

ランダウ＝リフシッツ物理学小教程量子力学

ŁouiG*

目次

1	量子力学の基本概念	2
1.1	不確定性原理	2
1.2	重ね合わせの原理	3
1.3	演算子	3
1.4	演算子の和および積	6
1.5	連続スペクトル	8
1.6	極限移行	9
1.7	密度行列	10

* <https://pr440.github.io>

1 量子力学の基本概念

1.1 不確定性原理

量子力学がまだ構築される以前では、原子的現象、すなわち微小な粒子の現象については、古典力学・電磁気学の理論と実験との間に深刻な矛盾が生じていた。このため、当時の古典概念・法則は根本的な変更を余儀なくされた。例えば、電子の二重スリット実験で電子が波動的性質を示したために、微小な粒子は軌道をもたないと考えられるようになった。1927 年、ハイゼンベルグは **量子力学の基本原則として不確定性原理を提唱した**。

古典力学の内容を拒否するだけの消極的な内容にすぎないように思える不確定性原理を定式化し、この原理が含む新たな力学体系の構築に必要な積極的主張を考察するために、量子力学の直面する問題を明らかにする。

まず、量子力学と古典力学の関係を見ると、量子力学はそれ自体で一つの閉じた論理系にはならず、量子力学が扱う場合の特殊な事例にすぎない古典力学と不可分である。粒子が軌道を持たないということはそもそも粒子の力学的性質を定義できないということを示す。粒子が何らかの古典的対象と相互作用をするからこそ、その対象の変化をもって粒子の定量的特徴付けができる。このときの **古典的対象との作用過程のことを測定と呼び、その古典的対象を測定器と呼ぶ**。測定器は古典力学に従うことが条件であり、測定の精度によっては電子のようなミクロなものも測定器になりうる。

量子力学の課題とは、この測定の結果から次の測定結果を予言することである。しかし、**測定の過程は測定を受ける粒子に作用を及ぼす**。この作用は、測定の精度をあげれば上げるほど大きくなっていく。(もし測定が及ぼす作用を測定に関係なく小さくできるなら、その量は測定と無関係な量である。すなわち、考えるべき対象でない。) 例えば、粒子の座標測定は、時間的にも空間的にも、測定精度をあげれば上げるほど無秩序になっていく。(このことは、先に指摘した軌道が存在しないことと符合する。) 特に後者を省察すると、粒子の座標変化を時間変化で割ったものの極限である速度が定義できないことになるが、量子力学では別に速度を定義することができる。

このように **量子力学では、粒子が軌道をもたないことから速度と座標は同時に決定できない量である**。このため、古典力学では座標と速度が与えられることにより (運動方程式から) 系の未来の運動を確定させることができるが、量子力学では必ず一方が欠けるために古典力学より曖昧な記述しかできず、確定した未来の予測をすることはできない。しかし、**量子力学の課題は未来に起こりうる測定結果の確率を導くことにある**。

同時に測定でき、同時に確定値を取ることができるときがあり、かつその時両者の関数でない他の物理量は確定値をとらないという性質をもった物理量の組のことを**完全な組**と呼ぶ。座標と速度のように、物理量が同時に測定できず、同時に確定値を取らないことが多々ある量子力学の世界では、完全な組が同時に測定できたとき状態を完全に記述でき、測定以前の状態に関わらず測定以後の測定結果の確率を定めることができるため、この組は重要である。

1.2 重ね合わせの原理

量子力学において、系の状態を数学的に記述する方法は、力学のそれと大きく異なっている。系の座標をまとめて q 、座標の微小変化の積 (系の配位空間の体積要素) を dq と表すことにすると、系の各状態の記述は座標の (一般には複素) 関数 $\Psi(q)$ によって与えることができる。また、この関数の絶対値の二乗は座標の確率分布に対応する。この関数は波動関数と呼ばれる。(1926 年にシュレーディンガーが導入した。)

波動関数を用いると、座標だけでなくあらゆる測定のいろいろな結果の確率も (原理的には) 計算することができる。その確率は、 Ψ と Ψ^* に関する双一次形式

$$\iint \Psi(q) \Psi^*(q') \psi(q, q') dq dq' \quad (1.2.1)$$

で定義されている。($\psi(q, q')$ は測定の種類、結果に依存する関数。) 実際、座標の確率もこの形式を取っている。

また、系の状態が時間が経つと変化するのに合わせ、波動関数も時間的変化を起こす。すなわち波動関数は時間の関数でもある。ある時刻に波動関数がわかっていたとすると、状態が完全に記述されていることとそれ以後の波動関数を求めることができることは同値である。

確率の定義から、全配位空間で $|\Psi(q)|^2 dq$ を積分したものは 1 にならなければならない。

$$\int |\Psi(q)|^2 dq = 1 \quad (1.2.2)$$

これを波動関数の規格化条件という。しかし、波動関数は常に規格化できるとは限らない。

$\Psi_1(q, t)$ と $\Psi_2(q, t)$ の二つの波動関数およびそれらに対応した状態 1, 2 を考えたとき、二つの線形結合が対応する新たな状態 12 を考えることができる。これを状態の重ね合わせの原理という。

二つの部分から成る系について、かつ各部分で完全な記述ができるよう系の状態が与えられているとき、一方の部分の座標 q_1 の確率は他方の部分の座標 q_2 の確率に無関係であるから、確率の性質から、系の波動関数 Ψ_{12} は部分系の波動関数 Ψ_1, Ψ_2 の積で表せる。

$$\Psi_{12}(q_1, q_2) = \Psi_1(q_1) \Psi_2(q_2)$$

1.3 演算子

量子系の状態を特徴づける物理量は、前項で述べたように様々な値を取りうる。それらは固有値と呼ばれ、その全体をスペクトルと呼ぶ。ここではスペクトルが離散的である場合について考察する。

物理量 f の固有値を $f_n (n > 0, n \in \mathbb{Z})$ と表すことにする。前項で述べたように物理量に対しある波動関数を取ることができ、各固有値に対する波動関数を固有関数と呼ぶ。 f_n に対応する固有関数は Ψ_n と表すことにする。

系がどんな波動関数 Ψ をもつ状態にあるときでも、その系で f の測定を行えば結局固有値 f_n のうちの一つが得られる。重ね合わせの原理から、 Ψ はこの状態にある系に対して測定を行ったと

きに観測される固有値 f_n の固有関数 Ψ_n の線形結合で表せる。

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n \quad (1.3.1)$$

このことから、あらゆる波動関数が任意の物理量の固有関数で展開できることもわかる。このような展開ができる関数の系は**関数の完全系**と呼ばれる。

系が波動関数 Ψ に対応する状態を取るとき、 f が f_n と観測される確率を求めてみよう。まず、確率は (1.2.1) の通り Ψ と Ψ^* の双一次形式で表されたから、 a_n と a_n^* についても双一次形式となっているはずである。次に、求める確率の式は当然正の定符号を持たなければならない。最後に、 f が f_n を取る確率は、 $\Psi = \Psi_n$ のときは1であり、また波動関数を展開したときに Ψ_n の項がなければ0とならなければならない。言い換えれば、 f_n に対応する Ψ_n の展開式 (1.3.1) での係数 a_n のみが1でその他の係数は全て0のときは求める確率は1であり、逆に a_n が0であったときは確率は0となるということである。以上を満たすのは、係数 a_n の絶対値の二乗しかない。すなわち、**波動関数 Ψ の状態で f が f_n と観測される確率は $|a_n|^2$ である**ということである。規格化条件から、 a_n は以下の式を満たす。

$$\sum_n |a_n|^2 = 1$$

f の平均値 \bar{f} は、

$$\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2 \quad (1.3.2)$$

で定義される。次に、この \bar{f} を Ψ で表すことを考える。上式には a_n と a_n^* の双一次形式である $|a_n|^2$ が含まれているから、 Ψ についても双一次形式となるはずである。そこで、 \bar{f} が次のような双一次形式の式で表せるように、ある数学的 **演算子 \hat{f}** を導入する。

$$\bar{f} = \int \Psi^* (\hat{f} \Psi) dq \quad (1.3.3)$$

上式の定義より、 \hat{f} が以下のような条件を満たす **線形演算子** でなければならない。

$$\hat{f}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{f}\Psi_1 + \hat{f}\Psi_2 \quad (1.3.4)$$

$$\hat{f}(a\Psi) = a\hat{f}\Psi \quad (1.3.5)$$

またこの定義から、任意の物理量はある線形演算子に対応することがわかる。

演算子の形は物理的考察から求めることができる。まず、物理量の平均値は実数であることから、次の関係式を満たす。

$$\int \Psi^* (\hat{f} \Psi) dq = \int \Psi (\hat{f}^* \Psi^*) dq \quad (1.3.6)$$

任意の線形演算子に対してこれは成り立たない。この条件式は

$$\int \Phi (\hat{f} \Psi) dq = \int \Psi (\tilde{\hat{f}} \Phi) dq \quad (1.3.7)$$

で定義される **転置演算子** \tilde{f} を用いれば次のように書き換えられる。

$$\tilde{f} = \hat{f}^* \quad (1.3.8)$$

この条件を満たす演算子は **エルミート演算子** と呼ばれる。 **実数の物理量に対応する演算子はエルミートでなければならない。**

このように演算子が決定できれば、ある物理量 f がわかっているとき、 f の固有関数 Ψ は方程式

$$\hat{f}\Psi = f\Psi \quad (1.3.9)$$

の解として求めることが可能である。例えば、系の波動関数 Ψ が f_n の固有関数 Ψ_n であるとき、物理量 f の平均値 \bar{f} は f_n に一致しなければならないから、

$$\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n dq = f_n$$

とならなければならない。このためには明らかに

$$\hat{f}\Psi = f_n\Psi$$

でなければならない。

形式的には複素数の物理量も考えられる。その複素共役な量を f^* と表す。 f^* にもある線形演算子に対応するはずで、それを \hat{f}^+ と表し \hat{f} に対して **共役な演算子** と呼ばれる。 \hat{f}^+ の満たす関係式としては、 \bar{f}^* の定義式

$$\bar{f}^* = \int \Psi^* \hat{f}^+ \Psi dq$$

がある。一方 $\bar{f}^* = (\bar{f})^*$ であるから、

$$(\bar{f})^* = \left[\int \Psi^* \hat{f} \Psi dq \right]^* = \int \Psi \hat{f}^* \Psi^* dq = \int \Psi^* \tilde{f} \Psi dq$$

が成り立つ。以上から

$$\hat{f}^+ = \tilde{f}^* \quad (1.3.10)$$

となり、一般的には \hat{f}^+ と \hat{f}^* は一致しない。(1.3.8) をこの式を用いて書き換えると次のようになる。

$$\hat{f} = \hat{f}^+ \quad (1.3.11)$$

すなわち、実数の物理量の演算子は自身の共役演算子とも一致する。(このため、エルミート演算子は **自己共役演算子** と呼ばれる。)

f_n, f_m を実数の物理量 f の固有値とし、それぞれに対応する固有関数を Ψ_n, Ψ_m とする。これらは物理量 f に対応した演算子 \hat{f} を用いた関係式

$$\begin{aligned} \hat{f}\Psi_n &= f_n\Psi_n \\ \hat{f}\Psi_m &= f_m\Psi_m \end{aligned}$$

を満たしている。一つ目の式に Ψ_m^* を、二つ目の式と複素共役な式に Ψ_n をかけたものを辺々引くと、

$$\Psi_m^* \hat{f} \Psi_n - \Psi_n \hat{f}^* \Psi_m^* = (f_n - f_m) \Psi_n \Psi_m^*$$

となる。さらにこれを両辺 q について積分すると、 f は実数の物理量であったから \hat{f} はエルミート演算子なので、式 (1.3.8) および転置演算子の定義式 (1.3.7) から左辺の積分は 0 になる。よって、

$$(f_n - f_m) \int \Psi_n \Psi_m^* dq = 0$$

が成り立つ。しかし、固有値の定義から $f_n - f_m \neq 0$ なので、結果として、

$$\int \Psi_n \Psi_m^* dq = 0 \quad (1.3.12)$$

が得られる。波動関数の規格化条件とも合わせると、

$$\int \Psi_n \Psi_m^* dq = \delta_{nm} \quad (1.3.13)$$

と表すことができる (δ_{nm} はクロネッカーのデルタ)。このように **固有関数 Ψ_n の集合は、規格化され直交した (規格直交) 関数の完全系を成している**。このことから直ちに、波動関数の展開式 (1.3.1) の係数 a_n が、(1.3.1) の両辺に Ψ_n^* をかけることで容易に決定することが可能であることがわかる。

$$\begin{aligned} a_n &= a_n \int \Psi_n \Psi_n^* dq \\ &= \int (a_0 \Psi_0 + a_1 \Psi_1 + \cdots + a_n \Psi_n + \cdots) \Psi_n^* dq \\ &= \int \Psi \Psi_n^* dq \end{aligned}$$

ここでは、ある物理量 f について考察してきたが、物理量の組についても、各物理量にはある線形演算子に対応し、各物理量の固有値の組に対し固有関数が存在する。

1.4 演算子の和および積

\hat{f}, \hat{g} を二つの物理量 f, g に対応する演算子としたときに、 $f + g$ に対応する演算子が $\hat{f} + \hat{g}$ となるのは、両者が同時に測定可能な時のみである。確かに、 f, g が同時に測定可能な場合、 \hat{f}, \hat{g} は共通の固有関数を持ち、その関数は $\hat{f} + \hat{g}$ の固有関数でもあり、その固有値は f, g の固有値の和 $f_n + g_n$ に等しい。

逆に、 f, g が同時に測定できないときに $f + g$ について言えることは次の平均値についての式だけである。

$$\overline{f + g} = \bar{f} + \bar{g} \quad (1.4.1)$$

また、演算子の和 $\hat{f} + \hat{g}$ の固有値と固有関数は、一般的には f, g の固有値・固有関数と何ら関係しないと考えるべきだろう。しかし、 \hat{f}, \hat{g} がエルミートであれば、 $\hat{f} + \hat{g}$ もエルミートであるからそ

の固有値も実数であるが、それは実数の物理量 f, g の和 $f + g$ の固有値になっていることは明らかである。

f, g が同時に測定できるとき、和だけでなく積を取ることも考えられる。その積とは、固有値が f と g の固有値の積となっているようなものである。明らかにこの積に対応する演算子は \hat{f} と \hat{g} の積であるはずだ。実際に Ψ_n が \hat{f}, \hat{g} の共通の固有関数だとすると、

$$\hat{f}\hat{g}\Psi_n = \hat{f}(\hat{g}\Psi_n) = \hat{f}g_n\Psi_n = g_n(\hat{f}\Psi_n)g_nf_n\Psi_n$$

となる。これは、演算子の積の順序を入れ替えても同じ結果になる。任意の波動関数は固有関数の線形結合で表せたから、このことが意味するのは、**任意の波動関数について $\hat{f}\hat{g}$ と $\hat{g}\hat{f}$ の作用は同じ** ということである。このことは、形式的に

$$\hat{f}\hat{g} = \hat{g}\hat{f} \quad (1.4.2)$$

あるいは、

$$\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} = 0 \quad (1.4.3)$$

と表せる (二つ目の式の左辺は交換子とも呼ばれる)。この関係を満たす二つの演算子は互いに**可換**であるといわれる。

二つの物理量 f, g が同時に確定値をもつことができるならば、対応する演算子 \hat{f}, \hat{g} は可換である。これは逆も成り立つため、演算子の可換性は物理量が同時に測定可能であることの必要十分条件である。

物理量 f, g が同時に測定できないとき、それらの積は上のように直接定義することはできない。このことは演算子 $\hat{f}\hat{g}$ がエルミートでなく、いかなる物理量にも対応しないという形で確認することができる。(1.3.7) から、

$$\int \Psi \hat{f}\hat{g}\Phi dq = \int (\hat{g}\Phi)(\tilde{\hat{f}}\Psi) dq$$

となる ($\tilde{\hat{f}}$ は Ψ にのみ、 \hat{g} は Φ にのみ作用する) から、もう一度 (1.3.7) を使えば、

$$\int \Psi \hat{f}\hat{g}\Phi dq = \int (\tilde{\hat{f}}\Psi)(\hat{g}\Phi) dq = \int \Phi \tilde{\hat{g}}\hat{f}\Psi dq$$

となる。こうして $\hat{f}\hat{g}$ の転置演算子 $\tilde{\hat{g}}\hat{f}$ を得た。

$$\widetilde{\hat{f}\hat{g}} = \tilde{\hat{g}}\hat{f} \quad (1.4.4)$$

上式を両辺複素共役をとると、

$$(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}^+\hat{f}^+ \quad (1.4.5)$$

となる。 \hat{f}, \hat{g} がそれぞれエルミートなら $(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}\hat{f}$ だから、 $\hat{f}\hat{g}$ がエルミートであることと \hat{f}, \hat{g} が可換であること、 f, g が同時に確定値をもつことは全て同値である。

1.5 連続スペクトル

ここまでの離散スペクトルの物理量に対する固有値・固有関数の考察を連続スペクトルの場合に一般化する。 f を連続スペクトルをもつ物理量とし、その固有値も f と表すことにする。固有値 f の固有関数は Ψ_f とする。

(1.3.1) のように、任意の波動関数は固有関数の完全系で展開することができる。連続スペクトルでは積分になり、

$$\Psi(q) = \int a_f \Psi_f(q) dq \quad (1.5.1)$$

となる。ただし展開係数 a_f は

$$a_f = \int \Psi(q) \Psi_f^*(q) dq \quad (1.5.2)$$

である。

物理量の値の確率は、 f と $f + df$ の間の無限小区間の値を取る確率について考えなければならない。その確率は $|a_f|^2 df$ で与えられる。取りうる全ての f の確率の和が 1 であるから、

$$\int |a_f|^2 df = 1 \quad (1.5.3)$$

が要請される。

ここまでの式に含まれる固有関数 Ψ_f は、

$$\int \Psi_{f'}^* \Psi_f dq = \delta(f' - f) \quad (1.5.4)$$

によって規格化されたものである (右辺はディラックのデルタ関数)。これは (1.5.1) に (1.5.2) を代入した式

$$a_f = \int a_{f'} \left(\int \Psi_{f'}^* \Psi_f dq \right) df'$$

が (1.5.4) により満たされることからわかる。

(1.5.5) にすでに現れているが、固有値 f, f' が $f \neq f'$ のとき固有関数 $\Psi_f, \Psi_{f'}$ は互いに直交する。また、(1.5.5) では、 $|\Psi_f|^2$ の積分は発散することになるが、この点については後の章で説明する。

先ほどとは逆に、(1.5.2) に (1.5.1) を代入すると、

$$\Psi(q) = \int \Psi(q') \left(\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q) df \right) dq'$$

を得る。これから

$$\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q) df = \delta(q' - q) \quad (1.5.5)$$

が要請される。デルタ関数の変数が (1.5.4) と違い q, q' であることなどに注目すれば二つの違いが理解できるだろう。

(1.5.1) に (1.5.2) を代入した式から要請されるのが (1.5.4)、(1.5.2) に (1.5.1) を代入した式から要請されるのが (1.5.5) であることを踏まえ、(1.5.1) と (1.5.4) の組と (1.5.2) と (1.5.5) の組を比較す

ると、(1.5.2) は (1.5.1) のように関数 $\Psi_f^*(q)$ による f の関数 $a_f \equiv a(f)$ の展開と見ることもできる。 $a(f)$ は $\Psi(q)$ と同じく系の状態を完全に決定するから、 **f -表示による波動関数**と呼ぶことがある ($\Psi(q)$ は座標表示、 q -表示などと呼ばれる)。系の座標が範囲 dq のなかにある確率は $|\Psi(q)|^2$ により定義されるように、物理量 f の値が範囲 df のなかにある確率は $|a(f)|^2$ で定義される。また、関数 $\Psi_f(q)$ は q -表示における量 f の固有関数であったが、その複素共役 $\Psi_f^*(q)$ は f -表示における座標 q の固有関数になっている。

一般には離散スペクトルと連続スペクトルを共に含む物理量もある。そのような物理量 f の固有関数による波動関数の展開式は、 $\Psi_n(q)$ を離散スペクトルの部分における固有関数、 $\Psi_f(q)$ を連続スペクトルの部分における固有関数とすると、

$$\Psi(q) = \sum_n a_n \Psi_n(q) + \int a_f \Psi_f(q) dq \quad (1.5.6)$$

となる。変更が必要なのは展開式のみで、展開式以外の今までの議論は全て成立する。

座標 q 自身、連続スペクトルをもつ物理量の一つである。この量に対応する演算子 \hat{q} は q そのものであることは、次の式と演算子の定義式 (1.3.3) から明らかである。

$$\hat{q} = \int q |\Psi|^2 dq = \int \Psi^* q \Psi dq$$

\hat{q} の固有関数は、(1.3.9) より $q\Psi_{q_0} = q_0\Psi_{q_0}$ で決定されなければならない (q_0 は変数 q と区別して、その時々座標の具体的数値を表す)。この等式が満たされるのは $\Psi_{q_0} = 0$ あるいは $q = q_0$ の時なので、導かれる固有関数の内、規格化条件をみたすものは次のようになる。

$$\Psi_{q_0} = \delta(q - q_0) \quad (1.5.7)$$

1.6 極限移行

量子力学は、それ自身の中に極限の場合として古典力学を含む。この極限への移行がどのように行われるかを考える。

量子力学と古典力学の関係と、波動光学と幾何光学の関係の間にはある種の類似性が見られる。例えば、波動関数が線形微分方程式の解である/電磁波が連立微分方程式の解である電場および磁場ベクトルで表されるのに対し、古典力学での電子は運動方程式で完全に決定される軌道をもつ/幾何光学での光は一定の光路に沿って伝播していく様子を光線としてとらえる。

波動光学から幾何光学への極限移行は、電磁場の成分 $u = ae^{i\phi}$ の波長を短くしていくこと、すなわち位相 ϕ の絶対値を大きくすることである。これと同様に、量子力学から古典力学への極限移行が、波動関数 $\Psi = ae^{i\phi}$ の a がゆっくり変動し、 ϕ の絶対値を大きくすることであると仮定する。力学では、粒子の軌道は力学系の作用 S を最小にするという最小作用の原理によって決定できる。幾何光学で対応しそうな原理として、光路の始めと終わりの位相の差は最小でなければならないというフェルマーの原理がある。

以上の類似性を鑑みるに、古典的な極限の場合に波動関数の位相 ϕ は作用 S に比例しなければならないと結論づけられる。この比例定数は (**換算**) **プランク定数** (あるいはディラック定数) と呼

ばれ、文字 \hbar で表される。

$$\hbar = 1.054 \times 10^{-27} \text{erg} \cdot \text{sec} \quad (1.6.1)$$

系の準古典的な波動関数は、次のような形をしていると考えられる。

$$\Psi = ae^{\left(\frac{i}{\hbar}S\right)} \quad (1.6.2)$$

プランク定数は、同じ次元をもつ物理量に対するその大きさが、任意の物理系の「量子化の程度」を決めている。量子力学から古典力学への移行は、式の上では $\hbar \rightarrow 0$ の極限移行と記述される。

準古典的な波動関数の形を決定したが、一般に波動関数で記述される運動は決して確定した軌道で沿った運動ではない。古典的な軌道を持つ運動へは、波動関数はある時刻に座標の確率分布とともに与えられれば、以後この分布が古典力学の法則に従って「移動する」ことに着目し、空間の非常に狭い領域でのみ 0 でないような特別な形の波動関数（いわゆる「波束」）を考えることにより到達することができる。

量子力学での演算子は、古典的極限では対応する物理量の掛け算となってしまう。

1.7 密度行列

波動関数を用いた系の記述は、量子力学において可能なもっとも完全な記述（完全な組の物理量を同時測定した状態）に対応している。しかし、大きな閉じた系の一部をなす系ではこの記述はできない。閉じた形は全体として $\Psi(q, x)$ で記述される状態にあるとする（ x は考える部分系の座標全体、 q は閉じた形の残り全体を表す）。部分系が自分だけの波動関数を持たないために、 $\Psi(q, x)$ は一般に x だけの関数と q だけの関数の積には決して分解できない。

次のような関数 $\rho(x', x)$ を、系の**密度行列**と呼ぶ。

$$\rho(x', x) = \int \Psi^*(q, x') \Psi(q, x) dq \quad (1.7.1)$$

$x' = x$ のとき、密度行列は系の座標分布を定める。

$$\rho(x, x) = \int |\Psi(q, x)|^2 dq$$

考える部分系に関係したある物理量を f とする。対応する演算子は x にのみ作用し q には作用しない。この平均値は、

$$\bar{f} = \iint \Psi^*(q, x) \hat{f} \Psi(q, x) dq dx \quad (1.7.2)$$

である。これは密度行列を用いてつぎのように変形できる。

$$\bar{f} = \int [\hat{f} \rho(x', x)]_{x'=x} dx \quad (1.7.3)$$

(大括弧の中の演算の後に $x' = x$ と置いていることに注意せよ。) このように、**密度行列**により系を特徴づける任意の物理量の平均値を計算できる。また、系の物理量が種々の値をとる確率も求められる。部分系の状態は密度行列で記述することができる。

密度行列を使った記述が系の量子力学的記述のもっとも一般的な形であり、波動関数を用いた記述は、対応する密度行列が $\rho(x', x) = \Psi^*(x')\Psi(x)$ であるような特殊な場合である。波動関数を持つ場合 (**純粋状態**) は確実に一定の結果を導くような測定過程の完全系が存在する (数学的には Ψ がある演算子の固有関数であることに対応する) のに対し、密度行列のみをもつ状態 (**混合状態**) はそのような完全系を持たない。