

4 状態の重ね合わせ、測定

4.1 $\hat{s}_x$ の固有状態と重ね合わせ

- スピンが x 方向を向いた状態： $\hat{s}_x$ の固有状態

$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (34)$$

$$\hat{s}_x |x+\rangle = +\frac{1}{2} |x+\rangle, \quad \hat{s}_x |x-\rangle = -\frac{1}{2} |x-\rangle \quad (35)$$

$|x+\rangle$ は x 軸正の方向、 $|x-\rangle$ は負の方向を向いた状態

- 固有状態の規格直交性（補足参照）

$$\langle x+ | x+ \rangle = \langle x- | x- \rangle = 1 \quad \text{同じベクトルの内積は1（規格）} \quad (36)$$

$$\langle x+ | x- \rangle = \langle x- | x+ \rangle = 0 \quad \text{異なるベクトルの内積は0（直交）} \quad (37)$$

複素ベクトルでも内積が0の場合に直交するという

- x 方向を向いた状態は $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の線形結合（重ね合わせ）でかける

$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \quad (38)$$

$$|x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \quad (39)$$

- 一般の状態（任意の方向を向いた状態）も上向きと下向きの重ね合わせ

$$|a\rangle = a_1 |\uparrow\rangle + a_2 |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (40)$$

量子コンピューター、量子情報理論の基礎

（ a_1, a_2 は複素数、 $\hat{s}_y$ の固有状態を作ると複素数が必要であることがわかる、補足参照）

4.2 測定

- 式 (38), (39) を $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ について解く

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |x+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |x-\rangle \quad (41)$$

$$|\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |x+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |x-\rangle \quad (42)$$

- $\hat{s}_x$ の固有状態と $|\uparrow\rangle$ の内積

$$\langle x+|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\langle x+|x+\rangle}_{=1} + \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\langle x+|x-\rangle}_{=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (43)$$

$$\langle x-|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (44)$$

- z 軸上向き状態 $|\uparrow\rangle$ のスピンの x 成分を測定
 $+1/2$ が得られる確率 P_+ 、 $-1/2$ が得られる確率 P_-

$$P_+ = |\langle x+|\uparrow\rangle|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}, \quad (45)$$

$$P_- = |\langle x-|\uparrow\rangle|^2 = \frac{1}{2} \quad (46)$$

確率 $1/2$ で正方向、 $1/2$ で負方向の状態が観測される：ゆらいでいる
 式 (31), (33) の結果に対応

4.3 交換関係と不確定性関係

- 演算子の交換関係

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (47)$$

ただの数ならいつでもゼロ、演算子（行列）ではゼロでない場合がある
 交換関係が 0 になる演算子の組を交換する演算子の組と呼ぶ

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \quad (48)$$

- スピンの場合の例（補足参照）

$$[\hat{s}^2, \hat{s}_z] = \hat{s}^2 \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}^2 = 0 \quad (49)$$

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_z] = \hat{s}_x \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_x = -i\hat{s}_y \quad (50)$$

- 不確定性関係：二つの物理量のゆらぎの積の下限值

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (51)$$

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow$ 両方のゆらぎを 0 にできる：物理量が同時に確定できる

$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \Rightarrow$ 両方のゆらぎを 0 にできない：物理量が同時に確定できない

- 例）位置と運動量の交換関係（補足参照）

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (52)$$

4.4 ベクトルと関数

- 関数は一般化されたベクトル（力学IIのフーリエ変換参照）
- n 成分複素ベクトル $|a\rangle$ ：番号 $i = 1, \dots, n$ に対し複素数 a_i が割り当てられている（図5左）
- 波動関数 $\psi(x)$ ：変数 $x \in \mathbb{R}$ に対し複素数 $\psi(x)$ が割り当てられている（図5右）

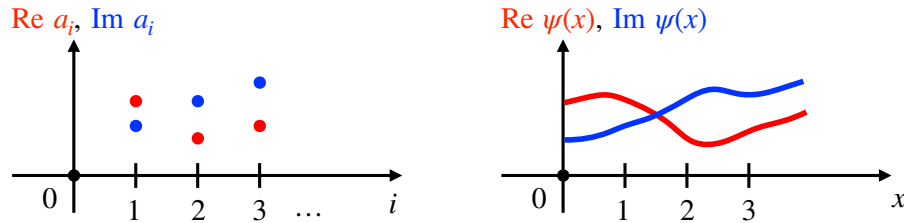


図 5: 複素ベクトル（左）と波動関数（右）の模式図

- 線形結合

$$c_a |a\rangle + c_b |b\rangle = |\psi\rangle \quad \text{ベクトル 2つ} \rightarrow \text{別のベクトル} \quad (53)$$

$$c_a \psi_a(x) + c_b \psi_b(x) = \psi(x) \quad \text{関数 2つ} \rightarrow \text{別の関数} \quad (54)$$

- 内積

$$\begin{aligned} \langle a|b\rangle &= a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_n^* b_n \\ &= \sum_{i=1}^n a_i^* b_i \quad \text{2つのベクトル} \rightarrow \text{1つのスカラー} \end{aligned} \quad (55)$$

$$(\psi_a, \psi_b) = \int dx [\psi_a(x)]^* \psi_b(x) \quad \text{2つの関数} \rightarrow \text{1つのスカラー} \quad (56)$$

- 演算子：

$$\hat{A} |a\rangle = |b\rangle \quad \text{ベクトル} \rightarrow \text{別のベクトル (行列)} \quad (57)$$

$$\hat{A} \psi(x) = \phi(x) \quad \text{関数} \rightarrow \text{別の関数} \quad (58)$$

位置演算子 $\hat{x}$ 、運動量演算子 $\hat{p}$

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (59)$$

例) $\psi(x) = C \exp\{-\alpha x^2\}$ の場合、

$$\hat{x} \psi(x) = C x \exp\{-\alpha x^2\} \quad (60)$$

$$\hat{p} \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} [C \exp\{-\alpha x^2\}] = 2i\hbar C \alpha x \exp\{-\alpha x^2\} \quad (61)$$

4.5 シュレディンガー方程式

- 量子力学の（定常）状態はシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (62)$$

を解いて得られる波動関数 $\psi(x)$

- ハミルトニアン演算子：エネルギーに対応する演算子（解析力学参照）

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (63)$$

式 (59) の運動量演算子 $\hat{p}$ を用いると

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (64)$$

$\hat{H}$ の第 1 項は運動エネルギー、第 2 項はポテンシャルエネルギー

- ハミルトニアンを用いるとシュレディンガー方程式は

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (65)$$

$\psi(x)$ は演算子 $\hat{H}$ の固有関数、 E は固有値

式 (13) の拡張

- 波動関数による演算子の期待値

$$\langle A \rangle = (\psi, \hat{A}\psi) = \int dx [\psi(x)]^* \hat{A}\psi(x) \quad (66)$$

式 (20) の拡張（第 2 回の補足の計算）

4.6 まとめ

- 量子力学：ミクロな世界の現象を記述
- ミクロな粒子はスピンを持つ。ボソン：整数スピン、フェルミオン：半整数スピン
- スピン 1/2 状態の性質：2 成分複素ベクトル
- 一般の量子力学の状態：波動関数
- キーワード：重ね合わせ（線形結合）、固有値、固有ベクトル