4　状態の重ね合わせ、観測

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

$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \quad |x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \tag{36}$$

$$\hat{s}_x\,|x+\rangle = +\frac{1}{2}\,|x+\rangle\,, \quad \hat{s}_x\,|x-\rangle = -\frac{1}{2}\,|x-\rangle \tag{37}$$

$|x+\rangle$ 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

$$\langle x+|x+\rangle = \langle x-|x-\rangle = 1 \quad \text{同じベクトルの内積は 1（規格）} \tag{38}$$

$$\langle x+|x-\rangle = \langle x-|x+\rangle = 0 \quad \text{異なるベクトルの内積は 0（直交）} \tag{39}$$

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

$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\downarrow\rangle \tag{40}$$

$$|x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\downarrow\rangle \tag{41}$$

- 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

$$|a\rangle = a_1\,|\uparrow\rangle + a_2\,|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix} \tag{42}$$

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）

4.2　測定

- 式 (40), (41) を $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ について解く

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|x+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|x-\rangle \tag{43}$$

$$|\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|x+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|x-\rangle \tag{44}$$

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

$$\langle x+|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\langle x+|x+\rangle}_{=1} + \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\langle x+|x-\rangle}_{=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{45}$$

$$\langle x-|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{46}$$

- 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_-

$$P_+ = |\langle x+|\uparrow\rangle|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}, \tag{47}$$

$$P_- = |\langle x-|\uparrow\rangle|^2 = \frac{1}{2} \tag{48}$$

  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 (33), (35) 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**

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{49}$$

  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

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \tag{50}$$

- スピンの場合の例

$$[\hat{\boldsymbol{s}}^2, \hat{s}_z] = \hat{\boldsymbol{s}}^2\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{\boldsymbol{s}}^2 = \cdots = 0 \tag{51}$$

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_z] = \hat{s}_x\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{s}_x = \cdots = -i\hat{s}_y \tag{52}$$

- **不確定性関係**：二つの物理量のゆらぎの積の下限値

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle| \tag{53}$$

  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow$ 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

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{54}$$

4.4 ベクトルと関数

- 関数は一般化されたベクトル（フーリエ変換参照）
- n 成分複素ベクトル $|a\rangle$：番号 $i = 1, \cdots, n$ 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）

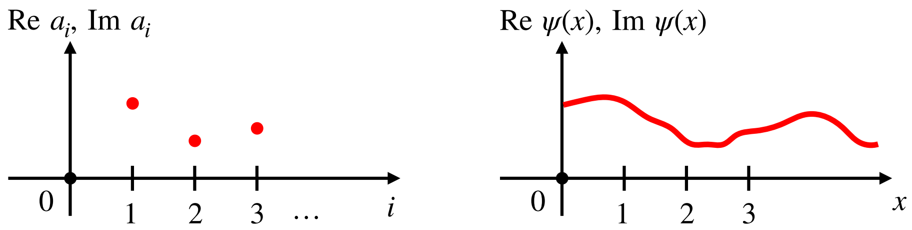

図 5: 複素ベクトルと波動関数の模式図

- ベクトルの線形結合：別のベクトル

$$c_a |a\rangle + c_b |b\rangle \tag{55}$$

- 関数の線形結合：別の関数

$$c_a \psi_a(x) + c_b \psi_b(x) \tag{56}$$

- ベクトルの内積：2 つのベクトルから 1 つのスカラー量

$$\langle a|b\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_n^* b_n = \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i \tag{57}$$

- 関数の内積：2 つの関数から 1 つのスカラー量

$$(\psi_a, \psi_b) = \int dx [\psi_a(x)]^* \psi_b(x) \tag{58}$$

- ベクトルに対する演算子：ベクトルを別のベクトルに変換する（行列）

$$\hat{A} |a\rangle = |b\rangle \tag{59}$$

- 関数に対する演算子：関数を別の関数に変換する

$$\hat{A}\psi(x) = \phi(x) \tag{60}$$

位置演算子 $\hat{x}$、運動量演算子 $\hat{p}$

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \tag{61}$$

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

$$\hat{x}\psi(x) = Cx \exp\{-\alpha x^2\} \tag{62}$$

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}[C \exp\{-\alpha x^2\}] = 2i\hbar C\alpha x \exp\{-\alpha x^2\} \tag{63}$$

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**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{64}$$

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）

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{65}$$

式 (61) の運動量演算子 $\hat{p}$ を用いると

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{66}$$

$\hat{H}$ 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

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \tag{67}$$

$\psi(x)$ 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

$$\langle A\rangle = (\psi, \hat{A}\psi) = \int dx[\psi(x)]^*\hat{A}\psi(x) \tag{68}$$

式 (20) の拡張（第 1 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