第3章　状態とオペレータ

3.1　基底状態の正規直交性と完備性

$$\text{正規直交性} \qquad \langle j|\, k\rangle = \delta_{jk}$$

$$\text{完備性} \qquad |\psi\rangle = \sum_{\text{all } j} |j\rangle \langle j|\, \psi\rangle$$

を満たす状態の組を基底状態という。

偏光系では $|x\rangle, |y\rangle$ は基底状態。他の基底状態の組も存在する。例えば偏光系で

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + |y\rangle), \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - |y\rangle)$$

は別の基底状態の組を構成する。

3.2　偏光系

任意の偏光はニコルのプリズムによって $|x\rangle$、$|y\rangle$ の二状態に分離できる。

逆に、どんな偏光状態も $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ のような基底状態の組で実現することができる。例えば

$$|\theta\rangle = \cos\theta\, |x\rangle + \sin\theta\, |y\rangle)$$

$$|45°\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + |y\rangle)$$

$$|-45°\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - |y\rangle)$$

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i\, |y\rangle) \qquad (\text{右旋光})$$

$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i\, |y\rangle) \qquad (\text{左旋光})$$

ちなみに、$\{|45°\rangle, |-45°\rangle\}$、$\{|R\rangle, |L\rangle\}$ はそれぞれ別の基底状態の組を構成する。

3.3　スピン 1/2 系

スピン 1/2 粒子、例えば電子は不均質磁場 B_z により $|+z\rangle$、$|-z\rangle$ の二状態に分離できる。

$\{|+z\rangle, |-z\rangle\}$ は基底状態で、スピン 1/2 電子のどんな状態もこの組み合わせで実現できる。例えば

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

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

$$|+y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+z\rangle + i\,|-z\rangle)$$

$$|-y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+z\rangle - i\,|-z\rangle)$$

ちなみに、$\{|+x\rangle, |-x\rangle\}$、$\{|+y\rangle, |-y\rangle\}$ はそれぞれ別の基底状態の組を構成する。

3.4　一次元空間中の粒子

スピンなどの内部状態を考慮しないですむ粒子は、全空間を $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ で切り刻んで、その存在位置 $\{|x_j, y_k, z_l\rangle\}$ を基底状態とできる。

一次元では $x_j \sim x_j + \Delta x$ の領域に存在する状態 $\{|x\rangle_j\}$ が基底状態になる。

ただし、空間のサイズが $L = N\Delta x$ として $-L/2 \sim L/2$ に限られており、かつ周期的境界条件を仮定すると、議論は楽になる。

明らかに

$$\langle x_j |\, x_k\rangle = \delta_{jk}$$

で、

$$|\psi\rangle = \sum_{\text{all } j} |x_j\rangle \langle x_j |\, \psi\rangle$$

となる。

3.5　運動量基底状態

周期型境界条件を有する一次元空間の別の状態として、次の運動量確定状態が存在する。

$$\langle x_j |\, p_J\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(i\frac{p_J x_j}{\hbar}\right)$$

ただし p_J は、J を $-(N-1)/2 \le J \le (N-1)/2$ なる整数として、$p_J = (2\pi\hbar/L)J$ である。この運動量確定状態は別の基底状態の組を構成する。

3.6　一次元空間の連続化

$\Delta x \to 0$ とすると、空間が連続化される。この場合、確率 $P(x_j \sim x_j + \Delta x)$ よりも確率振幅 $p(x_j) = P(x_j \sim x_j + \Delta x)/\Delta x$ の方が利用される。

それに合せ、確率振幅も密度型のものを定義する (確率密度振幅)

$$\langle \underline{x} |\, \underline{x'}\rangle = \delta_{xx'}/\Delta x \qquad \text{(正規直交性)}$$

この右辺は $\Delta x \to 0$ で Dirac δ 関数 $\delta(x - x')$ となる。

$$\psi = \sum \Delta x\, |\underline{x}\rangle \langle \underline{x} |\, \psi\rangle \qquad \text{(完備性)}$$

$\sum \Delta x$ は $\Delta x \to 0$ で $\int dx$ となる。また、$\langle \underline{x} |\, \psi\rangle$ は波動関数 $\psi(x)$ とも呼ばれる。

3.7　オペレータ

操作や装置のように量子状態を変えるものは、オペレータによって表現可能である (実は線形性を仮定)。

$$\widehat{A}\,|\psi\rangle = |\phi\rangle$$

オペレータも基底状態展開ができる。^は A がスカラー量でないことを示すため、必要に応じ付ける。

$$\langle j|\,\widehat{A}\,|k\rangle\,\langle k|\,\psi\rangle = \langle k|\,\phi\rangle$$

[例] x 偏光板

$$(x\ \text{偏光板})\,|x\rangle = |x\rangle\,, \qquad (x\ \text{偏光板})\,|y\rangle = 0$$

これより

$$(x\ \text{偏光板})\,|\psi\rangle = (x\ \text{偏光板})\,|x\rangle\,\langle x|\,\psi\rangle + (x\ \text{偏光板})\,|y\rangle\,\langle y|\,\psi\rangle = |x\rangle\,\langle x|\,\psi\rangle$$

3.8　単位オペレータ

何も状態を変えない素通しの装置は単位オペレータ $\widehat{I}$ と呼ばれる。

$$\widehat{I}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

$$\langle j|\,\widehat{I}\,|k\rangle = \langle j|\,k\rangle = \delta_{jk}$$

以上より、完備性の式に対し、形式論であるが次式が成立する。

$$\sum_{\text{all }j} |j\rangle\,\langle j| = \widehat{I} \qquad \text{(完備性)}$$

この式を随所に入れることにより、展開式が簡単に得られる。