〈1粒子の量子力学における状態〉 1

§状態の基本

状態と波動関数

3次元空間（全体でも一部でも）

$\mathbf{r} = (x, y, z)$

同じイミでつかう

ある瞬間での1粒子系の状態

・複素数値関数 $\boxed{\varphi(\mathbf{r})}$ → 波動関数

・ただし「すべての $\mathbf{r}$ で $\varphi(\mathbf{r}) = 0$」は除く.

・二乗可積分 $\int d^3r \, |\varphi(\mathbf{r})|^2 < \infty$ (1)

(まずは連続とか微分可能とかはいわない)

→ (エネルギー固有状態など を考えるときは気にする)

特に

$$\int d^3r \, |\varphi(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad (2)$$

をみたすものを規格化された $\left\{ \begin{array}{l} \text{状態} \\ \text{波動関数} \end{array} \right.$

ケット状態

状態（関数の全体）を $\boxed{|\varphi\rangle}$ と書く．

ket phi（あるいは phi ket）

ket 状態

「ゼロケット」

「すべての x について $\varphi(x)=0$」を $|\varphi\rangle=0$ と書く．

状態ではないけど

⚠ $|\varphi\rangle$ はケットベクトルと似た性質をもっている．
ただし何かが縦に並んでいると思う必要はない．

⚠ ベクトルの記法との関係

成分でベタに書く $\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_D \end{pmatrix} \longleftrightarrow$ 太字でかっこよくかく $\mathbf{v}$

波動関数でベタに書く $\varphi(x) \longleftrightarrow$ ket でかっこよくかく $|\varphi\rangle$

重ね合わせの原理

$\varphi(x)$ と $\psi(x)$ が状態（波動関数）

$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ について

$\alpha\varphi(x) + \beta\psi(x)$ も状態（波動関数）

⇓ ketをつかえば

$|\varphi\rangle$ と $|\psi\rangle$ が状態

$\alpha|\varphi\rangle + \beta|\psi\rangle$ も状態

↳ $|\varphi\rangle$ と $|\psi\rangle$ の $\left\{\begin{array}{l}\text{重ね合わせ} \\ \text{線形結合}\end{array}\right.$

⚠ これは不思議な原理

Schrödingerの猫状態

$$\alpha|\varphi_{\text{死}}\rangle + \beta|\varphi_{\text{生}}\rangle$$

波動関数と物理的状態の対応

$|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ は状態

> $\alpha \neq 0$ の複素数 α があって
>
> $$|\varphi\rangle = \alpha|\psi\rangle \qquad (1)$$
>
> ならば $|\varphi\rangle$ と $|\psi\rangle$ はまったく同じ物理的状態を表わす.

(こう要請する理由については測定のところで…)

問 $|\varphi\rangle$ と $-|\varphi\rangle$ は区別しなくていいのか?

$|\xi\rangle + |\varphi\rangle$ と $|\xi\rangle - |\varphi\rangle$ は

まったくちがう状態!

状態の内積

ケット状態（波動関数）$|\varphi\rangle$ と $|\psi\rangle$ の内積

$$\boxed{\langle\varphi|\psi\rangle := \int d^3x\, \varphi^*(x)\, \psi(x)} \in \mathbb{C} \quad (1)$$

$$\left(\begin{array}{l}\text{ベクトルの内積に対応している！} \\ \langle u, v\rangle = \sum_j u_j^* v_j\end{array}\right) \quad (2)$$

□ 性質

$$\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle \quad (3)$$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \int d^3x\, |\varphi(x)|^2 \geq 0 \quad (4)$$

ノルムを $\boxed{\| |\varphi\rangle \| := \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle}}$ と定義 (5)

$\|\varphi\|$ とも書く → 規格化条件は $\|\varphi\| = 1$

$$\| \alpha |\varphi\rangle \| = |\alpha|\, \| |\varphi\rangle \| \quad (6)$$

ブラ状態について

$\langle\varphi|\psi\rangle$ ブラベクトルと似た性質

ブラ状態 $\langle\varphi|$ とケット状態 $|\psi\rangle$ を並べたものとみなしてもよい.

$$\langle\varphi| = \left(|\varphi\rangle\right)^{\dagger} \quad (1)$$

$$\left(\alpha|\varphi\rangle + \beta|\psi\rangle\right)^{\dagger} = \alpha^{*}\langle\varphi| + \beta^{*}\langle\psi| \quad (2)$$

§正規直交完全系

無限個の状態の集合

$\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots\}$ あるいは $\{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2,\cdots}$

が正規直交完全系であるとは

(i) 任意の j, k について $\langle\psi_j|\psi_k\rangle = \delta_{j,k}$ (1)

(ii) 任意の状態 $|\varphi\rangle$ を

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j |\psi_j\rangle \qquad (2)$$

と展開できる　$\alpha_j \in \mathbb{C}$

▷ D次元ベクトルの場合は (1) をみたす D個のベクトル $|\psi_1\rangle, \ldots, |\psi_D\rangle$ があれば (2) は自動的に成立.

しかし無限次元ではそうはならない!

(注 (2)の厳密な意味は $\lim_{N\uparrow\infty} \left\| |\varphi\rangle - \sum_{j=1}^{N} \alpha_j |\psi_j\rangle \right\| = 0$ (3))

性質 ベクトルの場合と同様に

$$\langle\psi_j|\varphi\rangle = \langle\psi_j|\sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k|\psi_k\rangle$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k\underbrace{\langle\psi_j|\psi_k\rangle}_{=\delta_{j,k}} = \alpha_j \quad (1)$$

$$\boxed{\alpha_j = \langle\psi_j|\varphi\rangle = \int d^3r\,(\psi_j(r))^*\,\varphi(r)} \quad (2)$$

よって p7-(2) は

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\varphi\rangle \quad (3)$$

と書ける.

つまり $\displaystyle\sum_{j=1}^{\infty}|\psi_j\rangle\langle\psi_j| = \hat{1}$ (4)

この記号の代はあとで

また

$$\|\varphi\|^2 = \langle\varphi|\varphi\rangle = \left(\sum_j\alpha_j^*\langle\psi_j|\right)\left(\sum_k\alpha_k|\psi_k\rangle\right)$$

$$= \sum_{j,k}\alpha_j^*\alpha_k\langle\psi_j|\psi_k\rangle = \sum_{j=1}^{\infty}|\alpha_j|^2 \quad (5)$$

正規直交完全系の例　1次元の平面波

1次元　$0 \leqq x \leqq L$　(1)

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left[i \frac{2\pi n}{L} x \right] \quad (2)$$

$(n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$

(自由粒子のSch. eq. $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi(x)$ の周期境界条件のもとでのエネルギー固有状態)

かんたん！

正規直交性

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int_0^L dx\, \psi_n^*(x)\, \psi_m(x)$$

$$= \frac{1}{L} \underbrace{\int_0^L dx\, e^{i \frac{2\pi(m-n)}{L} x}}_{0\text{または}L} = \delta_{n,m} \quad (3)$$

Ⅲ 完全性

任意の $|\varphi\rangle$ について

$$|\varphi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\varphi\rangle \quad (1)$$ をいいたい

波動関数のことばでは

$$\varphi(x) = \sum_n \psi_n(x) \int_0^L dy\, \psi_n^*(y)\, \varphi(y)$$

$$= \int_0^L dy \boxed{\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y)}\, \varphi(y) \quad (2)$$

これがもし $\delta(x-y)$ ならOK！ → デルタ関数

$\left(\int_0^L dy\, \delta(x-y)\, \varphi(y) = \varphi(x) \quad (3) \right.$ だよね！$\left. \right)$

$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(y) = \frac{1}{L}\sum_n e^{i\frac{2\pi n}{L}(x-y)} \quad (4)$$

すべての $n = 0, \pm1, \pm2, \cdots$ についての和

この和のふるまいを知りたい！

奇数 N について

$$\delta_N(z) := \frac{1}{L} \sum_{n=-\frac{N-1}{2}}^{\frac{N-1}{2}} e^{i\frac{2\pi n}{L} z} \quad (1)$$

と定ぎ

$$-\frac{L}{2} \leqq z \leqq \frac{L}{2}$$

(一般の $z \in \mathbb{R}$ について)

$$\delta_N(z+L) = \delta_N(z) \quad (2)$$

周期関数.

$$\delta_N(z) \xrightarrow[N\to\infty]{} \delta(z)$$ がいえればうれしい. (3)

まず

$$\int_{-L/2}^{L/2} dz\, e^{i\frac{2\pi n}{L} z} = \begin{cases} 0 & n \neq 0 \\ L & n = 0 \end{cases} \quad (4)$$

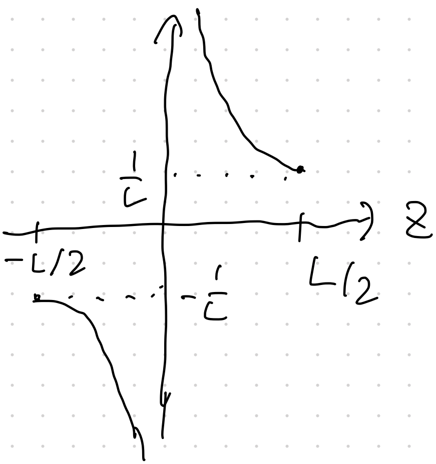
よって

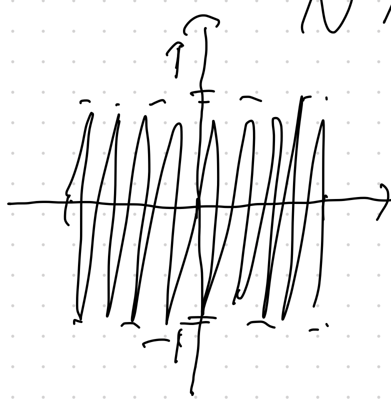
$$\int_{-L/2}^{L/2} dz\, \delta_N(z) = 1 \quad (5)$$

デルタ関数と同じ規格化

$\delta_N(z)$は等比級数の和をつかって正確に計算できる

$$\delta_N(z) = \frac{1}{L}\,\frac{\sin\left(\frac{N\pi}{L}z\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{L}z\right)} \quad (z \neq 0) \qquad (1)$$





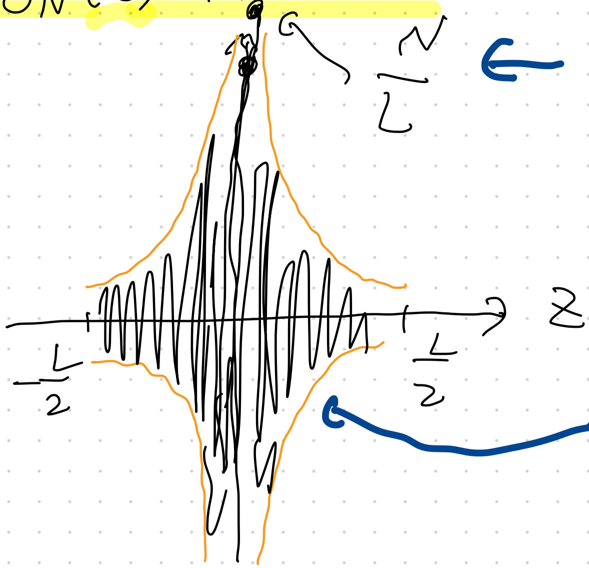
N大なら
はげしく
~~振~~動

また

$$\delta_N(0) = \frac{1}{L}\sum_{n=-\frac{N-1}{2}}^{\frac{N-1}{2}} 1 = \frac{N}{L} \qquad (2)$$

N大なら大きくなる

$\delta_N(z)$のふるまい



Nが大きいほどピークは高い

Nが大きいほど振動は激しい。

デルタ関数ではない…

しかし積分すれば（$z=0$以外では）
振動のために消える!!

$$\lim_{N\to\infty}\int_{-L/2}^{L/2} dz\, f(z)\,\delta_N(z) = \lim_{N\to\infty}\int_{-L/2}^{L/2} dz\, f(0)\,\delta_N(z)$$

$$= f(0)\lim_{N\to\infty}\int_{-L/2}^{L/2} dz\,\delta_N(z) = f(0) \quad (1)$$

積分の中ではデルタ関数! $\left(\int dz\, f(z)\,\delta(z) = f(0)\right)$

正規直交完全系の他の例

▷ 1次元 $x \in \mathbb{R}$ で 調和振動子の

エネルギー固有状態 $\{|\varphi_n\rangle\}_{n=0,1,2,\cdots}$

▷ 1次元 $0 \leq x \leq L$ で

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \qquad (1)$$

$n = 1, 2, \cdots$

などなど

注 P7-(3)の例では、(1)の $\varphi_n(x)$ で任意の

$\varphi(x)$ を展開できる。 $\begin{pmatrix} \varphi(0) = \varphi(L) = 0 \\ \text{の必要はない} \end{pmatrix}$