§2 量子力学 (Quantum Mechanics = QM) の体系

'21 10/11

2.1 基本原理

〈準備と記号〉

"関数列の収束先 $\in \mathcal{H}$"

$\mathcal{H}$: $\mathbb{C}$ 上完備な「内積」空間 $\ni$ $|\psi\rangle$ ket vector "(たて)ベクトル"

↕ エルミート共役

$\mathcal{H}^\dagger$: $\mathcal{H}$ の双対空間 $\ni$ $\langle\psi|$ bra vector "(よこ)ベクトル" (& c.c.)

← dagger (数学では「$*$」)

c.c. = complex conjugate

内積 : $\langle\psi|\psi'\rangle \in \mathbb{C}$

bracket

定義 2.1 $\hat{F}$ を $\mathcal{H}$ 上の線形 operator (op. と略す) とする

$$\hat{F}|\varphi_\lambda\rangle = f_\lambda|\varphi_\lambda\rangle \quad (\lambda \in \Lambda) \quad \cdots (*)$$

をみたすとき, f_λ を $\hat{F}$ の固有値, $|\varphi_\lambda\rangle$ を $\hat{F}$ の固有関数という.

$|\hat{A}\psi\rangle := \hat{A}|\psi\rangle$

$\langle\hat{B}\psi| := |\hat{B}\psi\rangle^\dagger$

定義 2.2 $^\forall|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\hat{B}\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle$

が成り立つとき, $\hat{B}$ を $\hat{A}^\dagger$ と書き $\hat{A}$ のエルミート共役という.

(hermitian conjugate = h.c.)

定義 2.3 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ のとき $\hat{A}$ をエルミート op. という

(エルミート = 自己共役)

命題 2.4 エルミート op. $\hat{F}$ の

(i) 固有値 f_λ は実数

(ii) 異なる固有値に属する固有関数は直交する $\overset{\text{正規化}}{\rightsquigarrow}$ $\langle\varphi_\lambda|\varphi_{\lambda'}\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}$

定義 2.5 正規直交系 $\{|\varphi_\lambda\rangle\}_{\lambda\in\Lambda}$ が完全系

$$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow} \quad \sum_\lambda |\varphi_\lambda\rangle\langle\varphi_\lambda| = \hat{1}_{\mathcal{H}}$$

(このとき $^\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ $= \hat{1}_{\mathcal{H}}|\psi\rangle = \sum_\lambda |\varphi_\lambda\rangle \underbrace{\langle\varphi_\lambda|\psi\rangle}_{\text{展開係数} \in \mathbb{C}}$)

"完全"ということ

※ λ の重複度 ≥ 2 の場合 → 注 2.12 参照

定義2.6 $\hat{F}$がオブザーバブル

$\overset{\mathrm{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\begin{cases} \cdot\ {}^{\forall}\text{固有値 } f_\lambda \in \mathbb{R} \\ \cdot\ \text{固有関数系 } \{|\varphi_\lambda\rangle\} \text{ が完全系} \end{cases}$

〈本題〉

$\mathcal{H}$上のオブザーバブル $\hat{H}$(ハミルトニアン)が定めるシステムを考える

法則2.7 (量子力学の基本法則)

(I) システムの状態は $\mathcal{H}$の元 $|\psi\rangle$ で表される. このとき特に$\mathcal{H}$を状態空間,

$|\psi\rangle$を状態ベクトルと呼ぶ. $|\psi\rangle$ と $C|\psi\rangle$ は同じ状態とみなす.
↖const (≠0)

(II) 物理量は $\mathcal{H}$上のオブザーバブルで表される

(III) システムの時間発展はシュレーディンガー(Schrödinger)方程式で記述される:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

$i=\sqrt{-1}$

$\hbar$: プランク定数

(IV) 物理量$\hat{F}$の期待値を以下のように定義し,

$$\langle \hat{F} \rangle := \frac{\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

状態$|\psi\rangle$において, 物理量$\hat{F}$を観測したときの期待値と解釈する.

注2.8 (IV)について (2.4の設定の下)　　宿題1 これを示せ

$|\psi\rangle = \sum_\lambda |\varphi_\lambda\rangle \underbrace{\langle\varphi_\lambda|\psi\rangle}_{c_\lambda}$ と表したとき $\langle \hat{F} \rangle = \dfrac{\sum_\lambda f_\lambda |c_\lambda|^2}{\sum_\lambda |c_\lambda|^2} \overset{\langle\psi|\psi\rangle=1 \text{ なら}}{=} \sum_\lambda f_\lambda |c_\lambda|^2$

1回の観測で得られる測定値は$\overset{\in\mathbb{R}}{f_\lambda}$のどれか。そのときシステムの状態は

$|\psi\rangle$から$|\varphi_\lambda\rangle$に(確率$|c_\lambda|^2$で)(突如)遷移する. ⇝ 観測問題

← $\langle\psi|\psi\rangle=1$のとき

注2.9 $\langle\psi|\psi\rangle=1$ のとき. (I) の定数の不定性は $|\psi\rangle \sim e^{i\theta}|\psi\rangle$ となる
$U(1)$ 因子の不定性 $(\theta\in\mathbb{R})$

〈システムの時間発展の記述〉 $\left(\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0\right.$ とする$\left.\right)$

- Schrödinger picture (S) : $|\psi(t)\rangle$ が時間発展 ($\hat{F}$ は固定) $\Leftrightarrow$ Sch. eq.
- Heisenberg 〃 (H) : $\hat{F}(t)$ が 〃 ($|\psi\rangle$ は固定) $\Leftrightarrow$ Heisenberg eq.

(S) → (H)

Sch. eq. $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle$ より

$$|\psi(t)\rangle=\underbrace{e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}}_{\text{ユニタリ }(\hat{H}:\text{エルミート})}\underbrace{|\psi(0)\rangle}_{=:|\psi\rangle} \Rightarrow \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=\langle\psi|\psi\rangle \quad \text{一定}$$

オブザーバブル $\hat{F}$ の期待値

$$\langle\hat{F}(t)\rangle=\langle\psi(t)|\hat{F}|\psi(t)\rangle$$
$$=\langle\psi|\underbrace{e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{F}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}}_{=\hat{F}(t)}|\psi\rangle$$

時間発展を op. におしつける

$$\frac{d\hat{F}(t)}{dt}=\frac{i}{\hbar}e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}(\hat{H}\hat{F}-\hat{F}\hat{H})e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

← 宿題2 $\hat{F}(t)$ の def から Heis. eq. を導け

$[\hat{A},\hat{B}]:=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ 交換子積

$$=\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t),\hat{H}] \quad : \text{Heisenberg eq.}$$

命題2.10 $[\hat{F},\hat{H}]=0 \Rightarrow \hat{F}$ は保存量 (i.e. $\frac{d\hat{F}}{dt}=0$)

注2.11 これは古典力学における Poisson 括弧 $\{\ ,\ \}_{P.B.}$ を op. に対する交換子 $\frac{1}{i\hbar}[\ ,\ ]$ におきかえたもの

☺ (注2.11)

古典力学(解析力学)

〈簡単のため1次元で議論〉　　x：物体の位置，p：物体の運動量

$H(x,p) := \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{運動エネルギー}} + \underbrace{V(x)}_{\text{ポテンシャルエネルギー}}$　(ハミルトニアン) として ①

(ハミルトンの) 正準方程式： $\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q}$ ，$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$

$\frac{\partial H}{\partial q} \overset{①}{=} \frac{1}{m}p$ (p と V の関係)，　$-\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial V}{\partial x}$ (保存力) (運動方程式)

Poisson 括弧：

$$\{f,g\}_{P.B.} := \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial f}{\partial x}$$

このとき，$F = F(x,p)$ に対して

$$\frac{dF}{dt} = \{F,H\}_{P.B.} \overset{☺}{=} \frac{\partial F}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial x} \overset{\text{代入}}{=} \frac{\partial F}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p}\frac{dp}{dt} = \frac{F\text{の全微分}}{dt}$$ ∎

が成り立つ．

注2.12

命題2.4(ii)は λ の重複度が2以上でも成り立つ．(これがエルミート性の帰結)

$|\varphi_\lambda\rangle \rightsquigarrow |\varphi_\lambda, k\rangle$ と表すと．2.4(ii)，2.5の式は ← 1から λ の重複度まで走るラベル

以下のようになる

(正規直交性)　$\langle\varphi_\lambda, k|\varphi_{\lambda'}, k'\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{kk'}$

(完全性)　$\sum_{\lambda,k} |\varphi_\lambda, k\rangle\langle\varphi_\lambda, k| = 1_{\mathcal{H}}$