量子力学の基礎

(暫定版 2007.10.16)

北野正雄

はじめに

このテキストは工学部電気電子工学科の 3 年生向きの授業のノートを修正加筆したものであり, 2007 年 10 月現在, 独立した量子論の教科書として, まとめる過程にある. 前半部 (11 章まで) は授業内容にほぼ沿っているので, 京都大学工学部の授業資料のページ, ならびに京都大学オープンコースウェア (OCW) において公開している. やや進んだ内容を含む後半部 (15 章まで) は発展途上であり, チェックや意見をいただくために (リクエストベースあるいは押しつけモードにて) 適宜配布している.

量子論の教科書は選択に困るほど, 数多く出版されており, 著名な学者の手になる見事な本も多い. そんな中にあって, 通常の平均的な記述を付け加えても, 情報を増やすことにならないので, ここでは, 可能な限り, 従来とは異なる説明や視点を心がけた. 直交性をめざすこのようなアプローチは, ある種の暴挙であり, 危険がつきものである. 一般的な説明は長年の選択淘汰に耐えてきただけの意味があるので, それを利用しないと, 結果的に分かりにくいものになってしまう恐れがある. また, 思いつきの独自の説明は全く間違っているかも知れない. というわけで, たまたまこのテキストで量子論を勉強することになった読者のみなさんは, ぜひとも, 最低でも 1 冊の教科書を買っていただきたい. うまくゆけば, 両眼視によって量子論の立体像を楽しむことができるかもしれない.

量子論は自然のコアな部分を記述する理論にふさわしく, 計り知れない広がりと深さをもっており, 苦労なしに手軽に習得できるものではない. 特に問題となるのは, (1) 量子論の記述に必要が数学がやや高度である (高校レベルでは間に合わない). (2) 量子論で扱われる物理系が多岐にわたっており, 対象ごとに量子論の異なった側面が現れている. (3) 古典論との概念的差異が大きく, 現在でも量子論の本質にかかわる未解決の問題を抱えている.

ここでは, (1) の問題を克服することを目標に, 大学初年レベルでの数学的知識を前提に量子論のための言語としての数学をマスターすることをめざす. (2), (3) については, ここで学んだことを装備して, 広大な原野や未踏の高峰を目指してほしい.

量子論の数学的基礎の大部分は線形代数であるといってよい. 大学の初年度に習うのは係数体が実数の線形空間が主である. そこで複素数体上の線形空間を最初に導入する必要がある. ここでは電気回路で利用される複素振幅 (フェーザ) の多次元化という立場で複素線形空間を導入した.

ディラックのすばらしいアイデアであるブラケット記法は昔に比べるとより広く用いられるようになってきたが, 今でも, オプションの 1 つとして扱われたり, 教えにくいなどの理由で全く使用しない教科書さえある. ここでは, 一貫してブラケット記法を用いるために, その意味づけにやや過剰なまでに力点をおいた.

演算子については, ユニタリ演算子, エルミート演算子を包含するクラスとして正規演算子を導入して, そのスペクトル分解定理を詳しく扱った. 線形代数における行列の対角化との関係にも触れ,

演算子の全体像を明確にするよう心がけた.

このテキストでは水素原子, バンド構造といった量子論の定番のテーマを扱うことはしなかった. 具体例は 2 状態系と 1 次元粒子の 2 つに絞り, 前者は離散スペクトルの, 後者は連続スペクトルの系の一般的性質を調べる土俵として利用した. また, それぞれの系に対応する古典波動系の具体例として, 複合共振回路と共振器列を導入した. 回路といっても初歩的なものなので, 電気を専門としない人にも理解できる内容だと思われる.

離散系と連続系の関連については, かなりのページ数を割いて説明した. これによって, 連続系に関してもブラケット記法を躊躇なく使えるようになるはずである.

最近, 多くの事柄が紙の上や計算機の中で済まされることが多くなったためか, 物理量の次元と単位が軽視される傾向にあるように思われる. ここでは, これらを意識できるよう, 必要に応じて次元のチェックを行うようにした.

後半の複合系, 測定理論, 第 2 量子化の部分を含め, 全般的にまだまだ未完成であり, 内容に関して忌憚のないご意見をいただけると幸いである. また, 式の不整合や不明瞭な点などもぜひご指摘いただきたい.

2007.10.16 著者

目　次

第 1 章　量子の発見 **1**
1.1　発見の経緯 — プランク定数 1
1.2　電子の波動性 3
1.3　波動性と粒子性の橋渡 5
1.4　プランク長さ — 最小の長さ 5

第 2 章　量子の振舞 **9**
2.1　微弱な光の検出 — フォトンカウンター 9
2.2　量子サイコロ — ビームスプリッタ 11
2.3　光子の偏光 12
2.4　光子の干渉 15

第 3 章　ヒルベルト空間 **19**
3.1　振動の重ね合せと干渉 19
3.2　振動と複素数 (フェーザ) 20
3.3　フェーザと偏光 21
3.3.1　基底と基底変換 22
3.3.2　複素基底 23
3.4　ヒルベルト空間 24
3.5　ヒルベルト空間の次元と基底 25
3.6　成分と行列表示 26
3.7　ブラとケット 27
3.8　線形汎関数, 双対空間, ブラ 28
3.9　双対基底 31
3.10　比較 31

第 4 章　演算子 **33**
4.1　偏光を変える素子 33
4.2　演算子 34
4.3　1 の分解 37
4.4　演算子の行列表示 37
4.5　共役演算子 39

4.5.1 内積による定義 39
4.5.2 双対空間上の演算子 40
4.5.3 共役演算子 41
4.6 固有値と固有ケット 43
4.7 ユニタリ演算子 44
4.8 ユニタリ変換 45
4.8.1 基底の変換 46
4.8.2 成分の変換 46
4.9 エルミート演算子 46
4.10 非負演算子 48
4.11 射影演算子 48
4.12 正規演算子 49

第 5 章 演算子のスペクトル分解 51
5.1 固有方程式 51
5.2 固有ケットと固有部分空間 52
5.3 スペクトル分解と演算子の関数 52
5.4 正規演算子のスペクトル分解定理 54
5.5 縮退の影響 55
5.6 スペクトル分解のアルゴリズム 55
5.7 スペクトル分解できない場合 57
5.7.1 固有空間の非直交性 57
5.7.2 縮退 — ケース 1 58
5.7.3 縮退 — ケース 2 58
5.8 行列の対角化との関係 59
5.9 交換子 60
5.10 スペクトル分解と交換可能性 61

第 6 章 時間発展 63
6.1 時間発展演算子 63
6.1.1 対角的な場合 63
6.1.2 一般の場合 65
6.2 演算子の時間発展 — Heisenberg 描像 66
6.3 中間表示 67
6.4 Baker-Campbell-Hausdorff の定理 68
6.5 時間に依存するハミルトニアン 69

第 7 章 物理量と測定 73

7.1 量子系における物理量と測定 73
7.2 測定を与える演算子 74
7.3 平均値 75
7.4 トレースと演算子の内積 76
7.5 行列式 77
7.6 密度演算子と射線 78
7.7 不確定関係 81
7.8 測定の効果 82
7.9 純粋状態と混合状態 83

第 8 章 パウリ行列と 2 状態系 87
8.1 パウリ行列 87
8.2 複合共振回路と 2 状態系のアナロジ 89
8.3 2 状態系の一般論 92
8.4 ブロッホベクトル 93
8.5 ブロッホベクトルの運動 94
8.6 2 状態系の例 95
8.6.1 偏光 95
8.6.2 マッハツェンダー干渉計 96
8.6.3 スピン 1/2 粒子 97
8.6.4 2 準位原子 99
8.7 2 状態系の表現の比較 99
8.8 Berry 位相 100
8.9 連続ユニタリ群と交換関係 103

第 9 章 連続スペクトルと波動関数 107
9.1 デルタ関数 107
9.2 デルタ関数の公式 109
9.3 位置表示 111
9.3.1 位置表示 111
9.3.2 演算子の座標表示 112
9.3.3 正準交換関係 113
9.4 運動量表示 114
9.4.1 変換 114
9.5 基底ケットの成分表示 115
9.6 次元 116
9.7 無限行列 116

第 10 章 シュレディンガーの波動方程式 **119**
10.1 シュレディンガーの波動方程式 119
10.2 結合共振器列とシュレディンガー方程式 120
10.3 連続状態のブラケット表示 122
10.4 連続状態に対する演算子 123
10.5 確率の流れ 124
10.6 波動方程式の解法 126
10.6.1 時間定常解 126
10.6.2 空間次元の低下 127
10.6.3 1 次元一様ポテンシャル 127
10.7 井戸型ポテンシャル 128
10.8 周期境界条件 130
10.9 階段ポテンシャル 133
10.10空間的にゆっくり変化するポテンシャル 136

第 11 章 量子古典対応 — 波束, 群速度 **137**
11.1 群速度 137
11.2 波束の構成 139
11.3 波束のスケーリングと特異関数 140
11.4 波束の自由運動 141
11.5 トンネル問題 142
11.6 正準方程式 144
11.7 正準交換関係 146
11.8 ポアソン括弧式と交換関係 149
11.9 クライン・ゴルドン方程式 152
11.10ディラック方程式 153
11.11ガリレイ変換 154
11.12位相速度と波の屈折 156

第 12 章 調和振動子 **159**
12.1 調和振動子 159
12.2 量子化 160
12.3 個数状態とその時間発展 163
12.4 Q 表示 164
12.5 調和振動子の集合 165
12.6 コヒーレント状態 165
12.6.1 コヒーレント状態の過剰完全性 167
12.7 電磁場の量子化 168

12.8 偏光 170
12.9 多モード電磁場 171

第 13 章 エンタングルメント **175**
13.1 複合系とテンソル積 175
13.2 部分系 177
13.3 複合系の例 179
13.4 エンタングルメント 181
13.5 シュミット分解 181
13.6 特異値分解 183
13.7 デコヒーレンス 184
13.8 非局所相関 187
13.9 隠れた変数モデル 189
13.10Bell の不等式 190
13.11GHZ 状態 192

第 14 章 測定の量子論 **195**
14.1 測定のモデル 195
14.2 一般化測定, POVM 197
14.3 一般化測定, POVM の例 199
14.4 クローン不可能定理 202
14.5 アンサンブルに対する測定 203

第 15 章 同種粒子と第 2 量子化 **205**
15.1 振動子としての 2 状態系 205
15.2 フェルミ粒子の量子化 — 第 2 量子化 207
15.3 従来記法との比較 210
15.4 占有数表示 210
15.4.1 同一粒子からなる系 210
15.4.2 時間発展 212
15.4.3 基底の対称化 213
15.4.4 基底の反対称化 215
15.5 粒子数が変わる場合 215
15.5.1 ボーズ粒子の場合 216
15.5.2 フェルミ粒子の場合 217