たしざん・かけざんだけでまなぶ りょーしりきがく

低音

October 5, 2024

2025 年物性若手夏の学校やります!!!

- 全国の物性物理関連の大学院生が集結
- 4 泊 5 日の集中合宿
- 講義・集中ゼミで最先端研究をキャッチアップ
- 学会形式で自分の研究を発表

若手研究者が研究の道を本格的に歩み始める第一歩になります!!!

参加・斡旋・各種協賛お願いします!!!

自己紹介: 低音

- 京大 基礎物理学研究所 M1
- 専門は凝縮系理論物理
- 登山・自転車が趣味
- note「ペンローズのグラフ記法」
- 第 70 回物性若手夏の学校 副代表

このセミナーで目指すもの

目標

量子力学における自発的対称性の破れを理解する

南部陽一郎・小林誠・益川敏英 ノーベル賞 (2008)

このセミナーで登場しないもの

- 実験事実
- 波動関数
- シュレディンガー方程式
- 微積分
- 三角関数

なぜ「物理」をやらないのか?

1. 現象が**直観とかけ離れている**
   - 状態の重ね合わせ?
   - 測定したら状態が変わる?
   - 位置と速度が同時に決まらない?
   - 量子もつれ?
2. **学部１年の線形代数だけ**で理解できる
   - 複素ベクトル
   - エルミート行列
   - ユニタリ行列

難しそうだが、全て**たしざんとかけざん**。
計算できるようになると、なぜか量子力学の感覚を掴めてくる

ベクトル

ベクトルは数がいっぱい並んだもの。4 つ数が並ぶと 4 次元。
量子力学のお約束に従って、ブラ・ケットで書くと、後々直感的にわかりやすい。

$$|1,2,4,3\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \boxed{|1,2,4,3\rangle}$$

$$\langle 1,2,4,3| = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 3 \end{bmatrix} = \boxed{\langle 1,2,4,3|}$$

量子力学ではベクトルは状態を表すので、**状態ベクトル**と呼ぶことにする。

状態ベクトルの足し算

同じ次元のブラ同士、ケット同士なら単純に足すだけ。

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 5 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}$$

次元が違うもの、ブラとケットは足せない。
足し算の延長でスカラー倍もそのまま。

$$3 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 12 \\ 9 \end{bmatrix}$$

状態ベクトルどうしの掛け算 (内積)

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \\ -3 \\ 2 \end{bmatrix} = 1 \cdot 5 + 2 \cdot 1 + 4 \cdot (-3) + 3 \cdot 2$$

$$= 1$$

具体的な計算をしないなら、お絵描きしたほうがわかりやすい。

$$\boxed{\langle 1, 2, 4, 3 |} \text{———} \boxed{| 5, 1, -3, 2 \rangle} = 1$$

脚が出てないので状態ベクトルじゃない。

行列の状態ベクトルへの作用

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \cdot 1 + 2 \cdot (-2) \\ -1 \cdot 1 + 4 \cdot (-2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ -9 \end{bmatrix}$$

こういうのを

$$\hat{H} |\psi\rangle = |H\psi\rangle$$

$$-\boxed{\hat{H}}-\boxed{|\psi\rangle} \quad = \quad -\boxed{|H\psi\rangle}$$

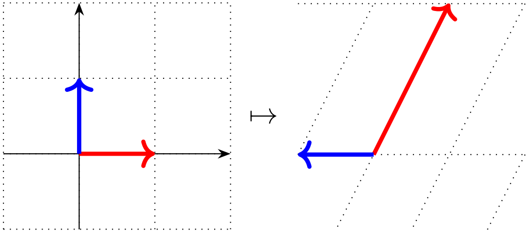
みたいに書く。$\hat{H}$ は状態ベクトルを状態ベクトルにするので脚が 2 本。

$$\hat{H} = \ -\boxed{\hat{H}}-$$

矢印で理解するなら

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} : \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right) \mapsto \left(\begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix} \right)$$

ベクトルを回転・伸縮



行列積

$$
\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} e & f \\ g & h \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} e\alpha + f\beta \\ g\alpha + h\beta \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} a(e\alpha + f\beta) + b(g\alpha + h\beta) \\ c(e\alpha + f\beta) + d(g\alpha + h\beta) \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} (ae + bg)\alpha + (af + bh)\beta \\ (ce + dg)\alpha + (cf + dh)\beta \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} ae + bg & af + bh \\ ce + dg & cf + dh \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}
$$

$$
\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} e & f \\ g & h \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} ae + bg & af + bh \\ ce + dg & cf + dh \end{bmatrix}
$$

$$
-\boxed{\hat{A}}-\boxed{\hat{B}}- \;=\; -\boxed{\widehat{AB}}-
$$

行列積

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1N} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{N1} & B_{N2} & \cdots & B_{NN} \end{bmatrix}$$

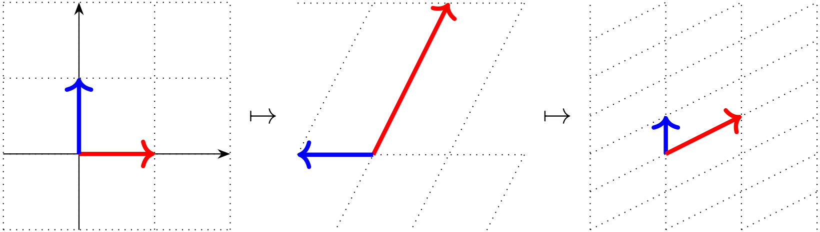
$$= \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} + \cdots + A_{1N}B_{N1} & \cdots & A_{11}B_{1N} + \cdots + A_{1N}B_{NN} \\ A_{21}B_{11} + \cdots + A_{2N}B_{N1} & \cdots & A_{21}B_{1N} + \cdots + A_{2N}B_{NN} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1}B_{11} + \cdots + A_{NN}B_{N1} & \cdots & A_{N1}B_{1N} + \cdots + A_{NN}B_{NN} \end{bmatrix}$$

$$(AB)_{ij} = A_{i1}B_{1j} + \cdots + A_{iN}B_{Nj}$$

むずそうなことやってるけど、結局は足し算と掛け算がいっぱいあるだけ。

矢印で理解するなら

2 回の回転・伸縮を合成



わかる人には一発でわからせる固有方程式

定義 (固有方程式)

$$\begin{bmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & \cdots & H_{NN} \end{bmatrix} \underset{\text{固有状態ベクトル}}{\begin{bmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_N \end{bmatrix}} = \underset{\text{固有値}}{E} \underset{\text{固有状態ベクトル}}{\begin{bmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_N \end{bmatrix}}$$

$$\hat{H} \left|\phi\right\rangle = E \left|\phi\right\rangle$$

$$-\boxed{H}-\boxed{\left|\phi\right\rangle} = E -\boxed{\left|\phi\right\rangle}$$

固有方程式 定義のポイント

$$-\boxed{H}-\boxed{|\phi\rangle} \;=\; E\; -\boxed{|\phi\rangle}$$

- 両辺の固有状態ベクトル $|\phi\rangle$ は同じ
- 固有値 E はただの実数

H を決めると $(E, |\phi\rangle)$ の組が (一般には複数個) 出現

例

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \Longrightarrow (E, |\phi\rangle) = \left(1, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}\right), \left(-1, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right)$$

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \Longrightarrow (E, |\phi\rangle) = \left(1, \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}\right), \left(1, \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}\right)$$

手を動かせ

Example (2 × 2 でやってみよう!)

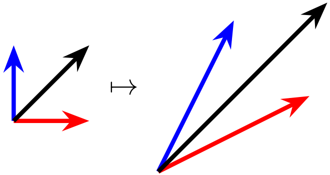
$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \cdot 1 + 1 \cdot 1 \\ 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \cdot 1 + 1 \cdot (-1) \\ 1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

一般に行列 $\hat{H}$ から固有値 E と固有状態ベクトル $|\phi\rangle$ を見つけるのは至難の業 (原理的にはできるが計算が膨大)。

矢印で理解するなら

$\hat{H}\,|\phi\rangle = E\,|\phi\rangle$ 方向が変わらないベクトルが固有ベクトル。



異なる固有値の内積

定理

固有値が異なる固有ベクトルは直交

$$
\begin{aligned}
o_1 \langle o_1 | o_2 \rangle &= (\langle o_1 | \hat{O}) | o_2 \rangle \\
&= \langle o_1 | (\hat{O} | o_2 \rangle) = o_2 \langle o_1 | o_2 \rangle
\end{aligned}
$$

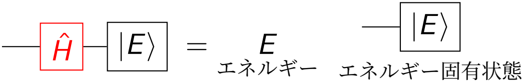
$$
\therefore (o_1 - o_2) \langle o_1 | o_2 \rangle = 0.
$$

$o_1 \neq o_2$ では $\langle o_1 | o_2 \rangle = 0.$

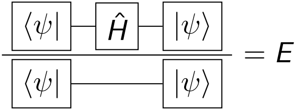
理論

定義 (理論)

「エネルギー」を固有値にもつ行列 $\hat{H}$



エネルギーを求めたければ、



縮退

定義

縮退状態 $|E;1\rangle, |E;2\rangle$ が共に $\hat{H}$ の固有値 E の固有状態ベクトルでありながら

$$|E;1\rangle \neq |E;2\rangle$$

を満たすとき、$|E;1\rangle, |E;2\rangle$ は**縮退**するという。

縮退: 例

Example

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

の固有値・固有ベクトルは

$$(E, |E\rangle) = \left(1, \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}\right), \quad \left(1, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right), \quad \left(-1, \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}\right).$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \not\equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

要請

要請

1. 「物理量」が**一般には複数だが限定された**「測定値」を持つ
2. どんな「物理量」にも**「測定値」がただ一つしか生じない**状態ベクトルが存在する
3. 任意の状態ベクトルは「測定値」がただ一つしか生じない状態ベクトルたちの**重ね合わせ**で書ける
4. ある状態ベクトルの「測定値」が出る確率は、その「測定値」がただ一つしか生じない要請 2 の状態ベクトルと元の状態ベクトルだけで計算できる

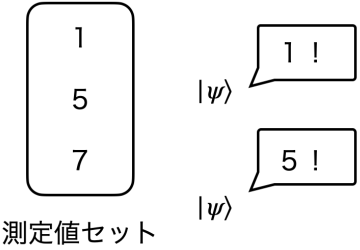
何を言ってるかわからないと思うので説明します。

要請 1

要請

「物理量」が**一般には複数だが限定された**「測定値」を持つ

ある状態ベクトルに「測定」を施すと、「測定値」セットのうちどれかが出てくる。



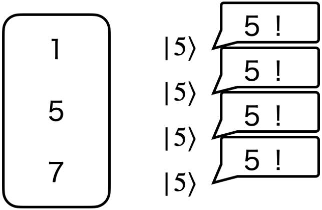
一般に測定ごとに結果が変わる。

要請 2

要請

どんな「物理量」にも**「測定値」がただ一つしか生じない**状態ベクトルが存在する

何回「測定」を繰り返しても「測定値セット」のうちの 1 つだけしか出てこない。



測定値セット

要請 3

要請

任意の状態ベクトルは「測定値」がただ一つしか生じない状態ベクトルたちの**重ね合わせ**で書ける

$$\text{測定値} = \{1, 5, 7\} \Longrightarrow |\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_5 |5\rangle + c_7 |7\rangle$$

こういうのを「$|1\rangle, |5\rangle, |7\rangle$ を混ぜる」とか言います。

要請 4

要請

ある状態ベクトルの「測定値」が出る確率は、その「測定値」がただ一つしか生じない要請 2 の状態ベクトルと元の状態ベクトルだけで計算できる。

状態ベクトル $|\psi\rangle$ で測定値セット $\{1, 5, 7\}$ のうち 5 が出る確率
$\longleftarrow$ $|\psi\rangle$ & $|5\rangle$ で計算可能。

物理量の表し方

1. 物理量を、測定値が固有値の行列で表す
2. 要請 3『任意の状態ベクトルは「測定値」がただ一つしか生じない状態ベクトルたちの**重ね合わせ**で書ける』に従って、状態ベクトルを分解
3. 分解した固有状態ベクトルの固有値が測定値になり得る

Example

固有値 $\{1, 5, 7\}$ の物理量を状態

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_5 |5\rangle$$

で測定すると、測定値は 1 or 5.

特定の測定値を出す確率

物理量 $\hat{O}$ の固有値 $\{o_1, o_2, \ldots\}$ とその固有ベクトル $\{|o_1\rangle, |o_2\rangle, \ldots\}$.

定義

状態 $|\psi\rangle$ で $\hat{O}$ を測定して測定値 o_1 が出る確率:

$$P_{o_1} = \frac{|\langle o_1|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle\langle o_1|o_1\rangle} = \frac{\left|\boxed{\langle o_1|}\boxed{|\psi\rangle}\right|^2}{\boxed{\langle\psi|}\boxed{|\psi\rangle}\ \boxed{\langle o_1|}\boxed{|o_1\rangle}}.$$

固有状態ベクトルでは100%固有値が出る:

$$P_{o_1} = \frac{|\langle o_1|o_1\rangle|^2}{\langle o_1|o_1\rangle\langle o_1|o_1\rangle} = 1, \qquad P_{o_2} = \frac{|\langle o_2|o_1\rangle|^2}{\langle o_1|o_1\rangle\langle o_2|o_2\rangle} = 0.$$

期待値

定義

期待値

$$\text{期待値} = \sum \text{値} \times \text{確率}$$

Example

$|\langle\psi|\psi\rangle| = |\langle o_1|o_1\rangle| = 1$ の状態が $|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_5|5\rangle$ なら、

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle &= \boxed{\langle\psi|} - \boxed{\hat{O}} - \boxed{|\psi\rangle} \\
&= (\langle 1|c_1^* + \langle 5|c_5^*)\hat{O}(c_1|1\rangle + c_5|5\rangle) \\
&= |c_1|^2\langle 1|\hat{O}|1\rangle + c_1^* c_5 \cdot 5\langle 1|5\rangle \\
&\quad + c_5^* c_1 \cdot 1\langle 5|1\rangle + |c_5|^2\langle 5|\hat{O}|5\rangle \\
&= 1|\langle 1|\psi\rangle|^2 + 5|\langle 5|\psi\rangle|^2 = 1P_1 + 5P_5
\end{aligned}$$

状態ベクトルの変換

要請

要請 3 任意の状態ベクトルは「測定値」がただ一つしか生じない状態ベクトルたちの**重ね合わせ**で書ける

重ね合わせ＝行列の状態ベクトルへの作用で、大きさを変えないもの

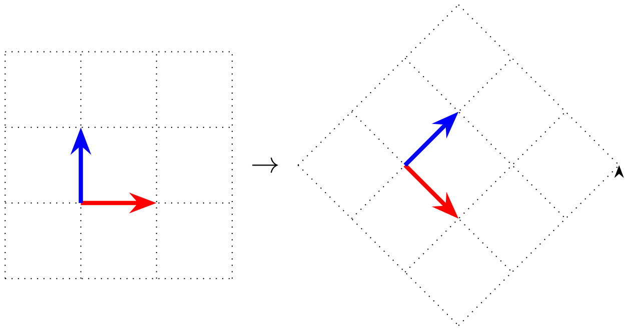
$$|\psi\rangle \to \hat{U}\,|\psi\rangle = |U\psi\rangle$$

$$-\boxed{\hat{U}}-\boxed{|\psi\rangle}$$

$$\text{w/ } \langle U\psi|U\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

例: 回転

$$\hat{U}_{45^\circ} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$



状態の対称性

定義 (状態が変換 $\hat{U}$ で対称)

$$|\psi\rangle \equiv \hat{U}\,|\psi\rangle$$

Example

$$|\leftrightarrow\rangle := \frac{|\rightarrow\rangle + \hat{U}_{180^\circ}\,|\rightarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

は 180° 回転で不変

$$\hat{U}_{180^\circ}\,|\leftrightarrow\rangle = \frac{\hat{U}_{180^\circ}\,|\rightarrow\rangle + \hat{U}_{360^\circ}\,|\rightarrow\rangle}{\sqrt{2}} \equiv |\leftrightarrow\rangle$$

$\longrightarrow$ 180° 回転対称

理論の対称性

もしどのエネルギー固有状態 $|E\rangle$ を 180° 回転した
$|UE\rangle = \hat{U}_{180^\circ}|E\rangle$ もエネルギーが変わらないなら、

$$
\begin{aligned}
-\boxed{\hat{U}}-\boxed{\hat{H}}-\boxed{|E\rangle} &= E -\boxed{\hat{U}}-\boxed{|E\rangle} \\
&= E -\boxed{|UE\rangle} \\
&\equiv -\boxed{\hat{H}}-\boxed{|UE\rangle} \\
&= -\boxed{\hat{H}}-\boxed{\hat{U}}-\boxed{|E\rangle}
\end{aligned}
$$

定義 (理論の対称性)

$\hat{H}\hat{U} = \hat{U}\hat{H} \iff$ 理論 $\hat{H}$ は $\hat{U}$ で対称

例

Example

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix}, \qquad \hat{U} = \begin{bmatrix} & & & 1 \\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ 1 & & & \end{bmatrix}$$

$$\hat{H}\hat{U} = \begin{bmatrix} & & & 1 \\ & & -1 & \\ & -1 & & \\ 1 & & & \end{bmatrix} = \hat{U}\hat{H}$$

理論 $\hat{H}$ は変換 $\hat{U}$ を対称性にもつ。

基底状態

定義 (基底状態)

理論 $\hat{H}$ の最小固有値を出す固有状態 $|E_0\rangle$

Example

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} & 1 \\ 1 & \end{bmatrix}$$

固有値 (=エネルギーの測定値) は ± 1. 最小のエネルギー $E = -1$ を与える

$$|E_9\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

が基底状態。

絶対零度では基底状態 (の重ね合わせ) が実現する

自発的対称性の破れ

変換 $\hat{U}$, 理論 $\hat{H}$, 状態 $|\psi\rangle$ に対して、

状態の対称性 $|\psi\rangle \equiv \hat{U}\,|\psi\rangle$

理論の対称性 $\hat{H}\hat{U} = \hat{U}\hat{H}$

定義 (自発的対称性の破れ)

理論は対称性を守っているが、基底状態が対称性を破っていること

南部陽一郎・小林誠・益川敏英のノーベル賞 (2008)

自発的対称性の破れ: 例

Example

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{bmatrix}, \qquad \hat{U} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & & 1 \\ & 1 & \end{bmatrix}$$

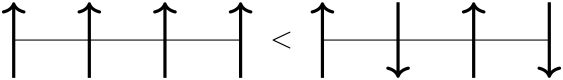
$\hat{H}$ の固有値は ± 1. 基底状態は **2 つ**。

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

$\hat{H}\hat{U} = \hat{U}\hat{H}$ だが $\hat{U}\,|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \neq |\uparrow\rangle$. **何が楽しい?**

物理的直感

矢印の向きが揃った方が低エネルギーとする

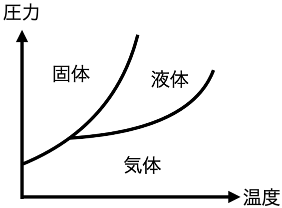


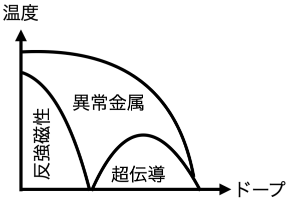
理論は「揃え」としか言っていないのに、実現する状態は揃う向きが勝手に決まる

$\to$ 磁性の発現, 磁石のメカニズム

相図

対称性がわかると結構わかる





自発的対称性の破れだけでほとんどの線が引ける

次回予告

相図の全ての線が自発的対称性の破れで書けると思っていた。
そう、量子ホール効果の出現までは...
次回**「トポロジカル秩序の分類に制限を与える禁止定理」**

量子力学の参考書

- **清水明「新版 量子論の基礎」サイエンス社**
  今回の流れに沿っている。数学的に厳密に寄せているのに、わかりやすい。初学者にも勧められる。
- **J. J. サクライ「現代の量子力学 (上)」吉岡書店**
  今回つかったブラケット記法による有名書。ゼミに便利。一人で読むなら 2 冊目以降。
- **猪木慶治・川合光「量子力学 I」講談社**
  今回扱わなかった波動関数表示で進める。割と王道。

2025年物性若手夏の学校やります!!!

- 全国の物性物理関連の大学院生が集結
- 4泊5日の集中合宿
- 講義・集中ゼミで最先端研究をキャッチアップ
- 学会形式で自分の研究を発表

若手研究者が研究の道を本格的に歩み始める第一歩になります!!!

参加・斡旋・各種協賛お願いします!!!