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 4, 2024

2025年物性物理夏の学校やります!!!

- 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

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」

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

計算できるようになると、なぜか感覚を掴めてくる

1 べくとるとぎょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 りろんたいけー

4 ひょーげんろん

5 ぶんるいもんだい

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。

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

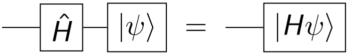
脚が出てないので状態ベクトルじゃない。

行列の状態ベクトルへの作用

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

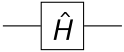
こういうのを

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



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。

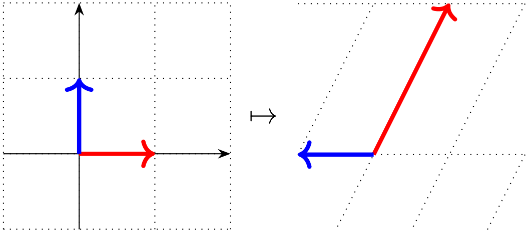
$\hat{H} =$



矢印で理解するなら

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

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

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

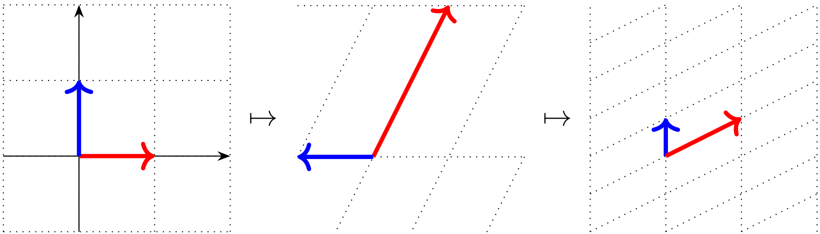
$$= \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} + \cdots + A_{1N}B_{N1} & \cdots & A_{11}B_{1N} + \cdots + A_{1N}B_{NN} \\ A_{21}B_{11} + \cdots + A_{2N}B_{N1} & \cdots & A_{21}B_{1N} + \cdots + A_{2N}B_{NN} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1}B_{11} + \cdots + A_{NN}B_{N1} & \cdots & A_{N1}B_{1N} + \cdots + A_{NN}B_{NN}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

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

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



一方その頃量子力学では

状態を変換すると別の状態になる

- 回転する
- ズラす
- 交換する

状態ベクトルを状態ベクトルに移すので、行列による作用で表せる

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

わかる人には一発でわからせる固有方程式

Definition 1: 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

e.g. 1: 2×2 **でやってみよう!**

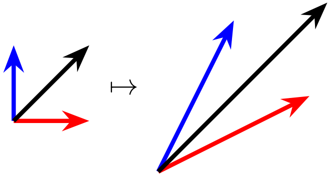
$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \cdot 1 + 1 \cdot 1 \\ 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

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

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。



対角化

以下我々が扱う行列は固有値が斜めに並んだだけの行列で表せることが知られている。

Example

固有値が $\{1, 5, 7\}$ の行列はうまく変形することで

$$\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 5 & \\ & & 7 \end{bmatrix}$$

の形になる。固有値, 固有ベクトルは

$$\left(1, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}\right), \quad \left(5, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}\right), \quad \left(7, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right).$$

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

ハミルトニアン

ハミルトニアン:「エネルギー」を固有値にもつ行列

$$\underbrace{\hat{H}}_{\text{ハミルトニアン}} |E\rangle = \underbrace{E}_{\text{エネルギー}} \underbrace{|E\rangle}_{\text{エネルギー固有状態}}$$

縮退

定義

縮退状態 $|E;1\rangle, |E;2\rangle$ が共にハミルトニアンの固有値 E の固有状態ベクトルでありながら

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

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

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

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \leq \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 2$$

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

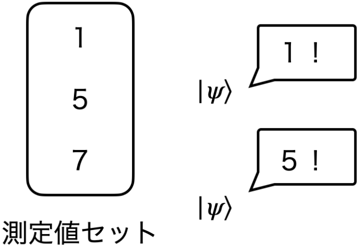
何を言ってるかわからないと思うので説明します。

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。



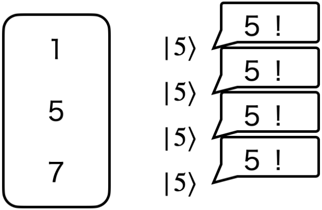
一般に測定ごとに結果が変わる。

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 $\hat{O}$ 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 $\hat{O}$ を測定して固有値 o_1 が出る確率:

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

固有状態ベクトルでは 100%固有値が出る:

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

期待値

定義

期待値

$$期待値 = \sum 値 \times 確率$$

Example

状態 $|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_5 |5\rangle$ なら、

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

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

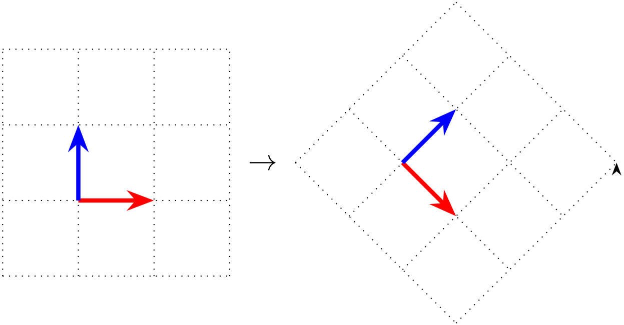
重ね合わせ＝行列の状態ベクトルへの作用で、大きさを変えないもの

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

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

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

Example

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

は 180° 回転で不変

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

$\longrightarrow$ 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、

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

定義 (理論の対称性)

$$\hat{H}\hat{U} = \hat{U}\hat{H}$$

$\Longleftrightarrow$ 理論 $\hat{H}$ は $\hat{U}$ で対称

例

Example

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

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

1. べくとるとぎょーれつ
2. こゆーほーてーしき
3. りろんたいけー
4. ひょーげんろん
5. ぶんるいもんだい