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 1, 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 考えたい理論体系

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)

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

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。

一方その頃量子力学では

量子力学では，すべての情報はベクトルが持っている．
状態ベクトル＝状態。

prop. 1: 測定により $|\psi\rangle$ が測定される確率

$$P_\psi \propto \langle\psi|\psi\rangle = \boxed{\langle\psi|}\!-\!\boxed{|\psi\rangle}$$

状態って???
→ 詳しい話はこの後

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

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

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

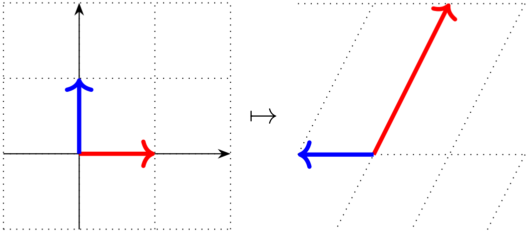
みたいに書く。$\hat{H}$ は状態ベクトルを状態ベクトルにするので脚が 2 本。

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

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

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

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

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

行列積

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

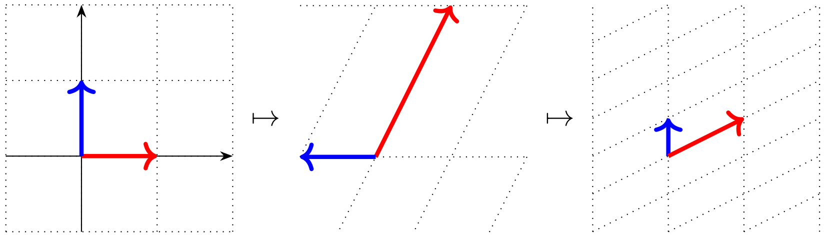
$$
= \begin{bmatrix}
A_{11}B_{11} + \cdots + A_{1N}B_{N1} & \cdots & A_{11}B_{1N} + \cdots + A_{1N}B_{NN} \\
A_{21}B_{11} + \cdots + A_{2N}B_{N1} & \cdots & A_{21}B_{1N} + \cdots + A_{2N}B_{NN} \\
\vdots & \ddots & \vdots \\
A_{N1}B_{11} + \cdots + A_{NN}B_{N1} & \cdots & A_{N1}B_{1N} + \cdots + A_{NN}B_{NN}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

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

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

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

1 べくとるとぎょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 考えたい理論体系

4 ひょーげんろん

5 ぶんるいもんだい

わかる人には一発でわかるせる固有方程式

Definition 1: 固有方程式

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

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

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

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!**

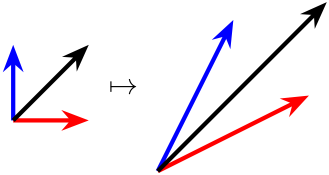
$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \cdot 1 + 1 \cdot 1 \\ 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

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

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

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



1 べくとるとぎょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 考えたい理論体系

4 ひょーげんろん

5 ぶんるいもんだい

要請

これから考える理論体系が満たすべきもの

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**線型結合**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

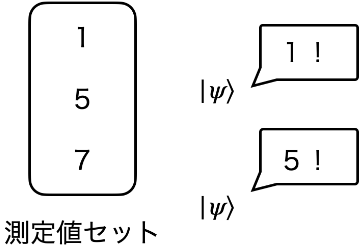
何を言ってるかわからないと思うので説明します。

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。



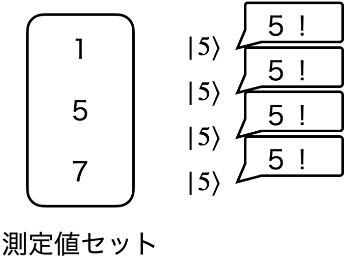
一般に測定ごとに結果が変わる。

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。



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**線型結合**で書ける

$$\text{測定値} = \{1, 5, 7\} \Longrightarrow |\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_5 |5\rangle + c_7 |7\rangle \tag{3.1}$$

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「物理量」$\hat{A}$ を測定して「測定値」a が出る確率
$\longleftarrow$ $|\psi\rangle$ & 「物理量」$\hat{A}$ を「測定」すると常に a しか出ない状態ベクトル $|a\rangle$

期待値ってなに?

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

期待値に見える?
$\rightarrow$ 固有状態ベクトルに直せばわかる!

固有方程式で見る期待値

$\hat{H}$ の固有値 $E_1, E_2, \ldots$ の固有ベクトル $|E_1\rangle, |E_2\rangle, \ldots$ により

$$-\boxed{|\psi\rangle} = c_1 -\boxed{|E_1\rangle} + c_2 -\boxed{|E_2\rangle} + \cdots$$

と展開すると、

$$\begin{aligned}
&\boxed{\langle\psi|}-\boxed{\hat{H}}-\boxed{|\psi\rangle} \\
&= c_1 \boxed{\langle\psi|}-\boxed{\hat{H}}-\boxed{|E_1\rangle} + c_2 \boxed{\langle\psi|}-\boxed{\hat{H}}-\boxed{|E_2\rangle} + \cdots \\
&= E_1 c_1 \boxed{\langle\psi|}-\boxed{|E_1\rangle} + E_2 c_2 \boxed{\langle\psi|}-\boxed{|E_2\rangle} + \cdots
\end{aligned}$$

1 べくとるとぎょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 考えたい理論体系

4 ひょーげんろん

5 ぶんるいもんだい

1 べくとるとぎょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 考えたい理論体系

4 ひょーげんろん

5 ぶんるいもんだい