

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・幹旋・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

1 べくとるときょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 りろんたいけー

4 じはつてきたいしょーせーのやぶれ

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。

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

$$\langle 1, 2, 4, 3| = [1 \quad 2 \quad 4 \quad 3] = \boxed{\langle 1, 2, 4, 3|} \text{---}$$

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

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

こういうのを

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

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

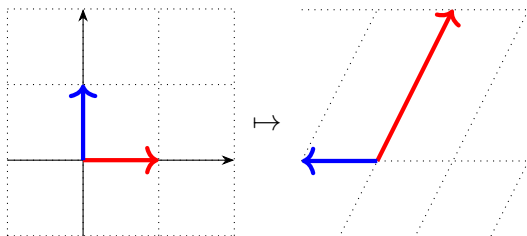
みたいを書く。 \hat{H} は状態ベクトルを状態ベクトルにするので脚が2本。

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

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

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

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

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

行列積

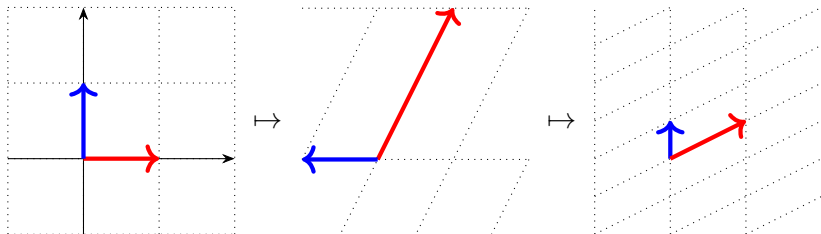
$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1N} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots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

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

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



1 べくとるときょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 りろんたいけー

4 じはつてきたいしょーせーのやぶれ

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)

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

固有状態ベクトル 固有状態ベクトル

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

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

固有方程式 定義のポイント

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

- 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

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

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

手を動かせ

Example (2×2 でやってみよう!)

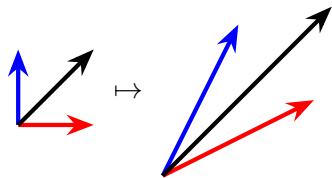
$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \cdot 1 + 1 \cdot 1 \\ 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

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

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

定義 (理論)

「エネルギー」を固有値にもつ行列 \hat{H}

$$\text{---} \boxed{\hat{H}} \text{---} \boxed{|E\rangle} = \underset{\text{エネルギー}}{E} \text{---} \boxed{|E\rangle} \underset{\text{エネルギー固有状態}}$$

エネルギーを求めたければ、

$$\frac{\begin{array}{|c|} \hline \langle\psi| \end{array} \boxed{\hat{H}} \begin{array}{|c|} \hline |\psi\rangle \end{array}}{\begin{array}{|c|} \hline \langle\psi| \end{array} \text{---} \begin{array}{|c|} \hline |\psi\rangle \end{array}} = E$$

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

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

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

1 べくとるときょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 りろんたいけー

4 じはつてきたいしょーせーのやぶれ

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

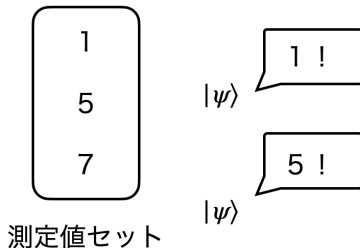
何を言ってるかわからないと思うので説明します。

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。



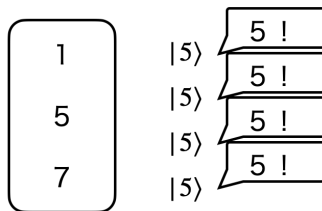
一般に測定ごとに結果が変わる。

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

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

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
← $|\psi\rangle$ & $|5\rangle$ 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 $\{o_1, o_2, \dots\}$ とその固有ベクトル $\{|o_1\rangle, |o_2\rangle, \dots\}$.

定義

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

$$P_{o_1} = \frac{|\langle o_1 | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle \langle o_1 | o_1 \rangle} = \frac{\left| \begin{array}{|c|} \hline \langle o_1 | \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline |\psi\rangle \\ \hline \end{array} \right|^2}{\begin{array}{|c|} \hline \langle \psi | \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline |\psi\rangle \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \langle o_1 | \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline |o_1\rangle \\ \hline \end{array}}.$$

固有状態ベクトルでは 100%固有値が出る:

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

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、

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

1 べくとるときょーれつ

2 こゆーほーてーしき

3 りろんたいけー

4 じはつてきたいしょーせーのやぶれ

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

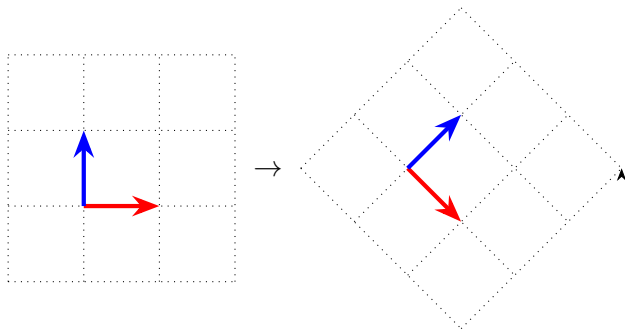
$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{U}|\psi\rangle = |U\psi\rangle$$

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

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

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

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

→ 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、

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

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

Example

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

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

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

$$|E_0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

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

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

\hat{H} の固有値は ± 1 . 基底状態は **2** つ。

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

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

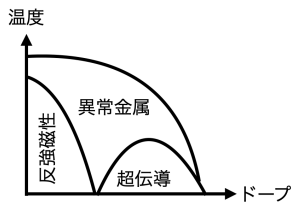
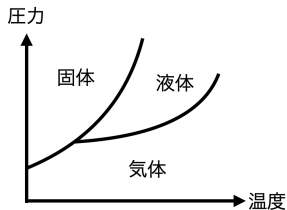


理論は「揃え」としか言っていないのに、実現する状態は揃う向きが勝手に決まる

→ 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・幹旋・各種協賛お願いします!!!

