量子力学 〜摂動と量子情報を主として〜

Teamil9

2021 年 11 月 11 日

概要

目次

第 1 章　基本知識 2

1.1 解析力学と正準量子化 2

1.2 数学的な基礎知識 3

1.3 量子力学における記法と線形代数学の概念との対応 3

第 2 章　N 準位系 5

2.1 $N(=2)$ 準位系 5

2.2 N 準位系 5

第 3 章　摂動論 7

3.1 時間を含まない摂動論 7

3.2 時間を含む摂動論 7

第 4 章　同種粒子の量子論 9

第 5 章　量子統計力学への道標 10

第 6 章　散乱問題 11

第 1 章

基本知識

1.1　解析力学と正準量子化

解析力学の基礎的な知識

多粒子の Lagrangian は次のように定義できる。

$$L = \sum_k \frac{m}{2} \dot{q_k}^i \dot{q}_{ki} - V(q_1, \ldots) \tag{1.1}$$

この時 q に対応する正準運動量 p は、

$$p^i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{1.2}$$

と定義され、Hamiltonian は、

$$H := p\dot{q} - L = \frac{p^2}{2m} + V(q) \tag{1.3}$$

となる。また、Poisson bracket は次のように定義される：

$$\{f, g\} = \sum_k \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k} - \frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k} \tag{1.4}$$

ブラとケット

量子力学における

正準量子化

正準量子化は量子力学における演算子の交換子と古典力学における Poisson bracket とが次の関係を結ぶことを言う。:

$$\left[\hat{f}, \hat{g}\right]_q = i\hbar\{f, g\}_c \tag{1.5}$$

ここで、f, g は演算子 $\hat{f}, \hat{g}$ の古典的な対応物となる物理量である。これにより、位置演算子と、運動量演算子の間の関係は次を満たすこととなる。

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{1.6}$$

1.2 数学的な基礎知識

1.2.1 Pauli 行列の性質

Pauli 行列 σ_i は次の式で与えられる。

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.7}$$

この Pauli 行列と単位行列 $I =: \sigma_0$ を用いて、2×2 の正則行列 A は一般に次のように書ける。[*1]

$$\hat{A} = \sum_{i=0}^{3} a_i \hat{\sigma}_i \tag{1.8}$$

1.2.2 固有値・固有ベクトル

1.3 量子力学における記法と線形代数学の概念との対応

ブラケット記法とベクトル・双対ベクトル

量子状態はベクトルの性質を持っており、

$$|\cdot\rangle \tag{1.9}$$

という形で表すこととし、これをケット（ベクトル）と呼ぶ。系の取り得る量子状態全体の集合であるベクトル空間 $\mathcal{H}$ は Hilbert 空間[*2]であり、状態空間と呼ばれている。

また、ベクトル空間には必ず対となる双対空間があり、この空間におけるベクトルを、

$$\langle\cdot| \tag{1.10}$$

と書き、これをブラ（ベクトル）と呼ぶ。

さて、状態空間 $\mathcal{H}$ から取った二つの任意のベクトル $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ の内積を次のように書こう[*3]

$$g(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \quad (\in \mathbb{C}) \tag{1.11}$$

ここで、双対空間の元として $\langle\psi| : |\phi\rangle \mapsto g(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ [*4]となるような $\langle\psi|$ が取れる。[*5]なので、一々、式 (1.11) のように書くことはせずに、

$$\langle\psi|\phi\rangle := g(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \tag{1.12}$$

と量子力学の (ブラケット) 記法では書くこととする。

[*1] 本 pdf では x 座標、y 座標、z 座標といった方向のラベリングは行わず、座標に関するラベルを数字に全て置き換える。こうすることによって総和記号がスッキリするためである。もしも慣れない読者がいた場合には $1 \to x, 2 \to y, 3 \to z$ と読み替えすると理解に支障はでないはずだ。

[*2] エルミート内積つき複素ベクトル空間のことである。

[*3] ベクトルの前後の置き方に関しては流儀の違いがある。ここでは先においたものの成分が複素共役をとったものという流儀を用いている。

[*4] 双対空間の元はもとの空間のベクトルをそのベクトル空間の係数体の数に対応させる写像と同一視出来る。（逆にもとの空間のベクトルは、双対空間のベクトルを係数体の数に対応させる写像と同一視できる。）

[*5] 表現定理と呼ばれている。

テンソル積

線形代数の理論によるとテンソル積というベクトル空間の元をいくつか持ってきて組を作ったらそれもまた線形空間になった。これらのテンソル積が量子力学の記法においてどのように書くことになるのかを見る。

２階のテンソルを考える。ベクトル空間と双対空間の中の元で取りうる組を考えると、ベクトル空間の２つの元での組みと、双対空間の２つの元での組と、ベクトル空間の元１つと双対空間の元１つの組が考えられるだろう。これらは順に次のように書き表していく。

$$|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle =: |\psi\rangle |\phi\rangle \tag{1.13}$$

$$\langle\psi| \otimes \langle\phi| =: \langle\psi| \langle\psi| \tag{1.14}$$

$$|\psi\rangle \otimes \langle\phi| =: |\psi\rangle\langle\phi| \tag{1.15}$$

ここで、$|\cdot\rangle\langle\cdot|$ について考察する。$|\cdot\rangle\langle\cdot|$ のうち、$\langle\cdot|$ と $|\psi\rangle$ との内積を取ることを試みると、

$$|\cdot\rangle \langle\cdot|\psi\rangle \tag{1.16}$$

と考えられる。$\langle\cdot|\cdot\rangle$ は単なる数なのでこの式はケットだ（！）このような内積の取り方はテンソルの縮約と認識ができる。$|\cdot\rangle |\cdot\rangle$ や $\langle\cdot| \langle\cdot|$ も同様にして縮約をとることができると認識できるだろう。

一般のテンソルは次のように書く。[*6]

$$|a_1\rangle |a_2\rangle \ldots |a_n\rangle \langle b_1| \langle b_2| \ldots \langle b_{n'}| \tag{1.17}$$

これは n 階反変 n' 階共変テンソルとなる。この場合の $|a_1\rangle$ と $\langle b_1|$ の間の縮約は次のような形に書かれることになる。

$$\langle b_1|a_1\rangle |a_2\rangle |a_3\rangle \ldots |a_n\rangle \langle b_2| \langle b_3| \ldots \langle b_{n'}| \tag{1.18}$$

このようにケットとブラの順番をみることによって、どこが縮約していて、どこが縮約していないのかを把握することができる。

また、$|\cdot\rangle\langle\cdot|$ のテンソル積についてさらに考えてみるとこれは、$\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ の線形変換であると考えられる。

[*6] あまりこのような状態ベクトルは見かけないが、考えることはできる。

第 2 章

N 準位系

2.1 $N(=2)$ 準位系

2.1.1 Stern=Gerlach の実験

2.1.2 二準位系の量子論再考

２準位系では系の

2.2 N 準位系

N 準位系における Born 則

N 準位系の k 準位で $\lambda_a(k) \in \mathbb{R}(a = 1, 2, \ldots, N-1)$ となる $N-1$ 個の物理量に対して、次を満たすようなものを取る。

$$\sum_{k=1}^{N} \lambda_a(k) = 0 \tag{2.1}$$

$$\sum_{k=1}^{N} \lambda_a(k)\lambda_{a'}(k) = N\delta_{aa'} \tag{2.2}$$

すると、k 番目の成分が 1 で、そのほかは 0 であるようなベクトル $\boldsymbol{e}_k$ を用いて、$\boldsymbol{\lambda}_a$ を、

$$\boldsymbol{\lambda}_a = \sum_{k=1}^{N} \lambda_a(k)\boldsymbol{e}_k \tag{2.3}$$

として表すことが出来る。$\boldsymbol{e}_k$ のようなよくわからない基底を使うのは単に記法の問題であって、ここに物理は（おそらく）ない。したがって、上記の要請した λ_a の性質から物理的に意味の見出せる基底を作り出すことをひとまずの目標にしよう。

まず、式（2.1）より、$\lambda_a\boldsymbol{e}_k$ と、$\sum_{k=1}^{N} \boldsymbol{e}_k$ のベクトルが直交する。この性質から、$\boldsymbol{e}'_N$ を、全成分が $1/\sqrt{N}$ であるようなベクトルとして定義しよう。このベクトルと任意の a の $\boldsymbol{\lambda}_a$ とは直交する。また、式（2.2）によって、$a \neq a'$ であるとき λ_aとλ'_a とは直交する。そして、これらのノルムとしては N となる。以上から次のような正規直交基底を作ることが出来る。

$$\boldsymbol{e}'_a = \begin{cases} \boldsymbol{\lambda}_a/\sqrt{N} & (a = 1, 2, 3, \ldots, N-1) \\ \sum_{k=1}^{N} \boldsymbol{e}_k/\sqrt{N} & (a = N) \end{cases} \tag{2.4}$$

これによって、物理的に意味のありそうな基底が得られた。$a = N$ の場合のものは物理的には思えないかもしれないが、k の状態が得られる確率 $p(k)$ は $\boldsymbol{p}$ をベクトルとして、

$$\boldsymbol{p} = \sum_{k=1}^{N} p(k)\boldsymbol{e}_k \tag{2.5}$$

という成分として表すことが出来、これと $\boldsymbol{e}'_N$ との内積を考えてみると、

$$\boldsymbol{p}.\boldsymbol{e}'_N = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=1}^{N} p(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \tag{2.6}$$

という N 個の準位の中に状態がある確率全体の和を $\sqrt{N}$ で割ったものが得られることとなる。

以上からまず、λ_a の期待値は、

$$\langle\lambda_a\rangle = \sum_{k=1}^{N} \lambda_a(k)p(k) = \boldsymbol{\lambda}_a.\boldsymbol{p} \tag{2.7}$$

と表せる。この結果から、

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{p} &= \sum_{a=1}^{N} \boldsymbol{e}_a(\boldsymbol{e}_a.\boldsymbol{p}) && (2.8)\\
&= \frac{1}{N}\left\{\sqrt{N}\boldsymbol{e}_a\left(\sqrt{N}\boldsymbol{e}_a.\boldsymbol{p}\right) + \sum_{a=1}^{N-1}\sqrt{N}\boldsymbol{e}_a\left(\sqrt{N}\boldsymbol{e}_a.\boldsymbol{p}\right)\right\} && (2.9)\\
&= \frac{1}{N}\left\{\sqrt{N}\boldsymbol{e}_a + \sum_{a=1}^{N-1}\boldsymbol{\lambda}_a(\boldsymbol{\lambda}_a.\boldsymbol{p})\right\} && (2.10)\\
&= \frac{1}{N}\left\{\sqrt{N}\boldsymbol{e}_a + \sum_{a=1}^{N-1}\boldsymbol{\lambda}_a\langle\lambda_a\rangle\right\} && (2.11)
\end{aligned}$$

となる。ここで、$\boldsymbol{e}_k$ 方向の成分を取り出すと、

$$p(k) = \frac{1}{N}\left\{1 + \sum_{a=1}^{N-1}\lambda_a(k)\langle\lambda_a\rangle\right\} \tag{2.12}$$

が得られることとなる。

第 3 章

摂動論

3.1　時間を含まない摂動論

3.1.1　縮退がない場合

3.1.2　縮退のある場合

3.2　時間を含む摂動論

3.2.1　相互作用表示

まず考える系の Hamiltonian が、

$$H = H_0 + V(t) \tag{3.1}$$

と書けると考える。ここに、H_0 についての固有値方程式

$$H_0 \left|\psi_n\right\rangle = E_n \left|\psi_n\right\rangle \tag{3.2}$$

は解けており、E_n は固有値、$\left|\psi_n\right\rangle$ は対応する固有状態であるとする。そして、V は H_0 に比べて小さいとする。さて、私たちは系の状態の時間の依存性を考えるにあたって二つの表示の仕方があることを知っている。それは Schrodinger-表示と Heisenberg-表示である。Schrodinger-表示では系の状態が時々刻々と移り変わっていくと考えるため、系の状態を決める方程式、Schrodinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left|\psi\right\rangle_{\mathrm{S}} = \hat{H} \left|\psi\right\rangle_{\mathrm{S}} \tag{3.3}$$

一方で Heisenberg-表示では系の状態が変わるのではなく、演算子が時間によって変わっていくと考えて、

$$i\hbar \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} = \left[\hat{O}, \hat{H}\right] \tag{3.4}$$

しかし、私たちが考えている Hamiltonian は解の知っている H_0 と V の和として考えているため、なんとかして表示の中で解の知っている H_0 と V とを分離させたいと考えられるだろう。だから次のような状態の新

たな表示を考えよう。

$$|\psi\rangle_{\mathrm{I}} := \exp\left(\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right)|\psi\rangle_{\mathrm{S}} \tag{3.5}$$

$$\hat{O}_{\mathrm{I}} := \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)\hat{O}_{\mathrm{S}}\exp\left(-\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) \tag{3.6}$$

この表示を相互作用表示もしくは Dirac 表示と呼ぶ。この表示の状態ケットの時間発展を考えてみると、

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_{\mathrm{I}} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)|\psi\rangle_{\mathrm{S}}\right) \\
&= -H_0\exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)|\psi\rangle_{\mathrm{S}} + i\hbar\exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_{\mathrm{S}} \\
&= -H_0\exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)|\psi\rangle_{\mathrm{S}} + \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)(H_0 + V(t))|\psi\rangle_{\mathrm{S}} \\
&= \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)V(t)_{\mathrm{S}}\exp\left(-\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right)|\psi\rangle_{\mathrm{S}} \\
&= V_{\mathrm{I}}|\psi\rangle_{\mathrm{I}}
\end{aligned}$$

一方で、演算子の時間発展の方を考えてみると、

$$\frac{\partial\hat{O}_{\mathrm{I}}}{\partial t} = -\frac{H_0}{i\hbar}\hat{O}_{\mathrm{I}} + \frac{\hat{O}_{\mathrm{I}}H_0}{i\hbar} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{O}_{\mathrm{I}}, H_0\right]$$

となる。まとめると、相互作用表示において状態ケットと演算子の時間発展は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_{\mathrm{I}} = V_{\mathrm{I}}|\psi\rangle_{\mathrm{I}} \tag{3.7}$$

$$i\hbar\frac{\partial\hat{O}_{\mathrm{I}}}{\partial t} = \left[\hat{O}_{\mathrm{I}}, H_0\right] \tag{3.8}$$

これと先の Schrodinger 方程式と Heisenberg 表示とを見比べると、ちょうど中間のような形になっていることが見える。この関係を次の表にまとめておく。

表 3.1　S-表示,I-表示,H-表示の時間依存性早見表

	S-表示	I-表示	H-表示
状態ケット	H	V	なし
演算子	なし	H_0	H

この表を見れば、演算子は書かれている交換子を考えればよく、状態ケットであれば書かれている演算子をケットにかけたものが $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ のかけられたものと等号で結ばれる。

さて、$|\psi\rangle_{\mathrm{I}}$ を H_0 の固有ケットで展開する。

$$|\psi\rangle_{\mathrm{I}} = \sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle \tag{3.9}$$

Hamiltonian が時間に応じて変化することから、各ケットの係数 c_n も時間に依るだろう。これを相互作用表示の式（3.7）に代入し、左から $\langle\psi_m|$ を代入して、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_n|\sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|V_{\mathrm{I}}\sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle \tag{3.10}$$

第 4 章

同種粒子の量子論

第 5 章

量子統計力学への道標

第 6 章

散乱問題