

「量子力学って神秘的でなんだか素敵だね。」そう言ってベッドにスマホを投げた貴女と縁を切った。

kohgasa

序文

量子力学というのは古典的概念から飛翔し、全く別の視点から対象を観察する学問である。つまるところ、学部程度の数学、解析力学、電磁気学等の理解を要するとはいうものの、物理をそれ程熱心にやってこなかった人も全く新しい学問を学ぶ、と割り切って進んでしまえばよいということである。この文書では、原理に従い量子力学の諸法則を構成しつつ^{*1}、物理的に重要な知見を得られる具体例を通して科学技術計算のための言語 *Julia* を用いた数値計算に入門していく^{*2}。一方、1 対 1 対応で *Python* を用いたスクリプトも別途記述するため、使用言語の気に食わぬ諸君はそのスクリプトを用い、または更に改良し、自らの環境で確かめてみるとよいだろう。

この文書の指針とするところは以下になる。

- 原理から理論を構成する
- 計算過程の省略はしない
- テンポよく進める

敷居は決して高くない。早速始めよう。

1 ここでいう原理とは、実験によりその正当性が保証されたものであり、数学でいうところの最も権威的な取り決めである公理とは意を異にすることに注意されたい。

2 あくまでも *Julia* による計算物理学の入門に力点が置かれていることに注意されたい。物理学徒に限っては、本書を用いて量子力学に入門するなど断じてあってはならないことである。

Contents

1. 量子力学の一般論	1
1.1. 重ね合わせの原理	1
1.1.1. Heisenberg の不確定性原理	1
1.1.2. 観測される値は実数である	2
1.1.3. 重ね合わせの原理	2
1.2. 状態及びオブザーバブル	2
1.2.1. test	2
1.3. 量子条件	2
1.3.1. test	2
2. プログラミング	3
2.1. 数値計算	3
2.1.1. 誤差	3
2.1.2. 積分法	3
2.1.3. 微分法	3
3. 量子系の運動	4
3.1. 1次元の問題	4
3.1.1. トンネル効果 - ポテンシャル障壁	4
3.1.2. 束縛状態 - 井戸型ポテンシャル	4

3.1.3. Kronig-Penny モデル - 周期的ポテンシャル	4
3.2. 中心力ポテンシャル内の問題	4
3.2.1. トンネル効果 - ポテンシャル障壁	4
3.2.2. 束縛状態 - 井戸型ポテンシャル	4
3.2.3. Kronig-Penny モデル - 周期的ポテンシャル	5
4. 角運動量の理論	6
5. 量子力学の対称性	7
6. 近似法	8
7. 多粒子系の理論	9
8. 散乱の理論	10
9. 量子電磁気学	11
10. 相対論的量子力学	12

Chapter 1

量子力学の一般論

量子力学を構成するに必要な原理をまず述べる。

1.1. 重ね合わせの原理

例えば、我々が原子の振る舞いを何らか人間の認識可能な形で表現したいとする。その際、我々はまず表現の対象である原子を観なくてはならない。つまり、何か物理的現象を考えようとした際、この観測という営みが必要不可欠なのである。では、観測をする際、具体的に我々は何をするだろうか。蓋し、対象に向けて何かをぶつけてみたり、対象を移動させてみたり、何らかの外的作用をその対象に及ぼす他ないであろう。では、この外的操作によって、その観測対象は一体どのくらいの影響を受けるのだろうか。我々が原子などから物質の構造を考えようとする際、その影響の尺度は絶対的な大きさとして評価されることが避けられない。そこで我々の観測におけるこの限界は物質の本性であると認め、決してその限界を超えることはできないと仮定する。その当然の帰結として観測の結果には不可避の不定さが生じる。この不定さの上で、定量的な量子力学の理論を構成するにあたって、いくつかの法則を必要とする。これらの法則の中で最も基本的でまた思い切ったものの一つが状態の重ね合わせの原理である。

1.1.1. Heisenberg の不確定性原理

始めに断っておくが、これは原理とは名のつくもののあくまでそれは慣習を踏襲したためであって、私が量子力学を構成するにあたって必要と述べた原理とは意を異にすることに注意されたい。これは冒頭で述べたように、物質の本性、つまり原理よりもさらなる根本に位置するいわば普遍の事実であると解釈されたい。以下 2 つのものがここで言う原理である。

さて量子力学の幕開けを Planck の量子仮説に見ることも多いが、真に決定的な幕開けは Einstein により説明の成された光電効果の実験に見出すべきであろう。これは振動数 ν の光は $h\nu$ のエネルギーを持つ粒子の集団のように振る舞うとい

うことを結論する．つまり，光は光子の集団であるということである．

1.1.2. 観測される値は実数である

test

1.1.3. 重ね合わせの原理

test

1.2. 状態及びオブザーバブル

test

1.2.1. test

test

1.3. 量子条件

test

1.3.1. test

test

Chapter 2

プログラミング

1 章では量子力学の一般原理を学んだ .3 章では , その運動法則に従い , 具体的な運動を調べていく . 特に 1 次元の場合は常微分方程式を解きその厳密解を求めることができる . しかし , 一度それが多次元に及ぶとその定式は偏微分方程式となり , 物理的にもその厳密解を求めることは不可能で , 後の章で述べるいくつかの近似法を用いる必要が生じる . 数値計算でまず問題となるのは厳密解の求められる 1 次元の場合である . ここで用いるいくつかの数値計算の手法をここで説明すると共に , 当文書で用いる主要言語である Julia での数値計算について概観する . よって , この章は前半で当文書で用いるいくつかの数値計算の手法についてその理論を説明し , 後半でプログラミング言語 Julia を用いた数値計算について概説するような形となっている . 数値計算の手法については , その紹介は断片的なものに過ぎず , 地味でありながらも科学技術の立派な一分野たるその理論に対して , 何ら学び取れる要素のないことに注意されたい .

2.1. 数値計算

test

2.1.1. 誤差

test

2.1.2. 積分法

test

2.1.3. 微分法

test

Chapter 3

量子系の運動

test

3.1. 1次元の問題

test

3.1.1. トンネル効果 - ポテンシャル障壁

test

3.1.2. 束縛状態 - 井戸型ポテンシャル

test

3.1.3. Kronig-Penny モデル - 周期的ポテンシャル

test

3.2. 中心力ポテンシャル内の問題

test

3.2.1. トンネル効果 - ポテンシャル障壁

test

3.2.2. 束縛状態 - 井戸型ポテンシャル

test

3.2.3. Kronig-Penny モデル - 周期的ポテンシャル

test

Chapter 4

角運動量の理論

test

Chapter 5

量子力学の対称性

test

Chapter 6

近似法

test

Chapter 7

多粒子系の理論

test

Chapter 8

散乱の理論

test

Chapter 9

量子電磁気学

test

Chapter 10

相对論的量子力学

test

References

- [1] 砂川 重信 . 量子力学 . 岩波書店 , 1991.