量子力学の基本原理

小桜 未来

2022 年 12 月 26 日

1　数学的記法による量子力学の基本原理

量子力学の基本原理は以下で与えられる。

1. 物理的状態はヒルベルト空間上の射線で表される。
2. 観測量はエルミート演算子で表現され、その固有値が観測量となる。
3. ある状態を取りうる確率は、その状態と全体の状態の内積の絶対値の二乗で与えられる。

量子力学の全ての法則は以上の基本原理から導かれる。以下にその説明を与える。

1.1　物理的状態

複素完備内積線形空間のことをヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ と言う。この空間は複素数で構成されており、完備性[*1]と線形性を持ち、内積が定義できる。ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の元を状態 Ψ と言う。ヒルベルト空間上の内積 (Φ, Ψ) はエルミート対称性

$$(\Phi, \Psi) = (\Psi, \Phi)^*$$

と第二変数に対する線形性

$$(\Phi, \xi_1\Psi_1 + \xi_2\Psi_2) = \xi_1(\Phi, \Psi_1) + \xi_2(\Phi, \Psi_2)$$

そして正定値性

$$(\Psi, \Psi) \geq 0$$

を満たす。
ここから直ちに第一変数に対する反線形性

$$(\eta_1\Phi_1 + \eta_2\Phi_2, \Psi) = \eta_1^*(\Phi_1, \Psi) + \eta_2^*(\Phi_2, \Psi)$$

が導かれる。
状態 Ψ が規格化

$$(\Psi, \Psi) = 1$$

されているとする。このとき、スカラー倍しか違わない状態ベクトルをまとめて射線 $\mathcal{R}$ と言う。つまり、射線はヒルベルト空間に属する集合であり、

$$\mathcal{R} \subset \mathcal{H}$$

[*1] 簡単に言えば、極限が取れて微分できるということである。

$|\xi| = 1$ を満たす ξ 倍しか違わない二つの状態ベクトル $\Psi, \xi\Psi$ は同じ射線に属する。

$$\forall\Psi \in \mathcal{R},\ \forall\xi \in \mathbb{C},\ |\xi| = 1 \Rightarrow \xi\Psi \in \mathcal{R}$$

1.2 観測量

エルミート演算子とは射線に属する状態ベクトルに作用する演算子

$$\Psi \to A\Psi$$

であり、線形性

$$A(\xi_1\Psi_1 + \xi_2\Psi_2) = \xi_1 A\Psi_1 + \xi_2 A\Psi_2$$

を満たし、実条件

$$A^\dagger = A$$

を満たす。ここで $A^\dagger$ のことを A のエルミート共役といい、

$$(\Phi, A^\dagger\Psi) = (A\Phi, \Psi)$$

で定義される。
この演算子に対して観測量は

$$A\Psi = \alpha\Psi$$

を満たす α である。
観測量は実でなくてはならないが、以上の定義から観測量は実である。

$$\begin{aligned}
(\Psi, A\Psi) &= (\Psi, \alpha\Psi) \\
&= \alpha(\Psi, \Psi) \\
(\Psi, A\Psi) &= (A^\dagger\Psi, \Psi) \\
&= (A\Psi, \Psi) \\
&= (\alpha\Psi, \Psi) \\
&= \alpha^*(\Psi, \Psi)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \alpha = \alpha^*$$

また、異なる固有値を持つ状態ベクトルは直交する。

$$\begin{aligned}
(\Psi_1, A\Psi_2) &= (\Psi_1, \alpha_2\Psi_2) \\
&= \alpha_2(\Psi_1, \Psi_2) \\
(\Psi_1, A\Psi_2) &= (A^\dagger\Psi_1, \Psi_2) \\
&= (A\Psi_1, \Psi_2) \\
&= (\alpha_1\Psi_1, \Psi_2) \\
&= \alpha_1^*(\Psi_1, \Psi_2) \\
&= \alpha_1(\Psi_1, \Psi_2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow (\alpha_1 - \alpha_2)(\Psi_1, \Psi_2) = 0 \\
&\Rightarrow (\Psi_1, \Psi_2) = \delta^{\alpha_1}_{\alpha_2}
\end{aligned}$$

1.3　確率

二つの状態ベクトルの内積の二乗は確率を与える。つまり、

$$\mathcal{R}_1 \cup \mathcal{R}_2 \cup \cdots = \mathcal{R}$$

のような互いに直交した状態 $\mathcal{R}_n$ のいずれかにあるとき、$\mathcal{R}$ のうち $\mathcal{R}_n$ であるような確率は $\Psi \in \mathcal{R}, \Psi_n \in \mathcal{R}_n$ とすると

$$P(\mathcal{R} \to \mathcal{R}_n) = |(\Psi_n, \Psi)|^2$$

のように表される。特に (Ψ_n, Ψ) を確率振幅という。これにより、波動関数 $\psi(x)$ は粒子が x に存在するという状態を表す状態ベクトル Φ_x を用いて (Φ_x, Ψ) と表すことができる。確率の和が 1 でなければならないという条件から、状態ベクトル Φ_n は完全系でなければならない。つまり、

$$\begin{aligned}
\Sigma_n P(\mathcal{R} \to \mathcal{R}_n) &= \Sigma_n |(\Psi_n, \Psi)|^2 \\
&= \Sigma_n (\Psi_n, \Psi)(\Psi_n, \Psi)^* \\
&= \Sigma_n (\Psi_n, \Psi)(\Psi, \Psi_n) \\
&= \Sigma_n (\Psi, \Psi_n(\Psi_n, \Psi)) \\
&= (\Psi, \Sigma_n \{\Psi_n(\Psi_n, \Psi)\}) \\
&= (\Psi, \Psi) \\
&= 1
\end{aligned}$$

である。ベクトルの組が完全系をなす性質のことを完全性という。

2　ブラケット記法による量子力学の基本原理

2.1　物理的状態

ヒルベルト空間を H とし、ヒルベルト空間上のベクトルを $|\psi\rangle$ と書き、ケットベクトルと呼ぶ。ヒルベルト空間 H から複素数体 $\mathbb{C}$ への線形汎関数を $\mathscr{L}(H, \mathbb{C})$ と書くことにすると、双対ヒルベルト空間は

$$H^* = \mathscr{L}(H, \mathbb{C})$$

と定義される。この双対ヒルベルト空間上のベクトルを $\langle\phi|$ と書き、ブラベクトルと呼ぶ。よって

$$\langle\phi| \, (\, |\psi\rangle \,)$$

は何らかの複素数になる。これを

$$\langle\phi|\psi\rangle$$

と書く。これを $|\phi\rangle$ と $|\psi\rangle$ の内積と言う。

2.2　観測量

数学的記法での基本原理より、

$$(\Phi, A\Psi) = (A\Phi, \Psi)$$

である。これをブラケット記法に直せば

$$\langle\phi|A\psi\rangle = \langle A\phi|\psi\rangle$$

となる。ここで

$$|A\psi\rangle = A\,|\psi\rangle$$

なので、これを代入して

$$\langle\phi|A|\psi\rangle = \langle A\phi|\psi\rangle$$

となる。よって、$\langle\phi|A\psi\rangle$ と $\langle A\phi|\psi\rangle$ をまとめて $\langle\phi|A|\psi\rangle$ と書ける。

2.3　確率

　数学的記法において

$$P(\mathcal{R}\to\mathcal{R}_n) = |(\Psi_n,\Psi)|^2$$

と書かれていたものは

$$P(\mathcal{R}\to\mathcal{R}_n) = |\,\langle\psi_n|\psi\rangle\,|^2$$

と書ける。$z\in\mathbb{C}$ に対して $|z|^2 = z^*z$ より、

$$P(\mathcal{R}\to\mathcal{R}_n) = \langle\psi|\psi_n\rangle\,\langle\psi_n|\psi\rangle$$

とも書ける。これにより、完全性の条件は

$$\Sigma_n\,|\psi_n\rangle\,\langle\psi_n| = 1$$

と書ける。