Quantum Mechanics

Toshiya Tanaka

2021 年 11 月 10 日

目次

第 1 章

量子力学の基礎原理

1.1　量子力学の法則

量子 (quantum) とは，とびとびの値を取るという意味である．歴史的に見れば，連続であってほしい量が，なぜか離散的にあらわれて不思議だということから名前が付けられたようだが，歴史的な流れでつけられた名前が本質を表している保証はないと思う．歴史的な流れは排除して，完成された理論として量子力学を理解するのが，見通しがよいと思う．

1.1.1　枠組み

量子力学の基本的な枠組みを列挙する．[i.]

1. 状態は内積の定義された複素線形空間の non zero の元である．
2. 物理量は状態空間の間の線形写像を与える．
3. 観測される値は，観測する物理量の固有値のいずれかになる．
4. 状態 $|\psi\rangle$ に対する物理量 A の測定により a_i という値を観測する確率は，$|\langle a_i|\psi\rangle|^2$ である．
5. 系に対する観測以外の操作は（反）unitary 変換で指定される．
6. 系 1 と系 2 の状態空間が $\mathcal{H}_1$,$\mathcal{H}_2$ のとき，合成系の状態空間は $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ である．

以下で，各法則に関する説明を行う．

状態は内積の定義された複素線形空間の non zero の元である．

ある状態があって，それに $|\psi\rangle$ と名前を付ける．可能な状態は $|\psi\rangle$，$|\phi\rangle$，... とあるとすると，これらをすべて集めた集合 $\mathcal{H} \coloneqq \{|\psi\rangle, |\phi\rangle, \ldots\}$ を状態空間[ii.]と呼ぶ．$\mathcal{H}$ には状態の重ね合わせという演算 $+$ が入っており，任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}, c_1, c_2 \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ に対して $|\chi\rangle = c_1 |\psi\rangle + c_2 |\phi\rangle$ も $\mathcal{H}$ の元である．これを数学的には $\mathcal{H}$ は線形空間であるということで，物理的には重ね合わせの原理[iii.]という．

また，$\mathcal{H}$ の構造としては，更に内積 $(\bullet, \bullet) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ が定義[iv.]されており，これを $\langle\psi|\phi\rangle \coloneqq (|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ と書く．[v.]

物理量は状態空間の間の線形写像を与える．

位置や運動量などの物理量の観測は（可観測量，Observable）は線形写像 $A\colon \mathcal{H} \to \mathcal{H},\ |\psi\rangle \ \mapsto A|\psi\rangle$ を与える．これは物理では演算子，数学では作用素という．特に self adjoint のクラスに属するものが，物理量に対応する．

---

i. 1 から 4 の意味を理解するよい実験として Stern Gerlach の実験がある．

ii. （完備な）内積空間を Hilbert 空間というので，$\mathcal{H}$ と書く．ただし，量子力学の状態空間とは微妙な違いがあり，正定値でない内積が出てきたり，そもそも位置の固有状態が Hilbert 空間の元でないことなどがあるので，Hilbert 空間とは言わないようにしている．

iii. 量子力学は粒子と波の二重性があるといわれることが多いが，粒子は粒子だと思う．粒子がとる物理量に揺らぎがあり，それらの情報に線形性があるというだけな気がする．実際，基礎方程式の Schrödinger 方程式は波動方程式ではない．i.e., 時間については一階微分である．

iv. 数学では $(\psi, c\phi) = c^*(\psi, \phi)$ と後ろを共役線形に定義するが，物理では $(c\psi, \phi) = c^*(\psi, \phi)$ と前を共役線形にすることが多い．本稿では後者の定義を用いる．

v. ここで，$\langle\psi|$ は $|\psi\rangle$ の双対ベクトルである．このように書けるのは，Riesz の表現定理により，$f(|\phi\rangle) \in \mathbb{C}$ なる線形汎関数 f と，$(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ なる $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ の間に one-to-one の関係があることが保証されるからである．

観測される値は，観測する物理量の固有値のいずれかになる．

物理量 A に対し，$A\left|a_i\right\rangle = a_i\left|a_i\right\rangle$ なる関係を持たす $\left|a_i\right\rangle \in \mathcal{H}$ と $a_i \in \mathbb{C}$ があり，それぞれ固有状態 (eigenstate)，固有値 (eigenvalue) という．線形写像が self adjoint ならば，eigenstate により完全系を構成することが出来る．i.e., 任意の状態が eigenstate により

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_i c_i \left|a_i\right\rangle \quad ; \quad c_i \in \mathbb{C} \tag{1.1.1}$$

なる分解ができる．状態 $\left|\psi\right\rangle \in \mathcal{H}$ に対し，物理量 A を測定したときに，得られる値は a_i のいずれかとなる．これが観測量が離散的になりうる理由である．

状態 $\left|\psi\right\rangle$ に対する物理量 A の測定により a_i という値を観測する確率は，$\left|\left\langle a_i|\psi\right\rangle\right|^2$ である．

観測値は物理量の固有値のどれかを取るが，どれを取るかのルールがある．状態 $\left|\psi\right\rangle = \sum c_i \left|a_i\right\rangle$ の状態で，物理量 A を測定すると， 確率 $\left|\left\langle a_i|\psi\right\rangle\right|^2 = |c_i|^2$ で固有値 a_i を得る．また，測定後の状態は $\left|a_i\right\rangle$ になる．

系に対する観測以外の操作は（反）unitary 変換で指定される．

系に対する時間発展，回転，平行移動などの操作は unitary 変換が指定する．ただし，時間反転は反 unitary 変換である．Heimitian operator A があって，$\exp(iA)$ は unitary 変換である．すなわち，物理量に対応した系の操作があるということで，これが古典力学で保存量が微小変換の生成子になっていることと対応していることをのちに見る．

系 1 と系 2 の状態空間が $\mathcal{H}_1$,$\mathcal{H}_2$ のとき，合成系の状態空間は $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ である．

$\mathcal{H}_1 = \mathrm{Span}\{\left|a_i\right\rangle\}$，$\mathcal{H}_2 = \mathrm{Span}\{\left|b_j\right\rangle\}$ としたとき，合成系の状態空間は $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ である．合成系の基底は $\left|a_i\right\rangle \otimes \left|b_j\right\rangle$ たちである．

1.2 内積記法と bra-ket notation について

この Section では，内積記法と bra-ket notation は同じようで強調点が少し違う[vi.]ということについて述べる．

1.2.1 内積による定義

Definition 1.2.1 (内積)

$\mathcal{H}$ を線形空間とする．任意の $\psi, \phi \in \mathcal{H}$ に対して，演算 $\langle\bullet,\bullet\rangle\colon \mathcal{H}\times\mathcal{H} \to \mathbb{C}$ が定まり[vii.]，次を満たすもの[viii.]を内積という．

$\psi, \psi_1, \psi_2, \phi, \phi_1, \phi_2 \in \mathcal{H}$，$c \in \mathbb{C}$ に対して

$$\langle\phi, \psi_1 + \psi_2\rangle = \langle\phi,\psi_1\rangle + \langle\phi,\psi_2\rangle \tag{1.2.1}$$
$$\langle\phi_1 + \phi_2, \psi\rangle = \langle\phi_1,\psi\rangle + \langle\phi_2,\psi\rangle \tag{1.2.2}$$
$$\langle\phi, c\psi\rangle = c\langle\phi,\psi\rangle \tag{1.2.3}$$
$$\langle c\phi, \psi\rangle = c^*\langle\phi,\psi\rangle \tag{1.2.4}$$
$$\langle\phi,\psi\rangle = \langle\psi,\phi\rangle^* \tag{1.2.5}$$

が成り立つ．

内積の定まった線形空間を内積空間という．

---

vi. この topic の元ネタは http://kir018304.kir.jp/nc/htdocs/?action=common_download_main&upload_id=99 にある pdf.

vii. $\langle\mathrm{hoge},\mathrm{hoge}\rangle$ は不等号 $<\mathrm{hoge},\mathrm{hoge}>$ ではなく langle,rangle で挟みましょう．

viii. 数学と物理では若干流儀が違って，数学では前の後ろのスロットに対して反線形に定義するのがスタンダードだと思う．また $*$ は複素共役のこと．数学で複素共役は $^-$ を使うことが多いと思う．

数学的には量子力学は Hilbert 空間上 (完備な内積空間) で作用素を考えるなどであるので，内積で与えるのが自然らしい．

Definition 1.2.2 (内積流の Hermitian conjugate)
任意の (Hermitian でなくてもよい) 演算子 A に対し，$\langle B\phi, \psi\rangle = \langle \phi, A\psi\rangle$ なる演算子 B を A の Hermitian conjugate といい，$A^\dagger \coloneqq B$ と定める．

1.2.2 bra-ket による定義

内積記法は同じ集合 $\mathcal{H}$ から取った二つの元に注目するが，bra-ket notation は $\mathcal{H}$ とその dual に対し注目する．

Definition 1.2.3 (bra-ket 流の Hermitian conjugate)
写像 $\dagger$ を

$$\begin{tikzcd} \dagger\colon \mathcal{H} \arrow[r] & \mathcal{H}^* \\ \rotatebox{90}{$\in$} & \rotatebox{90}{$\in$} \\ \lvert\psi\rangle \arrow[r, mapsto] & \langle\psi\rvert \end{tikzcd}$$

で定義する．

お絵かきタイム
図式で書くと，

$$\begin{tikzcd} & \mathbb{C} \ni \langle\phi\rvert A \lvert\psi\rangle \\ \mathcal{H}^* \ni \langle\phi\rvert \circ A & \\ \mathcal{H} \arrow[r, "A"] \arrow[uur] & \mathcal{H} \arrow[uu, "\langle\phi\rvert \in \mathcal{H}^*"'] \\ \rotatebox{90}{$\in$} & \rotatebox{90}{$\in$} \\ \lvert\psi\rangle \arrow[r, mapsto] & A\lvert\psi\rangle \end{tikzcd}$$

のようになる．双対のほうに注目すると

$$\begin{tikzcd} \mathcal{H}^* & \mathcal{H}^* \arrow[l, "\overleftarrow{A}"'] \\ \rotatebox{90}{$\in$} & \rotatebox{90}{$\in$} \\ \langle\phi\rvert \overleftarrow{A} & \langle\phi\rvert \arrow[l, mapsto] \end{tikzcd}$$

のようになる．$\overleftarrow{A}$ は A が $\langle\phi\rvert$ に右からかかっているということを強調する意味である．

すなわち，$\langle\phi\rvert A \lvert\psi\rangle$ は A が Hermitian かどうかにかかわらず，誤解なしにこのように書け，演算子 A が左右どちらにかかっているとみてもよい．

誤解を招きやすいがよく用いられる記法として $\langle\phi|A\psi\rangle$ という記法がある[ix]．これは bra-ket に似せているが，双対構造が反映されない内積記法である[x]．これらの記法間の関係は

$$\begin{aligned} \langle\phi\rvert A \lvert\psi\rangle = (\lvert\phi\rangle)^\dagger A \lvert\psi\rangle &= \langle\phi|A\psi\rangle = \langle\phi, A\psi\rangle && (1.2.6) \\ &= \left\langle A^\dagger\phi \middle| \psi\right\rangle = \langle A^\dagger\psi, \psi\rangle && (1.2.7) \\ &= \left(A^\dagger \lvert\phi\rangle\right)^\dagger \lvert\psi\rangle && (1.2.8) \end{aligned}$$

である．

---

ix. Konishi Paffuti の本もこの記法が用いられている．有名な和書では岩波の現代物理学の基礎で用いられており，誤解されていることがネタ pdf で言及されている．

x. ので，私は折衷記法は使わない方がよいと思う．

1.3 波動力学

1.3.1 基底による表示

状態 $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ は位置の固有状態の線形結合として

$$|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x' \, |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \tag{1.3.1}$$

と展開できる．この展開係数 $\psi(x,t) \coloneqq \langle x'|\alpha\rangle$ を波動関数という．

この位置のように，任意の状態を線形結合により表せる物理量には例えば運動量 P がある．運動量の固有状態の組を $\{|p\rangle\}$ とする．すなわち，$P\,|p\rangle = p\,|p\rangle$．これを位置基底により表現すると

$$\langle x|\, P\,|p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle = p\,\langle x|p\rangle \tag{1.3.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle = \frac{ip}{\hbar}\langle x|p\rangle \tag{1.3.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi_p(x,t) = \frac{ip}{\hbar}\psi_p(x,t) \tag{1.3.4}$$

の微分方程式を満たすことが分かる．複素定数 N としてこの解を

$$\psi_p(x,t) = N\exp\left(\frac{ip}{\hbar}x\right) \tag{1.3.5}$$

とかく．この定数は $|x\rangle$ の規格化によって決定できて，

$$\langle x'|x\rangle = \int \mathrm{d}p \, \langle x'|p\rangle \langle p|x\rangle \tag{1.3.6}$$

$$= \int \mathrm{d}p|N|^2\exp\left(\frac{ip(x-x')}{\hbar}\right) \tag{1.3.7}$$

$$= \delta(x-x') \tag{1.3.8}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p\exp\left(\frac{ip(x-x')}{\hbar}\right) \tag{1.3.9}$$

となる．(1.3.9) では Dirac delta の Fourier 変換を使った．ここで，(1.3.7) と (1.3.9) を比較すると

$$|N| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tag{1.3.10}$$

として決定できる．結局

$$\psi_p(x,t) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \tag{1.3.11}$$

となる．また，この Hermitian conjugate をとると

$$\phi_x(p) \coloneqq \langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \tag{1.3.12}$$

また，これらより，任意の状態 $|\alpha\rangle$ に対して

$$\psi_\alpha(x,t) = \langle x|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}p \, \langle x|p\rangle \langle p|\alpha\rangle \tag{1.3.13}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\phi_\alpha(p,t)\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \tag{1.3.14}$$

および，

$$\phi_\alpha(p,t) = \langle p|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x \, \langle p|x\rangle \langle x|\alpha\rangle \tag{1.3.15}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}x\psi_\alpha(x,t)\exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) \tag{1.3.16}$$

[KP09]

第 2 章

可解系の計算

2.1　1 次元量子系

2.1.1　自由粒子

一次元自由粒子の Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{2.1.1}$$

である．変形して，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad ; \quad k \coloneqq \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \tag{2.1.2}$$

である．この一般解は任意定数 $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$ または $A \in \mathbb{C}, \delta \in \mathbb{R}$ を用いて

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} = A\sin\left(kx + \delta\right) \tag{2.1.3}$$

と書ける．[i.]

これは，無限に高い井戸型ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq L) \\ \infty & (x \leq 0,\ L \leq x) \end{cases} \tag{2.1.4}$$

で規格化したのち，井戸の幅を無限大にするというのが一つの方法である．[ii.] この方法を用いるとき，ナイーブな差異として境界条件の取り方があるが，意外と面白いので紹介する．

Dirichlet 型境界条件

まず，一番簡単なのは「境界で波動関数がゼロ」i.e.,$\psi(0) = \psi(L) = 0$ とすることである．これを Dirichlet 型境界条件[iii.] という．このとき，Eq(2.1.3) の sine の解を採用すると簡単で，

$$A\sin\delta = A\sin(kL + \delta) = 0 \tag{2.1.5}$$

なので，$\delta = 0,\ kL = n\pi\ (n \in \mathbb{Z}_{>0})$ となる．一つの固有状態を規格化しておくと，

$$\int_0^L \mathrm{d}x |A|^2 \sin^2(kx) = 1 \tag{2.1.6}$$

---

i. 以前 https://www.mns.kyutech.ac.jp/~okamoto/education/quantum/quantum-1dim100802.pdf を参照して，自由粒子では重ね合わせの状態は取らないなど議論していたが，それは誤りであると栗本先生から指摘を受けた．私が誤っていた点は，演算子が可換ならば同時固有状態を取ることが出来るが，すべての状態が同時固有状態なわけでないということ．固有状態の線形結合は一般に固有状態でないからそれは当たり前．

ii. もう一つ，Dirac delta を使う規格化がある．

iii. これは PDE の言葉だろうか？例えば Laplacian は Hermitian であってほしいわけだが，そうであるためには表面項が消える必要があって，その時に Derichlet を入れたりする．他に，微分が境界で消える Neumann であったりこの後の PBC も表面項を消す境界条件になっていたりする．

の条件から，$|A| = \sqrt{2/L}$ と決まり，固有関数は

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}_{>0} \tag{2.1.7}$$

となる．

ところで，これは何の固有状態であるかというと，エネルギーの固有状態である．エネルギー,i.e., Hamiltonian, の構成上，これは運動量の固有状態になっていてほしいが，そうはなっていない.[iv.] 実際,

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = -i\hbar\sqrt{\frac{2}{L}}\frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{2.1.8}$$

と sine が cosine になっており，固有関数でない．Hamiltonian では二回微分することで sine が sine に戻っていた.

2 状態 ψ, ϕ を考えると，

$$\begin{aligned}
(\phi, P\psi) &= \int_0^L \mathrm{d}x \phi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)f(x) &(2.1.9)\\
&= \left[\frac{\partial}{\partial x}\phi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\right]_0^L + \int_0^L \mathrm{d}x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)\right)^*\psi(x) &(2.1.10)\\
&= (P\phi, \psi) &(2.1.11)
\end{aligned}$$

となる．これは，運動量は Hermitian ということ．ところが，P と $P^\dagger$[v.] の定義域を見てみると，$\mathrm{dom}P = \{\psi\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C} \mid \psi(0) = \psi(L) = 0\}$ なのに対し，$\mathrm{dom}P^\dagger = \{\phi\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C} \mid$ 特に制限なし $\}$ である.[vi.]

すなわち Dirichlet 境界条件の下で運動量演算子が Hermitian だが self adjoint でない[vii.] ということである.[viii.]

周期的境界条件

別の境界条件の取り方として，周期的境界条件 (Periodic boundary condition; PBC)$\psi(x) = \psi(x+L)$ がある．Eq(2.1.3) で exponential のほうを使うと $kL = 2n\pi(n \in \mathbb{Z}_{\geq 0})$ となる．先ほどと違い等号がつくのは，exponential では引数が 0 でも null state にならないから．また，ground state 以外では縮退していて，固有状態を全て別々に扱うことにすると，負の整数も許して勘定することが出来る．すなわち固有状態 $\langle \ldots, e^{2i\pi x/L\cdot(-1)}, 1, e^{2i\pi x/L\cdot 1}, \ldots\rangle$ たちが全状態空間を張るということ．具体的な規格化などは次にやる．

この境界条件の下では上に列挙したエネルギー固有状態たちは運動量の同次固有状態になり，運動量はちゃんと self adjoint である．

Twisted boundary condition

もう少し変な境界条件の取り方もできて，量子力学の基本的要請から phase の違いは同一視できるので「一周して同じ状態」という境界条件を PBC より一般に $\psi(x+L) = e^{i\theta}\psi(x)$ といれることが出来る．これを twisted boundary condition という．

境界条件より，

$$kL = \theta + 2\pi n \quad n \in \mathbb{Z} \tag{2.1.12}$$

となる.，正負をまとめることで k および n は負の値も取ることに注意.

k の定義から，エネルギー固有値は

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(\theta + 2\pi n)^2 \tag{2.1.13}$$

---

iv. このことは谷村先生に 2021 年 03 月 02 日の集中講義で質問し答えていただいた.

v. 関数 f, g と演算子 A があって，内積を $(f, Ag) = (Bf, g)$ とする演算子 B をもって $A^\dagger \coloneqq B$ と定め，A の Hermitian conjugate という.

vi. これは部分積分した第一項を見れば，ψ の条件で表面項が消えてくれるので ϕ に制限を書ける必要がないことが分かる.

vii. 最近 https://arxiv.org/abs/quant-ph/0103153 が話題になっていた気がする.

viii. Hermitian とは $P = P^\dagger$ のことで, self adjoint はそれに加え両者の定義域が一致していることまで要求する．self adjoint operator は Hermitian operator より狭いクラスということ．self adjoint $\subset$ Hermitian みたいな感じ．物理量は self adjoint のクラス.

となり，固有状態は

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(i \frac{\theta + 2\pi n}{L} x \right) \tag{2.1.14}$$

となる．

ここで，

- $\theta = 0$ のとき，i.e., 通常の PBC のとき，

  $$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} n^2 \tag{2.1.15}$$

  となる．spectrum は $n \neq 0$ のとき正負の組で二重に縮退するが，ground state は縮退しない．
- $\theta = \pi$ のとき，

  $$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \tag{2.1.16}$$

  で，すべての $n \in \mathbb{Z}$ において縮退する．
- $\theta \neq 0, \pi$ のとき，すべての $n \in \mathbb{Z}$ において縮退しない．

さて，θ の制限を外して，$\theta : 0 \to 2\pi$ に連続的に（断熱的に）動かすことを考える．すると，$|n\rangle$ だった状態が $\theta = 2\pi$ をまたいだ瞬間 $|n+1\rangle$ に移ってしまう．[ix.] これは spectral flow と呼ばれるらしく，非常に面白い．

[ix.] これは境界を同一視した，i.e., 一次元円周 S^1 の topology を持たせた，ことで空間が単連結でなくなったことによるらしい．

参考文献

[KP09] K. Konishi and G. Paffuti, *Quantum mechanics : a new introduction*, Oxford University Press, 2009. https://ci.nii.ac.jp/ncid/BA89868434.