愛媛大学向け 集中講義　2021.9.6-10（水-金）

by 谷村省吾（名古屋大学 情報学研究科）

現代の量子論（科目名：量子物理学）

第1部　量子力学の数学的基礎

1. 力学の構文
   古典力学・量子力学・熱力学・統計力学にも共通のことばづかい.
   古典と量子の違い.

2. 測度論・積分論・確率論
   リーマン積分とルベーグ積分
   累積確率と確率密度
   ラドン・ニコディム微分

3. ヒルベルト空間
   ベクトル空間・ノルム空間・バナッハ空間・ヒルベルト空間
   コーシー・シュワルツの不等式
   リースの表現定理

4. 線形演算子
   演算子の domain, ノルム,
   有界演算子
   演算子の共役
   射影演算子
   エルミート演算子
   自己共役演算子
   ユニタリ演算子
   等長埋め込み

5. 自己共役演算子のスペクトル分解定理

力学とは

- 系 (system) … ひとまとまりの注目している対象。1個の粒子である必要はない。多数の・多種類の粒子からなるシステムもある。電場と磁場も1つのシステムとみなせる。
- 状態 (state)
- 物理量 (observable)
- 値 (value)
- 運動・変換 (dynamics, transformation)

の五者のありようと関係を記述する理論だ
この面に関しては古典力学・量子力学・熱力学・統計力学・場の理論も共通。

$\boxed{系}$ → 外界・環境
エネルギーや物質のやりとりがあってもよい
なければ閉じた系・孤立系
閉鎖系ともいう。

「Aという系が
Bという状態のとき
Cという物理量が
Dという値をとる」

というのが力学の構文。

~~150~~ 144g
~~100~~ gのボールが
時速120kmで飛んでいるとき
運動エネルギーは ~~80J~~
80J である。

古典力学の命題

1モルの気体が
20℃、1気圧のとき
体積は
24リットルである

熱力学の命題

状態変化
transformation
→ エネルギーを100J の ~~仕事を~~ 与えれば
(2原子分子気体で定圧変化する)
温度は3.4℃上がる

ランプ
ナトリウム原子から出た1つの光子のエネルギーは2.1eVである。

系＝光子　量子力学
状態＝ナトリウム原子のD状態遷移に伴って放出された
物理量＝エネルギー

$$E=\frac{1}{2}mv^2$$
$$=\frac{1}{2}\times \cancel{100}\,150\,g\times\left(120\,km/h\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\times \cancel{0.1}\,150\times10^{-3}\,kg\times\left(\frac{120\times10^3\,m}{3.6\times10^3\,s}\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\times \cancel{10}\,15\times10^{-2}\,kg\times\left(\frac{1}{3}\times10^2\,m/s\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\times \cancel{10}\,15\times10^{-2}\times\frac{1}{9}\times10^4\,kg\,m^2/s^2$$
$$=\frac{15}{18}\times10^{2}\,J$$
$$=\cancel{\frac{100}{18}\times10^2\,J}$$
$$=\frac{5}{6}\times10^{2}\,J$$
$$\fallingdotseq 0.833\ldots\times10^2\,J$$
$$=83\,J$$

$$E=\frac{1}{2}mv^2$$
$$=\frac{1}{2}\times144\,g\times\left(120\,km/h\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\times144\times10^{-3}\,kg\times\left(\frac{120\times10^3\,m}{3600\,s}\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\times144\times10^{-3}\,kg\times\left(\frac{12}{36}\times10^2\,m/s\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\times144\times10^{-3}\,kg\times\left(\frac{1}{3}\times10^2\,m/s\right)^2$$
$$=\frac{1}{2}\times144\times\frac{1}{9}\times10^{-3+4}\,kg\,m^2/s^2$$
$$=\frac{12\times12}{2\times3\times3}\times10^{+1}\,J$$
$$\fallingdotseq\frac{4\times4}{2}\times10^{+1}\,J$$
$$\fallingdotseq 8\times10\,J$$
$$\fallingdotseq 80\,J$$

物理量と値の概念を分節しよう!

物理量に対する要請 : 代数をなす

~~和~~ スカラー倍, ~~和~~(実数倍)　$M\to 2M, 3M, (-4)\cdot M$

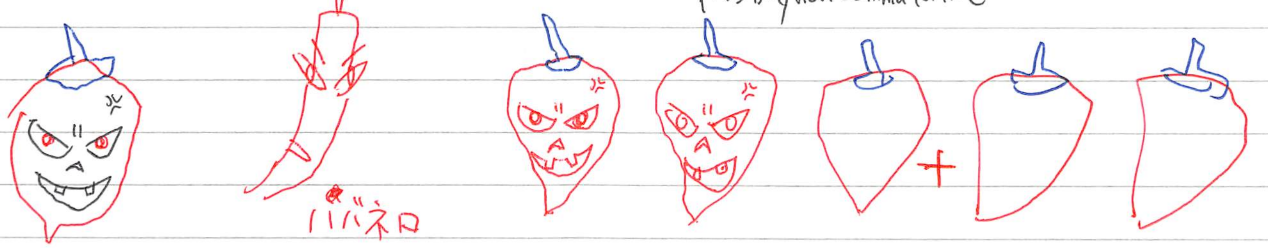
同質な量の和　M_1+M_2　L_1+L_2

同質・異質を問わず積　$S=\frac{1}{2}a\cdot b$

物理量代数 observable algebra　$F=P\cdot S$　$p=mv$

vector space
associative
(狭義の)
和が意味をなさないものは物理量とは言わない. distributive product
possibly non commutative

$E=\frac{1}{2}mv^2+\cancel{\frac{1}{2}}mg\cancel{l}x+\frac{1}{2}kx^2$



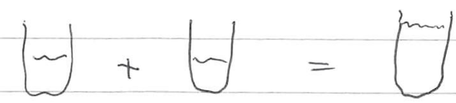
3辛 + 2辛 = 5辛 ?

温度は物理量か?

系と状態が定まれば温度の値が定まる. という意味では物理量。

しかし, 系の合併が ~~物理量~~ 温度の和をただちには与えない

~~dQ~~ 100 K + 200 K = 300 K ?



という意味で, 温度は物理量代数の元ではない。

ポテンシャル(位置エネルギー)やベクトルポテンシャルは物理量か?

差や微分だけが物理的に計測可能.

絶対的な値は物理的に決められない.

値の原点に不定性がある.

observable とは言わないのが普通.

力学 力学相違
古典と量子の~~共通~~点

1. マクロ と ミクロ

ヒューマンサイズ ¦ 分子 原・原子・原子核・素粒子レベル

明確な境界があるわけではない。

量子力学を特徴付ける定数は Plack定数

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \ \mathrm{J \cdot s}$$

(エネルギー)×(時間) = (作用積分) の次元

であって長さの□>次元ではない。
「…よりも大きければ古典力学」とは言えない。

長さ的寸法が大きくても量子的な現象は出現しうる…
巨視的量子効果 超伝導
超流動 BEC
ジョセフソン素子
磁束の重ね合わせ状態
スクイーズド光
エンタングルメント
BEC
⋮

2.

古典と量子の相違点

2、 決定論と確率論 … これも微妙ですが…

同一の系 A
同一の状態 B
同一の物理量 C
を測っても 値は D_1, D_2, D_3 … いろいろな値が出てくることがある。

$C \xrightarrow{B} D_1$ D_1の出現確率 = 相対頻度 = $\frac{N_1}{N} = p_1$

$C \xrightarrow{B} D_2$ D_2 〃 $= \frac{N_2}{N} = p_2$

$C \xrightarrow{B} D_3$ ⋮

$C \xrightarrow{B} D_1$

$C \xrightarrow{B} D_3$

$C \xrightarrow{B} D_1$

⋮

量子力学は 確率 $(p_1, p_2, p_3 \cdots)$ を予測する。

古典力学では

$C_1 \xrightarrow{B} D_1$ 物理量 C_1を測れば 値D_1を 確実に得る。

$C_2 \xrightarrow{B} D_2$ C_2 〃 D_2 〃

$C_3 \xrightarrow{B} D_3$ C_3 〃 D_3 〃

とも言える。

つまり $B(C_i) = D_i$ 状態は物理量をinputすれば値をoutputする関数(写像)だといえる。

Cをinput Dがoutput

物理量 $\xrightarrow{\text{状態}}$ 値の対応が { 古典論は決定的 / 量子論は確率的

　　　　　　　状態（物理量）＝値
古典力学では　$B(C) \simeq D$　を ~~扱う~~ 扱う

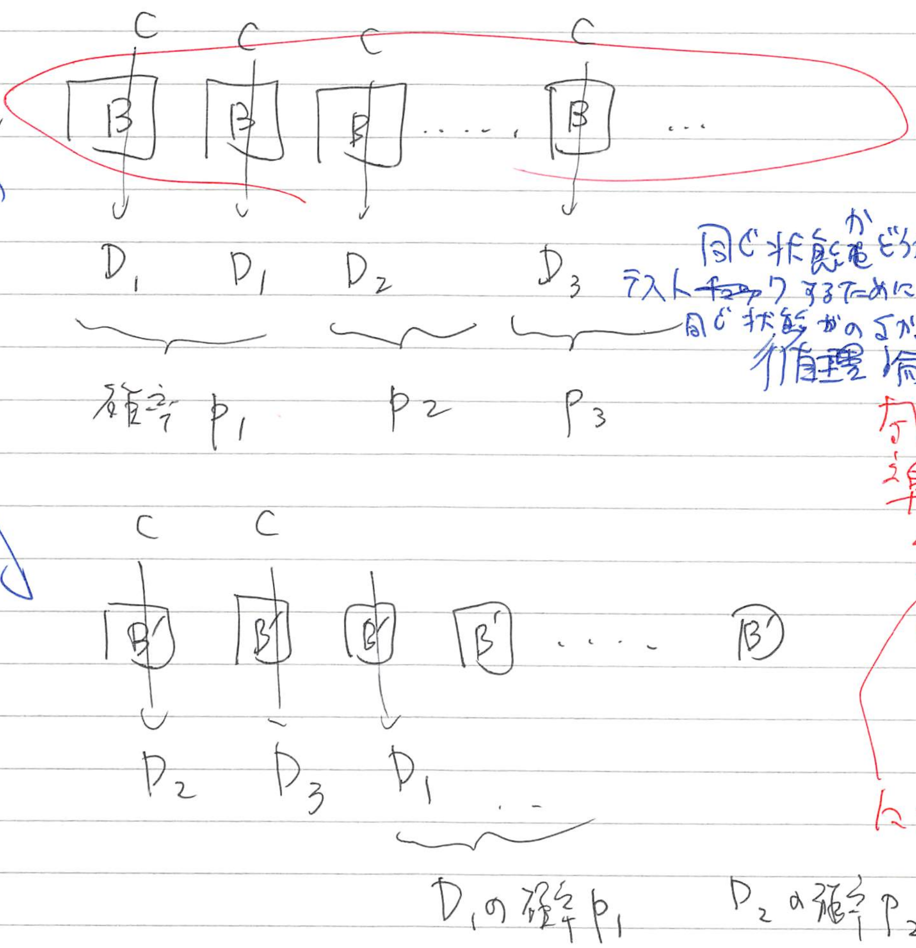
　　　　　　　確率
量子力学では　$P(B:C \to D)$　状態Bにおいて Cを測って値Dを得る確率
を記述・予測する

量子力学では
状態 B と B' が $\boxed{\text{同じ状態}}$ であることを

$$\forall C,\ \forall D \text{ について } P(B:C\to D) = P(B':C\to D)$$

で定める。

多数のサンプル



これらが同じ状態Bであることをどうやって保証するのか？

同じ状態かどうかテスト ~~チェック~~ するために同じ状態が のが必要だった？
循環論法になっていないか？

同じやり方で準備された系は ~~状態~~ 同じ状態になっているだろうと仮定することがあり。

について確率分布が収束するが

古典と量子の相違点

3. 連続と離散

物理量Cを測って値Dを得る.

例. エネルギーの値

速度

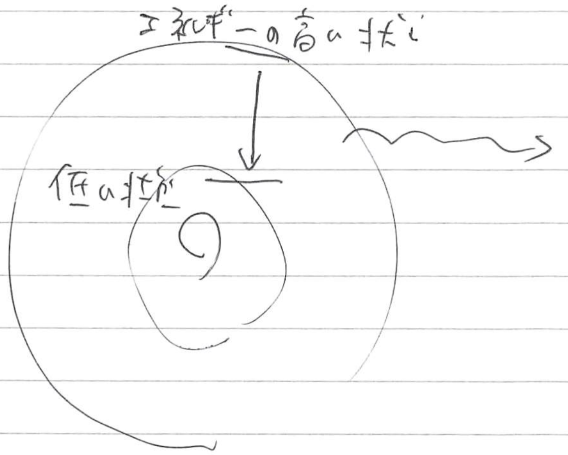
ボールの速度　0, 0.1 m/s, 0.2 m/s, … 0.314 m/s

連続的にどんな実数値もとりうる.

アナログ.

例. 原子のエネルギー　とびとび

原子のエネルギーは連続的に変化できない.



$$E_2 - E_1 = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

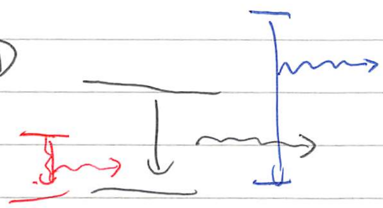
決まった周波数ν, 波長のλの光.

ナトリウム原子なら　エネルギー差 = 2.1 eV

黄色い光

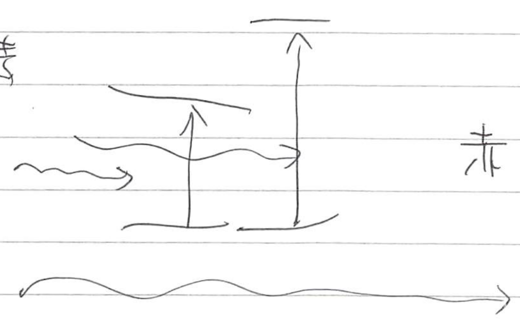
（ナトリウムランプの色（最近見なくなる, それ…）
なべのふきこぼれで見える色.

LED



エネルギー差で決まった波長・色の光.

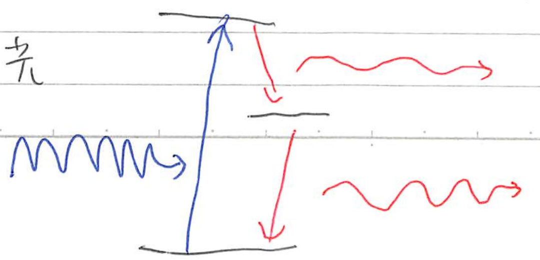
葉緑素



赤や青の光はよく吸収する

緑色体は素通り

蛍光



物質にはなぜ特定の色があるのか？
というのも量子力学の問題.

相違点4. 可換と非可換

a) ~~観~~測定における非可換性
量子論では特に

物理量
$C_1 \to C_2 \to C_3$ の順に測るのと
値 D_1 を得て 値 D_2 を得る D_3 を得る

C_2, C_3 の順に測って D_2, D_3 が得られた部分

$C_1 \to C_3 \to C_2'$ の順で測る
D_1 をえる D_3' D_2' をえる.

≠ 等しいとは限らない.

C_3, C_2 の順に測って D_2', D_3 が得られる

~~等しくても~~
等しくても
等しいとは限らない
等しいとは限らない

b) 積演算における非可換性.

$$x \cdot p_x \neq p_x \cdot x$$

$$C_1 C_2 \neq C_2 C_1$$

→ 干渉効果 ~~弱値~~
量子消去
遅延選択

論理的に先行している

~~確率~~

これが量子論の最大の特徴であり ~~これまで~~ 量子と古典の差違を生んでいる.

$\boxed{\text{積演算の非可換性}}$

→ 測定における非可換性… 弱値
→ 不確定性関係, 確率論の役割
余接る やむない
→ 物理量の値の非実在性
文脈依存性
Bell の不等式の破れ
Kochen-Specker の定理
→ 論理の分配律の破れ
量子論理やむない

可換な場合 → 古典力学.

積分論

リーマン (Riemann) 積分 … 横割(よこわり)

ルベーグ (Lebesgue) 積分 … 縦割(たてわり)

テストの合計点 (平均点) や 平均身長・平均体重・平均年収
をもとめようと思ったら…

1. メンバーに通し番号をつけて、順に足す.

$$S = \overset{\text{1番の人の得点}}{\downarrow} y_1 + \overset{\text{2番の人}}{\downarrow} y_2 + \overset{\text{3番}}{\downarrow} y_3 + \cdots + \overset{N\text{番}}{\downarrow} y_N$$

$$Y = \frac{1}{N} S$$

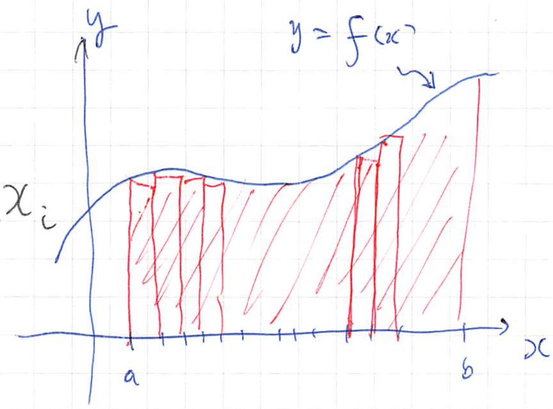
2. 0点の人が n_0 人, 1点の人が n_1 人, …, 100点の人が n_{100} 人 という
人数を数えて、点数をかけて足す.

$$N = n_0 + n_1 + n_2 + \cdots + n_{100}$$

$$S = 0 \times n_0 + 1 \times n_1 + 2 \times n_2 + \cdots + 100 \times n_{100}$$

1の流儀のリーマン積分. 関数 $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$S = \int_a^b f(x)\,dx := \lim_{N \to \infty} \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i)\,\Delta x_i$$



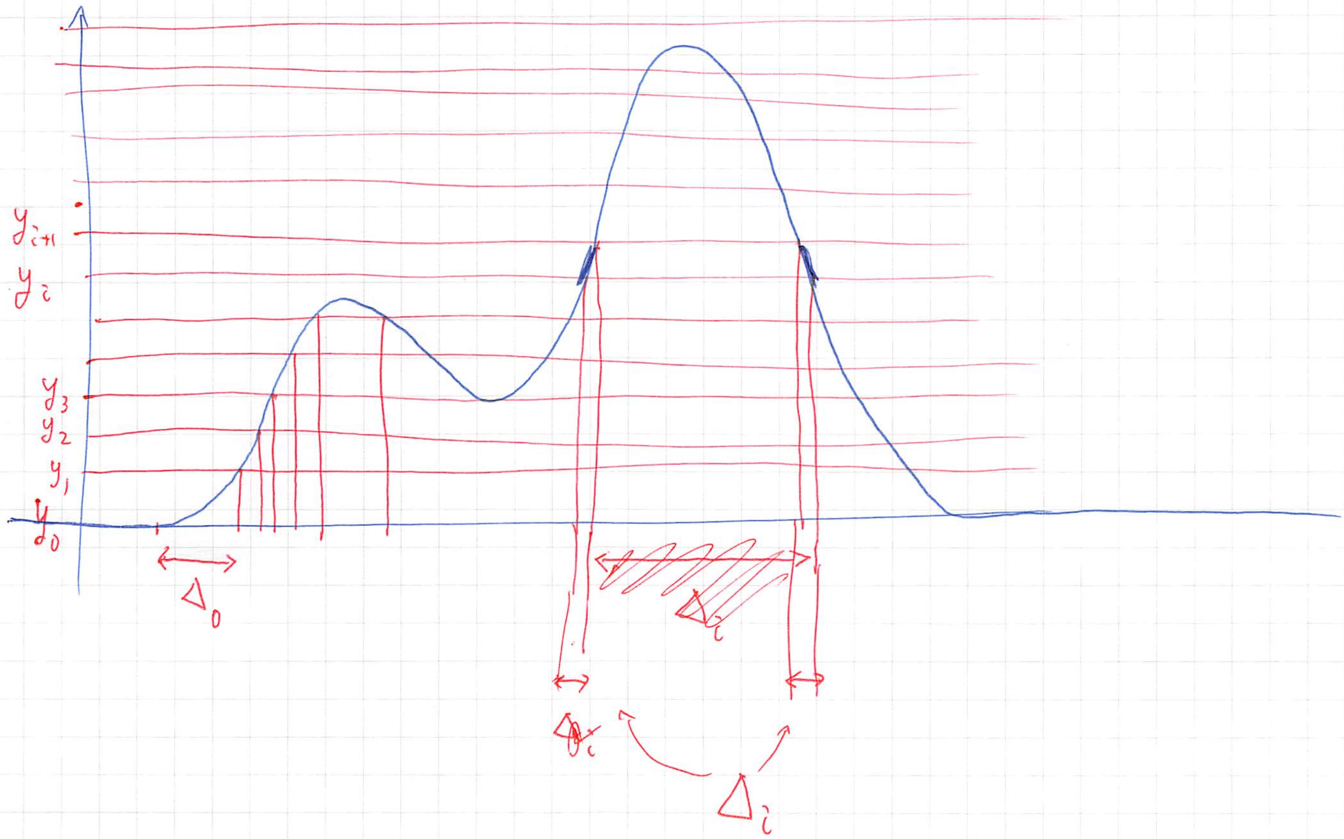
区間 [a, b] の分割

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_i < x_{i+1} < \cdots < x_{N-1} < x_N = b$$

$$\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$$

2の流儀のルベーグ積分

関数 $y=f(x)$ の値の方を分割する



$$\Delta_i := f^{-1}([y_i, y_{i+1})) = \{x \in \mathbb{R} \mid y_i \leq f(x) < y_{i+1}\}$$

$|\Delta_i| :=$ 区間 Δ_i の長さ.

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = \int_0^{\infty} y f^{-1}(dy)$$

$$= \lim_{|\Delta| \to 0} \sum_i y_i |\Delta_i|$$

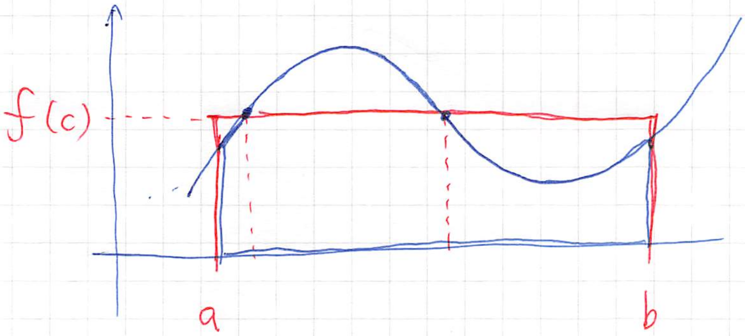
ところで、なぜ「平均」はよい指標なのか？

積分の平均値の定理

$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ が連続関数ならば 任意の $a<b$ に対して

$$\int_a^b f(x)\,dx = f(c) \times (b-a)$$

となるような c $(a \leq c \leq b)$ が（少なくとも1つ）存在する。



平均値 = ならした値.

ある集団の標準値・代表値

- 平均値
- 中央値
- 最頻値

⋮

集団の合併によって

平均値は重心平均がすぐに求められる。

中身に立ち入る必要がない。

$$\overline{X} = \frac{N_1 \overline{X_1} + N_2 \overline{X_2}}{N_1 + N_2}$$

中央値や最頻値は

ソーティングのやり直しが必要。

平均値は加法性・保存性のある数量に対して意味を持つ。

Def 測度

X：集合

$\mathcal{F}$：Xの部分集合（すべてとは限らない）の集合．

$\mathcal{F}$が以下の条件を満たしていれば $\mathcal{F}$をσ加法族（σ-algebra）という．（シグマ）

1. $\mathcal{F} \neq \phi$

条件 2. $A \in \mathcal{F} \Rightarrow A^c$（$A$の補集合）$\in \mathcal{F}$

3. $A_1, A_2, \cdots \in \mathcal{F} \Rightarrow \bigcup_i A_i \in \mathcal{F}$

$$\bigcap_i A_i = \left(\bigcup_i A_i^c\right)^c \in \mathcal{F}$$ も従う．

$$A \cup A^c = X \in \mathcal{F} \qquad A \cap A^c = \phi_X \in \mathcal{F}$$ も従う．

関数 $\mu : \mathcal{F} \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ が以下を満たしていれば

μを$(X, \mathcal{F})$上の測度（measure）という

1. $A \in \mathcal{F}$に対し $\mu(A) \geq 0$

2. $A_1, A_2, \cdots \in \mathcal{F}$，$i \neq j$ ならば $A_i \cap A_j = \phi$ となっているとき

$$\mu\left(\bigcup_i A_i\right) = \sum_i \mu(A_i)$$

3. ~~このことから~~ $\mu(\phi) = 0$ ~~も従う~~．$(X, \mathcal{F}, \mu)$を測度空間（measure space）という

とくに $\mu(X) = 1$ となっていれば μを確率測度（probability measure）という．

$X = \mathbb{R}$ として　任意の $a, b \in \mathbb{R}$ について $(a < b)$

両閉区間 $[a, b] = \{x \in \mathbb{R} \mid a \leq x \leq b\}$

片閉区間 $[a, \infty) = \{\quad a \leq x \quad\}$

$(-\infty, a] = \{\quad x \leq a \quad\}$

をみたすを含む最小のσ-加法族 $\mathcal{B}$ を Borel 集合族といい，

$\mu([a, b]) = b - a$

で Borel measure μを定める．

$\mathbb{R}$ の ボレル Borel 集合族.

$\mathbb{R}^n$ の ジョルダン測度

どんな部分集合でも体積を測れるわけではない。

可測集合 ~~xx~~ measurable set を区別する必要.

measure zero という概念

可算和 と 非可算和はちがう.

パラドクスを避けるために. 可算和に限定

| Xが有限集合なら積分は和

確率変数 = 物理量 observable の ~~xxx~~ ~~xx~~ $A : X \to \mathbb{R}$

$(X, \mathcal{F}, \mu)$ が確率空間の場合.

$(X, \mathcal{F}, \mu)$ が測度空間のとき,

関数 $f : X \to \mathbb{R}$ が可測関数.

$:\Leftrightarrow \forall U \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して $f^{-1}(U) \in \mathcal{F}$

非負 f

$$\int_X f(x)\, d\mu(x) := \lim \sum y_i\, \mu\left(f^{-1}(U_i)\right)$$

$$= \int y\, \mu\left(f^{-1}(dy)\right)$$ と書いた方がよい.

$\mu(X) = 1$ のとき

~~累積~~確率 $\mathbb{P}[f(x) \in U] = \mu\left(f^{-1}(U)\right)$

累積確率 $\mathbb{P}[f(x) \leq r] = \mu\left(f^{-1}((-\infty, r))\right)$

$$= P(r) = \int_{-\infty}^{r} \rho_f(x)\, dx$$

確率密度

ラドン・ニコディム Radom-~~B~~Nykodim derivative
微分.

~~測~~可測~~集合~~ $(X, \mathcal{F})$ 上に 2つの測度 μ, ν があったとき,
空間

$$^\forall U \in \mathcal{F} \text{ に対して } \nu(U) = 0 \text{ ならば } \mu(U) = 0$$

が成り立つなら ν に対して μ は 絶対連続だ という.
absolutely continuous

このとき,

$$\int f(x) d\mu = \int f(x) \left(\frac{d\mu}{d\nu}\right)(x)\, d\nu$$

を満たす関数 $\frac{d\mu}{d\nu} : X \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ が

ν の測度ゼロの点を除いて一意的に存在する.