付録Ａ‐３　量子力学の基本事項

１．ヒルベルト空間

力学的状態は，ケットで表現され，｜＞　を用いて表す。ケット全体は線型ベクトル空間をつくる。ケットの線型結合も，ケットである。この双対空間のベクトルとして，ブラ　＜｜　を定義する。

線型独立なベクトルの数に制限がないとき，この空間はヒルベルト空間となる。

また，これらのベクトルに作用する線型演算子があり，

｜v＞　＝　A　｜u＞　　（１）

と書く。これらの演算子の間には積が定義され，従って，群（リー群）を形成する。一方，これらの演算子は一般に非可換であり，交換子

[A,B]　＝　AB　－　BA　　（２）

は一般に０とは限らない。演算子の間に，和と積が定まったものを，環といい，線型演算子に（２）の交換子が定義されている場合，リー環と呼ぶ。量子力学では，このようなリー環を扱う。冒頭に述べた，pq－ｑｐ　は，交換子の例である。

二つのベクトル空間　ε１とε２から, それぞれケット　｜u１＞,｜u２＞をとり，積ケット，｜u１＞｜u２＞を作ることが出来る。この乗法は可換で,

｜u１＞｜u２＞=｜u２＞｜u１＞=｜u１u２＞　　（３）

と書くことが出来, ケット｜u１u２＞が張る空間を，ε１とε２のテンソル積という。

リー群Ｇとベクトル空間Ｖについて写像ｒ：Ｇ　→　Aut(V)　が,

ｒ（ｇｈ）＝ｒ（ｇ）ｒ（ｈ),　　（g,ｈはＧの任意の２元）　（４）

を満たすとき，ｒをＧのＶ上の表現という。ここで，Aut(V)は，自己同型写像の全体が作る群である。リー群の表現は，無数にある。

２．行列表現

ケット　｜u＞　と，ブラ　＜ｘ｜に対し，内積　＜ｘ｜u＞　が定まり，その値は一般に複素数で，＜ｘ｜u＞　＝　＜u｜x＞*　が成り立つ。ここで，*は複素共役を示す。

リー群を，ＭｘＮ 複素行列（A）で表現すると，その要素（＝A_{kl}）の複素共役をとり，行と列を転置（＝A^*_{lk}）したＮｘＭ行列（A†）を，その行列のエルミート共役行列といい，そのように表現された演算子を，エルミート共役演算子という。

ケット　A†｜u＞　は，ブラ　＜u｜A　に共役であるから，

＜ｔ｜A†｜u＞　＝　＜u｜A｜ｔ＞　　（５）

が成り立つ。

演算子｜u＞＜v｜のエルミート共役,

（｜u＞＜v｜）†　＝　｜v＞＜u｜　　（６）

である。
線型演算子 H がエルミートであるとは,

$$H = H^\dagger \qquad (7)$$

の時である。

二つのエルミート演算子の積は必ずしもエルミートとは限らず，交換するときのみエルミートである。

任意の線型演算子は，エルミートと反エルミートの二つの演算子の和で表される。例えば，二つの演算し K と L の積は

$$KL = \frac{KL+LK}{2} + \frac{1}{2}[K,L] \qquad (8)$$

と表される。

演算子 U は，U がそのエルミート共役行列の逆になっているとき，ユニタリーという。

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1 \qquad (9)$$

ユニタリー演算子の積は，ユニタリーである。

2．固有値，オブザーバブル

複素数 a が A の固有値であり，ケット｜u＞が a に対応する固有ケットであるとき,

$$A|u\rangle = a|u\rangle \qquad (10)$$

と表す。また,

$$\langle u'|A = a'\langle u'| \qquad (11)$$

のとき，＜u'｜は固有値 a'に対応する固有ブラである。

A がエルミートならば, a = a' で, 実数となり, 固有ケットと固有ブラは双対である。

系の力学的状態を｜u＞とすると，与えられた物理量（オブザーバブル）A の任意の関数 F(A)の平均値は,

$$\langle F(A)\rangle = \langle u|F(A)|u\rangle,\ (\text{但し，}\langle u|u\rangle = 1\ \text{とする})$$

である。

オブザーバブルの間には交換関係が存在し，ｐを運動量，ｑを座標とすると,

$$[q_r,\ q_s] = 0,\ [p_r,\ p_s] = 0,\ [q_r,\ p_s] = ih/2\pi \qquad (12)$$

が成り立つ。

3．不確定性原理

オブザーバブル，A，B を考える。

$$[A,\ B] = ih/2\pi \qquad (13)$$

さらに

　$\Delta A = (<A^2> - <A>^2)^{1/2}$　　　　　　　　　　　　（１４）

　$\Delta B = (<B^2> - <B>^2)^{1/2}$　　　　　　　　　　　　（１５）

とし，ここで新たにオブザーバブル

　$A^{\#} = A - <A>, \quad B^{\#} = B - <B>$　　　　　　　　（１６）

を導入する。シュワルツの不等式より，以下が成り立つ。

$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = <u|A^{\#2}|u><u|B^{\#2}|u> \geqq <u|A^{\#}B^{\#}|u>^2$　（１７）

また，$A^{\#}B^{\#}$をエルミート部分と反エルミート部分に分けると，

$$A^{\#}B^{\#} = \frac{A^{\#}B^{\#} + B^{\#}A^{\#}}{2} + \frac{A^{\#}B^{\#} - B^{\#}A^{\#}}{2} = \frac{A^{\#}B^{\#} + B^{\#}A^{\#}}{2} + \frac{ih}{4\pi} \qquad (18)$$

従って，

$$<u|A^{\#}B^{\#}|u> = <\frac{A^{\#}B^{\#} + B^{\#}A^{\#}}{2}> + \frac{ih}{4\pi} \qquad (19)$$

式（１７）より，

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq <\frac{A^{\#}B^{\#} + B^{\#}A^{\#}}{2}>^2 + \frac{ih}{8\pi} \qquad (20)$$

従って，

$\Delta A \cdot \Delta B \quad \geqq \quad ih/4\pi$　　　　　　　　　　　　（２１）

が成り立つ。

４．運動方程式

　外部の干渉から全く孤立した量子系は正確に予見できる形で変化する。時刻t_0における力学的状態を$|\psi(t_0)>$とし，その後の時刻tにおける状態を$|\psi(t)>$とする。t_0からtの間，観測は行われなかった，とする。

　状態の重ね合わせは保存される。従って，

　$|\psi(t)> \;=\; U(t, t_0)\,|\psi(t_0)>$　　　　　　　　（２２）

と表される。ここで$U(t, t_0)$は線型演算子で，時間推進の演算子と呼ぶ。

　エネルギーEに対するHの固有ベクトルを$|U_E(t_0)>$とする。

　$H|U_E(t_0)> \;=\; E|U_E(t_0)>$　　　　　　　　（２３）

ここで，エネルギーEを持つ系の運動が周期運動と考え，その振動数がアインシュタインの法則

　$E \;=\; \omega h/(2\pi)$

に従うと考えると（この考え方は，あとに述べるように，カオス軌道においても成り立つ），

$$|U_E(t)> = e^{-i\omega(t-t_0)}|U_E(t_0)> = e^{-iE(t-t_0)/\hbar}|U_E(t_0)> = e^{-iH(t-t_0)}|U_E(t_0)> \qquad (24)$$

両辺をtについて微分すると，微分方程式，

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t,t_0)=HU(t,t_0) \quad (25)$$

が得られる。

（２２）の両辺を微分すると，

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)>=(\frac{d}{dt}U(t,t_0))|\psi(t_0)> \quad (26)$$

（２５）より，

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)>=H|\psi(t)> \quad (27)$$

ベクトル｜ψ（ｔ）＞のノルムが時間的に一定に保たれるためには，Ｈ がエルミートでなければならない。また H がエルミートならば，Ｕ（ｔ，ｔ$_0$）は，ユニタリー演算子である。

さらに，Ｈが時間に依存する場合でも，

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t+dt)>=(1-\frac{i}{\hbar}Hdt)|\psi(t)> \quad (28)$$

と書け，この場合，

$$U(t+dt,t)=1-\frac{i}{\hbar}Hdt \quad (29)$$

は，無限小ユニタリー演算子である。

５．シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示

上に述べたように，系の状態が時間とともに変わるような記述の仕方を，シュレーディンガー表示と言い，このような表示のケットとオブザーバブルに対して，時間に依存するユニタリー変換Ｕ†（ｔ，ｔ$_0$）を行うと，ハイゼンベルグ表示となる。

$$|\psi_S(t)> = U(t,t_0)|\psi_S(t_0)> \quad (30)$$

$$|\psi_H> = U^\dagger(t,t_0)|\psi_S(t)> = |\psi_S(t_0)> \quad (31)$$

これに対し，シュレーディンガー表示のオブサーバブルＡ$_S$は，

$$A_H(t)=U^\dagger(t,t_0)A_S U(t,t_0) \quad (32)$$

この式を，式（２５）を考慮して微分すると，

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dA_H}{dt} &= -U^+HA_SU+i\hbar U^+\frac{\partial A_S}{\partial t}U+U^+A_SHU \\ &= U^+[A_S,H]U+i\hbar U^+\frac{\partial A_S}{\partial t}U \end{aligned} \quad (33)$$

ここで，ハイゼンベルグ表示のハミルトニアン，$H_H=U^\dagger HU$を導入すると，

$$U^\dagger[A_S,H]U = [A_H,H_H] \quad (34)$$

となる。

従って式（３３）は,

$$i\hbar\frac{dA_H}{dt}=[A_H,H_H]+i\hbar\frac{\partial A_H}{\partial t} \quad （３５）$$

と書かれる。これをハイゼンベルグ方程式という。

６．量子統計

系が，ケット・ベクトル｜１＞，｜２＞,・・・｜m＞に見出される確立がそれぞれ,
P1，P2,・・・Pm であるとすると，系に対する測定結果の平均値＜A＞が,

$$<A_m>=\frac{<m|A|m>}{<m|m>} \quad （３６）$$

に等しくなる確率は，Pmである。ベクトル｜１＞，｜２＞,・・・｜m＞が規格化されていれば,

$$<A>=\sum_m p_m <m|A|m> \quad （３７）$$

と書ける。

このような統計的混合系を記述するには，密度演算子

$$\rho=\sum_m |m>p_m<m| \quad （３８）$$

を用いる。ここで，$P_m\geq 0,\sum_m P_m=1$である。

ここで，TrPmA＝TrPm²A＝TrPmAPm=Tr｜m＞＜m｜A|m＞＜m｜＝
＜m｜A｜m＞TrPm ＝ ＜m｜A｜m＞ （３９）

したがって,

$$Tr\rho A=\sum_m p_m Tr(|m><m|A)=\sum_m p_m<m|A|m>=<A> \quad （４０）$$

密度演算子の時間変化に関しては,

$$\begin{aligned}\rho_t&=\sum_m |m>_t\ p_{mt}<m|=\sum_m U(t,t_0)|m>_0\ p_{m0}<m|U^+(t,t_0)=\\ &U(t,t_0)(\sum_m |m>_0\ p_{m0}<m|)U^+(t,t_0)=U(t,t_0)\rho_0 U^+(t,t_0)\end{aligned} \quad （４１）$$

式（２５）より,

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho_t=[A_H,\rho_t] \quad （４２）$$

これが密度演算子の運動方程式である。

さらに，対応原理から，系のエントロピーは,

S ＝ －k Tr（ρlogρ）

と表される。