

構造化学 6回目.

前回 量子力学の導入と一次元の無限井戸の中の粒子の問題を
解いた。今日は、量子力学の導入をまた1回で行う。という

4ヶ条を行う、従って話は厳密ではない。ふやっと“イメージ”
をつかんでもらうだけにしよう。

6-1. 線形代数と微分積分を混ぜてやる
+ 関数の完全系をフーリエ展開の観点で。

6-2 Schrodinger方程式をたいて 固有値問題。
正準量子化の紹介

6-3 波動関数は線形の波。
6-1, 6-2は完全結果と一致する。

6-4. 物理量と観測値。

6-1 線形代数と微積分をまぜてみる + 関数の完全素数スモホのストーリーの論議で.

☆ ^{ここ}線形代数は抽象的な感じがするが、抽象性が高いから
それだけ汎用性もよ、スライシイ道具になる.

☆ 数学や工学の歴史を見ると、やることはたいがい線形代数
(諸説あり) 人間はそれ以外の思考域がたのびもしない。(諸説あり)

☆ ベクトル空間の定義

体 K 、空間 V があるとき.

$$K \ni \alpha, \beta \quad V \ni x, y \quad \alpha x + \beta y \in V$$

ならば V はベクトル空間 とよ.

☆ 線形写像の定義

ベクトル空間 V, W の間の写像 $f: V \rightarrow W$ が 線形写像 とは.

$$V \ni x, y, K \ni \alpha, \beta$$

$$f(\alpha x + \beta y) = \alpha f(x) + \beta f(y)$$

が成立するとき.

$\int_{-\infty}^{\infty}$ で積分可能な.

これと微分積分の間に関係があるのか!

★ 実連続関数 $C = \{f(x)\}$ は線形空間で可.

$f(x), g(x)$ を 実連続関数 α, β を実数とお
 $\alpha f(x) + \beta g(x)$ も実連続関数.

▷ 微分演算は C から C へ線形写像

$$\frac{d}{dx} (\alpha f(x) + \beta g(x)) = \alpha \frac{d}{dx} f(x) + \beta \frac{d}{dx} g(x)$$

★ 積分演算は C から $\mathbb{R}$ へ線形写像

$$\int_{-\infty}^{\infty} \alpha f(x) + \beta g(x) dx = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx + \beta \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx$$

★ 不定積分も $C \rightarrow C$ へ線形写像になる (なるまい)

$$\int \alpha f(x) + \beta g(x) dx = \alpha F(x) + \beta G(x) + \underline{C}$$

不定分

⇒ 線形代数と微分積分が繋がってる!!

⇒ ヒルベルト空間 にしてつながる

$$C_H = \left\{ f(x) \mid \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty \right\} \rightarrow \text{量子力学の確率!}$$

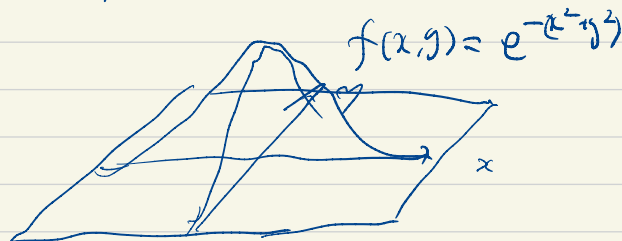
$f(x)$ の基底関数の2乗 $|f(x)|^2$ が積分可能な関数のみおつた空間

(タブレットでやる) 手紙

スライスの断面を考える。どんな写真でもうつるよね!

関数はグラフなどで表せる $f(x, y)$ とする。

色と強度で $f(x, y)$ の値を表そう。



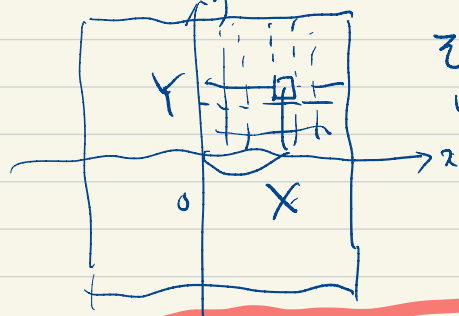
どんな関数でも断面にうつったもの
と考える。(よい近似)

実用的には、 $10^{100000} \text{ m} \times 10^{100000} \text{ m}$ のスクリーンを考えると
1ピクセル $10^{-100000} \text{ m} \times 10^{-100000}$ と思うと、
強度 $0 \sim 10^{100000}$ まで表すには青(赤は正負は負)

ほとんどの関数も スライス上にとっても近似でうつる。

実質無限だがあくまで有限。

スカラー画素は $X_{(x,y)}$ と $Y_{(x,y)}$ に点 p が光る。



その強さを赤なる正、青なる負
として表す。

このとき、スカラー画素は線形空間となる

① 特性関数 χ

$$\chi_{(x,y)}(x,y) = \begin{cases} 1 & \dots x,y \text{ が } X_{(x,y)}, Y_{(x,y)} \text{ の交点} \\ 0 & \dots \text{それ以外に} \end{cases}$$

どんな画像 $f(x,y)$ も 特性関数 $\{\chi_{(x,y)}\}$ と $\chi_{(x,y)}$

$$f(x,y) \simeq \sum_{x,y} \chi_{(x,y)}(x,y) C_{x,y}$$

↓
光度

と χ もよく (実質同じ) 近似できる。

スカラー画素は、特性関数と光度の線形結合。

$$\chi = \sum_{x,y} \chi_{(x,y)} C_{x,y}$$

線形空間!!!

$\{X(x,y)(x,y)\}$ を完全系 といふ。

$\Rightarrow \{X(x,y)\}$ は V_X の完全系 $\Leftrightarrow$ どんな V_X の "画像"

もあらわせる

スカラーの画像であらわさる

(どんな関数)

$\rightarrow$ でも V_X の "画像" が表わせない

$\Leftrightarrow \{X(x,y)\}$ は 完全系ではない

たとえば $X(x,y)$ のうち $\rightarrow$ でも表われない $\left\{ \begin{array}{l} \text{色がついてない} \\ \text{暗いまま} \end{array} \right\}$ 等

$\Leftrightarrow$ 完全ではない

V_X かつ $f(x,y), g(x,y)$ は、^{いつでも} 積分可能 (有限な値)

微分は 差分で代用する (言葉はともかく)

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

(たんとなく、たいたい)

微分・積分、線形代数を統合

できた. !!!

内積はどうか?

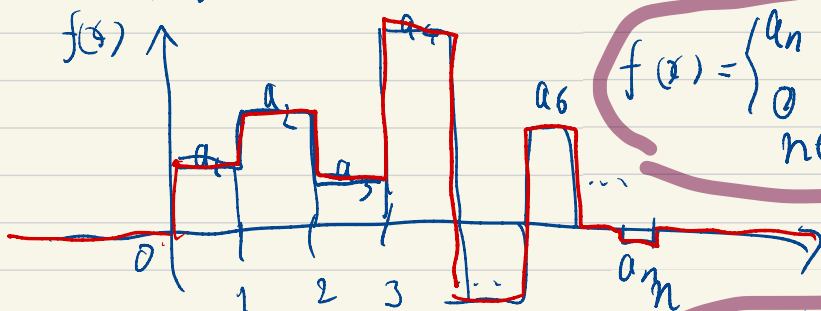
(有限次元の) n 次元空間 $a \in V$

$$a = (a_1, a_2, \dots, a_n) \quad b = (b_1, b_2, \dots, b_n)$$

a, b の (標準的な) 内積

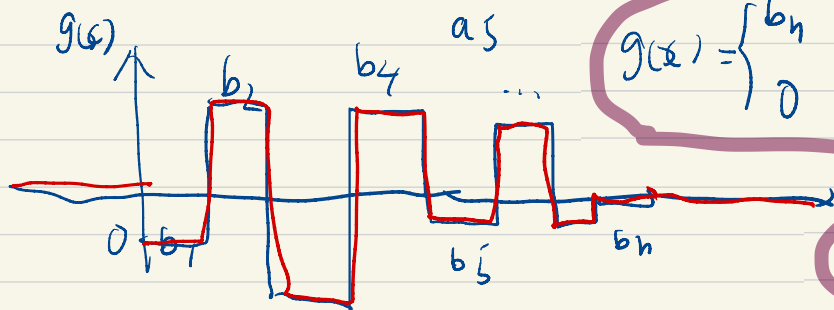
$$a \cdot b = \sum_i a_i^* b_i \quad \text{と定義される}$$

$f(x), g(x)$ を $[0, n]$ 上の $\mathbb{R}$ 数値



$$f(x) = \begin{cases} a_n & n \leq x \leq n+1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$n \in \mathbb{N}$



$$g(x) = \begin{cases} b_n & n \leq x \leq n+1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$n \in \mathbb{N}$

としよう

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* g(x) dx = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_n^* b_n$$

$f(x), g(x)$ の内積を

$$f \cdot g = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* g(x) dx \quad \text{と定義}$$

6-2.

Schrödinger 方程式をたてる + 固有値問題

正準量子化を紹介

不思議かつ "古典的な量子力学を推定する" みたいな
感じで 整合性なく 納得いかないが、

今のところ正しい。例外は(多分)ない。

①

系の古典的なハミルトン関数 $H(p, x)$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

一次元の $V(x)$ の粒子、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2$$

一次元のバネ、

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

水素原子

機械的に、

②

$$p \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$x \rightarrow x$ に変化するものか (量子的) Hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

一次元 $V(x)$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} k x^2$$

バネ

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

水素原子

③

波動方程式

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi : \text{時間に依存する Schrödinger 方程式}$$

④ 神の方程式 $H\psi_n = E_n\psi_n$ (時間依存しない定常状態の)
 $(n=1, 2, \dots, \infty)$ Schrödinger 方程式

先程の2式の近似を考えてみる。

H : とても大きな $\left\{ \begin{array}{l} \text{実対称} \\ \text{エルミート} \end{array} \right.$ 正定行列 $(N \times N)$
 ψ_n : とても長い ベクトル N

E_n : 固有値問題

⑤ 何で Hamiltonian は $\left\{ \begin{array}{l} \text{実対称} \\ \text{エルミート} \end{array} \right.$ 行列なの？

$H_{ij} = H_{ji}^*$ (or $H_{ij} = H_{ji}$)

物理量: エネルギー, 粒子の位置, 粒子の運動量,
 ... など は すべて実数

線形代数で習う

H がエルミート $\Rightarrow$ 固有値は 実数

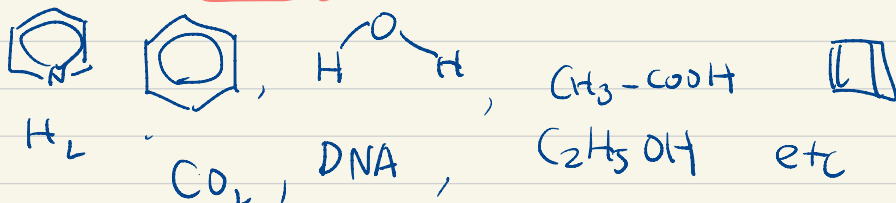
↑ 都合
 がよい
 + 実験とあう

ポイント

- ① 古典力学が量子力学は単におきかえていい
 (今はなぜと思わず、とりあえず字だけ変えてみる)
- ② 神の方程式である Schrödinger 方程式は実験と完全一致
- ③ 化学は時間依存しない版を扱う

何で 時間に依存しない Schrodinger 方程式を解くの?

第1 近似として分子は 時間が流れず 50 定常状態 にある。



逆に 非定常状態 $\Rightarrow$ すぐ崩壊して安定定常状態になる

電子の動きは 核の動きより 数個位遅い のので、分子の動きに

電子は完全に追従して常に定常状態にあると見てよい

演習問題

Hamiltonian が 時間に依存しない

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{r} \quad \text{とか} \quad H \text{ が } t \text{ を陽に} \\ \text{ふくまないとき}$$

時間に依存している Schrodinger 方程式 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi$ を変数分離して

時間に依存しない Schrodinger 方程式 $H \psi = E \psi$ を導け。

6-3 波動関数は線形の波.

6-1, 6-2は 実験結果と一致する.

★ 量子力学の教えでは.

① この世のすべては 波動関数 ψ で表わされる. 波動関数とは、
波動関数 ψ は、位置^{と時間}の関数で、確率密度を返す

$$\psi: x, t \rightarrow \psi(x, t) \in \mathbb{C} \quad \left[\begin{array}{l} \text{この授業では} \\ \text{実数でOK} \end{array} \right]$$

② 波動関数は、線形である.

つまり ψ, ϕ が波動関数とすると

$$\alpha \psi(x) + \beta \phi(x) \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C} \text{ も波動関数}$$

③

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \text{ が有限.}$$

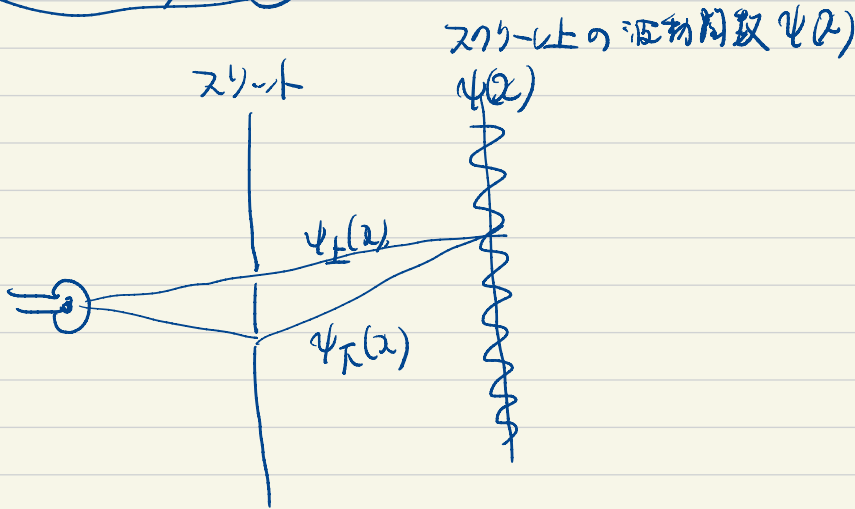
↓
ベクトルの公理の一つ

② はどうしてやる? $\Rightarrow$ 電子の波のモジュラス実験!

③ 粒子は宇宙のどこかにある. 確率を1にし
有限にしておきたい

スミットの pixel の考え方は いづれも 有限でしかない.
それでええんやろ

電気の干涉実験



これは $\psi_{\text{上}} + \psi_{\text{下}}$ が $\psi(x)$ となる。

線形性の波の重ね合わせ

②は、もっと強力に ψ の スムースな関数に画像を写す

$$\textcircled{a} \quad \psi(x, y) = \sum_{x, y} \chi(x, y) C_{xy} \quad \left(\begin{array}{l} x, y \text{ は} \\ \text{中心の } x, y \text{ pixel} \\ \text{目} \text{ という事} \end{array} \right)$$

といつても分解できる。

① Fourier 変換の同波数分解もその例。

(2次元にすぎない、どの次元にもこの考えは使える)

0-4

物理量と観測則

① 量子力学では、物理量は エルミート演算子 で表わされる。

(pixel 画像 などと数値) 物理量も (有限次元の) 巨大なエルミート行列
で表わせる

例) ・ Hamiltonian : 系のエネルギー

・ 分子の双極子モーメント

・ 分子の電荷分布

・ どんな有限次元のエルミート行列は 量子力学で実現可能!

実数線形代数の複習

① Hermite 行列はいつでも Unitary 行列で対角化でき

$$U^H H U = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_N \end{bmatrix} \quad U^H U = U U^H = \begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

① 従って H の固有 N つ U は 完全規格直交系 をなす
 $\rightarrow |x_i|^2 = 1 \quad \langle x_i, x_j \rangle = \delta_{ij}$
 x_i は N コ

$$H x_i = \lambda_i x_i, \quad \forall \psi = \sum_{i=1}^N x_i c_i \quad \exists c_i \in \mathbb{C}$$

($1 \leq i \leq N$)

② Hermite 行列の固有値は可なり実数

$$\begin{aligned} x_j^H H x_i &= x_j^H (\lambda_i x_i) = \lambda_i x_j^H x_i = \lambda_i \langle x_j, x_i \rangle \quad \therefore \lambda_i = \lambda_i^* \\ &= (x_j^H H) x_i = x_j^H \lambda_j^* x_i = \lambda_j^* \langle x_j, x_i \rangle \quad \text{on } x_j^H x_i = \delta_{ij} \end{aligned}$$

コレだけじゃいじょうだ!!

観測 (測定ともいう: 同義)

① 物理量 H を観測すると 波動関数 ψ は、 H の固有関数のどれか ϕ_i に 突然 収縮する として 観測値 E_i を得る。

② そしてその確率は、

$$H\phi_i = E_i\phi_i \quad (1 \leq i \leq N)$$

$$\psi = \sum_{i=1}^N \phi_i c_i, \quad \sum_{i=1}^N |c_i|^2 = 1$$

$|c_i|^2$ となる

$\psi \xrightarrow{H \text{ の測定}} \phi_i, |c_i|$ 確率.

③ ϕ_i になるのであれば、その後何回測定しても同じ ϕ_i のまま、 E_i が何回も得られる。

定理. 系の波動関数が ψ にあるとき、 $\hat{H}$ の期待値は

$$\int \psi^* \hat{H} \psi d\mu \text{ である, } \langle \hat{H} \rangle \text{ と表す.}$$

つまり、系の波動関数が ψ にあるとき (= 何回も同じ ψ を作る)

エネルギーなどの測定を何回も行うと、その値の平均値は $\langle \hat{H} \rangle$ になる。

例 1. Bobは Aliceのことが好きとする. Aliceは Bobのことが好きか 興味ないか、いまいち定まらない.
 このとき Bobが Aliceに好きか 関心ないか 定まる
 ようになる?

① Aliceは 人間であり、波動関数は複素数を極めるが:
 第1近似とし $\psi_{\text{Alice}} = \psi_{\text{Bobの心}} \times \psi_{\text{その他}}$
 Bobの心と関心(関心ない)空間とその他を種々表わす. (複素数分解)

② $\psi_{\text{Bobの心}}$ は ψ_{Bob} に関心がある + $\psi_{\text{Bobの関心なし}}$
 と、線形結合で書ける. もう一つこの2つのベクトルは、直交する
 これを、 $\frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{B, \text{心}}^A + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{B, \text{関心なし}}^A$ としても書ける. (係数は何となくおまん)

③ Bobが Aliceについて好きに決まる. (好きかどうかおまん)

④ そうすると、Aliceの Bob 関心 線形空間のベクトルは2つの固有状態
 $\psi_{B, \text{心}}^A, \psi_{B, \text{関心なし}}^A$ に収縮する.

$\psi_{B, \text{心}}^A$ に収縮したら ずっとそのまま何回書いても
 好き.

$\psi_{B, \text{関心なし}}^A$ に収縮したら その後ずっと関心なしのまま.

⑤ 基底状態計算は 何回2にを行う. $\downarrow$
 締めて他の人へのアタックが強い

例2 箱の中にコインが入っていて、上向きと下向きの波動関数の重ね合わせとす

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{表}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{裏}}$$

このときコインの表裏を観測する演算子 $\hat{C}$ を考える

$$\hat{C}\psi_{\text{表}} = +1\psi_{\text{表}} \quad \text{表なら} +1, \text{裏なら} -1.$$

$$\hat{C}\psi_{\text{裏}} = -1\psi_{\text{裏}}$$

としよう.

$$\begin{aligned} \langle \hat{C} \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{表}}^* + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{裏}}^* \right) \hat{C} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{表}} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{裏}} \right) d\mu \\ &= \int \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{表}}^* + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{裏}}^* \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{表}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{\text{裏}} \right) d\mu \\ &= \frac{1}{2} \left[\underbrace{\int |\psi_{\text{表}}|^2 d\mu}_1 - \frac{1}{2} \underbrace{\int |\psi_{\text{裏}}|^2 d\mu}_1 + \frac{1}{2} \int \psi_{\text{表}}^* \cdot \psi_{\text{裏}} d\mu - \frac{1}{2} \int \psi_{\text{裏}}^* \cdot \psi_{\text{表}} d\mu \right] \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 0 - 0 \\ &= 0. \end{aligned}$$

直交

$\psi_{\text{表}}, \psi_{\text{裏}}$ は 表裏の完全系

かつ $\psi_{\text{表}}, \psi_{\text{裏}}$ は直交



6-1 といえずシュレーディンガー方程式をたてるところまで。

この世界がどうやって成り立っているかというゲームのルールみたいなものを科学者がといているが、人間には知り方がなく、オフィシャルにはわからないものの、人類は実験を通してさぐってきた。原子、分子までくると、古典力学ではうまくゆかなくなってしまう。量子力学が必要となる。古典から量子までたどりつくのに300年かかる。

- 運動量 (粒子性) と波長 (波動性) $p = \frac{h}{\lambda}$ は必ずいっている。
- 古典力学を使いつつ量子力学を構築する必要あり
 - 系を古典的に知っている必要あり。(人間は、巨視的な存在なので)
 - 粒子の質量 電磁場の有無など
 - 古典的ハミルトニアン $H(p, x, t)$ p : 運動量, x : 位置
 $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $x \rightarrow x$, $t \rightarrow t$ におきかえをして。
 - 量子的ハミルトニアン $\hat{H}(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x, t)$ を得る
ここはたどりつくには、シュレーディンガーの天才が必要だった。
 - シュレーディンガー方程式が成り立っていることが知られている

導出可能

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (\text{時間に依存する})$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (\text{時間に依存しない})$$

(演習問題) $\hat{H}$ が大に陽に依存しないとき、変数分離を行う

時間に依存するシュレーディンガー方程式から、時間に依存しない方程式を導出

- ① シュレーディンガー方程式を解くとは、 $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ ($n=1, 2, \dots$) について

ψ_n : 固有波動関数 } E_n : 固有値 } を求めること。
 波動関数 }
 固有ベクトル } 固有エネルギー

- ② シュレーディンガー方程式の2つの数学的な見方

一見 偏微分方程式、しかし、(線形代数の)固有値問題でもある

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

①

$\hat{H}$: (線形) 演算子

ψ_n : 固有波動関数

E_n : 固有エネルギー

$$Hx_n = \lambda_n x_n$$

H : 無限次元の $\left(\begin{array}{l} \text{実対称} \\ \text{複素エルミート} \end{array} \right)$ 行列

x_n : 固有ベクトル

λ_n : 固有値

シュレーディンガー方程式として出てくる行列の次元は、一般に無限次元となるが、通常、有限次元と同じように考えてOK!

- たまに困ることがあり、そのときはそのとき個別に考える。

- 上が嫌いな人は、数学科が良いかも...

- 線形代数習いたてなのにいきなり無限がよ... 文科者へ90!
昔は高校でかきつた

6-2 波動関数は系の全てを表す。"線形の波"である。

量子力学的には波動関数がこの世の全てを表す関数となっている。

物理量(エネルギーとか)は計算できる

• 系のすべての情報は波動関数 ψ で表わされる。

• 時刻 t の波動関数 $\psi(x, t)$ を知ると、過去 $t' < t$ 未来の $t'' > t$ の波動関数もわかる。

• $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t)$ を解けば良い

(演習問題) 上の方程式は、 $\psi(x, t)$ について dt を無限小として $\psi(x, t+dt)$ を求める式だが、これを、有限時間後の $\psi(x, t')$ を求める式に拡張せよ。

exp

• 古典との大きな違い。

• 古典だと、粒子の位置と速度と時刻が系の状態を表すときに必要。

(13) n 個の質点系

時刻 t の

粒子 1 の 位置と速度

粒子 2 の 位置と速度

⋮

粒子 n の 位置と速度

が必要

つまり、 n 粒子系で系の時刻 t での全情報 Σ を典型的に表して、

$$x_1(t), v_1(t) \longrightarrow x_1(t+dt), v_1(t+dt)$$

$$x_2(t), v_2(t) \longrightarrow x_2(t+dt), v_2(t+dt)$$

$$\vdots$$

$$x_n(t), v_n(t) \longrightarrow x_n(t+dt), v_n(t+dt)$$

Newton 方程式を解くと時刻 $t+dt$ の全情報がある。

一方、量子力学だと、

時刻 t の

同じ n 個の粒子系

粒子 1 の位置

= 2 の位置

の n 個の関数

$$\psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n, t)$$

n の位置

となる。粒子の位置の関数であって実際の位置ではないことに注意。古典の場合と対比して、量子の場合の系の情報は、

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_n, t) \longrightarrow \psi(x_1, x_2, \dots, x_n, t+dt)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, \dots, x_n, t) = H \psi(x_1, \dots, x_n, t)$$

で得られる。運動量(や速度)がある、と消えていることに注意。

あとで出すが、量子力学では、粒子 1 がどこに存在しているかは、

確率的にしかわからないため粒子 1 が "x" に存在していると考えつつ、位置そのものを変数とすることは、今は考えなくてよい

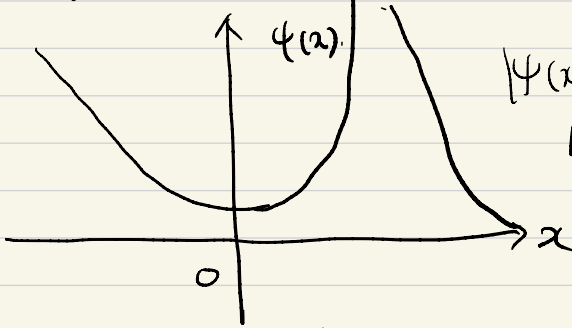
$x, y, z \in \mathbb{R}$

17:50 - 53

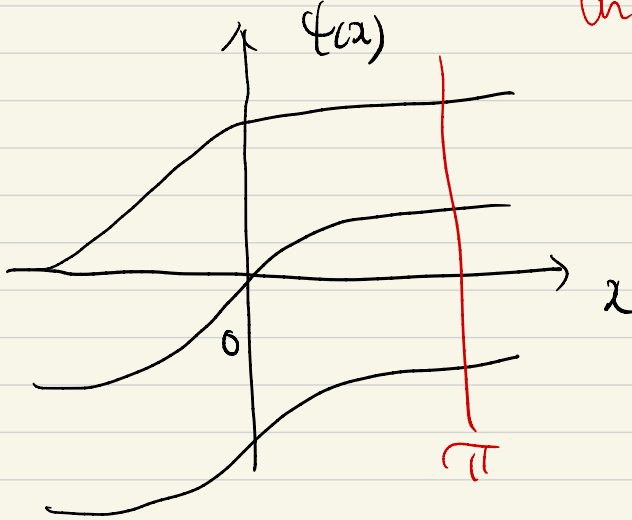
$\psi: (x, y, z) \rightarrow \psi(x, y, z) \in \mathbb{C}$ 波動関数

• どんな関数でも波動関数になりえたらどうか?

• ψ も任意の関数とすると、いくつかのおかしな点が出てくる。



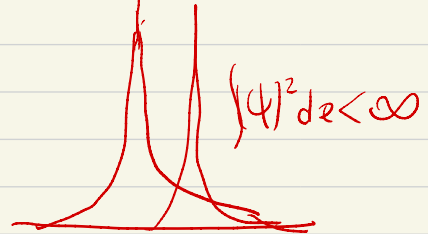
$|\psi(x)|^2$ の全空間での積分が発散する。関数は粒子の存在確率が定義できない。
ので不適。



oscillation

$\psi(x)$ がいくつかの値をもつ関数

系を回転させると値が
変化する例をつくる



何らかの制限が必要

絶対

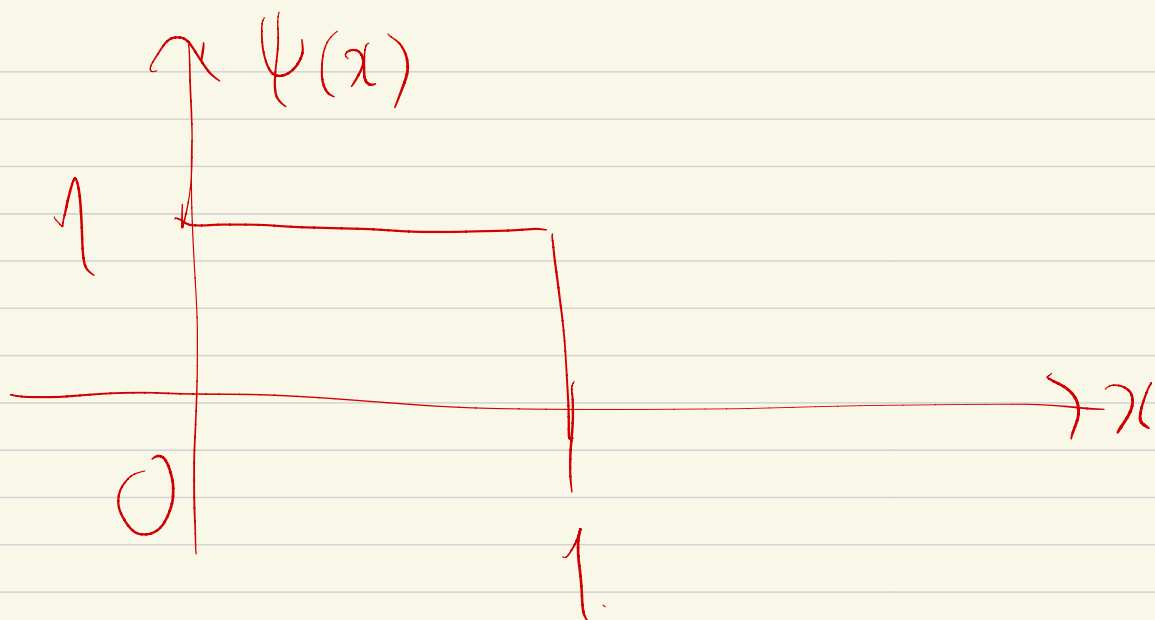
↓

ψ が (量子力学的) 波動関数になるには、2乗可積分が、できれば

つまり $\int |\psi|^2 dx < \infty$ で OK

より正確にはヒルベルト空間の元であれば OK.

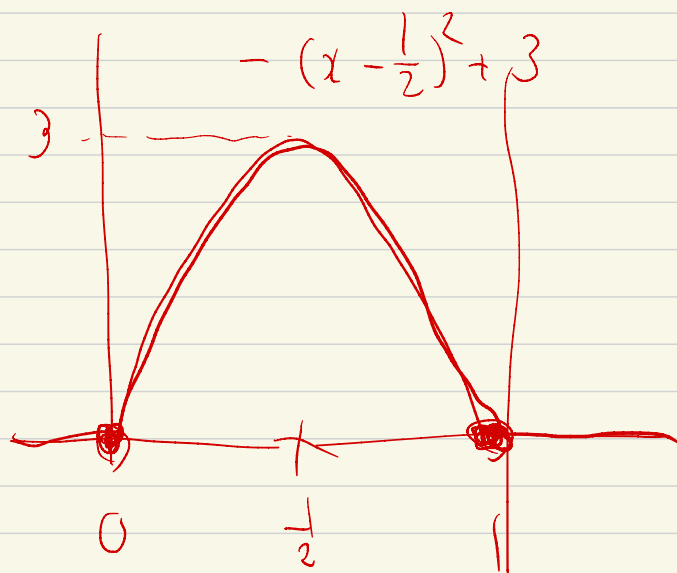
測り度



$$\int \psi(x) \psi(x) dx = 1$$

$$\psi(x) = \begin{cases} = 1 \\ = \infty \end{cases}$$

$$\left. \begin{array}{l} x = \text{无理数} \\ \text{かつ } 0 \leq x \leq 1 \\ x = \text{有理数} \\ \text{かつ } 0 \leq x \leq 1 \end{array} \right\}$$



● 波動関数は線形の波である。

線形 重ね合わせが成り立つ。

電子の二重スリット実験では、電子が“波”となって自分自身と干渉している。 ψ を波動関数として α, β を任意の複素数とすると、

$\alpha\psi + \beta\phi$ も波動関数となる。

原理

これは、線形代数でも習った(はず)の α, β を任意のスカラー μ, ν を任意のベクトルとしたとき、 $\alpha\mu + \beta\nu$ もベクトルである。

ベクトル空間の公理と全く同じ形をしている。

二重スリットでは、上のスリットを通る波動関数を $\psi_{上}$ 、
下の $\psi_{下}$ としたとき、 $\psi_{上} + \psi_{下}$ として、波が重ね合わせられる。
スクリーン上での強度を x とおくと



$$\begin{aligned} & \psi_{上}(x) + \psi_{下}(x) \\ &= 0 \quad \text{となる点} \text{は 暗線} \\ & \text{であった} \end{aligned}$$

6-3. 量子力学では、"観測"が確率的になる

一粒子の系の{波動関数}が $\psi(x)$ で表わされているとき、
状態

$x \sim x+dx$ に粒子が存在する確率は、
波関数

$$|\psi(x)|^2 dx \text{ に比例する.}$$

これは、有名なボールの解釈である。

量子力学によると、観測を行うと、波動関数は、確率的にある波動関数にぴびうつる。
ジャンプする
収縮する

何故確率が入ってくるのか、サイコロはどこと振られているか...

これを量子力学では、答えられない。ただし実験で何回も何回も
たしかめられているので 疑いようがない。

さて、本題に入るまでに。

自己共役

物理量はすべてエルミート演算子の形で書かれる。

古典力学と違い、物理量はすべてエルミート演算子の形で書かれる。

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$x \rightarrow x.$$

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

$$p^2 \rightarrow -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

14:04

- 14:07

(見て其役

~~エネルギー~~ 演算子 $\hat{H}$ $H_{ij} = H_{ji}^*$

転置をとって、さらに複素共役をとる

例えば、系にある粒子のエネルギー E を測定するのはどういふことだろうか?

前提

① 系のハミルトニアンは $\hat{H}$ で、シュレーディンガー方程式 $\hat{H}\psi_j = E_j \psi_j$ ($j=1, 2, \dots, \infty$) は解けているとする。

② 系は状態 ψ にあるとする。

③ さらに、 $\psi = \sum_{j=1}^{\infty} \psi_j c_j$ で展開できることが知られている (線形代数というところの基底に分解)

④ 規格化のため一般性を失わずに $\sum_{j=1}^{\infty} |c_j|^2 = 1$ とできる。

ψ であるとき エネルギーを測定する。

↓

ψ_j のどれかに $|c_j|^2$ の確率でジャンプ

↓

エネルギーの測定値として E_j を得る。

(エネルギーの測定方法については明記していない、あくまで原理的な話である)

10:07
- 10:12

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

例.

$$H = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ のとき. }$$

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_1 = -1 \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \lambda_2 = 1$$

系が $\chi_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ という状態にあるとき、Hを測定すると。

- ・ 0.5の確率で、 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ にジャンプし、測定値 -1 を得る。
- ・ 0.5の、 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ にジャンプし、測定値 1 を得る。

例. A男はB子が好きである。しかし、B子は好きと無関心の間にある。B子の波動関数は、このとき

$$|B\rangle = (\text{好き}) \cos \theta + (\text{無関心}) \sin \theta.$$

で表わされる。規格化条件は $\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$ となっている。
 したがって、確率 1 で、(好き)状態と(無関心)状態のいずれかを得る。

A男は、B子の心を知りたい。好き演算子で、B子の測定をす。

つまり、“自分を好きか?” と A子にたずねるという演算子を作用させると、

確率 $\cos^2 \theta$ で、(好き)にジャンプする。おめでと(?) また $\sin^2 \theta$ で(無関心)にジャンプする。残念(?)

人間の心がよくわからないのは、心理状態が観測に重々あわさるからだろう。勇気をもつ(?) 演算子も作用させなければならぬのもうなかなきびしい。(好き)にジャンプすれば良か(無関心)にジャンプしたその後、ずっとそのままだから。

物理量の期待値

さて、これまでの議論で、物理量の期待値の計算ができることを示そう。

物理量 $\hat{A}$ を知っているとし、

系の状態が ψ にあるとき、

$\hat{A}$ の期待値 $\langle \hat{A} \rangle$ を計算するには

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

を計算すれば良い。

(言正明) $\hat{A} \psi_j = a_j \psi_j$ ($j=1, \dots, \infty$) は解けているとする

$$\psi = \sum_j \psi_j c_j \quad \sum_j |c_j|^2 = 1 \quad \text{と展開する。}$$

a_j を得る確率は、 $|c_j|^2$ 。

$$\text{よって、期待値は、} \langle \hat{A} \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} |c_j|^2 a_j$$

$$\begin{aligned} \text{一方、} & \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx \\ &= \int \sum_j c_j^* c_i \psi_j^* \hat{A} \psi_i dx \\ &= \int \sum_j c_j^* c_i \psi_j^* a_i \psi_i dx \\ &= \sum_j c_j^* c_i a_i \int \psi_j^*(x) \psi_i(x) dx \\ &= \sum_i |c_i|^2 a_i \quad \text{よって成立。} \quad \square \end{aligned}$$

演習問題

$$\begin{aligned} \int \psi_j^*(x) \psi_i(x) dx &= \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \\ &\text{を示せ} \end{aligned}$$

14:14

14:15

① 何故 物理量は エルミート的な演算子なの?

- 物理量の期待値は実数であってほしい.

- 粒子の座標は $x=0.5$ などであって $1 + \frac{1}{2}i$ と複素数になんてほしくない

- エルミート行列の固有値は実数となることが簡単に証明でき

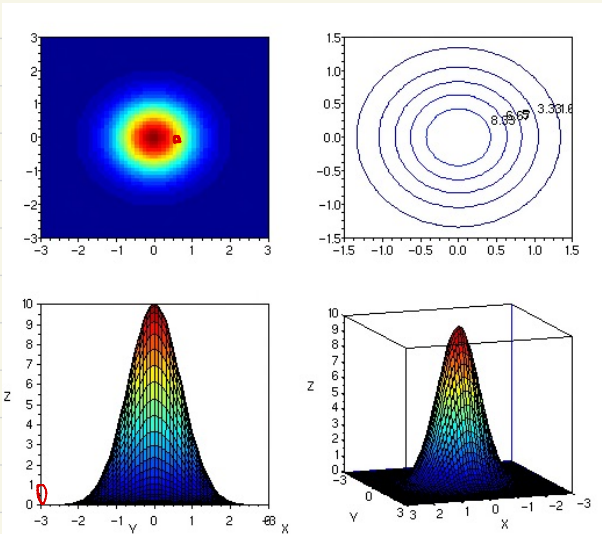
14:15-14:20

6-4 関数の完全系：関数を線形代数のベクトルのように見做す。

量子力学に出てくる波動関数は、線形代数におけるベクトルとなる。これの直観的な理解をしてみよう。

★ $\psi(x, y)$ という実数関数を考える。3次元関数となるが

$\psi(x, y)$ の値は、“色”で表すことにしよう。



★これをスマホのスクリーンだと思って考える。

●まず、 $N \times N$ のピクセルを持たないスマホの画面を想像と。

どの1つのピクセルが欠けても、画像は正しく表示されない。

⇒ “完全”であるためには、

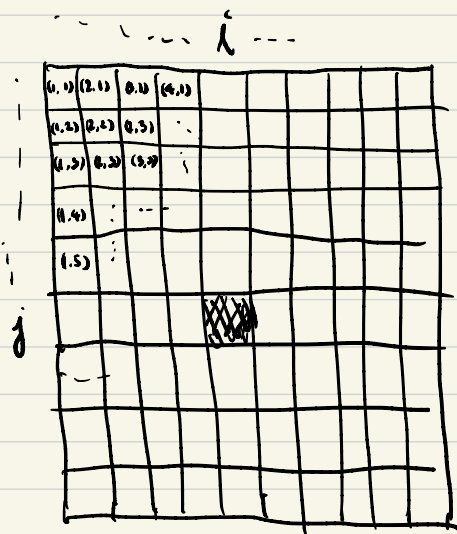
すべてのピクセルが正常に発色する必要あり。ドット欠けは不可

・ $N \times N$ の N はとても大きな数。たとえば、 10^{100000} とかと思えばよい。無限ではないが、とても大きな有限の数。

(数学的不都合はとりあえず問題になるまで考えない)

ここで少し定義

① $N \times N$ の "ピクセル" 毎に 関数 $\psi_{ij}(x, y)$ を定義する。



$$\psi_{ij}(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{ij ピクセル上} \\ & \text{(左図参照)} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

すると、任意の関数 $\psi(x, y) = \sum_{ij} \psi_{ij}(x, y) c_{ij}$

c_{ij} は実数とすると、とびとびに近似できる

このとき ψ_{ij} は、" $N \times N$ のピクセル空間の"基座"となることが直観的にわかる。 $\{\psi_{ij}\}$ のどれかが欠けていると、画像は正に表現できないからだ。

$\{\psi_{ij}(x, y)\}_{ij = (0,1), (1,2), (2,1), (1,1), (2,2), (3,1), \dots}$ のような関数の組を、完全系とよぶ。

関数の内積

量子力学では、 $\psi(x)$, $\phi(x)$ という状態が与えられたとき、

$$\int \psi^*(x) \phi(x) dx \quad \text{を内積と呼ぶ。}$$

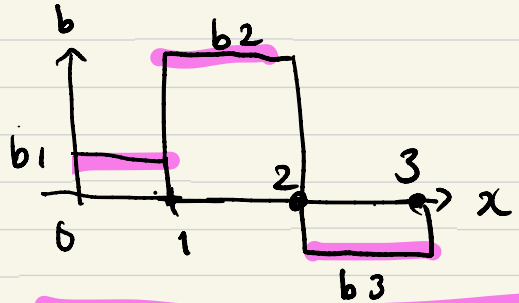
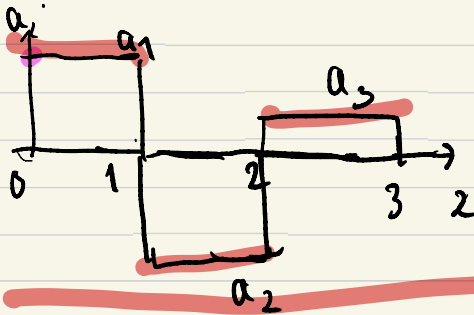
これを直観的に理解してみよう。

3次元ベクトル $a = (a_1, a_2, a_3)$ $b = (b_1, b_2, b_3)$

のとき、 $a \cdot b = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$

$$= \sum_i a_i b_i$$

である。これを添字を x 軸と思えば関数におきかえる。



$$a(x) = \begin{cases} a_1 & 0 \leq x < 1 \\ a_2 & 1 \leq x < 2 \\ a_3 & 2 \leq x < 3 \end{cases}$$

$$b(x) = \begin{cases} b_1 & 0 \leq x < 1 \\ b_2 & 1 \leq x < 2 \\ b_3 & 2 \leq x < 3 \end{cases}$$

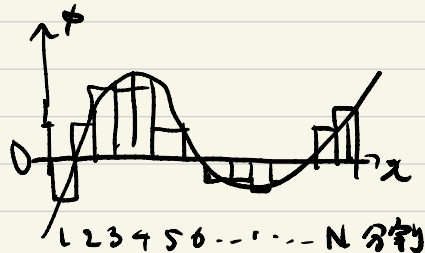
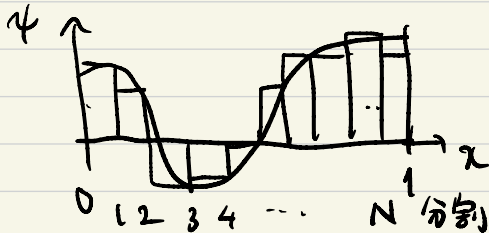
14:26 - 14:30

この2, n 関数の積を2重積分する。

$$\begin{aligned} \int_0^3 a(x) \cdot b(x) dx &= \int_0^1 a(x) \cdot b(x) dx + \int_1^2 a(x) b(x) dx + \int_2^3 a(x) b(x) dx \\ &= a_1 b_1 \int_0^1 dx + a_2 b_2 \int_1^2 dx + a_3 b_3 \int_2^3 dx \\ &= a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \quad \text{内積 と一致!} \end{aligned}$$

$[0, 1]$ 上の関数 $\psi(x), \phi(x)$ について、内積を $\int_0^1 \psi^*(x) \phi(x) dx$ で定義する、その意味を考える

(あとで、 $[0, 1]$ でなく $[-\infty, \infty]$ にした方が良いので、今は大ざかに考える)
まず、 $[0, 1]$ で ψ, ϕ を N 等分した区間に切りわけ、近似する。



したがって、

$$\psi(x) \approx \begin{cases} \psi(\frac{1}{N}) & 0 \leq x < \frac{1}{N} \\ \psi(\frac{2}{N}) & \frac{1}{N} \leq x < \frac{2}{N} \\ \vdots & \vdots \\ \psi(\frac{N-1}{N}) & \frac{N-1}{N} \leq x \leq 1 \end{cases}$$

$$\phi(x) \approx \begin{cases} \phi(\frac{1}{N}) & 0 \leq x < \frac{1}{N} \\ \phi(\frac{2}{N}) & \frac{1}{N} \leq x < \frac{2}{N} \\ \vdots & \vdots \\ \phi(\frac{N-1}{N}) & \frac{N-1}{N} \leq x \leq 1 \end{cases}$$

このように、 $\psi(\frac{1}{N}) \phi(\frac{1}{N}) \cdot \frac{1}{N} + \psi(\frac{2}{N}) \phi(\frac{2}{N}) \frac{1}{N} + \psi(\frac{3}{N}) \phi(\frac{3}{N}) \frac{1}{N} \dots$ を内積を考えると自然、一方 $\sum_{k=1}^N \psi(\frac{k}{N}) \cdot \phi(\frac{k}{N}) \frac{1}{N} \approx \int_0^1 \psi(x) \cdot \phi(x) dx$ となるので、
内積は積分するに定義するのが自然、とわかる。