駒場現代物理学(2023)第3,4回講義ノート

1　複素線形代数と量子力学

1.1　基本法則

I 系の状態は状態空間 $\mathcal{H}$ のノンゼロのベクトル $|\psi\rangle$ であらわされる。状態空間はエルミート内積付き複素線形空間である。

II 観測以外の操作(時間発展、回転等)はユニタリ演算子 U であらわされる。

III 観測量は $\mathcal{H}$ のエルミート演算子 A であらわされる。

IV 観測量 A の固有ベクトルを $|i\rangle$, $A|i\rangle = a_i|i\rangle$ とすると、状態 $|\psi\rangle$ において A を観測した際の結果は a_i のうちどれかであり、a_i が得られる確率は $|c_i|^2$ に比例する、ただし c_i は $|\psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle$ と展開したときの係数。

V 全系が部分系 A と部分系 B からなり、部分系がそれぞれ状態空間 $\mathcal{H}_A$, $\mathcal{H}_B$ を持つとき、全系の状態空間はテンソル積 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ である。

ニュートンの運動の三法則のように法則の名前、順番等が決まっていればよいのだが、決まっていないようである。ここでは僕の趣味で I から V にした[1]。

1.2　法則 I について: 複素線形代数の基本

状態空間 $\mathcal{H}$ は複素線形空間である。すなわち

$$|\psi\rangle\,,\ |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.2.1}$$

に対し

$$|\psi\rangle + |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.2.2}$$

がさだまり、

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.2.3}$$

と複素数 $a \in \mathbb{C}$ に対して

$$a\,|\psi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.2.4}$$

が定まっている[2]。

さらに状態空間にはエルミート内積が定まっている:

$$|\psi\rangle\,,\ |\phi\rangle \in \mathcal{H} \tag{1.2.5}$$

に対し

$$(|\psi\rangle\,, |\phi\rangle) \in \mathbb{C} \tag{1.2.6}$$

が定まっていて、二つ目の引数に対して複素線形

$$(|\psi\rangle\,, a\,|\phi\rangle) = a(|\psi\rangle\,, |\phi\rangle), \quad (|\psi\rangle\,, |\phi\rangle + |\phi'\rangle) = (|\psi\rangle\,, |\phi\rangle) + (|\psi\rangle\,, |\phi'\rangle) \tag{1.2.7}$$

[1]この枠組みが論理的必然かどうかについてはいろいろ研究がある。Kapustin さんの講演 http://www.theory.caltech.edu/~kapustin/QM_colloq.pdf 等参照。

[2]量子力学では慣習的に状態ベクトルを $|\psi\rangle$ などと書く。これを ket とよぶ。

さらに

$$\overline{(|\psi\rangle\,,|\phi\rangle)} = (|\phi\rangle\,,|\psi\rangle). \tag{1.2.8}$$

すると $(a\,|\psi\rangle\,,|\phi\rangle) = \bar{a}(|\psi\rangle\,,|\phi\rangle)$ も従う。

すると $(|\psi\rangle\,,|\psi\rangle)$ は実であるが、さらに

$$(|\psi\rangle\,,|\psi\rangle) \geq 0 \tag{1.2.9}$$

がいつもなりたち、これを $|\psi\rangle$ の長さの二乗と呼ぶことにする。さらに

$$(|\psi\rangle\,,|\psi\rangle) = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0 \tag{1.2.10}$$

が成り立つとする。[3]

しばらくは簡単のため有限次元の $\mathcal{H}$ を考えよう。n 次元とすると

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \longleftrightarrow (\psi_1, \cdots, \psi_n)^T \tag{1.2.11}$$

という縦ベクトルだと思える。こういうものを $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^n$ と書く。内積は

$$(|\psi\rangle\,,|\phi\rangle) = \bar{\psi}_1\phi_1 + \bar{\psi}_2\phi_2 + \bar{\psi}_3\phi_3 + \cdots + \bar{\psi}_n\phi_n. \tag{1.2.12}$$

これらが上記関係式をみたすのは確認できる。

1.3 線形変換、演算子、作用素

変換 $|\psi\rangle \mapsto A\,|\psi\rangle$ が線形であるとは

$$A(|\psi\rangle + |\psi'\rangle) = A\,|\psi\rangle + A\,|\psi'\rangle\,, \qquad A(a\,|\psi\rangle) = aA(|\psi\rangle) \tag{1.3.1}$$

を満たすこと。

複素線形変換は行列の掛け算である: $|\psi\rangle \mapsto |\phi\rangle = A\,|\psi\rangle$ は

$$\phi_i = \sum_{j=1}^{n} (A_{ij})\psi_j \tag{1.3.2}$$

ということ。

線形変換 A に対してそのエルミート共役 $A^\dagger$ は

$$(A\,|\psi\rangle\,,|\phi\rangle) = (|\psi\rangle\,,A^\dagger\,|\phi\rangle) \tag{1.3.3}$$

で定める。成分でかけば

$$(A^\dagger)_{ij} = \overline{A_{ji}}. \tag{1.3.4}$$

これより

$$\overline{(|\psi\rangle\,,A\,|\phi\rangle)} = (|\phi\rangle\,,A^\dagger\,|\psi\rangle) \tag{1.3.5}$$

となる。勝手な ψ に対して

$$\overline{(|\psi\rangle\,,A\,|\psi\rangle)} = (|\psi\rangle\,,B\,|\psi\rangle) \tag{1.3.6}$$

を満たすような B は $A^\dagger$ に限るので、これで定義してもよい。

線形変換のことを operator という。日本語訳は理論物理では演算子、数学では作用素ということが多い。

[3] 量子力学では $(|\psi\rangle\,,|\phi\rangle)$ のことをしばしば $\langle\psi|\phi\rangle$ と書き、$\langle\psi|$ の部分を bra という。$\langle\psi|\phi\rangle$ とあわせて bra(c)ket となるという Dirac による駄洒落らしい。複素線形代数に慣れてしまえばこの記法は便利だが、複素線形代数も知らない時点だとかえってややこしいと思うので、今回の講義では bra は使わないことにする。また物理では複素共役は $\bar{z}$ のかわりに z^* と書くことがしばしばあるが今回の講義では $\bar{z}$ を使うことにする。

1.4　法則 II について: ユニタリ変換

$\mathcal{H}$ の複素線形変換 $|\psi\rangle \mapsto U|\psi\rangle$ で長さを保つ、すなわち

$$(U|\psi\rangle, U|\psi\rangle) = (\psi, \psi) \tag{1.4.1}$$

をみたすものをユニタリ変換という。

量子力学において観測以外の操作(t だけ時間をすすめる、空間を z 軸回り θ だけ回転させる、時間反転させる、など)はユニタリである。

1.5　法則 III について: エルミート行列

量子力学において観測量 (observable) とは状態空間 $\mathcal{H}$ のエルミート演算子 A のこと。観測量というのは、エネルギーだとか角運動量などのこと。無限次元だとエルミートという概念は自己共役、対称、エルミートという三つの微妙に異なる概念にわかれる。有限次元だとそういう問題はない。 A がエルミートとは $A = A^\dagger$ であること。

1.6　法則 IV について: エルミート行列の固有値分解

エルミート演算子 A であらわされる観測量を、状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ で観測したときにどうなるかというルール。

$A|i\rangle = a_i|i\rangle$ となり $|i\rangle \neq 0$ であるようなとき、a_i を固有値、$|i\rangle$ を固有ベクトルもしくは固有状態という。

> **事実/定理 1.6.1** $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^n$ に作用するエルミート行列 Aは n 個の固有ベクトル $|1\rangle$, $\ldots$, $|n\rangle$ で互いに直交し長さが 1 のものが取れる。その固有値はすべて実数である。

証明も勉強になるが、線型代数の講義ではないので信じることにする。

さて、観測量 A を状態 $|\psi\rangle$ で測ったときどうなるか。 A の固有状態、固有値を $|i\rangle, a_i$ と書く。 $|i\rangle$ は長さ 1 で互いに直交するように取っておく。すると $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i |i\rangle \tag{1.6.1}$$

と展開できる。 c_i を求めるには

$$(|i\rangle, \psi) = (|i\rangle, \sum_j c_j |j\rangle) = \sum_j c_j(|i\rangle, |j\rangle) = c_i \tag{1.6.2}$$

を使えば良い。また同様に展開すれば

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = \sum |c_i|^2 \tag{1.6.3}$$

である。簡単のため a_i は全て異なるとする。

- 観測で得られる値は a_i のうちのどれかである。
- a_i が得られる確率は $|c_i|^2$ に比例する。

特に、固有状態 $|i\rangle$ で A を観測すると 100% の確率で a_i が測定される。もっと一般には、a_i が得られる確率は

$$\frac{|c_i|^2}{\sum_j |c_j|^2} = \frac{|(|i\rangle, |\psi\rangle)|^2}{|(|\psi\rangle, |\psi\rangle)|^2} \tag{1.6.4}$$

で与えられる。

勝手なノンゼロの複素数 z に対して、$|\psi\rangle$ と $z|\psi\rangle$ は上式の分子分母に同じ係数 $|z|^2$ が掛かるだけで同じ観測確率をあたえる。これは勝手な観測量 A について正しい。そこで、互いに複素数倍の状態ベクトルは「物理的に同じ」であるとよくいわれる。(しかし、勿論 $|\phi\rangle + |\psi\rangle$ と $|\phi\rangle + z|\psi\rangle$ は異なることに注意。)

また、上式の分母は面倒くさいので、しばしば状態 $|\psi\rangle$ の長さは 1 であるように取っておく。それでも絶対値 1 の複素数 c に対し $|\psi\rangle$ と $c|\psi\rangle$ は両方とも長さ 1 でしかも物理的に同等である。

また、上のルールから観測量 A の長さ 1 の状態 $|\psi\rangle$ における期待値は

$$\sum_i a_i|c_i|^2 = \sum_i a_i|(|i\rangle, |\psi\rangle)|^2 \tag{1.6.5}$$

であるが、これは $(|\psi\rangle, A|\psi\rangle)$ と等しい、なぜなら

$$(|\psi\rangle, A|\psi\rangle) = (\sum_i c_i|i\rangle, A\sum_j c_j|j\rangle) = \sum_{i,j} \overline{c_i} a_j c_j (|i\rangle, |j\rangle) = \sum_i a_i|c_i|^2. \tag{1.6.6}$$

だから上記の補題で最小化していたものは観測量 A の期待値だった。期待値の最小値は最小の固有値であるということ。

エルミート行列の固有ベクトルの性質というのと量子力学の確率解釈が密接に関係しているというのに注意。

1.7 法則 V

この法則は複合系をつくる際の法則。次回以降に扱う。

2 一番簡単な量子力学系

一番簡単な状態空間は $\mathcal{H} = \mathbb{C}^1$ である。しかし二つの状態ベクトル $|\psi\rangle$,$|\psi'\rangle$ が互いに複素数倍

$$|\psi'\rangle = z|\psi\rangle \tag{2.0.1}$$

のときは物理的に同等であった。勝手な $\mathbb{C}^1$ のベクトルは (1) の複素数倍なので、ほんとうに一コしか状態がない。勝手な1×1 のユニタリ変換は複素数倍なので実質なにもしない。勝手な1×1 のエルミート行列は単に実数 a で、ベクトル (1) はその固有値で、測定するとかならず a が得られる。だから面白いことはなにも起きない。

3 二番めに簡単な量子力学系

次に二番めに簡単な状態空間として $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^2$ という二次元の複素ベクトル空間の場合を考える。量子力学の講義で歴史的に進む場合は一粒子の運動を扱うことが多いが、その場合は状態空間は無限次元になって、出てくる演算子は微分演算子等になって難しい。でも二

次元の複素ベクトル空間だと行列ですむので比較的簡単。量子力学の本当に面白い所は無限次元の状態空間が出てくるからだという人も(お年の人には)多いけれども、二次元(や有限次元)の複素ベクトル空間でも十分面白いことが沢山おこる。歴史的には量子力学は古典力学を量子化して得られ、その場合は無限次元の状態空間が出がちであったので、こういう有限次元の状態空間は驚きであった。はじめてこれが出て来たのは電子のスピン自由度に関してだが、それ以外にもいろんな系で出てくる。現在では量子情報で qubit と呼ばれてとても重要。

3.1 観測量

どのような観測量があるか考える。観測量は 2×2 のエルミート行列 A_{ij} である。条件は $A_{ij}=\overline{A_{ji}}$ だから、行列としてあからさまに書くと

$$A=\begin{pmatrix} a & z \\ \bar{z} & b \end{pmatrix} \tag{3.1.1}$$

ただし a, b は実数、z は複素数、という形である。これの固有ベクトルは何か、固有値はなにかを計算すると、 A を観測したときにどの値がどの確率で得られるかがわかる。 A はまた p, a, b, c を実数として

$$A=p\mathrm{id}+a\sigma_X+b\sigma_Y+c\sigma_Z \tag{3.1.2}$$

とも展開できる、ただし

$$\mathrm{id}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{3.1.3}$$

は単位行列で、

$$\sigma_X=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_Y=\begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_Z=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3.1.4}$$

ととる。$\sigma_{X,Y,Z}$ はパウリ行列と呼ばれる[4]。

σ_Z の固有ベクトルは明らかに

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\qquad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.1.5}$$

で、それぞれ固有値は $+1$, -1 である。

σ_X の固有値も ± 1 で、固有ベクトルはそれぞれ

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},\qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{3.1.6}$$

である。

[4] 2×2 のエルミート行列で単位行列でないものを書き下しただけで物理の歴史に名前が残るのだから昔は物理は簡単だった。また、通常は $\sigma_y := -\sigma_Y$ を使うが、以下にあらわれる計算で負号がなるべくあらわれないように通常と異なる定義をつかった。

練習問題 3.1.1 σ_Y の固有値と固有ベクトルをもとめよ。

この二状態系を電子のスピン角運動量を記述していると思う場合は、角運動量演算子の X, Y, Z 成分はそれぞれ

$$\frac{\hbar}{2}\sigma_X, \frac{\hbar}{2}\sigma_Y, \frac{\hbar}{2}\sigma_Z, \tag{3.1.7}$$

であることが知られている。$\hbar = h/(2\pi)$ は reduced Planck 定数という、角運動量の次元をもった定数:

$$h = 6.62607015 \times 10^{-34}\mathrm{kg} \cdot \mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}^{-1}. \tag{3.1.8}$$

さて状態

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix} \tag{3.1.9}$$

ただし $|z|^2 + |w|^2 = 1$ で σ_Z を測定すると、確率 $|z|^2$ で $+1$ が得られ、確率 $|w|^2$ で -1 が得られ、期待値は $(|\psi\rangle, \sigma_Z |\psi\rangle) = |z|^2 - |w|^2$ である。

練習問題 3.1.2 σ_Y や σ_X を測定したばあいにどの値が得られる確率がいくつか、期待値はいくつか、計算せよ。

同様にして

$$\Big((|\psi\rangle, \sigma_X |\psi\rangle), (|\psi\rangle, \sigma_Y |\psi\rangle), (|\psi\rangle, \sigma_Z |\psi\rangle)\Big) = (2\,\mathrm{Re}\, z\bar{w}, 2\,\mathrm{Im}\, z\bar{w}, |z|^2 - |w|^2) \tag{3.1.10}$$

である。これは実質前回の講義でやった Hopf ファイブレーションで、単位球面上にあるのだった。

3.2 「物理的に同等」な状態の分類; Bloch 球; Hopf fibration

反省しよう。$\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^2 \simeq \mathbb{H}$ において物理的に同等な波動関数をどう分類するかを考えたい。一般に $|\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$ が非ゼロの複素数 c に対して

$$|\psi'\rangle = c\,|\psi\rangle \tag{3.2.1}$$

ならば物理的に同等というのだった。確率解釈のためには長さ 1, $(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = 1$ にしておくのは自然である。それでも (3.2.1) で $|c| = 1$ な場合は長さ 1 なままベクトルを変化させる。この場合「物理的に同等」である。操作 (3.2.1) をしても (3.1.10) での行き先はかわらない。すなわち、

事実/定理 3.2.1 Qubit の状態空間 $\mathcal{H}$ で長さ 1 に正規化した状態 $|\psi\rangle$ たちは三次元球面 S^3 をなす。それらの間で絶対値 1 の複素数 c で関連付く物理的に同等な状態たちを (3.2.1) で同一視したものは、角運動量演算子の期待値 (3.1.10) のなす二次元球面 S^2 になる。

ということである。この S^2 は物理では Bloch 球とよばれる。

S^2 の一点 p を固定して、そこにうつる S^3 の点全体をかんがえると、それは$|\psi\rangle \in S^3$ をひとつ固定すれば $|c| = 1$ として $c|\psi\rangle$ たちのなす S^1 である。この状況を、S^3 は S^2 の各点に S^1 がファイバーしている、といい、

$$S^1 \to S^3 \to S^2 \tag{3.2.2}$$

と書くのだった。

4　回転の二状態系への作用について

4.1　Z 軸周りの回転

Z 軸まわりの θ だけの回転は二状態系にどう作用させればよいだろうか。状態 $|\psi\rangle = (z,w)^T$ に対して X, Y, Z 方向の角運動量の期待値は (3.1.10) で与えられたので、これを適切に回転させたい。天下りではあるが

$$\begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix} \mapsto R_Z(\theta) \begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} e^{\mathrm{i}\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-\mathrm{i}\theta/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\mathrm{i}\theta/2} z \\ e^{-\mathrm{i}\theta/2} w \end{pmatrix} \tag{4.1.1}$$

を考えると

$$(2\operatorname{Re} z\bar{w}, 2\operatorname{Im} z\bar{w}, |z|^2 - |w|^2) \mapsto (2\operatorname{Re} e^{\mathrm{i}\theta} z\bar{w}, 2\operatorname{Im} e^{\mathrm{i}\theta} z\bar{w}, |z|^2 - |w|^2) \tag{4.1.2}$$

となるので、XY 平面内で θ 回転させたことになる。

ここで不思議なことがおこる: $\theta = 2\pi$ だけ回転させると、勿論 (3.1.10) はもとにもどる。しかし、$|\psi\rangle$ 自体は

$$\begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix} \mapsto - \begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix} \tag{4.1.3}$$

となって元に戻らない。(一粒子系だと $|\psi\rangle \sim -|\psi\rangle$ は「物理的に同じ」だから戻っていると言えなくもないが、二粒子系で片方の粒子だけ 2π まわすとこの -1 倍は観測にかかりうる。) 4π 回転させてはじめてもとにもどる。

4.2　一般のばあい

これまで Z 軸まわりの回転を考えたが、一般には三次元の極座標で単位球の (ϕ, ψ) の方向を軸として θ だけ回す作用がある。これは二状態系にはどう作用するだろうか?

天下りであるが、$\mathbb{C}^2$ に作用するユニタリ行列

$$U = \begin{pmatrix} u & u' \\ v & v' \end{pmatrix}, \qquad UU^\dagger = \mathrm{id} \tag{4.2.1}$$

を考える。条件 (4.2.1) は

$$|u|^2 + |v|^2 = |u'|^2 + |v'|^2 = 1, \qquad u\bar{u}' + v\bar{v}' = 0 \tag{4.2.2}$$

だから u, v, u', v' に 8 パラメタあるところに 4 条件を課し、残り 4 パラメタある。この時点で $(\det U)\overline{\det U} = \det U \det U' = \det UU' = 1$ であるので $\det U = e^{it}$である。さらに

$$\det U = uv' - u'v = 1 \tag{4.2.3}$$

を要求すると残り 3 パラメタある。$|u|^2 + |v|^2 = 1$ の解は実 3 パラメタだから u', v' はほとんど決まっているはずで、実際

$$U = \begin{pmatrix} u & -\bar{v} \\ v & \bar{u} \end{pmatrix} \tag{4.2.4}$$

と取れる。

さて、この U によって状態 $|\psi\rangle = (z,w)^T$ を

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle = \begin{pmatrix} u & -\bar{v} \\ v & \bar{u} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix} \tag{4.2.5}$$

にうつすことを考える。これによって $\sigma_{X,Y,Z}$ の期待値はどうかわるか? そこで一般に行列

$$W := a\sigma_X + b\sigma_Y + c\sigma_Z = \begin{pmatrix} c & a+ib \\ a-ib & -c \end{pmatrix} \tag{4.2.6}$$

を考える。これは 2×2 エルミート行列でトレースがゼロなものの一般形である。すると

$$(|\psi'\rangle, W|\psi'\rangle) = (U|\psi\rangle, WU|\psi\rangle) = (|\psi\rangle, (U^\dagger WU)|\psi\rangle) \tag{4.2.7}$$

であるので

$$|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle := U|\psi\rangle \tag{4.2.8}$$

は

$$W \mapsto W' := U^\dagger WU \tag{4.2.9}$$

を引き起こす。W' もエルミートでトレースがゼロであるから、

$$W' = a'\sigma_X + b'\sigma_Y + c'\sigma_Z \tag{4.2.10}$$

と展開でき、

$$(a,b,c)^T \mapsto (a',b',c')^T \tag{4.2.11}$$

は線形変換である。

練習問題 4.2.1 この線形変換を 3×3 行列としてあからさまに u, v を用いて書け。

また、

$$\det W = -a^2 - b^2 - c^2 \tag{4.2.12}$$

は長さの二乗にマイナスをつけたものであることに注意すると

$$\det W' = \det U^\dagger WU = \det U^\dagger \det W \det U = \det W \tag{4.2.13}$$

なので

$$-a^2 - b^2 - c^2 = -(a')^2 - (b')^2 - (c')^2 \tag{4.2.14}$$

となって、三次元ベクトルの長さをたもつ。

これにより、(4.2.4) による (4.2.5) が三次元の回転を引き起こすことがわかった。(4.2.4) には実三パラメタ含まれており、三次元の回転も軸を指定するのに二パラメタ、回転角を指定するのに一パラメタ必要だから、「ほぼ」 1:1 の対応であろうと期待できる。

しかし、U がひきおこす変換と $-U$ が引き起こす変換はおなじである:

$$(-U)^\dagger W(-U) = U^\dagger WU. \tag{4.2.15}$$

これより

$$\text{三次元の回転操作全体} \simeq \frac{\text{(4.2.4) の形のユニタリ行列}}{U \sim -U} \simeq \frac{S^3}{\text{対蹠点の同一視}} \tag{4.2.16}$$

ということがわかった。ここで (4.2.4) において $|u|^2+|v|^2=1$ は S^3 を定めることを用いた。

いいかえれば

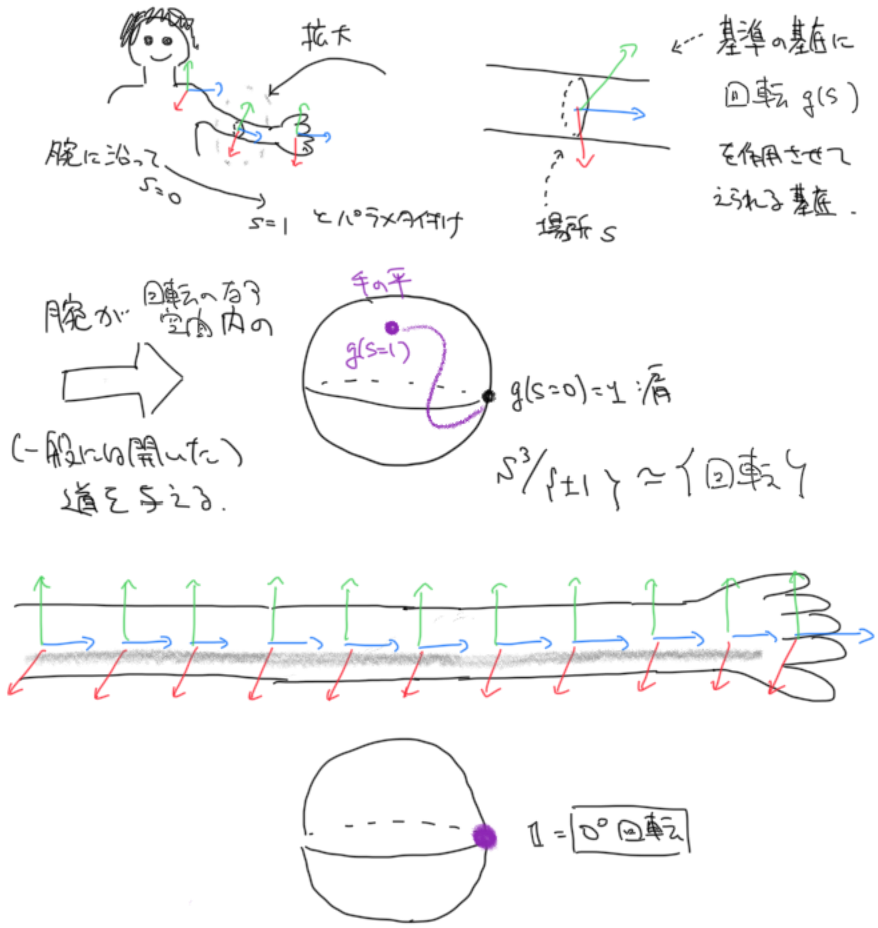
$$S^3 \to \text{三次元の回転操作全体} \tag{4.2.17}$$

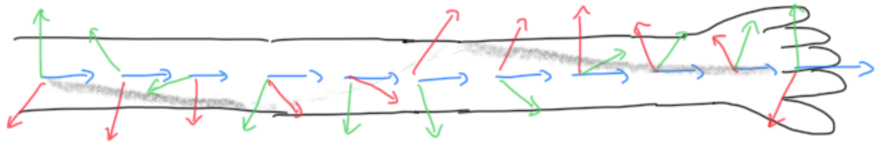
という写像は 2 : 1 であり、その中で

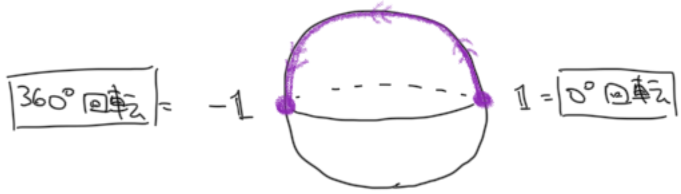
$$\{\begin{pmatrix} e^{i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta/2} \end{pmatrix}\} \to \{Z \text{ 軸まわりの } \theta \text{ 回転 }\} \tag{4.2.18}$$

となっているため、三次元での 2π 回転は S^3 の中ではもとの位置には戻らず、4π 回転を必要とするのである。

これを体で図示すると以下のようになる:







動画は https://www.youtube.com/watch?v=zAHSOkY7hlo を見よ。

5　再度法則 II と法則 III について

5.1　一般論

法則 II では、観測以外の時間発展、回転などの操作はユニタリ変換 U であるといい、法則 III では、観測量はエルミート行列 A であると言った。

一般に行列 A に対し、

$$e^A := 1 + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \cdots \tag{5.1.1}$$

と定める。 A と B が交換しないと一般に $e^{A+B} \neq e^A e^B$ であるが、 A と B が交換すれば $e^{A+B} = e^A e^B$ は以前と同様に示せる。

A がエルミートのときに i は虚数単位、 s を実のパラメタとして $e^{\mathrm{i}sA}$ を考える。これはユニタリである。なぜなら

$$(e^{\mathrm{i}sA}\psi, e^{\mathrm{i}sA}\psi) = (\psi, e^{-\mathrm{i}sA}e^{\mathrm{i}sA}\psi) = (\psi, e^{-\mathrm{i}sA+\mathrm{i}sA}\psi) = (\psi, \psi). \tag{5.1.2}$$

また逆に勝手なユニタリ行列 U は何かエルミート行列をもちいて $e^{\mathrm{i}A}$ と掛ける。

具体的には、固有ベクトル $|i\rangle$ を互いに直交して長さが 1 になるようにとって、固有値を a_i と書き、さらに一般のベクトル $|\psi\rangle$ を $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$ と展開すると、

$$e^{\mathrm{i}sA} |\psi\rangle = \sum_i e^{\mathrm{i}sa_i} c_i |i\rangle\,. \tag{5.1.3}$$

まとめると、ある(観測以外の)操作がユニタリ U であらわされると、対応する観測量 A が $U = e^{\mathrm{i}A}$ として存在する。

5.2　具体例

たとえば、角度 θ だけ回転させる、という操作 $R(\theta)$ はユニタリ演算子だが、エルミート演算子 $\underline{L}$ をもちいて

$$R(t) = e^{\mathrm{i}\theta \underline{L}} \tag{5.2.1}$$

指数関数の肩は無次元、すなわち単位を持たない。角度 θ も無次元。だから $\underline{L}$ も無次元。二状態系のばあいに Z 軸まわりの回転の場合は

$$R(\theta) = e^{\mathrm{i}\theta(\sigma_Z)/2} \tag{5.2.2}$$

だったので、$\underline{L} = \sigma_Z/2$.

> **練習問題 5.2.1** 一般に単位球面上の点 (a, b, c) に対して原点とそれをつなぐ軸のまわりの θ 回転は二状態系に対しては $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(a\sigma_X+b\sigma_Y+c\sigma_Z)}$ で与えられる。これを確認せよ。

すでに述べたように、一般に $\theta = 4\pi$ すなわち $720°$ まわすともとに戻るはずである。よって $e^{4\pi\mathrm{i}\underline{L}} = 1$。よって $\underline{L}$ の固有値は半整数、すなわち整数か整数割る 2 である。

古典極限をとると $\underline{L}$ は角運動量に対応することがしられている。角運動量 L は単位 $\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$ を持つ。

$$L = \hbar\underline{L} \tag{5.2.3}$$

とした換算係数がプランク定数 $\hbar$ で

$$2\pi\hbar = 6.62607015\cdot 10^{-34}\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1} \tag{5.2.4}$$

となるように kg, m, s が定義されている。よって、量子力学的には角運動量は半整数 $\times\hbar$ である。

また、時間 t だけすすめる、という操作 $U(t)$ もユニタリ演算子で、エルミート演算子 $\underline{H}$ を用いて

$$U(t) = e^{\mathrm{i}t\underline{H}} \tag{5.2.5}$$

とかける。指数関数の肩は無次元で、t は s の単位をもつので、 $\underline{H}$ は s^{-1} (周波数)の単位を自然に持つ。

そもそも s の定義は、セシウム 133 原子の $\underline{H}$ の特定の二つの固有状態 $\underline{H}|1\rangle = \omega_1|1\rangle$, $H|2\rangle = \omega_2|2\rangle$ に対して

$$\omega_1 - \omega_2 = 2\pi\cdot 9192631770\ \mathrm{s}^{-1} \tag{5.2.6}$$

となるように定められている。 $H = \hbar\underline{H}$ はエネルギーの次元をもち、古典極限をとると系のエネルギーに対応する。

$$U(t) = e^{\mathrm{i}tH/\hbar} \tag{5.2.7}$$

ということで、これをシュレーディンガー方程式という。

おまけだが、m の定義は光速が

$$c = 299792458\mathrm{m/s} \tag{5.2.8}$$

となるようにされている。

> **練習問題 5.2.2** kg, s, m の定義の歴史的変遷について調べてみよ。