Physics Lab. 2023 量子班

著者：前田陵汰

量子論の基本構成とその準備

1　はじめに

ベクトルや行列といった線形代数の用語を導入し、それらを用いて量子論がどのように構成されているかを簡単に解説します。

2　複素ベクトル

2.1　複素数

$i^2 = -1$ となるような数 i を虚数単位と呼びます。実数 a, b を用いて $a + bi$ のように表せる数を複素数といいます。

2.2　ベクトル

いくつかの '数' をひとまとめにしたものをベクトルといいます。たとえば、1 と 2 の二つをまとめて

$$(1, 2) \quad \text{あるいは} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

のように書いたものです。n 個の '数' の組になっているとき、それを n 次元ベクトルと呼びます。ここでいう '数' には整数や実数などが当てはまりますが、量子論では複素数が用いられます。

3　行列と線形変換

3.1　行列

数を縦に m 個、横に n 個並べたものを m 行 n 列の行列 ($m \times n$ 行列) といいます。たとえば

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}$$

は 2 行 3 列の行列です。ここでは (量子論で使われるものとして) 行と列の数が等しい行列を考えていきます。

3.2　行列とベクトルの積

$n \times n$ 行列と n 次元ベクトルの積を次式で定義します。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n \end{pmatrix}$$

積をとった結果は n 次元ベクトルとなります。たとえば

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot 5 + 2 \cdot 6 \\ 3 \cdot 5 + 4 \cdot 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 17 \\ 39 \end{pmatrix}$$

といった具合です。

3.3　線形変換

上記の積によって、行列はあるベクトルを別のベクトルに "変換" することが分かります。この変換は線形性という性質を持っているので "線形変換" と呼ばれています。

3.4　行列の固有値

行列の線形変換によって、一般にベクトルはまったく異なるベクトルに変わってしまいます。しかし、変換後のベクトルが元のベクトルの定数倍になるだけという特別な場合があります (ここで定数倍とは、全ての成分に同じ定数をかけることを指します)。このようなベクトルを行列の固有ベクトルといい、定数を固有値と呼びます。たとえば $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ という行列は、固有ベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ と固有値 1、それから固有ベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ と固有値 -1 を持ちます。

4　量子論の構成

4.1　古典論の破綻

古典論では、全ての物理量 (位置や運動量、エネルギーなど) は一意に決まっており、それを計算あるいは予測することを理論の目的としています。しかし、ミクロな世界ではそもそも物理量が確定しておらず、測定値の確率分布のみが定まっていることが実験的に確かめられています。古典論ではこの確率分布を計算することができません。

4.2　量子論の構成

量子論 (のうち、演算子形式と呼ばれる形式) では、以下を要請 (理論の出発点) としています [1]。

- 物理量は複素数の行列で表す。
- 物理量の測定値は、行列の固有値 (実数) のいずれかとなる。
- 系の状態は複素数のベクトルで表現する。
- 物理量の測定値の確率分布は、ベクトルの成分の絶対値の 2 乗で与えられる。

このように量子論は、古典論で計算できなかった確率分布を計算できるように作られています。

参考文献

[1] 清水明. "新版 量子論の基礎" サイエンス社 (2004).