量子力学3 第二回講義まとめ

200910908 大島 洋音

平成25年4月19日

1 量子力学における対称性

1.1 並進演算子

量子力学で扱う対称性には様々な種類があるが, まずは波動関数の並進について考えてみる. 一般的に関数の並進とは任意の関数 $f(x)$ に対して, 次の変換を施すことである.

$$f'(x) \stackrel{\text{def.}}{=} f(x-a) \tag{1}$$

この関数 $f'(x)$ は文字通り $f(x)$ の関数を x の正方向へ a だけ並進させた関数である. 今仮に $f(x)$ がテイラー展開で展開可能な関数であったとすると,$f'(x)$ は次のように展開できる.

$$f'(x) = f(x) + (-a)\frac{d}{dx}f(x) + (-a)^2\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}f(x) + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}(-a)^n\frac{1}{n!}\frac{d^n}{dx^2}f(x) \tag{2}$$

ここで, 各項の $f(x)$ の係数が, 演算子を含んではいるが指数関数 e^X のテイラー展開の式に酷似している. そこでまず,e^X を $X=0$ で展開したものを思い出すと

$$e^X = 1 + X + \frac{1}{2!}X^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}X^n \tag{3}$$

対応を見比べれば明らかに $X = -a\frac{d}{dx}$ と置いた場合である. 即ち一次元における並進の演算子とは, 指数関数を用いて次の形で表される.

$$e^{-a\frac{d}{dx}} \tag{4}$$

もし $f(x)$ が $f(x,y)$ など多変数関数だったとしても, 微分を並進させたい変数の偏微分に変えれば同様に説明することが出来る. 即ち,x 方向の並進演算子は

$$e^{-a\frac{\partial}{\partial x}} \tag{5}$$

さて, 量子力学において, 位置変数による偏微分は運動量に置き換わるのであった. つまり, 偏微分を次の関係式を用いて置き換えることを行う.

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = p_x \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \frac{ip_x}{\hbar} \tag{6}$$

この置き換えを行えば,x 方向の並進演算子は

$$e^{-iap_x/\hbar} \tag{7}$$

量子力学において，運動量を指数関数の肩に乗せると併進の演算子を与えることがわかる．ちなみに，この並進演算子はユニタリ変換である．これは，エルミート共役な演算子を取ってくることで容易に確かめられる．なお，次の式で運動量演算子がエルミート演算子であることを用いた．

$$(e^{-iap_x/\hbar})^\dagger = e^{+iap_x^\dagger/\hbar} = e^{iap_x/\hbar} \tag{8}$$

$$(e^{-iap_x/\hbar})^\dagger e^{-iap_x/\hbar} = e^0 = 1 \tag{9}$$

1.2 ユニタリ変換と不変性

さて，並進演算子がユニタリ変換ということはわかったが，ではユニタリ変換にはどのような性質があるだろうか．いまここで，任意のユニタリ変換 U を定義する．ユニタリ変換の定義より，次の関係式が成り立っている．

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1 \tag{10}$$

いま，任意のケットベクトル $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$ を考える．この 2 つのベクトルはそれぞれユニタリ変換 U によって次の変換を受ける

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle, \quad |\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle \tag{11}$$

この二つのベクトルの内積について

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|U^\dagger U\varphi\rangle = (U|\psi\rangle)^\dagger U|\varphi\rangle = (|\psi'\rangle)|\varphi'\rangle = \langle\psi'|\varphi'\rangle \tag{12}$$

つまり，ユニタリ変換で二つのベクトルの内積は不変量となる．先ほどの並進演算子もユニタリ変換のため，任意のベクトル内積を不変に保つ．

1.3 ユニタリ変換と演算子

先ほどはベクトル内積が不変であることを示したが，演算子の場合はどうなるだろうか．いま，あるエルミート演算子 $\hat{O}$ があり，その観測値 (期待値) の変換則を求めてみる．

変換前の波動関数の状態での期待値 $\langle\hat{O}\rangle$ は

$$\langle\hat{O}\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle \tag{13}$$

この式を少し変形してユニタリ変換により変換された波動関数を用いて表すと

$$\langle\hat{O}\rangle = \langle\psi|U^\dagger U\hat{O}U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\psi'|U\hat{O}U^\dagger|\psi'\rangle \tag{14}$$

この時，次の変換則が成り立つならば，物理量 $\hat{O}$ は変換により不変である．

$$\langle\hat{O}'\rangle = U\hat{O}U^\dagger \tag{15}$$

$\hat{O}$ が不変なユニタリ変換を考えるために，先ほどの並進演算子を拡張する．いま，次の二つの量を考える．

$$\begin{cases} \lambda = \lambda^\dagger & \text{:ある物理量} \\ G = G^\dagger & \text{:変換の母関数} \end{cases} \tag{16}$$

二つの量により表されるユニタリ変換は

$$U = e^{i\lambda G/\hbar} \tag{17}$$

(17) のエルミート共役をとれば,(16) より

$$U^\dagger = e^{-i\lambda^\dagger G^\dagger/\hbar} = e^{-i\lambda G/\hbar} \tag{18}$$

特に, λ が微小変換 $\delta\lambda$ のとき, ユニタリ変換は次の式で表される.

$$\begin{cases} U &= 1 + i\delta\lambda G/\hbar + o(\delta\lambda^2) \\ U\dagger &= 1 - i\delta\lambda G/\hbar + o(\delta\lambda^2) \end{cases} \tag{19}$$

微小変換なので,$o(\delta\lambda^2)$ の項は素早く 0 に収束し, 演算子 $\hat{O}$ がユニタリ変換 U により変換された $\hat{O}'$ は (15) により与えられるので

$$\begin{aligned} \hat{O}' &= \left(1 + \frac{i\delta\lambda G}{\hbar} + o(\delta\lambda^2)\right) \hat{O} \left(1 - \frac{i\delta\lambda G}{\hbar} + o(\delta\lambda^2)\right) \\ &= \hat{O} + \frac{i\delta\lambda}{\hbar}(GO - OG) + o(\delta\lambda^2) \end{aligned} \tag{20}$$

$\hat{O}, \hat{O}'$ の差を取ると, 微小な変換における物理量 $\hat{O}$ の変分 $\delta\hat{O}$ が得られる.

$$\delta\hat{O} \overset{\text{def.}}{=} \hat{O}' - \hat{O} = \frac{i\delta\lambda}{\hbar}[G, O] \tag{21}$$

$\hat{O}$ がユニタリ変換で不変であるためには, 母関数 G との交換が 0. 逆に, 交換が成り立つならば, 物理量 $\hat{O}$ はユニタリ変換で不変に保たれる.

先ほどの例を参考にすると,$G \to p_x, \lambda \to -a$ であるので微小変換におけるユニタリ変換は

$$U = 1 - \frac{i\delta a}{\hbar} + o(\delta a^2) \tag{22}$$

まず運動量演算子との交換関係は,p_y, p_z は偏微分演算子が互いに交換し合うことから,p_x は自身との交換であることから, 全てと交換する

$$[p_x, p_y] = -i\hbar^2 [\partial_x, \partial_y] = 0 \tag{23}$$

$$[p_x, p_z] = -i\hbar^2 [\partial_x, \partial_y] = 0 \tag{24}$$

$$[p_x, p_x] = 0 \tag{25}$$

次に, 運動量演算子の二乗との交換関係だが, 次の関係式を使うとよい

$$[AB, C] = B[A, C] + [A, B]C \tag{26}$$

すなわち,p_x^2, p_y^2, p_z^2 と p_x との交換関係は

$$[p_x^2, p_x] = p_x[p_x, p_x] + [p_x, p_x]p_x = 0 \tag{27}$$

$$[p_y^2, p_x] = p_y[p_y, p_x] + [p_y, p_x]p_y = 0 \tag{28}$$

$$[p_z^2, p_x] = p_z[p_z, p_x] + [p_z, p_x]p_z = 0 \tag{29}$$

ところで, 運動エネルギーは運動量の二乗和で表される

$$K=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2) \tag{30}$$

すなわち, 運動エネルギー K も運動量の二乗がそれぞれ p_x と交換関係を持つため, 並進変換において運動エネルギーは不変となる

$$[K,p_x]=0 \tag{31}$$

1.4 ハミルトニアンとの交換関係と保存量

あるユニタリ変換の母関数 G が時間に依存しないハミルトニアン H と交換関係を持っていたとする. すなわち

$$[G,H]=0 \tag{32}$$

ところで, 時間に依存しないハミルトニアンを持つ場合, 波動関数は時刻 $t=0$ での初期状態と時間発展による項の積に分解することができた

$$|\psi(t)\rangle=e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle \tag{33}$$

この波動関数を用いて,G の観測値を求めると

$$\langle G\rangle=\langle\psi(0)|e^{iHt/\hbar}Ge^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle \tag{34}$$

$\langle G\rangle$ を時間微分すると

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle G\rangle&=\langle\psi(0)|e^{iHt/\hbar}\frac{iH}{\hbar}Ge^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle-\langle\psi(0)|e^{iHt/\hbar}G\frac{iH}{\hbar}e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle\\&=-\frac{it}{\hbar}\langle\psi(0)|[G,H]|\psi(0)\rangle\end{aligned} \tag{35}$$

ここで $[G,H]=0$ ならば, ブラケットの中身が 0 となるため

$$\frac{d}{dt}\langle G\rangle=0 \tag{36}$$

即ち, 次の条件が成り立つとき,$\langle G\rangle$ は時間に依存しない保存量となることがわかる

$$[G,H]=0 \tag{37}$$

例えば, 並進によってハミルトニアンが変化しない場合は, 運動量は時間に依存しない保存量となる

$$[p_x,H]=0\Rightarrow\quad p_x\text{は保存量 (時間に依存しない)} \tag{38}$$

1.5 具体例 1-三次元の並進

今まではx方向の並進について議論してきたが, 同様に 3 次元の並進について議論することも出来る. その場合, 並進の関係と並進演算子が次のように書き換わる.

$$\psi'(\vec{x})=\psi\vec{x}-\vec{a},\quad U=e^{-\vec{a}\cdot\vec{\nabla}} \tag{39}$$

同様に ∇ を運動量で置き換えることで並進演算子は

$$U = e^{-i\vec{a}\vec{p}/\hbar} \tag{40}$$

ハミルトニアンとの交換関係を考えれば

$$[H, \vec{p}] = 0 \Leftrightarrow H \text{ が並進で不変量} \Rightarrow \vec{p} \text{が時間に依存しない} \tag{41}$$

1.6 時間の並進

今までは位置の並進について考えてきたが，もちろん時間の並進を考えることも出来る．いま，$\delta\tau$ だけ変化させる場合を考える．その前に，時間に依存しないハミルトニアンを持つ場合の波動関数は次のように書けた

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle \tag{42}$$

次に，時間並進をした波動関数 ψ' を考える

$$|\psi'(t)\rangle = e^{-iH(t-\delta\tau)/\hbar}|\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi'(0)\rangle \tag{43}$$

即ち，時間の並進におけるユニタリ変換は次の変換であることがわかる．

$$U = e^{i\delta\tau H/\hbar} \tag{44}$$

つまり時間並進の母関数はハミルトニアンである．時間並進と空間並進を次のように並べて考えると，確かにハミルトニアンが母関数であることに不思議はない．(符号が逆転していることは非常に興味深いが)

$$\begin{cases} \hat{H} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} & \Leftrightarrow \dfrac{\partial}{\partial t} = -\dfrac{i\hat{H}}{\hbar} \\ \hat{p_x} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} & \Leftrightarrow \dfrac{\partial}{\partial x} = \dfrac{i\hat{p_x}}{\hbar} \\ \hat{p_y} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial y} & \Leftrightarrow \dfrac{\partial}{\partial y} = \dfrac{i\hat{p_y}}{\hbar} \\ \hat{p_z} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z} & \Leftrightarrow \dfrac{\partial}{\partial z} = \dfrac{i\hat{p_z}}{\hbar} \end{cases} \tag{45}$$