201110869 田中 裕樹 No. 1

量子力学3 4/16の講義まとめ

◎ 対称性と保存量

・並進

並進とは、ある関数をある方向に動かすことである。例えば、関数$\psi(x)$をx方向にaだけ並進させた時、並進後の関数を$\psi'(x)$とすると、

$$\psi'(x+a) = \psi(x) \Longleftrightarrow \psi'(x) = \psi(x-a)$$

となる。これを展開すると、

$$\begin{aligned}\psi'(x) &= \psi(x-a)\\ &= \psi(x) + (-a)\psi^{(1)}(x) + \frac{1}{2!}(-a)^2\psi^{(2)}(x) + \cdots\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-a)^n\partial_x^n\psi(x)\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-a\partial_x)^n}{n!}\psi(x)\\ &= e^{-a\partial_x}\psi\end{aligned}$$

$\because\ e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}$ でe^xの$x=0$におけるテイラー展開

となる。ここで、演算子Uを

$$U \equiv e^{-a\partial_x}$$

と定義すると

$$\psi'(x) = U\psi(x)$$

と表すことが出来、

$$P_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x = -i\hbar\partial_x$$

より、

$$U = e^{-iaP_x/\hbar}$$

と書ける。よって

$$U^\dagger = e^{iaP_x/\hbar}$$

となり、

$$\begin{aligned}UU^\dagger &= e^{-iaP_x/\hbar}\cdot e^{iaP_x/\hbar}\\ &= 1\end{aligned}$$

となる。

・ユニタリ行列

ある演算子 U で、

$$U^\dagger = U^{-1}$$

が成立するならば、U をユニタリ行列という。

このユニタリ行列をある関数に作用させることを、ユニタリ変換と言い

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= U|\psi\rangle \\ |\varphi'\rangle &= U|\varphi\rangle \end{aligned} \Longrightarrow \langle\varphi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle$$

$$= \langle\varphi'|\psi'\rangle$$

$$\because \langle\varphi|U^\dagger = (U|\varphi\rangle)^\dagger = (|\varphi'\rangle)^\dagger = \langle\varphi'|$$

が成り立つ。つまり、ユニタリ変換で重なり積分は不変である。

$$\therefore \langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi'|\psi'\rangle$$

・並進操作

上記のことより、並進操作は次のように書ける。

$$|\psi\rangle \longmapsto |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$$

※ U はユニタリ行列

・物理量とユニタリ変換

まず、次のように定義する。

$$O \longmapsto O' \quad , \langle O\rangle = \langle O'\rangle$$

ここで、状態 ψ における期待値は、

$$\langle O\rangle = \langle\psi|O|\psi\rangle$$

より、

$$\langle O'\rangle = \langle\psi'|O'|\psi'\rangle$$

$$= \langle\psi|U^\dagger O' U|\psi\rangle$$

と書ける。以上より、

$$\langle O\rangle = \langle O'\rangle = \langle\psi|U^\dagger O' U|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|O|\psi\rangle$$

となり、したがって、

$$O = U^\dagger O' U \Longrightarrow O' = UOU^\dagger = UOU^{-1}$$

・対称操作に対応するユニタリ変換

一般に、ある対称操作に対応するユニタリ変換：

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

と書いて、

$$\lambda^\dagger = \lambda$$

をある物理量とし、

$$G^\dagger = G$$

を変換母関数と言う。先に書いた、一次元での並進と見比べると、次のように対応している。

$$a \Leftrightarrow \lambda \quad , \quad -P_x \Leftrightarrow G$$

また、λが無限小のとき、λを$\delta\lambda$と置いて

$$U = e^{i\delta\lambda G/\hbar} = 1 + i\delta\lambda G/\hbar$$

を無限小変換という。このとき、$\delta\lambda$の2次以上の項は無視できるものとした。

また、$\theta' = \theta$の時、θは対称操作で不変であるという。

。無限小変換

物理量θに対して、

$$\theta' = (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\theta(1 - i\delta\lambda G/\hbar)$$
$$= \theta + i\delta\lambda/\hbar\,(G\theta - \theta G)$$

ここで、上より、

$$\delta\theta = \theta' - \theta = i\delta\lambda/\hbar\,[G, \theta]$$

と書ける。このとき、

$$[G, \theta] = 0 \Longrightarrow \theta\text{は無限小変換で不変}$$

今まで一次元の無限小変換について考える。つまり、

$$U = \exp[\,i a P_x/\hbar\,]$$

において、aが無限小ならばδaとして、

$$U = 1 - i\delta a P_x/\hbar$$

と考えて良い。ここで、物理量である運動エネルギーKについて考える。

$$K = \frac{\vec{P}^2}{2m} = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)$$

ここで、

$$[P_j^2, P_i] = P_j[P_j, P_i] + [P_j, P_i]P_j \quad , \quad [P_i, P_j] = 0$$

より、

$$[K, P_x] = 0$$

したがって、運動エネルギーは並進操作で不変である。
また、ハミルトニアンが無限小変換で不変なら、すなわち、

$$\delta H = i\delta\lambda[G, H] = 0$$

なら、シュレディンガー方程式の形式解

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

より、

$$\langle G\rangle = 一定 \quad (時間に依存しない)$$

が導ける。
例えば、ハミルトニアンが

$$U = e^{-iaP_x/\hbar}$$

で不変なら、P_xは保存する。

・3次元での無限小変換
状態ψを$\vec{a}$だけ並進させる：$\psi(\vec{r}) \longmapsto \psi'(\vec{r})$
無限小変変換に対して、

$$\psi' = e^{i\delta\lambda G/\hbar}\psi = (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\psi$$
$$= \psi + i\delta\lambda(G/\hbar)\psi$$
$$\Longrightarrow \delta\psi = \psi' - \psi = i\delta\lambda(G/\hbar)\psi$$

となる。また

$$\delta\psi = \psi'(\vec{r}) - \psi(\vec{r})$$
$$= \psi(\vec{r} - \delta\vec{a}) - \psi(\vec{r})$$
$$= -\delta\vec{a}\cdot\vec{\nabla}\psi$$
$$= -i\delta\vec{a}\cdot\vec{P}/\hbar\,\psi \qquad \because \vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

となる。上の2つの式を見比べると、

$$\delta\lambda = \vec{a}, \quad G = -\vec{P}$$

が分かる。このとき、次の関係が成り立つ。

$$[H, \vec{P}] = 0 \Longleftrightarrow ハミルトニアンが並進で不変$$
$$\Longrightarrow \vec{P}：運動量は保存する。$$

・時間推進

$\psi(t)$ を $\delta\tau$ だけ進める操作を考える。

$$\psi \mapsto \psi' \quad , \psi'(t) = \psi(t-\delta\tau)$$

より、

$$\delta\psi = \psi' - \psi = \psi(t-\delta\tau) - \psi(t)$$
$$= -\delta\tau\,\partial_t\psi$$

が得られる。ここで、シュレディンガー方程式より、

$$\partial_t\psi = (H/i\hbar)\psi$$

を代入すると、

$$\delta\psi = (iH/\hbar)\,\delta\tau\,\psi$$

が導ける。

$$\psi' = \psi + \delta\psi = (1 + i\delta\tau H/\hbar)\psi$$

より、$\delta\tau$ を無限小と考えると、ユニタリ変換：

$$U = e^{i\delta\lambda G/\hbar} = 1 + i\delta\lambda G/\hbar$$

と見比べて、$\delta\lambda$ と $\delta\tau$ が、G と H が対応していることが分かる。

特に、H が t に依存しなければ、

$$[H, H] = 0$$

となり、系は時間推進で不変である。

したがって、$\langle H \rangle$ = 一定、エネルギー不変である。

・回転対称操作

回転対称操作の母関数は角運動量であり、系が回転の方向に依存しないならば、角運動量は保存する。

No.

Date