戸澤 悠　　20110873

§ 量子力学における対称性

◎ 対称性と保存量

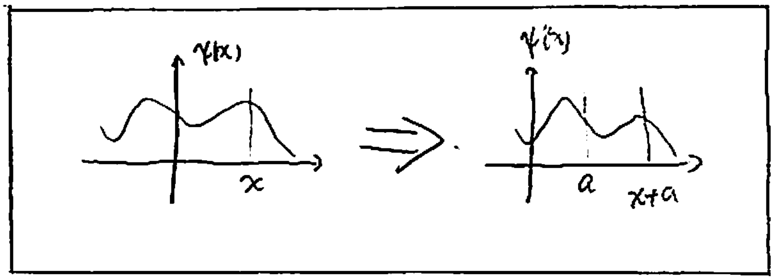
対称操作の例：並進 (translation)

1次元

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$, $\psi(x)$

x方向に a だけ並進させる。$\psi \to \psi'$

(対称操作)



ここで、ψ'の定義より、

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

である。

$$\psi'(x) = \psi(x-a)$$
$$= \psi(x) + (-a)\psi'(x) + \frac{1}{2!}(-a)^2\psi''(x) + \frac{1}{3!}(-a)^3\psi'''(x) + \cdots$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-a)^n \partial_x^n \psi$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} (-a\partial_x)^n / n! \cdot \psi$$
$$= e^{-a\partial_x}\psi$$

$\left(\partial_x = \frac{d}{dx},\ e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}\right)$

また右の計算により

$$\psi'(x) = e^{-a\partial_x}\psi$$

が得られる。

$U = e^{-a\partial_x}$ (演算子) とすると、

$$\psi' = U\psi$$

と表せる。

また、運動量 p_x は

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

であるから、

$$\partial_x = \frac{i p_x}{\hbar}$$

となる。

よって、

$$U = e^{-iap_x/\hbar}, \quad U^\dagger = e^{iap_x/\hbar}$$

となる。ただし、$p_x^\dagger = p_x$ である。

また、

$UU^\dagger = e^0 = 1$

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

つまり、U はユニタリ演算子であり、$\psi \mapsto \psi' = U\psi$ はユニタリ変換である。

一般に、ユニタリ変換で重なり積分は不変である。 $\left(\begin{array}{l} |\psi'\rangle = U|\psi\rangle \\ |\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle \end{array} \Rightarrow \langle\varphi'|\psi'\rangle = \langle\varphi|U^\dagger U|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle \right)$

並進操作で物理量はどうなるのだろうか？

$|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ 　　物理量：$O = O^\dagger$

$O \mapsto O'$

$\langle O\rangle = \langle O'\rangle'$ と定義すると、

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

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

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

$\therefore O = U^\dagger O' U, \quad O' = UOU^\dagger = UOU^{-1}$

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{並進} \quad |\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = U|\psi\rangle = e^{-iap_x/\hbar}|\psi\rangle \\[1em] \qquad\quad O \mapsto O' = UOU^{-1} \end{array}}$$

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、

$\lambda^\dagger = \lambda$　（ある物理量）

$G^\dagger = G$　（変換の母関数）

$\begin{pmatrix} a \leftrightarrow \lambda \\ -p_x \leftrightarrow G \end{pmatrix}$

特に、λが無限小（最低次のみ議論）のとき、λを$\delta\lambda$と書いて、

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

を無限小変換という。

特に、$O' = O$の時、Oは対称操作で不変であるという。

無限小変換に対しては、

$$O' = (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\, O\, (1 - i\delta\lambda G/\hbar)$$
$$= O + i\delta\lambda (GO - OG)$$
$$\delta O = O' - O = i\delta\lambda [G, O]$$

$[G, O] = 0 \quad \Rightarrow \quad O$は変換で不変

例）　$U = e^{-iap_x/\hbar}$　aが無限小のとき、$U = 1 - i\delta a p_x/\hbar$　　$[p_i, p_j] = (-i\hbar)^2 [\partial_i, \partial_j] = 0$

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

運動エネルギー

公式

$$\boxed{\begin{aligned} [A, BC] &= ABC - BCA \\ &= B[A, C] + [A, B]C \quad (= BAC - BCA + ABC - BAC = ABC - BCA) \\ &\text{同様に、} \\ [A, BC] &= B[A, C] + [A, B]C \\ [AB, C] &= A[B, C] + [A, C]B \end{aligned}}$$

公式を用いると、

$$[P_x^2, P_i] = \underbrace{P_x[P_x, P_i] + [P_x, P_i]P_x}_{=0}$$

$$\therefore [K, P_x] = 0$$

∴運動エネルギーは並進操作で不変

特に、ハミルトニアンが無限小変換 $U = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ で不変なら、

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

このとき、$\langle G \rangle = 一定$ ⇒ 保存量

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

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

$$\because \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = (-iH/\hbar)e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$$
$$= (-iH/\hbar)|\psi\rangle$$
$$= (H/i\hbar)|\psi\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

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

$$\frac{d}{dt}\langle G \rangle = \langle \psi(0)|e^{iHt/\hbar}\frac{iH}{\hbar}G\,e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle + \langle \psi(0)|e^{iHt/\hbar}G\left(-\frac{iH}{\hbar}\right)e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$$
$$= \left(\frac{i}{\hbar}\right)\langle \psi(0)|e^{iHt/\hbar}[H, G]\,e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$$
$$= 0 \qquad ([H, G] = 0)$$

$\therefore \langle G \rangle = 一定$　　ただし、Hが時間に依存しないと仮定した。

つまり、

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{ハミルトニアンが無限小変換 } U=e^{i\delta\lambda G/\hbar} \text{ で不変なとき、}\\ \text{(物理系が対応する対称操作で不変なとき)}\\ \text{物理量 } G \text{ は保存する。}\end{array}}$$

x方向の並進で系が不変なら、x方向の運動量 p_x は保存する。

具体例

☆3次元での並進：$\vec{a}$だけ並進する。$\psi(\vec{r}) \mapsto \psi'(\vec{r})$

$$\psi'(\vec{r}+\vec{a}) = \psi(\vec{r})$$
$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r}-\vec{a})$$

無限小変換に対して

$$\begin{aligned}\psi' &= e^{i\delta\lambda G/\hbar}\psi \\ &= (1+i\delta\lambda G/\hbar)\psi \\ &= \psi + i(\delta\lambda G/\hbar)\psi\end{aligned}$$

$$\therefore\ \delta\psi = \psi' - \psi = i\delta\lambda(G/\hbar)\psi$$

また、

$$\begin{aligned}\delta\psi &= \psi'(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r}-\delta\vec{a}) - \psi(\vec{r}) \\ &= -\delta\vec{a}\cdot\nabla\psi \\ &= -i\delta\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar\cdot\psi \qquad (\vec{p} = -i\hbar\nabla)\end{aligned}$$

$$\therefore\ U = e^{-i\delta\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar},\quad G = -\vec{p}$$

$[H,\vec{p}]=0 \iff$ ハミルトニアンが並進で不変
$\implies$ 運動量 $\vec{p}$ は保存する。

☆ 時間推進 : δt だけ時間を進める.

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

$$\begin{aligned} \delta\psi &= \psi' - \psi \\ &= \psi(t - \delta t) - \psi(t) \\ &= -\delta t \partial_t \psi \end{aligned}$$

ここで

$$i\hbar \partial_t \psi = H\psi$$

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

よって.

$$\delta\psi = (iH/\hbar)\delta t \psi$$

つまり、

時間推進の母関数はハミルトニアンである.

特に、H が t に依存しなければ、

$$[H, H] = 0$$

⇒ 系(ハミルトニアン)は時間推進で不変

⇒ $\langle H \rangle$: 一定

(エネルギー不変、エネルギー保存則)

系が空間の方向に依存しない

||

回転対称

回転対称操作の母関数 = 角運動量，角運動量は保存する.

$$\vec{r} \longmapsto R\vec{r}$$

3×3行列

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} & & \\ & R & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

例)

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\cos\theta - y\sin\theta \\ x\sin\theta + y\cos\theta \\ z \end{pmatrix} = x\begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \\ 0 \end{pmatrix} + y\begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \\ 0 \end{pmatrix} + z\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$|\vec{r}|^2 = (R\vec{r}, R\vec{r}) = |R\vec{r}|^2$　　${}^tRR = E_3$: 直交行列