201310875 物理学科 出口 裕佳 2015.4.17

1. Symmetry in Quantum mechanics

1.1 Symmetry and conserved quantities

1.1.1 Symmetry operation and wave function conservation low

$\psi(\vec{r},t)$: wave fn. H = Hamiltonian

Schrö eq は

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

Symmetry operation (対称操作)

ex) translation (並進) point particle

translation by a $\quad T_a : x \longmapsto x+a$

1dim w.f $\psi(r,t)$

$$T_a : \psi(x,t) \longmapsto \psi'(x',t)$$

Transformation (変換)

ψ'がどのような形か分かりにくい。

波動関数を動かすとは、

$$T_a : x \longmapsto x' + a$$

$$\boxed{\psi'(x') \equiv \psi(x)}$$ ← definision of translation

うつった先 もと.

並進の作用素について考える

$\psi'(x) = (T_a \psi)(x)$ のように書くと

定義から $\psi'(x) = \psi(x-a) = \psi(T_a^{-1}x)$

$\because T(T_a^{-1}x) = x$

$\psi(x-a)$を$a=0$点まわりでテーラー展開

$$\psi(x-a) = \psi(x) - a\,\partial_x\psi + \frac{1}{2}(-a)^2\partial_x^2\psi - \cdots$$

$$= \sum_{n=0} \frac{(-a)^n}{n!}\partial_x^n \psi(x)$$

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

$$\therefore \psi'(x) = \underbrace{e^{-a\partial_x}}_{\text{III}\ U_a}\psi(x)$$

U_aとする(作用素)

U_aを $P_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x$ (momentum, hermite $p_x^\dagger = P_x$ ※1) を用いて表すと

$$U_a = e^{-ia\frac{\partial_x}{i}} = e^{-iaP_x/\hbar}$$

$$U_a^\dagger = \left(e^{-ia\frac{P_x}{\hbar}}\right)^\dagger = e^{\frac{ia}{\hbar}P_x^\dagger} = e^{\frac{ia}{\hbar}P_x}$$

$$\therefore \boxed{\text{“}U_a U_a^\dagger = 1\text{”}}$$ unitary operator

並進操作はユニタリ.

※1 $P_x = P_x^\dagger$ について考える

$$[\hat{x}, \hat{P}_x] = x(-i\hbar\partial_x) + i\hbar\partial_x x$$

$$= -i\hbar x\partial_x + i\hbar x\partial_x + i\hbar$$

$$= i\hbar \quad -①$$

①の左辺で$\dagger$をとる

$$[\hat{x}, \hat{P}_x]^\dagger = (\hat{x}\hat{P}_x)^\dagger - (\hat{P}_x\hat{x})^\dagger$$

$$= \hat{P}_x^\dagger\hat{x} - \hat{x}\hat{P}_x^\dagger \qquad \because (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$= i\hbar\partial_x^\dagger x - x\cdot i\hbar\partial_x^\dagger$$

$$= -[x, i\hbar\partial_x^\dagger]$$

$$= -[\hat{x}, \hat{P}_x^\dagger]$$

①の右辺で$\dagger$をとると、$-i\hbar$

$$\therefore [\hat{x}, \hat{P}_x^\dagger] = [\hat{x}, \hat{P}_x]$$

$$\therefore \hat{P}_x = \hat{P}_x^\dagger$$

∎

1.2 Infinitesimal transformation (無限小変換)

並進 $U = e^{-\frac{i\delta a}{\hbar}P_x}$ 　a:有限 　δa: small

$\sim 1 - i\delta a P_x/\hbar$ 　$(|\delta a P_x| \ll \hbar)$

(テーラー1次の項)

$\Downarrow$

一般化 Unitary transformation

$$U = e^{i\lambda G/\hbar} \quad \lambda\text{: real } (\lambda^* = \lambda)$$

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

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

∵ユニタリ変換

$\therefore$ $G^\dagger = G$ (G は Hermite)

observable (Dirac)

((ex) translation なら $G = -P_x$)

G: generater 母関数

波動関数とのからみ…

$\psi(x,t)$: wave function

$\mathcal{O}$: physical quantity (observable) Hermite

($\mathcal{O}$ の例) Energy $\mathcal{O} = H$ ハミルトニアン
momentum $\mathcal{O} = P_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x$)

$\mathcal{O}$ の期待値

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\, \mathcal{O}\, \psi(x)$$

expectation value

$= \langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle$ 　bra-ket

ψ を対称操作する(U はユニタリ)

$$\psi' = U\psi$$

$\langle \mathcal{O}' \rangle \equiv \langle \mathcal{O} \rangle$ とする

$$\langle \mathcal{O}' \rangle = \langle \psi' | \mathcal{O}' | \psi' \rangle$$

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

$$= \langle \mathcal{O} \rangle$$

$\therefore$ $\mathcal{O} = U^\dagger \mathcal{O}' U$ より

$$\boxed{\mathcal{O}' = U \mathcal{O} U^\dagger}$$

transformation Low of the observable

物理量の変換則

まとめ… ユニタリ変換 U によって ψ, $\mathcal{O}$ は

$\psi \longmapsto \psi' = U\psi$

$\mathcal{O} \longmapsto \mathcal{O}' = U\mathcal{O}U^\dagger$ と変換される

$\mathcal{O}$: Invariant 不変 (for the transformation)

i.e. $\mathcal{O} \longmapsto \mathcal{O}' = U\mathcal{O}U^\dagger = \mathcal{O}$ のとき

$\Leftrightarrow$ $U\mathcal{O} = \mathcal{O}U$

$\therefore$ $\boxed{[U, \mathcal{O}] = 0}$

commute with each other

$$\left([U, \mathcal{O}] \equiv U\mathcal{O} - \mathcal{O}U \right)$$

commutator

U: unitory, infinitesimal transformation とする

$$U_{\delta\lambda} = e^{i\delta\lambda G/\hbar} \quad (|\delta\lambda G| \ll \hbar)$$

はじめの議論同様

$$\sim 1 + i\delta\lambda G/\hbar$$

$$U_{\delta\lambda}^\dagger = e^{-i\delta\lambda G/\hbar}$$

$$= U_{\delta\lambda}^{-1} = 1 - i\delta\lambda G/\hbar$$

これを用いて, $[U, \mathcal{O}]$ を計算する

$$[U, \mathcal{O}] = U\mathcal{O} - \mathcal{O}U$$

$$= (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\mathcal{O} - \mathcal{O}(1 + i\delta\lambda G/\hbar)$$

$$= \frac{i\delta\lambda}{\hbar}[G, \mathcal{O}] = 0$$

$\therefore$ $\boxed{[G, \mathcal{O}] = 0}$ (if $\mathcal{O}$ is invariant)

結論♪

T: symmetry op. 　$\psi \longmapsto \psi' = U\psi$ (U: unitary)

translation by a 　$x \longmapsto x' = x + a$

$U = e^{i\lambda G/\hbar}$ $(= e^{-a\partial_x})$

$\Uparrow$ 　λ: real

G: hermite (generator) $\left(G = -P_x = -\frac{\hbar}{i}P_x\right)$

$\mathcal{O}$: observable (generic)

$\mathcal{O}^\dagger = \mathcal{O}$

$\mathcal{O} \longmapsto \mathcal{O}' = U\mathcal{O}U^\dagger$

infinitesimal trans

if $\mathcal{O}$ is invariant for the trans (Symmetry op)

$$[G, \mathcal{O}] = 0$$

・In general

$$O \to O' = UOU^{\dagger}$$

無限小変換 $= (1+i\delta\lambda G/\hbar)\,O\,(1-i\delta\lambda G/\hbar)$

$= O + i\delta\lambda/\hbar\,[G, O] + \underbrace{(\delta\lambda)^2}_{\text{2次無視}}$

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

if Oが不変なら $\delta O = 0 \Rightarrow [G, O] = 0$

Physical system

Schrö eq $\quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$

$H^{\dagger} = H$ hamiltonian

どんなものかが大事

対称操作で何かかわるか→ハミルトニアンがどうかわるか

Symmetry of the system ⟷ Hamiltonian

System invariant ⟷ H invariant

別のアプローチ

Hが無限小変換で不変のとき, 観測値Gと Gの期待値の時間変化は $\quad [H, G] = 0$

$$\frac{d}{dt}\langle G\rangle_t = \frac{d}{dt}\langle\psi(0)|e^{\frac{iHt}{\hbar}} G e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$
$$= \frac{i}{\hbar}\langle\psi(0)|e^{\frac{iHt}{\hbar}} HG e^{-\frac{iHt}{\hbar}} - e^{\frac{iHt}{\hbar}} GH e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$
$$= \frac{i}{\hbar}\langle\psi(0)|e^{\frac{iHt}{\hbar}}\underset{0}{[H, G]}e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$
$$= 0$$

Bra-ket 表記

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

O の期待値

$$\langle\psi(t)|O|\psi(t)\rangle$$
$$= \langle\psi(0)|e^{\frac{iHt}{\hbar}}\, O\, e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$

$O = G$, $[H, G] = 0$ なら $\quad e^{-iHt/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-it/\hbar)^n H^n$ より $[G, e^{-iHt/\hbar}] = 0$

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

初期とおなじ. G: conserve

Gは保存する

ex) $H = \frac{P_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2$ (free particle)

Translation, $U = e^{-a\partial_x} = e^{-\frac{iaP_x}{\hbar}}$ $(G = -P_x)$

$$[G, H] = [-P_x, \frac{P_x^2}{2m}]$$
$$= 0$$

結論

Hが無限小変換 $e^{\frac{i\delta\lambda G}{\hbar}}$ 下で不変な時

$[H, G] = 0$ で (前のギロン)

Gは保存量となる