201310848　岡田 麻希

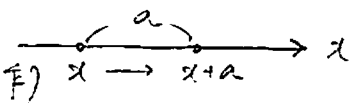
No. 1
Date 2015.4.17

量子力学3　第2回講義(4/14)まとめ

§1. 量子力学における対称性

1.1. 対称性と保存量

1次元における点粒子の波動関数 $\psi(x)$ を考える。



関数 $\psi(x)$ を x 方向に a だけ並進させる操作(並進操作)

T_a により、x, $\psi(x)$ は x', $\psi'(x)$ に変換されるとするならば、

$$T_a : x \mapsto x' = x + a \Rightarrow x' = T_a x \qquad (1.1)$$

$$T_a : \psi(x) \mapsto \psi'(x) \Rightarrow \psi'(x) = T_a \psi(x) \qquad (1.2)$$

$$\psi'(x') = \psi(x) \qquad (1.3)$$

と書ける。これら(1.1)〜(1.3)式より(1.2)式を変形してテーラー展開すると、

$$T_a\psi(x) = \psi'(x) = \psi(T_a^{-1}x) \qquad (\because \psi'(T_a^{-1}T_a x) = \psi(T_a^{-1}x))$$

$$= \psi(x-a)$$

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

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

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

ただし、$\partial_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ とし、e^x のマクローリン展開 $e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}$ を用いた。

上記の変形により T_a は

$$T_a = e^{-a\partial_x}$$

と書けることがわかる。ここで運動量演算子 $p_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x$ を用いると、T_a は、

$$T_a = e^{-ia\frac{\hbar}{i}\partial_x/\hbar} = e^{-iap_x/\hbar} \qquad (1.4)$$

と表せる。また、運動演算子 p_x がエルミート演算子だから、$p_x^\dagger = p_x$ が成り立つことを用いると、

$$T_a^\dagger = (e^{-iap_x/\hbar})^\dagger = e^{iap_x^\dagger/\hbar} = e^{iap_x/\hbar}$$

となり、

$$T_aT_a^\dagger = T_a^\dagger T_a = e^{-iap_x/\hbar + iap_x/\hbar} = e^0 = 1. \qquad (1.5)$$

と書けるから T_a はユニタリ演算子であるとわかる。つまり、並進操作はユニタリ変換である。

1.2 ユニタリ変換と物理量

$U = e^{i\lambda G/\hbar}$ と書けるようなユニタリ変換を考える。ただし、λ は実数であり、G は母関数でエルミート演算子である。ここで U は、ある対称操作における作用素である。例えば並進操作ならば、$G = -p_x$ となる。

U により ψ' へ変換されるような波動関数 ψ ($\psi' = U\psi$) と、観測可能な物理量 O ($O^\dagger = O$, $ex) O = H, O = p = \frac{\hbar}{i}\partial_x$) から、$O$ の期待値は

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

$$= \langle \psi | O | \psi \rangle \qquad (1.6)$$

と書ける。また、$\psi' = U\psi$ より、

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

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

$$= (|\psi\rangle)^\dagger U^\dagger = \langle \psi | U^\dagger$$

と書けるから、これらを用いて (1.6) 式を変形すると、

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

と書ける。ただし、$O' = UOU^\dagger$ とおいた。つまり、以下のような変換（物理量の変換則）が行われたことがわかる。

$$\psi \mapsto \psi' = U\psi$$

$$O \mapsto O' = UOU^\dagger$$

特に、O が対称操作に対し不変のとき、

$$O' = UOU^\dagger = O \quad \Leftrightarrow \quad UO = OU$$

つまり

$$[U, O] = 0$$

となり U, O は互いに可換になる。

1.3 無限小変換

$U = e^{i\lambda G/\hbar}$ の λ が無限小 $\delta\lambda$ をとるとき、次のユニタリ変換

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

を無限小変換という。このとき $|\delta\lambda G| \ll \hbar$ が成り立つから、

$$U_{\delta\lambda} = e^{i\delta\lambda G/\hbar} \sim 1 + i\delta\lambda G/\hbar \qquad (1.7)$$

が成り立つ。ただし $\delta\lambda$ の2次以上の項は無視できるとした。また、(1.7) 式はユニタリ変換である。($U_{\delta\lambda}^\dagger = U_{\delta\lambda}^{-1} = 1 - i\delta\lambda G/\hbar$)

$[U_{\delta\lambda}, O]$ を計算すると、

$$[U_{\delta\lambda}, O] = U_{\delta\lambda} O - O U_{\delta\lambda}$$

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

$$= (i\delta\lambda/\hbar)[G, O]$$

となり、O が無限小変換に対して不変ならば、$[G, O] = 0$ となる。

No.
Date

一般には無限小変換 $U \sim 1 + i\delta\lambda G/\lambda$ について以下のことが成り立つ.

$$O \to O' = UOU^\dagger$$
$$= (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\, O\, (1 - i\delta\lambda G/\hbar)$$
$$= O + i(\delta\lambda/\hbar)[G, O] \qquad (1.8)$$

$$\delta O = O' - O$$
$$= (i\delta\lambda/\hbar)[G, O] \qquad (1.9)$$

ただし2次以上の$\delta\lambda$は無視できるとした。いずれの(1.8), (1.9)式でも, Oが無限小変換に対して不変のとき, $[G, O] = 0$となる。

1.4 ハミルトニアンと保存量
ハミルトニアンが無限小変換 $U = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ で不変のとき

$$[G, H] = 0$$

が成り立つ. 自由粒子系の並進操作を考えると, ハミルトニアンは,

$$H = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m}$$

並進操作に対する変換は, (1.4)式の $U = e^{-a\partial x} = e^{-iap_x/\hbar}$ から, 母関数は,

$$G = -p_x$$

よって

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

となり自由粒子系でHが無限小変換において不変だとわかる。
次に, シュレーディンガー方程式

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

を考えると, 形式解

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

を得る。ただし$|\psi(0)\rangle$は$|\psi(t)\rangle$の初期状態。これよりGの期待値は

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

となり, 時間に依らず一定値をとることがわかる。つまり, ハミルトニアンが無限小変換 $U = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ で不変のとき, その母関数Gは保存する。
期待値$\langle G\rangle_t$(=const)は保存量。