量子力学3 第18回講義まとめ

201310851 金杉 翔太

3次元回転

$$\mathbb{r}=\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}\longmapsto \mathbb{r}'=\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}=R\mathbb{r}\qquad (R:3\times3\text{行列})$$

$|\mathbb{r}'|^2=|\mathbb{r}|^2$ より、

$$|\mathbb{r}'|^2=\tilde{\mathbb{r}}'\mathbb{r}'=(\widetilde{R\mathbb{r}})R\mathbb{r}=\tilde{\mathbb{r}}\tilde{R}R\mathbb{r}=\tilde{\mathbb{r}}\mathbb{r}=|\mathbb{r}|^2$$

$$\therefore\ \tilde{R}R=E_3\qquad (E_3:3\times3\text{単位行列})$$

$$\therefore\ \tilde{R}=R^{-1}\longrightarrow R\text{は直交行列}$$

よって、$\mathbb{e}_i\cdot\mathbb{e}_j=\delta_{ij}$ ($\mathbb{e}_i$は3次元列ベクトル)として、$R=(\mathbb{e}_1,\mathbb{e}_2,\mathbb{e}_3)$ とすれば

$$\tilde{R}R=\begin{pmatrix}\tilde{\mathbb{e}}_1\\\tilde{\mathbb{e}}_2\\\tilde{\mathbb{e}}_3\end{pmatrix}(\mathbb{e}_1,\mathbb{e}_2,\mathbb{e}_3)=\begin{pmatrix}\tilde{\mathbb{e}}_1\cdot\mathbb{e}_1 & \tilde{\mathbb{e}}_1\cdot\mathbb{e}_2 & \tilde{\mathbb{e}}_1\cdot\mathbb{e}_3\\ \tilde{\mathbb{e}}_2\cdot\mathbb{e}_1 & \tilde{\mathbb{e}}_2\cdot\mathbb{e}_2 & \tilde{\mathbb{e}}_2\cdot\mathbb{e}_3\\ \tilde{\mathbb{e}}_3\cdot\mathbb{e}_1 & \tilde{\mathbb{e}}_3\cdot\mathbb{e}_2 & \tilde{\mathbb{e}}_3\cdot\mathbb{e}_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}=E_3$$

となり、直交行列の条件を満たす。また、

$$\det(R-E_3)=\det(\tilde{R}-\tilde{E_3})=\det(R^{-1}-E_3)=\det R^{-1}(E_3-R)=\det R^{-1}\det(E_3-R)$$

であり、

$$\det\tilde{R}R=(\det R)^2=\det E_3=1$$

$$\therefore\ \det R=\pm1$$

となるので、$\det R=1$ とすると、

$$\det(R-E_3)=\det R^{-1}\det(E_3-R)=\det(E_3-R)=-\det(R-E_3)$$

$$\therefore\ \det(R-E_3)=0$$

$$\therefore\ {}^{\exists}\mathbb{v}\neq\mathbb{0},\quad (R-E_3)\mathbb{v}=\mathbb{0}$$

$$\longrightarrow R\mathbb{v}=\mathbb{v}\quad \text{—}(*)$$

よって、(*)より、3次元回転操作を施しても変化しない回転軸$\mathbb{v}$が存在することが分かる($\mathbb{v}\neq\mathbb{0}$)。これより、3次元回転は回転軸$\mathbb{v}$とその周りの回転角θで指定されるので、以下$R_\theta(\mathbb{v})$と表す。

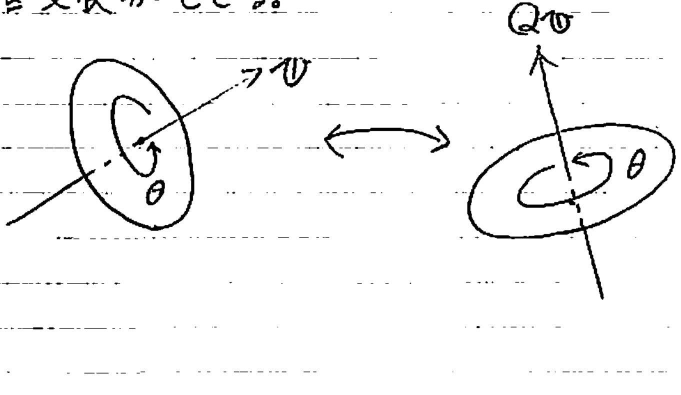
ある回転Qを考えると、$Q^{-1}Q=E_3$より、

$$QR_\theta(\mathbb{v})Q^{-1}Q\mathbb{v}=QR_\theta(\mathbb{v})\mathbb{v}=Q\mathbb{v}$$

より、$QR_\theta(\mathbb{v})Q^{-1}$は$Q\mathbb{v}$を回転軸とする回転であることが分かるので、

$$R_\theta(Q\mathbb{v})=QR_\theta(\mathbb{v})Q^{-1}$$

と基底変換ができる。



3次元回転のオイラー角による表現

(i) z軸のまわりにαだけ回転：$R_\alpha(\hat{z})$

座標軸：$(x, y, z) \longmapsto (x_1, y_1, z_1 = z)$

(ii) y_1軸のまわりにβだけ回転：$R_\beta(\hat{y}_1)$

座標軸：$(x_1, y_1, z_1 = z) \mapsto (x_2, y_2 = y_1, z_2)$

$$R_\beta(\hat{y}_1) = R_\alpha(\hat{z}) R_\beta(\hat{y}) R_\alpha^{-1}(\hat{z}) \quad \text{—— ①}$$

(iii) z_2軸のまわりにγだけ回転：$R_\gamma(\hat{z}_2)$

座標軸：$(x_2, y_2 = y_1, z_2) \longmapsto (x_3, y_3, z_3 = z_2)$

$$R_\gamma(\hat{z}_2) = R_\beta(\hat{y}_1) R_\gamma(\hat{z}) R_\beta^{-1}(\hat{y}_1) \quad \text{—— ②}$$

以上の(i)〜(iii)の回転を順々に行う回転$R(\alpha, \beta, \gamma)$は、

$$\begin{aligned} R(\alpha,\beta,\gamma) &= R_\gamma(\hat{z}_2) R_\beta(\hat{y}_1) R_\alpha(\hat{z}) \\ &= R_\beta(\hat{y}_1) R_\gamma(\hat{z}) R_\beta^{-1}(\hat{y}_1) R_\beta(\hat{y}_1) R_\alpha(\hat{z}) \quad (\because ②) \\ &= R_\alpha(\hat{z}) R_\beta(\hat{y}) R_\alpha^{-1}(\hat{z}) R_\gamma(\hat{z}) R_\alpha(\hat{z}) \quad (\because ①) \\ &= R_\alpha(\hat{z}) R_\beta(\hat{y}) R_\gamma(\hat{z}) \end{aligned}$$

最後の変形では、同じ軸まわりの回転は可換であることを使った。

波動関数

回転行列Rに対して、波動関数$\psi(\mathbf{r})$が、

$$\psi(\mathbf{r}) \mapsto (R\psi)(\mathbf{r}) \equiv \psi(R^{-1}\mathbf{r})$$
$$\psi \mapsto R\psi$$

となるものとし、$\mathbf{r}^R = R\mathbf{r}$とすると

$$(R\psi)(R\mathbf{r}) = (R\psi)(\mathbf{r}^R) = \psi(\mathbf{r})$$

である。次に、

$$R : |\psi\rangle \longmapsto R|\psi\rangle = |R\psi\rangle$$

とすると、

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

となるので、Rがユニタリ演算子で、$R^\dagger R = 1$ ($R^\dagger = R^{-1}$) であれば、

$$\langle R\psi|R\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

となる。Schrödinger方程式は、

$$H|\psi\rangle = |\psi\rangle E$$

であるから、$[R, H] = 0$ であれば、

$$RH|\psi\rangle = HR|\psi\rangle = R|\psi\rangle E$$

となり、$R|\psi\rangle$もHのエネルギーEの固有状態となる。

もし、Eに縮退がなければ $R|\psi\rangle \propto |\psi\rangle$ であり、

$$R|\psi\rangle = |\psi\rangle\omega, \quad |\omega| = 1$$

と書ける。Eがd重に縮退していて

$$H|\psi_i\rangle = |\psi_i\rangle E \quad (i = 1, 2, \cdots, d)$$
$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$$

であれば、$RH|\psi_i\rangle = HR|\psi_i\rangle = R|\psi_i\rangle E$ より、$R|\psi_i\rangle$は固有値Eの固有関数であり、$\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots, |\psi_d\rangle\}$の線形結合で書ける。