

量子力学 3

講義

1/1

・ 回転対称性

or. 三角形 \triangle $120^\circ, 240^\circ, 360^\circ$ 回転で不変: 回転対称性 $R_{120}, R_{240}, R_{360}$

$$R_{360} = 1 = e : \text{単位元}$$

$$\begin{pmatrix} R_{120} \cdot R_{120} = R_{240} \\ R_{240} \cdot R_{120} = R_{360} = e = 1 \end{pmatrix} = R_{120} = R_{240} \quad \text{対称操作}$$

・ 回転

 $\vec{r} \mapsto \vec{r}' : \text{長さ不変} \quad (|\vec{r}| = |\vec{r}'|)$

2次元.

$$\vec{r} \mapsto \vec{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow \text{線型}$$

3次元.

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \mapsto \vec{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \underline{R} \vec{r}$$

回転行列

$$\begin{aligned} |\vec{r}'|^2 &= \vec{r}' \cdot \vec{r}' \\ &= (x' \cdot y' \cdot z') \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \\ &= (\hat{R} \vec{r}) \cdot (\hat{R} \vec{r}) \\ &= \vec{r} \cdot \hat{R}^T \hat{R} \vec{r} \\ &= \vec{r} \cdot \vec{r} \end{aligned}$$

$$\hat{R} \cdot \hat{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = E_3$$

$$\hat{R} = R^{-1}$$

$$R R^{-1} = R \cdot \hat{R} = E_3$$

$$\det R = 1$$

直交

$$R = \left(\begin{pmatrix} | \\ e_1 \\ | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | \\ e_2 \\ | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | \\ e_3 \\ | \end{pmatrix} \right)$$

$$\hat{R} \cdot R = \begin{pmatrix} \hat{e}_1 \\ \hat{e}_2 \\ \hat{e}_3 \end{pmatrix} (e_1 \cdot e_2 \cdot e_3) = \begin{pmatrix} \hat{e}_1 \cdot e_1 & \hat{e}_1 \cdot e_2 & \hat{e}_1 \cdot e_3 \\ \hat{e}_2 \cdot e_1 & \hat{e}_2 \cdot e_2 & \hat{e}_2 \cdot e_3 \\ \hat{e}_3 \cdot e_1 & \hat{e}_3 \cdot e_2 & \hat{e}_3 \cdot e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{e}_i \cdot e_j = \delta_{ij}$$

$R^{-1} = \hat{R}$ とする

$$\begin{aligned} \det(R - E_3) &= \det(\hat{R} - E_3) \\ &= \det(R^{-1} - E_3) \\ &= \det R^{-1} (E_3 - R) \\ &= \det R^{-1} \det(E_3 - R) \\ &= -\det(R - E_3) \end{aligned}$$

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

$$\rightarrow (R - E_3) \vec{u} = 0, \quad R\vec{u} = \vec{u}$$

と解ける $\vec{u} \neq 0$ の存在
回転軸

\rightarrow 3次元回転には回転軸が存在

回転の表現 : $R_\theta(\vec{u})$

回転軸 \vec{u} と回転角 θ で表現

\rightarrow 回転操作は群をつくる

$$R\vec{u} = \vec{u}$$

$$\Rightarrow R(\vec{u}) \cdot \vec{u} = \vec{u}$$

別の回転 Q に対して

$$Q R_\theta(\vec{u}) \cdot Q^{-1} \cdot Q \cdot \vec{u} = Q \vec{u}$$

$$(Q R_\theta(\vec{u}) \cdot Q^{-1}) \cdot (Q \vec{u}) = (Q \cdot \vec{u})$$

$Q \cdot \vec{u}$ が回転軸

$$Q \cdot R_\theta(\vec{u}) \cdot Q^{-1} = R'_\theta(Q \cdot \vec{u}) : \text{基底変換}$$

Q は $R \in R'$ に移す回転

$R'_\theta(Q \cdot \vec{u})$ と $R_\theta(\vec{u})$ は同じ類に属する。

3次元行列一周による表現 (R_z 回転の合成)

① z 軸まわりには α 回転 $R_\alpha(z)$

座標軸は $(x_1, y_1, z_1 = z) \wedge$

② y 軸まわりには β 回転 $R_\beta(y_1)$

座標軸は $(x_2, y_2 = y_1, z_2) \wedge R_\beta(y_1) = R_\alpha(z) R_\beta(y) R_\alpha^{-1}(z)$

③ z 軸まわりには γ 回転 $R_\gamma(z_2)$

$R_\alpha(z) = R_\beta(y_1) R_\gamma(z_1) R_\beta^{-1}(y_1)$

$\therefore R_\gamma(z_1) = R_\alpha(z) R_\gamma(z) R_\alpha^{-1}(z) = R_\gamma(z)$

$$\begin{aligned} R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_\gamma(z_2) R_\beta(y_1) \cdot R_\alpha(z) \\ &= R_\beta(y_1) R_\gamma(z_1) \cdot R_\beta^{-1}(y_1) R_\beta(y_1) R_\alpha(z) \\ &= R_\alpha(z) \cdot R_\beta(y) \cdot R_\alpha^{-1}(z) \cdot R_\alpha(z) \cdot R_\gamma(z) \\ &= R_\alpha(z) \cdot R_\beta(\beta) \cdot R_\gamma(z) \end{aligned}$$

同軸まわりの回転は可換

R : 回転行列, ψ : 関数

$$\psi(\vec{r}) \mapsto R\psi(\vec{r}) = \psi(R^{-1} \cdot \vec{r})$$

$$|\psi\rangle \mapsto R|\psi\rangle$$

$$\vec{r}^R = R\vec{r}$$

$$(R \cdot \psi)(R \cdot \vec{r})$$

$$= (R \cdot \psi) \vec{r}^R$$

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

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$$\rightarrow \langle R\psi | R\psi \rangle = 1$$

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

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \text{ なる } \psi$$

$$[H, R] = 0 \text{ なら}$$

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

$R|\psi\rangle$ も H のエネルギー E の固有状態

固有値 E が d 重に縮退

$$|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_d\rangle$$

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$H|\psi_i\rangle = E|\psi_i\rangle \quad i = 1, 2, \dots, d$$

$R \in$ 作用.

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

$$R|\psi_i\rangle = \text{固有値 } E \text{ の固有ベクトル}$$

$\{|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_d\rangle\}$ の線型結合
 $\rightarrow R|\psi_i\rangle = |\psi\rangle_i D_{ij}(R)$ と表現