量子力学3まとめレポート 7/7分

2013108?? 渡辺展正

回転対称性　rotational symmetry

回転：対称操作

$R_{360} = e$　単位元　unit

$R_{120} \cdot R_{120} = R_{120}^2 = R_{240}$　,　$R_{240} \cdot R_{120} = R_{360} = e$

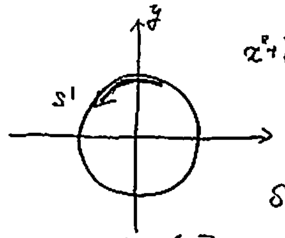
対称操作：ある関係式で表わされる群をつくる group　↔　Symmetry ← 群論（群の表現）

<-> 波動関数はどう変化するか？を表す

☆ 3D rotation　3次元回転

<=> 2次元回転

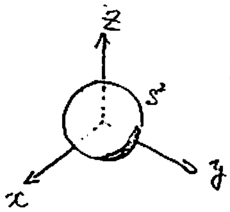
$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \longmapsto \vec{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$



$x^2 + y^2 = 1$
$\updownarrow$
S^1

$S^1 \to S^1$：長さ不変

$|\vec{r}| = |\vec{r}'|$：長さが不変　,　"線型"であることが重要



$x^2 + y^2 + z^2 = 1$
3次元回転
$S^2 \to S^2$

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \longmapsto \vec{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \vec{r} = R\vec{r}$$

$$|\vec{r}'|^2 = \tilde{\vec{r}}'\vec{r}' = (x'y'z')\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = (\widetilde{R\vec{r}})R\vec{r} = \tilde{\vec{r}}\underbrace{\tilde{R}R}_{=E_3}\vec{r}$$

$$= |\vec{r}|^2 = \tilde{\vec{r}}\vec{r}$$

$$\rightarrow \tilde{R}R = E_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$e_i e_j = \delta_{ij} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1e_1 & e_1e_2 & \cdots \\ \vdots & & \end{pmatrix}$$

$\tilde{R} = R^{-1}$　$RR^{-1} = R\tilde{R} = E_3$.

orthogonal matrix
直交

$$R = \left(\begin{pmatrix} e_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_3 \end{pmatrix} \right) \qquad \tilde{R}R = \begin{pmatrix} \tilde{e}_1 \\ \tilde{e}_2 \\ \tilde{e}_3 \end{pmatrix} (e_1\, e_2\, e_3) = \begin{pmatrix} \tilde{e}_1e_1 & \tilde{e}_1e_2 & \cdots \\ \vdots & & \end{pmatrix}$$

$$\det(R - E_3) = \det(\tilde{R} - \tilde{E}_3) = \det(R^{-1} - E_3)$$
$$= \det R^{-1}(E_3 - R) = \det R^{-1} \det(E_3 - R)$$

$\det \tilde{R}R = (\det R)^2 = 1 \longrightarrow \det R = \pm 1$　$\det R = 1$ を考える（$R = E_3$から連続変形可）

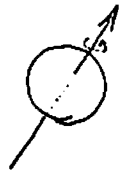
（$\det R = -1$　Inversion $\begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{pmatrix}$）

先程の結果から

$$\det(R - E_3) = \det R^{-1} \det(E_3 - R) = \det(E_3 - R) = (-)^3 \det(R - E_3)$$

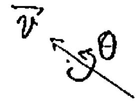
$$\det(R - E_3) = (-)^3 \det(R - E_3) = -\det(R - E_3) \longrightarrow \det(R - E_3) = 0$$

$^{\exists}\vec{v} \neq \vec{0} \quad (R-E)\vec{v} = 0 \quad \hat{R}\vec{v} = \vec{v}$



⟺ 3次元回転には 回転軸が存在する。

回転：回転軸 $\vec{v}$ と回転角 θ で指定
angle　specify



このとき $R_\theta(\vec{v})$ ：回転操作（群をつくる，3次元回転群）

$R\vec{v} = \vec{v}$ として $R(\vec{v})\vec{v} = \vec{v}$ と書くとき，ある回転 Q を行うと，

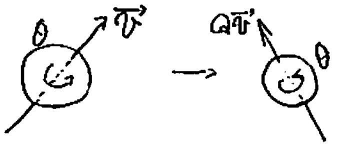
$$Q R(\vec{v}) \underbrace{Q^{-1} Q}_{E_3} \vec{v} = Q\vec{v}$$

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

$Q\vec{v}$ が回転軸
回転角はもとのまま，

⟺ 3次元空間基底変換

$R_\theta(\vec{v}) \longleftrightarrow Q R_\theta(\vec{v}) Q^{-1}$ 　R_θ と同じ類に属する。



$Q\vec{v}$：新しい回転軸

☆ 3次元回転のオイラー角における表現
Euler angle

① z 軸まわりに α 回転 $R_\alpha(\hat{z})$，座標軸が $(x, y, z) \longrightarrow (x_1, y_1, z_1 = z)$ へ

② y_1 軸まわりに β 回転 $R_\beta(\hat{y}_1)$ 　〃　$(x_2, y_2 = y_1, z_2)$ へ．

このとき $R_\beta(\hat{y}_1) = R_\alpha(\hat{z}) R_\beta(\hat{y}) R_\alpha^{-1}(\hat{z})$

（∵ $Q R_\theta(\vec{v}) Q^{-1} = R_\theta(Q\vec{v})$ において $Q \leftrightarrow R_\alpha(\hat{z})$，$R_\theta(\vec{v}) \leftrightarrow R_\beta(\hat{y})$）

③ z_2 軸まわりに γ 回転 $R_\gamma(\hat{z}_2)$

$R_\gamma(\hat{z}_2) = R_\beta(\hat{y}_1) R_\gamma(\hat{z}) R_\beta^{-1}(\hat{y}_1)$ ⟶ 回転：③②①

（注意）

$R_\gamma(\hat{z}) = R_\alpha(\hat{z}) R_\gamma(\hat{z}) R_\alpha^{-1}(\hat{z})$ 　同じ軸まわりの回転は可換　Abelian

$$\begin{aligned}
R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_\gamma(\hat{z}_2) R_\beta(\hat{y}_1) R_\alpha(\hat{z}) \\
&= R_\beta(\hat{y}_1) R_\gamma(\hat{z}) \underbrace{R_\beta^{-1}(\hat{y}_1) R_\beta(\hat{y}_1)}_{e} R_\alpha(\hat{z}) \\
&= R_\alpha(\hat{z}) R_\beta(\hat{y}) \underline{R_\alpha^{-1}(\hat{z}) R_\gamma(\hat{z}) R_\alpha(\hat{z})} = R_\gamma(\hat{z}) R_\alpha^{-1}(\hat{z}) R_\alpha(\hat{z}) \quad (∵ z\text{軸まわり可換}) \\
&= R_\alpha(\hat{z}) R_\beta(\hat{y}) R_\gamma(\hat{z})
\end{aligned}$$

R：回転行列　　$\psi(\vec{r})$：波動関数　とするとき，

$$\psi(\vec{r}) \longmapsto (R\psi)(\vec{r}) \equiv \psi(R^{-1}\vec{r})$$

$\psi \longmapsto R\psi$：関数の回転

$(|\psi\rangle \longmapsto R|\psi\rangle = |R\psi\rangle)$

$\vec{r}^R \equiv R\vec{r}$ として，

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

$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \longrightarrow \langle R\psi|R\psi\rangle = 1$　であるはず

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

$\leftrightarrow R^\dagger R = 1 \quad R^\dagger = R$：unitary

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

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

if $[R, H] = 0$

$RH|\psi\rangle = HR|\psi\rangle = R|\psi\rangle E$　$\Longleftrightarrow$ $R|\psi\rangle$ も H のエネルギー固有状態

もし固有値に縮退がない $\longrightarrow$ $\underbrace{R|\psi\rangle}_{= |\psi\rangle\omega} \propto |\psi\rangle$　ω：位相 $|\omega| = 1$
E　unique

もし E が d 重縮退なら（それで全てであるとき）
if E is d fold degenerated

$\longrightarrow |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots |\psi_d\rangle$　　$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$

$$\left.\begin{aligned} H|\psi_1\rangle &= |\psi_1\rangle E \\ H|\psi_2\rangle &= |\psi_2\rangle E \\ &\vdots \\ H|\psi_d\rangle &= |\psi_d\rangle E \end{aligned}\right\}$$

$H|\psi_i\rangle = |\psi_i\rangle E$

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

$R|\psi_i\rangle$：固有値 E の固有ベクトル
eigen value

$R|\psi_i\rangle$：$\{|\psi_1\rangle, \cdots |\psi_d\rangle\}$ の線型結合.

$R|\psi_i\rangle = |\psi_j\rangle_j \underbrace{D_{ji}(R)}_{\text{数係数}}$　　$D_{ji}(R)$　行列：R の表現