A

NO.

DATE . .

量子力学3　第4回授業まとめ

201310851　金杉 翔太

回転 (rotation)

3次元回転

$$\vec{r} \longrightarrow \vec{r}' = R\vec{r}, \quad R: 3\times3 \text{行列}$$

を考える。回転操作においては、

$$|\vec{r}| = |\vec{r}'|$$

であるから、

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

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

よって、

$$\tilde{R}R = E_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{—— ①}$$

但し、

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \tilde{\vec{r}} = (x \ y \ z)$$

である。①より、$R^{-1} = \tilde{R}$ であり、このような行列を直交行列と呼び、$R \in O(3)$ で表す。また、①より、

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

$$\therefore \det R = \pm 1$$

$\det R = 1$ の時、$R \in SO(3)$ と表す。

$\det R = 1$ の例として、

$$R = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

がある。$\theta \to 0$ の時、これは $R \to E_3$ となる。

無限小回転 (infinitesimal rotation)

無限小回転においては $R \sim E_3$ であると考えられるので、$\det R = 1$ である。

このことより、δR を成分が微小な行列として、

$$R \sim E_3 + \delta R$$

とすると、

$$R\tilde{R} = (E_3 + \delta R)(E_3 + \delta\tilde{R})$$

$$= E_3 + \delta\tilde{R} + \delta R + \delta R \cdot \delta\tilde{R}$$

$$\sim E_3 + \delta\tilde{R} + \delta R \quad \text{—— ②}$$

①より、$R\tilde{R} = E_3$ であるから、②と比較して、

$$\delta\tilde{R} + \delta R = O = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\therefore \widetilde{\delta R} = -\delta R \quad \text{—— ③}$$

③より、δR は反対称 (anti-symmetric) になっていることが分かる。

KOKUYO

また、③より、

$$(\delta\tilde{R})_{ij} = \delta R_{ji} = -\delta R_{ij}$$

よって、$i=j$ ならば、$\delta R_{ii} = 0$ となるので、対角成分は0となり、

$$\delta R = \begin{pmatrix} 0 & A & B \\ -A & 0 & C \\ -B & -C & 0 \end{pmatrix} \quad \text{—— ④}$$

と書ける。ここで、完全反対称(completely anti-symmetry)なテンソル

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & (i,j,k) = (1,2,3), (2,3,1), (3,1,2) \\ -1, & (i,j,k) = (2,1,3), (3,2,1), (1,3,2) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

を用いて、

$$\delta R_{ij} \equiv -\epsilon_{ijk}\,\delta\omega_k \quad \text{—— ⑤}$$

と定義すれば、④の条件をみたしている。ここで、$\delta\omega_k \in \mathbb{R}$ であり、

$$\delta\vec{\omega} = \begin{pmatrix} \delta\omega_1 \\ \delta\omega_2 \\ \delta\omega_3 \end{pmatrix}$$

また、⑤は同じ添字 k については、1~3までの和をとることを表す。

$\vec{r}' = R\vec{r} \sim (E_3 + \delta R)\vec{r}$ であるから、第 i 成分 $(i=1,2,3)$ は、

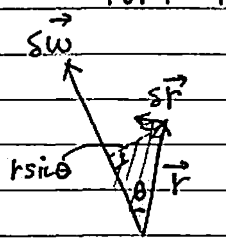
$$\begin{aligned}(\vec{r}')_i = (R\vec{r})_i &= R_{ij} r_j = (E_3 + \delta R)_{ij} r_j \\ &= r_i + \delta R_{ij} r_j \\ &= r_i - \epsilon_{ijk}\,\delta\omega_k r_j\end{aligned}$$

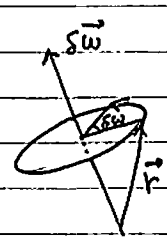
よって、

$$\begin{aligned}(\delta\vec{r})_i &= (\vec{r}' - \vec{r})_i \\ &= r_i' - r_i \\ &= \epsilon_{ikj}\,\delta\omega_k r_j = (\delta\vec{\omega} \times \vec{r})_i\end{aligned}$$

$$\therefore \delta\vec{r} = \delta\vec{\omega} \times \vec{r} \quad \text{—— ⑥}$$

$$|\delta\vec{r}| = |\delta\vec{\omega}||\vec{r}| \sin\theta$$





次に、この無限小回転における波動関数 $\psi(\vec{r})$ の変化を調べる。

$$\vec{r} \longmapsto \vec{r}' = R\vec{r}$$

$$\psi(\vec{r}) \longmapsto \psi'(\vec{r}')$$

このとき、$\psi'(\vec{r}') = \psi(\vec{r})$ であるから、

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

$$\therefore \psi'(\vec{r}) = \psi(R^{-1}\vec{r})$$

ここで、$R \sim E_3 + \delta R$ であり、δR は④で表せるので、

$$R^{-1} \sim E_3 - \delta R$$

であるから、

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \psi(R^{-1}\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r} - \delta R\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r} - \delta\vec{r}) \qquad (\delta\vec{r} = \delta R\vec{r}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \therefore \delta\psi(\vec{r}) &= \psi'(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \\ &= \psi(\vec{r} - \delta\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \\ &\cong \psi(\vec{r}) - \delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \\ &= -\delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ を用いれば、

$$\begin{aligned} \delta\psi &= -\delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla}\psi \\ &= -\frac{i}{\hbar}\delta\vec{r}\cdot\vec{p}\psi \\ &= -\frac{i}{\hbar}(\delta\vec{\omega}\times\vec{r})\cdot\vec{p}\psi \qquad (\because ⑥) \\ &= -\frac{i}{\hbar}(\vec{r}\times\vec{p})\cdot\delta\vec{\omega}\psi \\ &= -\frac{i}{\hbar}\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}\psi \qquad — ⑦ \end{aligned}$$

ここで、$\vec{L}$は角運動量(angular momentum)演算子であり、

$$\vec{L} \equiv \vec{r}\times\vec{p}$$

一般論から、無限小変換において、

$$\psi' = e^{i\delta\lambda G/\hbar}\psi \cong (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\psi$$

$$\therefore \delta\psi = \psi' - \psi = i\delta\lambda G/\hbar\,\psi \qquad — ⑧$$

であるから、⑦と⑧を比較すると、

$$\delta\lambda \leftrightarrow \delta\vec{\omega}$$

$$G \leftrightarrow -\vec{L}$$

という対応があり、$\vec{L}$が回転の母関数になっている。
従って、もしハミルトニアンが回転操作に対して不変ならば、角運動量が保存することが分かる。

変換則 (transformation law)

$\mathcal{O}$を物理量として、

$$\psi \mapsto \psi' = U\psi = e^{i\delta\lambda G/\hbar}\psi \cong (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\psi$$

という変換を考えると、

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

より、

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

であるから、

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{O} = \mathcal{O}' - \mathcal{O} &= (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\mathcal{O}(1 - i\delta\lambda G/\hbar) - \mathcal{O} \\ &= i(\delta\lambda/\hbar)[G, \mathcal{O}] \qquad — ⑨ \end{aligned}$$

⑨を用いて、物理量 $O = \vec{r}, \vec{p}, \vec{L}$ の変化分を求める。

$$\delta\vec{r} = [-i\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}/\hbar, \vec{r}] = -i/\hbar[\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}, \vec{r}]$$

$$\begin{aligned}
(\delta\vec{r})_i &= -i/\hbar[\delta\omega_j L_j, r_i] \\
&= -i/\hbar[\delta\omega_j \epsilon_{jab} r_a p_b, r_i] \\
&= -\frac{i}{\hbar}(\delta\omega_j \epsilon_{jab} r_a)[p_b, r_i] \\
&= -\frac{i}{\hbar}(\delta\omega_j \epsilon_{jab} r_a)(-i\hbar\delta_{bi}) \\
&= \epsilon_{iaj} r_a \delta\omega_j = (\vec{r}\times\delta\vec{\omega})_i
\end{aligned}$$

$$\therefore \delta\vec{r} = -\delta\vec{\omega}\times\vec{r} \quad \text{—— ⑩}$$

ここで、交換関係

$$[r_a, p_b] = i\hbar\delta_{ab}$$

を用いた。同様にして、

$$\delta\vec{p} = [-i\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}/\hbar, \vec{p}] = -i/\hbar[\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}, \vec{p}]$$

$$\begin{aligned}
(\delta\vec{p})_i &= -i/\hbar[\delta\omega_j L_j, p_i] \\
&= -i/\hbar[\delta\omega_j \epsilon_{jab} r_a p_b, p_i] \\
&= -\frac{i}{\hbar}(\delta\omega_j \epsilon_{jab} p_b)[r_a, p_i] \\
&= -\frac{i}{\hbar}(\delta\omega_j \epsilon_{jab} p_b)\cdot(i\hbar\delta_{ai}) \\
&= -\epsilon_{ijb}\delta\omega_j p_b = (-\delta\vec{\omega}\times\vec{p})_i
\end{aligned}$$

$$\therefore \delta\vec{p} = -\delta\vec{\omega}\times\vec{p} \quad \text{—— ⑪}$$

$$\delta\vec{L} = [-i\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}/\hbar, \vec{L}] = -\frac{i}{\hbar}[\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}, \vec{L}]$$

$$\begin{aligned}
(\delta\vec{L})_i &= -\frac{i}{\hbar}[\delta\omega_j L_j, L_i] \\
&= -\frac{i}{\hbar}\delta\omega_j[L_j, L_i] \\
&= -\frac{i}{\hbar}\delta\omega_j(i\hbar\epsilon_{ijk}L_k) \\
&= \epsilon_{jik}\delta\omega_j L_k \\
&= -\epsilon_{ijk}\delta\omega_j L_k = (-\delta\vec{\omega}\times\vec{L})_i
\end{aligned}$$

$$\therefore \delta\vec{L} = -\delta\vec{\omega}\times\vec{L} \quad \text{—— ⑫}$$

但し、角運動量の交換関係

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$$

を用いた。

以上より、$\vec{r}, \vec{p}, \vec{L}$ は、

$$\delta\vec{V} = -\delta\vec{\omega}\times\vec{V} \quad \text{—— ⑬}$$

という形の変換則で表せる。⑬のように表せる $\vec{V} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$ を、ベクトル演算子と呼ぶ。

運動エネルギー $K=\frac{\vec{p}^2}{2m}$ の変化は、

$$\delta K=\frac{1}{2m}(\vec{p}\cdot\delta\vec{p}+\delta\vec{p}\cdot\vec{p})$$
$$=-\frac{1}{2m}\{\vec{p}\cdot(\delta\vec{\omega}\times\vec{p})+(\delta\vec{\omega}\times\vec{p})\cdot\vec{p}\}$$
$$=\frac{1}{m}\delta\vec{\omega}\cdot(\vec{p}\times\vec{p})=0$$
$$\therefore\ \delta K=0$$

このように、変換によって変化しない物理量をスカラー演算子と呼ぶ。

ex) 3次元調和振動子のハミルトニアン

$$H=\frac{\vec{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\vec{r}^2$$

$$\delta H=\frac{1}{2m}(\vec{p}\cdot\delta\vec{p}+\delta\vec{p}\cdot\vec{p})+\frac{m\omega^2}{2}(\vec{r}\cdot\delta\vec{r}+\delta\vec{r}\cdot\vec{r})$$
$$=\frac{1}{m}\delta\vec{\omega}\cdot(\vec{p}\times\vec{p})+m\omega^2\delta\vec{\omega}\cdot(\vec{r}\times\vec{r})$$
$$=0$$

よって、Hは無限小回転に対して不変である。 //