201310848　岡田麻希

量子力学3　第3回講義(4/17)まとめ

§1.2. 保存則の具体例.

1.2.1. 無限小変換(前回補足)

ある対称操作におけるユニタリ変換 U ($U^\dagger U = UU^\dagger = 1$) により波動関数 ψ が ψ' へ変換するとする。

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

このとき.物理量 O ($O^\dagger = O$:エルミート演算子)の期待値は.

$$\langle O \rangle_\psi = \langle \psi | O | \psi \rangle$$
$$= \langle \psi' | U O U^\dagger | \psi' \rangle$$
$$\equiv \langle \psi' | O' | \psi' \rangle = \langle O' \rangle_{\psi'},$$

i.e. $O' = U O U^{-1}$

ここで、U が無限小変換 $U_{\delta\lambda} = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ ($\delta\lambda \in \mathbb{R}$, G:母関数かつ $G^\dagger = G$, $|\delta\lambda G/\hbar| \ll 1$) であるならば.

$$O' = U O U^{-1} = e^{i\delta\lambda G/\hbar}\, O\, e^{-i\delta\lambda G/\hbar}$$
$$= (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\, O\, (1 - i\delta\lambda G/\hbar) \quad (\delta\lambda \text{ の2次以上は無視})$$
$$= O + i(\delta\lambda/\hbar)[G, O]$$

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

となり, $O = H$ (ハミルトニアン)ならば.

$$\delta H = i\delta\lambda/\hbar\, [G, H]$$

もし $[G, H] = 0$ ならば.

$$\delta H = 0$$

H?

となり H は不変で.このとき. U は系の対称性を示す。

次にシュレーディンガー方程式 $i\hbar\partial_t|\psi\rangle = H|\psi\rangle$ を考える。ただし H は時間に依存しない。このとき形式解

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

を得る。このとき.母関数 G の期待値は.

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

となり,このとき.無限小変換 $e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ で不変ならば.

$$[G, H] = 0 \quad \Rightarrow \quad [G, e^{-iHt/\hbar}] = 0, \quad \delta H = 0.$$

となり,母関数 G と $e^{-iHt/\hbar}$ が可換であるから.

$$\langle G \rangle_{\psi(t)} = G^{obs}(t) = \langle \psi(0) | G | \psi(0) \rangle = G^{obs}(0) \qquad (1.2.1)$$

つまり $G^{obs}(t)$ は時間に依存しない。このとき G は保存量。

また、Gの期待値の時間変化は

$$\frac{d}{dt}G^{obs}(t) = \frac{d}{dt}\langle\psi(0)|e^{iHt/\hbar}\,G\,e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar}\frac{d}{dt}\langle\psi(0)|e^{iHt/\hbar}[H,G]e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

で、$\delta H = 0$のとき

$$\frac{d}{dt}G^{obs}(t) = 0$$

以下では、保存則についての具体的な例を示す。

1.2.2 空間推進 → $x \mapsto x' = x + \delta a$（前回と同じ）

1次元の並進操作について考えると、無限小変換 $U_{\delta\lambda} = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ は、

$$U_{\delta\lambda} = U_{\delta a} = e^{-i\delta a p_x/\hbar} = e^{-\partial\partial x} \qquad \left(p_x = \frac{\hbar}{i}\partial x\right)$$

であり、このときの母関数は $G = -p_x$。ここで質量mの一次元自由粒子について考えると、ハミルトニアン $H = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial x^2$ と $G = -p_x$ は、

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

で可換。つまり式（1.2.1）と同様に考えると、

$$p_x^{obs}(t) = p_x^{obs}(0)$$

となり、$p_x^{obs}(t)$は時間に依存しない、かつp_xは保存する。⇒ 運動量保存則

次に3次元の波動関数$\psi(\mathbf{r})$について、

$$\mathbf{r} \longmapsto \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta a$$

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

とするような無限小変換を考えると、

$$U_{\delta a} = e^{i\delta a\cdot\mathbf{p}/\hbar} = e^{-\delta a\cdot\nabla}$$

である。ここで質量mの3次元自由粒子について考えると、ハミルトニアン $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ で、このとき、

$$[p_x, H] = [p_y, H] = [p_z, H] = 0$$

より

$$[\delta a\cdot\mathbf{p}, H] = 0$$

で、このとき、1次元と同様に、$\mathbf{p}^{obs}(t)$は時間に依存せず、$\mathbf{p}$は保存する。

⇒ 運動量保存則

1.2.3. 時間推進

波動関数 $\psi(t)$ について、時間を τ だけ推進させる操作を考えると、

$$t \longmapsto t' = t+\tau$$
$$\psi(t) \longmapsto \psi'(t)$$
$$\psi'(t') = \psi(t)$$

と書ける。このとき並進操作と同様の変形を行うことで、

$$\psi'(t) = \psi(t-\tau)$$
$$= e^{-\tau\partial_t}\psi(t) = U_\tau \psi(t)$$

としてユニタリ変換 $U_\tau = e^{-\tau\partial_t}\psi(t)$ を得る。ここで U_τ は、

$$U_\tau = e^{-\tau\partial_t} = e^{-i\cdot i\tau\hbar\partial_t/\hbar}$$
$$= e^{i\tau H/\hbar}$$

$(i\hbar\dot{\partial_t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle)$

で $U_{\delta\lambda} = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ と比較すると $G = H$。特に H が時間に依存しないとき、

$$[G, H] = [H, H] = 0, \quad \delta H = 0$$
$$\Rightarrow H^{obs}(t) = H^{obs}(0) = E(t)$$

となり、$H^{obs}(t)$ は時間に依存せず、H は保存 ⇒ エネルギー保存則。

1.2.3 空間回転

2次元における回転操作は、

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \qquad (\theta\text{だけ回転})$$

と書ける。一方3次元では、3×3 実行列 R により、

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

へ回転されるとする。このとき、次のように詳しく書けるとする。

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

このとき、回転ではベクトルの大きさは不変であるから、

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

となるはず。よって、

$$|\mathbf{r}|^2 = \mathbf{r}\cdot\mathbf{r} = (x, y, z)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{r}}\mathbf{r} \qquad \left(\overset{\text{転置}}{\tilde{\mathbf{r}}} = {}^t\mathbf{r}\right)$$

$$|\mathbf{r}'|^2 = \mathbf{r}'\cdot\mathbf{r}' = (x', y', z')\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{r}}'\mathbf{r}' = (\widetilde{R\mathbf{r}})(R\mathbf{r}) = \tilde{\mathbf{r}}\tilde{R}R\mathbf{r}$$

$$\left(\begin{aligned} (\widetilde{AB})_{ij} &= (AB)_{ji} = A_{jk}B_{ki} = B_{ki}A_{jk} \\ &= (\tilde{B})_{ik}(\tilde{A})_{kj} \end{aligned} \right)$$

より、$|\mathbb{r}'| = |\mathbb{r}|$ となるには、

$$\tilde{R}R = E_3 \ , \quad \tilde{R} = R^{-1}$$

となる必要がある。このとき、Rは直交行列$O(3)$の条件を満たし、$R \in O(3)$と書かれる。これより、

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

$$\det R = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases}$$

が導かれ、特に、$\det R = 1$ のときを特殊直交行列$SO(3)$と呼ばれ、

$$\mathbb{r} \longmapsto \mathbb{r}' = R\mathbb{r} = E_3 \mathbb{r} = \mathbb{r} \qquad (R = E_3 \in SO(3))$$

となり、単位行列E_3に連続変換できる。

また$\det R = -1$ のとき 行列Rは

$$R = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (\because \det R = (-1)^3 = -1)$$

などと書かれる。この行列Rは、奇数次元へ空間反転する。