量子力学3 第3回授業まとめ

201310851 金杉翔太

ブラケット記法

ユリタリ変換 U を用いて、状態 $|\psi\rangle$ が

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

と変換されるとする。

任意の物理量 $\mathcal{O}$ に対して、その期待値は、

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\psi = \langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle \quad \text{—— ①}$$

また、ユリタリ変換後の期待値は、

$$\langle \mathcal{O}' \rangle_{\psi'} = \langle \psi' | \mathcal{O}' | \psi' \rangle$$

$$= \langle \psi | U^\dagger \mathcal{O}' U | \psi \rangle \quad \text{—— ②}$$

ここで、

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\psi \equiv \langle \mathcal{O}' \rangle_{\psi'}$$

とすると、①、②より、

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

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

よって、物理量 $\mathcal{O}$ は、

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

と変換される。

$U_\lambda = e^{i\lambda G/\hbar}$, $\lambda \in \mathbb{R}$ とすると、U_λ はユリタリ変換なので、

$$U_\lambda^\dagger = e^{-i\lambda G^\dagger/\hbar} = U_\lambda^{-1} = e^{-i\lambda G/\hbar}$$

$$\therefore G^\dagger = G$$

よって、変換の母関数 G はエルミートとなる。

無限小変換 $U_{\delta\lambda} = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$, $|\delta\lambda G/\hbar| \ll 1$ を考えると、

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

$$= e^{i\delta\lambda G/\hbar}\,\mathcal{O}\,e^{-i\delta\lambda G/\hbar}$$

$$\approx (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\,\mathcal{O}\,(1 - i\delta\lambda G/\hbar)$$

$$\approx \mathcal{O} + i(\delta\lambda/\hbar)[G, \mathcal{O}]$$

$$\therefore \delta\mathcal{O} = \mathcal{O}' - \mathcal{O} = i(\delta\lambda/\hbar)[G, \mathcal{O}]$$

よって、$\mathcal{O} = H$ として、ハミルトニアン H が $U_{\delta\lambda}$ で不変な時、

$$\delta H = i(\delta\lambda/\hbar)[G, H] = 0$$

$$\therefore [G, H] = 0$$

シュレディンガー方程式

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

を解くと、

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

これを用いると、時刻 t での物理量 $\mathcal{O}$ の期待値は、

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\psi(t)} \equiv \mathcal{O}^{\mathrm{obs.}}(t)$$

$$= \langle \psi(t) | \mathcal{O} | \psi(t) \rangle$$

$$= \langle \psi(0) | e^{iHt/\hbar}\,\mathcal{O}\,e^{-iHt/\hbar} | \psi(0) \rangle \quad \text{—— ③}$$

NO.

DATE

ここで、ハミルトニアンが $U_{\delta a}$ で不変とすると
$$[G, H] = 0$$
であるから、
$$[e^{iHt/\hbar}, G] = 0$$
となるので、③で $O = G$ として、
$$\langle G \rangle_{\psi(t)} = G^{obs.}(t)$$
$$= \langle \psi(0) | e^{iHt/\hbar} G e^{-iHt/\hbar} | \psi(0) \rangle$$
$$= \langle \psi(0) | G | \psi(0) \rangle$$
$$= G^{obs.}(0)$$
よって、Gは時間に依らない保存量となる。

例1) 1次元並進
$$x \mapsto x' = x + \delta a$$
$$U_{\delta a} = e^{-\delta a \partial_x} = e^{-i\delta a p_x/\hbar}, \quad p_x = \frac{\hbar}{i}\partial_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$
質量mの自由粒子系を考えると、
$$H = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2$$
このとき、$G = -p_x$ であるから、
$$[H, G] = \left[\frac{p_x^2}{2m}, -p_x\right] = 0$$
よって、$p_x^{obs.}(t)$ は保存量。

例2) 3次元並進
$$\vec{r} \mapsto \vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{a}$$
$$U_{\delta\vec{a}} = e^{-\delta\vec{a}\cdot\nabla} = e^{-i\delta\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar}$$
質量mの3次元自由粒子系を考えると、
$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$
ここで、
$$[p_x, p_y] = 0, \quad [p_y, p_z] = 0, \quad [p_z, p_x] = 0$$
$$[p_x, H] = 0, \quad [p_y, H] = 0, \quad [p_z, H] = 0$$
を用いると、
$$[\delta\vec{a}\cdot\vec{p}, H] = 0$$
よって、$\vec{p}^{obs.}(t)$ は保存量。

例3) 時間推進

$t \mapsto t' = t + \tau$

1次元空間並進 $x \mapsto x' + a$ において、変換が

$$U_a = e^{-a\partial_x}$$

と表せたことを参考にすると、この変換 U_τ は、

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

U_τの母関数 G は $G = H$ であるから、

$$[G, H] = [H, H] = 0$$

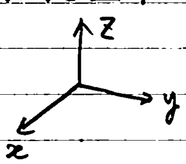
よって、$H^{obs.}(t) = E(t)$ は保存量。

☆回転 ⟶ 角運動量

・2次元回転

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

・3次元回転



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

R: 3×3行列

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \vec{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

転置行列を ${}^t\vec{r} = (x\ y\ z) = \tilde{\vec{r}}$ と書くと、

$$|\vec{r}|^2 = \vec{r}\cdot\vec{r} = (x\ y\ z)\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \tilde{\vec{r}}\vec{r}$$

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

ここで、$(\widetilde{R\vec{r}}) = \tilde{\vec{r}}\tilde{R}$ であるから、

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

回転操作においては、

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

であるから、

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

$$\therefore \tilde{R}R = E_3$$

E_3: 3×3単位行列

よって、3次元回転において、

$$\hat{R}R = R\hat{R} = E_3$$

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

このとき、Rを直交行列と呼び、$R \in O(3)$ と表す。

また、

$$\det(R\hat{R}) = \det(E_3) = 1$$
$$= \det(R)\cdot\det(\hat{R})$$
$$= (\det(R))^2$$
$$\therefore \det(R) = \pm 1$$

$\det(R)=1$ のとき、Rを特殊直交行列と呼び、$R \in SO(3)$ と表す。

<u>$\det(R) = 1$ の例</u>

$$\vec{r} \mapsto \vec{r}' = \vec{r} = E_3\vec{r}$$

$$\det(E_3) = 1$$

$$R = E_3 \in SO(3)$$

$$\therefore R \in SO(3)$$

<u>$\det(R) = -1$ の例</u>

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

$$\det(R) = (-1)^3 = -1$$