4/28 201810869 永井るい

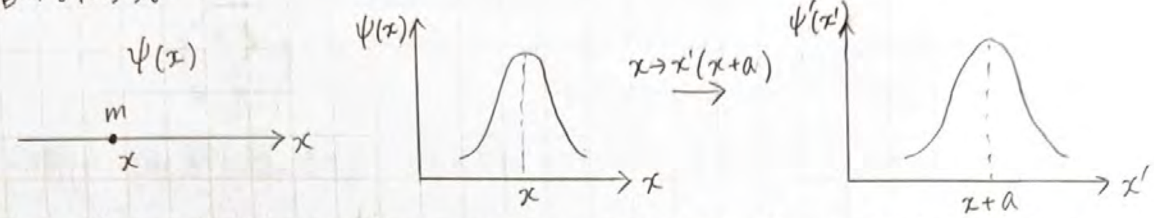
量子力学3

第1章 量子論における対称性

まず最初に一次元を運動する質点を例にとり、x方向にaだけ移動する操作T_aを考える。
これを波動関数で表せば、元の波動関数を$\psi(x)$として移動させた後の波動関数を$\psi'(x)$とすれば

$$\psi'(x+a) = \psi(x)$$

と書けるだろう。



平行移動した場所$x+a = T_a x$で元の位置での波動関数の値をとる関数が平行移動した波動関数というわけである。これを

$$x' = T_a x = x+a$$

$$\psi' = T_a \psi$$

$$\psi'(x') = \psi(x)$$

と書いて、波動関数がx方向にaだけ平行移動することにより$\psi \to T_a\psi$と変換されたと考える。
よってテイラー展開から

$$
\begin{aligned}
T_a\psi(x) &= \psi'(x) = \psi(T_a^{-1}x) = \psi(x-a) \\
&= \psi(x) - a\psi^{(1)}(x) + \frac{a^2}{2}\psi^{(2)}(x) \mp \cdots \\
&= \sum_{n=0} \frac{(-a)^n}{n!}\psi^{(n)}(x) \\
&= \sum_{n=0} \frac{(-a\partial_x)^n}{n!}\psi(x) \\
&= e^{-a\partial_x}\psi(x)
\end{aligned}
$$

$\leftarrow e^A = 1 + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \cdots = \sum_{n=0} \frac{1}{m!}A^m$

となる。これは、並進操作T_aが

$$T_a = e^{-a\partial_x} = e^{-iap_x/\hbar}$$

と運動量演算子$p_x = -i\hbar\partial_x$を用いて表現できることを意味する。
なお$p_x^\dagger = p_x$と運動量はエルミート演算子なので

$$T_a^\dagger = e^{+iap_x^\dagger/\hbar} = e^{+iap_x/\hbar} = T_a^{-1}$$

となり

$$T_a^\dagger T_a = T_a T_a^\dagger = 1$$

となる。この関係を満たす演算子をユニタリ演算子という。
(unitary)

$$
\begin{pmatrix}
\text{関数} & : \text{数} \longmapsto \text{数} \\
\text{(function)} & x \longmapsto f(x) \\
 & \\
\text{演算子} & : \text{関数} \longmapsto \text{関数} \\
\text{(operotor)} & \psi(x) \longmapsto \psi'(x)
\end{pmatrix}
$$

1.1.2 物理量の変換と保存則

物理量の変換

まず、ある対称操作に対応するユニタリ変換 U により波動関数が $\psi' = U\psi$ と変換するとする。

$$\psi \to \psi' = U\psi, \quad U^\dagger = U^{-1}$$

ここでブラケット記法を使えば次のようになる。

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = |U\psi\rangle \equiv U|\psi\rangle \qquad \text{波動関数の変換}$$

一般に物理量，観測量 $\mathcal{O}$ はエルミート演算子であたえられ、その期待値（物理量 $\mathcal{O}$ を実験的に観測したときの期待値）は次のようになることに注意する。

$$\langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle = \int dx\, \psi^*(x)\, \mathcal{O}\psi(x)$$

ここで、ある変換操作（対称操作）で物理量 $\mathcal{O}$ が $\mathcal{O}'$ に変換するとしたとき、観測量はこの変換により不変であるとする。つまり

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

この右辺に波動関数の変換則を使えば

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

となるから、$\mathcal{O} = U^\dagger\mathcal{O}'U$ つまり

$$\mathcal{O} \to \mathcal{O}' = U\mathcal{O}U^{-1}$$

と変換する。特に

$$\mathcal{O}' = U\mathcal{O}U^{-1} = \mathcal{O} \qquad \leftarrow U\mathcal{O} = \mathcal{O}U$$

の時、物理量 $\mathcal{O}$ は変換のもとで不変であるという。これは

$$[\mathcal{O}, U] = 0$$

と表現できる。

ブラケット記法についての補足

演算子 A のエルミート共役 $A^\dagger$ とは任意の状態 $|\varphi\rangle, |\phi\rangle$ に対して、下記の条件を満たす

$$\langle\varphi|A\phi\rangle = \langle A^\dagger\varphi|\phi\rangle, \quad \int dx (\varphi(x))^*(A\phi(x)) = \int dx ((A^\dagger\varphi)(x))^*\phi(x)$$

この時、ブラケット記法で $(|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|$, $|A\phi\rangle = A|\phi\rangle$, $(|A\phi\rangle)^\dagger = \langle A\phi| = \langle\phi|A^\dagger$ と書いて $\langle\varphi|A\phi\rangle = \langle\varphi|\cdot A|\phi\rangle$, $\langle A^\dagger\varphi|\phi\rangle = \langle\varphi|(A^\dagger)^\dagger\cdot|\phi\rangle = \langle\varphi|A|\phi\rangle$ だから $\langle\varphi|A|\phi\rangle$ という記法が許される。

無限小変換と母関数

特に$\delta\lambda$を無限小の物理量として、次の形のユニタリ変換を無限小変換という。

$$U_\lambda = e^{i\delta\lambda G/\hbar}, \quad G^\dagger = G$$

$\leftarrow$ $G \sim p_x$

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

$G^\dagger = G$

c.f. $T_a = e^{-iap_x/\hbar}$ $\quad a \sim \delta\lambda$

ここで、Uのユニタリ性からGはエルミート演算子となり、ある物理量に対応する。($\delta\lambda$とGとの積が$\hbar$の次元をもつ(お互いに共役)であることにも注意する) このGを無限小変換の母関数と呼ぶ。
この無限小変換に対して一般の物理量と波動関数の変換則をまとめる。($\delta\lambda$の最低次で)

無限小変換

$$U = e^{i\delta\lambda G/\hbar} \quad \sim 1 + i\delta\lambda G/\hbar$$

波動関数：$\delta\psi = \psi' - \psi = i\delta\lambda G\psi/\hbar$

物理量：$\delta O = O' - O = i\delta\lambda[G, O]/\hbar$

よって$[G, O] = 0$の時、Oは無限小変換の下で不変である。

ここで一般にシュレディンガー方程式$i\hbar\partial_t \Psi = H\psi$の形式解を

$$\Psi(t) = e^{-iHt/\hbar}\Psi(0)$$

と書けば、Gの期待値$\langle G\rangle_t = \langle\Psi(t)|G|\Psi(t)\rangle$の時間変化は次のように書ける。

$$\frac{d}{dt}\langle G\rangle_t = \frac{d}{dt}\langle\Psi(0)|e^{iHt/\hbar}Ge^{-iHt/\hbar}|\Psi(0)\rangle$$

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

$$\left(\underbrace{\langle\partial_t\Psi(t)|}_{=-\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|H}G|\Psi\rangle + \langle\Psi|G\underbrace{|\partial_t\Psi\rangle}_{=\frac{1}{i\hbar}H|\Psi\rangle} = \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|\underbrace{(GH - HG)}_{=[G,H]}|\Psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|[H, G]|\Psi\rangle\right)$$

よってハミルトニアンが無限小変換$e^{i\delta\lambda G/\hbar}$で不変なとき、$[H, G] = 0$であり、$\langle G\rangle_t$は時間に依存せず保存量となる。これを次のようにまとめる。

無限小変換と保存則

ハミルトニアンHが無限小変換$e^{i\delta\lambda G/\hbar}$の下で不変な時、$[H, G] = 0$とハミルトニアンと$G$は可換であり、$G$は保存量となる。

CamScannerでスキャン