第2講.

§§1.2 保存則の具体例

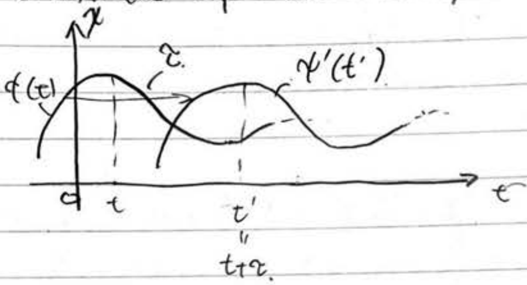
対称操作 $\hat{U}$ $\longleftrightarrow$ 保存則 $[\hat{A}, \hat{U}] = 0$ ($\hat{A}$: observable)

この構図が成り立つような相互関係の具体例を見ていく

§§§1.2.1 時間推進とエネルギー

時間間隔 τ だけ時間発展を作用する operator $\hat{T}_\tau$ を,

$$\begin{cases} t \longrightarrow t' = \hat{T}_\tau t = t+\tau, \\ \psi(x,t) \longrightarrow \psi'(x,t) = \hat{U}_\tau \psi(t) \end{cases}$$



となるような演算子として定める

$$\boxed{\psi'(t') = \psi(t)}$$

$$\Rightarrow \psi'(t) = \psi(t-\tau) = \hat{U}_\tau \psi(t)$$

τ を無限小量にとると,

$$\delta\psi := \psi(t-\tau) - \psi(t) = -\tau \frac{\partial}{\partial t}\psi(t)$$

ここで Schrödinger e.q. :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = \hat{H}\psi(t)$$

を用いると,

$$\delta\psi = -\tau \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi(t) = \frac{i}{\hbar}\tau \hat{H}\psi.$$

$\hat{U} = e^{\frac{i}{\hbar} a \cdot p}$

§§§ 1.1.2 空間推進と運動量

3次元の空間推進 $\mathbf{a}$ を考える。

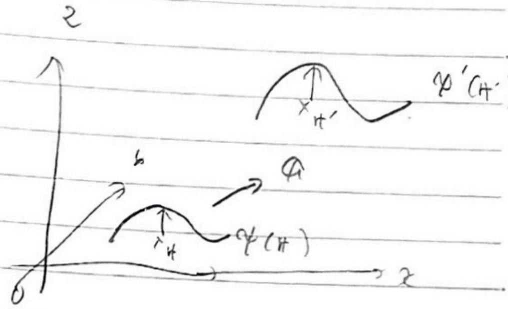
$$\hat{T}_a \mathbf{r} \longrightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}.$$

$$\psi \longrightarrow \psi' = \hat{T}_a \psi.$$

を満たすものとして定義!!

ここで、$\underline{\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r})}$ より、

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}).$$



$\mathbf{a}$ を無限小量とすると、

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) = \psi(\mathbf{r}) - \mathbf{a}\cdot\nabla\psi(\mathbf{r})$$

$$\therefore\ \delta\psi = -\mathbf{a}\cdot\nabla\psi(\mathbf{r}) = \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)}_{\hat{p}\ (:\text{運動量})}\psi(\mathbf{r})$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\hat{p}\,\psi(\mathbf{r}).$$

したがって、

空間推進

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{空間推進の演算子の生成演算子は、運動量 } \hat{p}. \\ \qquad \hat{U}_a = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\cdot\hat{p}\right] \ : \text{Unitary op.} \\ \text{空間推進で不変な系では、運動量が保存する。}\end{array}}$$

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0 \implies \langle \hat{p} \rangle_t = \text{Const.}$$

No.

Date

となる。

時間推進 | 発展

時間発展の演算子の母関数は Hamiltonian $\hat{H}$.

$$\hat{U}_\tau = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\cdot\hat{H}\tau\right] \quad : \text{Unitary operator.}$$

Hamiltonian が時間に依存しないとき、自分自身と可換となり

$$[\hat{H}, \hat{H}] = 0$$

そのため、時間依存しない Hamiltonian で記述される系は、エネルギーを保存量とする

注意

ここの但し書きにもあるように、このことは Hamiltonian が時間依存しないときに限られる主張であることに注意。

もし時間依存する場合、

$$[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] \neq 0 \quad (\text{for } t \neq t')$$

となるような場合には、時間発展の生成演算子 $\hat{U}_t$ は $\exp[\cdot]$ のような形で表せず、時間順序積を用いた逐次積分

$$\hat{U}_\tau = \underbrace{\overrightarrow{T}}_{\text{時間順序積}} \exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')dt'\right]$$

で実現される。

時間発展で系が不変 ⇒ エネルギーが保存

$$\langle \hat{H} \rangle_t = \text{Const.}$$

この構図は、古典論では Neither の定理、と呼ばれる。

注意

$\psi'(x) = \psi(x - \delta a)$ にみられる座標表示で確かめてみると

$$\langle\psi'|\hat{x}_i|\psi'\rangle = \int dx'\, \psi'^*(x)\, \hat{x}_i\, \psi'(x)$$

$$= \int dx\, \psi^*(x - \delta a)\,(x_i - a_i)\,\psi(x - \delta a)$$

$$= \int dx\, \psi^*(x)\, \hat{x}_i\, \psi(x) = \langle\psi|\hat{x}_i|\psi\rangle \;//$$

となり, 確かに物理量の変換則の一般論と整合的.

また, 運動量演算子 $\hat{p}$ を observable として選ぶと

$$\delta \hat{p}_i = \frac{i}{\hbar}[-\delta a\cdot \hat{p}, \hat{p}_i] = -\frac{i}{\hbar}\delta a_j [\hat{p}_j, \hat{p}_i]$$

$$= 0$$

となり, 運動量は並進操作に対して不変であることが分かる.

No.

Date

ex

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$ ：自由粒子の Hamiltonian

この場合は

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0$$

であるから，自由粒子系は空間推進で不変（並進対称性を持つ。）

⇒ 運動量は保存される！

Observable の変換則

対称操作 $\hat{U} = e^{\frac{i}{\hbar}\delta\lambda\hat{G}}$ に対する observable $\hat{O}$ の変換：

$$\delta\hat{O} = \frac{i}{\hbar}\delta\lambda[\hat{G}, \hat{O}]$$

ここが分かれば o.k.

◎ 並進操作

$$\hat{U} = \hat{T}_a = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\delta a\cdot p\right]$$ δa：無限小の parameter.

この $\hat{T}_a$ の gerator $\hat{G} = -\delta a\cdot p$,

とすると，例えば物理量として位置演算子 $\hat{r}$ が $\hat{U}$ に対してどういう変化するかを見れば，

$$\delta r_i = \frac{i}{\hbar}[-\delta a\cdot p, r_i] = -\frac{i}{\hbar}[a_j p_j, r_i]$$

$$= -\frac{i}{\hbar}a_j[p_j, r_i] = \frac{i}{\hbar}a_i\, i\hbar$$

$$= -a_i$$

この計算結果は，$r \to r' = r - \delta a$ という変換を受けることと一致。（$\psi'(r) = \psi(r - \delta a)$）

（$T_a r \to r' = r + \delta a$ とは異なることに注意。）

$(A\times B)_i = \epsilon_{ijk} A_j B_k$

いま回転操作を考えているので、O(3)ではなくSO(3)が回転操作Rの構成する群になる。

次に、いつも通り、回転を表現する無限小変換を求めたい。

$$R = \underset{\text{Identity Matrix}}{I} + \delta R$$

とすると、

$$\begin{aligned} R^\dagger R &= (I^\dagger + \delta R^\dagger)(I + \delta R) \\ &= I + \delta R + \delta R^\dagger \\ &= I \end{aligned}$$

$\therefore \underline{\delta R + \delta R^\dagger = 0}$ ← $\delta R = \begin{pmatrix} 0 & a & b \\ -a & 0 & c \\ -b & -c & 0 \end{pmatrix}$ といったかんじ

つまり、δRは反対称（非対角ベクトルの、転置成分の符号を逆転したもの。）

⇒ 無限小のangle $\delta\omega$を用いて、δRを次のように書ける！

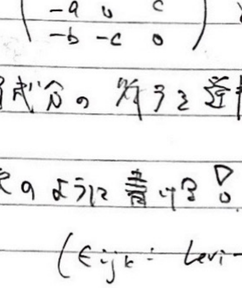
$$(\delta R)_{ij} = -\epsilon_{ijk}\,\delta\omega_k \qquad (\epsilon_{ijk}:\ \text{Levi-Chibita})$$

ということは、ベクトルrを無限小回転させたときの成分$(\delta R r)_i$は、

$$\begin{aligned} \delta r = (\delta R r)_i &= -\epsilon_{ijk}\,\delta\omega_k\, r_j \\ &= -\epsilon_{ijk}\, r_j\, \delta\omega_k \\ &= \epsilon_{ikj}\,\delta\omega_k\, r_j \end{aligned}$$

) ϵ_{ijk}は添字の入れ替えに反対称。

$\therefore \delta r = \delta\omega \times r$



これを、$\delta\omega$を軸として$\delta\omega$を右ねじが進む向きとして$|\delta\omega|$だけ右ねじの回る方向に回転させたことを意味。

No.

Date

§1.2.3 空間回転と角運動量

原点周りの回転 R による変換　R : 3×3の実行列

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \to \boldsymbol{x}' = R\boldsymbol{x}$$

ここで、回転はベクトルのノルムを変えないので、

$$|\boldsymbol{x}|^2 = \boldsymbol{x}^t \boldsymbol{x},$$
$$|\boldsymbol{x}'|^2 = \boldsymbol{x}'^t \boldsymbol{x}' = (R\boldsymbol{x})^t R\boldsymbol{x}$$
$$= \boldsymbol{x}^t R^t R \boldsymbol{x}$$

$$\therefore \boxed{\begin{aligned} R^t R &= I \\ R^t &= R^{-1} \end{aligned}}$$

ということを R が満たすべきと分かる。こういう条件を満たす行列：直交行列 $O(3)$

また、
$$(\det R)^2 = 1$$
が分かるが、特に $R \to I$ へ単位行列に連続変形できるような行列 R に関しては
$$\det R = 1$$
が成り立つ。これを満たすような行列は $SO(3)$ と呼ばれる
Special orthogonal group.

(∵) $I = R^t R$.

$\therefore \det I = 1 = \det R^t \det R.$
$= \det R^{-1} \det R.$

ここで $I = R^{-1} R$ より　$\det I = 1 = \det R^{-1} \det R.$

$\therefore (\det R)^2 = 1.$

また、$\det I = 1$ ではあるから、$\det R = 1$ であれば、R を連続的に I と一致させることができる

そして、波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ に対して

$$\psi'(R\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}), \quad \psi'(\mathbf{r}) = \psi(R^{-1}\mathbf{r})$$

とすると、

$$
\begin{aligned}
\delta\psi &:= \psi'(\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \\
&= \psi(R^{-1}\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) && R^{-1}\mathbf{r} = \mathbf{r} - \delta\mathbf{r} \\
&= \psi(\mathbf{r} - \delta R\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) && \delta R\mathbf{r} = \delta\mathbf{r} \\
&= \psi(\mathbf{r} - \delta\mathbf{r}) - \psi(\mathbf{r}) \\
&= -(\delta\mathbf{r})\cdot\nabla\psi \\
&= -(\delta\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\cdot\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\right)\psi \\
&= -\frac{i}{\hbar}(\delta\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\cdot\mathbf{p}\,\psi && \boxed{\mathbf{A}\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{C}) = \mathbf{B}\cdot(\mathbf{C}\times\mathbf{A}) = \mathbf{C}\cdot(\mathbf{A}\times\mathbf{B})} \\
&= -\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\,\psi
\end{aligned}
$$

$\mathbf{L} := \mathbf{r}\times\mathbf{p}$ と角運動量 (Angular Momentum) を定義すると、

$$\cdots = -\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{L}\,\psi$$

となる。

・以上をまとめて、

— 空間回転 —

空間回転の演算子の生成演算子は角運動量であり、

$$\hat{U}_{\delta\omega} = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\hat{\mathbf{L}}\right]$$

よって、空間回転に対して不変な系では、角運動量は保存量になる。

$$[\mathbf{L}, \hat{H}] = 0 \qquad \langle\hat{\mathbf{L}}\rangle_t = \mathrm{Const.}$$