演習問題 7 :群の表現と量子力学 (2020) 初貝，吉田 (恒)

問題 1. ハミルトニアン H のエネルギー E の規格直交化された固有状態は $|\psi_i\rangle$, $(i = 1, \cdots, d)$ d 重に縮退していて，ユニタリ変換 R は H と可換であるとする $[H, R] = 0$。

(1) $R|\psi_j\rangle = |\psi_i\rangle D_{ij}(R)$ となる d 次元行列 D: $\{D(R)\}_{ij} = D_{ij}(R)$ が存在するのはなぜか，理由を述べよ。

(2) $D(R)$ がユニタリ行列であることを示せ。

(3) $\psi = (|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_d\rangle)$ として $R\psi = \psi D(R)$ を成分を用いて書き直せ。

(4) $(R_2R_1)\psi = \psi D(R_2)D(R_1)$ であることを示せ。これから $D(R_2R_1) = D(R_2)D(R_1)$ となる。

(5) $(R^{-1})\psi = \psi[D(R)]^{-1}$ を示せ。

問題 2. 1 次元ポテンシャル $V(x)$ 中の質点のハミルトニアン $H(x) = \frac{p^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)$, $(p = -i\hbar\partial_x)$ の固有関数 $\psi(x)$, $H\psi = E\psi$ を考える。

(1) $V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \le a \\ +\infty & |x| > a \end{cases}$ を考える。

(a) $\psi_\pm^k = e^{\pm ikx}$ に関して $H\psi_\pm^k = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi_\pm^k$ となることを示せ。

(b) 系の波動関数を $\psi = A_k\psi_+^k + B_k\psi_-^k$ とおき、これが境界条件 $\psi(\pm a) = 0$ を満たすとして $\det M = 0$, $M = \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ e^{-ika} & e^{ika} \end{pmatrix}$ から $k = k_n = \frac{\pi n}{2a}$, $n = 1, 2, \cdots$ を導け。

(c) n が奇数の時 $\frac{A_{k_n}}{B_{k_n}} = 1$ を示し，$\psi_{k_n} = C_n^c \cos k_nx$ を導け。C_n^c は定数。

(d) n が偶数の時 $\frac{A_{k_n}}{B_{k_n}} = -1$ を示し，$\psi_{k_n} = C_n^s \sin k_nx$ を導け。C_n^s は定数。

(e) $H(-x) = H(x)$ であるから，反転操作 $I : x \to -x$ に対して，$[H, I] = 0$ である。恒等変換 (何もしない変換) を E とかいて

$$E\psi_{k_n} = \psi_{k_n}D^n(E), \quad I\psi_{k_n} = \psi_{k_n}D^n(I)$$

と書いたとき，次の関係式を示せ。

$$D^n(E) = 1, \quad D^n(I) = (-1)^{n-1}$$

(2) $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ を考える。この時，a を $[a, a^\dagger] = 1$ を満たす消滅演算子としたとき，$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ として，$x = \frac{\ell}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger)$, $p = \frac{\hbar}{i\ell\sqrt{2}}(a - a^\dagger)$ は $[x, p] = i\hbar$ を満たし，$H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$ となる（復習）。また，このハミルトニアンも $[H, I] = 0$ と反転対称性を持つ。

(a) $a\psi_0 = 0$ から ψ_0 を求めよ。

(b) $I\psi_0 = \psi_0$ を示せ。

(c) $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n\psi_0$ は $H\psi_n = E_n\psi_n$, $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ を満たす。

$$E\psi_{k_n} = \psi_{k_n} D^n(E), \quad I\psi_{k_n} = \psi_{k_n} D^n(I)$$

と書いたとき，$D^n(E)$ と $D^n(I)$ を求めよ。ただし $IxI = -x$, $IpI = -p$, $(I^{-1} = I)$ である。

問題 3. 正三角形状の 3 原子分子を考え，ハミルトニアンを $H = \begin{pmatrix} 0 & t & t \\ t & 0 & t \\ t & t & 0 \end{pmatrix}$, $(t < 0)$ とする。

(1) $\omega = \frac{-1+i\sqrt{3}}{2}$, ($\omega^3 = 1$, $\omega^* = \omega^{-1}$) として $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega^n \\ \omega^{2n} \end{pmatrix}$, $n = 0, 1, 2$ が H の固有関数であることを確認し，$H\psi_n = E_n\psi_n$ となる E_n を $n = 0, 1, 2$ に対して、それぞれ求めて $E_1 = E_2$ を確認せよ。

(2) 原子 1 と 2 の入れ替えを表すユニタリ変換 $\sigma_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ に対してハミルトニアンが不変であること $[\sigma_{12}, H] = 0$（2×2 零行列）を示せ。

(3) $\sigma_{23} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_{23} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, $C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, として $G = \{E, \sigma_{12}, \sigma_{23}, \sigma_{31}, C, C^2\}$ は群をつくり、$R_i \in G$ から決まる R_2R_1 は丁寧に計算すれば次のようになる。各行、各列で G の全ての元が必ず 1 回あらわれることを用いて空白の部分を埋めよ（どうしてか余裕があれば考えよ)。

R_2 \ R_1	E	σ_{12}	σ_{23}	σ_{31}	C	C^2
E	E	σ_{12}	σ_{23}	σ_{31}	C	C^2
σ_{12}		E	C^2		σ_{31}	σ_{23}
σ_{23}		C	E	C^2	σ_{12}	σ_{31}
σ_{31}	σ_{31}	C^2	C	E	σ_{23}	σ_{12}
C	C	σ_{23}	σ_{31}	σ_{12}	C^2	E
C^2	C^2	σ_{31}	σ_{12}		E	C

(4) 前問の穴埋めが、正しいことを実際に行列の積を計算して何カ所か確認せよ。G はハミルトニアン H を不変にする群となる。(余裕があれば、確認せよ)

(5) $\Psi = (\psi_1, \psi_2)$ として

$$\sigma_{12}\psi_1 = \sigma_{12}\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega \\ \omega^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} \omega \\ 1 \\ \omega^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega^2 \\ \omega^4 \end{pmatrix}\omega = \psi_2\omega,$$

$$\sigma_{12}\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega^2 \\ \omega^4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} \omega^2 \\ 1 \\ \omega^4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega \\ \omega^2 \end{pmatrix}\omega^2 = \psi_1\omega^2,$$

なので，$\sigma_{12}\Psi = \Psi D(\sigma_{12})$ としたとき $D(\sigma_{12}) = \begin{pmatrix} 0 & \omega^2 \\ \omega & 0 \end{pmatrix}$ である。

さらに

$$\sigma_{23}\psi_1 = \sigma_{23}\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega \\ \omega^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega^2 \\ \omega \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega^2 \\ \omega^4 \end{pmatrix} = \psi_2,$$

$$\sigma_{23}\psi_2 = \sigma_{23}\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega^2 \\ \omega^4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega^4 \\ \omega^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \omega \\ \omega^2 \end{pmatrix} = \psi_1$$

となることを確認して $\sigma_{23}\Psi = \Psi D(\sigma_{23})$ としたときの $D(\sigma_{23})$ を求めよ。

(6) 表から $C = \sigma_{23}\sigma_{12}$ である。これを用いて $D(C)$ を求めよ。（問題 1(4）を用いよ。）

(7) $C\psi_1 = \psi_1\omega$, $C\psi_2 = \psi_2\omega^2$ を直接示し，前問で求めた $D(C)$ が正しいことを確認せよ。