量子力学II 第2回 ノートまとめ [redacted]

ブラケット記法で

$|n\rangle,\ n=1,2,\cdots$

が規格直交化されてかつ完全な基底とする

任意の演算子 A について、以下のようになる

$A: |\psi\rangle \mapsto |\chi\rangle = A|\psi\rangle = |A\psi\rangle$

特に $A|n\rangle = \sum_m |m\rangle A_{mn},\ A_{mn} \in \mathbb{C}$

このときの A_{mn} は展開係数である。上の式で左から $\langle m|$ をかけてやることで次が得られる

$\langle m|A|n\rangle = A_{mn}$

また A のエルミート共役について（$A^\dagger$ は $\langle m|A|n\rangle = \langle A^\dagger m|n\rangle$ を満たす）

$\langle A^\dagger m| = (|A^\dagger m\rangle)^\dagger = (A^\dagger|m\rangle)^\dagger = \langle m|(A^\dagger)^\dagger = \langle m|A$ $\quad (\because \langle A^\dagger m|n\rangle = \langle m|A|n\rangle = \langle m|An\rangle = \langle m|A\cdot|n\rangle)$

一般に

$(X|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|X^\dagger$

とすると $\langle m|A|n\rangle$ と書いてよい ??

基底 $\{|n\rangle\}$ での A の行列表示として A を用いる。つまり $\langle m|A|n\rangle = A_{mn} = (\mathsf{A})_{mn}$

$A^\dagger|n\rangle = \sum_m |m\rangle (A^\dagger)_{mn}$ $\quad\rightarrow\quad \langle m|A^\dagger|n\rangle = (A^\dagger)_{mn}$

$(A^\dagger|n\rangle)^\dagger = \langle n|A = \sum (A^\dagger)^*_{mn}\langle m|$ $\quad\rightarrow\quad \overbrace{\langle n|A|m\rangle}^{A_{nm}} = (A^\dagger)^*_{mn}$

$\therefore (A^\dagger)_{mn} = A^*_{nm}$ OK.

行列 A に対しては

$(\mathsf{A})_{nm} = (\tilde{\mathsf{A}})_{mn} = ({}^t\mathsf{A})_{mn}$

$\tilde{\mathsf{A}} = {}^t\mathsf{A},\quad \mathsf{A}^\dagger = \tilde{\mathsf{A}}^*$

対称性の話

対称操作を U として、次のようなものとする

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

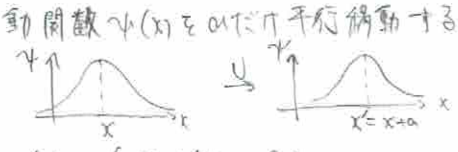
$|\psi\rangle$ は規格直交化されているとし、操作後の関数を $|\psi'\rangle$ と書くことにすると

$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle = 1$ （第1回授業より対称操作はユニタリである必要あり）

操作の例）1次元、波動関数 $\psi(x)$ を a だけ平行移動する操作 U

$U: \psi \longmapsto \psi'$

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



$\psi'(x) = \psi(x-a) = \psi(x) + (-a)\psi'(x) + O(a^2)$

a が小さいと、$a = \delta a$ として無限小と考えて、無限小変換となり、テイラー展開して、

$\psi'(x) = \psi(x-a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!}\psi^{(n)}(x)$

$\psi^{(n)} = \frac{d^n}{dx^n}\psi(x) = \partial^n\psi$ $\quad (\partial = \frac{d}{dx})$ と書くとすると

$\therefore \psi'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a\partial)^n}{n!}\psi = e^{-a\partial}\psi$ $\quad (\because e^z$ のマクローリン展開）

ここで $\psi'(x) = U\psi$ であったから $U = e^{-a\partial}$

x の運動量を $p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\ (= -i\hbar\partial)$ とすると

$U = e^{-a\partial} = e^{-iap_x/\hbar}$

となるが特に a が $a = \delta a$（無限小）なら一般に

$U = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ $\quad G = p_x$ $\quad$（ただし $\delta\lambda = -\delta a$）

となり G は変換の母関数ということになる。つまり、空間 x 方向への並進操作の母関数は x 方向への運動量 p_x

補足 エルミート演算子について（$p_x^\dagger = p_x$）

一般にエルミート演算子 $A = A^\dagger$ に対して、

$\langle\psi|A\varphi\rangle = \langle A^\dagger\psi|\varphi\rangle$ $\quad$ for $\forall\psi,\varphi$ ―①

が成り立っている。このとき $p_x = \frac{\hbar}{i}\partial$ の ∂ について、

$\langle\psi|\partial\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*(x)\,\partial\varphi(x) = \psi^*(x)\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx\,(\partial\psi^*)\varphi$ $\quad$（部分積分の要領で）

これでもし $\psi^*(x)\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$ なら、

$\langle\psi|\partial\varphi\rangle = -\langle\partial\psi|\varphi\rangle$ となる。これと①からすると、$(\partial)^\dagger = -\partial$

となるので $(p_x)^\dagger = p_x$ と確かになってエルミートである。では $\psi^*(x)\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$ となるのはどういうときか？

1つは$\psi(x)$と$\varphi(x)$が$\pm\infty$で十分早く0になるとき。
もしくは$\psi^*(x)\cdot\varphi(x)\Big|_{-L/2}^{L/2} \xrightarrow{L\to\infty} 0$ 。つまり平面波のとき
なので $\psi(x+L)=\psi(x)$
$\varphi(x+L)=\varphi(x)$ ⟶ 周期的境界条件

対称操作 $U=e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ で物理系が不変なら対称
量子力学では$|\psi\rangle$がすべてを決定しているので

$i\hbar\partial|\psi\rangle = H|\psi\rangle$ 　　H：ハミルトニアン

HがUで不変、というのは

$H \mapsto H'$

ということ？ つまり

$\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi'|H'|\psi'\rangle = \langle\psi|U^{+}H'U|\psi\rangle$

では
$U^{+}H'U=H$ であるようにH'を定める ($H\mapsto H'=UHU^{+}$)
$U=e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ だから、

$$H'=e^{i\delta\lambda G/\hbar}He^{-i\delta\lambda G/\hbar}$$
$$=\left(1+i\frac{\delta\lambda}{\hbar}G\right)H\left(1-i\frac{\delta\lambda}{\hbar}G\right)+O(\delta\lambda^2)$$
$$=H+i\frac{\delta\lambda}{\hbar}(GH-HG)+\cancel{O(\delta\lambda^2)} \quad ?$$

$\therefore \delta H = H'-H = i\frac{\delta\lambda}{\hbar}[G,H]$ となるので Hが不変なら $\delta H=0 \Leftrightarrow [G,H]=0$
このような例として、一次元系が空間並進で不変 $[H,p_x]=0$

- 自由粒子 p_xとpで可換 ◎
- 一次元調和振動子 はというと、
  $H=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ がいるので × $x=0$が特別

では$[H,G]=0$ はどんな物理から帰結するのか？

$\langle G\rangle_t = \langle\psi(t)|G|\psi(t)\rangle$

この時間微分をとると、

$$\frac{d}{dt}\langle G\rangle_t = \frac{d}{dt}\langle\psi|G|\psi\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi|\right)G|\psi\rangle + \langle\psi|G\frac{d}{dt}|\psi\rangle$$

また $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$ を用いれば
$\delta H=0 \Leftrightarrow [G,H]=0$ というのは $\frac{d}{dt}\langle G\rangle_t = 0$
$\therefore$ Gは保存する。
⇒ x方向の並進で物理系が不変 ⇒ 運動量が保存

3次元なら、操作は
$U_{\vec{a}} = e^{-i\vec{a}\cdot\vec{p}/\hbar} = e^{-i\vec{a}\cdot\nabla}$
となり、空間並進なら運動量が保存 ○

時間並進$\delta\tau$では、 ($t'=t+\delta\tau$)
$\psi'(t)=\psi(t-\delta\tau)=\psi(t)-\delta\tau\,\partial_t\psi$
$\delta\psi = e^{-\delta\tau}\psi$
$U_{\delta\tau}=e^{-\delta\tau\partial_t}=e^{\frac{\delta\tau}{i\hbar}H}$
つまり時間並進の母関数はハミルトニアンとなり、
条件は時間並進で$\delta H=0$
⟶ エネルギー$\langle H\rangle_t$保存則。