

量子力学Ⅱ 第2回

ブラケット記法

規格直交基底 $\{|n\rangle\}$

基底 $|n\rangle, n=1, 2, \dots$ が規格直交 $\langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n=m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$

この基底で完全 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ とする

任意の演算子 A $A: |u\rangle \mapsto |x\rangle = A|u\rangle = |Au\rangle$

特に $A|u\rangle = \sum_m |m\rangle A_{mu}$ $A_{mu} \in \mathbb{C}$
展開係数

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

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

A のエルミート共役 $A^\dagger$ $\langle m| A |n\rangle = \langle A^\dagger m | n\rangle$ とするもの

$$\langle m| A |n\rangle = \langle A^\dagger m | n\rangle \rightarrow \langle A^\dagger m | = \langle m| A \quad \text{とすると}$$

$$\langle A^\dagger m | = (|A^\dagger m\rangle)^\dagger = (A^\dagger |m\rangle)^\dagger$$

$$\langle A^\dagger m | n\rangle = \langle m| A |n\rangle = \langle m| A n\rangle = \langle m| A \cdot |n\rangle \text{ とすると}$$

$$(A^\dagger |m\rangle)^\dagger = \langle m| (A^\dagger)^\dagger = \langle m| A$$

$$\text{一般に } (X |u\rangle)^\dagger = \langle u| X^\dagger \text{ とすると } \langle m| A |n\rangle \text{ と書いてよい.}$$

$$\rightarrow \langle m| A |n\rangle = A_{mn} = (\star)_{mn} \quad \text{基底 } \{|n\rangle\} \text{ での } A \text{ の行列表示}$$

$A \sim \star$: 行列

展開係数? 同一視

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

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

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

" A_{nm} "

$$\text{行列 } \star (=A) \text{ に対して } (\star)_{nm} = (\tilde{\star})_{mn} = (\star^t)_{mn}$$

$\tilde{\star} = \star^t$: $\star$ の転置行列

$$A^\dagger = \tilde{\star}^*$$

transpose

対称性

対称操作

$$U = |\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle \mapsto |U\psi\rangle = U|\psi\rangle$$

$|U\psi\rangle$ に変換する

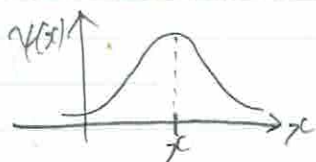
$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$$

$$U^\dagger U = 1, \quad U^\dagger = U^{-1} \quad : \text{ユニタリ行列}$$

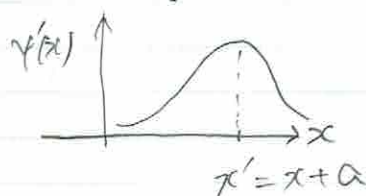
1次元の波動関数 $\psi(x)$ を a だけ平行移動する操作 U

$$U: \psi \mapsto \psi'$$

$\psi(x) = \psi'(x+a)$ とするは "平行移動" (2"あると考へ4る,



↓ U



$$\psi \mapsto \psi' = U\psi$$

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

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

a が小さい

$$a = \delta a \quad (\text{無限小と考へる})$$

無限小変換

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

テイラー展開 Taylor expansion

$$\psi^{(n)} = \frac{d^n}{dx^n} \psi(x) = \partial^n \psi$$

$$\partial = \frac{d}{dx} \text{ と書く.}$$

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

$$e^z = 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 + \dots$$

$$\psi'(x) = e^{-a\partial} \psi = U\psi \quad U = e^{-a\partial}$$

$$x \text{ の運動量 } p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = -i\hbar\partial$$

とすると,

$$U = e^{-a\partial} = e^{-a(\frac{i}{\hbar}p_x)\frac{\hbar}{i}} = e^{-ia p_x / \hbar}$$

特に $a = \delta a$, 無限小

$$\text{一般に } U = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$$

$$G = p_x \quad (\delta\lambda = -\delta a)$$

G : 変換の母関数

空間 x 方向への並進操作の母関数は p_x : x 方向への運動量

$$\text{補足} \quad p_x^\dagger = p_x \quad \text{エルミート演算子}$$

$$\text{エルミート } A = A^\dagger$$

$$\langle \psi | A \psi \rangle = \langle A^\dagger \psi | \psi \rangle \quad \text{for } \forall \psi, \varphi$$

$$P_x = \frac{\hbar}{i} \partial \quad \partial = \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | \partial \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \partial \psi(x) = \partial(\psi^* \psi) - (\partial \psi^*) \psi \\ &= \psi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx (\partial \psi^*) \psi \end{aligned}$$

部分積分

$$\text{もし, } \psi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0 \text{ ならば}$$

$$\langle \psi | \partial \psi \rangle = - \langle \partial \psi | \psi \rangle \quad \text{となる.}$$

$$(\partial)^\dagger = -\partial$$

$$(P_x)^\dagger = \left(\frac{\hbar}{i} \partial\right)^\dagger = (-1)^2 P_x = P_x \quad : P_x \text{ はエルミート}$$

$$\psi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad \psi(x), \varphi(x) \text{ が } |x| \rightarrow \infty \text{ で } 0 \text{ になる}$$

$$\text{もし } \psi^*(x) \psi(x) \Big|_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 0 \quad \text{"平面波"}$$

$$\begin{aligned} \psi(x+L) &= \psi(x) \\ \varphi(x+L) &= \varphi(x) \end{aligned} \quad \rightarrow \text{周期的境界条件}$$

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

対称操作

量子力学の物理系が不変
量子力学 $|\psi\rangle$ が U によって決定

$$H|\psi\rangle = H'|\psi\rangle \quad H: \text{ハミルトニアン}$$

H が不変である

$$H \mapsto H' \quad ? \quad \text{物理量の変換}$$

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

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi' | H' | \psi' \rangle$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi' | H' | \psi' \rangle = \langle \psi | U^\dagger H' U | \psi \rangle$$

$$U^\dagger H' U = H \quad \text{であるように } H' \text{ を定める}$$

$$H \rightarrow H' = U H U^\dagger$$

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

$$\begin{aligned} H' &= e^{-i\delta\lambda G/\hbar} H e^{-i\delta\lambda G/\hbar} \quad (G: \text{エルミート}) \\ &= (1 - i\delta\lambda G/\hbar) H (1 + i\delta\lambda G/\hbar) \end{aligned}$$

$$H' = H + i \frac{\delta \lambda}{\hbar} (GH - HG) + O(\delta \lambda^2)$$

$$\delta H = H' - H = i \frac{\delta \lambda}{\hbar} [G, H]$$

$$H \text{ が } \lambda \text{ 不変 } \delta H = 0 \Leftrightarrow [G, H] = 0$$

例: 一次系が"空間並進" 不変 $[H, p_x] = 0$

・自由粒子 $H = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial^2$ 空間並進で不変

一次元調和振動子 $H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$
 $[H, p_x] \neq 0$ 並進で不変ではない
 $x=0$ が特別

$[H, G] = 0$ どのような物理的帰結?

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

$$\frac{d}{dt} \langle G \rangle_t = \frac{d}{dt} \langle \psi | G | \psi \rangle$$

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

$$(i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle = H | \psi \rangle)$$

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | = \langle \psi | H$$

$$\frac{d}{dt} \langle G \rangle_t = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | H \cdot G | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | G \cdot H | \psi \rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [G, H] | \psi \rangle$$

$$\delta H = 0 \Leftrightarrow [G, H] = 0 \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \langle G \rangle_t = 0$$

$\langle G \rangle_t = \langle \psi | G | \psi \rangle$ は時刻 t によらない. G は保存する.

x 方向の並進"物理系が"不変 $\Rightarrow$ 運動量が保存する

3次元なら $U_{\vec{a}} = e^{i\vec{a} \cdot \vec{p}} / \hbar = e^{-i\vec{a} \cdot \vec{\nabla}}$
 空間並進 $\Rightarrow$ 運動量保存

時間推進 δt

$$\psi(t) \mapsto \psi'(t') \quad t' = t + \delta t$$

$$\psi'(t) = \psi(t - \delta t) = \psi(t) - \delta t \partial_t \psi$$

$$\delta \psi = -\delta t \partial_t \psi$$

$$U_{sc} = e^{-i\hat{H}t}$$

$$= e^{-\frac{\partial}{\partial \hbar} H}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \sim \frac{H}{i\hbar}$$

時間推進の母関数は $\langle \text{ヒルトン} = A \rangle [H(t), H(t)] = 0$
 H が t に依存しない $\rightarrow$ 時間推進で $\delta H = 0$

時間推進での不変性 $\rightarrow$ エネルギー $- \langle H \rangle_t$ 保存則