

量子力学Ⅱ

ブラケット記法

状態 $|n\rangle$, $n=1,2,3$ が規格直交でかつ完全とする.

$$\text{規格直交: } \langle n|m\rangle = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n=m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

$$\text{完全: } \sum_n |n\rangle \langle n| = 1$$

任意の演算子 A について

$$|x\rangle = A|v\rangle = |Av\rangle$$

特に

$$A|n\rangle = \sum_m |m\rangle A_{mn}, \quad \text{展開係数: } A_{mn} \in \mathbb{C}$$

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

$$\equiv \langle m|A|n\rangle$$

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

A のエルミート共役

$$\langle m|A|n\rangle = \langle A^\dagger m|n\rangle \quad \text{と等しいもの}$$

$$\langle m|A|n\rangle = \langle A^\dagger m|n\rangle$$

$$\rightarrow \langle A^\dagger m| = \langle m|A \text{ とすると } \langle m|A|n\rangle \text{ と書いてよい}$$

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

$$\begin{aligned} \langle A^\dagger m|n\rangle &= \langle m|A|n\rangle = \langle m|A|n\rangle \\ &= \langle m|A|n\rangle \end{aligned}$$

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

$$\text{一般に } (X|v\rangle)^\dagger = \langle v|X^\dagger \text{ とすると}$$

$$\langle m|A|n\rangle \text{ と書いてよい}$$

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

基底 $\{|n\rangle\}$ での A の行列表示

$$A \sim A: \text{行列} \quad (\text{同一視})$$

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

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

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

$\leftarrow |m\rangle$ より

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

$$A_{nm}^*$$

$$(A^\dagger)_{nm} = A_{mn}^*$$

行列 A に対して

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

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

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

対称性

対称操作: U

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

$U|\psi\rangle$ に変換する

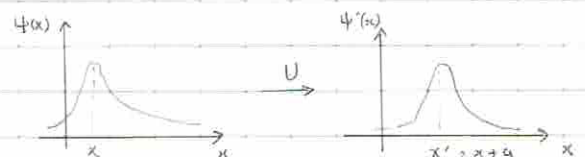
$$\langle \psi|\psi\rangle = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = 1$$

$$\langle \psi'|\psi'\rangle = \langle \psi|U^\dagger U|\psi\rangle = 1$$

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

1次元の波動関数 $\psi(x)$ を α だけ "平行移動" する操作: U

$$U: \psi \rightarrow \psi'$$



$\psi(x) = \psi'(x+\alpha)$ とすれば "平行移動" (であると考えられる)

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

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

$$= \psi(x) + (-\alpha)\dot{\psi}(x) + O(\alpha^2)$$

$$\alpha \text{ が小さい: } \alpha = \delta\alpha \text{ (無限小と考える)}$$

無限小変換

テイラー展開

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

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

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

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

$$e^z = 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 + \frac{1}{4!}z^4 + \dots$$

指数関数

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

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

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

特に $\alpha = \delta\alpha$ (無限小)

$$\text{一般に } U = e^{i\delta\lambda G / \hbar} \quad G = p_x \quad (\delta\lambda = -\delta\alpha)$$

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

(補足) $p_x^\dagger = p_x$ エルミート演算子

エルミート $A = A^\dagger$

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

$p_x = \frac{\hbar}{i} \partial$ ∂ について考える

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

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

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

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

$$(p_x)^\dagger = \left(\frac{\hbar}{i} \partial\right)^\dagger = (-i\hbar)^\dagger \partial = p_x : p_x \text{ はエルミート} \quad [H, G] = 0 : \text{どんな物理的帰結?}$$

$$\psi^*(x) \varphi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

$\psi(x), \varphi(x)$ が $\pm\infty$ で十分早く 0

$$\psi^*(x) \varphi(x) \Big|_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 0$$

"平面波"

$$\begin{aligned} \psi(x+L) &= \psi(x) \\ \varphi(x+L) &= \varphi(x) \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \psi(x+L) &= \psi(x) \\ \varphi(x+L) &= \varphi(x) \end{aligned}} \right\} \text{同期的境界条件}$$

対称操作 $U = e^{i\delta\lambda G/\hbar}$ で物理系が不変

量子力学 $|\psi\rangle$ がすべてを決定

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

H : ハミルトニアン

H が U で不変である

$$H \mapsto H'?$$

物理量の変換

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

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \langle \psi' | H' | \psi' \rangle = \langle \psi | U^\dagger H' U | \psi \rangle \\ &\quad \uparrow \\ &\quad |\psi'\rangle = U |\psi\rangle \end{aligned}$$

$$U \rightarrow \leftarrow U^\dagger \text{ より}$$

$U^\dagger H' U = H$ であるように H' を定める

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

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

$$\begin{aligned} H' &= e^{i\delta\lambda G/\hbar} H e^{-i\delta\lambda G/\hbar} \quad (G: \text{エルミート}) \\ &= \left(1 + i\frac{\delta\lambda}{\hbar} G\right) H \left(1 - i\frac{\delta\lambda}{\hbar} G\right) + O(\delta\lambda^2) \\ &= H + i\frac{\delta\lambda}{\hbar} (GH - HG) + O(\delta\lambda^2) \end{aligned}$$

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

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

例: 一次元系が空間並進で不変 $[H, p_x] = 0$

$$\cdot \text{自由粒子 } H = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial^2$$

空間並進で不変

$$\cdot \text{一次元調和振動子 } H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$[H, p_x] \neq 0 \quad \text{並進で不変ではない}$$

$x=0$ が特別

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle G \rangle_t &= \frac{d}{dt} \langle \psi | G | \psi \rangle \\ &= \left(\frac{d}{dt} \langle \psi | \right) G | \psi \rangle + \langle \psi | G \left(\frac{d}{dt} | \psi \rangle \right) \end{aligned}$$

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

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

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

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

$$\delta H = 0 \Leftrightarrow [G, H] = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} \langle G \rangle_t = 0$$

$\langle G \rangle_t = \langle \psi | G | \psi \rangle$ は時刻 t によらない

G は保存する。

x 方向の並進で物理量が不変

$\Rightarrow$ 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

$$\psi(x) \mapsto \psi'(x) \quad x' = x + \delta x$$

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

$$= \psi(x) - \delta x \partial_x \psi$$

$$\delta \psi = e^{-\delta x \partial_x} \psi$$

$$U_{\delta t} = e^{-\delta t \partial_t} = e^{\frac{\delta t}{i\hbar} H}$$

$$i\hbar \partial_t \psi = H \psi$$

$$\partial_t \sim \frac{H}{i\hbar}$$

時間推進の母関数はハミルトニアン

$$[H(x), H(x)] = 0$$

H が x 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