[redacted]

NO.
DATE 5 . 2 . 金

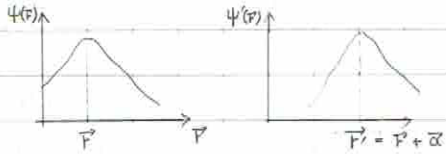
量子力学 II

対称操作：U について

位置ベクトル $\vec{r}$ での波動関数を $\psi(\vec{r})$ とする

並進を例にとると

$$U: \vec{r} \longrightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \vec{\alpha} \quad (\vec{\alpha}：定数ベクトル)$$



$\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r}')$ となる $\psi' = U\psi$ を考える。

$$U: \psi \longmapsto \psi'$$

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

$$\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r} + \vec{\alpha})$$

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{\alpha})$$

無限小変換 $\vec{\alpha} = \delta\vec{\alpha}$（1次まで考える）

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \delta\vec{\alpha})$$

$$= \psi(\vec{r}) - \delta\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{r})$$

テイラー展開（の最低次）

$$= (1 - \delta\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla})\psi(\vec{r})$$

$$\simeq e^{-\delta\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}}\psi(\vec{r})$$

従って、$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ $\left(\vec{\nabla} = \frac{i}{\hbar}\vec{p}\right)$ より

$$U = e^{-\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}} = e^{-i\vec{\alpha}\cdot\vec{p}/\hbar}$$

$U: \psi(\vec{r}) \longmapsto \psi'(\vec{r})$（関数 $\longmapsto$ 関数）は演算子である

$\vec{p}$ はエルミート演算子（$\vec{p}^\dagger = \vec{p}$）であるため

$$U^\dagger = e^{+i\vec{\alpha}\cdot\vec{p}/\hbar} = U^{-1}$$

$$U^\dagger U = UU^{-1} = 1$$

従って U はユニタリ演算子である

$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ とすると $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ より

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

従って ユニタリ演算子 $\Longleftrightarrow$ 規格化を保存する

一般に無限小変換

$$U = e^{i\delta\lambda G/\hbar} \quad (\delta\lambda：無限小)$$

$$= 1 + i\delta\lambda G/\hbar$$

はユニタリ演算子である。

ここで、

$$G^\dagger = G$$

は変換の母関数（エルミート）である

物理量 $\mathcal{O}$ エルミート演算子 について

期待値：$\langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle$

は $\mathcal{O} \longmapsto \mathcal{O}'$ でどう変換されるのか？

$\langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle = \langle\psi'|\mathcal{O}'|\psi'\rangle$ という $\mathcal{O}'$ を定める。

$$\langle\psi'|\mathcal{O}'|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger\mathcal{O}'U|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle$$

$$\therefore U^\dagger\mathcal{O}'U = \mathcal{O} \Longleftrightarrow \mathcal{O}' = U\mathcal{O}U^{-1}$$

$\delta\mathcal{O} = \mathcal{O}' - \mathcal{O}$（物理量 $\mathcal{O}$ の変化分）を考える

$$\delta\mathcal{O} = U\mathcal{O}U^{-1} - \mathcal{O}$$

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

$$= (1 + i\delta\lambda G/\hbar)\mathcal{O}(1 - i\delta\lambda G/\hbar) - \mathcal{O}$$

$$= i\frac{\delta\lambda}{\hbar}[G, \mathcal{O}] + \cancel{\mathcal{O}(\delta\lambda^2)}$$

従って、$\delta\mathcal{O} \leftarrow [G, \mathcal{O}]$

物理量の変化 $\longleftrightarrow$ 母関数と物理量の交換子

特に $\mathcal{O} = H$ ハミルトニアン の場合

（波動関数の時間発展を定める）系

$\delta\mathcal{O} = 0$ 変換で物理量が不変

$\delta H = 0$ 変換でハミルトニアンが不変

$[G, H] = 0$

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

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

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

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

$$= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[G, H]|\psi\rangle = 0$$

従って、$\langle G\rangle_t$ は t によらない

$\Rightarrow$ G：保存量

まとめ

系の無限小変換（母関数 G）に対する不変性

$\Updownarrow$

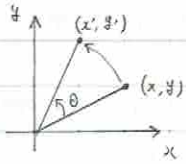
保存量 G

例 並進不変性 $\longleftrightarrow$ 運動量保存

時間推進不変性 $\longleftrightarrow$ エネルギー保存

回転操作：$U = R$ について

回転とは？



2次元の回転

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$$

$R : \vec r \mapsto \vec r'$

$|\vec r| = |\vec r'|$: 長さが不変な連続変換

$\vec r = \begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$ とし、$\tilde{\vec r} = {}^t\vec r = (x, y, z)$ と書く。

$\vec r \mapsto \vec r' = R\vec r$

$$R = \begin{pmatrix}* & * & *\\ * & * & *\\ * & * & *\end{pmatrix}$$ 3×3の実行列

$|\vec r|^2 = (\vec r, \vec r)$ 内積

$$= (x, y, z)\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

$= \tilde{\vec r}\vec r$

$|\vec r'|^2 = \tilde{\vec r}'\vec r'$

$= (\widetilde{R\vec r})R\vec r$

$= \tilde{\vec r}\tilde R R\vec r = \tilde{\vec r}\vec r$

＊一般の行列ABについて

$\widetilde{AB} = \tilde B\tilde A$

従って、$\tilde R R = E_3 = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$ である。

⇒ $\tilde R = R^{-1}$ 直交行列

回転行列 R : 実の直交行列

＊ $\widetilde{AB} = \tilde B\tilde A$ について

$(\widetilde{AB})_{ij} = (AB)_{ji}$

$= A_{jk}B_{kj}$

$= B_{kj}A_{jk} = (\tilde B)_{jk}(\tilde A)_{kj} = (\tilde B\tilde A)_{ij}$

特に無限小変換 δR について

$$R = 1 + \delta R = E_3 + \underbrace{\delta R}_{\text{無限小の}3\times3\text{行列}}$$

$\tilde R R = (\widetilde{E_3 + \delta R})(E_3 + \delta R)$

$= E_3 + \widetilde{\delta R} + \delta R + \cancel{\delta R^2} = E_3$

⇒ $\widetilde{\delta R} + \delta R = 0$

$\widetilde{\delta R} = -\delta R$: 反対称行列

$(\delta R)_{ij} = -(\delta R)_{ji}$

従って、

$(\delta R)_{ij} = -\varepsilon_{ijk}\delta w_k$ と書く

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & ijk = (123), (231)(312) \\ -1 & (213)(132)(321) \\ 0 & \end{cases}$$

エディントンのε

$R : \psi \to \psi' = U\psi$ において U は？

$R = 1 + \delta R$, $R^{-1} = 1 - \delta R$ より、

$\psi(\vec r) = \psi(\vec r') = \psi'(R\vec r)$

$\psi'(\vec r) = \psi(R^{-1}\vec r)$

$= \psi((1 - \delta R)\vec r)$

$= \psi(\vec r - \delta R\vec r)$

$= \psi(\vec r) - (\delta R\vec r)\cdot\nabla\psi$ (テイラー展開)

ここで、

$-(\delta R\vec r)\cdot\nabla = -(\delta R r)_i\cdot\partial_i$

$= -(\delta R)_{ia}r_a\partial_i$

$= \varepsilon_{iak}\delta w_k r_a\partial_i$

$= \varepsilon_{iak}r_a\partial_i\delta w_k$

$= -\varepsilon_{kai}r_a\partial_i\delta w_k$

$= -(\vec r\times\nabla)_k\delta w_k$

$= -\delta\vec w\cdot(\vec r\times\nabla)$

従って、

$\psi' = \psi - \delta\vec w\cdot(\vec r\times\nabla)\psi \qquad \vec p = \frac{\hbar}{i}\nabla$

$= \psi - i\cdot\delta\vec w(\vec r\times\vec p)/\hbar\,\psi$

$= e^{-i\delta\vec w\cdot\vec L/\hbar}\psi$

ここで、

$\vec r\times\vec p = \vec L$ 角運動量

$\vec{r} \mapsto \vec{r}' = R\vec{r}$, $R = 1 + \delta R$

$|\vec{r}| = |\vec{r}'|$

$$\psi \mapsto \psi' = \underbrace{e^{-i\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}/\hbar}}_{U}\,\psi$$

$\Rightarrow U = e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{L}/\hbar}$

$$|\psi\rangle = |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$$
$$= e^{-i\vec{\omega}\cdot\vec{L}/\hbar}|\psi\rangle$$

従って、回転の母関数は角運動量である。

H が回転操作で不変

↓

角運動量が保存

特に無限小変換 $e^{-i\delta\vec{\omega}\cdot\vec{L}/\hbar}$ について

一般の物理量 O はどう変換されるか？

$\delta O = +i\delta\omega_i \cdot [O, L_i]/\hbar$ と変換

$O' = UOU^\dagger$

交換子 ↔ 変化

$\delta\vec{r}$, $\delta\vec{p}$, $\delta\vec{L}$ を計算

↕

$[L_i, L_j]$ を計算する

交換則で物理量を分類

交換子