対称性と保存則

時間の並進

$\hat{H}$ が t に依存しない $\longrightarrow \frac{d}{dt}\hat{H} = 0$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}_{\hat{U}(t)}|\psi(0)\rangle$$

$\hat{U}(t)$ 時間発展演算子

$\hat{H}$：生成子

$\hat{H}$ は自身とは交換するので

$$\langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\cdot\hat{H}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|\hat{H}|\psi(0)\rangle = E$$

エネルギー保存則

空間の並進

$\psi(x)$ を x 方向へ x_0 平行移動 $\longrightarrow \psi(x-x_0)$

$$\psi(x-x_0) = \left(1 + (-x_0)\frac{d}{dx} + \frac{(-x_0)^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2} + \cdots\right)\psi(x)$$

$$= e^{-x_0\frac{d}{dx}}\cdot\psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}\cdot x_0}\psi(x) \quad \leftarrow \hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$$

系を平行移動するユニタリ演算子 $\hat{T}(x_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}\cdot x_0}$　　$\hat{p}$：生成子

$$\int \psi^*(x)\hat{H}\psi(x)dx = \int \psi^*(x-x_0)\hat{H}\psi(x-x_0)dx \quad : \text{並進対称性}$$

$$= \int \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\psi(x)\right)^*\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\psi(x)\,dx$$

$$= \int \left(\hat{T}(-x_0)\psi(x)\right)^*\hat{H}\hat{T}(-x_0)\psi(x)dx$$

$$= \int \psi(x)^*\hat{T}^\dagger(-x_0)\hat{H}\hat{T}(-x_0)\psi(x)dx$$

$$= \int \psi(x)^*\underbrace{\left\{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\right\}}_{\hat{H}}\psi(x)dx$$

x_0 微小量として

$$\hat{H} = \hat{H} + \frac{i}{\hbar}[\hat{p},\hat{H}]x_0 + O(x_0^2)\cdots$$

そのためには、$[\hat{p},\hat{H}] = 0$

ハイゼンベルクeq. $\frac{d}{dt}\hat{p} = \frac{i}{\hbar}\underbrace{[\hat{H},\hat{p}]}_{=0}$

運動量保存則

結晶格子（間隔 a）

$x_0 = na \quad n \in \mathbb{Z}$

$\hat{T}(na) = \left(\hat{T}(a)\right)^n$ なので $\left[\hat{H}, \left(\hat{T}(a)\right)^n\right] = 0$

これは、$\hat{H}$ と $(T(a))^n$ が同時固有状態をとる。

$T(a)$ の固有値 $e^{in\theta}$ $\quad \theta = ka$ とする。

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}na} \psi_{k,E}(x) = e^{ikan} \psi_{k,E}(x)$$

$$\hat{H} \psi_{k,E}(x) = E \psi_{k,E}(x)$$

一方で、$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}na} \psi_{k,E}(x) = \psi_{k,E}(x+na)$ ← 前ページ

よって、$\psi_{k,E}(x+na) = e^{ikna} \underbrace{\psi_{k,E}(x)}$

$$\left.\begin{aligned} &\hookrightarrow = e^{ikx} \cdot u_{k,E}(x) \\ &u_{k,E}(x+a) = u_{k,E}(x) \end{aligned}\right) \text{Bloch の定理}$$

周期的ポテンシャル中の粒子の波動関数

$\psi_{k,E}(x)$: Bloch 関数

空間回転

z軸回りに θ 回転　$\psi(x,y,z) \longrightarrow \psi'(x,y,z)$

$= \psi'(x\cos\theta + y\sin\theta,\ y\cos\theta - x\sin\theta,\ z)$

$|\theta| \ll 1$ として、θ の1次まで展開.

$$\psi'(x,y,z) = \psi(x+y\theta,\ y-x\theta,\ z) + O(\theta^2)$$

$$= \left[1+\theta\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]\psi(x,y,z)$$

$$= \left[1-\frac{i}{\hbar}\theta\left(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\right)\right]\psi(x,y,z)$$

$$= \left[1-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z\right]\psi(x,y,z)$$

回転の生成子は、軌道角運動量のz成分　$\hat{L}_z \equiv x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$

θ が大きいときは、N等分して、$N\to\infty$ とする.

$$\psi'(x,y,z) = \lim_{N\to\infty}\left(1-\frac{i}{\hbar}\cdot\frac{\theta}{N}\hat{L}_z\right)^N\psi(x,y,z)$$

$$= \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}}_{\hat{R}_z(\theta)}\psi(x,y,z)$$

$\hat{R}_x(\theta)$, $\hat{R}_y(\theta)$ も同様に定式化される.

$$\hat{H} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\theta}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\theta}$$

$$= \hat{H} + \frac{i}{\hbar}[\hat{L}_z, \hat{H}]\theta + O(\theta^2)$$

任意の θ で成立するには、$[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$

$\hat{L}_z$ についての Heisenberg eq.　$\dfrac{d\hat{L}_z}{dt} = \dfrac{i}{\hbar}[\hat{H}, L_z] = 0$

よって、角運動量保存則.

角運動量

$$\begin{cases} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar L_y \end{cases}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \qquad [\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z$$

$$= i\hbar[-L_yL_z - L_zL_y + L_zL_y + L_yL_z] = 0$$

$\downarrow$

同時固有状態をもつ

$$L^2|L, M\rangle = \hbar^2 f(L)|L, M\rangle$$

$$L_z|L, M\rangle = \hbar M|L, M\rangle$$

昇降演算子を定義する $L_+ \equiv L_x + iL_y \quad L_- = L_x - iL_y$

$[L_z, L_+] = \hbar L_+ \quad [L_z, L_-] = -\hbar L_-$ をみたす。

$$L_z(L_+|L, M\rangle) = L_+(L_z + \hbar)|L, M\rangle$$

$$= \hbar(M+1)L_+|L, M\rangle$$

$\hat{L}_+$が Mを 1 増加させる。

$$\hbar^2(f(L) - M^2) = \langle L, M|L^2 - L_z^2|L, M\rangle$$

$$= \langle L, M|L_x^2 + L_y^2|L, M\rangle \geq 0$$

L に対して Mには max, min がある。

$$L_+|L, M^{max}\rangle = 0, \quad L_-|L, M^{min}\rangle = 0$$

$\downarrow$

$L_-L_+|L, M^{max}\rangle = (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z)|L, M^{max}\rangle$ より

$$f(L) = M^{max}(M^{max} + 1)$$

$L_+L_-|L, M^{min}\rangle = (L^2 - L_z^2 + \hbar L_z)|L, M^{min}\rangle$ より

$$f(L) = M^{min}(M^{min} - 1)$$

ここで $M^{max} = -M^{min}$ であるので

$f(L) = L(L+1)$ となる

$\hat{L}^2 = \hbar^2 L(L+1)$

よって $\hat{L}^2|L,M\rangle = \hbar^2 L(L+1)|L,M\rangle$

$L_z|L,M\rangle = \hbar M|L,M\rangle$

$M = L, L-1, \cdots, -L$ である。

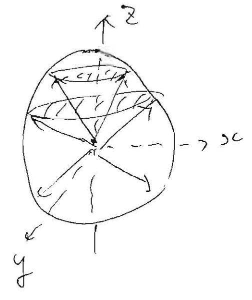
L と $-L$ の差 $2L$ は整数である。 $\longrightarrow$ $L = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$

波動関数の一価性 $\longrightarrow$ L も整数。

$M=L$ のときを考える。 $|L,L\rangle$

2π 回転 $\psi'(x,y,z) = \underbrace{e^{-2\pi i L}}_{=1}\psi(x,y,z)$ $\longrightarrow$ $L=0,1,2,\cdots$

$\hat{L}$ の固有値は $\hbar^2 L^2$ ではなく $\hbar^2 L(L+1)$ である。 $\longrightarrow$ $\hbar^2 L$ 程度の量子ゆらぎをもっている。



$$\left.\begin{aligned}\langle L,M+1|L_+|L,M\rangle &= \hbar\sqrt{(L-M)(L+M+1)}\\ \langle L,M-1|L_-|L,M\rangle &= \hbar\sqrt{(L+M)(L-M+1)}\end{aligned}\right\}$$ 導出せよ。

完全性条件 $\int d\tau\, |\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi| = I$ を使って

$$\int d\tau \langle L,M|\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi|L',M'\rangle = \int d\tau\, Y_L^{M*}(\theta,\phi)\, Y_{L'}^{M'}(\theta,\phi) = \delta_{LL'}\delta_{MM'}$$

球面調和関数