6. 量子力学の一般原理

6-1 ハミルトニアンの対称性

量子力学 ⇒ { ハミルトニアンのエネルギー固有値を求め、その固有関数を決定する

$\boxed{\text{ハミルトニアンの対称性}}$

↓

ある種の「物理量」は「運動方程式」を解かなくても「対称性」だけで性質がわかる

(Schrödinger 方程式を解かなくても決まる量がある)

• 変換　　波動関数 ψ を

$$\boxed{\psi' = U\psi}$$

と変換する

U はオペレータ

$\boxed{U^{+}U = 1}$ をみたす

ユニタリーオペレータである

- 何故ユニタリーか？

変換された ψ' も確率が 1 であるべき

$$\boxed{\langle \psi' | \psi' \rangle = 1}$$

$$\langle \psi' | \psi' \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi'^*(x)\, \psi'(x)\, dx = 1$$

$\psi' = U\psi$ とした時

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

よって $\boxed{U^\dagger U = 1}$ である必要がある。

【具体的な式】

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^{\dagger\prime}(x)\, \psi'(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(U\psi(x)\right)^\dagger U\psi(x)\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^\dagger(x)\, U^\dagger U\, \psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^\dagger(x)\, \psi(x)\, dx = 1$$

$$\therefore \boxed{U^\dagger U = 1}$$

注：オペレータ $\underline{\underline{(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger}}$ である。

[オペレータの変換] 3

$\hat{O}$ をオペレータとする(例えば運動量演算子 $\hat{p}$)

$\psi' = U\psi$ のとき オペレータ $\hat{O}$ は

どう変換されるのか?

$$\boxed{\hat{O}' = U \hat{O} U^{-1}}$$ と変換される

(証) $\psi' = U\psi$ と変換したとき

$(\psi, \hat{O})$ $(\psi', \hat{O}')$ どちらでも

期待値は同じ

よって

$$\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{O}' | \psi' \rangle$$

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

よって $\hat{O} = U^{+} \hat{O}' U$

すなわち

$$\boxed{\hat{O}' = U \hat{O} U^{-1}}$$

但し $U^{+}U = 1$ を使った

変換：
$$\begin{cases} \psi' = U\psi & (\text{状態}) \\ \hat{O}' = U\hat{O}U^{-1} & (\text{オペレータ}) \end{cases}$$

（但し $U^{+}U = 1$）

- ハミルトニアン $\hat{H}$ はオペレータ

よって
$$\boxed{\hat{H}' = U\hat{H}U^{-1}}$$
と変換される

［重要］ $\hat{H}' = \hat{H}$ のとき

ハミルトニアン $\hat{H}$ は変換 U に対して

$\boxed{\text{不変}}$ であるという

$$\boxed{\hat{H} = U\hat{H}U^{-1}}$$

（このとき不変）

・ $\hat{H}$ が変換 U に対して不変である時

$$\hat{H} = U\hat{H}U^{-1}$$ 両辺の右から U をかけると

$$\boxed{\hat{H}U = U\hat{H}}$$ となる。

その時，$\hat{H}$ と U は同時固有関数をもつ

（証） $\hat{H}$ の固有関数を ψ
その固有値を E とすると

$$\boxed{\hat{H}\psi = E\psi}$$

左から U をかけると

$$U\hat{H}\psi = EU\psi$$ ところが $U\hat{H} = \hat{H}U$ だから

$$\boxed{\hat{H}U\psi = EU\psi}$$ となる。

よって　$U\psi$ は $\hat{H}$ の固有関数になっている

そして その固有値は E

$$\hat{H}(U\psi) = E(U\psi)$$

従って $U\psi$ は ψ に比例しているべきである

$$U\psi \propto \psi$$

比例定数を k とすると

$$\boxed{U\psi = k\psi}$$

これは ψ が U の固有関数であることを意味している

k は決まらない

k を求めるには

$U\psi = k\psi$ の方程式を解けばよい