6-2 空間回転の対称性

ハミルトニアン $\hat{H}$ が

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 + V(r)}$$

$$r = |\boldsymbol{r}| \quad , \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$$

で与えられる系は

空間回転に対して不変である

$\hat{\boldsymbol{p}}^2$ はスカラー
$r = |\boldsymbol{r}|$ はスカラー
よって回転に対して不変

◎ 回転オペレータ

(例) z-軸回りに θ 回転させるオペレータは

$$\boxed{\hat{R}_z(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\theta}}$$

である

ここで $\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

↑ 角運動量演算子の z 成分

(証) $\psi(x'y'z') = \hat{R}_z(\theta)\,\psi(x,y,z)$

の $\hat{R}_z(\theta)$ を求める.

$$\begin{cases} x' = \cos\theta\; x + \sin\theta\; y \\ y' = -\sin\theta\; x + \cos\theta\; y \\ z' = z \end{cases}$$

(z-軸回りの θ 回転)

• $\theta \ll 1$ (微小回転) とする

このとき $\begin{cases} \sin\theta \simeq \theta \\ \cos\theta \simeq 1 \end{cases}$

よって $\begin{cases} x' = x + \theta y \\ y' = y - \theta x \\ z' = z \end{cases}$

よって $\psi(x', y', z') = \psi(x + \theta y,\ y - \theta x,\ z)$

$\theta \ll 1$ より Taylor 展開すると

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

ここで $L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ より

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

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

[有限のθ]　　$\frac{\theta}{n}$ の回転を n 回実行する.

但し $\underline{\frac{\theta}{n} \ll 1}$

よって

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

ここで $n \to \infty$ とすると

$$\lim\left(1 + \frac{a}{n}\right)^n = e^a$$

よって

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

すなわち　$\hat{R}_z(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}$

と求められる

• $$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \qquad (r = |\mathbf{r}|)$$

のとき

$$\hat{R}_z(\theta)\,\hat{H}\,\hat{R}_z^{-1}(\theta) = \hat{H}$$

（回転において不変）

$$\hat{R}_z(\theta) = 1 - \frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z \qquad (\theta \ll 1)$$ より

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z\right)\hat{H}\left(1 + \frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z\right) = \hat{H}$$

θの1次までとると

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

$$\therefore \boxed{\hat{L}_z\hat{H} = \hat{H}\hat{L}_z}$$

すなわち $\hat{H}$ と $\hat{L}_z$ は同時固有関数をもつ

実際： $\hat{H}$ の固有関数は

$$\begin{cases} \psi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m\, Y_{lm}(\theta,\varphi) \end{cases}$$ となっている