§ 対称性と保存則

1. 対称性と保存則

以下、Hamiltonian $\hat{H}$ に時間依存性のない場合を考える。

- **時間に依存する Schrödinger 方程式**

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t)\,. \tag{1}$$

- **Schrödinger 方程式の形式解**

$$\psi(\mathbf{r},t) = \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(\mathbf{r},0) \tag{2}$$

- **演算子 $\hat{F}$ の時刻 t における期待値**

$$\begin{aligned} F(t) = \langle\psi(t)|\hat{F}|\psi(t)\rangle &= \int [\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\psi^*(\mathbf{r},0)]\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(\mathbf{r},0)\,d\mathbf{r} \\ &= \int \psi^*(\mathbf{r},0)\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(\mathbf{r},0)\,d\mathbf{r} \\ &= \langle\psi(0)|\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle \end{aligned} \tag{3}$$

ここで、第二行目の表現を得る際に、$\hat{H}$ のエルミート性を用いた。

- **$F(t)$ の時間変化**

(3) 式を t で微分する。演算子 $\hat{F}$ と $\hat{H}$ は一般に非可換であることを考慮すると、次の結果が得られる。

$$\frac{dF(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(0)|\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}(\hat{H}\hat{F}-\hat{F}\hat{H})\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle \tag{4}$$

ゆえに、

$$\hat{H}\hat{F} = \hat{F}\hat{H} \quad \longrightarrow \quad \frac{dF(t)}{dt} = 0 \tag{5}$$

が結論される。つまり、

$\hat{H}$ と可換な演算子 $\hat{F}$ の期待値は時間変化しない。

言い換えると、F は保存量である。

- **$\hat{F}$ がエルミート演算子で $\hat{H}$ と可換な場合**

$\hat{H}\hat{F} = \hat{F}\hat{H}$ を行列表示すると、$\sum_l H_{ml}F_{ln} = \sum_l F_{ml}H_{ln}$ となる。行列 $\underline{H} = (H_{mn})$ と $\underline{F} = (F_{mn})$ はエルミート行列なので、

$\hat{H}\hat{F} = \hat{F}\hat{H}$ は、行列 $\underline{H}$ と $\underline{F}$ が同時対角化可能であることも意味する。

2. 保存則の例

- **運動量保存則**

$\hat{H}$ が次式で表される場合を考える。

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \tag{6}$$

この時、$\hat{\mathbf{p}}$ と $\hat{H}$ は明らかに可換である。すなわち $\hat{\mathbf{p}}\hat{H} = \hat{H}\hat{\mathbf{p}}$。従って、運動量 $\mathbf{p}$ は保存する。$\hat{\mathbf{p}}$ の固有状態

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} . \tag{7}$$

は、同時に $\hat{H}$ の固有状態でもあり、その固有値は $\varepsilon_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2m$ である。

- **角運動量保存則**

中心力ポテンシャル $V(r)$ $(r \equiv \mathbf{r})$ の下での Hamiltonian：

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) \tag{8}$$

は、次に示すように、軌道角運動量演算子 $\hat{\mathbf{L}} \equiv \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$ と可換である。

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{L}}, \hat{H}] &= \frac{[\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{p}}^2]}{2m} + [\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{p}}, V(r)] \\
&= \frac{\mathbf{r}\times[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{p}}^2] + [\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}^2]\times\hat{\mathbf{p}}}{2m} + \mathbf{r}\times[\hat{\mathbf{p}}, V(r)] + [\mathbf{r}, V(r)]\times\hat{\mathbf{p}} \\
&= \frac{\mathbf{0} + 2i\hbar\hat{\mathbf{p}}\times\hat{\mathbf{p}}}{2m} + \mathbf{r}\times(-i\hbar)\frac{\partial V(r)}{\partial \mathbf{r}} \\
&= \mathbf{r}\times(-i\hbar)\frac{dV(r)}{dr}\frac{\partial r}{\partial \mathbf{r}} \\
&= (-i\hbar)\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{r}\times\frac{\mathbf{r}}{r} \\
&= \mathbf{0}
\end{aligned}$$

ゆえに、角運動量 $\mathbf{L}$ は保存される。$\hat{\mathbf{L}}$ の固有状態

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{9}$$

は $\hat{H}$ の固有状態でもある。実際、$\hat{H}$ の固有状態は、$R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ であたえられ、動径部分の波動関数 $R_{nl}(r)$ は次式を満たす。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_{nl}(r) = \varepsilon_{nl} R_{nl}(r) . \tag{10}$$

- **パリティ保存則**

空間反転の演算子 $\hat{P}$ を次式で定義する。

$$\hat{P} f(\mathbf{r}) = f(-\mathbf{r}) \tag{11}$$

ここで $f(\mathbf{r})$ は座標 $\mathbf{r}$ の任意の関数である。(11) 式にもう一度 $\hat{P}$ を作用させせると、$\hat{P}^2 f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})$ が得られる。$f(\mathbf{r})$ は任意関数であるから、

$$\hat{P}^2 = 1 \tag{12}$$

が結論される。

$\hat{P}$ の固有状態は簡単に求まる。(11) 式で f が $\hat{P}$ の固有状態であるとし、その固有値を σ とする。すなわち $\hat{P} f(\mathbf{r}) = \sigma f(\mathbf{r})$。一方 (12) 式より、この固有値は $\sigma^2 = 1$ をみたす。従って、$\sigma = \pm 1$。まとめると、$\hat{P}$ の固有状態には、次の二つがある。

$$\begin{cases} \hat{P} f^{(\mathrm{e})}(\mathbf{r}) = f^{(\mathrm{e})}(\mathbf{r}) & : \text{偶関数} \\ \hat{P} f^{(\mathrm{o})}(\mathbf{r}) = -f^{(\mathrm{o})}(\mathbf{r}) & : \text{奇関数} \end{cases} . \tag{13}$$

Hamiltonian 中のポテンシャル $V(\mathbf{r})$ が、$V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ を満たす場合を考える。例えば上の中心力場の場合がそうである。このとき、次式で示すように、$\hat{P}$ と $\hat{H}$ は可換である。

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1} = \hat{P}\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right]\hat{P}^{-1} = \left[\frac{(-\hat{\mathbf{p}})^2}{2m} + V(-\mathbf{r})\right]\hat{P}\hat{P}^{-1} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \hat{H}$$

従って、$\hat{P}$ の固有状態は時間変化しない。また、一般の状態に関しても、$\hat{P}$ の期待値は変化しない。これは、一般の状態が $\hat{P}$ の固有状態の線形結合として表すことができ、かつその結合定数は時間変化しないことから結論できる。

Hamiltonian の固有状態も、偶関数と奇関数に分離することができる。上の中心対称場の例では、l が偶数のとき Y_{lm} は偶関数、l が奇数の時 Y_{lm} は奇関数である。実際、Y_{lm} は次の関係式を満たす。

$$Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{14}$$

詳細は、量子力学 I の 248 ページにある [問題 3](4) を参照。

3. 対称性を利用することの利点

$\hat{H}$ と可換な演算子の演算子の集まりは、群を構成することが知られている。$\hat{H}$ を直接対角化する前に、$\hat{H}$ と可換な演算子を数え上げることは、対角化すべき行列の次元を下げることができるという意味で、実際上の大きな利点がある。例えば、上のパリティの例では、$\hat{H}$ が $\hat{P}$ と可換な場合、その行列要素は次の性質を持つ。

$$\langle f^{(\mathrm{e})} | \hat{H} | f^{(\mathrm{o})} \rangle = 0 \,. \tag{15}$$

従って、偶関数、奇関数それぞれの空間内で $\hat{H}$ の行列を対角化すればよいことになり、対角化すべき行列の次元が半分になった。