量子力学 Tips

～並進対称性と運動量保存について～

KENZOU

2008 年 5 月 6 日

♣GW もいよいよ終わりかけのとき、お気に入りのサンバイザーをかぶり、スニーカーを履いてコニーが K 氏を訪ねてきた。

- コニー：K さん、お久しぶりです。この GW はどこかにいかれました。私はテニスや散歩それと池で彼とボート乗ったりで、けっこう日に焼けちゃったわ。シミができないか心配しているの。
- K 氏：GW は幸いにもズ～と天気がよかったものね。ところで久しぶりに僕を訪ねてきたわけだけど、なにかお喋りをしに寄ったの、それともまた何か質問をぶつけにきたのかな。
- コニー：早速警戒モードに入った感じね。心配されないで、特にムダ話をしに寄ったわけじゃないの。ちょっと頭を整理したくて寄ったの。
- K 氏：そうなの、何を整理したいのかな。
- コニー: うん、ボートに乗っていた時に彼が一所懸命ボートを漕ぐじゃない。水面は静かに後ろに流れていくのを見ていたとき、ふと並進対称性は運動量保存則と結びついていると講義で聞いたことを思い出したの。力学でそのようなのを習ったけど、量子力学的にはどう記述されのかなと思ったわけ。
- K 氏: 相変わらずだね。。。いや、意地悪で言ったんじゃないよ。相変わらず勉強家だなぁと感心したのさ。そうだね、量子力学においても保存量と対称性は重要な役割を果たしているよ。例えば、並進対称性があれば運動量が保存し、回転対称性をあれば角運動量が保存する。 このことは量子力学でもなんら変わらない。対称性の考察からいろいろ有用なことが導かれるんだ。そうだね、それじゃ空間の並進対称性と運動量保存則とつながりについて、話を進めようか。ここ↓のサイトの講義録を参考にさせていただくよ。
http://www.sci.u-hyogo.ac.jp/material/theory2/takahash/QuantumMechanics3.html
- コニー: はい、よろしくお願いします。
- K 氏：了解。ところで知っていると思うけど、空間の並進対称性というのは座標 $\mathbf{x}$ を $\mathbf{x}+\mathbf{a}$ とずらしても系の性質（系の運動方程式）が変わらないことを言うんだね、念のため。それではははじめようか。一応、演算子は太文字で示しておくことにします。

■並進演算子

座標の値をある値 a だけ増加させる操作のことを並進操作と呼びます。この並進操作を D(a) の記号で表すことにします。座標についての関数に D(a) を作用させると

$$D(a)f(x) = f(x+a) \tag{1}$$

となります。この操作によって引数が $x \longrightarrow x+a$ に変換されるので、関数の形は反対方向に移動します。並進作用によって得られた関数をテイラー展開し、微分演算子を用いて表すと

$$f(x+a) = f(x) + af'(x) + \frac{a^2}{2!}f''(x) + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{a^k}{k!}\frac{d^k}{dx^k}f(x) \tag{2}$$

ここで次の関係式を使います。

$$exp(A) = 1 + A + \frac{A^2}{2!} + \cdots$$

で $A=a\frac{d}{dx}$ と置いてやると

$$exp\left(a\frac{d}{dx}\right)=1+a\frac{d}{dx}+\frac{a^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2}+\cdots=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{a^k}{k!}\frac{d^k}{dx^k}$$

また運動量演算子は $p_x=-i\hbar\frac{d}{dx}$ で表されますから $A=i\frac{p_x a}{\hbar}$ となって、式 (2) は

$$f(x+a)=exp\left(i\frac{p_x a}{\hbar}\right)f(x) \tag{3}$$

となり、並進操作 $D(a)$ は次のように表すことができることがわかります。
これを一般化すると

$$D(\mathbf{a})=exp\left(i\frac{\mathbf{p}\,a}{\hbar}\right) \tag{4}$$

となります。
次に、距離 a,b を連続して作用させる場合を考えます。これは $a+b$ の距離の操作に等しいですから、

$$D(a+b)=exp\left(i\frac{\mathbf{p}(a+b)}{\hbar}\right)=exp\left(i\frac{\mathbf{p}\,a}{\hbar}\right)exp\left(i\frac{\mathbf{p}\,b}{\hbar}\right)=D(a)D(b) \tag{5}$$

となります。$\mathbf{p}$ はエルミート演算子 ($\mathbf{p}^\dagger=\mathbf{p}$) ですから

$$D^\dagger(a)=exp\left(-i\frac{\mathbf{p}\,a}{\hbar}\right)=D(a)^{-1} \tag{6}$$

$$D(a)D^\dagger(a)=1 \tag{7}$$

となり、$D(a)$ はユニタリー演算子[1]であるという重要なことがわかります。そうすると、**演算子として考えた時の座標x** は並進操作によって次のような変換を受けることになります。

$$D(a)\mathbf{x}D^{-1}(a) \tag{8}$$

この計算を実行するにあたって、エルミート演算子とユニタリー変換を結び付ける Baker-Haudorff の公式を使いますのでそれを載せておきます。
＜ Baker-Hausdorff の公式＞
$\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ は演算子とします。

$$e^{i\mathbf{A}\,\lambda}\,\mathbf{B}\,e^{-i\mathbf{A}\,\lambda}=\mathbf{B}+i\,\lambda[\mathbf{A},\,\mathbf{B}]+\left(\frac{i^2\,\lambda^2}{2!}\right)[\mathbf{A},\,[\mathbf{A},\,\mathbf{B}]\,]+\cdots\left(\frac{i^n\,\lambda^n}{n!}\right)[\mathbf{A},\,[\mathbf{A},\cdots[\mathbf{A},\,\mathbf{B}]\cdots]]+\cdots \tag{9}$$

座標 $\mathbf{x}$ を演算子とみなして、早速この公式を使ってみます。$\mathbf{x}$ と $\mathbf{p}$ の交換関係は $[\mathbf{x},\,\mathbf{p}]=i\hbar$ で、

$$\begin{aligned}D(a)\,x\,D^{-1}(a) &= e^{i\mathbf{p}\,a/\hbar}\,\mathbf{x}\,e^{-i\mathbf{p}\,a/\hbar}=x+i\,a\,[\mathbf{p},\,\mathbf{x}]\,/\hbar+\frac{i^2a^2/\hbar^2}{2!}[\,\mathbf{p},\,[\mathbf{p},\,\mathbf{x}]\,]+\cdots\\ &= \mathbf{x}+i\,a\,[\mathbf{p},\,\mathbf{x}]\,/\hbar\\ &= \mathbf{x}+a\end{aligned} \tag{10}$$

となり、座標 x は $x\longrightarrow x+a$ と並進変換されることがわかりました。

■並進対称性と運動量の保存

解析力学で Noether の定理というのを習ったことがあると思います。これは、系に対称性があればそれに対応する保存則が存在するということを言ったもので、例えば空間が並進対称性[2]をもっていると運動量保存則がでてくるということになります。以下にそれを見ていくことにします。
注目している系が並進対称性をもっていれば、その系のハミルトニアンに並進操作を施しても変化しないこと、つまり

$$D(a)\mathbf{H}D(a)^{-1}=\mathbf{H}+\frac{i}{\hbar}a[\mathbf{H},\mathbf{p}]+\cdots=\mathbf{H} \tag{11}$$

[1] ユニタリー演算子の定義 $D^\dagger=D^{-1}$ つまり $DD^\dagger=D^\dagger D=1$ を満たしている。行列 A のユニタリー変換は $A\longrightarrow A'=U\,A\,U^\dagger=U\,A\,U^{-1}$。

[2] 並進対称性というのは、注目している系を全て一斉に平行移動してみても物理法則は変化を受けないというものです。

が成り立たなければなりません。(11) が成り立つにはハミルトニアンと運動量が交換可能という条件が必要です。これは運動量が保存されることを意味しています [3]。

$$[\mathbf{p}, \mathbf{H}] = 0 \tag{12}$$

ポテンシャルのない自由粒子の場合は p と H は交換可能なので (11) は成立しますが、一般の場合はポテンシャルが邪魔をして必ずしも交換可能でありません[4]。そうすると (11) を成立させるためのポテンシャルの条件は以下のようになります。

$$D(a)HD(a)^{-1} = D(a)\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x)\right)D(a)^{-1} = D(a)\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right)D(a)^{-1} + D(a)V(x)D(a)^{-1}$$

で、右辺の第１項は

$$D(a)\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right)D(a^{-1}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

となることがすぐわかります。そうするとポテンシャル $V(x)$ が並進操作によっても変化を受けない、いいかえるとポテンシャルが座標に依存しないということ

$$D(a)V(x)D(a)^{-1} = V(x+a) = V(x) \tag{13}$$

が求める条件となります。この結果はいって見れば当たり前のことで、ポテンシャルが空間の場所によって異なるようでは空間並進対称性が成り立たないですね。上の議論は１粒子系を見てきましたが、多粒子系でも相互作用がなく且つ各粒子のポテンシャルが空間座標に依存しなければそれぞれの粒子の運動量は保存されることがわかります。

これで話を終わると面白くありませんので、相互作用があってもそれが特殊な場合はどうなかの、そのあたりのことを次に調べていくことにします。
簡単のために２粒子系を考えます。それぞれの粒子の位置座標を $\mathbf{x}_1$、$\mathbf{x}_2$ とし、V は各粒子のポテンシャル、V_{int} は相互作用ポテンシャルを表すとします。また、各粒子の運動量をそれぞれ $\mathbf{p}_1$、$\mathbf{p}_2$ としておきます。そうするとこの系のポテンシャルは一般に次式で与えられます。

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2) + V_{int}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

脚注 (2) によれば、相互作用のない場合、この系が並進対称性をもつためには

$$[\mathbf{p}_i,\, V(\mathbf{r}_i)] = 0 \qquad (i = 1,\, 2) \tag{14}$$

が成り立つことが必要です。

さて、相互作用ポテンシャル $V_{int}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は、個々の粒子の並進操作によって不変でなくなります。例えば粒子１の並進操作では

$$D(\mathbf{a})V_{int}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)D(\mathbf{a})^{-1} = e^{i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{a}}V_{int}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)e^{-1\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{a})} = V_{int}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \mathbf{r}_2) \tag{15}$$

となります。そこで相互作用ポテンシャルが２粒子間の距離の差（$\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$）の関数となっているような場合を考えて見ましょう。つまり $V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = U(\mathbf{r}1 - \mathbf{r}_2)$ のような場合は、２つの粒子を同時に $\mathbf{a}$ だけ空間並進操作をしたとしますと、これはまず１番目の粒子の並進操作

$$D(\mathbf{a})V_{int}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)D(\mathbf{a})^{-1} = e^{i\frac{\mathbf{p_1}}{\hbar}}V_{int}e^{-i\frac{\mathbf{p_1}}{\hbar}} = V_{int}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \mathbf{r}_2)$$

に続いて２番目の粒子の並進操作

$$e^{i\frac{\mathbf{p_2}}{\hbar}}V_{int}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \mathbf{r}_2)e^{-i\frac{\mathbf{p_2}}{\hbar}}$$

[3] ハイゼンベルグの運動方程式 $dp/dt = [H, p]$ から運動量がハミルトニアンと交換可能であれば $d\mathbf{p}/dt = 0$ となり、運動量の時間変化はなし、つまり運動量が保存される。

[4] $\mathbf{H} = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x)$, $[\mathbf{p}, \mathbf{H}] = [V(x), \mathbf{p}]$ となり、$V(x) = 0$ の自由粒子の場合やポテンシャルが座標に依存しない、また $[\mathbf{p}, V] = 0$ の場合には (11) が成り立つが、一般には $V(x)$ が邪魔をして (11) が成り立つとはいえない。

をすることになりますから、$\mathbf{p}=\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2$ として以上の操作を纏めると

$$e^{i\frac{\mathbf{p}}{\hbar}}V_{int}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)e^{-i\frac{\mathbf{p}}{\hbar}}=V_{int}(\mathbf{r}_1+\mathbf{a},\mathbf{r}_2+\mathbf{a}) \tag{16}$$

と書けることになります。ところで相互作用ポテンシャルは 2 点間の距離の差のみに依存するという条件を入れると

$$V_{int}(\mathbf{r}_1+\mathbf{a},\mathbf{r}_2+\mathbf{a})=U(rX_1+\mathbf{a}-\mathbf{r}2-\mathbf{a})=U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)$$

となりますから、(16) は

$$e^{i\frac{\mathbf{p}}{\hbar}}U_{int}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)e^{-i\frac{\mathbf{p}}{\hbar}}=U_{int}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)$$

とうまくポテンシャルの並進対称性を示すことができました。ところで系の並進対称性は (11) が成立することが条件でした。つまり

$$[\mathbf{p},H]=[\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2,H]=0$$

ということですから、系の全運動量 $\mathbf{p}$ はハミルトニアンと交換可能ということになり、脚注 (3) よりこの系の全運動量 ($\mathbf{p}=\sum_i\mathbf{p}_i$) は保存されることが分かります。

♣ *Q&A* ———

- K 氏：以上だけど、何か参考になったかい。いまの話は空間並進対称性と運動量保存則だったけど、このほかにも時間推進対称性とエネルギー保存則とか回転対称性と角運動量保存則とかいろいろあるんだけど、疲れたから今日はここまでにしておくよ。

- コニー： ありがとう、大変お疲れ様でした。非常に勉強になったわ。ところでお疲れのところ恐縮なんだけど 1 つ質問があるの。

- K 氏：なっ、なんだい、その質問とは？

- コニー：えぇ、他でもないだけ並進演算子 $D(a)$ は、$D(a)f(x)=f(x+a)$ の方針のもと $f(x+a)$ をテイラー展開し、$D(a)=\sum_k\frac{a^k}{k!}\frac{d^k}{dx^k}$ として導出したわね。これに座標 x を作用させると $D(a)x=(1+a\frac{d}{dx}+\frac{a^2}{dx^2}+\cdots)x=x+a$ となって、座標 x は $x+a$ となるじゃない、当たり前だけど。そこで質問だけど、$D(a)$ がユニタリー演算子であると分かった時、なぜ (8) のように $D(a)\mathbf{x}D^{-1}(a)$ と x を $D(a)$ と $D(a)^{-1}$ で挟み込むようなことをするのかしら。$D(a)x$ でいいのじゃないの。

- K 氏：う〜ん、なかなか鋭い。ぼんやり聞いていたらそんな質問はでないよね。ちょっと思い出してほしいんだけど、そこでは x を**演算子として考えた場合**と言っていたよね。ここがポイントなんだ。

- コニー：たしかにそのように仰っていたわね。それで？

- K 氏：うん、$D(a)$ の中身の微分演算子 ($\frac{d}{dx}$) を運動量演算子 ($p_x=-i\hbar\partial/\partial x$) に置き換えただろ。ここがキーポイントで、この置き換えで量子力学の世界に入ったんだ。そうすると座標 x というのは**座標演算子$\mathbf{x}$** の固有値ということになる。つまり $\mathbf{x}|x\rangle=x$ だね。だから (8) は**、$\mathbf{x}$ という座標演算子がユニタリー変換でどう変換されるか**ということを示しているんだ。おまけのついでだからこのあたりのことをちょっと説明しておくけど、必ずご自分でチェックしてネ。

  ユニタリー変換 D により $|x\rangle$ という状態が $|x'\rangle$ に変換されたとする。

  $$|x'\rangle=D|x\rangle \tag{17}$$

  座標演算子 $\mathbf{x}$ に $|x\rangle$ を作用させたものを

  $$\mathbf{x}|x\rangle=|y\rangle \tag{18}$$

  (18) に対するユニタリー変換したものをダッシュを付けて表すと

  $$\mathbf{x}'|x'\rangle=|y'\rangle \tag{19}$$

ここで、ユニタリー変換によって結ばれた (18) と (19) は物理的に同等であるということを思いだすと

$$\mathbf{x}'D|x\rangle = |y'\rangle = D|y\rangle = D\mathbf{x}|x\rangle \tag{20}$$

これに左から D^{-1} をかけると

$$D^{-1}\mathbf{x}'D|x\rangle = D^{-1}D\mathbf{x}|x\rangle = \mathbf{x}|x\rangle \tag{21}$$

任意の $|x\rangle$ に対して (21) は成り立つので、両辺から $|x\rangle$ をはずし、両辺の左から D をかけ、右から D^{-1} をかけると

$$\mathbf{x}' = D\mathbf{x}D^{-1} \tag{22}$$

- コニー：なるほど、エルミート演算子のユニタリー変換は $\mathbf{x}' = D\mathbf{x}D^{-1}$ となるということなのね。
- K 氏：冴えているね！それじゃこの辺でそろそろお開きとしようか。
- コニー：いやぁ〜今日は本当にありがとう。もう夕刻になったけどまだ外は明るいわね。さっ、これからデートなの。
- K 氏：いろいろ忙しいんだね。若いうちはそうでなくっちゃ、応援するよ。
- コニー：それじゃ、失礼しま〜す。またよろしくお願いします。えっと、時間に間に合うかしら、いそがなくっちゃ！

（了）