2　対称性と保存則

具体的な量子力学の問題を解こうとする場合、系のもついろいろな対称性をうまく利用することによって問題が易しくなることがある。また、対称性にしたがって状態を分類することによって、問題が考え易くなり、したがって系の示す性質の大まかな性質を直感的に理解するのに役立つこともある。厳密な解がわからなくても、大まかな解のふるまいをある程度予測できることもある。

球対称性をもつ孤立した原子の取り扱いで、角運動量が問題を解く際に重要な役割を果たしたり、また角運動量に関連した量子数があることについてはすでに学んでいるものと思う。ここでは、この「対称性」に焦点をあて、対称性とは何か、また量子力学にそれがどのように利用できるかについて説明する。

また、対称性は系の保存則とも密接に関係があるので、物理学ではそれ自身極めて重要な考え方でもある。まず以下のような簡単な例題をとりあげてみよう。

2.1　簡単な例題

下図に示すような 1 次元の井戸型ポテンシャル中を運動する粒子についての量子力学の問題を考えてみよう。ポテンシャル $V(x)$ は次のように与えられ、粒子のエネルギー E は負の値であると考える。

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a \text{ のとき} \\ -V_0, & |x| \le a \text{ のとき} \end{cases}$$

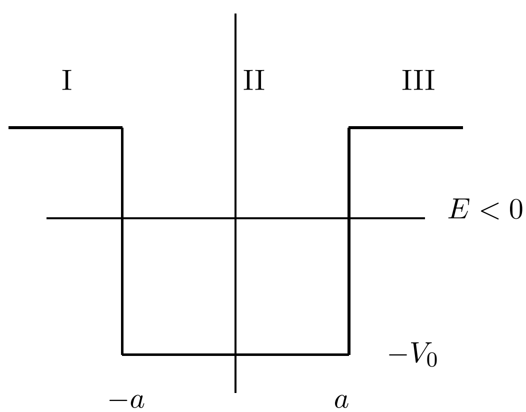

図 3: 1 次元井戸型ポテンシャル

それぞれの領域において波動関数 $\phi(x)$ は次のような解をもつ。

$$\phi(x) = \begin{cases} A\mathrm{e}^{Kx}, & x < -a \text{ のとき} \\ B\cos kx + C\sin kx, & |x| \le a \text{ のとき} \\ D\mathrm{e}^{-Kx}, & a < x \text{ のとき} \end{cases} \tag{12}$$

ただし、k, K は、$\hbar^2K^2/2m=|E|$, $\hbar^2k^2/2m=E+V_0$ を用いて定義した。領域の境界 $x=\pm a$ における波動関数の対数微分についての接続の条件から次の２つの条件が得られる。

$$
\begin{aligned}
-K &= k\frac{-B\sin ka+C\cos ka}{B\cos ka+C\sin ka}, \quad (x=a)\\
K &= k\frac{B\sin ka+C\cos ka}{B\cos ka-C\sin ka}, \quad (x=-a)
\end{aligned}
\tag{13}
$$

これら２つの式から容易に次の関係が得られることがわかる。

$$
\frac{B\sin ka-C\cos ka}{B\cos ka+C\sin ka}=\frac{B\sin ka+C\cos ka}{B\cos ka-C\sin ka}
$$

または、次のように表すこともできる。

$$
\begin{aligned}
&(B\sin ka-C\cos ka)(B\cos ka-C\sin ka)\\
&\qquad=(B^2+C^2)\sin ka\cos ka-BC(\cos^2 ka+\sin^2 ka)\\
&=(B\cos ka+C\sin ka)(B\sin ka+C\cos ka)\\
&\qquad=(B^2+C^2)\sin ka\cos ka+BC(\cos^2 ka+\sin^2 ka)
\end{aligned}
$$

この結果を整理すると $BC=0$ が得られる。つまり、$B=0$ または、$C=0$ の解が存在することがわかる。これらは 原点近傍の II の領域において、$\sin kx$ または $\cos kx$ の形の解に対応し、それぞれ奇関数、偶関数である。解は、必ず偶関数か奇関数の形をとり、両者が互いに混ざりあうような解が存在しないことを上の条件は表している。

解の性質についてこのような結果が得られたことは、この系のもつ対称性と密接な関係がある。もし、最初から奇関数の解の存在を予想できれば、(12) のような解の形を仮定するのではなく、領域 II の解を単に $C\sin kx$ とおくことが可能であり、境界条件も $x=a$ についての１つの条件を課すだけで十分である（$x=-a$ の条件は対称性から自動的に満足される)。すると (13) の代わりに次の条件が得られる。

$$
-K=k\frac{\cos ka}{\sin ka}
$$

同じことが $\cos kx$ に比例する偶関数の解についてもいえる。このように問題を少しだけやさしくすることができた。

このような対称性をうまく利用する方法について、もう少し詳しく考えてみようというのがこの節の目的である。

2.2 対称操作

対称性とは、ある対象に何らかの操作を加えたとき対象がどのように変化するか、または変換されるかに関係する。そのためには、操作や、操作を行ったときに対象がどのように変換されるかについて知る必要がある。まず、何らかの座標系で定義された関数に対し、操作やその操作の結果がどのように表されるかについて調べてみよう。

2.2.1 関数に対する変換操作

ある対象、ここではある座標系で定義された関数 $f(\mathbf{r})$ を考える。この関数についての操作とは、関数の表すグラフをある方向に一様に移動する（並進操作)、ある軸の周りに回転させる（回転操作）などのことである。これらの操作は座標軸の変換と密接な関係がある。ある操作 R によって関数が f が f' に変換されることを次のように表すことにする。

$$f'(\mathbf{r}) = Rf(\mathbf{r})$$

関数に対して、操作を行った別の関数を対応させると意味から、操作と演算子は同じものと見なすことができる。関数と同様に座標ベクトルに同じ操作を行うこともできる。その場合、もとの座標ベクトル $\mathbf{r}$ と変換後の座標ベクトル $\mathbf{r}'$ の間には次の関係が成り立つと考えられる。

$$\mathbf{r}' = R\mathbf{r}$$

ある操作を行って変換した関数を、同じ変換を行った座標ベクトルの関数として表せば、２つの関数は同じ値をもつはずである。したがって、次のような関係が成り立つ。

$$f'(\mathbf{r}') = Rf(R\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})$$

この式で、$\mathbf{r}'$ の代わりに $\mathbf{r}' = R^{-1}\mathbf{r}''$ とおくと、次の関係、

$$Rf(\mathbf{r}'') = f(R^{-1}\mathbf{r}''), \quad \text{つまり } Rf(\mathbf{r}) = f(R^{-1}\mathbf{r}) \tag{14}$$

が任意の $\mathbf{r}$ に対して成り立つ。ただし、逆の操作を R^{-1} と表した。つまり、あり操作によって座標がどのように変換されるかがわかれば、関数がどのように変換されるかがわかる。

簡単な例を考えてみよう。

- 座標軸の正と負の向きを逆転させる操作（パリティ、または鏡映）

  1 次元の関数について考える。座標軸の正と負の向きを逆転させる操作をパリティの操作と呼び、P と表すことにする。この場合は逆の操作 P^{-1} も P に等しい。つまり $P^{-1} = P$ が成り立つ。この操作によって座標軸を変換すると、新たな座標と古い座標の間には次の関係が成り立つ。

  $$x' = Px = -x$$

  (14) にしたがって、変換後の関数は次のように表される。

  $$f'(x) = Pf(x) = f(P^{-1}x) = f(-x)$$

  例えば、関数として $f(x) = x^2 - x$ を考えると、パリティ操作後の関数は次のように表される。

  $$f'(x) = Pf(x) = f(-x) = (-x)^2 - (-x) = x^2 + x$$

- 並進操作

  同様に対象を x-軸を正の方向に a だけ移動させる操作を考えてみよう。この操作によって x-軸の座標を距離 a だけ移動すると、移動後の座標 x' は前の座標の値 x と、$x' = x + a$ の関係がある。つまり、$R^{-1}x = x - a$ が成り立つので、関数 $f(x)$ に並進操作を行うと次の関数に変換される。

$$Rf(x) = f(x - a)$$

2.2.2 演算子の変換

次に演算子が操作によってどのような変換を受けるかについて考えてみよう。演算子とは、微分演算子のようにある関数に対してその関数の導関数を対応させる場合のように、関数と関数との間の対応関係のことである。

では、演算子が操作によってどのように変換されるかを考えてみよう。ある演算子 A の作用で関数 $f(x)$ から関数 $g(x)$ が得られることを次のように表す。

$$g(x) = Af(x)$$

ある関数 $f(x)$ に対し、演算子 A を作用させて得られる関数に対してある操作を施す場合について考えてみよう。この結果として得られる関数は、これまでの定義から $RAf(x)$ と表される。関数の変換が、座標系の変換に関わることについてすでに述べた。いま２つの関数 f と g があって、それらが変換 R によって f' と g' に変換されたと考えよう。もし、元の座標で $g = Af$ が成り立つのであれば、変換された座標で定義される演算子は、同様に $g' = A'f'$ の対応関係を保証するものである必要がある。

今述べた、ある操作 R の演算子におよぼす影響を次の図のように表すことができる。つ

$$\begin{array}{ccccc} & & R & & \\ & f & \longrightarrow & f' = Rf & \\ A & \downarrow & & \downarrow & A' \\ & g = Af & \longrightarrow & g' = A'f' = A'Rf & \\ & & R & \qquad = RAf & \end{array}$$

まり、$A'R = RA$ の関係が成り立つことから演算子に対する操作の影響は次のように表される。

$$A' = RAR^{-1}$$

例として、ある関数 $f(x)$ に x をかける操作はパリティ変換の操作により次のようになることがわかる。

$$PxP^{-1}f(x) = Pxf(-x) = -xf(x) \quad \Longrightarrow \quad PxP^{-1} = -x$$

同様に微分作用に対する変換も次のように考えることができる。

$$P\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P^{-1}f(x) = P\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(-x) = -P\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}f(x')\bigg|_{x'=-x} = -f'(x)$$

つまり、次の変換性が成り立つ。

$$P\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P^{-1} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \quad Pp_xP^{-1} = -p_x$$

一般に x と p の関数として表されるハミルトニアンにパリティの操作を行なうと次のように変換されることもわかる。

$$PH(x,p)P^{-1} = H(-x,-p)$$

対象にある操作を行なったとき、操作を行なう前後でその対象に変化が認められないとき、その操作に対して対象は対称であるという。また、その操作のことを対称操作と呼ぶ。パリティ操作に関する対称性はしたがって、次のように表すことができる。

$$PH(x,p)P^{-1} = H(-x,-p) = H(x,p)$$

$PH = HP$ と表すこともできるので、ハミルトニアンが対称性をもつということは、その操作、たとえば、パリティ演算子とハミルトニアンが互いに交換する、つまり

$$[P,H] = 0$$

が成り立つであると考えることもできる。

2.3　対称操作に関する固有値問題

量子力学の問題は、系を記述するハミルトニアンに関する固有値と固有関数を求めることである。また、ハミルトニアン自身も演算子であり、系にたいするある種の操作であると考えられる。したがって、ハミルトニアンや物理量に対応する座標や運動量以外の一般的な操作に関しても同じような固有値問題を考え、その固有値と固有関数を求めることができる。特にハミルトニアンと交換する対称操作に関する演算子についての固有状態は、問題を簡単化する上で大変役に立つことがわかる。

ここでは、簡単のためにまずパリティの演算子を考え、系がパリティに対する対称性をもつものと仮定する。パリティに関する次のような固有値問題を考えよう。

$$Pf(x) = \lambda f(x)$$

ただし、λ は固有値とする。$P^2f(x) = Pf(-x) = f(x)$ の関係があるので、$P^2 = 1$ つまり $\lambda^2 = 1$ が成り立つので $\lambda = \pm 1$ が得られる。このそれぞれの固有値に対応する固有関数を偶関数、奇関数と読んでいる。

ハミルトニアンが P と交換するとき、次のような固有値問題を考えて見よう。

$$H\phi(x) = E\phi(x)$$

交換関係 $[H,P] = 0$ が成り立つことから、次の式が成り立つ。

$$PH\phi(x) = H[P\phi(x)] = E[P\phi(x)]$$

つまり、P を操作して得られる関数もハミルトニアンの固有関数であることがわかる。また、$\phi(x)$ が P の固有関数の場合には次の関係も成り立つことがわかる。

$$PH\phi(x) = H[P\phi(x)] = \lambda H\phi(x)$$

つまり、関数にハミルトニアンを作用させても偶関数、奇関数の性質はそのまま保たれる。偶関数と奇関数をそれぞれ別々に分けてハミルトニアンの固有値問題を解くことができることを意味し、これが最初の例題が簡単化できる理由である。