

3 いろいろな対称性とその利用

系を不変に保つ対称操作は、一般に複数が存在する。これらの操作を要素とする集合を考えると、それは一般に数学の分野における群の条件を満たすことが知られている。ここでは、量子力学や物質科学でよく表れる対称操作の主なものについてもう少し詳しく説明するが、これらは以下のように連続的な対称性と有限の対称性とに分けることができる。

- 対称操作がある連続的なパラメータに依存するような場合

例 並進対称性、回転対称性

- 有限個の対称操作に関するもの

例 Parity の対称性など

3.1 並進対称性

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、ここでは $D(a)$ の記号で表すことにする。座標についての関数に $D(a)$ を作用させた結果は次のように表すことができる。

$$D(a)f(x) = f(x + a)$$

この操作によって引数が $x \rightarrow x + a$ に変換されるので、関数の形は反対方向に移動する。並進作用によって得られた関数は、微分演算子を用いて次のように表すこともできる。

$$\begin{aligned} f(x + a) &= f(x) + af'(x) + \frac{a^2}{2!}f''(x) + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k}{k!} \frac{d^k}{dx^k} f(x) \\ &= \exp\left(a \frac{d}{dx}\right) f(x) = \exp\left(i \frac{p_x a}{\hbar}\right) f(x) \end{aligned}$$

つまり、並進操作は微分演算子、または運動量演算子を用いて次のように表すことができる。

$$D(a) = \exp\left(i \frac{p_x a}{\hbar}\right) \quad (17)$$

距離 a, b の操作を連続して作用させた結果は、 $a + b$ の距離の操作に等しいことから次の関係が成り立つ。

$$D(a + b) = D(a)D(b)$$

また、運動量がエルミット演算子であることから、 $D(a)$ はユニタリ演算子であり、次のような関係が成り立つこともわかる。

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

以下の参考 (18) に示す結果を利用すると、演算子と考えたときの座標 x は、並進操作によって次のように変換されることがわかる。

$$D(a)x D^{-1}(a) = e^{ipa/\hbar} x e^{-ipa/\hbar} = x + ia[p, x]/\hbar = x + a$$

参考: A, B を演算子としたとき、次の公式が成り立つ。

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots \quad (18)$$

これは次のように証明できる。まず、パラメータ λ の関数として次の演算子を考える。

$$f(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$$

これを、パラメータ λ について原点の周りでテイラー展開したときに必要となる微係数は次のように求めることができる。

$$\begin{aligned} f'(\lambda) &= e^{\lambda A} A B e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} B A e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [A, B] e^{-\lambda A} \\ f''(\lambda) &= e^{\lambda A} A [A, B] e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} [A, B] A e^{-\lambda A} = e^{\lambda A} [A, [A, B]] e^{-\lambda A} \\ &\dots \end{aligned}$$

これらの結果を利用し、 $f(\lambda)$ が次のように表されることがわかる。

$$f(\lambda) = \sum_k \frac{\lambda^k}{k!} f^{(k)}(0) = B + \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2} [A, [A, B]] + \dots$$

$\lambda = 1$ とおいたものが、(18) 式である。

3.1.1 並進対称性と運動量の保存

任意の並進距離 a の値に対して、系が対称性をもつためには、どんな微小な a の値についても並進操作に対してハミルトニアンは不変であり、次の式を満たす必要がある。

$$D(a) H D(-a) = H - a [p, H] + \dots = H$$

つまりハミルトニアンが運動量と交換し、次の関係が成り立つときである。

$$[p, H] = 0 \quad (19)$$

簡単のため 1 次元の問題を考えると、通常ハミルトニアンは、運動エネルギーとポテンシャルとの和とし次のように表される。

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

運動エネルギーは運動量と交換するので、この系が並進対称性をもつのは任意のパラメータ a に対し、ポテンシャルが次の条件を満たすときである。

$$D(a) V(x) D(-a) = V(x + a) = V(x)$$

これは、ポテンシャルが座標に依存しない場合にだけ成り立つ。

並進対称性が成り立つ系に対しては、運動量の固有関数を用いて状態をその固有値の値の違いに応じて分類しておくのが便利である。固有関数は次の固有値問題の解として決まる。

$$-i\hbar \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} = p \phi(x) \quad (20)$$

よく知られたように、この解は次の平面波で与えられる。

$$\phi(x) \propto \exp(ipx/\hbar)$$

この場合は問題が簡単なこともあり、上の関数はすでにハミルトニアン固有関数でもあ
ることがわかり、すでに固有値問題の解も得られ、エネルギーが固有値の値が運動量の固
有値 p の関数として与えられる。

複数の粒子を含む系の場合、例えば 2 個粒子 1, 2 を含む系のポテンシャルエネルギー
は一般に次のように与えられる。

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_0(\mathbf{r}_1) + V_0(\mathbf{r}_2) + V_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

それぞれの粒子の座標を $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ で表し、 V_0 は各粒子に働くポテンシャルエネルギー、 V_1
は粒子間の相互作用を表す。運動量は $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ とする。並進対称性をもつために、個々の
座標に対しポテンシャル V_0 が次の交換関係、

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

を満たせばよいことがわかる。つまり、相互作用がなくてポテンシャルが座標に依存しな
い場合には、それぞれの粒子の運動量が保存することがわかる。

一般に相互作用がある場合には、個別の粒子の並進操作に対し、ポテンシャルは不変に
保たれない。例えば、粒子 1 の並進によって、 V_1 は次のように変換されるからである。

$$e^{i\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \mathbf{a}} V_1(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) e^{-i\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \mathbf{a}} = V_1(\hat{\mathbf{r}}_1 + \mathbf{a}, \hat{\mathbf{r}}_2)$$

2 つの粒子の座標に依存するポテンシャルが並進対称性をもつとすると、それは 2 つの粒
子に対して同時に並進操作を行う場合である。その操作は、次の全運動量演算子によって
実現できる。

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$$

相互作用のある粒子系が並進操作に対して不変であるのは、以下に示すように相互作用が
 $V_1(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = v(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$ のように与えられる場合であり、そのとき保存されるのは個々の
粒子の運動量ではなく、全運動量ということになる。

$$e^{i\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{a}} v(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2) e^{-i\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{a}} = v(\hat{\mathbf{r}}_1 + \mathbf{a} - \hat{\mathbf{r}}_2 - \mathbf{a}) = v(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)$$

一般に多くの数の粒子を含む系であっても、それらの粒子間の相互作用が次のような粒
子間距離だけに依存するポテンシャルの和の形で書けるような場合、つまり次のように与
えられる場合には、

$$V(\hat{\mathbf{r}}_1, \dots) = \sum_{i,j} v(\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j)$$

系の全運動量演算子、

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_i \mathbf{p}_i$$

は、全系のハミルトニアンと交換する。 \mathbf{P} に関する固有状態を利用することによって固有
値問題を簡単化することができる。

3.1.2 周期的なポテンシャルの問題

任意の距離の並進操作ではなく、ある特定の距離 a の並進に対する対称性の存在する場合もある。例えば、結晶中の電子の運動がこの場合に当たる。任意の距離の並進対称性よりも、対称性は少し低下している場合である。ポテンシャルがある周期性をもつ場合に対応する。

周期性をもつポテンシャルとは、ポテンシャルが次のような性質をもつ場合のことである。

$$e^{ipa/\hbar}V(x)e^{-ipa/\hbar} = V(x+a) = V(x)$$

簡単のために 1 次元の系の場合を考えた。このとき、ハミルトニアンと $D(a)$ は互いに交換する。つまり、 $[D(a), H] = 0$ が成り立つ。これまでの説明からわかるように、問題を簡略化するために、状態をユニタリ演算子 $D(a)$ の固有値にしたがって分類しておくのが便利である。そこで、まず並進操作 $D(a)$ の固有関数と固有値について考えてみよう。

すぐに思いつくことは、運動量の固有状態である平面波の状態、 $\exp(ikx)$ が $D(a)$ についても固有状態のなることがわかる。次の式が成り立つので、

$$D(a)\exp(ikx) = \exp(ika)\exp(ikx)$$

固有値の値は、 $\exp(ika)$ である。ただ、少し注意が必要である。同じ固有値をもつ状態は上の状態だけに限られない。 k の値と $2\pi/a$ の整数倍だけ異なるなる状態は、すべて同じ固有値 $\exp(ika)$ の値をもつからである。したがって、ユニタリ演算子 $D(a)$ の固有状態は、一般にはこれらすべての状態の線形結合として次のように表される。

$$\begin{aligned}\psi_k(x) &= \sum_n c_n e^{i(k+2\pi n/a)x} = e^{ikx} \sum_n c_n e^{2i\pi nx/a} = e^{ikx} u(x) \\ u(x) &= \sum_n c_n e^{2i\pi nx/a}\end{aligned}\quad (21)$$

上の式に現れた関数 $u(x)$ は周期 a をもつ周期関数を表す。上の $u(x)$ に関する展開形は、フーリエ級数展開である。ここで求めた固有関数 $\psi_k(x)$ は、固体物理学の分野では、Bloch 関数という名前で知られている。

3.2 対称性とエネルギー準位の縮重

運動量の保存則が存在する場合、 $\phi_k(x) = e^{ikx}$ が運動量演算子に関する固有関数である。この系にさらに、パリティの対称性が存在する場合を考えてみよう。例えば、ポテンシャルが存在しない自由粒子の場合を考えてみよう。この場合、系のハミルトニアン H は次の交換関係を満足する。

$$[p_x, H] = 0, \quad [P, H] = 0$$

運動量とパリティの演算子はすでに説明したように、次の関係が成り立つので、互いに交換しない。

$$Pp_xP^{-1} = -p_x$$

したがって、ハミルトニアン H は系のパリティ P と交換し、また運動量とも交換する。しかし、 $[P, p_x] \neq 0$ である。

この問題の解である平面波 $\phi_k(x)$ にパリティの操作を作用させると、新たな状態 $\phi_{-k}(x) = P\phi_k(x)$ に変換される。パリティがハミルトニアンと交換することは、変換された状態もハミルトニアンの固有状態のままであり、固有値の値も変わることはない。つまり、変換前後の2つの状態は同じエネルギーをもちエネルギー準位の縮重があることがわかる。ただし、例外として $k = 0$ の固有状態は、パリティ操作によって異なる状態に変換されるわけではないので例外である。

この例のように、複数の対称性があり、その中に互いに交換しないものがある場合には一般にエネルギー準位の縮重が発生する。