

# 数値計算の観点から見た 対称性とよい量子数

---

大島・山崎研究室 D1 佐々木徹

2024.03.15執筆

# 本資料の対象と目的

## 対象

研究室内のB4およびM1を対象とする。  
学部レベルの量子力学の知識を前提とする。

## 目的

- 大島研に所属する上で知っておくとうれしい知識
- かつ作者(佐々木)の研究周辺の概念  
に興味を持ってもらうことを目的とする。

## 本資料のコンセプト

- だいたい10ページくらい，10分程度で目を通せるボリューム
- 多めの図で構成して視覚的にイメージしやすい資料

# 目次

---

- 概要
- インTRODクシヨン
- 球コマの回転を例にした計算
- 計算速度の比較
- まとめ

# 概要

## 本資料の流れ

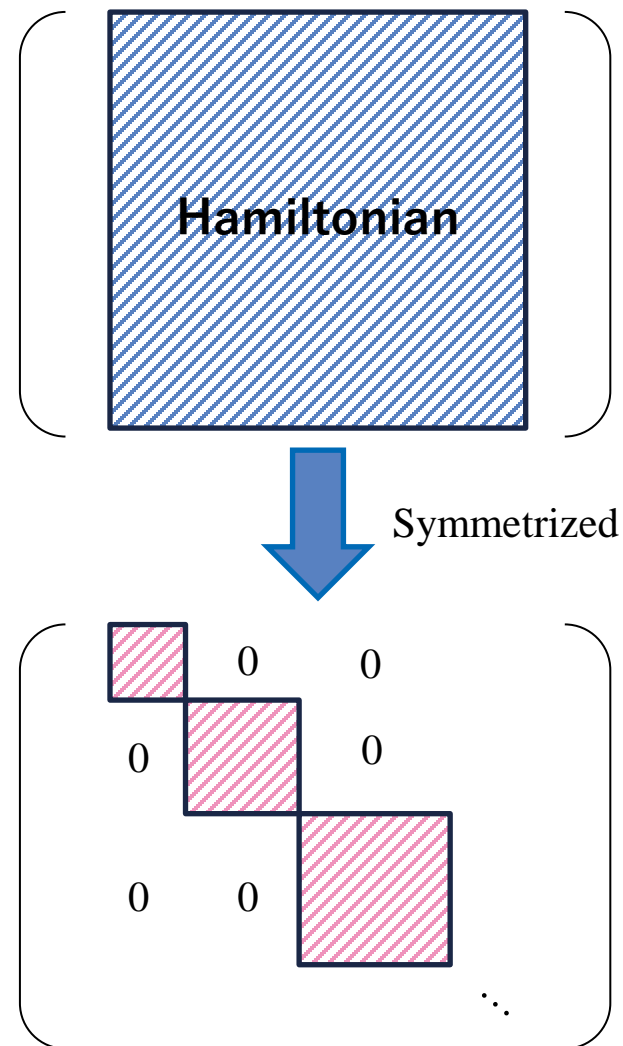
- よい量子数について紹介する.
- よい量子数を考えることのメリットを計算コストの観点から示す.
- 実際の計算時間の比較を示す.

## 主要な結果

- 回転対称性を考慮してブロック対角化をした結果計算時間を1/10程度に削減できた.

## キーワード

よい量子数   対称性   計算時間



# イントロダクション

## よい量子数とは

Hamiltonianと可換な物理量の量子数

→ 系の対称性を反映

例：	対称性	保存する物理量	よい量子数
	中心対称性	全角運動量の大きさ $\hat{\mathbf{L}}^2$ , 1方向の角運動量の大きさ $\hat{L}_z$	$l, m$
	$\alpha$ -軸周りの回転対称性	$\alpha$ -軸周りの角運動量 $\hat{L}_\alpha$ (大抵 $\alpha = z$ とする)	$m$
	並進対称性	運動量 $\hat{p}$	$p$
	空間反転対称性	(物理量ではないが)空間反転演算子	パリティ

## 何がうれしいのか

- 固有状態にエネルギー以外の名前をつけることができる $|E, \Gamma\rangle$ . ex.  $\Gamma = l, m$   
→ エネルギー的に縮退している場合はエネルギー以外のラベル付けが必要.
  - 対称性に起因する選択則などが分かる. ex.  $\Delta m = \pm 1$ .
- Hamiltonian行列はよい量子数の値ごとにブロック対角化される.  
→ 計算コストの大幅削減

物理的な側面から議論している参考書はたくさんある.

→ この資料では最後の計算科学的な観点からよい量子数を掘り下げる.

# 計算例

球コマ分子のHindered rotorモデル

外場ポテンシャル中での回転子系

$$H = Bj^2 + V_3 \left( Y_{3,2}(\theta, \phi) + Y_{3,-2}(\theta, \phi) \right)$$

使う基底は対称コマ回転子

$$\{|j, k, m\rangle\}$$

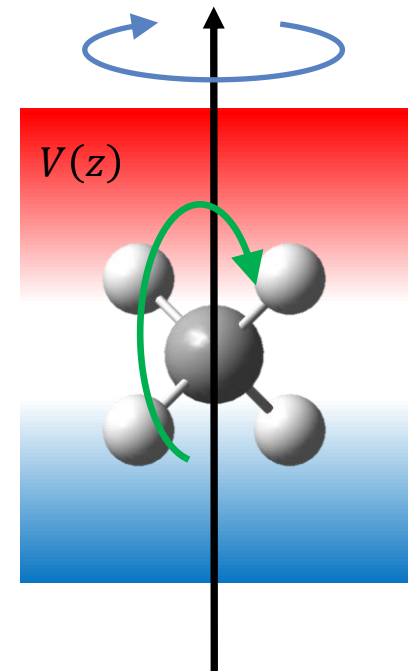
ポテンシャル項 $V_3 \left( Y_{3,2}(\theta, \phi) + Y_{3,-2}(\theta, \phi) \right)$ は異なる $j, k$ の状態どうしを混合させるが、異なる $m$ どうしの行列要素はゼロ.

$$\langle j', k', m' | V | j, k, m \rangle = V_{j', j, k', k} \delta_{m', m}$$

→  $m$ はよい量子数： $z$ -軸周りの系の回転対称性と対応.

※これはよくがB4のときに弄りまわしていたモデル

$z$ -軸回りの回転対称性

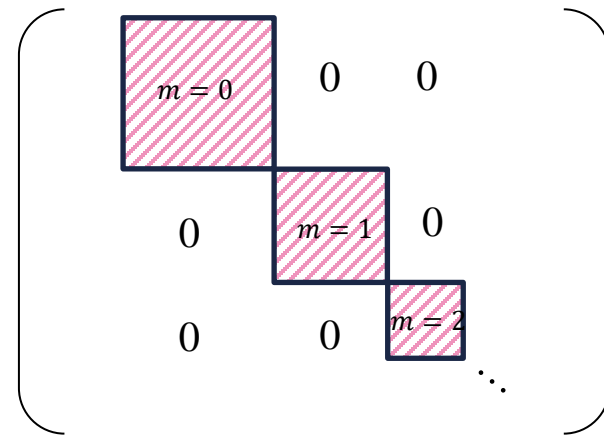


# 計算速度の比較

対称性を考慮しないプログラム vs. 対称性を考慮したプログラム

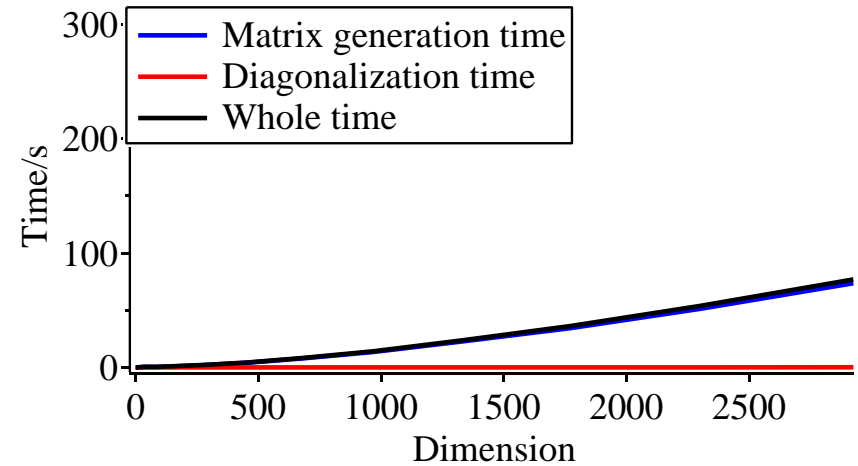
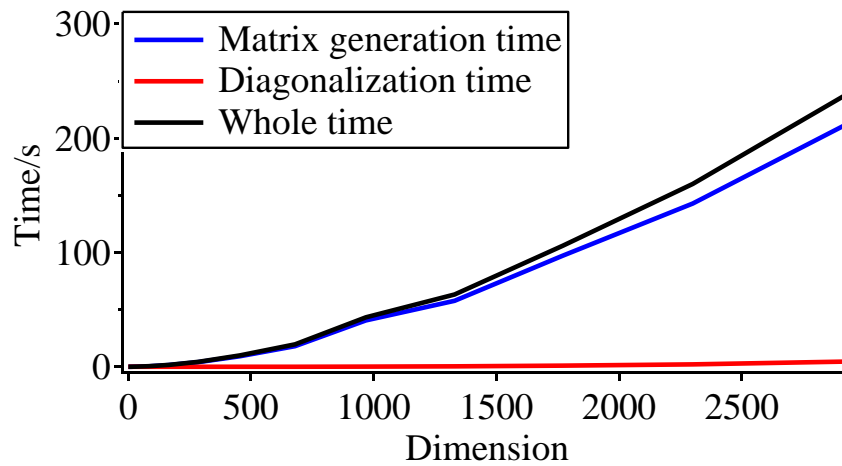


$$\text{dimension: } \sum_{j=0}^{j_{\max}} (2j + 1)^2$$



$$\text{dimension: } \sum_{j=m}^{j_{\max}} (2j + 1) \text{ for } m = 0, 1, \dots, j$$

計算量のオーダーは一緒だがブロック対角化した方が圧倒的に速い



# まとめ

## よい量子数

- 定義：Hamiltonianと可換な物理量の量子数
  - 系の対称性を反映
  - 固有ベクトルのラベル付け
  - 計算コストの削減
- 
- 系の対称性からよい量子数を見つける.
  - よい量子数が異なる状態間での混合は生じないためブロック対角化可能  
→ 計算コストの削減