

ハミルトニアン量子化についてのコメント A comment on Quantization of Hamiltonian

学術番号 06609 氏名 母袋大輔

指導教員 山野辺 基雄

概要

3次元の球面上に拘束された粒子の物理系を、Diracの方式^{[4], [5]}に基づいて量子化する。このとき、座標系としては、デカルト座標系と極座標系の2つを用いる。結果として、デカルト座標系における量子化では、一意的にハミルトニアンが与えられるのに対し、極座標系における量子化は、演算子順序の異なる多数のハミルトニアンの存在を許すことが示される。さらに、多数得られたハミルトニアンのうち2つを選び、その2つの差をアフィン接続係数という幾何学的な量を用いて表す。

次に、他の拘束系でも同様な事が起きるのかを調べるために、球面とは別の拘束系として、トーラス(ドーナツ状の2次元曲面)上に拘束された粒子の物理系について考察する。その結果、トーラス座標系における量子化では、球面上に拘束された場合の極座標系での量子化と同様に、複数のハミルトニアンの存在が許されることが示される。さらに、これら異なるハミルトニアンの差をアフィン接続係数を用いて表すと、極座標系の場合とまったく同じ幾何学的構造を持つことがわかる。

最後に、空間的に拘束されていない物理系に対し、一般化座標を用いて量子化を行う。この場合にも、複数のハミルトニアンの存在が許され、差異を表す項の幾何学的構造は同じであることが示される。このことから、粒子に対する閉じた2次元曲面への拘束は、ハミルトニアンが多数得られることには関係していないことがわかる。

1. 研究の背景

量子力学は、20世紀初等、古典力学では説明できないような原子レベルで起きる微小な振る舞いを説明するために考案された理論体系である。その後工業技術が発達し半導体の微細化や超伝導材料の研究などが進むにつれ、工学の分野において、量子力学は非常に重要な理論となった。

量子力学における基礎方程式は、Schrödinger方程式(固有方程式)と呼ばれ、次式で表現される。

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

ここで $|\psi\rangle$ は系の状態を表すベクトルであり、状態ベクトルと呼ばれる。上式は、演算子によって表現されている。これを座標表示するためには、両辺に左側から座標のブラベクトルをかければよい。

$$\langle q|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle q|\psi\rangle$$

具体的に微分方程式としてSchrödinger方程式を書き下すためには、ハミルトニアンの座標表示を知る必要がある。

量子力学では、座標や運動量などの物理量を演算子として扱う。そして演算子間に交換関係を設定する。このことにより、古典系では可換なものが量子系では必ずしも可換でなくなる。

一般的な量子力学の教科書においては、極座標系におけるSchrödinger方程式を得るために、デカルト座標系のSchrödinger方程式から変数変換を行う方法を用いている^[3]。もしこの方法でしか極座標系におけるSchrödinger方程式を得られないのであれば、極座標系での量子論はデカルト座標系を経由しなければ議論できないことになる。すなわち、デカルト座標系が絶対的な座標系でなければならない。しかし、座標系は観測者によるものであって、それらの中に絶対的な座標系が存在するはずはないと考えられる。それぞれの座標系における量子化については既に議論がなされており^{[1], [2]}、極座標系で量子化を行うとハミルトニアンが多数得られてしまうことが確認されている。それらは全て位置演算子と運動量演算子の順序が異なるものであり、ど

のハミルトニアンが極座標系の正しいSchrödinger方程式を記述するのかわからない。そこで本研究では、多数得られるハミルトニアンがどのような意味を持つかについて明らかにすることを目指す。

2. デカルト座標系での量子化

3次元の球面上に拘束された粒子の量子化をするにあたって、以下の手順で量子化を行った。まず、ラグランジェの未定乗数法を用いて拘束系でのラグランジアンを定義し、ルジャンドル変換をラグランジアンに施すことによってハミルトニアンを得た^[1]。その後、Diracの方式^{[4], [5]}に従って拘束条件を調べ、それを基にDirac括弧を定義した。そして、座標と運動量に関するDirac括弧を全て計算し、それらを交換子に置き換えることによって、量子力学における演算子同士の交換関係を導き出した。

デカルト座標系で量子化を行った結果、次のようなハミルトニアンが得られる。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_i \hat{p}_i$$

ここで、 p_i はデカルト座標系における運動量を表す。また1つの項の中で同じ添え字が2ヶ所以上使われている場合は、それぞれの成分について足し合わせることを意味する。力学変数の交換関係は、次のようになる。

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0,$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \left(\delta_{ij} - \frac{\hat{x}_i \hat{x}_j}{r^2} \right),$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = \frac{i\hbar}{r^2} (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i)$$

ただし、 $[F, G] \equiv FG - GF$ である。 \hat{p}_i の座標表示は、本間らの方法^[6]を用いれば明らかとなる。

ハミルトニアンをデカルト座標表示すれば、次のようになる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{2x_i}{r^2} \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{x_i x_j}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \right)$$

ここで、 r は球の半径を表す。

3. 極座標系での量子化

2節と同じ物理系を、今度は極座標系において、同じ手順で量子化する。極座標系で量子化すると、ハミルトニアンは多数得られる。例えば、

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2m} \hat{g}^{-\frac{1}{4}} \hat{\Pi}_m \hat{g}^{\frac{1}{4}} \hat{g}^{mn} \hat{g}^{\frac{1}{4}} \hat{\Pi}_n \hat{g}^{-\frac{1}{4}},$$

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2m} \hat{\Pi}_m \hat{g}^{mn} \hat{\Pi}_n$$

などである。ここで Π_m は極座標系における運動量である。また g_{mn} は計量と呼ばれる量であり、微小距離 ds は計量を用いて、

$$(ds)^2 = g_{mn} dq_m dq_n$$

で表される。極座標系においては、

$$g_{mn} \equiv \begin{pmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}$$

である。また、 g^{mn} は g_{mn} の逆行列である。極座標系において、力学変数の交換関係は、

$$\left[\hat{\theta}, \hat{\Pi}_2 \right] = \left[\hat{\phi}, \hat{\Pi}_3 \right] = i\hbar$$

となり、他の交換関係は全て0となる。DeWittの方法^[7]を用いれば、 $\hat{\Pi}_m$ の座標表示を求めることができる。

量子力学においては、物理量を表す演算子はエルミートでなければならない。よって系の量子化を行う際には、ハミルトニアンに対し、次式で表されるエルミート性を要請する。

$$\langle \phi | \hat{Q} | \phi' \rangle = \langle \phi' | \hat{Q} | \phi \rangle^*$$

しかし、極座標系では、この要請を満たすようなハミルトニアンが多数存在する。 \hat{H}_1 と \hat{H}_2 はどちらもエルミート性を有するが、演算子順序が異なるハミルトニアンである。言い換えると、極座標系における量子化によってハミルトニアンが多数得られるのは、演算子順序が定まらないからである。

4. 2種類のハミルトニアンの比較

ハミルトニアンに対する要請を考えるために、 \hat{H}_1 と \hat{H}_2 の差を求め、その意味を明らかにする。まず、 \hat{H}_1 と \hat{H}_2 を極座標表示してその差を求める。それは次式のようになる。

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_1 + \frac{\hbar^2}{8mr^2} \cot^2 \hat{\theta} + \frac{\hbar^2}{4mr^2}$$

しかし、極座標表示ではその意味について理解しづらい。よって、次は極座標表示をせずに \hat{H}_1 と \hat{H}_2 の差を求める。それは次式のように表される。

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_1 + \frac{i\hbar}{4m} \left[\hat{g}^{mn} \hat{g}^{ik} \frac{\partial \hat{g}^{jk}}{\partial \hat{q}^m}, \hat{\Pi}_n \right] + \frac{1}{16m} \hat{g}^{ik} \hat{g}^{ij} \frac{\partial \hat{g}^{jk}}{\partial \hat{q}^m} \frac{\partial \hat{g}^{ij}}{\partial \hat{q}^n} \hat{g}^{mn}$$

ここでアフィン接続係数と呼ばれるものを導入する。アフィン接続係数とは、空間の幾何学的な性質に関する量であり、次式のような関係が成り立つ。

$$\Gamma_{\mu\lambda}^{\alpha} = \frac{1}{2} g^{\alpha\beta} \frac{\partial g^{\alpha\beta}}{\partial q_{\mu}}$$

アフィン接続係数を導入することによって、 \hat{H}_1 と \hat{H}_2 の差を次式のように書き換えることができる。

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_1 + \frac{i\hbar}{4m} \left[2\hat{g}^{mn} \hat{\Gamma}_{ma}^a, \hat{\Pi}_n \right] + \frac{\hbar^2}{4m} \hat{\Gamma}_{mb}^b \hat{\Gamma}_{nc}^c \hat{g}^{mn}$$

5. トーラス上に拘束された粒子の場合

5節では、トーラス上に拘束された粒子を扱う。閉じた2次元曲面は、球とトーラスより構成されることが知られている。球面に拘束された場合については2~4節で論じているので、あとはトーラスに拘束された場合を扱えば、閉じた2次元曲面についての議論は尽されることになる。量子化は、デカルト座標系のほかに、トーラス座標系^[2]で行った。デカルト座標系との関係は、

$$x_1 = (R + r \sin \theta) \cos \phi,$$

$$x_2 = (R + r \sin \theta) \sin \phi,$$

$$x_3 = r \cos \theta$$

である。ここで、 R は原点とチューブの中心との距離、 r はチューブの半径である。また、 $r < R$ である。

量子化の手順は、球面上に拘束された粒子を扱う場合と同様なのでここでは省略し、それぞれの座標系で量子化されたハミルトニアンのみを示す。まず、デカルト座標系では、ハミルトニアンは次のようになる。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_i \hat{p}_i$$

ここで、 \hat{p}_i はデカルト座標系における運動量である。一方、トーラス座標系においてハミルトニアンは多数得られるが、そのうち任意の2つを選んで示す。

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2m} \hat{g}^{-\frac{1}{4}} \hat{\Pi}_m \hat{g}^{\frac{1}{4}} \hat{g}^{mn} \hat{g}^{\frac{1}{4}} \hat{\Pi}_n \hat{g}^{-\frac{1}{4}},$$

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2m} \hat{\Pi}_m \hat{g}^{mn} \hat{\Pi}_n,$$

$$\hat{g}^{mn} = \begin{pmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & (R + a \sin \hat{\theta})^2 \end{pmatrix}$$

ここで $\hat{\Pi}_m$ は極座標系における運動量、 g_{mn} はトーラス座標系における計量である。 \hat{H}_1 と \hat{H}_2 は、計量の成分を除けば、球面上に拘束された粒子の量子化によって得られたハミルトニアンと一致する。さらに、 \hat{H}_1 と \hat{H}_2 の差を求めれば、

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_1 + \frac{i\hbar}{4m} \left[2\hat{g}^{mn} \hat{\Gamma}_{ma}^a, \hat{\Pi}_n \right] + \frac{\hbar^2}{4m} \hat{\Gamma}_{mb}^b \hat{\Gamma}_{nc}^c \hat{g}^{mn}$$

となり、球面上に拘束された場合と幾何学的構造が一致する。

6. 一般化座標における量子化

ここでは、一般化座標系で議論を行う。物理系も、球面上に拘束された粒子ではなく、無拘束の自由粒子を扱う。まず、古典的ハミルトニアンは、次式で表される。

$$H' = \frac{1}{2m} P_i g^{ij} P_j$$

ここで、 P_i は一般化運動量、 g_{ij} は計量である。

次に量子化を行うと、多数のハミルトニアンが得られる。それらの中で \hat{H}_1 、 \hat{H}_2 と同じ順序のハミルトニアンを選ぶ。

$$\hat{H}'_1 = \frac{1}{2m} \hat{g}^{-\frac{1}{4}} \hat{P}_m \hat{g}^{\frac{1}{4}} \hat{g}^{mn} \hat{g}^{\frac{1}{4}} \hat{P}_n \hat{g}^{-\frac{1}{4}},$$

$$\hat{H}'_2 = \frac{1}{2m} \hat{P}_m \hat{g}^{mn} \hat{P}_n$$

\hat{H}'_1 と \hat{H}'_2 の差を求めると、次のようになる。

$$\hat{H}'_2 = \hat{H}'_1 + \frac{i\hbar}{4} \left[2\hat{g}^{mn} \hat{\Gamma}_{ma}^a, \hat{P}_n \right] + \frac{\hbar^2}{4} \hat{\Gamma}_{mb}^b \hat{\Gamma}_{nc}^c \hat{g}^{mn}$$

上式は、拘束条件が存在しない系のハミルトニアンであるにもかかわらず、2~4節、あるいは5節で扱った拘束系のハミルトニアンと同値である。このことから、粒子に対する拘束は、量子化によってハミルトニアンが多数得られることには寄与していないものと考えられる。

7. 結論

極座標系での量子化において多数発見されるハミルトニアンの違いは、演算子順序の違いであることがわかった。また、それらの差をアフィン接続係数によって表した。しかし、このことが具体的に何を意味するのかについては不明である。また、閉じた2次元曲面への拘束は、その構造に関わらず、ハミルトニアンの非一貫性には関係しない。さらに、空間的に拘束されていない系において議論を行った結果、粒子に対する拘束自体がハミルトニアンの非一意性に関係しないことがわかった。

8. 今後の展望

今後は、もっと別の演算子順序を持つハミルトニアンの差を求め、その差がどのように表されるかを調べたい。また、差を表す項が必要になる場合も存在することが報告されているので、それについても考察を行いたい。

参考文献

- [1] N.K.Flack and A.C.Hirshfeld, Eur. J. Phys. **4** (1983) 5.
- [2] 石川 純夫, 宮崎 忠, 山野辺 基雄, 山本 和義, トーラス上に拘束された粒子の量子論(1995)
- [3] 小出 昭一郎, 量子力学(I) (裳華房 2003)
- [4] 九後 汰一郎, ゲージ場の量子論 I (培風館 1989)
- [5] P.A.M.Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics* (Yeshiva Univ. Press, New York, 1964)
- [6] T. Honma, T. Inamoto and T. Miyazaki, Phys.Rev **D.42** (1990) 2049
- [7] B. S. DeWitt, Phys.Rev. **85** (1952) 653.