5201
ハミルトニアン演算子の表現についての考察
A comment on a representation of Hamiltonian operators.

09511 加藤 澄也
指導教員 山野辺 基雄

1 研究目的
本研究の目的は物理学の理論について取り扱い，物理学という学問の更なる理解と追求を充実させることである．詳細な研究内容として古典論から量子論への移行，すなわち量子化法においてハミルトニアンと呼ばれる物理演算子の座標系の違いを考慮した表現方法について考察を行う．事前の準備として解析力学，量子力学，正準量子化法などの研究に関連する理論についての知識が必須であり，研究過程としてこれらについて学習を行う．

2 研究背景
量子力学における運動を支配する基礎方程式の一つとしてSchrödinger方程式と呼ばれるものが知られている．本研究では特に定常状態のSchrödinger方程式を扱うこととし，これは次のように演算子を伴って書かれる．

$$\langle q|\,\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,\langle q\,|\,\psi\rangle \tag{1}$$

ここで$\hat{H}$はハミルトニアンと呼ばれる演算子で，物理系のエネルギーを表すものである．量子論では，物理量はエルミート性を持つ演算子で記述される．それらの間には，正準交換関係と呼ばれる代数関係が設定され，古典論で可換であったものが量子論では必ずしも可換ではなくなる．

Schrödinger方程式を具体的な微分方程式として解くためには，ハミルトニアンの座標表示を知る必要がある．例えばデカルト座標表示のSchrödinger方程式を得るには，古典系におけるデカルト座標表示のハミルトニアンから量子化を行う方法が一般的である．

しかし，デカルト座標表示以外の座標系でのSchrödinger方程式を得る際，一般に用いられるのは量子化されたデカルト座標表示のハミルトニアンに変数変換を施す方法である．この方法が用いられる事情として，デカルト座標表示以外のハミルトニアンを直接量子化すると，無数の演算子順序の異なるハミルトニアンを取り得るからである．すなわち，一意的に正しいSchrödinger方程式を記述するハミルトニアンを決定できないのである．もし先述の方法でしか他座標系におけるSchrödinger方程式を得ることが出来ないのであれば，他座標系における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．したがって，デカルト座標系が絶対的な座標系ということになる．しかし，座標系とは観測者が任意に設定するものであり，その中に絶対的な座標系が存在することは認め難い．そこで他座標系で記述されている古典系のハミルトニアンを直接量子化して，一意的に量子系のハミルトニアンを得る手法を確立しなければならない．

本研究では多数得られるハミルトニアンの中からデカルト座標系のものと同値になるものを判定した．本研究では同値となる理由を考察し，明らかにすることを目的の一つとする．

3 デカルト座標系での量子化
自由な1粒子物理系の量子化は次の手順で行う．物理系のラグランジアンを定義し，ルジャンドル変換によってハミルトニアンを得る．ポアソン括弧を計算した後，交換子に置き換えることにより量子論における演算子間の交換関係が導ける．DeWittの正準量子法[1]に則って量子化を行う場合，次のような置き換えによって為される．

$$\hat{x}_k = x_k \tag{2}$$

$$\hat{p}_k = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{1}{2}i\hbar\Gamma^l_{kl} \tag{3}$$

ここで$\hat{x_k}$は粒子の座標，$\hat{p_k}$はその共役運動量および，Γ^l_{kl}はアフィン接続係数と呼ばれる空間の幾何学的な性質に寄与する量である．これは計量$g_{\alpha\beta}$を用いて

$$\Gamma^l_{kl} = \sum_{\alpha,\,\beta}\frac{1}{2}g^{\alpha\beta}\frac{\partial}{\partial x_k}g_{\alpha\beta}$$

のように表される．またg^{kl}はg_{kl}の逆行列である．

デカルト座標系における量子化では，演算子の非可換性を考慮しても次のハミルトニアンのみが得られる．

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \tag{4}$$

4 一般化されたハミルトニアン
デカルト座標系以外の他座標系で量子化を行うと，ハミルトニアンの候補は無数に得られる．例えば，

$$\hat{H}_1 = \sum_{k,\ l}\frac{1}{2m}g^{-\frac{1}{4}}\hat{p}_k g^{\frac{1}{4}}g^{kl}g^{\frac{1}{4}}\hat{p}_l g^{-\frac{1}{4}} \tag{5}$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{k,\ l}\frac{1}{2m}\hat{p}_k g^{kl}\hat{p}_l \tag{6}$$

などである[2]．実際に計算すると，(6)式では座標系によっては余分なポテンシャルの付加項が存在し，デカルト座標系での表現(4)と同値にならない．反面，(5)式はどの座標系であってもデカルト座標系でのハミルトニアンと同値であることが確認できる．そこで(5)式のハミルトニアン演算子を一般座標系で表現すると，

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(g^{kl}\frac{\partial^2}{\partial q_k^2} + \frac{\partial g^{kl}}{\partial q_k}\frac{\partial}{\partial q_k} + \frac{1}{2g}g^{kl}\frac{\partial g}{\partial q_k}\frac{\partial}{\partial q_k}\right) \tag{7}$$

を得る．

5 まとめ
多数得うるハミルトニアンから必ずデカルト座標系のものと同値となるものを特定した．しかし，一般座標系だけの考察で何故(5)式の順序でなければならないのかは本研究では判明せず，解明には更なる考察が必要となる．今後の展望として，先述の余分に得られるポテンシャル項は先行研究[2]より，場合により必要となることも報告されている．したがって，それについても考察を行う必要があるだろう．

参考文献
[1] B.S. DeWitt，Phys.Rev.85 (1952) 653
[2] Daisuke Motai，*A comment on Quantization Hamiltonian*. graduation thesis，(2007)