大阪市立科学館研究報告 15,63-66(2005)

曲がった空間での量子化について

斎藤吉彦

大阪市立科学館

概要

直交座標を正準変数とした量子化の手続きと、一般座標のそれとの関係を考察する。素直な力学系の場合曲がった空間での量子化の処方箋を与えることができる。

1．はじめに

拘束系の量子化の処方箋は Dirac[1] によって与えられた。Faddeev[2] はこの方法を Feynman 経路積分に導入し、ゲージ理論のユニタリティーを保証するために導入されていたゴーストの意味を明らかにした。Masukawa-Nakajima[3] は、拘束系の位相空間の正準座標には次のようなものが存在することを示した。すなわち、その正準座標系におけるいくつかの正準変数を 0 とおくことが、その力学系の拘束条件に対応する。このことにより、Dirac の処方は、拘束条件を与える正準変数を省いた位相空間での量子化に対応すること、Faddeev の方法は、拘束条件により縮小された位相空間での Feynman 積分であることが明白になった。

ただし、Masukawa-Nakajima の証明は局所的なものであるので、大局的に正準変数が得られない場合は、困難な問題が残されている。そのような場合は、局所的に解いた座標系をはり合わせ、全位相空間を覆うことが必要で、座標系の共通部分は正準変換によって関係付けられる。このとき、正準変数が量子化されると、正準変数同士の交換関係を無視できないので、古典論のような関係付けはほとんどの場合不可能である。また、無限次元自由度の場合はヒルベルト空間の定義により、まったく異なった量子系となることがある。たとえば、弦理論において、時空の次元が 26 以外は棄却されるが、ヒルベルト空間をボゴリューボフ変換することで、この臨界次元を変えることができる[4]。この問題を解くには、量子化の処方に関する基本的な考察が必要である。

そこで、量子化について最も基本的なことを考察した。本稿にそのメモを残す。

標準的な教科書では、ユークリッド空間上で、直交座標 $x_i (i = 1, 2, 3)$ を正準変数とし、それに共役な運動量 p^i を微分演算子 $-i\frac{\partial}{\partial x_i}$ で置き換えるという量子化の手続きが行われる。直交座標が特別な座標である理由はないので、一般座標を正準変数として量子化してもよいはずである。しかし、これを考察した教科書は、著者の知る限り、存在しない。そこで、直交座標系による量子化と矛盾しない一般座標系による量子化を考察したところ、曲がった空間での量子化の標準を得た。

第 2 章で、直交座標による量子化における正準変数の交換関係と一般座標によるものとは同値であることを、第 3 章で、通常のハミルトニアンの順序は直交座標によるものを採用すべきで、これを採用することで曲がった空間の量子化が可能となることを示し、第 4 章で一般のハミルトニアンの量子化の処方を与え、その処方に従うことで曲がった空間で量子化が可能であることを示す。

2．一般座標における正準量子化

質点の位置を直交座標 $x_i (i = 1, 2, 3)$ で表し、ラグランジアンを $L(x_i, \dot{x}_i)$ とすると、x_i に共役な運動量は次式で定義される。

$$p^i \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial L}{\partial \dot{x_i}} \tag{1}$$

ディラックはポアソン括弧を交換関係に置き換えることで、量子化の処方を与えた。すなわち、

$$[\hat{A}, \hat{B}] \overset{\text{def}}{=} i\{A, B\}_{P.B.} \tag{2}$$

したがって、ディラックの処方 [(1)] によれば、x_i と、p^j は次の交換関係を満たす代数として量子化される。

$$[\hat{x}_i, \hat{p}^j] = i\delta_i^j \tag{3}$$

一般座標 Q_i, に共役な運動量を P^j とすれば、ディラックの処方は

$$[\hat{Q}_i, \hat{P}^j] = i\delta_i^j \tag{4}$$

式（3）と式（4）とは、代数関係として矛盾しないことが次のようにして分かる。

$$P^i \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i} = \frac{\partial x_j}{\partial Q_i}\frac{\partial L}{\partial \dot{x_j}} = \frac{\partial x_j}{\partial Q_i}p^j \tag{5}$$

であるので、一般座標 Q は直交座標 x の関数であることを考慮すると、式（4）の左辺は

$$\begin{aligned}[\hat{Q}_i, \hat{P}^j] &= \left[Q_i(\hat{x}), \frac{\partial x_k}{\partial Q_j}(\hat{x})\hat{p}^k\right] \\ &= i\frac{\partial Q_i}{\partial x_k}\frac{\partial x_k}{\partial Q_j} \\ &= i\delta_i^j\end{aligned} \tag{6}$$

これは、式 (5) 第 3 式を代数演算子で表すときの順序の任意性には依存しない。なぜならその任意性は $\hat{x}$ のみの関数であり、$\hat{Q}$ と可換であるから。同様に、x を Q の関数とみなしても、式 (3) は成立する。[*1] このように、代数関係においては量子化された運動量間の関係は順序に無頓着でいてよい。しかし、波動関数に作用する演算子として扱う場合は考慮が必要である。このとき、運動量は微分演算子と定義される。微分として矛盾なく定義するには、次のように運動量演算子間の関係式を与える必要がある。

$$\hat{P}^i \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial x_j}{\partial Q_i}\hat{p}^j \tag{7}$$

$$\hat{p}^i \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial Q_j}{\partial x_i}\hat{P}^j \tag{8}$$

[*1] 以上の括弧積の計算において、$[f(\hat{x}), \hat{p}] = if'(\hat{x})$ を使ったことに注意せよ。付録 A 参照

3．ハミルトニアンの量子化

ハミルトニアンは運動量の 2 次関数となるのが一般である。この場合、運動量演算子と位置座標演算子との順序の任意性により、ハミルトニアンを一意的に量子化することは出来ない。本章では、量子化の処方箋は通常の量子力学の教科書で採用されている順序が適切であることを示す。

3.1. 直交座標系による量子化

ユークリッド空間の計量を $\boldsymbol{g}$ とする。素直なラグランジアンは座標に依存しない形で次のように書ける。

$$L = \frac{m}{2}\boldsymbol{g}^{-1}(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) - U \tag{9}$$

ここで、$\boldsymbol{v}$ は速度ベクトル、U はポテンシャル。

$\boldsymbol{g}$ に対応する直交座標系を $\{x\}$ とすれば (9) は

$$L = \frac{m}{2}\sum_{i=1}^{3}\dot{x_i}^2 - U(x) \tag{10}$$

$\{x\}$ に共役な運動量を $\{p_x\}$ と書けば、ハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}\left(p_x{}^i\right)^2 + U(x) \tag{11}$$

量子化されたハミルトニアンを

$$\hat{H}_x \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}\left(\hat{p}_x{}^i\right)^2 + U(\hat{x}) \tag{12}$$

と定義するのが一般である。他の直交座標系を $\{y\}$ とすれば、同様の手続きで

$$\hat{H}_y \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}\left(\hat{p}_y{}^i\right)^2 + U(\hat{x}) \tag{13}$$

演算子の順序に悩まされることなく、次式の成立することが分かる。

$$\hat{H}_x = \hat{H}_y \tag{14}$$

なぜなら、$\frac{\partial y_j}{\partial x_i}$ は定数なので (付録 B 参照)、式 (5) より演算子の順序に悩まされることなく、次式を導出できるからである。

$$\hat{p}_x{}^i = \frac{\partial y_j}{\partial x_i}\hat{p}_y{}^j \tag{15}$$

したがって、ラグランジアンが式 (9) で与えられる単純なものであれば、直交座標系によるハミルトニアンの量子化は直交座標系のとり方に依存しない。

ここまでは、空間をユークリッド空間と仮定したきたが、曲がった空間にもこの量子化は拡張できる。なぜなら、曲がった空間を局所的にユークリッド空間と同一視すれば、曲がった空間を複数のユークリッド空間で覆うことができる。これらのユークリッド空間で、それぞれハミルトニアンを式 (12)、式 (13) のように定義すれば well-defined である。なぜなら、ユークリッド空間の重なった領域では、共役運動量間の関係は式 (15) となり、式 (14) の関係が成立するからである。

3.2. 一般座標による量子化

一般座標系を $\{Q\}$ とすると、ハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = \frac{1}{2m}\sum_k \frac{\partial Q_j}{\partial x_k}\frac{\partial Q_i}{\partial x_k}P^i P^j \tag{16}$$

量子化のための順序は、式（12)、式（13) と同値になるように、次式を採用することにする[*2]。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_k \frac{\partial Q_j}{\partial x_k}\hat{P}^i\frac{\partial Q_i}{\partial x_k}\hat{P}^j \tag{17}$$

すなわち、直交座標での量子化を標準とする。この標準は、極座標表示で中心力を扱う場合と一致しているので、自然界がこの標準を選択していると言ってよいであろう[*3]。

4．一般的なハミルトニアンの量子化

前章ではユークリッド空間の計量で定義されたラグランジアンの場合の量子化を考察した。ここでは、より一般の場合を考察する。

$$L = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) - U \tag{18}$$

$\{X\}$ を次のように $\boldsymbol{A}$ を対角化する座標系とする。

$$\boldsymbol{A} \quad = \sum_i \frac{\partial}{\partial X_i} \otimes \frac{\partial}{\partial X_i} \tag{19}$$

この時、X に共役な運動量を P_X とすれば、ハミルトニアンは

$$H = \sum_i \left(P_X{}^i\right)^2 + U(X) \tag{20}$$

したがって、代数の順序に悩まされることなく、次のように量子化できる。

$$\hat{H_X} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i \left(\hat{P}_X{}^i\right)^2 + U(\hat{X}) \tag{21}$$

この定義は $\boldsymbol{A}$ を対角化する座標系に依存しない。このことは第 3 章と同じ手続きで証明できる。任意の座標系に対する量子化は第 2 章と同じである。

この量子化は与えられたラグランジアンにより、一意的に定義されるものであり、座標系に依存しない。また、第 2 章で議論したことと全く同じ理由で曲がった空間にも拡張できる。

5．まとめ

本稿では量子化の処方箋の一般化を試みた。すなわち、　正準座標の量子化は、直交座標とそれに共役な運動量とのポアッソン括弧積を交換関係に置き換えることによって行うこと、　ハミルトニアン演算子の順序は、式（21）のように運動量で対角化されたもので定義すること、を与えた。

今回取り扱ったハミルトニアンはニュートン力学的なものをほんの少し一般化したもので、一般的なものではない。相対論的な力学系に拡張できれば、興味深いものになるかもしれない。

参考文献

(1) P.A.M.Dirac, Lectures on Quantum Mechanics, Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, (New York, 1964)

(2) L.D.Faddeev, Teoret.i Mat.Fiz.1(1969)3

(3) T.Masukawa and H.Nakajima, Prog. Theor. Phys. 56(1976)1295

(4) Y.Saito, Phys.Rev.D .36(1987)3178

付録Ａ．微分可能関数と運動量の括弧積

[*2] $\frac{\partial Q}{\partial x}$ と $\hat{P}$ との順序は、式 (8) を標準とする。

[*3] 原子スペクトルの記述を思い出そう

第２章の括弧積の計算では、微分可能な関数 $f(x)$ に対して、次の関係が成り立つと仮定した。

$$[f(\hat{x}), \hat{p}] = if'(\hat{x}) \tag{22}$$

この関係式は、$\hat{p}_x$ を微分演算子として表現する時は自明である。一般の場合も、以下の理由で成立すると仮定してよいであろう。

もっともらしい理由１.

$f(x)$ が x のべきの場合は式 (22) は成立する。すなわち、次式を帰納法で証明できる。

$$[\hat{x}^n, \hat{p}] = in\hat{x}^{n-1} \tag{23}$$

もっともらしい理由２.

もし、$\hat{x}$ の逆元 $\hat{x}^{-1}$ が存在するなら、逆元に対して式 (22) に相当する関係式が成立する。すなわち、$[\hat{x}\hat{x}^{-1}, \hat{p}] = 0$ を使えば、次式を証明できる。

$$[\hat{x}^{-n}, \hat{p}] \quad = -in\hat{x}^{-(n+1)} \tag{24}$$

もっともらしい理由３.

$f(x)$ がべき展開可能なら、式 (23) 式 (24) を使うことで、式 (22) が成立することが分かる。ただし、無限級数の場合は少々気にかかるが、本稿では無限の扱いは無頓着でいることとする。

もっともらしい理由４.

$f(x)$ がフーリエ分解可能なら、次で示すようにのように式 (22) が成立する。

$f(x)$ のフーリエ分解を

$$f(x) = \int g(k)e^{-ikx}dk, \tag{25}$$

とする。このとき、$f(\hat{x})$ を

$$f(\hat{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \int g(k)e^{-ik\hat{x}}dk \tag{26}$$

と定義すると、もっともらしい理由３から、

$$\begin{aligned}[f(\hat{x}), \hat{p}] \quad &= \left[\int g(k)e^{-ik\hat{x}}dk, \hat{p}\right] \\ &= \int [g(k)e^{-ik\hat{x}}, \hat{p}]dk \\ &= \int kg(k)e^{-ik\hat{x}}dk \\ &= if'(\hat{x})\end{aligned} \tag{27}$$

ここで、括弧積と積分演算との可換性は気になるところであるが、無頓着に認めることとする。もっともらしい理由１～４で仮定１を認めることとする。この仮定は 第３章で座標変換に対して使うのであるが、座標変換は局所的なものなので、ほとんど一般に成り立つものとしてよいであろう。

付録Ｂ．直交座標間の座標変換

ユークリッド空間の２つの直交座標系 $\{x\}, \{y\}$ をとすると、$\frac{\partial x_i}{\partial y_j}$ は定数場であり $O(3)$ の成分となることを証明する。

仮定から、ユークリッド空間の計量は次のようになる。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{g} &= \sum_i \quad dx_i \otimes dx_i \\ &= \sum_i \quad dy_i \otimes dy_i\end{aligned} \tag{28}$$

この関係から

$$\delta_{jk} = \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial y_j}\frac{\partial x_i}{\partial y_k} = \sum_i \frac{\partial y_i}{\partial x_j}\frac{\partial y_i}{\partial x_k} \tag{29}$$

を得る。２つの直交座標系 $\{x\}, \{y\}$ の原点を平行移動により一致させ、直交回転させることで原点で座標軸の向きが一致するようにする。この操作は $\frac{\partial x_i}{\partial y_j}$ に効かないので、証明の一般性を失う心配は不要である。座標変換を次のように微小変換

$$y_i = x_i + \epsilon_i(x_1, x_2, \cdots) \tag{30}$$

とすると、式 (29) から

$$\frac{\partial \epsilon_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \epsilon_j}{\partial x_i} = 0 \tag{31}$$

各 i に対して

$$\frac{\partial \epsilon_i}{\partial x_i} = 0 \tag{32}$$

となるので、ϵ_i は x_i に依存しない。したがって、式 (31) より、ϵ_1 は x_2, x_3 に関して線型となる。すなわち、

$$\epsilon_1 = a_1 x_2 x_3 \tag{33}$$

同様に

$$\epsilon_2 = a_2 x_3 x_1 \tag{34}$$

$$\epsilon_3 = a_3 x_1 x_2 \tag{35}$$

式 (31) より、各 i に対して $a_i = 0$ となるので、$\epsilon_i = 0$ を得る。Q.E.D.