

=====

運動量演算子について (その2)

2003.12.13 by KENZOU

=====

前稿の「動径運動量演算子について」で球面座標表示での運動量演算子の表記を考えたが、ここではもう少し一般的な観点から運動量演算子の表記を調べていくことにする。ということで、前稿には一度目を通しておいていただきたい。

< 一般運動量の表記 >

一般座標を $q_j(j=1, 2, \dots, f)$ とする系で、状態関数 (状態ベクトル) \mathbf{y} , \mathbf{f} の内積が

$$\langle \mathbf{y} | \mathbf{f} \rangle = \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} dx = \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} J(q) dq \quad (1)$$

(ただし、 $dx = dx_1 dx_2 \dots dx_f$, $dq = dq_1 dq_2 \dots dq_f$, $dx = J(q) dq$)

与えられるとき、一般運動量 p_j に対する演算子は次ぎの形となる。

$$p_j = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial q_j} + f_j(q) \right) \quad (2)$$

【証明】

p_j がエルミット演算子であるためには、任意の状態ベクトル \mathbf{y} , \mathbf{f} について次式が成り立たねばならない。

$$\langle \mathbf{y} | p_j | \mathbf{f} \rangle = \langle p_j^\dagger \mathbf{y} | \mathbf{f} \rangle \quad (3)$$

(3) の左辺を計算すると

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{y} | p_j | \mathbf{f} \rangle &= -i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger (p_j \mathbf{f}) J(q) dq = -i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial q_j} + f_j(q) \right) \mathbf{f} \right\} J(q) dq \\ &= -i\hbar \left[\mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} J(q) \right]_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger f_j(q) \mathbf{f} J(q) dq \\ &= i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger f_j(q) \mathbf{f} J(q) dq \end{aligned} \quad (4)$$

ここで右辺第1項は2乗可積分の条件よりゼロとなることを使った。

次ぎに(3)の右辺を計算すると

$$\begin{aligned} \langle p_j^\dagger \mathbf{y} | \mathbf{f} \rangle &= i\hbar \int \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial q_j} + f_j(q) \right)^\dagger \mathbf{y}^\dagger \right\} \mathbf{f} J(q) dq \\ &= i\hbar \left[\mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} J(q) \right]_{-\infty}^{+\infty} - i\hbar \int \left\{ \mathbf{y}^\dagger \frac{\partial}{\partial q_j} (\mathbf{f} J(q)) - f_j^\dagger(q) \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} J(q) \right\} dq \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -i\hbar \int \left\{ \mathbf{y}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial q_j} (\mathbf{f}) J(q) + \mathbf{f} \frac{\partial}{\partial q_j} J(q) \right) - f_j^\dagger(q) \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} J(q) \right\} dq \\
&= -i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial q_j} - f_j^\dagger(q) \right) \mathbf{f} \right\} J(q) dq + i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} \frac{\partial}{\partial q_j} J(q) dq \\
&= -i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger f_j^\dagger(q) \mathbf{f} J(q) dq + i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} \frac{\partial}{\partial q_j} J(q) dq \tag{5}
\end{aligned}$$

(3)(4)(5)より

$$i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger f_j(q) \mathbf{f} J(q) dq = -i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger f_j^\dagger(q) \mathbf{f} J(q) dq + i\hbar \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} \frac{\partial}{\partial q_j} J(q) dq \tag{6}$$

これを整理して

$$\int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} \{f_j(q) + f_j^\dagger(q)\} J(q) dq = \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} \frac{\partial}{\partial q_j} J(q) dq \tag{7}$$

一般運動量 p_j がエルミット演算子となるための $f_j(q)$ の条件は式(8)を満たすことである。

$$\{f_j(q) + f_j^\dagger(q)\} J(q) = \frac{\partial}{\partial q_j} J(q) \tag{8}$$

一般運動量 p_j は正準交換関係 $[p_j, p_k] = 0$ を満たさなければならないので

$$\left[\frac{\partial}{\partial q_j} + f_j(q), \frac{\partial}{\partial q_k} + f_k(q) \right] = \frac{\partial f_k(q)}{\partial q_j} - \frac{\partial f_j(q)}{\partial q_k} = 0 \tag{9}$$

となるように $f_j(q)$ をとればよいことになる。いま、 $f_j(q)$ を実数とすれば、(8)より

$$f_j(q) = \frac{1}{2J(q)} \frac{\partial}{\partial q_j} J(q) \tag{10}$$

となる。これは(9)を満たす。そこで $f_j(q)$ として(10)を採用することにすれば、一般運動量 p_j は

$$\begin{aligned}
p_j &= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial q_j} + f_j(q) \right) = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial q_j} + \frac{1}{2J} \frac{\partial}{\partial q_j} J \right) \\
&= -i\hbar \frac{1}{\sqrt{J}} \frac{\partial}{\partial q_j} \sqrt{J} \tag{11}
\end{aligned}$$

ここで $\frac{\partial}{\partial q_j}$ は \sqrt{J} より右にくるものにまで及ぶことに注意。

(証明終わり)

《例》球(極)座標を使うと内積は

$$\langle \mathbf{y} | \mathbf{F} \rangle = \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{F} d\mathbf{x} = \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{f} J(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \int \mathbf{y}^\dagger \mathbf{F} r^2 \sin \mathbf{q} dr d\mathbf{q} d\mathbf{f}$$

$$J = r^2 \sin \mathbf{q} ,$$

$$f_j(\mathbf{q}) = \frac{1}{2J(\mathbf{q})} \frac{\partial}{\partial q_j} J(\mathbf{q})$$

$$f_r = \frac{1}{r} , f_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \cot \mathbf{q} , f_{\mathbf{f}} = 0$$

従って一般運動量は(ここで微分の及ぶ範囲の注意を思い出すこと)

$$p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$$

$$p_{\mathbf{q}} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} + \frac{1}{2} \cot \mathbf{q} \right) = -i\hbar \frac{1}{\sqrt{\sin \mathbf{q}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \sqrt{\sin \mathbf{q}}$$

$$p_{\mathbf{f}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{f}}$$

これを古典力学のハミルトニアンに代入すると量子力学の正しいハミルトニアンが得られることを確かめられたい。

< 古典力学 >

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_{\mathbf{q}}^2}{r^2} + \frac{p_{\mathbf{f}}^2}{r^2 \sin^2 \mathbf{q}} \right) + V(r)$$

< 量子力学 >

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \mathbf{q}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\sin \mathbf{q} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \mathbf{q}} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{f}^2} \right\} + V(r)$$

エピローグ

教えてGooでgrodenickさんが正準交換関係とユニタリー変換の関係の $|Q\rangle$ をだされたとき、Hamiltonianの極座標表示で運動量の表記が??となることの議論をした。もっともこの $|Q\rangle$ は中身が相当深遠な内容を含み、課題を残したまま締め切りとなったが、それは兎も角、運動量の表記がそれ以来頭の隅っこに残り、その後いろいろ調べてみた。その結果をレポート1, 2にまとめたのだが、まあ、量子力学はそ知らぬ顔をして通りすぎれば通りすぎられぬこともないが、何か引っかかりを気にしだすと、自分は量子力学についてほとんどよく知らないのだなア~とという気持ちになる。しかし今更分厚い教科書を読む気にもならず、ツンドクツンドクの齧り読みしかできぬが、まあ、ボチボチと知識の深耕化をやっていきますか。

----- おつかれさま ~ Coffee Break $\nabla f \mathbf{x} y d z c r$