令 和 4 年 度 後 期 履 修 科 目

連 成 振 動

大阪大学　理学部・物理学科

◇ M39 (424ー1)

(計　算　用　紙)

〔１〕このような系のポテンシャル $U(x_1,\cdots,x_N)$ は，アインシュタインの縮約規則を用いると次のように書ける．

$$U(x_1,\cdots,x_N)=\frac{1}{2}x_\mu^\dagger K_{\mu\nu}x_\nu$$

ここで，弾性テンソル $K_{\mu\nu}$ は 2 次テンソルとして，次のように定まる:

$$K_{\mu\nu}:=2k\delta_{\mu\nu}-k\delta_{\mu\nu-1}-k\delta_{\mu\nu+1} \tag{1}$$

これは，2 次テンソルなので，次のように行列の形式として書くこともできる．例えば，$N=3$ の場合は:

$$K_{\mu\nu}^{N=3}=\begin{bmatrix}2k & -k & 0\\ -k & 2k & -k\\ 0 & -k & 2k\end{bmatrix}$$

これは，今まで習ってきた $N=3$ の時の連成振動の結果と一致する．より，テンソル (1) を N 個の粒子系が及ぼす振動に対しての系の弾性テンソル $K_{\mu\nu}$ は一般的に式 (1) のように与えられることを分かる．

標準座標の設定

以上により，この系において次のような標準座標系 $\hat{x}_n$ およびそのエルミート共役 $\hat{x}_n^\dagger$ を与えることにより，ポテンシャル $U(x_1,\cdots,x_N)$ が対角化できるか確かめてみよう．

$$\hat{x}_n=U_{n\mu}x_\mu\ ,\qquad \hat{x}_n^\dagger=x_\mu^\dagger U_{\mu n}^\dagger \qquad \cdots(*)$$

ここで，ユニタリー変換 $U_{n\mu}$ は次のように定まる．

$$U_{n\mu}:=\frac{e^{i2\pi\frac{\mu n}{N}}}{\sqrt{N}}\qquad (\mu,n=1,\cdots,N)$$

このように変換 $U_{n\mu}$ を定まると，これはユニタリー行列になり，次の正規直交性を持つことが簡単に分かる．

$$U_{l\mu}U_{\mu m}^\dagger=U_{l\mu}U_{m\mu}^*=\sum_{\mu=1}^{N}\frac{e^{i2\pi\frac{l-m}{N}\mu}}{N}$$

ここで，上式は次のように計算されることが分かる:

$$\sum_{\mu=1}^{N} \frac{e^{i2\pi\frac{l-m}{N}\mu}}{N} = \begin{cases} \displaystyle\sum_{\mu=1}^{N} \frac{1}{N} = 1 & (l=m) \\ \displaystyle\frac{e^{i2\pi\frac{l-m}{N}}}{N} \frac{1-e^{i2\pi(l-m)}}{1-e^{i2\pi\frac{l-m}{N}}} = 0 & (l \neq m) \end{cases}$$

より，変換 $U_{n\mu}$ がユニタリー変換で,

$$U_{l\mu} U^{\dagger}_{\mu m} = \delta_{lm} \tag{2}$$

が成り立つことを分かる．このような正規直行性 (2) を用いると，標準座標 $\hat{x}_n, \hat{x}^{\dagger}_n$ の次のような逆変換を取ることもできる:

$$U^{\dagger}_{\mu' n} \hat{x}_n = U^{\dagger}_{\mu' n} U_{n\mu} x_\mu = \delta_{\mu'\mu} x_\mu = x_{\mu'} \tag{3}$$

同様に,

$$\hat{x}^{\dagger}_n U_{n\mu'} = U^{\dagger}_{\mu n} U_{n\mu'} x^{\dagger}_\mu = \delta_{\mu'\mu} x_\mu = x^{\dagger}_{\mu'} \tag{4}$$

が成り立つことも分かる．

ポテンシャルの対角化

以上の結果により，$x_\nu = U^{\dagger}_{\nu l} \hat{x}_l$ および $x^{\dagger}_\mu = \hat{x}^{\dagger}_m U_{m\mu}$ を元のポテンシャル $U(x_1, \cdots, x_N)$ に代入して $U(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_N)$ を考えることにより, [*1]

$$\begin{aligned} U(x_1, \cdots, x_N) &= \frac{1}{2} x^{\dagger}_\mu K_{\mu\nu} x_\nu = \frac{1}{2} K_{\mu\nu} U_{m\mu} U^{\dagger}_{\nu l} \hat{x}^{\dagger}_m \hat{x}_l \\ &= \frac{1}{2} (2k\delta_{\mu\nu} - k\delta_{\mu\nu-1} - k\delta_{\mu\nu+1}) U_{m\mu} U^{\dagger}_{\nu l} \hat{x}^{\dagger}_m \hat{x}_l \\ &= \frac{1}{2} \left(2k U_{m\mu} U^{\dagger}_{\mu l} - k U_{m\mu} U^{\dagger}_{\mu+1 l} - k U_{m\mu} U^{\dagger}_{\mu-1 l} \right) \hat{x}^{\dagger}_m \hat{x}_l \end{aligned}$$

のようにポテンシャルの対角化可能を論議することができる．

[*1] ここで，次式とおいても良いのではないかと思う学生があるかも知れないが，シグマ記号を復活させば:

$$U(x_1, \cdots, x_N) = \sum_{\mu=1}^{N} \sum_{\nu=1}^{N} \frac{1}{2} x^{\dagger}_\mu K_{\mu\nu} x_\nu \neq \sum_{\mu=1}^{N} \sum_{\nu=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \frac{1}{2} K_{\mu\nu} U_{m\mu} U^{\dagger}_{\nu m} \hat{x}^{\dagger}_m \hat{x}_m$$

は一般的に明らかに成り立たないことを分かる．

また，次のような関係式が成り立つこと用いたら，上式をもっと簡単にまとめることができる:

$$U^\dagger_{\mu\pm1l} = \frac{e^{-i2\pi l\frac{\mu\pm1}{N}}}{\sqrt{N}} = e^{\mp i2\pi\frac{l}{N}}U^\dagger_{\mu l}$$

より，以下の式が成り立つことが分かる．

$$\begin{aligned}
U(x_1,\cdots,x_N) &= \sum_{\mu,m,l}\frac{1}{2}(2k - ke^{-i2\pi\frac{l}{N}} - ke^{i2\pi\frac{l}{N}})U_{m\mu}U^\dagger_{\mu l}\hat{x}^\dagger_m\hat{x}_l \\
&= \sum_{\mu,m,l}\frac{1}{2}\left[2k - 2k\cos\left(\frac{2\pi l}{N}\right)\right]\underbrace{U_{m\mu}U^\dagger_{\mu l}}_{\delta_{ml}}\hat{x}^\dagger_m\hat{x}_l \\
&= \sum_{m,l}\frac{1}{2}\left[2k - 2k\cos\left(\frac{2\pi l}{N}\right)\right]\delta_{ml}\hat{x}^\dagger_m\hat{x}_l \\
&= \sum_{m=1}^{N}\frac{1}{2}\left[2k - 2k\cos\left(\frac{2\pi m}{N}\right)\right]|\hat{x}_m|^2
\end{aligned}$$

より，このことから，標準座標 $\hat{x}_m$ により，ポテンシャル $U(x_1,\cdots,x_N)$ は対角化できることが分かる．ただし，ここでの記号 $|\hat{x}_m|^2$ は複素空間のノルム (norm) として，$|\hat{x}_m|^2 = \hat{x}^\dagger_m\hat{x}_m$ とする．つまり，標準座標 $\hat{x}_m$ により:

$$\boxed{U(\hat{x}_1,\cdots,\hat{x}_N) = \sum_{m=1}^{N}\frac{1}{2}\left[2k - 2k\cos\left(\frac{2\pi m}{N}\right)\right]|\hat{x}_m|^2.}$$

のように書ける．