

# 場の量子論

平成25年7月18日

# 目次

<b>第1章 場の量子論とは</b>	<b>1</b>
1.1 場の量子論 v.s. 量子力学	1
1.1.1 粒子数	1
1.1.2 同種粒子	1
1.1.3 まとめ	3
1.2 粒子数の生成・消滅をどのように表すか	3
1.3 統計性はどのように表されるか	4
1.4 場の演算子と第二量子化	5
<b>第2章 正準量子化</b>	<b>7</b>
2.1 解析力学復習	7
2.1.1 ラグランジュ形式	7
2.1.2 正準運動量とハミルトニアン	7
2.1.3 ポアソン括弧	8
2.1.4 簡単な系での例	13
2.2 量子化	15
2.2.1 交換子積とその性質	15
2.2.2 正準量子化	16
2.3 シュレーディンガー描像とハイゼンベルク描像	21
2.3.1 シュレーディンガー描像	21
2.3.2 ハイゼンベルク描像	22
2.3.3 二つの描像間の関係	22
<b>第3章 調和振動子の正準量子化</b>	<b>25</b>
3.1 古典論	25
3.2 量子化	26
3.3 エネルギー固有値, エネルギー固有状態	27
3.4 物理量の期待値	33
3.4.1 <参考> $x$ 表示の波動関数	34
<b>第4章 弦の正準量子化</b>	<b>38</b>
4.1 古典論: 弦の解析力学	38

4.1.1	ラグランジアン, ラグランジアン密度	39
4.1.2	最小作用の原理と運動方程式	41
4.1.3	共役運動量とハミルトニアン・ハミルトニアン密度	42
4.1.4	Poisson 括弧	44
4.1.5	空間座標=自由度のラベル	45
4.2	弦の量子化	46
4.2.1	正準交換関係	46
4.2.2	Heisenberg 方程式	46
4.3	正準量子化のまとめ	48
<b>第 5 章</b>	<b>シュレーディンガー場の量子論</b>	<b>50</b>
5.1	シュレーディンガー場	50
5.2	解析力学	51
5.2.1	ラグランジアン密度	51
5.2.2	共役運動量	53
5.2.3	ハミルトニアン	54
5.2.4	ポアソン括弧	54
5.3	量子論	54
5.3.1	正準量子化	54
5.4	1次元自由粒子	58
5.4.1	平面波解	59
5.4.2	平面波解による展開 1 : 古典場	60
5.4.3	平面波解による展開 2 : 量子場	61
5.4.4	ハミルトニアン演算子, 運動量演算子, 個数演算子	63
5.4.5	粒子描像: 真空, 1 粒子状態, 多粒子状態	64
5.4.6	統計性	67
5.5	$L \rightarrow \infty$ の極限	67
5.6	量子力学との対応関係	70
5.6.1	1 粒子の量子力学	71
5.6.2	場の量子論における 1 粒子状態	71
5.6.3	場の演算子の意味	75
<b>第 6 章</b>	<b>シュレーディンガー場の量子論その 2 : フェルミ粒子</b>	<b>77</b>
6.1	交換関係とボーズ統計性	77
6.2	フェルミ統計性	77
6.3	反交換子積の性質	79
6.4	反交換関係によるシュレーディンガー場の量子化	81
6.4.1	量子化	81
6.4.2	ハイゼンベルク方程式	82

6.4.3	運動量表示	84
6.5	粒子描像	85
6.6	量子力学との関係	87
6.7	補足：統計性と波動方程式	88
<b>第7章</b>	<b>相対論的波動方程式</b>	<b>89</b>
7.1	非相対論的量子力学の復習	89
7.1.1	波動方程式	89
7.1.2	確率解釈, 確率の保存	89
7.1.3	スピン自由度	91
7.2	Klein-Gordon 方程式	94
7.2.1	試み1	94
7.2.2	試み2：クライン-ゴールドン	95
7.3	Dirac 方程式	97
7.3.1	試み3：ディラック	97
7.3.2	Dirac 方程式における保存量	102
7.3.3	Dirac 方程式の平面波解	104
7.3.4	ディラックの海と陽電子	106
7.3.5	まとめ	107
<b>第8章</b>	<b>相対論的場の量子論1：スカラー場</b>	<b>110</b>
8.1	解析力学	110
8.1.1	ラグランジアン	110
8.1.2	共役運動量, ハミルトニアン	112
8.1.3	Poisson 括弧	112
8.2	正準量子化	113
8.2.1	正準交換関係	113
8.2.2	ハミルトニアン演算子	114
8.2.3	ハイゼンベルク方程式	114
8.2.4	平面波解	115
8.2.5	平面波展開と生成消滅演算子	117
8.2.6	ハミルトニアンの生成消滅演算子による表示	120
8.2.7	運動量演算子	121
8.2.8	粒子描像：真空, 1粒子状態, 多粒子状態	121
8.2.9	「電荷」	123
8.3	まとめ	124

# 第1章 場の量子論とは

## 1.1 場の量子論 v.s. 量子力学

場の量子論とはどんなものかを見るため、とりあえず、学部時代に習った量子力学と比較してみよう。

### 1.1.1 粒子数

**場の量子論** 場の量子論では、粒子数は変化してもよい。粒子の生成・消滅を扱える。したがって、粒子数の変化する現象に対しては、場の量子論を必要とする。

光子は、原子などから放出・吸収されるので、光子数は容易に変化する。また、高エネルギーの現象では、電子なども反粒子と対で、対生成・対消滅が起き得るので、やはり粒子数は変化する。

**量子力学** 量子力学では、粒子数は固定されている。

- 1 粒子の波動関数： $\psi(\mathbf{r})$
- 2 粒子の波動関数： $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$
- 3 粒子の波動関数： $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$
- .....
- $n$  粒子の波動関数： $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$

例えば2粒子の問題を扱う場合は、最初から最後まで、2粒子の波動関数を扱う。したがって、粒子数の変化する現象に対しては、量子力学は使えない。

### 1.1.2 同種粒子

**場の量子論** 場の量子論では、同種粒子の統計性は最初から理論に組み込まれている。

**量子力学** 量子力学では同種粒子の統計性は、手で要求しなければならない。

例えば、同種2粒子の系を考えてみよう。

$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  で与えられる状態を考える。同種粒子であれば、粒子1と粒子2を入れ替えても状態は変わらないから、その状態は、定数倍の不定性を除いて、同じ波動関数で表されるはずである：

$$\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = C\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

この式において、変数  $\mathbf{r}_1$  と  $\mathbf{r}_2$  を入れ替えれば、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1).$$

この右辺に第一式を代入することで、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C^2\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

が成り立ち、結局、

$$C^2 = 1, \quad \text{or} \quad C = \pm 1$$

が成り立つ。すなわち、同種2粒子の波動関数は、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \pm\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

を満たさなければならない<sup>1</sup>。

このように、同種粒子の系の状態を表す波動関数には、座標の入れ替えに関する対称性が成り立たなければならない。しかし、シュレーディンガー方程式の解というだけでは、この性質は出てこないの、この対称性は手で要求することになる。

例として、お互いの相互作用が無視できる2個の電子からなる系を考えてみよう。粒子間の相互作用が無視できるので、それぞれの電子の状態は、1粒子の波動関数で記述できる。1番目の粒子の状態を1粒子の波動関数  $\psi_1(\mathbf{r}_1)$  で、2番目の粒子の状態を1粒子の波動関数  $\psi_2(\mathbf{r}_2)$  で表したとしよう。もし、同種粒子でなければ、全体の2粒子系としての状態は、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$$

で表されるのであるが、今の場合同種粒子であるので、統計性に対応する対称性をみたさないこの波動関数は採用することができない。統計性（今の場合、電子なのでフェルミ統計）を満たすためには、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)]$$

<sup>1</sup> この粒子を入れ替えたときに  $\pm 1$  が出るのが統計性に対応している。+1 に対してはボーズ統計（またはボーズ・アインシュタイン統計）が対応し、-1 に対してはフェルミ統計（またはフェルミ・ディラック統計）が対応する。ボーズ統計にしたがう粒子をボーズ粒子（またはボソン, boson）、フェルミ統計にしたがう粒子をフェルミ粒子（またはフェルミオン, fermion）と呼ぶ。

フェルミ粒子にはパウリの排他原理が成り立つ。例えば、2粒子が同じ位置  $\mathbf{r}$  にくる確率振幅は、 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$  を波動関数に代入すればよく、 $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  で与えられる。ところが、フェルミ統計にしたがうので、二つの  $\mathbf{r}$  を入れ替えればマイナスがでるので、

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = 0$$

となって、このような確率振幅はゼロとなる。すなわち、フェルミ粒子は同じ場所に二個は存在できない。

としなければならない。同種粒子の個数をもっと多い場合も同様である<sup>2</sup>。

### 1.1.3 まとめ

	量子力学	場の量子論
粒子数	固定されている	変化できる
同種粒子の統計性	手で要求する	自動組み込み

## 1.2 粒子数の生成・消滅をどのように表すか

場の量子論では粒子数の変化を許すため、いろいろな粒子数の状態、

$$\{ 0 \text{ 粒子状態 (真空)}, 1 \text{ 粒子状態}, 2 \text{ 粒子状態}, 3 \text{ 粒子状態}, \dots \}$$

をまとめて扱うことになる。そのためには、粒子数の異なる状態を結びつける演算子が必要となる。

真空状態を  $|0\rangle$ 、運動量  $\mathbf{p}$  の粒子が 1 個ある様態を  $|\mathbf{p}\rangle$ 、運動量  $\mathbf{p}, \mathbf{p}'$  の 2 粒子状態を  $|\mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle$  で表そう。これらの間を結ぶ演算子が必要となる：

$$|0\rangle \leftrightarrow |\mathbf{p}\rangle \leftrightarrow |\mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle \leftrightarrow \dots$$

このような演算子として、

$\hat{a}(\mathbf{p})$ : 運動量  $\mathbf{p}$  の粒子を一個消す演算子 (消滅演算子)

$\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})$ : 運動量  $\mathbf{p}$  の粒子を一個生成する演算子 (生成演算子)

を考えよう。つまり、これらは、

$$\begin{aligned} \hat{a}(\mathbf{p}')|\mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle &= |\mathbf{p}\rangle, & \hat{a}(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle &= |0\rangle, & \hat{a}(\mathbf{p})|0\rangle &= 0, \\ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})|0\rangle &= |\mathbf{p}\rangle, & \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')|\mathbf{p}\rangle &= |\mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle, & \dots & \end{aligned}$$

を満たすものとする<sup>3</sup>。

<sup>2</sup> 例えば、互いの相互作用を無視できる  $n$  個の電子があり、 $i$  番目の電子の状態が  $\psi_i(\mathbf{r}_i)$  で与えられるとき、全体としての波動関数は、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det[\psi_i(\mathbf{r}_j)]$$

とすればよい。右辺の行列式は、 $i, j$  を行列の添え字としてとったもので、スレーター行列式と呼ばれる。

<sup>3</sup> 消滅演算子が真空に作用したら、真空にはこれ以上消す粒子がないのでゼロベクトルになっている ( $\hat{a}|0\rangle = 0$ ) ことに注意しよう。同様に、 $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$  であれば、

$$\hat{a}(\mathbf{p})|\mathbf{p}'\rangle = 0 \quad (\mathbf{p} \neq \mathbf{p}')$$

も成り立つ。

上の性質から、真空  $|0\rangle$  に、 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})$  を作用して粒子を一個作り、さらに  $\hat{a}(\mathbf{p})$  を作用してその粒子を消せば、もとの真空に戻るはずである：

$$\hat{a}(\mathbf{p})\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})|0\rangle = |0\rangle. \quad (1.2.1)$$

一方、真空に作用する演算子の順番を替えれば、当然ゼロになる：

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\hat{a}(\mathbf{p})|0\rangle = 0. \quad (1.2.2)$$

辺々の差をとれば、

$$(\hat{a}(\mathbf{p})\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) - \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\hat{a}(\mathbf{p}))|0\rangle = |0\rangle \quad (1.2.3)$$

が成り立つ。これは、 $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  が交換関係

$$[\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})] = 1 \quad (1.2.4)$$

をみたせば成り立つ<sup>4</sup>。ここで、 $[ , ]$  は交換子 ( $[A, B] = AB - BA$ ) である。

場の量子論では、このような交換関係をみたすものとして、生成消滅演算子が現れる。生成消滅演算子に対する上の交換関係は、ちょうど調和振動子の生成消滅に対する交換関係と同じであることに注意しよう。実際、場の量子論では無限個の調和振動子の系として、理論が組み立てられるのである。

### 1.3 統計性はどのように表されるか

前節で考えた二粒子状態  $|\mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle$  は、真空に生成演算子を二回作用することにより、

$$|\mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')|0\rangle$$

と表される。一方、同種粒子の統計性を考えれば、この二粒子状態は、

$$|\mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle = \pm |\mathbf{p}', \mathbf{p}\rangle \quad (+ : \text{ボーズ統計}, - : \text{フェルミ統計})$$

を満たさなければならない。したがって、生成演算子の積の性質として、

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}') = \pm \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \quad (+ : \text{ボーズ統計}, - : \text{フェルミ統計})$$

が得られる。あるいは、これを書き直すと、

$$[\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')] = 0 \quad (\text{ボーズ統計}) \quad (1.3.1)$$

$$\{\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')\} = 0 \quad (\text{フェルミ統計}) \quad (1.3.2)$$

とできる。ここで、 $\{ , \}$  は反交換子 ( $\{A, B\} = AB + BA$ ) である。

<sup>4</sup> もちろんこれは十分条件であり、必要十分条件として導出したわけではない。



さて、前節では、生成演算子と消滅演算子の間に、交換関係 (1.2.4) が成り立てばいいことを見てきた。このときには、(1.2.1) 式から (1.2.2) 式を引いて (1.2.3) を出した。しかし、(1.2.1) 式に (1.2.2) 式を足しても同様な式、

$$(\hat{a}(\mathbf{p})\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) + \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\hat{a}(\mathbf{p}))|0\rangle = |0\rangle \quad (1.3.3)$$

を導くことができる。したがって、これからは、 $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  が反交換関係

$$\{\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\} = 1 \quad (1.3.4)$$

を満たすとしてもよかったのである。

場の量子論では、ボーズ粒子に対するは生成消滅演算子に対しては、交換関係を用い、フェルミ粒子に対しては反交換関係を用いる。すなわち、一般に、ボーズ粒子に対しては、

$$[\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')] = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \quad (1.3.5)$$

$$[\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')] = 0 \quad (1.3.6)$$

$$[\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}(\mathbf{p}')] = 0 \quad (1.3.7)$$

なる交換関係を用い、フェルミ粒子に対しては、

$$\{\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')\} = \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \quad (1.3.8)$$

$$\{\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')\} = 0 \quad (1.3.9)$$

$$\{\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}(\mathbf{p}')\} = 0 \quad (1.3.10)$$

なる反交換関係を用いることで、それぞれの統計性を表している。このように交換関係または反交換関係が設定されていれば、あとは、真空中に生成演算子を何回か作用することによって作られる任意の状態には、統計性が自動的に組み込まれているのである。

## 1.4 場の演算子と第二量子化

これまでは、粒子数が変化する状況として、1粒子状態、2粒子状態の例を考える際、状態のラベルとして運動量を用いた。例えば、1粒子状態としては  $|\mathbf{p}\rangle$  を考えた。これは、1粒子の量子力学でいえば、運動量表示で考えていることに相当する。座標表示の量子力学で無理矢理、粒子数が変化できるような状況を考えようとしたらどうなるだろうか。

1粒子の状態は波動関数

$$\psi(\mathbf{r})$$

で表される。2粒子の状態は、互いに相互作用しなければ、1粒子波動関数の積

$$\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$$

で表される（実際はこれに，統計性に対応する対称化をする）．3粒子状態であれば，

$$\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)\psi_3(\mathbf{r}_3)$$

これらの状態の間を取り持つ，粒子数を変える演算子を考えなければならない．そのためには，1粒子の波動関数の個数を増やしたり減らしたりしなければならない．とすれば，波動関数自身が演算子のようなものであればいいだろう…．

これはあくまでも，非常にいい加減な推測であるが，場の量子論では，実際に，この推測が実現されているのである．すなわち，場の量子論では，波動関数が演算子に昇格されているのである（この演算子を「場の演算子」という）．

では，波動関数を演算子にするとはどういうことだろうか．そもそも波動関数は，古典的な物理量  $\mathbf{r}$  や  $\mathbf{p}$  を演算子に昇格させ，その演算子が作用する対象として導入されたものである．つまり，古典的な粒子を量子化することで波動関数が現れ，この波動関数を，一端，古典的な波動の場だと思い直すことにより，その量子化を考えるのである．こうして，粒子を量子化することで出てきた波動場を，再度量子化しようするので，場の量子化のことを第二量子化と呼ぶことがある．

電磁場は，古典的には波動と考えられていた．この波動場を量子化（一回目の量子化だけれど第二量子化）すると生成消滅演算子が現れ，粒子性が取り組める．こうして出てくる粒子が光子である．

一方，電子などは古典的には粒子として考えられていた．これを量子化（第一量子化）することで波動関数が現れ，波動性をとりいれることが出来た．さらにこの波動関数を量子化（第二量子化）することで再び粒子性が現れるのである．

このように，一般に，古典的粒子を量子化すると波動性が現れ，古典的波動を量子化すると粒子性が現れる．こうして，量子論における粒子性と波動性は，互いに関連しているのである．

## 第2章 正準量子化

### 2.1 解析力学復習

#### 2.1.1 ラグランジュ形式

(一般化)座標変数を  $q_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) とする系のラグランジアン  $L(q_i, \dot{q}_i)$  は

$$L(q_i, \dot{q}_i) = K(q_i, \dot{q}_i) - V(q_i) \quad (2.1.1)$$

で表される. ここで,  $\dot{q}_i$  は(一般化)速度変数 ( $\dot{q}_i = dq_i/dt$ ) であり,  $K(q_i, \dot{q}_i)$  は運動エネルギー,  $V(q_i)$  ポテンシャルエネルギーである.

ラグランジアンが与えられると, それを用いて運動方程式を次のように表すことができる (Euler-Lagrange 方程式, E-L eq.):

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}. \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.1.2)$$

#### 2.1.2 正準運動量とハミルトニアン

ラグランジアンが与えられると, それから  $q_i$  に共役な正準運動量  $p_i$  を定義することができる.

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \quad (2.1.3)$$

(注意) この  $p_i$  は上の E-L eq. (2.1.2) の左辺に含まれていることに注意しよう. つまり,  $p_i$  を使えば, E-L eq. は

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (2.1.4)$$

と表される.

ハミルトニアン  $H$  を次で定義する,

$$H = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - L. \quad (2.1.5)$$

このとき、 $H$  の微分をとると<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} dH &= \sum_{i=1}^N (dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i) - \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i \right) \\ &= \sum_{i=1}^N dp_i \dot{q}_i - \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i. \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

2番目の等号では、 $p_i$  の定義 (2.1.3) から  $d\dot{q}_i$  の項が相殺されて消えていることに注意しよう。この結果をみると、ハミルトニアン  $H$  は  $q_i$  と  $p_i$  の関数と考えるのが自然であろう。以後、ハミルトニアンと言ったら、この  $q_i$  と  $p_i$  を変数とする関数  $H(q_i, p_i)$  として考える。(ハミルトン関数ともいう)。そうすると、 $H$  の全微分の一般形

$$dH(p_i, q_i) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i \quad (2.1.7)$$

と、上の式 (2.1.6) を比較すれば、

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i}.$$

これに E-L eq. (2.1.4) を合わせて考えれば、ハミルトンの運動方程式が得られる：

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (2.1.8)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (2.1.9)$$

### 2.1.3 ポアッソン括弧

一般の物理量 (力学変数) は、正準変数  $q_i, p_i$  の関数で表される。物理量  $A = A(q_i, p_i)$ ,  $B = B(q_i, p_i)$  があるとき、これらのポアッソンの括弧式 (Poisson bracket; Pb) は、次の式で定義される：

$$\{A, B\}_{\text{Pb}} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right). \quad (2.1.10)$$

---

<sup>1</sup> 全微分の公式の復習：一般に、2変数関数  $f(x, y)$  の全微分は、

$$df(x, y) = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy$$

と表される。変数が3以上の場合も同様。

## ポアッソン括弧と運動方程式

正準変数  $q_i, p_i$  の関数である物理量  $A$  の時間変化は、は、  $q_i, p_i$  を通しての変化であるので、

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \end{aligned}$$

2行目では、ハミルトンの運動方程式 (2.1.8), (2.1.9) を用いた。最右辺の形をみると、これは  $A$  と  $H$  のポアッソン括弧である。したがって、一般に、物理量  $A$  の時間変化は次で表される。

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}_{\text{Pb}}. \quad (2.1.11)$$

特に  $A$  として  $q_i, p_i$  を選べば、ハミルトンの運動方程式 (2.1.8), (2.1.9) も

$$\frac{dq_i}{dt} = \{q_i, H\}_{\text{Pb}} \quad (2.1.12)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = \{p_i, H\}_{\text{Pb}} \quad (2.1.13)$$

と表される。

## ポアッソン括弧の性質

ポアッソン括弧の定義式 (2.1.10) より、次の性質が導かれる：

(i) 反対称性

$$\{A, B\}_{\text{Pb}} = -\{B, A\}_{\text{Pb}}$$

(ii) 線形性 (or 分配法則と定数倍)

$$\{A, cB + c'B'\}_{\text{Pb}} = c\{A, B\}_{\text{Pb}} + c'\{A, B'\}_{\text{Pb}}$$

$$\{cA + c'A', B\}_{\text{Pb}} = c\{A, B\}_{\text{Pb}} + c'\{A', B\}_{\text{Pb}}$$

ただし、 $c, c'$  は定数、

(iii) 積の微分公式 (ライプニッツ則) の類似形

$$\{A, BC\}_{\text{Pb}} = \{A, B\}_{\text{Pb}}C + B\{A, C\}_{\text{Pb}}$$

$$\{AB, C\}_{\text{Pb}} = \{A, C\}_{\text{Pb}}B + A\{B, C\}_{\text{Pb}}$$

(iv) ヤコビの恒等式

$$\{A, \{B, C\}_{\text{Pb}}\}_{\text{Pb}} + \{B, \{C, A\}_{\text{Pb}}\}_{\text{Pb}} + \{C, \{A, B\}_{\text{Pb}}\}_{\text{Pb}} = 0.$$

(v) 正準変数間のポアッソン括弧

$$\begin{aligned} \{q_i, q_j\}_{\text{Pb}} &= \{p_i, p_j\}_{\text{Pb}} = 0, \\ \{q_i, p_j\}_{\text{Pb}} &= -\{p_i, q_j\}_{\text{Pb}} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \end{aligned}$$

これらの性質がポアッソン括弧の定義 (2.1.10) から出てくることを見るのは易しい. 性質 (i) は定義から自明. 性質 (ii) と (iii) は定義に含まれる微分の性質をそのまま引き継いだもの. 性質 (iv) は, 一目ではわからないかもしれないが, 定義に基づいて地道に計算すれば成り立つことがわかる. 性質 (v) も直接の計算で容易に確かめられる.

**問 2.1** ポアッソン括弧の定義 (2.1.10) に基づいて性質 (i)~(iii) を確かめよ.

**問 2.2** 定義 (2.1.10) に基づいて性質 (v) を確かめよ.

**問 2.3** 定義 (2.1.10) に基づいて性質 (iv) を確かめよ.

**問 2.4**  $A$  に対応した「演算子」 $\mathcal{D}_A$  を次で定義する :

$$\mathcal{D}_A X = \{A, X\}_{\text{Pb}}.$$

ポアッソン括弧の性質 (ii) の一番目の式と, 性質 (iii) の一番目の式を  $\mathcal{D}_A$  を用いて表せ.

**問 2.5** 上の問題の  $\mathcal{D}_A$  を使うと, 性質 (iv) (ヤコビの恒等式) は次の式に帰着されることを確認せよ.

$$\mathcal{D}_A \{B, C\}_{\text{Pb}} = \{\mathcal{D}_A B, C\}_{\text{Pb}} + \{B, \mathcal{D}_A C\}_{\text{Pb}}.$$

**問 2.6** 上の問 2.4, 問 2.5 の出題意図 (or 鑑賞ポイント) を推測せよ.

**性質 (i)~(v) がポアッソン括弧を特徴付ける**

上で見たように, ポアッソン括弧の性質 (i)~(v) は, 定義 (2.1.10) から導かれた. この逆も成立することをここで強調しておきたい. すなわち,

性質 (i)~(iii), (v) を満たす括弧式があれば, それは (2.1.10) で定義されるものに他ならない.<sup>2</sup>

このことを, 自由度 1 の場合 ( $N = 1$ ) で, 次の順で見していこう. (ちょっと長くなるので, とりあえず認めてもらえれば, 以下をスキップしても構わない.)

- (1)  $\{A, 1\}_{\text{Pb}} = 0$  が成り立つこと.  
性質 (iii) において,  $C = 1$  とおけば,

$$\{A, B \cdot 1\}_{\text{Pb}} = \{A, B\}_{\text{Pb}} \cdot 1 + B\{A, 1\}_{\text{Pb}}.$$

これが, 任意の  $B$  に対して成り立つためには,

$$\{A, 1\}_{\text{Pb}} = 0$$

が成り立たなければならない.

特に,  $\{q, 1\}_{\text{Pb}} = 0, \{p, 1\}_{\text{Pb}} = 0$ .

- (2)  $\{A, q^n\}_{\text{Pb}} = \{A, q\}_{\text{Pb}} nq^{n-1}, \{A, p^n\}_{\text{Pb}} = \{A, p\}_{\text{Pb}} np^{n-1}$  が成り立つこと.

$n$  に関する帰納法を使って, 前半の式を示そう.

$n = 0$  のときは, 右辺は 0, 左辺も (1) の結果から 0 となって成立.

$n = 1$  のときは, 右辺も左辺も同じ式で, そのまま成り立つ.

$n$  のときまで成り立つと仮定して,  $n + 1$  の場合を考える:

性質 (iii) より,

$$\begin{aligned} \{A, q^{n+1}\}_{\text{Pb}} &= \{A, q q^n\}_{\text{Pb}} \\ &= \{A, q\}_{\text{Pb}} q^n + q \{A, q^n\}_{\text{Pb}} \end{aligned}$$

第 2 項に帰納法の仮定を使えば,

$$\begin{aligned} &= \{A, q\}_{\text{Pb}} q^n + q \{A, q\}_{\text{Pb}} nq^{n-1} \\ &= \{A, q\}_{\text{Pb}} (n+1)q^n \end{aligned}$$

となるので, 確かに  $n+1$  のときにも成り立つ. したがって,  $\{A, q^n\}_{\text{Pb}} = \{A, q\}_{\text{Pb}} nq^{n-1}$  はすべての  $n$  に対して成り立つ.

$\{A, p^n\}_{\text{Pb}} = \{A, p\}_{\text{Pb}} np^{n-1}$  が成り立つことも全く同様に示せる.

---

<sup>2</sup> $Q_i = F_i(q_j, p_j), P_i = G_i(q_j, p_j)$  なる変数  $(Q_i, P_i)$  の組で (v) を満たすものがあれば, Poisson 括弧は,

$$\{A, B\}_{\text{Pb}} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial Q_i} \frac{\partial B}{\partial P_i} - \frac{\partial A}{\partial P_i} \frac{\partial B}{\partial Q_i} \right).$$

とも表されることも, このことから直ちにわかる.

(3)  $\{A, B\}_{\text{Pb}} = \{A, p\}_{\text{Pb}} \partial B / \partial p + \{A, q\}_{\text{Pb}} \partial B / \partial q$  が成り立つこと。

$B = B(p, q)$  をテイラー展開して,  $B = \sum_{n,m} c_{nm} p^n q^m$  と考えれば, 性質 (ii), (iii) より,

$$\begin{aligned} \{A, B\}_{\text{Pb}} &= \sum_{n,m} c_{nm} \{A, p^n q^m\}_{\text{Pb}} \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} (\{A, p^n\}_{\text{Pb}} q^m + p^n \{A, q^m\}_{\text{Pb}}) \end{aligned}$$

ここで, (2) の結果を使うと,

$$\begin{aligned} &= \sum_{n,m} c_{nm} (\{A, p\}_{\text{Pb}} n p^{n-1} q^m + p^n \{A, q\}_{\text{Pb}} m q^{m-1}) \\ &= \sum_{n,m} c_{nm} \left( \{A, p\}_{\text{Pb}} \frac{\partial(p^n q^m)}{\partial p} + \{A, q\}_{\text{Pb}} \frac{\partial(p^n q^m)}{\partial q} \right) \\ &= \{A, p\}_{\text{Pb}} \frac{\partial B}{\partial p} + \{A, q\}_{\text{Pb}} \frac{\partial B}{\partial q}. \end{aligned}$$

(4)  $\{A, p\}_{\text{Pb}} = \partial A / \partial q$ ,  $\{A, q\}_{\text{Pb}} = -\partial A / \partial p$  が成り立つこと。

(3) で示された式において,  $A$  として  $p$ ,  $B$  として  $A$  を使うと,

$$\{p, A\}_{\text{Pb}} = \{p, p\}_{\text{Pb}} \frac{\partial A}{\partial p} + \{p, q\}_{\text{Pb}} \frac{\partial A}{\partial q} = -\frac{\partial A}{\partial q}$$

が成り立つ. ここで, 2番目の等号では, 性質 (v) の  $\{p, p\}_{\text{Pb}} = 0$ ,  $\{p, q\}_{\text{Pb}} = -1$  を用いた. これと, 性質 (i) を使えば,

$$\{A, p\}_{\text{Pb}} = -\{p, A\}_{\text{Pb}} = \frac{\partial A}{\partial q}.$$

同様に, (3) の式において,  $A$  を  $q$  に,  $B$  を  $A$  に置き換えれば,

$$\{q, A\}_{\text{Pb}} = \{q, p\}_{\text{Pb}} \frac{\partial A}{\partial p} + \{q, q\}_{\text{Pb}} \frac{\partial A}{\partial q} = \frac{\partial A}{\partial p}.$$

2番目の等号では性質 (v) の  $\{q, p\}_{\text{Pb}} = 1$ ,  $\{q, q\}_{\text{Pb}} = 0$  を使った. これと性質 (i) より,

$$\{A, q\}_{\text{Pb}} = -\{q, A\}_{\text{Pb}} = -\frac{\partial A}{\partial p}.$$

(5)  $\{A, B\}_{\text{Pb}} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q}$  が成り立つこと。

(3) と (4) の結果を使えば,

$$\begin{aligned} \{A, B\}_{\text{Pb}} &= \{A, p\}_{\text{Pb}} \frac{\partial B}{\partial p} + \{A, q\}_{\text{Pb}} \frac{\partial B}{\partial q} \\ &= \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q}. \end{aligned}$$



(注意) 上の (4) の式において  $\partial A/\partial p = 0$  または  $\partial A/\partial q = 0$  の場合, すなわち,  $A(p, q) = f(q)$  または  $A(p, q) = g(p)$  の場合には, 次の性質が成り立つことがわかる.

$$\{q, f(q)\}_{\text{Pb}} = \{f(q), q\}_{\text{Pb}} = 0, \quad (2.1.14)$$

$$\{p, g(p)\}_{\text{Pb}} = \{g(p), p\}_{\text{Pb}} = 0. \quad (2.1.15)$$

## 2.1.4 簡単な系での例

ここまでのまとめを兼ねて, 次のような簡単な系で復習してみよう.  
質量  $m$  の 1 次元粒子を考える. ポテンシャルは  $V(x)$  とする.

### ラグランジアン

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x). \quad (2.1.16)$$

E-L eq. は

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \frac{\partial V(x)}{\partial x}. \quad (2.1.17)$$

### 運動量 $p$

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}. \quad (2.1.18)$$

### ハミルトニアン

$$\begin{aligned} H(p, x) &= p\dot{x} - L \\ &= m\dot{x}\dot{x} - \left( \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right) \\ &= \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \\ &= \frac{p^2}{2m} + V(x). \end{aligned} \quad (2.1.19)$$

途中の計算では, 変数を何にしてもよいが, 最終形は  $p$  と  $x$  で表わさないとハミルトニアンとは言えないことに注意しよう.

## ポアッソン括弧

$$\{A(p, x), B(p, x)\}_{\text{Pb}} = \frac{\partial A(p, x)}{\partial x} \frac{\partial B(p, x)}{\partial p} - \frac{\partial A(p, x)}{\partial p} \frac{\partial B(p, x)}{\partial x}. \quad (2.1.20)$$

正準変数  $p, x$  間のポアッソン括弧

$$\{x, x\}_{\text{Pb}} = 0, \quad \{p, p\}_{\text{Pb}} = 0 \quad (2.1.21)$$

$$\{x, p\}_{\text{Pb}} = -\{p, x\}_{\text{Pb}} = 1. \quad (2.1.22)$$

## ハミルトンの運動方程式

さて、ポアッソン括弧で表したハミルトンの運動方程式 (2.1.12), (2.1.13) を求めてみよう。ここでは、ポアッソン括弧の定義式 (2.1.20) を使わずに、正準変数間のポアッソン括弧 (2.1.21), (2.1.22) と性質 (i)~(iii) だけを使うことにする。

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \{x, H\}_{\text{Pb}} \\ &= \left\{ x, \frac{p^2}{2m} + V(x) \right\}_{\text{Pb}} \quad (H \text{ を代入}) \\ &= \frac{1}{2m} \{x, p^2\}_{\text{Pb}} + \{x, V(x)\}_{\text{Pb}} \quad (\text{性質 (ii) より}) \\ &= \frac{1}{2m} (\{x, p\}_{\text{Pb}} p + p \{x, p\}_{\text{Pb}}) + 0 \quad (\text{性質 (iii) と } \{x, f(x)\}_{\text{Pb}} = 0 \text{ より}) \\ &= \frac{1}{2m} 2p \quad ((2.1.22) \text{ より}) \\ &= \frac{p}{m}. \end{aligned} \quad (2.1.23)$$

4行目で使った  $\{x, f(x)\}_{\text{Pb}} = 0$  は、ポアッソン括弧の性質 (i)~(iii) と (2.1.21) から出てくる式 (2.1.14) である。

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} &= \{p, H\}_{\text{Pb}} \\ &= \left\{ p, \frac{p^2}{2m} + V(x) \right\}_{\text{Pb}} \quad (H \text{ を代入}) \\ &= \frac{1}{2m} \{p, p^2\}_{\text{Pb}} + \{p, V(x)\}_{\text{Pb}} \quad (\text{性質 (ii) より}) \\ &= 0 - \frac{\partial V(x)}{\partial x} \quad ((2.1.21), (2.1.22) \text{ と性質 (i)~(iii) より}) \\ &= -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \end{aligned} \quad (2.1.24)$$

4行目への変形で使った  $\{p, V(x)\}_{\text{Pb}} = -\partial V(x)/\partial x$  は、もちろん、12ページの (4) を用いた。これは、ポアッソン括弧の性質 (i)~(iii) と (v) から導かれたものである。

## 2.2 量子化

### 2.2.1 交換子積とその性質

量子論では、古典的な物理量  $A, B$  に対応して、演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  が量子論的な物理量になる。演算子であるため一般には積の順番が交換できない：

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A},$$

すなわち、

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0.$$

そこで、一般には0にならない左辺の量に対して次の交換子積 (or 交換子) を定義する：

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.2.1)$$

交換子積は二つの演算子の「交換のしにくさの度合」を表すものと考えてよい。特に、

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \iff [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad (2.2.2)$$

が成り立つ。

また、交換子積は二つの演算子を交換したときの「おつり」と考えることもできる：

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}] \quad (2.2.3)$$

#### 交換子積の性質

(i) 反対称性

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$

(ii) 線形性 (分配法則, 定数倍)

$$[\hat{A}, c\hat{B} + c'\hat{B}'] = c[\hat{A}, \hat{B}] + c'[\hat{A}, \hat{B}']$$

$$[c\hat{A} + c'\hat{A}', \hat{B}] = c[\hat{A}, \hat{B}] + c'[\hat{A}', \hat{B}]$$

ここで、 $c, c'$  は演算子ではない普通の数 ( $c$  数という)。

(iii) 積の微分公式 (ライプニッツ則) に類似した式

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$$

(iv) ヤコビの恒等式

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0.$$

問 2.7 定義 (2.2.1) に基づいて, 交換子積の性質 (i) を示せ.

問 2.8 定義 (2.2.1) に基づいて, 交換子積の性質 (ii) を示せ.

問 2.9 定義 (2.2.1) に基づいて, 交換子積の性質 (iii) を示せ.

問 2.10 定義 (2.2.1) に基づいて, 交換子積の性質 (iv) を示せ.

(ヒント:  $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]]$  を, 一端,  $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] = [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] - [\hat{A}, \hat{C}\hat{B}]$  と分解しておいて, この右辺に対して先に示しておいた交換子積の性質 (iii) を使い, その結果を再び交換子でまとめると簡単になるだろう.)

問 2.11 演算子  $\hat{A}$  に対して, 演算子に作用する演算子  $\mathcal{L}_A$  を次で定義する: 任意の演算子  $\hat{X}$  に対して,

$$\mathcal{L}_A \hat{X} = [\hat{A}, \hat{X}].$$

さて, このとき, 交換子積の性質 (ii) の一番目の式と (iii) の一番目の式を,  $\mathcal{L}_A$  を使って表せ.

問 2.12  $\mathcal{L}_A$  を上の問で定義したものとする. 交換子積の性質 (iv) (ヤコビの恒等式) を  $\mathcal{L}_A$  を使って表すと,

$$\mathcal{L}_A[\hat{B}, \hat{C}] = [\mathcal{L}_A \hat{B}, \hat{C}] + [\hat{B}, \mathcal{L}_A \hat{C}]$$

と書けることを確かめよ.

問 2.13  $\mathcal{L}_A$  を用いた上の二つの問の結果を鑑賞せよ.

## 2.2.2 正準量子化

正準量子化というのは, おおざっぱにいうと, 古典的な物理量を次のように演算子 (量子論的な物理量) に置き換えることである:

- $A, B \longrightarrow \hat{A}, \hat{B}$
- $i\hbar\{A, B\} \longrightarrow [\hat{A}, \hat{B}]$

古典物理の世界のポアソン括弧の性質 (i)~(iv) と, 量子論の世界の交換子積の性質 (i)~(iv) がまったく同じ形であることに注意しよう. この事実が, 量子論へ移行するときの橋渡しになっているのである.

## 正準交換関係

古典論では，ポアソン括弧の定義式は，ポアソン括弧の性質 (i)～(iii) と正準変数間のポアソン括弧 (v) がから導かれた．量子論でも，正準変数間に対応する交換関係を設定する．

$q_i, p_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) を正準変数とする古典論に対する演算子を， $\hat{q}_i, \hat{p}_i$  とする．これらの，正準変数間に次の正準交換関係 (Canonical Commutation Relation; CCR) を設定する：

$$\begin{aligned} [\hat{q}_i, \hat{q}_j] &= [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \\ [\hat{q}_i, \hat{p}_j] &= -[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

これらは，古典的な正準変数間のポアソン括弧に対応する式である．(正準変数間のポアソン括弧を  $i\hbar$  したものが，交換子に置き換わる.)

## ハイゼンベルク方程式

ポアソン括弧を交換子積に置き換えることをハミルトンの運動方程式に適用すれば，次のハイゼンベルク方程式が得られる：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{q}_i}{dt} &= [\hat{q}_i, \hat{H}] \\ i\hbar \frac{d\hat{p}_i}{dt} &= [\hat{p}_i, \hat{H}] \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

ここでハミルトニアン演算子  $\hat{H}$  は，古典的ハミルトン関数から次の置き換えで得られる：

- $H(p_i, q_i) \longrightarrow \hat{H} = H(\hat{p}_i, \hat{q}_i)$

## 簡単な系での例

ポテンシャル  $V(x)$  内の 1 次元 1 粒子系で考えてみよう．古典的ハミルトン関数は，

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

であり， $x$  と  $p$  が正準変数である．

正準量子化の操作の元では， $x, p$  は正準交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

を満たす演算子  $\hat{x}, \hat{p}$  に昇格する．また，ハミルトン関数も，次のハミルトニアン演算子

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

に置き換えられる.

ハイゼンベルク方程式を正準交換関係と交換子の性質を使って計算してみよう.

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d\hat{x}}{dt} &= [\hat{x}, \hat{H}] \\
 &= \left[ \hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right] \quad (\hat{H} \text{ を代入}) \\
 &= \frac{1}{2m} [\hat{x}, \hat{p}^2] + [\hat{x}, V(\hat{x})] \quad (\text{交換子積の性質 (ii) より}) \\
 &= \frac{1}{2m} \left( [\hat{x}, \hat{p}] \hat{p} + \hat{p} [\hat{x}, \hat{p}] \right) + 0 \quad (\text{交換子積の性質 (iii), } [\hat{x}, V(\hat{x})] = 0 \text{ より}) \\
 &= \frac{1}{2m} 2i\hbar \hat{p} \quad (\text{正準交換関係より}) \\
 &= i\hbar \frac{\hat{p}}{m}
 \end{aligned}$$

4行目への変形で,  $[\hat{x}, V(\hat{x})] = 0$  を使ったが, これはポアッソン括弧のときと全く同様に示すことができる. 例えば,  $[\hat{x}, \hat{x}^n] = 0$  を示せば十分であるが, これは, 交換子積の性質 (iii) より  $[\hat{x}, \hat{x}] = 0$  に帰着される.

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d\hat{p}}{dt} &= [\hat{p}, \hat{H}] \\
 &= \left[ \hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right] \quad (\hat{H} \text{ を代入}) \\
 &= \frac{1}{2m} [\hat{p}, \hat{p}^2] + [\hat{p}, V(\hat{x})] \quad (\text{交換子積の性質 (ii) より}) \\
 &= \frac{1}{2m} \cdot 0 + [\hat{p}, V(\hat{x})] \quad (\text{正準交換関係より}) \\
 &= -i\hbar V'(\hat{x}) \quad (\text{正準交換関係より})
 \end{aligned}$$

最後の行にある  $V'(\hat{x})$  は, 古典的変数  $x$  の関数  $V(x)$  を考え, その導関数  $V'(x) = \partial V(x)/\partial x$  において,  $x \rightarrow \hat{x}$  の置き換えを行ったものである. つまり,

$$V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$$

と表されている関数であれば,

$$V'(x) = \frac{\partial V(x)}{\partial x} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n n x^{n-1}$$

となる．ここで  $x$  を演算子  $\hat{x}$  に置き換えたものが， $V'(\hat{x})$  である<sup>3</sup>：

$$V'(\hat{x}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n n \hat{x}^{n-1}.$$

結局， $[\hat{p}, V(\hat{x})] = -i\hbar V'(\hat{x})$  を見るには，

$$[\hat{p}, \hat{x}^n] = -i\hbar n \hat{x}^{n-1}$$

を示せばよい．これもまた，ポアソン括弧のときと同様に，交換子積の性質 (iii) を使うことで，正準交換関係  $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$  に帰着される．

以上をまとめると，ハイゼンベルク方程式から，

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{\hat{p}}{m} \\ \frac{d\hat{p}}{dt} &= -V'(\hat{x}) \end{aligned}$$

が得られる．これが古典論の運動方程式と全く同じ形をしていることに注意しよう．だからこそ，この量子論は，元の古典論を量子化したものだとも言える．

古典論と同じ運動方程式が出てきた理由は量子化の手続きを考えれば明らかであろう．ポアソン括弧を交換子積に置き換え，ポアソン括弧で表されるハミルトンの運動方程式を交換子積で表しなおしただけであるから．途中計算は，ポアソン括弧であろうが交換子積であろうが，全く同じ形の計算になる．

**問 2.14**  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$  を 1 次元 1 粒子系の位置と運動量の演算子とする．これらは，次の正準交換関係をみたす．

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

このとき，次の式が成り立つことを確認せよ．

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{x}^n] &= 0, \\ [\hat{x}, f(\hat{x})] &= 0, \\ [\hat{x}, \hat{p}^n] &= i\hbar n \hat{p}^{n-1}, \\ [\hat{x}, g(\hat{p})] &= [\hat{x}, \hat{p}] \frac{\partial g}{\partial \hat{p}}(\hat{p}), \\ [\hat{p}, \hat{p}^n] &= 0, \\ [\hat{p}, g(\hat{p})] &= 0, \\ [\hat{p}, \hat{x}^n] &= -i\hbar n \hat{x}^{n-1}, \\ [\hat{p}, f(\hat{x})] &= [\hat{p}, \hat{x}] \frac{\partial f}{\partial \hat{x}}(\hat{x}). \end{aligned}$$

---

<sup>3</sup> $V(\hat{x})$  はもちろん，今の場合

$$V(\hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{x}^n$$

で与えられている．

ただしここで、古典的変数の関数、

$$f(x) = \sum_n f_n x^n, \quad g(p) = \sum_n g_n p^n$$

に対して、これらに付随する演算子を次で定義した：

$$\begin{aligned} f(\hat{x}) &= \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{x}^n, & \frac{\partial f}{\partial x}(\hat{x}) &= \sum_{n=1}^{\infty} n f_n \hat{x}^{n-1}, \\ g(\hat{p}) &= \sum_{n=0}^{\infty} g_n \hat{p}^n, & \frac{\partial g}{\partial p}(\hat{p}) &= \sum_{n=1}^{\infty} n g_n \hat{p}^{n-1}. \end{aligned}$$



## 2.3 シュレーディンガー描像とハイゼンベルク描像

ポアソン括弧で表したハミルトンの運動方程式は、正準量子化をした後では、ポアソン括弧が交換子積に変わることにより、ハイゼンベルク方程式となった。

ハイゼンベルク方程式は、演算子の時間発展を表す方程式であるので、これはもちろん、ハイゼンベルク描像のもとで考えることになる。そこで、ハイゼンベルク描像と、それと比較されるシュレーディンガー描像とを復習しておこう。なお、以下では、状態を表すのに（波動関数ではなく）ケットベクトルを用いる

### 2.3.1 シュレーディンガー描像

シュレーディンガー描像 (Schrödinger picture) では、状態ベクトルが時間とともに変化する。

状態ベクトルの時間発展を表すのは、シュレーディンガー方程式である：ハミルトニアン演算子を  $\hat{H}$  とし、状態ベクトルを  $|\psi(t)\rangle_S$  とすれば、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_S = \hat{H} |\psi(t)\rangle_S. \quad (2.3.1)$$

これに対し、物理量を表す演算子は時間に依存しない： $\hat{O}_S$  をシュレーディンガー描像での演算子とすれば、

$$\frac{d}{dt} \hat{O}_S = 0. \quad (2.3.2)$$

特に、正準変数  $\hat{q}$ ,  $\hat{p}$  も時間に依らない<sup>4</sup>。

演算子の指数関数を用いると、上のシュレーディンガー方程式の形式的な解を求めることができる：

$$|\psi(t)\rangle_S = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle_S. \quad (2.3.3)$$

これが解であることは、一般に、演算子  $\hat{A}$  の指数関数  $e^{t\hat{A}}$  に対して、

$$\frac{d}{dt} e^{t\hat{A}} = \hat{A} e^{t\hat{A}} \quad (2.3.4)$$

が成り立つことから容易に確かめられる。

**問 2.15**  $\hat{A}$  を演算子 (または、正方行列),  $t$  を実数パラメーターとするとき,  $t\hat{A}$  の指数関数  $e^{t\hat{A}}$  は次で定義される：

$$e^{t\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \hat{A}^n = \mathbf{1} + t\hat{A} + \frac{t^2}{2!} \hat{A}^2 + \dots \quad (2.3.5)$$

<sup>4</sup>シュレーディンガ描像なので、 $\hat{q}$ ,  $\hat{p}$  というよりは、 $\hat{O}_S$  の書き方で  $\hat{q}_S$ ,  $\hat{p}_S$ . 同様に、上のシュレーディンガー方程式におけるハミルトニアン演算子  $\hat{H}$  ももちろんシュレーディンガー描像での量であるが、ハミルトニアンに関しては敢えて添え字の S はつけないことにする。

( $\mathbf{1}$  は恒等演算子, つまり, かかっても何もしない演算子:  $\mathbf{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ .) さて, このとき, 次の式が成り立つことを確かめよ.

$$\frac{d}{dt}e^{t\hat{A}} = \hat{A}e^{t\hat{A}} = e^{t\hat{A}}\hat{A}. \quad (2.3.6)$$

### 2.3.2 ハイゼンベルク描像

ハイゼンベルク描像 (Heisenberg picture) では, 状態ベクトルは変化せず, 演算子の方が時間発展をする.

ハイゼンベルク描像の状態ベクトルを  $|\psi\rangle_{\text{H}}$  とすると,  $|\psi\rangle_{\text{H}}$  はシュレーディンガー描像の状態ベクトル  $|\psi(t)\rangle_{\text{S}}$  との間に, 次の関係で結びつけられる:

$$|\psi\rangle_{\text{H}} = e^{it\hat{H}/\hbar}|\psi(t)\rangle_{\text{S}}. \quad (2.3.7)$$

(2.3.3) 式と比較すれば,

$$|\psi\rangle_{\text{H}} = |\psi(0)\rangle_{\text{S}} \quad (2.3.8)$$

であることがわかるであろう. したがって, また, 確かに  $|\psi\rangle_{\text{H}}$  が時間に依存しないこともわかる.

シュレーディンガー描像の演算子  $\hat{O}_{\text{S}}$  に対応するハイゼンベルク描像の演算子  $\hat{O}_{\text{H}}(t)$  は,

$$\hat{O}_{\text{H}}(t) = e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{O}_{\text{S}}e^{-it\hat{H}/\hbar} \quad (2.3.9)$$

で与えられる. この定義のもとでは,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\hat{O}_{\text{H}}(t) &= i\hbar\frac{d}{dt}\left(e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{O}_{\text{S}}e^{-it\hat{H}/\hbar}\right) \\ &= \left(i\hbar\frac{d}{dt}e^{it\hat{H}/\hbar}\right)\hat{O}_{\text{S}}e^{-it\hat{H}/\hbar} + e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{O}_{\text{S}}\left(i\hbar\frac{d}{dt}e^{-it\hat{H}/\hbar}\right) \\ &= -\hat{H}e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{O}_{\text{S}}e^{-it\hat{H}/\hbar} + e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{O}_{\text{S}}e^{-it\hat{H}/\hbar}\hat{H} \\ &= -\hat{H}\hat{O}_{\text{H}}(t) + \hat{O}_{\text{H}}(t)\hat{H} \\ &= [\hat{O}_{\text{H}}(t), \hat{H}] \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

となり, 確かに,  $\hat{O}_{\text{H}}(t)$  がハイゼンベルク方程式にしたがって時間発展することがわかる.

### 2.3.3 二つの描像間の関係

ハイゼンベルク描像とシュレーディンガー描像との関係から, 次のことが成り立つことに注意しておく.

- 二つの描像において, ハミルトニアン演算子は共通である. 実際,

$$\hat{H}_{\text{H}}(t) = e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{H}e^{-it\hat{H}/\hbar} = e^{it\hat{H}/\hbar}e^{-it\hat{H}/\hbar}\hat{H} = \hat{H} (= \hat{H}_{\text{S}}).$$

- $t = 0$  において二つの描像の状態ベクトルは一致する :

$$|\psi(0)\rangle_S = |\psi\rangle_H \quad (2.3.11)$$

- $t = 0$  において二つの描像の演算子は一致する :

$$\hat{O}_H(0) = \hat{O}_S \quad (2.3.12)$$

- 状態ベクトル  $|\psi(t)\rangle_S$  には  $|\psi\rangle_H$  が対応し, 演算子  $\hat{O}_S$  には,  $\hat{O}_H(t)$  が対応するとき,  $\hat{O}_S|\psi(t)\rangle_S$  には,  $\hat{O}_H(t)|\psi\rangle_H$  が対応する. 実際,

$$\begin{aligned} \hat{O}_H(t)|\psi\rangle_H &= \left( e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}_S e^{-it\hat{H}/\hbar} \right) \left( e^{it\hat{H}/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \right) \\ &= e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}_S e^{-it\hat{H}/\hbar} e^{it\hat{H}/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}_S \left( e^{-it\hat{H}/\hbar} e^{it\hat{H}/\hbar} \right) |\psi(t)\rangle_S \\ &= e^{it\hat{H}/\hbar} \left( \hat{O}_S |\psi(t)\rangle_S \right) \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

となる. 一番下の行の形が,  $\hat{O}_S|\psi(t)\rangle_S$  に対応するハイゼンベルク描像の状態を表している.

- 演算子  $\hat{O}_S, \hat{O}'_S$  にそれぞれ,  $\hat{O}_H(t), \hat{O}'_H(t)$  が対応するとき, 演算子の積  $\hat{O}_S\hat{O}'_S$  には  $\hat{O}_H(t)\hat{O}'_H(t)$  が対応する. 実際,

$$\begin{aligned} \hat{O}_H(t)\hat{O}'_H(t) &= \left( e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}_S e^{-it\hat{H}/\hbar} \right) \left( e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}'_S e^{-it\hat{H}/\hbar} \right) \\ &= e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}_S e^{-it\hat{H}/\hbar} e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}'_S e^{-it\hat{H}/\hbar} \\ &= e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}_S \left( e^{-it\hat{H}/\hbar} e^{it\hat{H}/\hbar} \right) e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}'_S e^{-it\hat{H}/\hbar} \\ &= e^{it\hat{H}/\hbar} \left( \hat{O}_S \hat{O}'_S \right) e^{-it\hat{H}/\hbar} \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

となる. 一番下の行の形が,  $\hat{O}_S\hat{O}'_S$  に対応するハイゼンベルク描像の演算子を表している.

- シュレーディンガー描像での演算子  $\hat{O}_S = f(\hat{p}_S, \hat{q}_S)$  に対応するハイゼンベルグ描像の演算子は,  $\hat{O}_H(t) = f(\hat{p}_H(t), \hat{q}_H(t))$  である.

特に, ハミルトニアンは, 二つの描像で共通ではあるが, それぞれの描像での正準変数で表しておくのが便利である:  $\hat{H} = H(\hat{p}_S, \hat{q}_S) = H(\hat{p}_H(t), \hat{q}_H(t))$ .

- $\hat{O}_S, \hat{O}'_S$  にそれぞれ,  $\hat{O}_H(t), \hat{O}'_H(t)$  が対応するとき, 交換子積  $[\hat{O}_S, \hat{O}'_S]$  には  $[\hat{O}_H(t), \hat{O}'_H(t)]$  が対応する. すなわち,

$$[\hat{O}_H(t), \hat{O}'_H(t)] = e^{it\hat{H}/\hbar} [\hat{O}_S, \hat{O}'_S] e^{-it\hat{H}/\hbar} \quad (2.3.15)$$

- 二つの描像で，同一の正準交換関係が成り立つ．すなわち，シュレーディンガー描像では，

$$\begin{aligned} [\hat{q}_{Si}, \hat{q}_{Sj}] &= 0, & [\hat{p}_{Si}, \hat{p}_{Sj}] &= 0 \\ [\hat{q}_{Si}, \hat{p}_{Sj}] &= -[\hat{p}_{Si}, \hat{q}_{Sj}] = i\hbar\delta_{ij} \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

となり，ハイゼンベルグ描像では，

$$\begin{aligned} [\hat{q}_{Hi}(t), \hat{q}_{Hj}(t)] &= 0, & [\hat{p}_{Hi}(t), \hat{p}_{Hj}(t)] &= 0 \\ [\hat{q}_{Hi}(t), \hat{p}_{Hj}(t)] &= -[\hat{p}_{Hi}(t), \hat{q}_{Hj}(t)] = i\hbar\delta_{ij}. \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

- 状態ベクトル  $|\psi(t)\rangle_S$  には  $|\psi\rangle_H$  が対応し，演算子  $\hat{O}_S$  には， $\hat{O}_H(t)$  が対応するとき，二つの描像で計算する期待値は等しい：

$${}_H\langle\psi|\hat{O}_H(t)|\psi\rangle_H = {}_S\langle\psi(t)|\hat{O}_S|\psi(t)\rangle_S. \quad (2.3.18)$$

実際，

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \left\{ {}_S\langle\psi(t)| \left( e^{it\hat{H}/\hbar} \right)^\dagger \right\} \left\{ e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}_S e^{-it\hat{H}/\hbar} \right\} \left\{ e^{it\hat{H}/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \right\} \\ &= {}_S\langle\psi(t)| e^{-it\hat{H}/\hbar} \cdot e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{O}_S e^{-it\hat{H}/\hbar} \cdot e^{it\hat{H}/\hbar} |\psi(t)\rangle_S \\ &= {}_S\langle\psi(t)| \hat{O}_S |\psi(t)\rangle_S \\ &= \text{右辺} \end{aligned}$$

- 状態ベクトル  $|\psi(t)\rangle_S$  には  $|\psi\rangle_H$  が対応し， $|\psi'(t)\rangle_S$  には  $|\psi'\rangle_H$  が対応するとき，これらの状態間での振幅（＝内積）は二つの描像で一致する：

$${}_H\langle\psi|\psi'\rangle_H = {}_S\langle\psi(t)|\psi'(t)\rangle_S. \quad (2.3.19)$$

問 2.16 (2.3.12) が成り立つことを確認せよ．

問 2.17 (2.3.15) が成り立つことを確認せよ．

問 2.18 (2.3.16) を仮定して (2.3.17) を示せ．

問 2.19 (2.3.19) が成り立つことを確認せよ．

問 2.20 シュレーディンガー描像における演算子  $\hat{O}_S = \{\hat{p}_S\}^n \{\hat{q}_S\}^m$  に対応するハイゼンベルグ表示の演算子は， $\hat{O}_H(t) = \{\hat{p}_H(t)\}^n \{\hat{q}_H(t)\}^m$  であることを確認せよ．さらには， $f(p, q) = \sum_{n,m} c_{nm} p^n q^m$  と級数で表される関数があるとき，シュレーディンガー描像における演算子  $f(\hat{p}_S, \hat{q}_S)$  に対応するハイゼンベルグ表示の演算子は， $f(\hat{p}_H(t), \hat{q}_H(t))$  であることを納得せよ．

## 第3章 調和振動子の正準量子化

### 3.1 古典論

質量  $m$ 、角振動数  $\omega$  の調和振動子の系のラグランジアンは、

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (3.1.1)$$

である。これから得られる運動方程式は、

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\omega^2 x \quad (3.1.2)$$

であり、その解は

$$x = A \sin(\omega t - \alpha) \quad (3.1.3)$$

で与えられる。

ラグランジアンから、正準運動量を求めると、

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}. \quad (3.1.4)$$

ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned} H &= p\dot{x} - L \\ &= m\dot{x}\dot{x} - \left( \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \\ &= \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \\ &= \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \end{aligned}$$

すなわち、

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (3.1.5)$$

正準変数は、 $x$  と  $p$  であり、これらの間のポアソン括弧は、

$$\{x, x\}_{\text{Pb}} = 0, \quad \{p, p\}_{\text{Pb}} = 0 \quad (3.1.6)$$

$$\{x, p\}_{\text{Pb}} = -\{p, x\}_{\text{Pb}} = 1. \quad (3.1.7)$$

## 3.2 量子化

正準量子化は，正準変数  $x, p$  を正準交換関係をみたすエルミート演算子  $\hat{x}, \hat{p}$  に置き換えることで実行できる：

$$\begin{aligned}x &\longrightarrow \hat{x} \\ p &\longrightarrow \hat{p}\end{aligned}$$

$$[\hat{x}, \hat{x}] = 0, \quad [\hat{p}, \hat{p}] = 0 \quad (3.2.1)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = -[\hat{p}, \hat{x}] = i\hbar. \quad (3.2.2)$$

これに応じてハミルトニアンも次のようなハミルトニアン演算子に置き換えられる：

$$H(p, x) \longrightarrow \hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x})$$

すなわち，

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2. \quad (3.2.3)$$

時間発展はこのハミルトニアン演算子によって記述される．

シュレーディンガー描像をとれば，状態の時間発展は次のシュレーディンガー方程式によって与えられる：

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (3.2.4)$$

この解を得るには，ハミルトニアン  $\hat{H}$  の固有値と固有ベクトルがわかればよい．実際，

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle \quad (3.2.5)$$

なるエネルギー固有値  $E_n$  とエネルギー固有ベクトル  $|E_n\rangle$  が求めれば，上の (3.2.4) の解は，容易にわかるように，

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |E_n\rangle \quad (3.2.6)$$

で与えられる．ここで， $c_n$  は重ねあわせの係数である．こうして，この量子系を解くことは，エネルギー固有値問題 (3.2.5) を解くことに帰着される．

**問 3.1** (3.2.6) で与えられる  $|\psi(t)\rangle$  が，シュレーディンガー方程式 (3.2.4) の解であることを確認せよ．

### 3.3 エネルギー固有値, エネルギー固有状態

調和振動子のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2. \quad (3.3.1)$$

のもとで, エネルギー固有値問題

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle \quad (3.3.2)$$

を考えていこう. ただし, ハミルトニアン  $\hat{H}$  において,  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$  は正準交換関係,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (3.3.3)$$

を満たすエルミート演算子である.

古典的な変数のときには, ハミルトニアンは,

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \\ &= \left( \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}x + i\sqrt{\frac{1}{2m}}p \right) \left( \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}x - i\sqrt{\frac{1}{2m}}p \right) \end{aligned}$$

と因数分解できることを頭において, 次の演算子  $\hat{A}$ ,  $\hat{A}^\dagger$  を導入する.

$$\hat{A} = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m}}\hat{p}, \quad (3.3.4)$$

$$\hat{A}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m}}\hat{p}. \quad (3.3.5)$$

$\hat{A}$  と  $\hat{A}^\dagger$  の交換関係を調べてみよう.

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{A}^\dagger] &= \left[ \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m}}\hat{p}, \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m}}\hat{p} \right] \\ &= -i\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}\sqrt{\frac{1}{2m}}[\hat{x}, \hat{p}] + i\sqrt{\frac{1}{2m}}\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}[\hat{p}, \hat{x}] \\ &= -i\frac{\omega}{2}i\hbar + i\frac{\omega}{2}(-i\hbar) \\ &= \hbar\omega. \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

1行目右辺を交換子積の分配法則を使って展開すれば, 4つの交換子積の項がでる. しかし, そのうちの2項は,  $\hat{x}$  どうしの交換子積と  $\hat{p}$  どうしの交換子積の項で, 直ちにゼロになることがわかる項である. そこで, 2行目では, 最初からゼロにならない項だけを書いた.

上の結果から,  $\hat{A}$  と  $\hat{A}^\dagger$  のかわりに,  $\hat{A} = \sqrt{\hbar\omega} \hat{a}$ ,  $\hat{A}^\dagger = \sqrt{\hbar\omega} \hat{a}^\dagger$  となるような  $\hat{a}$  と  $\hat{a}^\dagger$  を導入すると便利である. すなわち,

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p}, \quad (3.3.7)$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \hat{p} \quad (3.3.8)$$

とすると,

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (3.3.9)$$

が成り立つ.

(3.3.7), (3.3.8) を逆に解けば,

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (3.3.10)$$

$$\hat{p} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (3.3.11)$$

となる. これらをハミルトニアン (3.3.1) に代入すれば,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \\ &= \frac{1}{2m} \cdot (-1) \frac{m\omega\hbar}{2} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{m\omega^2}{2} \cdot \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \{ (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 - (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 \} \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} \{ \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2} - (\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2}) \} \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \end{aligned} \quad (3.3.12)$$

$$= \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.3.13)$$

となる. 最後の行では, 交換関係  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$  を使った.

ここまで, 整理すると, われわれの問題は,

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (3.3.14)$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (3.3.15)$$

のもとで, エネルギー固有値問題

$$\hat{H} |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle \quad (3.3.16)$$



を解くことである.

$\hat{H}$  の固有値を求めるには,  $\hat{H}$  に現れる  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  の固有値がわかればよい. すなわち,  $\hat{N}$  を

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (3.3.17)$$

と定義すれば, ハミルトニアンが

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.3.18)$$

と表されるので,  $\hat{H}$  の固有値問題は,  $\hat{N}$  の固有値問題に帰着される.

固有値問題,

$$\hat{N} |\nu\rangle = \nu |\nu\rangle \quad (3.3.19)$$

を調べよう. まず,  $\hat{N}$  が  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  の形をしていることから, 固有値  $\nu$  は非負 ( $\nu \geq 0$ ) であることがわかる. 実際,  $|\nu\rangle$  が規格化されているとして, (3.3.19) の両辺に  $\langle \nu|$  を左からかけると,

$$\langle \nu | \hat{N} | \nu \rangle = \nu \langle \nu | \nu \rangle = \nu.$$

ここで最左辺は,  $|\phi\rangle \equiv \hat{a} |\nu\rangle$  おくと,

$$\langle \nu | \hat{N} | \nu \rangle = \langle \nu | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \nu \rangle = \langle \nu | \hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} | \nu \rangle = \langle \phi | \cdot | \phi \rangle = \langle \phi | \phi \rangle \geq 0 \quad (3.3.20)$$

が成り立つ. ただし, 等号が成り立つのは,  $|\phi\rangle = \hat{a} |\nu\rangle = 0$  の場合に限る. 結局,

$$\hat{a} |\nu\rangle \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \nu > 0, \quad (3.3.21)$$

$$\hat{a} |\nu\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \nu = 0 \quad (3.3.22)$$

が成り立つことがわかる.

さて,  $\hat{N}$  と  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  との交換関係を調べると,

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger, \quad (3.3.23)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}. \quad (3.3.24)$$

これらを使って,  $\hat{N}$  の  $\hat{a}^\dagger |\nu\rangle$  や  $\hat{a} |\nu\rangle$  への作用を見てみよう.

$$\begin{aligned} \hat{N} (\hat{a}^\dagger |\nu\rangle) &= \hat{N} \hat{a}^\dagger |\nu\rangle \\ &= (\hat{a}^\dagger \hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}^\dagger]) |\nu\rangle \\ &= (\hat{a}^\dagger \hat{N} + \hat{a}^\dagger) |\nu\rangle \\ &= (\hat{a}^\dagger \nu + \hat{a}^\dagger) |\nu\rangle \\ &= (\nu + 1) (\hat{a}^\dagger |\nu\rangle). \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

同様に,

$$\begin{aligned}\hat{N}(\hat{a}|\nu\rangle) &= (\hat{a}\hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}]|\nu\rangle) \\ &= (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|\nu\rangle \\ &= (\nu - 1)(\hat{a}|\nu\rangle).\end{aligned}\tag{3.3.26}$$

これらの結果を見ると,  $\hat{a}^\dagger|\nu\rangle$  や  $\hat{a}|\nu\rangle$  は  $\hat{N}$  の固有状態であり, その固有値はそれぞれ  $\nu+1$ ,  $\nu-1$  であることがわかる:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger|\nu\rangle &\sim |\nu+1\rangle, \\ \hat{a}|\nu\rangle &\sim |\nu-1\rangle.\end{aligned}$$

言い換えれば,  $\hat{a}^\dagger$  は  $\hat{N}$  の固有値を1だけ上げる演算子であり,  $\hat{a}$  は固有値を1だけ下げる演算子である. こうして, ある  $|\nu\rangle$  から出発して, 次々と  $\hat{a}^\dagger$  を作用していけば, いくらでも大きい固有値をもつ固有ベクトルが作れる:

$$|\nu\rangle \xrightarrow{\hat{a}^\dagger} |\nu+1\rangle \xrightarrow{\hat{a}^\dagger} |\nu+2\rangle \xrightarrow{\hat{a}^\dagger} |\nu+3\rangle \xrightarrow{\hat{a}^\dagger} \dots$$

しかしながら,  $\hat{a}$  を次々と作用して行った場合は事情が異なる. もし, いくらでも固有値を下げていくことができるならば, いずれ負の固有値を生み出すことになる. しかし, これは,  $\hat{N}$  の固有値が非負でなければならないこと (3.3.21), (3.3.22) に反する. したがって,  $\hat{a}$  を次々と作用して行った場合は, あるところ ( $n+1$  回目) でゼロにならなければならない:

$$|\nu\rangle \xrightarrow{\hat{a}} |\nu-1\rangle \xrightarrow{\hat{a}} |\nu-2\rangle \xrightarrow{\hat{a}} \dots \xrightarrow{\hat{a}} |\nu-n\rangle \xrightarrow{\hat{a}} 0.$$

$n+1$  回目でゼロになること,

$$\hat{a}|\nu-n\rangle = 0$$

の両辺に, 左から  $\hat{a}^\dagger$  をかけると,

$$0 = \hat{a}^\dagger\hat{a}|\nu-n\rangle = \hat{N}|\nu-n\rangle$$

であるから,  $|\nu-n\rangle$  は固有値0の固有ベクトルである. 一方,  $|\nu-n\rangle$  は固有値  $\nu-n$  であったから,  $\nu=n$  が導かれる. すなわち,  $\hat{N}$  の固有値  $\nu$  は非負の整数でなければならない:

$$\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle \quad \Rightarrow \quad \nu = 0, 1, 2, 3, \dots.\tag{3.3.27}$$

このことから,  $\hat{N}$  は個数演算子 (number operator) と呼ばれる.

これ以降は  $\hat{N}$  の固有値を ( $\nu$  ではなく)  $n$  と書き, 固有ベクトルを  $|n\rangle$  と書くことにする. 最小の固有値  $n=0$  に対応する  $|0\rangle$  は,

$$\hat{a}|0\rangle = 0\tag{3.3.28}$$

を満たすことで特徴づけられる。この  $|0\rangle$  から出発すれば、 $\hat{a}^\dagger$  を次々と作用することにより、すべての固有ベクトルを作ることができる：

$$|0\rangle \xrightarrow{\hat{a}^\dagger} |1\rangle \xrightarrow{\hat{a}^\dagger} |2\rangle \xrightarrow{\hat{a}^\dagger} |3\rangle \xrightarrow{\hat{a}^\dagger} \dots$$

したがって、固有値  $n$  に対応する固有ベクトル  $|n\rangle$  は、

$$|n\rangle \propto (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

で与えられる。以下では、規格化を考慮して、比例定数を決めよう。

出発点の  $|0\rangle$  は規格化してあるものとする：

$$\langle 0|0\rangle = 1. \quad (3.3.29)$$

$|1\rangle = c\hat{a}^\dagger|0\rangle$  とおき、 $|1\rangle$  が規格化されるよう定数  $c$  を決める。

$$\begin{aligned} 1 &= \langle 1|1\rangle \\ &= c^*c \langle 0|\hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger|0\rangle \\ &= |c|^2 \langle 0|(\hat{a}^\dagger\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger])|0\rangle \\ &= |c|^2 \langle 0|[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]|0\rangle \quad (\Leftarrow \hat{a}|0\rangle = 0) \\ &= |c|^2 \langle 0|1|0\rangle \quad (\Leftarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1) \\ &= |c|^2. \end{aligned}$$

したがって、 $c = 1$  と選ぶことができる：

$$|1\rangle = \hat{a}^\dagger|0\rangle. \quad (3.3.30)$$

同様に、 $|2\rangle = c\hat{a}^\dagger|1\rangle$  とおき、 $|2\rangle$  が規格化されるように定数  $c$  を決める。

$$\begin{aligned} 1 &= \langle 2|2\rangle \\ &= c^*c \langle 1|\hat{a} \cdot \hat{a}^\dagger|1\rangle \\ &= |c|^2 \langle 1|(\hat{a}^\dagger\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger])|1\rangle \\ &= |c|^2 \langle 1|(1 + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger])|1\rangle \quad (\Leftarrow \hat{a}^\dagger\hat{a}|1\rangle = \hat{N}|1\rangle = 1 \cdot |1\rangle) \\ &= |c|^2 \langle 1|2|1\rangle \quad (\Leftarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1) \\ &= 2|c|^2. \end{aligned}$$

したがって、 $c = 1/\sqrt{2}$  と選ぶことができる：

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle. \quad (3.3.31)$$

以下, 同様にしていけば  $|n\rangle$  としては,

$$|n\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (3.3.32)$$

とおけば,

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (3.3.33)$$

$$\langle n|n\rangle = 1 \quad (3.3.34)$$

が成り立つことがわかる. さらに,

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \quad (3.3.35)$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (3.3.36)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (3.3.37)$$

も成り立つ.

**問 3.2**  $|n\rangle$  が (3.3.32) で与えられるとき, (3.3.33)~(3.3.37) が成り立つことを確認せよ.

さて,  $\hat{N}$  の固有値問題が解けたので, ハミルトニアン  $\hat{H}$  の固有値問題も直ちにわかる.  $\hat{H}$  が

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

と表されたことを思い出すと,  $\hat{N}$  の固有ベクトル  $|n\rangle$  は  $\hat{H}$  の固有ベクトルでもあり, 対応する固有値  $E_n$  は,

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (3.3.38)$$

であることから,

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.3.39)$$

であることがわかる. また, 基底状態は  $|0\rangle$  であり, 基底状態のエネルギー (ゼロ点エネルギー) は,

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (3.3.40)$$

である.

### 3.4 物理量の期待値

ここまでの議論では、正準量子化に基づいた演算子の性質だけを使ってきた。波動関数  $\psi(x)$  や、 $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$  などの表示は全く使っていないことに注意しよう。極論すれば、正準交換関係だけですべてを計算できたのであり、波動関数などは必要としなかった。交換関係だけで波動関数は本当に必要ないのであるか。

例えば、波動関数がわかれば  $|\psi(x)|^2$  によって粒子の確率分布がわかる。波動関数を使わずにこのような情報はどのように得られるであろうか？

$\hat{x}^n$  の期待値  $\langle \hat{x}^n \rangle$  がわかればよい。 $\langle \hat{x} \rangle$  で平均的な位置がわかり、さらに  $\langle \hat{x}^2 \rangle$  がわかれば、平均的な位置からの広がり  $\Delta x$  もわかる：

$$\Delta x^2 \equiv \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2.$$

さらに高次の  $\langle \hat{x}^n \rangle$  がわかれば、より詳細な分布の形がわかるであろう。

では、このような期待値  $\langle \hat{x}^n \rangle$  はどうやって求められるだろうか。それは、(3.3.10) 式、

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

を使うことでできる。例えば、

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{x} | n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \langle n | \sqrt{n} | n-1 \rangle + \langle n | \sqrt{n+1} | n+1 \rangle \right) \\ &= 0. \\ \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \underbrace{\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}}_{2\hat{N}+1} | n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | 0 + 0 + (2n+1) | n \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1). \end{aligned}$$

**問 3.3** (3.3.11) 式などを使って、 $\langle \hat{p} \rangle$ ,  $\langle \hat{p}^2 \rangle$  を求めよ。

**問 3.4** 次の等式が成り立つことを示せ：

$$\langle n | \frac{\hat{p}^2}{2m} | n \rangle = \langle n | \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

### 3.4.1 <参考> $x$ 表示の波動関数

上で見たように、交換関係だけですべてが計算でき、波動関数は必要なかった。それでも波動関数がないと落ち着かない人もいるだろう。あるいは、波動関数は必要ないのは理解はしたが、これまでの記法と波動関数との関係が知りたいという人いるかもしれない。そのような人のためにこれまでの記法と波動関数との関係を簡単に説明しておこう。

状態ベクトル  $|\psi\rangle$  に対応する波動関数  $\psi(x)$  は、

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle \quad (3.4.1)$$

で与えられる。ここで、 $|x\rangle$  は粒子が位置  $x$  にいるという状態を表す。したがって、上で与えられる  $\psi(x)$  は、状態が  $|\psi\rangle$  で与えられるとき位置の測定をして測定値  $x$  を得る確率振幅を与える<sup>1</sup>。すなわち、

$$[\text{粒子が位置 } x \text{ に見つかる確率}] \propto |\psi(x)|^2.$$

これこそが波動関数の持つ意味であった。

粒子の位置が  $x$  であるという状態  $|x\rangle$  の定義を思いだそう。位置の演算子  $\hat{x}$  の固有値  $x$  に属する固有ベクトルが  $|x\rangle$  である<sup>2</sup>。

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle. \quad (3.4.2)$$

$\hat{x}$  の固有値は連続的な値をとりうるので、その固有ベクトルの規格化は、 $\delta$  関数の規格化をする：

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'). \quad (3.4.3)$$

任意の状態  $|\psi\rangle$  を  $|x\rangle$  の重ねあわせで表す場合は、固有値  $x$  についての積分となる。

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(x) |x\rangle dx.$$

展開係数  $c(x)$  は、上の規格化条件を使うと、

$$\begin{aligned} \langle x'|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} c(x) \langle x'|x\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} c(x) \delta(x' - x) dx \\ &= c(x') \end{aligned}$$

<sup>1</sup>量子力学復習：一般に、状態が  $|\psi\rangle$  で与えられるときに測定をして状態  $|\phi\rangle$  を得る確率は、 $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$  に比例する。絶対値をとる前の  $\langle\phi|\psi\rangle$  は確率振幅と呼ばれる：確率 = |確率振幅|<sup>2</sup>。

<sup>2</sup>量子力学復習その2：物理量を表す演算子  $\hat{A}$  の固有ベクトル  $|\psi\rangle$  があつたとする： $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ 。状態が  $|\psi\rangle$  で表されるとき、物理量  $\hat{A}$  の測定をすると、その測定値は確実に固有値  $a$  となる。すなわち、 $\hat{A}$  の固有ベクトルが与える状態は  $\hat{A}$  の値が確定している状態である。

と求められる。すなわち、この展開係数  $c(x)$  が  $|\psi\rangle$  に対応する  $x$  表示の波動関数  $\psi(x)$  である：

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) |x\rangle dx. \quad (3.4.4)$$

さて、 $|\psi\rangle$  に対応する波動関数が  $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$  であることはわかったが、では、 $\hat{p}|\psi\rangle$  に対応する波動関数は何であろうか。もちろん、それは  $\langle x|\hat{p}|\psi\rangle$  であるが、これと  $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$  との関係が知りたいのである。

上の (3.4.4) に注意すると、

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \langle x|\hat{p} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') |x'\rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') \langle x|\hat{p}|x'\rangle dx' \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

となるので、 $\langle x|\hat{p}|x'\rangle$  を決定すればよい。これは、 $\hat{p}$  と  $\hat{x}$  の関係から求めることになる。そこで、正準交換関係  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  の両辺を  $\langle x|$  と  $|x'\rangle$  ではさめば、

$$\langle x|[\hat{x}, \hat{p}]|x'\rangle = i\hbar \langle x|x'\rangle.$$

すなわち、

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}|x'\rangle - \langle x|\hat{p}\hat{x}|x'\rangle = i\hbar \delta(x - x').$$

ここで、 $\langle x|\hat{x} = x\langle x|$ 、 $\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$  であることに注意すれば、

$$(x - x') \langle x|\hat{p}|x'\rangle = i\hbar \delta(x - x') \quad (3.4.6)$$

を得る。デルタ関数とその導関数に関する恒等式

$$(x - x') \delta'(x - x') = -\delta(x - x') \quad (3.4.7)$$

を思い出し<sup>3</sup>、上と比較すれば、

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar \delta'(x - x') \quad (3.4.8)$$

と考えるとよいことがわかる。 $\langle x|\hat{p}|x'\rangle$  が決まったので、これを (3.4.5) 式に代入すれば、

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') (-i\hbar \delta'(x - x')) dx' \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') \delta(x - x') dx' \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

<sup>3</sup>思い出し方：デルタ関数の恒等式  $x\delta(x) = 0$  の両辺を微分すれば、

$$\delta(x) + x\delta'(x) = 0$$

となり、 $\delta(x)$  を右辺に移項すれば上の式がでる。

が得られる。あるいは同じことであるが、任意の  $|\psi\rangle$  に対して、

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\psi\rangle \quad (3.4.10)$$

が成り立つ。

まとめると、 $|\psi\rangle$  に対応する波動関数を  $\psi(x)$  とすれば、 $\hat{p}|\psi\rangle$  には  $(\hbar/i) \partial\psi(x)/\partial x$  が対応する。こうして、シュレーディンガー方程式を作るときの置き換え、

$$p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

が導かれた。

さて、 $x$  表示の波動関数や運動量演算子が変わったので、調和振動子の基底状態  $|0\rangle$  に対応する波動関数 ( $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ ) を求めてみよう。  $|0\rangle$  に対する条件

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

より、

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x|\hat{a}|0\rangle \\ &= \langle x|\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}\right)|0\rangle \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|0\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|0\rangle. \end{aligned}$$

すなわち、 $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$  は、微分方程式

$$\frac{\partial\psi_0(x)}{\partial x} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x) \quad (3.4.11)$$

を満たさなければならない。解は直ちに求められて、

$$\psi_0(x) = C \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (3.4.12)$$

となる。(  $C$  は規格化の定数.) 励起状態も簡単に求められる。例えば、第一励起状態



$\psi_1(x) = \langle x|1\rangle$  は,

$$\begin{aligned}
 \psi_1(x) &= \langle x|\hat{a}^\dagger|0\rangle \\
 &= \langle x|\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}\right)|0\rangle \\
 &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|0\rangle \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\partial}{\partial x}\right)C\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \\
 &= C'x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)
 \end{aligned} \tag{3.4.13}$$

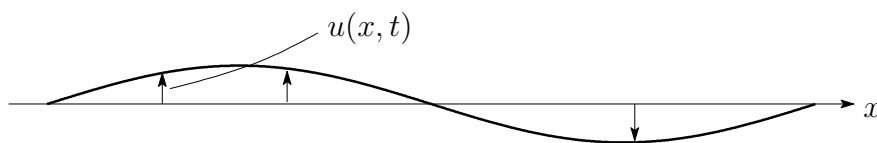
などと求められる。一般に、 $n$  番目の励起状態の波動関数は,

$$\begin{aligned}
 \psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \\
 &\propto \left(\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)
 \end{aligned} \tag{3.4.14}$$

で求められる。

## 第4章 弦の正準量子化

弦は空間が1次元の場の理論とみなすことができる。



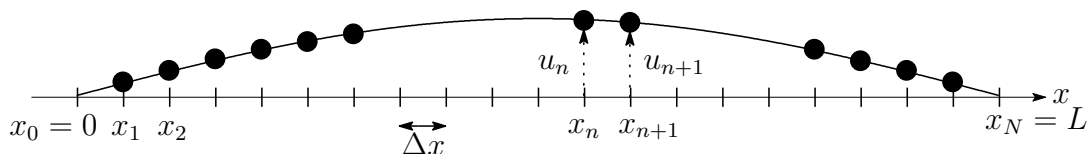
$x$ の各点ごとに変位（振幅） $u(x, t)$ が与えられており、それが時刻 $t$ とともに変化する。この振幅 $u(x, t)$ を場の変数と考えることができる。

### 4.1 古典論：弦の解析力学

$x$ 軸に横たわる長さ $L$ の弦を考える。弦は張力(tension) $T$ で張られている。弦の質量密度（質量線密度=単位長さあたりの質量）を $\sigma$ とする。

弦は両端で( $x = 0$ と $x = L$ )で固定されているものとする。すなわち、振幅を $u(x, t)$ とすれば、 $u(0, t) = u(L, t) = 0$ 。

弦は、物質が連続的に分布しているので、これまでの質点系の解析力学がすぐには使えない。そこで、この連続的な弦を離散化して考えることにする。つまり、弦を十分に細かく $N$ 等分に分割して、それぞれの素片を質点とみなすことにする。こうすれば質点系の理論が適用できる。最後に $N \rightarrow \infty$ の極限をとれば、連続的な質量分布が再現されるだろう。以下では、しばらくの間、 $N$ を大きいけれど有限の大きさのものとして話をする。



図のように、弦を $N$ 等分したときの $x$ 軸の位置を $x_n$ で表す。

$$x_n = \frac{nL}{N} \quad (n = 0, 1, \dots, N).$$

長さ $L$ の弦を $N$ 等分したので、一つの素片の長さ $\Delta x$ は、

$$\Delta x = x_{n+1} - x_n = \frac{L}{N} \quad (4.1.1)$$

で与えられる。このとき、一つの素片の質量  $\delta m$  は

$$\delta m = \sigma \Delta x \quad (4.1.2)$$

となる。こうして、離散化された弦は、質量  $\delta m$  の質点(素片)が  $x_n$  の位置ごとに  $N - 1$  個<sup>1</sup>存在する系として考えられる。 $x_n$  での質点の変位は振幅  $u(x, t)$  を使えば、 $u(x_n, t)$  で与えられる。これを、 $u_n$  で表すことにする：

$$u_n = u(x_n, t). \quad (4.1.3)$$

質点系として考えたとき、この  $u_n$  が座標変数(一般化座標)であると考えてよい。速度変数  $\dot{u}_n$  には、

$$\dot{u}_n = \frac{\partial}{\partial t} u(x_n, t). \quad (4.1.4)$$

が対応する。

#### 4.1.1 ラグランジアン, ラグランジアン密度

ラグランジアン  $L(u_1, u_2, \dots; \dot{u}_1, \dot{u}_2, \dots)$  を求めてみよう。そのためには、運動エネルギー  $K$  と位置エネルギー  $U$  がわかればよい。

$n$  番目の質点の運動エネルギーは、

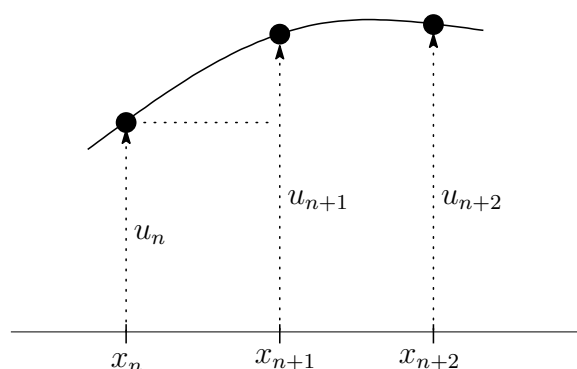
$$\frac{\delta m}{2} \dot{u}_n^2 = \frac{\sigma}{2} \dot{u}_n^2 \Delta x$$

で与えられるので、全運動エネルギーは、

$$K = \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\delta m}{2} \dot{u}_n^2 = \sum_{n=1}^{N-1} \frac{\sigma}{2} \dot{u}_n^2 \Delta x \quad (4.1.5)$$

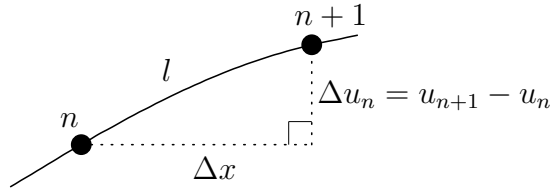
と求まる。

つぎに位置エネルギーを求めてみよう。図のような配置を考える。



<sup>1</sup>両端が固定されている弦なので、両端(の素片)は数えていない

$n$  番目の質点と  $n+1$  番目の質点の間に蓄えられた位置エネルギーを考えてみよう。



釣り合いの位置にいたときには二つの質点間の距離は  $\Delta x$  であった。これが、今の配置では図の長さ  $l$  にまで伸ばされている。張力  $T$  で引っ張られながら長さが  $\Delta x$  から  $l$  まで伸ばされたのであるから、位置エネルギーの増加分は、このときに加えられた仕事分、

$$\Delta U_n = T \times (l - \Delta x)$$

で与えられる。 $\Delta x$  は十分に小さいので、図の  $l$  は直角三角形の斜辺と見なしてよい(他の二辺が、 $\Delta x$  と  $\Delta u_n$ )。また、(図では強調して描いているが)  $\Delta u_n \ll \Delta x$  と考えてよいので、 $l$  は、

$$\begin{aligned} l &= \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta u_n)^2} \\ &= \Delta x \left[ 1 + \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \right]^{1/2} \\ &= \Delta x \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \right] \\ &= \Delta x + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \Delta x \end{aligned}$$

と近似できる<sup>2</sup>。こうして、 $n$  番目と  $n+1$  番目の質点の間に蓄えられた位置エネルギー  $\Delta U_n$  は、

$$\Delta U_n = \frac{T}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \Delta x$$

と求められる。したがって、全位置エネルギーは

$$U = \sum_{n=0}^{N-1} \frac{T}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \Delta x \quad (4.1.6)$$

で与えられる。結局ラグランジアンは、

$$L = K - U = \sum_n \left[ \frac{\sigma}{2} \dot{u}_n^2 - \frac{T}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \right] \Delta x \quad (4.1.7)$$

<sup>2</sup>一般に、 $|x| \ll 1$  のときは  $(1+x)^\alpha \approx 1 + \alpha x$  と近似できる。

と求められる。一端この段階で、 $N \rightarrow \infty$ の極限を考えてみよう。このとき、 $\Delta x \rightarrow 0$ であり、 $\dot{u}_n \rightarrow \partial u(x, t)/\partial t$ ,  $\Delta u_n/\Delta x \rightarrow \partial u(x, t)/\partial x$ ,  $\sum_n \Delta x \rightarrow \int dx$ などに注意すると、

$$L = \int_0^L \left[ \frac{\sigma}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \frac{T}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] dx \quad (4.1.8)$$

を得る。右辺の被積分関数をラグランジアン密度とって、 $\mathcal{L}$ で表す：

$$L = \int_0^L \mathcal{L} dx, \quad (4.1.9)$$

$$\mathcal{L} = \frac{\sigma}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \frac{T}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2. \quad (4.1.10)$$

#### 4.1.2 最小作用の原理と運動方程式

ラグランジアンが求まったので、作用積分も決まる：

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_1}^{t_2} L dt \\ &= \int dt dx \mathcal{L} \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \left[ \frac{\sigma}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \frac{T}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

最小作用の原理から運動方程式を求めてみよう。 $u(x, t) \rightarrow u(x, t) + \delta u(x, t)$ なる変分<sup>3</sup>のもとで、 $S$ の変分を考えると、

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \delta \left[ \frac{\sigma}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \frac{T}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \left[ \sigma \frac{\partial u}{\partial t} \delta \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right) - T \frac{\partial u}{\partial x} \delta \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \left[ \sigma \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t} \delta u - T \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \delta u \right] \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

となる。ここで、 $\delta u(x, t_1) = \delta u(x, t_2) = 0$ ,  $\delta u(0, t) = \delta u(L, t) = 0$ に注意して部分積分を実行すると、

$$\delta S = \int dt dx \left[ -\sigma \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + T \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right] \delta u(x, t). \quad (4.1.13)$$

<sup>3</sup> いつものように、 $t = t_1, t_2$ では $u$ を動かさない： $\delta u(x, t_1) = \delta u(x, t_2) = 0$ .

したがって、任意の  $\delta u(x, t)$  のもとで  $\delta S = 0$  となるためには、 $u(x, t)$  が

$$\sigma \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - T \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (4.1.14)$$

を満たさなければならない。これが、弦に対する運動方程式である。  $c = \sqrt{T/\sigma}$  とおけば、上の方程式は、

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (4.1.15)$$

ともかける。この形の式は、波動方程式と呼ばれ、波の速さが  $c$  の波動を記述する式である。実際、この偏微分方程式の一般解は、容易に確かめられるように、

$$u(x, t) = f(x - ct) + g(x + ct) \quad (4.1.16)$$

で与えられる (D'Alembert の解)。ここで、 $f(x), g(x)$  は任意の 1 変数関数である。 $f(x - ct)$  は速さ  $c$  で右向き ( $x$  軸正の向き) に進む波を表し、 $g(x + ct)$  は速さ  $c$  で左向き ( $x$  軸負の向き) に進む波を表している。

**問 4.1**  $u(x, t)$  が (4.1.16) の形で表されるならば、波動方程式 (4.1.15) を満たすことを確かめよ。

### 4.1.3 共役運動量とハミルトニアン・ハミルトニアン密度

運動量変数を求めるため、再び、離散的な場合のラグランジアン (4.1.7) に戻ろう。これより、座標変数  $u_n$  に共役な運動量  $p_n$  は、

$$p_n = \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_n} = \sigma \dot{u}_n \Delta x \quad (4.1.17)$$

となる。この段階で  $N \rightarrow \infty$  の極限をとろうとすると、 $\Delta x \rightarrow 0$  となるので、 $p_n \rightarrow 0$  となってしまう、運動量変数がなくなってしまう。そこで、 $p_n$  から  $\Delta x$  をはずしたものを  $\pi_n$  とする：

$$\pi_n = \sigma \dot{u}_n, \quad (4.1.18)$$

$$p_n = \pi_n \Delta x \quad (4.1.19)$$

こうすれば、 $N \rightarrow \infty$  の極限で、 $\pi_n$  は  $\pi_n \rightarrow \sigma \partial u(x, t) / \partial t$  となって有限の値に収束する。

次に、ハミルトニアンを求めよう。いつものように、 $p_n$  と  $u_n$  で表せば、

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_n p_n \dot{u}_n - L \\
 &= \sum_n \sigma \dot{u}_n^2 \Delta x - \sum_n \left[ \frac{\sigma}{2} \dot{u}_n^2 - \frac{T}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \right] \Delta x \\
 &= \sum_n \left[ \frac{\sigma}{2} \dot{u}_n^2 + \frac{T}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \right] \Delta x \\
 &= \sum_n \left[ \frac{p_n^2}{2\sigma \Delta x} + \frac{T}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \right] \Delta x
 \end{aligned} \tag{4.1.20}$$

となる。これもやはり  $N \rightarrow \infty$  の極限をとるのにはなじまない形をしている。そこで、ハミルトニアンを、 $p_n$  と  $u_n$  の関数というよりは、 $\pi_n$  と  $u_n$  の関数として表し直せば、

$$H = \sum_n \left[ \frac{\pi_n^2}{2\sigma} + \frac{T}{2} \left( \frac{\Delta u_n}{\Delta x} \right)^2 \right] \Delta x \tag{4.1.21}$$

となる。ここまで来れば直ちに  $N \rightarrow \infty$  の極限がとれ、連続極限でのハミルトニアンは、

$$H = \int_0^L \left[ \frac{\pi^2}{2\sigma} + \frac{T}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right] dx \tag{4.1.22}$$

で与えられる。右辺の被積分関数をハミルトニアン密度と呼び、 $\mathcal{H}$  で表す：

$$H = \int_0^L \mathcal{H} dx, \tag{4.1.23}$$

$$\mathcal{H} = \frac{\pi^2}{2\sigma} + \frac{T}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2. \tag{4.1.24}$$

ここで、 $\pi$  は、 $\pi_n$  の極限として表したものである： $\pi_n \rightarrow \pi(x, t)$ 。  $\pi_n = \sigma \dot{u}_n$  に対応する式は、

$$\pi(x, t) = \sigma \frac{\partial u(x, t)}{\partial t}$$

となる。また、 $\pi_n \Delta x = p_n = \partial L / \partial \dot{u}_n$  に対応する連続極限での式は、ラグランジアン密度  $\mathcal{L}$  を使って、

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \tag{4.1.25}$$

で表される。ただしここで、 $\dot{u} = \partial u / \partial t$  とした。

#### 4.1.4 Poisson 括弧

正準変数間のポアソン括弧をみてみよう．離散化バージョンに戻って考えれば，

$$\{u_n, u_m\}_{\text{Pb}} = 0, \quad (4.1.26)$$

$$\{p_n, p_m\}_{\text{Pb}} = 0, \quad (4.1.27)$$

$$\{u_n, p_m\}_{\text{Pb}} = \delta_{nm}, \quad (4.1.28)$$

である． $p_n$  を  $\pi_n$  で表し直せば，

$$\{u_n, u_m\}_{\text{Pb}} = 0, \quad (4.1.29)$$

$$\{\pi_n, \pi_m\}_{\text{Pb}} = 0, \quad (4.1.30)$$

$$\{u_n, \pi_m\}_{\text{Pb}} = \frac{1}{\Delta x} \delta_{nm}, \quad (4.1.31)$$

となる．1番目と2番目の式の連続極限は直ちにわかるが，3番目の式の右辺の極限は何であろうか． $N \rightarrow \infty$  ( $\Delta x \rightarrow 0$ ) のときに， $x_n \rightarrow x$ ,  $x_m \rightarrow x'$  とすれば，

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta x} \delta_{nm} = \begin{cases} 0 & (x \neq x') \\ +\infty & (x = x') \end{cases} \quad (4.1.32)$$

となる．連続変数  $x$ ,  $x'$  の関数でこのような性質を持つものは，Dirac のデルタ関数である．定数倍の不定性を考えれば，

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta x} \delta_{nm} = C \delta(x - x').$$

比例定数  $C$  を決めるため，両辺を  $x$  について積分すると，

$$\text{右辺} = \int C \delta(x - x') dx = C.$$

一方，左辺は，離散化段階の和 ( $n$  についての和) の極限が積分であることから，

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \int dx \left[ \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta x} \delta_{nm} \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_n \Delta x \left[ \frac{1}{\Delta x} \delta_{nm} \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_n \delta_{nm} \\ &= 1 \end{aligned}$$

となり，結局  $C = 1$  が導かれる．つまり，

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta x} \delta_{nm} = \delta(x - x'). \quad (4.1.33)$$



以上より、連続極限での正準変数  $(\pi(x, t), u(x, t))$  間の Poisson 括弧は以下のように与えられる。

$$\{u(x, t), u(x', t)\}_{\text{pb}} = 0, \quad (4.1.34)$$

$$\{\pi(x, t), \pi(x', t)\}_{\text{pb}} = 0, \quad (4.1.35)$$

$$\{u(x, t), \pi(x', t)\}_{\text{pb}} = \delta(x - x'). \quad (4.1.36)$$

#### 4.1.5 空間座標＝自由度のラベル

ここまで、離散化の手続きを考えることで連続的な分布をもつ弦に対する解析力学を考えてきた。この手続きを振り返ると次のようなことに思い当たる。

離散化した段階での座標変数は  $u_n$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) であった。これが、通常の質点系での座標変数  $q_n$  に対応する。ここで、 $n$  は自由度を区別するためのラベルである（例えば、 $n = 1$  は1番目の粒子の  $x$  座標を表し、 $n = 2, 3$  は1番目の粒子の  $y$  座標と  $z$  座標、 $n = 4, 5, 6$  は2番目の粒子の  $x, y, z$  座標、 $\dots$  など）。ところが、対応する  $u_n$  の  $n$  は  $x$  軸上の点  $x_n$  を表していた： $u_n = u(x_n, t)$ 。つまり、弦では自由度のラベルは  $x$  座標である。空間 ( $x$  軸) の各点に力学変数  $u(x)$  が割り当てられており、それが時間発展 ( $u(x, t)$ ) しているのである。

一般に、場の理論においては、(電場や磁場のように) 場は空間と時間の関数である： $\phi(x, y, z; t)$ 。空間の各点ごとに場の変数  $\phi$  が力学変数として与えられており、その時間発展を考えるのが場の理論である。空間点  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  ごとに力学変数があるのであるから、この  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  が自由度のラベルである。

重要なのでくり返す。質点の力学では、 $\mathbf{x} = (x, y, z)$  は粒子の位置座標を表す力学変数であったが、場の理論では単なる自由度のラベルに過ぎない。 $(q_n$  の  $n$  のようなもの。) ただし、質点系の自由度のラベルはとびとびの値をとるが、場の理論の自由度のラベルは連続的な値をとりうる。<sup>4</sup> これらのことは十分に意識しておこう。このような「考え方の転換」をきちんとしておきさえすれば、きっと場の理論の学習は楽しいものになるだろう。

質点系

$$q_n(t)$$



自由度のラベル  
(とびとびの値)

場の理論

$$\phi(\mathbf{x}, t)$$



自由度のラベル  
(連続的な値をとる)

<sup>4</sup> これに応じて、自由度についての足し算は、質点系では  $\sum_n$  だったものが、場の理論では、積分  $\int d^3\mathbf{x}$  になる。したがってまた、質点系でのクロネッカーデルタ  $\delta_{mn}$  は場の理論ではディラックのデルタ関数  $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  になる。

## 4.2 弦の量子化

正準量子化とは、正準変数を演算子に置き換え（したがって、それらの関数として表されるハミルトニアンも演算子になる）、それら正準変数演算子の間に正準交換関係を設定することであった。

### 4.2.1 正準交換関係

交換子積は対応する古典力学の Poisson 括弧に  $i\hbar$  をつけたものであった。量子化に伴い、 $u(x, t)$  は演算子  $\hat{u}(x, t)$  に、 $\pi(x, t)$  は演算子  $\hat{\pi}(x, t)$  に変わる。これらの間の (同時刻) 交換関係は、

$$[\hat{u}(x, t), \hat{u}(x', t)] = 0, \quad (4.2.1)$$

$$[\hat{\pi}(x, t), \hat{\pi}(x', t)] = 0, \quad (4.2.2)$$

$$[\hat{u}(x, t), \hat{\pi}(x', t)] = i\hbar\delta(x - x'), \quad (4.2.3)$$

で与えられる。

### 4.2.2 Heisenberg 方程式

ハミルトニアン演算子  $\hat{H}$  は、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int_0^L \hat{\mathcal{H}} dx, \\ \hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hat{\pi}(x, t)^2}{2\sigma} + \frac{T}{2} \left( \frac{\partial \hat{u}(x, t)}{\partial x} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.2.4)$$

で与えられる。

このハミルトニアンを用いることで、(Heisenberg picture における) 演算子  $\hat{O}(t)$  に対する Heisenberg の運動方程式も、

$$i\hbar \frac{d\hat{O}(t)}{dt} = [\hat{O}(t), \hat{H}] \quad (4.2.5)$$

で表される。

Heisenberg の運動方程式を使って,  $\hat{u}(x, t)$  や  $\hat{\pi}(x, t)$  の時間発展を調べてみよう.

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \hat{u}(x, t)}{\partial t} &= [\hat{u}(x, t), \hat{H}] \\
&= \left[ \hat{u}(x, t), \int_0^L \mathcal{H}(y) dy \right] \\
&= \int_0^L dy [\hat{u}(x, t), \hat{\mathcal{H}}(y)] \\
&= \int_0^L dy \left[ \hat{u}(x, t), \frac{\hat{\pi}(y, t)^2}{2\sigma} + \frac{T}{2} \left( \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \right)^2 \right] \\
&= \frac{1}{2\sigma} \int_0^L dy [\hat{u}(x, t), \hat{\pi}(y, t)^2] + \frac{T}{2} \int_0^L dy \left[ \hat{u}(x, t), \left( \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \right)^2 \right]. \quad (4.2.6)
\end{aligned}$$

ここで, 第一項と第二項の被積分関数を求めると,

$$\begin{aligned}
[\hat{u}(x, t), \hat{\pi}(y, t)^2] &= [\hat{u}(x, t), \hat{\pi}(y, t)]\hat{\pi}(y, t) + \hat{\pi}(y, t)[\hat{u}(x, t), \hat{\pi}(y, t)] \\
&= 2i\hbar\delta(x - y)\hat{\pi}(y, t), \quad (4.2.7)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[ \hat{u}(x, t), \left( \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \right)^2 \right] &= \left[ \hat{u}(x, t), \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \right] \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} + \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \left[ \hat{u}(x, t), \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \right] \\
&= \frac{\partial}{\partial y} [\hat{u}(x, t), \hat{u}(y, t)] \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} + \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} [\hat{u}(x, t), \hat{u}(y, t)] \\
&= 0. \quad (4.2.8)
\end{aligned}$$

これらの結果を代入すると,

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \hat{u}(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{2\sigma} \int_0^L dy 2i\hbar\delta(x - y)\hat{\pi}(y, t) \\
&= \frac{i\hbar}{\sigma} \hat{\pi}(x, t).
\end{aligned}$$

すなわち,

$$\frac{\partial \hat{u}(x, t)}{\partial t} = \frac{\hat{\pi}(x, t)}{\sigma}. \quad (4.2.9)$$

同様に計算すると,

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \hat{\pi}(x, t)}{\partial t} &= \int_0^L dy [\hat{\pi}(x, t), \hat{\mathcal{H}}(y)] \\
&= \frac{1}{2\sigma} \int_0^L dy [\hat{\pi}(x, t), \hat{\pi}(y, t)^2] + \frac{T}{2} \int_0^L dy \left[ \hat{\pi}(x, t), \left( \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (4.2.10)
\end{aligned}$$

$$= \frac{T}{2} \int_0^L dy 2 \frac{\partial \hat{u}(y, t)}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} [\hat{\pi}(x, t), \hat{u}(y, t)] \quad (4.2.11)$$

$$= i\hbar T \frac{\partial^2 \hat{u}(x, t)}{\partial x^2}. \quad (4.2.12)$$

すなわち,

$$\frac{\partial \hat{\pi}(x, t)}{\partial t} = T \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}. \quad (4.2.13)$$

(4.2.9) を  $t$  について微分して (4.2.13) を使えば,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \hat{u}(x, t)}{\partial t^2} &= \frac{1}{\sigma} \frac{\partial \hat{\pi}(x, t)}{\partial x} \\ &= \frac{T}{\sigma} \frac{\partial^2 \hat{u}(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned}$$

となる. すなわち, 弦に対する運動方程式 (波動方程式)

$$\sigma \frac{\partial^2 \hat{u}(x, t)}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 \hat{u}(x, t)}{\partial x^2} \quad (4.2.14)$$

が演算子レベルで導かれた.

**問 4.2** (4.2.10) から (4.2.11) への変形を説明せよ.

**問 4.3** (4.2.11) から (4.2.12) への変形を説明せよ.

### 4.3 正準量子化のまとめ

弦の正準量子化を考えるにあたり, ここまでは, まず解析力学を構築するのに, 離散化の手続きとその連続極限を考えた.

連続極限の結果だけを書けばつぎのようにまとめられる. ただし, 以下では, 弦とは限らない場  $\phi(x, t)$  で説明する.

**[ラグランジアン密度]**  $\phi$  とその導関数を変数とするラグランジアン密度

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}, \phi') \quad (4.3.1)$$

を導入する. ただしここで,  $\dot{\phi} = \partial\phi/\partial t$ ,  $\phi' = \partial\phi/\partial x$  とした. このラグランジアン密度のもと, 最小作用の原理

$$\delta S = \delta \int dt dx \mathcal{L} = 0$$

から,  $\phi$  に対する運動方程式 (場の方程式) が導かれる.

**[正準運動量]**  $\mathcal{L}$  から  $\phi$  に共役な正準運動量  $\pi$  を定義する:

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \quad (4.3.2)$$

[ハミルトニアン密度・ハミルトニアン]

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\phi} - \mathcal{L} \quad (4.3.3)$$

によって、ハミルトニアン密度  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\pi, \phi)$  を導入する。

ハミルトニアンはハミルトニアン密度の空間積分で与えられる：

$$H = \int dx \mathcal{H}. \quad (4.3.4)$$

[ポアッソン括弧] 正準変数  $\phi, \pi$  の間にポアッソン括弧を導入する：

$$\{\phi(x, t), \phi(y, t)\}_{\text{pb}} = 0, \quad (4.3.5)$$

$$\{\pi(x, t), \pi(y, t)\}_{\text{pb}} = 0, \quad (4.3.6)$$

$$\{\phi(x, t), \pi(y, t)\}_{\text{pb}} = \delta(x - y). \quad (4.3.7)$$

[量子化] 正準変数を演算子に昇格させ ( $\phi \rightarrow \hat{\phi}, \pi \rightarrow \hat{\pi}$ ) それらの間に正準交換関係 (CCR) を課す：

$$[\hat{\phi}(x, t), \hat{\phi}(y, t)] = 0, \quad (4.3.8)$$

$$[\hat{\pi}(x, t), \hat{\pi}(y, t)] = 0, \quad (4.3.9)$$

$$[\hat{\phi}(x, t), \hat{\pi}(y, t)] = i\hbar \delta(x - y). \quad (4.3.10)$$

これに応じて、ハミルトニアン密度やハミルトニアンも演算子に昇格される。

$$\mathcal{H}(\pi, \phi) \rightarrow \hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}(\hat{\pi}, \hat{\phi}) \quad (4.3.11)$$

$$H \rightarrow \hat{H} = \int dx \hat{\mathcal{H}}. \quad (4.3.12)$$

[時間発展] Heisenberg picture を採用すれば、演算子の時間発展は、Heisenberg 方程式、

$$i\hbar \frac{d\hat{O}(t)}{dt} = [\hat{O}(t), \hat{H}] \quad (4.3.13)$$

によって記述される。

上では、簡単のため、場としては1次元の場  $\phi(x, t)$  で考えたが、3次元空間の場  $\phi(x, y, z, t) = \phi(\mathbf{x}, t)$  の場合でも、全く同様に考えることができる。(容易に拡張できる.)

# 第5章 シュレーディンガー場の量子論

## 5.1 シュレーディンガー場

1粒子の量子力学では、粒子を量子化することにより波動関数  $\psi(\mathbf{x}, t)$  が現れた (第一量子化). この波動関数が満たす式がシュレーディンガー方程式 (シュレーディンガーの波動方程式),

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.1.1)$$

であった.

第二量子化では、この波動関数  $\psi(\mathbf{x}, t)$  を古典的な波動場とみなして、これを量子化する. すなわち、この立場では、 $\psi(\mathbf{x}, t)$  はもはや量子力学の状態を表す波動関数ではなく単なる波動の場である. この場を、シュレーディンガー場と呼ぶことにする. これから見えていくように、古典的なシュレーディンガー場を量子化することにより、再び、粒子性が現れることになる.

以下では、上のシュレーディンガー方程式の右辺に現れる微分演算子を  $h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right)$  で表すことにする<sup>1</sup>:

$$h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}). \quad (5.1.2)$$

この  $h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right)$  を使えば、シュレーディンガー場が満たす波動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.1.3)$$

と表される.

**(Remark)** 量子力学でも、互いに相互作用をしない非常に多数 ( $N$  個) の同種粒子が、すべて一つの1粒子状態  $\psi(\mathbf{x}, t)$  にある状況を考えると、古典的な波動のようなものが考えられる.

例えば、1個の粒子に注目すれば、

$$\int_V |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3 \mathbf{x}$$

---

<sup>1</sup>  $h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right)$  は、1粒子の量子力学ではハミルトニアン演算子であったものだが、今の場合は、あくまでも  $c$  数関数に作用する微分演算子に過ぎない.

はその1個の粒子が体積  $V$  内に見いだされる確率を表す。しかし、 $N$  個もの粒子がすべてこの状態にあるのであるから、この確率を  $N$  倍したものは ( $N$  が非常に大きいので)  $V$  内に存在する粒子数にほぼ等しいと考えられる。 ( $N$  が 100 億、上の確率が 0.02 であれば、確実に 2 億個ほどの粒子が  $V$  内に存在しているものと判断できる。) したがって、このような場合、 $\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \propto$  個数密度 とみなせる。

そこで、 $\psi$  を

$$N = \int |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x} \quad (5.1.4)$$

と規格化し直しておけば、

$$\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \text{個数密度} \quad (5.1.5)$$

が成り立つ。すなわち、このような状況では、 $\psi(\mathbf{x}, t)$  は、古典的な波動のようなものと考えられる。

また、規格化 (5.1.4) のもとでは、

$$\langle h \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} = \text{エネルギー} \quad (5.1.6)$$

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} = \text{運動量} \quad (5.1.7)$$

なども成り立つ。すなわち、1 粒子の量子力学では、例えば  $\langle h \rangle$  はエネルギーの期待値 (平均的な値) であったが、今の場合は、その  $N$  倍 (1 個当たりの平均的なエネルギー  $\times N$ ) であるので、エネルギーの値そのものと言ってよい。

## 5.2 解析力学

### 5.2.1 ラグランジアン密度

場の量子化を実行するためにはまず、場の解析力学が必要であった。そのためにはまず、シュレーディンガーの波動方程式 (5.1.3) が Euler-Lagrange 方程式として出てくるラグランジアン密度が必要である。すなわち、

$$\delta S = 0, \quad S = \int L dt = \int \mathcal{L} d^3\mathbf{x} dt \quad (5.2.1)$$

なる最小作用の条件から、シュレーディンガーの波動方程式 (5.1.3) が出てくるようなラグランジアン密度  $\mathcal{L}$  が必要である。

容易にわかるように、そのようなラグランジアン密度としては、次のものを考えればよい：

$$\mathcal{L} = \psi^*(\mathbf{x}, t) \left[ i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \psi(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (5.2.2)$$

この  $\mathcal{L}$  のもと，最小作用の原理からシュレーディンガー方程式が実際に導かれることを示すことができる．しかし，その前に少し注意を述べよう．

今考えている変数は複素数  $\psi$  である．したがって， $\delta S = 0$  を考えるときには， $\psi$  の実部と虚部の変分を独立なものとして考えることになる．すなわち，実部，虚部をそれぞれ  $\psi_1, \psi_2$ ,

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_1 + i\psi_2 \\ \psi^* &= \psi_1 - i\psi_2\end{aligned}$$

とすると，

$$\begin{aligned}\delta S &= \int \{A \delta\psi_1 + B \delta\psi_2\} d^3\mathbf{x} dt = 0 \\ \Rightarrow A &= 0, B = 0.\end{aligned}\tag{5.2.3}$$

などとしなければならない．( $A = 0, B = 0$  が Euler-Lagrange 方程式) しかしながら，わざわざ実部と虚部に分けるのは面倒である．そこで，

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \frac{1}{2}(\psi + \psi^*) \\ \psi_2 &= \frac{1}{2i}(\psi - \psi^*)\end{aligned}$$

となることに注意すれば，上の  $\delta S$  の括弧内は，

$$\begin{aligned}A \delta\psi_1 + B \delta\psi_2 &= A \frac{1}{2}(\delta\psi + \delta\psi^*) + B \frac{1}{2i}(\delta\psi - \delta\psi^*) \\ &= \frac{1}{2}(A - iB) \delta\psi + \frac{1}{2}(A + iB) \delta\psi^*\end{aligned}$$

と変形できる．この結果をみると， $\delta\psi$  と  $\delta\psi^*$  をあたかも独立な変分だと考えて  $\delta S = 0$  とすれば，

$$\begin{cases} A - iB = 0 \\ A + iB = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = 0 \\ B = 0 \end{cases}\tag{5.2.4}$$

と正しい結果が導かれることがわかる．こうして，複素数の変数を扱うときには，(本当は  $\psi$  と  $\psi^*$  は独立ではないのであるが)  $\psi$  と  $\psi^*$  を独立な変数として変分をとることで正しい運動方程式が導かれることがわかった．そこで，以下では， $\psi$  と  $\psi^*$  を独立な変数として扱う．

さて， $\psi$  と  $\psi^*$  を独立な変数として，ラグランジアン密度 (5.2.2) のもとでの作用  $S$ ，

$$S = \int \mathcal{L} d^3\mathbf{x} dt = \int \psi^* \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \right] \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} dt\tag{5.2.5}$$



の変分を考え、運動方程式を導こう：

$$0 = \delta S = \int \delta\psi^*(\mathbf{x}, t) \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \right] \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} dt + \int \psi^*(\mathbf{x}, t) \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \right] \delta\psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} dt. \quad (5.2.6)$$

$\delta\psi^*$  の係数から直ちに、

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \right] \psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (5.2.7)$$

が導かれる。これは、確かに、シュレーディンガー場の方程式 (5.1.3) である。では、 $\delta\psi$  の係数からはどうであろうか。(5.2.6) 式中の  $\delta\psi$  には微分演算子がかかっているの、このままではだめで、部分積分をしなければならない：

$$\begin{aligned} (5.2.6) \text{ 右辺第二項} &= \int \psi^* \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\psi - \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \delta\psi + V \delta\psi \right) \right] d^3\mathbf{x} dt \\ &= \int \left[ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V \psi^* \right) \right] \delta\psi d^3\mathbf{x} dt \\ &= \int \left[ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \psi^* \right] \delta\psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} dt. \end{aligned} \quad (5.2.8)$$

もちろんここで、部分積分による表面項はいつものように 0 となることを用いた。これより、 $\delta\psi$  の変分から出る運動方程式は、

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \psi^*(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (5.2.9)$$

である。この式は、(5.2.7) の複素共役になっているので、これもまた  $\psi^*$  に対する正しいシュレーディンガー場の方程式である。

## 5.2.2 共役運動量

ラグランジアン密度 (5.2.2),

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^*(\mathbf{x}, t) \dot{\psi}(\mathbf{x}, t) - \psi^*(\mathbf{x}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (5.2.10)$$

が得られたので、共役運動量も計算できる：

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar \psi^*. \quad (5.2.11)$$

$\psi$  と  $\psi^*$  を独立な変数として扱っている今の場合、この  $\pi$  はもちろん  $\psi$  に共役な運動量である。では、 $\psi^*$  に共役な運動量はどうなるかということ、 $\mathcal{L}$  に  $\dot{\psi}^*$  が含まれていないので、 $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} = 0$  となってしまう。しかし、 $\psi$  に共役な運動量が  $\pi = i\hbar \psi^*$  であったので、 $\psi^*$  を座標変数とは考えずに運動量変数だと考えれば、あらためて、 $\psi^*$  の共役運動量というものは必要ないだろう<sup>2</sup>。

<sup>2</sup> このような考え方で問題がないことは、この考えのもとで定義したポアソン括弧を用いて、ハミルトンの運動方程式からもとのシュレーディンガー場の方程式が再現されることを示せばよい。

### 5.2.3 ハミルトニアン

共役運動量が求まったので，ハミルトニアン密度も決まる：

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \pi \dot{\psi} - \mathcal{L} \\ &= i\hbar\psi^* \dot{\psi} - \psi^* (i\hbar\dot{\psi} - h(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}) \psi) \\ &= \psi^* h(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}) \psi.\end{aligned}\tag{5.2.12}$$

したがって，また，ハミルトニアンは，

$$H = \int \mathcal{H} d^3\mathbf{x} = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) h(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x}\tag{5.2.13}$$

で与えられる．右辺が量子力学でのハミルトニアンの期待値  $\langle h \rangle$  の形をしていることに注意しよう．

### 5.2.4 ポアッソン括弧

正準変数間のポアッソン括弧は，

$$\begin{aligned}\{\psi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} &= \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \\ \{\psi(\mathbf{x}, t), \psi(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} &= \{\pi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = 0,\end{aligned}\tag{5.2.14}$$

で与えられる． $\pi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\psi^*(\mathbf{x}, t)$  より， $\pi$  の代わりに  $\psi^*$  を使えば，

$$\begin{aligned}i\hbar\{\psi(\mathbf{x}, t), \psi^*(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} &= \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \\ \{\psi(\mathbf{x}, t), \psi(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} &= \{\psi^*(\mathbf{x}, t), \psi^*(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = 0,\end{aligned}\tag{5.2.15}$$

## 5.3 量子論

### 5.3.1 正準量子化

量子論に移るには，これまで古典的な正準変数だったものを演算子に昇格させる：

$$\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}(\mathbf{x}, t),\tag{5.3.1}$$

$$\pi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\pi}(\mathbf{x}, t).\tag{5.3.2}$$

また， $\psi$  の複素共役  $\psi^*$  は，演算子に昇格させた場合はエルミート共役になる：

$$\psi^*(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t).\tag{5.3.3}$$

したがって，関係式  $\pi = i\hbar\psi^*$  も

$$\hat{\pi}(\mathbf{x}, t) = i\hbar\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t)$$

と表される．

### 正準交換関係

ハットを付けただけではどういう演算子かわからない。次の正準交換関係を要請してはじめて演算子としての意味を持つことになる：

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}(\mathbf{y}, t)] &= i\hbar \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \\ [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}(\mathbf{y}, t)] &= [\hat{\pi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}(\mathbf{y}, t)] = 0. \end{aligned} \quad (5.3.4)$$

あるいは、 $\hat{\pi}$ の代わりに $\hat{\psi}^\dagger$ を使えば、

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] &= \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \\ [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}(\mathbf{y}, t)] &= [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] = 0 \end{aligned} \quad (5.3.5)$$

となる。

### ハミルトニアン演算子

正準変数が演算子に昇格したので、それらに応じて、ハミルトニアンも次のようなハミルトニアン演算子になる： $H \rightarrow \hat{H}$ ,

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x}. \quad (5.3.6)$$

### ハイゼンベルク方程式

演算子 $\hat{O}$ の時間発展は、ハイゼンベルク方程式

$$i\hbar \dot{\hat{O}} = [\hat{O}, \hat{H}] \quad (5.3.7)$$

で与えられる。

$\hat{\psi}$ と $\hat{\psi}^\dagger$ に対するハイゼンベルク方程式を計算して、シュレーディンガー方程式が再現されるかどうか確認してみよう。

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{\psi}}(\mathbf{x}, t) &= [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{H}] \\ &= \left[ \hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) d^3 \mathbf{y} \right] \\ &= \int d^3 \mathbf{y} \left[ \hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) \right] \\ &= \int d^3 \mathbf{y} \left\{ [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) \right. \\ &\quad \left. + \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), h\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t)] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int d^3\mathbf{y} \left\{ [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) \right. \\
&\quad \left. + \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}(\mathbf{y}, t)] \right\} \\
&= \int d^3\mathbf{y} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) \\
&= h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t). \tag{5.3.8}
\end{aligned}$$

同様に,

$$\begin{aligned}
i\hbar \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) &= [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{H}] \\
&= \left[ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) d^3\mathbf{y} \right] \\
&= \int d^3\mathbf{y} \left[ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) \right] \\
&= \int d^3\mathbf{y} \left\{ [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) \right. \\
&\quad \left. + \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t)] \right\} \\
&= \int d^3\mathbf{y} \left\{ [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}(\mathbf{y}, t) \right. \\
&\quad \left. + \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}(\mathbf{y}, t)] \right\} \\
&= - \int d^3\mathbf{y} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\
&= - \int d^3\mathbf{y} \left\{ h\left(-\frac{\partial}{\partial\mathbf{y}}, \mathbf{y}\right) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t) \right\} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\
&= -h\left(-\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \\
&= -h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t). \tag{5.3.9}
\end{aligned}$$

(5.3.8) と (5.3.9) を整理すれば,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \tag{5.3.10}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = h\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \tag{5.3.11}$$

となる。これらは、まさに、シュレーディンガー場が満たすべき方程式である。すなわち、古典論での (5.2.7), (5.2.9) において、場の変数  $\psi$  と  $\psi^*$  を対応する演算子  $\hat{\psi}$ ,  $\hat{\psi}^\dagger$  に置き換えたものになっている<sup>3</sup>。

<sup>3</sup> この結果は、今の場合、必ずしも自明なことではない。というのも、共役運動量を定義するときに、 $\psi$  に対するものしか導入しなかったことを思い出そう。  $\partial\mathcal{L}/\partial\dot{\psi}^* = 0$  であったため、敢えて、 $\psi^*$  の共役運動量は定義せず、そのかわり  $\psi^*$  は  $\psi$  の共役運動量 (の  $i\hbar$  倍) として解釈した。このような「ルール違反」をしたら普通はその結果は保証できない。しかし、今の場合は、Heisenberg 方程式からもとのシュレーディンガー方程式が成り立つことを直接確かめることができたので、われわれの対処が正当化されたことになる。

(Remark) 上の  $\hat{\psi}$  と  $\hat{\psi}^\dagger$  に対する Heisenberg 方程式の計算では、各ステップを丁寧に書いたつもりであるが、念のため、ここでもう少し詳しく解説しておこう。

ここでは、(5.3.8) 式の計算を説明する。

### (5.3.8) の説明

#### 2 番目の等号 (すなわち、1 行目から 2 行目への変形)

ハミルトニアン演算子  $\hat{H}$  に対して定義式 (5.3.6) を代入しただけ。ただし、文字  $\mathbf{x}$  が使用中だったので、代入するにあたっては、積分変数として  $\mathbf{y}$  を使った。

#### 3 番目の等号

交換子の線形性を用いて、 $\mathbf{y}$  積分を交換子の外に出した。

#### 4 番目の等号

交換子の公式  $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$  を用いた。

#### 5 番目の等号

交換子の線形性を用いて、微分演算子  $\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}, \mathbf{y} \right)$  を交換子の外に出した。

#### 6 番目の等号

正準交換関係 (5.3.5) を代入。

#### 7 番目の等号

$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  を含む積分の実行。

問 5.1 上の「(5.3.8) の説明」にならって、(5.3.9) 式の計算の各ステップを説明せよ。

## 個数演算子、運動量演算子

ハミルトニアン以外にも、古典的な物理量はすべて対応する演算子に置き換えられる。例えば、(5.1.4) で与えられる個数や、(5.1.7) で与えられる運動量に対応して、個数演算子  $\hat{N}$ 、運動量演算子  $\hat{\mathbf{P}}$  が次のように与えられる：

$$\hat{N} = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x}, \quad (5.3.12)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x}. \quad (5.3.13)$$

## 一般の演算子

ここまで、ハミルトニアン演算子、個数演算子、運動量演算子を見てきた。一般には、1 粒子の量子力学における物理量に対応して、第二量子化レベルでの演算子を次のように

して考えることができる。すなわち、1粒子の量子力学での物理量  $A(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x})$  があると、この期待値  $\langle A \rangle$  として、

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x}, t) A(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} \quad (5.3.14)$$

が考えられた。  $\psi, \psi^*$  を場の演算子  $\hat{\psi}, \hat{\psi}^\dagger$  に置き換えることで、対応する第二量子化レベルでの演算子  $\hat{A}$  が定義される：

$$\hat{A} = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) A(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x}. \quad (5.3.15)$$

## 5.4 1次元自由粒子

以下では、空間は1次元とし、ポテンシャルも  $V(x) = 0$  と仮定する。この章の主題は、第二量子化でいかにして粒子描像が得られるかであった。粒子描像がどう現れるかをい見るだけならば、このような仮定をしても十分であろう。

場の演算子は、  $\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(x, t)$  であり、これらは次の正準交換関係、

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)] &= \delta(x - y), \\ [\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}(y, t)] &= [\hat{\psi}^\dagger(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)] = 0 \end{aligned} \quad (5.4.1)$$

を満たす。系のハミルトニアン演算子は、

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x, t) h(\frac{\partial}{\partial x}, x) \hat{\psi}(x, t) dx \quad (5.4.2)$$

で与えられる。ここで、第一量子化のハミルトニアン  $h(\frac{\partial}{\partial x}, x)$  は、

$$h(\frac{\partial}{\partial x}, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (5.4.3)$$

である。このハミルトニアン演算子のもと、  $\hat{\psi}$  に対するハイゼンベルク方程式からは、シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \hat{\psi}(x, t)}{\partial x^2}, \quad (5.4.4)$$

が得られる。(このエルミート共役をとれば、  $\hat{\psi}^\dagger$  に対する式になる。)

以下では、さらにもう二つ、議論を扱いやすくするための仮定をする。その一つは、  $x$  に関して周期的境界条件を仮定することで、空間を有限の大きさを持つものとして扱うことである。すなわち、  $\psi(x, t)$  などに周期  $L$  の周期的境界条件

$$\psi(x + L, t) = \psi(x, t) \quad (5.4.5)$$

を課す。これにより、全空間を  $-L/2 < x \leq L/2$  の範囲とみなすことができる。したがってまた、ハミルトニアン演算子は、(5.4.2)ではなくて、

$$\hat{H} = \int_{-L/2}^{L/2} \hat{\psi}^\dagger(x, t) \hbar \left( \frac{\partial}{\partial x}, x \right) \psi(x, t) dx \quad (5.4.6)$$

で与えられる。

もう一つの仮定は、 $\hbar = 1$  となる単位系をとることである。これにより、 $\hbar$  があちこちに現れる煩わしさから解放される。(必要ならば、次元解析などを使えば、 $\hbar$  を復活させることもできる。) この単位系では、シュレーディンガー方程式は

$$i \frac{\partial \hat{\psi}(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \hat{\psi}(x, t)}{\partial x^2}, \quad (5.4.7)$$

である。

### 5.4.1 平面波解

シュレーディンガー方程式 (5.4.7) の解を見つけるため、まず、古典的な解を探す。平面波解の候補として、

$$\psi(x, t) = e^{i(px - Et)}$$

の形を仮定して<sup>4</sup>、上のシュレーディンガー方程式に代入すると、

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} &= i(-iE) e^{i(px - Et)} = E \psi(x, t), \\ -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} &= -\frac{1}{2m} (-p^2) e^{i(px - Et)} = \frac{p^2}{2m} \psi(x, t), \end{aligned}$$

となるので、 $E$  が  $p$  の関数として、

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (5.4.8)$$

を満たせば、この平面波が解となる。ただし、今は周期的境界条件 (5.4.5) を仮定しているので、 $p$  は任意の値をとることはできない。実際、(5.4.5) より、

$$e^{i[p(x+L) - Et]} = e^{i(px - Et)} \quad \Rightarrow \quad e^{ipL} = 1.$$

したがって、

$$p = p_n \equiv \frac{2\pi n}{L} \quad (n \text{ は整数}) \quad (5.4.9)$$

<sup>4</sup> 平面波なのだから、 $e^{i(kx - \omega t)}$  のように波数  $k$  と角振動数  $\omega$  の文字を用いるべきだと思える人もいるだろう。しかし、今の場合、 $\hbar = 1$  としたので、波数と運動量の関係は  $p = \hbar k = k$  であり、エネルギーと角振動数の関係も  $E = \hbar \omega = \omega$  となるので、波数  $k$  と角振動数  $\omega$  の代わりに、運動量  $p$  とエネルギー  $E$  を使って上のように表しても同じことである。

が許される  $p$  の値である。(整数  $n$  というのは、正も負もゼロも含むことに注意.)

さて、以下では、規格化も考慮した平面波解として、

$$\varphi_n(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-iE_n t + ip_n x} \quad (n \text{ は整数}) \quad (5.4.10)$$

とおく. ここで、もちろん、 $p_n$  は (5.4.9) で与えられる量であり、 $E_n$  は、

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} \quad (5.4.11)$$

で与えられる. くり返しになるが、この  $\varphi_n(x, t)$  が、古典場  $\psi(x, t)$  に対するシュレーディンガー方程式

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \quad (5.4.12)$$

の解である. また、複素共役を考えれば、 $\varphi_n^*(x, t)$  は、 $\psi^*(x, t)$  に対するシュレーディンガー方程式

$$-i \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*(x, t)}{\partial x^2} \quad (5.4.13)$$

の解であることもわかる.

これらの  $\varphi_n(x, t)$  は、規格直交関係

$$\int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \varphi_l(x, t) dx = \delta_{nl} \quad (5.4.14)$$

を満たす. これが成り立つことは、 $n = l$  の場合は明らかであろう.  $n \neq l$  の場合には、次のようにして確認できる:

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \varphi_l(x, t) dx \\ &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{iE_n t - ip_n x} e^{-iE_l t + ip_l x} dx \\ &= \frac{1}{L} e^{i(E_n - E_l)t} \int_{-L/2}^{L/2} e^{i(p_l - p_n)x} dx \\ &= \frac{1}{L} e^{i(E_n - E_l)t} \int_{-L/2}^{L/2} e^{i2\pi(l-n)x/L} dx \\ &= 0 = (\text{右辺}). \end{aligned} \quad (5.4.15)$$

## 5.4.2 平面波解による展開 1 : 古典場

古典場に対するシュレーディンガー方程式 (5.4.12) の一般解は、これらの平面波解の重ね合わせで表すことができる:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \varphi_n(x, t). \quad (5.4.16)$$



ここで、 $a_n$  は重ね合わせの係数 (展開係数) である。  $\psi$  が与えられたとき、係数  $a_n$  は次のようにして求めることができる:

$$a_n = \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \psi(x, t) dx. \quad (5.4.17)$$

実際、右辺に上の展開式を代入してみれば、

$$\begin{aligned} (\text{右辺}) &= \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \psi(x, t) dx \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \sum_{l=-\infty}^{\infty} a_l \varphi_l(x, t) dx \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} a_l \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \varphi_l(x, t) dx \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} a_l \delta_{nl} \\ &= a_n. \end{aligned} \quad (5.4.18)$$

ここで、 $\psi$  の展開式 (5.4.16) を代入するときには、添え字  $n$  が使用中であったため、展開の足し上げの添え字として  $l$  を使った。

### 5.4.3 平面波解による展開 2 : 量子場

古典解がわかったので、場の量子論に戻ろう。第二量子化レベルでは、場の変数  $\psi$  が場の演算子  $\hat{\psi}$  に昇格している。これに応じて、展開式 (5.4.16) では、展開係数  $a_n$  が演算子  $\hat{a}_n$  に昇格することになる:

$$a_n \rightarrow \hat{a}_n.$$

こうして、 $\hat{\psi}$  は、

$$\hat{\psi}(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{a}_n \varphi_n(x, t) \quad (5.4.19)$$

と表されることになる。また、両辺のエルミート共役をとれば、 $\hat{\psi}^\dagger$  の展開式も得られる:

$$\hat{\psi}^\dagger(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{a}_n^\dagger \varphi_n^*(x, t). \quad (5.4.20)$$

もちろん,  $\hat{\psi}$  が与えられたとき, 展開係数  $\hat{a}_n$  は,

$$\hat{a}_n = \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \hat{\psi}(x, t) dx \quad (5.4.21)$$

で求めることができる. 両辺のエルミート共役をとれば,  $\hat{a}_n^\dagger$  に対しても,

$$\hat{a}_n^\dagger = \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n(x, t) \hat{\psi}^\dagger(x, t) dx \quad (5.4.22)$$

が成り立つ.

$\hat{\psi}(x, t)$ ,  $\hat{\psi}^\dagger(x, t)$  に対する正準交換関係 (5.4.1) を用いて,  $\hat{a}_n$ ,  $\hat{a}_n^\dagger$  の交換関係を求めてみよう. (5.4.21), (5.4.22) より,

$$\begin{aligned} [\hat{a}_n, \hat{a}_l] &= \left[ \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \hat{\psi}(x, t) dx, \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_l^*(y, t) \hat{\psi}(y, t) dy \right] \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-L/2}^{L/2} dy \varphi_n^*(x, t) \varphi_l^*(y, t) \underbrace{[\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}(y, t)]}_{\parallel 0} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (5.4.23)$$

同様に,

$$[\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] = 0. \quad (5.4.24)$$

また,

$$\begin{aligned} [\hat{a}_n, \hat{a}_l^\dagger] &= \left[ \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \hat{\psi}(x, t) dx, \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_l(y, t) \hat{\psi}^\dagger(y, t) dy \right] \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} dx \int_{-L/2}^{L/2} dy \varphi_n^*(x, t) \varphi_l(y, t) \underbrace{[\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)]}_{\parallel \delta(x-y)} \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^*(x, t) \varphi_l(x, t) dx \\ &= \delta_{nl}. \end{aligned} \quad (5.4.25)$$

まとめれば,

$$\begin{aligned} [\hat{a}_n, \hat{a}_l] &= 0, \\ [\hat{a}_n, \hat{a}_l^\dagger] &= \delta_{nl}, \\ [\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] &= 0. \end{aligned} \quad (5.4.26)$$

これらの交換関係は、調和振動子の生成消滅演算子と同じであることに注意しよう。例えば、 $n = l = 1$ に限ってみれば、 $[\hat{a}_1, \hat{a}_1] = [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1^\dagger] = 0$ は自明であり、残りは、

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger] = 1,$$

となる。これは、確かに調和振動子の交換関係(3.3.9)に等しい。こうして、自由粒子の場は、無限個の調和振動子の系と同等であることがわかった。

**問 5.2** 上とは逆に、 $\hat{a}_n, \hat{a}_n^\dagger$  に対する交換関係(5.4.26)と展開式(5.4.19), (5.4.20)から、 $\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(x, t)$  の交換関係(5.4.1)が導かれることを示せ。

ただし、次の公式を使ってよい。

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i2\pi n(x-y)/L} = L\delta(x-y).$$

#### 5.4.4 ハミルトニアン演算子, 運動量演算子, 個数演算子

ハミルトニアン  $\hat{H}$  をこれらの  $\hat{a}_n, \hat{a}_n^\dagger$  で表してみよう。  $\hat{H}$  の式(5.4.6)に展開式(5.4.19), (5.4.20)を代入すると、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int_{-L/2}^{L/2} \hat{\psi}^\dagger(x, t) h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \psi(x, t) dx \\ &= \int_{-L/2}^{L/2} dx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{a}_n^\dagger \varphi_n^*(x, t) h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{a}_l \varphi_l(x, t) \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l \int_{-L/2}^{L/2} dx \varphi_n^*(x, t) h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \varphi_l(x, t) \end{aligned}$$

ここで、 $h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \varphi_l(x, t) = \frac{p_l^2}{2m} \varphi_l(x, t) = E_l \varphi_l(x, t)$  を使うと、

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l E_l \underbrace{\int_{-L/2}^{L/2} dx \varphi_n^*(x, t) \varphi_l(x, t)}_{\delta_{nl}} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n. \end{aligned} \tag{5.4.27}$$

したがって、

$$\hat{H} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \tag{5.4.28}$$

である.

ハミルトニアン以外の演算子も,  $\hat{a}_n, \hat{a}_l^\dagger$  で表すことができる. 個数演算子  $\hat{N}$ , 運動量演算子  $\hat{P}$  にたいしては,

$$\begin{aligned}\hat{N} &= \int_{-L/2}^{L/2} \hat{\psi}^\dagger(x, t) \psi(x, t) dx \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n,\end{aligned}\tag{5.4.29}$$

$$\begin{aligned}\hat{P} &= \int_{-L/2}^{L/2} \hat{\psi}^\dagger(x, t) \left( \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n,\end{aligned}\tag{5.4.30}$$

と表される.

問 5.3 上の  $\hat{N}$  と  $\hat{P}$  の式を導出せよ.

### 5.4.5 粒子描像 : 真空, 1 粒子状態, 多粒子状態

#### 真空

調和振動子の基底状態に対応して,  $|0\rangle$  を

$$\hat{a}_n |0\rangle = 0 \quad \text{for all } n\tag{5.4.31}$$

で定義する. このとき,

$$\hat{H}|0\rangle = 0\tag{5.4.32}$$

が成り立つことが直ちにわかる. したがって,  $|0\rangle$  は確かに  $\hat{H}$  の固有状態であり, そのエネルギー固有値は 0 である. 同様に,

$$\hat{P}|0\rangle = 0\tag{5.4.33}$$

も成り立つ. すなわち, この  $|0\rangle$  は, 運動量演算子  $\hat{P}$  の固有状態でもあり, その固有値は 0 である. エネルギーも運動量も 0 のこの状態  $|0\rangle$  を **真空** と呼ぶ.

## 1 粒子状態

真空  $|0\rangle$  に生成演算子を一個だけ作用した状態を考えよう.

$$|p_n\rangle \equiv \hat{a}_n^\dagger |0\rangle \quad (5.4.34)$$

なる状態  $|p_n\rangle$  を考える. このとき,

$$\begin{aligned} \hat{H} |p_n\rangle &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} E_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_n^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} E_l \hat{a}_l^\dagger \left( \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l + \underbrace{[\hat{a}_l, \hat{a}_n^\dagger]}_{\delta_{ln}} \right) |0\rangle \\ &= E_n \hat{a}_n^\dagger |0\rangle \\ &= E_n |p_n\rangle \end{aligned} \quad (5.4.35)$$

また, 同様に,

$$\hat{P} |p_n\rangle = p_n |p_n\rangle \quad (5.4.36)$$

も成り立つ. 結局, 状態  $|p_n\rangle$  は, エネルギー  $E_n = p_n^2/(2m)$ , 運動量が  $p_n$  を持つ状態である. これは,  $|p_n\rangle$  が表す状態は, 質量  $m$  の粒子が 1 個運動量  $p_n$  で運動している状態であることを意味する. 実際, 個数演算子  $\hat{N}$  を  $|p_n\rangle$  に作用すると,

$$\hat{N} |p_n\rangle = |p_n\rangle, \quad (5.4.37)$$

も成り立つので, この状態は確かに「個数」が 1 の状態である.

**問 5.4** (5.4.30), (5.4.29) などを使って (5.4.36), (5.4.37) 式を確かめよ.

## 多粒子状態

真空と 1 粒子状態がわかったので,  $\hat{a}_n^\dagger$  を真空に何個か作用すれば, 多粒子状態が得られるだろうと予想できる.

例えば,

$$|p_n, p_l\rangle \equiv \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_l^\dagger |0\rangle$$

とおけば,  $|p_n, p_l\rangle$  は運動量がそれぞれ  $p_n, p_l$  の粒子が 2 個存在する状態である. 実際に, この状態が, 運動量の固有値が  $p_n + p_l$  であり, エネルギー  $\hat{H}$  の固有値が  $\frac{p_n^2}{2m} + \frac{p_l^2}{2m}$ ,  $\hat{N}$  の固有値が 2 であることは次のようにしてわかる.

まず,  $\hat{H}$ ,  $\hat{N}$ ,  $\hat{P}$  などと生成・消滅演算子  $\hat{a}_n^\dagger$ ,  $\hat{a}_n$  との交換関係を求める.

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}, \hat{a}_n^\dagger] &= \left[ \sum_l E_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l, \hat{a}_n^\dagger \right] \\
 &= \sum_l E_l [\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l, \hat{a}_n^\dagger] \\
 &= \sum_l E_l \left( [\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_n^\dagger] \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger [\hat{a}_l, \hat{a}_n^\dagger] \right) \\
 &= \sum_l E_l (0 + \hat{a}_l^\dagger \delta_{ln}) \\
 &= E_n \hat{a}_n^\dagger.
 \end{aligned} \tag{5.4.38}$$

同様に,

$$[\hat{H}, \hat{a}_n] = -E_n \hat{a}_n, \tag{5.4.39}$$

が得られる. また,

$$[\hat{P}, \hat{a}_n] = -p_n \hat{a}_n, \quad [\hat{P}, \hat{a}_n^\dagger] = +p_n \hat{a}_n^\dagger, \tag{5.4.40}$$

$$[\hat{N}, \hat{a}_n] = -\hat{a}_n, \quad [\hat{N}, \hat{a}_n^\dagger] = +\hat{a}_n^\dagger \tag{5.4.41}$$

も成り立つ.

さて,  $|E\rangle$  がハミルトニアン  $\hat{H}$  の固有値  $E$  の固有状態とする.

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

このとき,

$$\begin{aligned}
 \hat{H}(\hat{a}_n^\dagger|E\rangle) &= \left( \hat{a}_n^\dagger \hat{H} + \underset{\hat{E}}{[\hat{H}, \hat{a}_n^\dagger]} \right) |E\rangle \\
 &= (E + E_n) (\hat{a}_n^\dagger|E\rangle)
 \end{aligned} \tag{5.4.42}$$

したがって,  $\hat{a}_n^\dagger|E\rangle$  は  $\hat{H}$  の固有状態であり, 固有値は  $E + E_n$  である. すなわち,  $\hat{a}_n^\dagger$  はエネルギーを  $E_n$  だけ上げる演算子である.

交換関係 (5.4.40), (5.4.41) を使うと, 全く同様なことが  $\hat{P}$  と  $\hat{N}$  の固有値についても言える. すなわち,  $\hat{a}_n^\dagger$  は運動量を  $p_n$ , 粒子数を 1 だけ上げる演算子である.

以上の結果を使えば,  $|p_n, p_l\rangle$  は確かに, 運動量の固有値が  $p_n + p_l$ ,  $\hat{H}$  の固有値が  $\frac{p_n^2}{2m} + \frac{p_l^2}{2m}$ ,  $\hat{N}$  の固有値が 2 であることがわかる.

より多粒子の状態も同様にして作る事ができる:

$$|p_{n_1}, p_{n_2}, \dots, p_{n_l}\rangle \equiv \hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger \cdots \hat{a}_{n_l}^\dagger |0\rangle$$

とおけば,

$$\begin{aligned}\hat{H} |p_{n_1}, \dots, p_{n_l}\rangle &= (E_{n_1} + \dots + E_{n_l}) |p_{n_1}, \dots, p_{n_l}\rangle, \\ \hat{P} |p_{n_1}, \dots, p_{n_l}\rangle &= (p_{n_1} + \dots + p_{n_l}) |p_{n_1}, \dots, p_{n_l}\rangle, \\ \hat{N} |p_{n_1}, \dots, p_{n_l}\rangle &= l |p_{n_1}, \dots, p_{n_l}\rangle\end{aligned}$$

が成り立つ.

問 5.5 (5.4.40), (5.4.41) 式を導出せよ.

### 5.4.6 統計性

2 粒子状態

$$|p_n, p_{n'}\rangle = \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}^\dagger |0\rangle$$

を考えてみよう. 交換関係

$$[\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_{n'}^\dagger] = 0$$

を使えば,

$$|p_n, p_{n'}\rangle = |p_{n'}, p_n\rangle \quad (5.4.43)$$

が成り立つ. すなわち, 1 番目と 2 番目の粒子を交換しても同じ状態ベクトルを与える. これは, ボーズ粒子が満たす条件であり, 考えている粒子がボーズ統計にしたがうことを意味している.

多粒子の状態に対しても同様である.  $l$  粒子状態

$$|p_{n_1}, p_{n_2}, \dots, p_{n_l}\rangle \equiv \hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger \dots \hat{a}_{n_l}^\dagger |0\rangle$$

は, どの二つの運動量を入れ替えても, 同じ状態ベクトルを表す. これらは, 交換関係 (5.4.26) から導かれることである.

## 5.5 $L \rightarrow \infty$ の極限

ここまでは, 空間座標  $x$  に対して周期  $L$  の周期的境界条件を課してきた. その結果, 許される運動量は

$$p_n = \frac{2\pi n}{L} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (5.5.1)$$

と、とびとびの値になった。有限のサイズの空間を考えたからである。無限大の空間を考えるために  $L \rightarrow \infty$  の極限を考えてみよう。このとき、

$$\Delta p_n = p_{n+1} - p_n = \frac{2\pi}{L} \rightarrow 0 \quad (5.5.2)$$

となるので、確かに  $p$  は連続的な量とれるようになる。

平面波解による展開

$$\hat{\psi}(x, t) = \sum_n \hat{a}_n \varphi_n(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_n \hat{a}_n e^{i(p_n x - E_n t)}$$

はこの極限でどうなるであろうか。  $n$  に関する足し算を、  $p$  に関する積分に直すには、  $\Delta p_n = 2\pi/L$  (これが極限で  $dp$  になる) が必要である。そこで、上の展開を

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x, t) &= \frac{\sqrt{L}}{2\pi} \sum_n \hat{a}_n e^{i(p_n x - E_n t)} \frac{2\pi}{L} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_n \left( \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_n \right) e^{i(p_n x - E_n t)} \Delta p_n \end{aligned} \quad (5.5.3)$$

と表せば、  $L \rightarrow \infty$  ( $\Delta p_n \rightarrow 0$ ) の極限で、

$$\hat{\psi}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}(p) e^{i(px - E_p t)} dp \quad (5.5.4)$$

と表すことができる。ただし、ここで、  $E_p = p^2/(2m)$  であり、  $\hat{a}(p)$  は、

$$p_n \rightarrow p \quad \text{として} \quad \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_n \rightarrow \hat{a}(p) \quad (5.5.5)$$

とした。同様に、  $\hat{\psi}^\dagger(x, t)$  の平面波解展開は、

$$\hat{\psi}^\dagger(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}^\dagger(p) e^{-i(px - E_p t)} dp \quad (5.5.6)$$

となり、ここで、

$$p_n \rightarrow p \quad \text{として} \quad \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_n^\dagger \rightarrow \hat{a}^\dagger(p) \quad (5.5.7)$$

である。

このように導入された、連続変数  $p$  の関数となった、  $\hat{a}(p)$ 、  $\hat{a}^\dagger(p)$  の間の交換関係を見よう。上の対応より、

$$\begin{aligned} [\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p')] &= \lim_{L \rightarrow \infty} \left[ \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_n, \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_{n'}^\dagger \right] \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{L}{2\pi} \delta_{nn'} \\ &= \delta(p - p') \end{aligned} \quad (5.5.8)$$



が得られる．ここで， $p_n \sim p, p_{n'} \sim p'$  とみなした．また，最後の等式では，

$$1 = \sum_n \delta_{nn'} = \sum_n \frac{L}{2\pi} \delta_{nn'} \Delta p_n \sim \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{L}{2\pi} \delta_{nn'} \right) dp$$

であることから，

$$\frac{L}{2\pi} \delta_{nn'} \rightarrow \delta(p - p')$$

とみなした．

そのほかの交換子も同様に計算でき，結果をまとめると，

$$\begin{aligned} [\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p')] &= \delta(p - p'), \\ [\hat{a}(p), \hat{a}(p')] &= [\hat{a}^\dagger(p), \hat{a}^\dagger(p')] = 0 \end{aligned} \quad (5.5.9)$$

となる．これらの交換関係が正しいことは次のようにしてわかる．すなわち，(5.5.9) と展開式 (5.5.4), (5.5.6) を仮定して， $\hat{\psi}$  と  $\hat{\psi}^\dagger$  の交換子を計算すると，

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)] &= \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}(p) e^{i(px - E_p t)} dp, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}^\dagger(q) e^{-i(qy - E_q t)} dq \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dp \int dq e^{i(px - E_p t) - i(qy - E_q t)} [\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(q)] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dp \int dq e^{i(px - E_p t) - i(qy - E_q t)} \delta(p - q) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dp e^{ip(x - y)} \\ &= \delta(x - y) \end{aligned} \quad (5.5.10)$$

と，正しい正準交換関係が再現されることからである．

$L \rightarrow \infty$  において，ハミルトニアン (5.4.28) は，(5.5.7) より，

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_n E_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \\ &= \sum_n E_n \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_n^\dagger \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_n \frac{2\pi}{L} \\ &= \sum_n E_n \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_n^\dagger \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \hat{a}_n \Delta p_n \\ &\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} E_p \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp \end{aligned}$$

となる．すなわち，

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{\infty} E_p \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp. \quad (5.5.11)$$

同様に、運動量や個数演算子、(5.4.30), (5.4.29) も、

$$\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} p \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp, \quad (5.5.12)$$

$$\hat{N} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp. \quad (5.5.13)$$

と表される.

交換関係, (5.5.9) を使えば, これらの  $\hat{H}$ ,  $\hat{P}$ ,  $\hat{N}$  と  $\hat{a}(p)$ ,  $\hat{a}^\dagger(p)$  との交換関係も,

$$[\hat{H}, \hat{a}(p)] = -E_p \hat{a}(p), \quad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger(p)] = +E_p \hat{a}^\dagger(p), \quad (5.5.14)$$

$$[\hat{P}, \hat{a}(p)] = -p \hat{a}(p), \quad [\hat{P}, \hat{a}^\dagger(p)] = +p \hat{a}^\dagger(p), \quad (5.5.15)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}(p)] = -\hat{a}(p), \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger(p)] = +\hat{a}^\dagger(p), \quad (5.5.16)$$

となることがわかる.

運動量が  $p$  の 1 粒子状態は

$$|p\rangle = \hat{a}^\dagger(p) |0\rangle \quad (5.5.17)$$

で定義される. このとき,

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p') \quad (5.5.18)$$

が成り立つ. また, 運動量が  $p, p'$  の二粒子状態は

$$|p, p'\rangle = \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}^\dagger(p') |0\rangle \quad (5.5.19)$$

で定義されることも同様である. この状態は, もちろん, ボーズ統計性

$$|p, p'\rangle = |p', p\rangle$$

を見たしている (交換関係 (5.5.9) から保証されている).

## 5.6 量子力学との対応関係

場を量子化することにより粒子描像が現れることを見てきた. 特に, 1次元自由粒子系では, 真空  $|0\rangle$  に  $\hat{a}^\dagger(p)$  を 1 個だけかけた状態 (あるいは, それらの線形結合) が 1 粒子の状態であった. これらの 1 粒子状態に限れば, 1 粒子の量子力学と等価な理論になっているものと期待される. 以下では, この対応関係を見ていこう.

### 5.6.1 1粒子の量子力学

まず, 1粒子の量子力学 (1次元系) を復習しておこう. ここでは, シュレーディンガー描像で考える.

ディラックの記法では, 位置演算子  $\hat{x}$  と運動量演算子  $\hat{p}$  があり, 交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i \quad (5.6.1)$$

が成り立つ ( $\hbar = 1$  の単位系). これらの演算子の固有状態,  $|x\rangle, |p\rangle$  は

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad \langle x|y\rangle = \delta(x-y), \quad (5.6.2)$$

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p-p') \quad (5.6.3)$$

で定義される. さらに, 交換関係 (5.6.1) から,  $|x\rangle$  と  $|p\rangle$  の間の内積は,

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx} \quad (5.6.4)$$

を満たすことがわかる (3.4.1 節参照). 特に, 上の式から,

$$\langle x|\hat{p}|y\rangle = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-y) \quad (5.6.5)$$

が成り立ち, また, 任意の状態  $|\varphi\rangle$  に対して,

$$\langle x|\hat{p}|\varphi\rangle = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\varphi\rangle \quad (5.6.6)$$

も成り立つことがわかった.

状態  $|\varphi\rangle$  に対応する  $x$  表示の波動関数  $\varphi(x)$  は

$$\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle \quad (5.6.7)$$

で与えられた. この対応では, (5.6.6) 式は,  $|\varphi\rangle$  への  $\hat{p}$  の作用が,  $x$  表示の波動関数では微分演算子になることを表していた:

$$|\varphi\rangle \leftrightarrow \varphi(x) \quad \text{のとき} \quad \hat{p}|\varphi\rangle \leftrightarrow \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x).$$

### 5.6.2 場の量子論における1粒子状態

場の量子論において, 運動量が確定している1粒子状態は,

$$|p\rangle = \hat{a}^\dagger(p)|0\rangle$$

で与えられた。実際，運動量演算子

$$\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x, t) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \hat{\psi}(x, t) dx \quad (5.6.8)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} p \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp \quad (5.6.9)$$

を作用すると，

$$\hat{P} |p\rangle = p |p\rangle \quad (5.6.10)$$

が成り立ち，交換関係，

$$[\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p')] = \delta(p - p')$$

より，

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \quad (5.6.11)$$

も成り立った。したがって，この1粒子状態  $|p\rangle$  が量子力学の運動量固有状態  $|p\rangle$  に対応するものと考えられる。

では，量子力学における位置の固有状態  $|x\rangle$  に対応する場の量子論の1粒子状態は何であろうか。量子力学での結果をみれば，

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}$$

であるはずなので，

$$\begin{aligned} |x\rangle &= \int dp |p\rangle \langle p|x\rangle \\ &= \int dp |p\rangle \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx} \end{aligned}$$

で定義すればよさそうである。つまり，

$$\begin{aligned} |x\rangle &\equiv \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx} |p\rangle dp \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ipx} \hat{a}^\dagger(p) |0\rangle dp \\ &= \hat{\psi}^\dagger(x, 0) |0\rangle \end{aligned} \quad (5.6.12)$$

である。ここで， $\hat{\psi}^\dagger(x, 0)$  の式は，平面波展開 (5.5.6) 式，

$$\hat{\psi}^\dagger(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}^\dagger(p) e^{-i(px - E_p t)} dp$$

において， $t = 0$  を代入したものを使った。

ところで、今比較している1粒子の量子力学系は、シュレーディンガー描像のものであったから、場の量子論でもシュレーディンガー描像で考えれば、この $\hat{\psi}^\dagger(x, 0)$ は、シュレーディンガー描像の場の演算子に他ならない（ハイゼンベルク描像の演算子は、 $t = 0$ でシュレーディンガー描像の演算子に等しい： $\hat{O}_H(t = 0) = \hat{O}_S$ ）。そこで、この $\hat{\psi}^\dagger(x, 0)$ を、シュレーディンガー描像での場の演算子として、単に、 $\hat{\psi}^\dagger(x)$ と書くことにする。また、(同様に、 $\hat{\psi}$ の方も、 $\hat{\psi}(x)$ でシュレーディンガー描像での演算子を表すことにする。)

この約束で、量子力学の位置の固有状態に対応すると思われるものは、

$$|x\rangle = \hat{\psi}^\dagger(x) |0\rangle \quad (5.6.13)$$

と表される。では、本当にこの予想は正しいだろうか。

上の予想の正しさを確かめるため、運動量演算子、

$$\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \hat{\psi}(x) dx$$

に対応して、位置演算子 $\hat{X}$ を

$$\hat{X} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x) x \hat{\psi}(x) dx \quad (5.6.14)$$

で定義する。(一般に、量子力学での期待値が場の理論での演算子になったことを思い出そう。) この定義より、

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{\psi}^\dagger(x)] &= \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(y) y \hat{\psi}(y) dy, \hat{\psi}^\dagger(x) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy [\hat{\psi}^\dagger(y) y \hat{\psi}(y), \hat{\psi}^\dagger(x)] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \left( [\hat{\psi}^\dagger(y), \hat{\psi}^\dagger(x)] y \hat{\psi}(y) + \hat{\psi}^\dagger(y) y [\hat{\psi}(y), \hat{\psi}^\dagger(x)] \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \hat{\psi}^\dagger(y) y \delta(y - x) \\ &= x \hat{\psi}^\dagger(x) \end{aligned} \quad (5.6.15)$$

が成り立つ。これより、

$$\begin{aligned} \hat{X} |x\rangle &= \hat{X} \hat{\psi}^\dagger(x) |0\rangle \\ &= (\hat{\psi}^\dagger(x) \hat{X} + [\hat{X}, \hat{\psi}^\dagger(x)] |0\rangle) \\ &= x \hat{\psi}^\dagger(x) |0\rangle \\ &= x |x\rangle \end{aligned} \quad (5.6.16)$$

が導かれる。ここで、 $\hat{X}|0\rangle = 0$ を使った（これは、 $\hat{\psi}(x)|0\rangle = 0$ から直ちに得られる）。したがって、上で定義した1粒子状態 $|x\rangle$ は確かに位置演算子 $\hat{X}$ の固有状態であり、固有値

$x$  をもつものであることがわかる。また、規格化の条件も、

$$\begin{aligned}\langle x|y\rangle &= \langle 0|\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(y)|0\rangle \\ &= \langle 0|[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)]|0\rangle \\ &= \delta(x-y)\langle 0|0\rangle \\ &= \delta(x-y)\end{aligned}\tag{5.6.17}$$

と出てくる。

こうして、量子力学の状態  $|x\rangle$  に対応する場の量子論の1粒子状態は  $\hat{\psi}^\dagger(x)|0\rangle$  であることが確かめられた。

ここまできると、波動関数との対応もわかる。量子力学では、状態  $|\varphi\rangle$  に対応する波動関数  $\varphi(x)$  は、(5.6.7) 式、

$$\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$$

であった。場の量子論でもこれをそのまま使えばよい。 $\langle x| = \langle 0|\hat{\psi}(x)$  に注意すれば、次のようにまとめられる：

<p>1粒子状態 <math> \varphi\rangle</math> に対応する、量子力学の波動関数 <math>\varphi(x)</math> は、</p> $\varphi(x) = \langle 0 \hat{\psi}(x) \varphi\rangle$ <p>で与えられる。</p>	(5.6.18)
---	----------

あるいは、逆に、 $\varphi(x)$  から  $|\varphi\rangle$  を得るには、

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x)\hat{\psi}^\dagger(x)|0\rangle dx\tag{5.6.19}$$

とすればよい。

**問 5.6** (5.6.15) 式の導出にならって、

$$[\hat{X}, \hat{\psi}(x)] = -x\hat{\psi}(x)\tag{5.6.20}$$

が成り立つことを示せ。

**問 5.7** (5.6.15) や上の問の結果などを使って、

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hat{N}\tag{5.6.21}$$

が成り立つことを示せ。ここで、 $\hat{N}$  は個数演算子

$$\hat{N} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) dx$$

である。したがって、特に1粒子状態に限れば、 $\hat{N} = 1$  となるため、 $\hat{X}$  と  $\hat{P}$  は、1粒子量子力学の位置演算子と運動量演算子の交換関係をみたすことがわかる。

問 5.8  $[\hat{\psi}(x), \hat{P}] = (1/i)\partial\hat{\psi}(x)/\partial x$  が成り立つことを確認し、その結果を用いて、つぎのことを示せ.

状態  $|\varphi\rangle$  に対して、 $\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$  とすると、

$$\langle x|\hat{P}|\varphi\rangle = \frac{1}{i} \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x}$$

が成り立つ. ここで、 $\langle x|$  はもちろん、 $\langle x| = \langle 0|\hat{\psi}(x)$ .

問 5.9 シュレーディンガー描像における状態ベクトル  $|\varphi\rangle$  に、 $|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi, t\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\varphi\rangle$  によって時間発展をさせる. このとき、 $\varphi(x, t) \equiv \langle 0|\hat{\psi}(x)|\varphi, t\rangle$  とおくと、 $\varphi(x, t) = \langle 0|\hat{\psi}(x, t)|\varphi\rangle$  が成り立つことを示せ. また、 $\varphi(x, t)$  がシュレーディンガー方程式をみたすことを確かめよ.

### 5.6.3 場の演算子の意味

上の節で見てきたように、

$$\hat{\psi}^\dagger(x)|0\rangle$$

は、粒子が点  $x$  に 1 個存在する状態を表すことがわかった. ところで、今やっているのは場の理論である. 場の理論では、エネルギー密度を表す演算子、すなわちハミルトニアン密度  $\hat{\mathcal{H}}$  が存在する:

$$\hat{\mathcal{H}}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x) h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \hat{\psi}(x). \quad (5.6.22)$$

そこで、このハミルトニアン密度を使って、本当に  $|x\rangle = \hat{\psi}^\dagger(x)|0\rangle$  という状態が、点  $x$  にだけエネルギーが集中している状態であるかどうかを確かめよう.

次の行列要素を考えよう.

$$\langle y|\hat{\mathcal{H}}(x)|y'\rangle = \langle 0|\hat{\psi}(y)\hat{\psi}^\dagger(x)h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right)\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(y')|0\rangle.$$

ここで、

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(y')|0\rangle &= [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y')]|0\rangle \\ &= \delta(x - y')|0\rangle \end{aligned}$$

であることに注意すると ( $\langle 0|\hat{\psi}(y)\hat{\psi}^\dagger(x)$  についても同様),

$$\begin{aligned} \langle y|\hat{\mathcal{H}}(x)|y'\rangle &= \langle 0|\delta(y - x)h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right)\delta(x - y')|0\rangle \\ &= \delta(y - x)h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right)\delta(x - y') = \begin{cases} \neq 0 & (x = y = y') \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \end{aligned} \quad (5.6.23)$$

となる. これは確かに、 $|y\rangle$  が点  $y$  にだけにエネルギーを持っている状態であることを示す.

上の式では  $h(\frac{\partial}{\partial x}, x)$  のかかったデルタ関数があつてわかりにくいかもしれないので、より一般の状態 (5.6.19) で  $\hat{\mathcal{H}}(x)$  の期待値を見てみよう。上の結果を使うと、

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{\mathcal{H}}(x) | \varphi \rangle &= \int dy \langle y | \varphi^*(y) \cdot \hat{\mathcal{H}}(x) \cdot \int dy' \varphi(y') | y' \rangle \\ &= \int dy \int dy' \varphi^*(y) \varphi(y') \langle y | \hat{\mathcal{H}}(x) | y' \rangle \\ &= \int dy \int dy' \varphi^*(y) \varphi(y') \delta(y-x) h(\frac{\partial}{\partial x}, x) \delta(x-y') \\ &= \int dy' \varphi^*(x) \varphi(y') h(\frac{\partial}{\partial x}, x) \delta(x-y') \\ &= \varphi^*(x) h(\frac{\partial}{\partial x}, x) \int dy' \varphi(y') \delta(x-y') \\ &= \varphi^*(x) h(\frac{\partial}{\partial x}, x) \varphi(x). \end{aligned}$$

したがって、もし、「波動関数」  $\varphi(x)$  が  $x = x_0$  のごく近傍でしか値を持たない関数であれば、エネルギーもその  $x = x_0$  の近傍でしか値を持たないことがわかる。

以上のことから、場の演算子に対して、次のことを結論してよいだろう。

- $\hat{\psi}^\dagger(x)$  は点  $x$  に粒子を一個生成する演算子。
- $\hat{\psi}(x)$  は点  $x$  における粒子を一個消滅させる演算子。

したがって、例えば、

$$|x, y\rangle = \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(y) |0\rangle$$

という状態は、点  $x$  と  $y$  のそれぞれに1個ずつ粒子が存在する2粒子状態である。

ここまでは1次元の自由粒子で考えてきたが、このような解釈は、3次元でも、また、ポテンシャルがあつたとしても成り立つ：

- $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$  は点  $\mathbf{x}$  に粒子を一個生成する演算子。
- $\hat{\psi}(\mathbf{x})$  は点  $\mathbf{x}$  における粒子を一個消滅させる演算子。

**(Remark)** 粒子数が保存しないような相互作用を考えるとときには、ハミルトニアン密度に、次のような相互作用項が含まれることがある。

$$g \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}).$$

これを、上の解釈で見ると、点  $\mathbf{x}$  で  $\phi$  粒子と  $\psi$  粒子が消滅し、またその点から  $\psi$  粒子が生成されるのであるから、「 $\phi$  粒子と  $\psi$  粒子が点  $\mathbf{x}$  にやってきて  $\phi$  粒子はそこで消え、 $\psi$  粒子だけがそこから飛んでいく」というようなプロセスを意味する。(例えば、結晶内の電子にフォノンが吸収されるようなプロセス。) また、 $g$  はこのプロセスの強さである。 $g$  が大きければ[小さければ]、このようなプロセスが起きる確率が大きい[小さい]。



# 第6章 シュレーディンガー場の量子論その2：フェルミ粒子

前章では、シュレーディンガー場を量子化することにより、ボーズ統計にしたがう粒子が現れることを見てきた。では、フェルミ統計にしたがう粒子はどのようにして現れるのだろうか。

## 6.1 交換関係とボーズ統計性

前章での2粒子状態のもつボーズ統計性

$$|p, p'\rangle = |p', p\rangle$$

がどのように現れたかを思い出してみよう。  $|p, p'\rangle$  の定義が、

$$|p, p'\rangle = \hat{a}^\dagger(p)\hat{a}^\dagger(p')|0\rangle$$

であったことを考えると、上の統計性は、交換関係

$$[\hat{a}^\dagger(p), \hat{a}^\dagger(p')] = 0$$

から導かれたことがわかる。

多粒子の状態に対しても同様である。例えば3粒子状態

$$|p, p', p''\rangle \equiv \hat{a}^\dagger(p)\hat{a}^\dagger(p')\hat{a}^\dagger(p'')|0\rangle$$

は、どの二つの運動量を入れ替えても、同じ状態ベクトルを表す。これらもやはり、交換関係 (5.5.9) から導かれることである。

## 6.2 フェルミ統計性

上でみたように、ボーズ統計性は交換関係 (5.5.9) から導かれた。これらは結局、 $\hat{\psi}(x, t)$  と  $\hat{\psi}^\dagger(x, t)$  に対する正準交換関係 (5.4.1) から来たものである。そこで、フェルミ統計を考えるには、正準交換関係 (5.4.1) に代わるものとして、反交換関係を考えたい。

$\hat{\psi}(x, t)$  と  $\hat{\psi}^\dagger(x, t)$  に対して次の反交換関係を仮定しよう.

$$\begin{aligned}\{\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)\} &= \delta(x - y), \\ \{\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}(y, t)\} &= \{\hat{\psi}^\dagger(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)\} = 0.\end{aligned}\quad (6.2.1)$$

ここで, 反交換子積の記号として,

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (6.2.2)$$

を用いた. さて, 正準交換関係 (5.4.1) から  $\hat{a}(p)$ ,  $\hat{a}^\dagger(p')$  に対するは交換関係 (5.5.9) が導かれたように, 上の反交換関係 (6.2.1) からは,  $\hat{a}(p)$ ,  $\hat{a}^\dagger(p')$  に対する反交換関係が導かれるものと期待される. 実際,  $\hat{\psi}(x, t)$  と  $\hat{\psi}^\dagger(x, t)$  に対する平面波展開の式, (5.5.4), (5.5.6),

$$\hat{\psi}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}(p) e^{i(px - E_p t)} dp, \quad (6.2.3)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}^\dagger(p) e^{-i(px - E_p t)} dp, \quad (6.2.4)$$

を仮定すると, 逆フーリエ変換の式より,

$$\hat{a}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(x, t) e^{-i(px - E_p t)} dx, \quad (6.2.5)$$

$$\hat{a}^\dagger(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x, t) e^{i(px - E_p t)} dx, \quad (6.2.6)$$

が得られる. これより, 例えば,

$$\begin{aligned}\{\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p')\} &= \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(x, t) e^{-i(px - E_p t)} dx, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(y, t) e^{i(p'y - E_{p'} t)} dy \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int dy e^{-i(px - E_p t)} e^{i(p'y - E_{p'} t)} \{\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int dy e^{-i(px - E_p t)} e^{i(p'y - E_{p'} t)} \delta(x - y) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dx e^{-i(p-p')x} e^{i(E_p - E_{p'})t} \\ &= e^{i(E_p - E_{p'})t} \delta(p - p') \\ &= \delta(p - p')\end{aligned}$$

が導かれる. 他も同様で, 結果をまとめれば, 結局

$$\begin{aligned}\{\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p')\} &= \delta(p - p'), \\ \{\hat{a}(p), \hat{a}(p')\} &= \{\hat{a}^\dagger(p), \hat{a}^\dagger(p')\} = 0.\end{aligned}\quad (6.2.7)$$

と、確かに  $\hat{a}(p)$ ,  $\hat{a}^\dagger(p')$  の間の反交換関係が導かれる。さらには、この反交換関係 (6.2.7) を使えば、

$$|p, p'\rangle = \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}^\dagger(p') |0\rangle$$

によって定義した状態  $|p, p'\rangle$  が確かにフェルミ統計性

$$|p, p'\rangle = -|p', p\rangle$$

を満たすこともわかる。

これで首尾よくフェルミ粒子の理論が完成したのであろうか。残念ながらまだである。少なくとも、ボーズ粒子では成り立っていた次のような事柄は、交換関係を変更してしまったりしているので、そのまま成り立つ保証はないだろう。

1. 本当にこの理論は、シュレーディンガー場の量子論になっているのか？ すなわち、場の演算子  $\hat{\psi}(x, t)$  はハイゼンベルク方程式の結果としてシュレーディンガー方程式を満たしているのか？
2. 今の場合でも粒子描像が出てくるのか？ 状態  $\hat{a}^\dagger(p) |0\rangle$  は、本当に、運動量が  $p$ , エネルギーが  $E_p = p^2/2m$  の粒子の状態とみなせるのか？
3. 1粒子状態に限れば、もとの量子力学と等価であることが示せるか？

以下では、これらのことを実際に確認していこう。しかし、その前の準備として、まず、反交換子積が現れるときの代数計算の公式を見ておこう。

### 6.3 反交換子積の性質

$\hat{A}$  と  $\hat{B}$  の反交換子積  $\{\hat{A}, \hat{B}\}$  は、(6.2.2) 式で定義された：

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (6.2.2)$$

空間ベクトルのベクトル積ではかけ算の順番を入れ換えるとマイナスが出る。一般に、 $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  が  $\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A}$  を満たせば、 $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  は反交換するという。したがって、反交換子積は二つの演算子の「反交換のしにくさの度合」を表すものと考えられる。特に、

$$\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A} \iff \{\hat{A}, \hat{B}\} = 0 \quad (6.3.1)$$

が成り立つ。また、反交換子積は二つの演算子を反交換（マイナスを付けて交換）したときの「おつり」と考えることもできる：

$$\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A} + \{\hat{A}, \hat{B}\} \quad (6.3.2)$$

反交換子積の意味がわかったところで、性質をまとめておこう。

### 反交換子積の性質

(i) 対称性

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \{\hat{B}, \hat{A}\}$$

(ii) 線形性 (分配法則, 定数倍)

$$\begin{aligned}\{\hat{A}, c\hat{B} + c'\hat{B}'\} &= c\{\hat{A}, \hat{B}\} + c'\{\hat{A}, \hat{B}'\} \\ \{c\hat{A} + c'\hat{A}', \hat{B}\} &= c\{\hat{A}, \hat{B}\} + c'\{\hat{A}', \hat{B}\}\end{aligned}$$

ここで,  $c, c'$  は演算子ではない普通の数 ( $c$  数) である.

(iii) 積の微分公式 (ライプニッツ則) に類似した式

$$\begin{aligned}[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\} \\ [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\} - \{\hat{A}, \hat{C}\}\hat{B}\end{aligned}$$

(iv) ヤコビの恒等式

$$[\hat{A}, \{\hat{B}, \hat{C}\}] + [\hat{B}, \{\hat{C}, \hat{A}\}] + [\hat{C}, \{\hat{A}, \hat{B}\}] = 0.$$

性質 (i) と (ii) は定義 (6.2.2) から直ちにわかるであろう. 気になるのは性質 (iii) である<sup>1</sup>. 覚えやすそうな気もするが, マイナスが出てきたりしてやはり難しそうである. 交換子の場合であれば (iii) の一番目の式に対応するものとして,

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (6.3.3)$$

というものがあつた. まず, この公式の証明の仕方を思い出して, 反交換子の場合の (iii) 第一式を示してみよう.

$$\begin{aligned}[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \\ &= (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})\hat{C} - \hat{B}(\hat{A}\hat{C} + \hat{C}\hat{A}) \\ &= \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\}.\end{aligned}$$

したがって,

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\}. \quad (6.3.4)$$

交換子の場合の (6.3.3) の公式が完全に頭に入っている人にとっては, この式は次のように考えると覚え易い:

<sup>1</sup>性質 (iv) は性質 (iii) を使えば導かれる. しかも, この性質を利用する機会はほとんどない.

1.  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  はすべてフェルミ的なものとする。つまり、基本は互いに反交換したがるものとするのである。だからこそ、反交換したときのおつり=反交換子に注目しているのである。
2. フェルミ的なもの二つの積  $\hat{B}\hat{C}$  はボーズ的なものである。実際、 $\hat{A}$  が（おつりを無視して）二つの積  $\hat{B}\hat{C}$  を飛び越えようと思ったら、マイナスが2回出るので結局はプラスが出るからである。
3. 公式 (6.3.4) の左辺は交換子でなければならない。なぜなら、フェルミ的な  $\hat{A}$  がボーズ的な  $\hat{B}\hat{C}$  を飛び越えたときの「おつり」に興味があるからである。
4. 右辺の各項の符号は次のように考える。まず、公式 (6.3.4) で、交換子や反交換子の括弧は無視して、 $A, B, C$  の順番だけに着目する。

左辺は、 $ABC$  の順である。右辺第一項も  $ABC$  の順である。右辺第二項は  $BAC$  の順であり、左辺の順番と比べると  $A$  と  $B$  が逆転している。 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  はすべてフェルミ的なものであったので、逆転が1回起きるたびにマイナス符号がでると思えばよい。こうして、右辺第一項にはプラス、第二項にはマイナスが現れている。

5. このように考えると、性質 (iii) の第二式も自然に思えてくる：

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\} - \{\hat{A}, \hat{C}\}\hat{B}. \quad (6.3.5)$$

問 6.1 (6.3.5) 式が成り立つことを示せ。

問 6.2 反交換子の性質 (iii) を使って、

$$[\hat{A}, \{\hat{B}, \hat{C}\}] = [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}\hat{B}] \quad (6.3.6)$$

を計算していくと、性質 (iv) と等価な式がでることを確認せよ。

## 6.4 反交換関係によるシュレーディンガー場の量子化

1次元自由粒子系のシュレーディンガー場の第二量子化を、反交換関係にもとづいてやり直してみよう。

### 6.4.1 量子化

波動関数  $\psi(x, t)$ ,  $\psi^*(x, t)$  は演算子に昇格される。

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &\rightarrow \hat{\psi}(x, t) \\ \psi^*(x, t) &\rightarrow \hat{\psi}^\dagger(x, t). \end{aligned}$$

ただし、これらの演算子は、今回は、反交換関係を満たすものとする：

$$\begin{aligned}\{\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)\} &= \delta(x - y), \\ \{\hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}(y, t)\} &= \{\hat{\psi}^\dagger(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t)\} = 0.\end{aligned}\quad (6.4.1)$$

波動関数が演算子に昇格されたことに応じて、第一量子化レベルでの期待値が対応する演算子に昇格される。特に、ハミルトニアン  $\hat{H}$  は、

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x, t) h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \hat{\psi}(x, t) dx \quad (6.4.2)$$

で与えられる。同様に、運動量演算子  $\hat{P}$ 、個数演算子  $\hat{N}$  は次で与えられる。

$$\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x, t) \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x} \hat{\psi}(x, t) dx, \quad (6.4.3)$$

$$\hat{N} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x, t) \hat{\psi}(x, t) dx. \quad (6.4.4)$$

## 6.4.2 ハイゼンベルク方程式

演算子  $\hat{O}(t)$  の時間発展は、ハイゼンベルク方程式、

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}(t) = [\hat{O}(t), \hat{H}]$$

にしたがう。

ハイゼンベルク方程式を用いて、 $\hat{\psi}(x, t)$  の時間発展を調べてみよう。反交換関係 (6.4.1) と反交換子の性質などより、

$$\begin{aligned}i \frac{\partial \hat{\psi}(x, t)}{\partial t} &= [\hat{\psi}(x, t), \hat{H}] \\ &= \left[ \hat{\psi}(x, t), \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(y, t) h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \hat{\psi}(y, t) dy \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[ \hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t) h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \hat{\psi}(y, t) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \left( \left\{ \hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t) \right\} h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \hat{\psi}(y, t) \right. \\ &\quad \left. - \hat{\psi}^\dagger(y, t) \left\{ \hat{\psi}(x, t), h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \hat{\psi}(y, t) \right\} \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \left( \left\{ \hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}^\dagger(y, t) \right\} h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \hat{\psi}(y, t) \right. \\ &\quad \left. - \hat{\psi}^\dagger(y, t) h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \left\{ \hat{\psi}(x, t), \hat{\psi}(y, t) \right\} \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(x - y) h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \hat{\psi}(y, t) \\ &= h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \hat{\psi}(x, t).\end{aligned}\quad (6.4.5)$$

同様に,

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial\hat{\psi}^\dagger(x,t)}{\partial t} &= [\hat{\psi}^\dagger(x,t), \hat{H}] \\
&= \left[ \hat{\psi}^\dagger(x,t), \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(y,t)h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right)\hat{\psi}(y,t) dy \right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[ \hat{\psi}^\dagger(x,t), \hat{\psi}^\dagger(y,t)h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right)\hat{\psi}(y,t) \right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dy \left( \{ \hat{\psi}^\dagger(x,t), \hat{\psi}^\dagger(y,t) \} h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right)\hat{\psi}(y,t) \right. \\
&\quad \left. - \hat{\psi}^\dagger(y,t) \{ \hat{\psi}^\dagger(x,t), h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right)\hat{\psi}(y,t) \} \right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dy \left( \{ \hat{\psi}^\dagger(x,t), \hat{\psi}^\dagger(y,t) \} h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right)\hat{\psi}(y,t) \right. \\
&\quad \left. - \hat{\psi}^\dagger(y,t) h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \{ \hat{\psi}^\dagger(x,t), \hat{\psi}(y,t) \} \right) \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} dy \hat{\psi}^\dagger(y,t) h\left(\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \delta(x-y) \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} dy \left( h\left(-\frac{\partial}{\partial y}, y\right) \hat{\psi}^\dagger(y,t) \right) \delta(x-y) \\
&= -h\left(-\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \hat{\psi}^\dagger(x,t) \\
&= -h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \hat{\psi}^\dagger(x,t). \tag{6.4.6}
\end{aligned}$$

こうして、ハイゼンベルク方程式から正しいシュレーディンガー方程式

$$i\frac{\partial\hat{\psi}(x,t)}{\partial t} = h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \hat{\psi}(x,t), \tag{6.4.7}$$

$$-i\frac{\partial\hat{\psi}^\dagger(x,t)}{\partial t} = h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \hat{\psi}^\dagger(x,t) \tag{6.4.8}$$

が成り立つことが示された。したがって、反交換関係にもとづく今の理論は、確かにシュレーディンガー場を量子化したものになっていることがわかる。

**問 6.3** 57ページの「(5.3.8)の説明」にならって、上の(6.4.5), (6.4.6)式の計算の各ステップを説明せよ。

### 6.4.3 運動量表示

場の演算子  $\hat{\psi}(x, t)$ ,  $\hat{\psi}^\dagger(x, t)$  がシュレーディンガー方程式を満たすことがわかったので、ようやく、平面波解による展開

$$\hat{\psi}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}(p) e^{i(px - E_p t)} dp, \quad (6.4.9)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}^\dagger(p) e^{-i(px - E_p t)} dp, \quad (6.4.10)$$

の正当化が出来た。もちろんここで、 $E_p = p^2/(2m)$  である。したがって、また、逆フーリエ変換の式、(6.2.5), (6.2.6) も使うことができ、 $\hat{a}(p)$ ,  $\hat{a}^\dagger(p')$  間の反交換関係

$$\begin{aligned} \{\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p')\} &= \delta(p - p'), \\ \{\hat{a}(p), \hat{a}(p')\} &= \{\hat{a}^\dagger(p), \hat{a}^\dagger(p')\} = 0. \end{aligned} \quad (6.4.11)$$

も導かれる。

#### 運動量表示の $\hat{H}$ , $\hat{P}$ , $\hat{N}$

$\hat{a}(p)$ ,  $\hat{a}^\dagger(p)$  で  $\hat{H}$  などを表してみよう。

展開式、(6.4.9), (6.4.10) をハミルトニアン (6.4.2) に代入すると、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x, t) h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \hat{\psi}(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \hat{a}^\dagger(p) e^{-i(px - E_p t)} h\left(\frac{\partial}{\partial x}, x\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp' \hat{a}(p') e^{i(p'x - E_{p'} t)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p') e^{-i(px - E_p t)} E_{p'} e^{i(p'x - E_{p'} t)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' E_{p'} \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p') e^{-i(E_{p'} - E_p)t} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(p' - p)x} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' E_{p'} \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p') e^{-i(E_{p'} - E_p)t} \delta(p' - p) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} E_p \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp. \end{aligned}$$

(上の計算でわかるように、演算子  $\hat{a}(p)$ ,  $\hat{a}^\dagger(p)$  などの順番の入れ換えは一切行っていないので、ボーズ粒子と同じ結果になるのは当然である。)  $\hat{P}$  や  $\hat{N}$  についても同様である。結果をまとめると、

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{\infty} E_p \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp, \quad (6.4.12)$$

$$\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} p \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp, \quad (6.4.13)$$



$$\hat{N} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) dp. \quad (6.4.14)$$

### 交換関係

$\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p)$  で  $\hat{H}$  が表せたので、交換関係を調べてみよう。反交換子積の性質や、 $\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p)$  の反交換関係などより、

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{a}(p)] &= \left[ \int_{-\infty}^{\infty} E_{p'} \hat{a}^\dagger(p') \hat{a}(p') dp', \hat{a}(p) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' E_{p'} [\hat{a}^\dagger(p') \hat{a}(p'), \hat{a}(p)] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' E_{p'} \left( \hat{a}^\dagger(p') \{ \hat{a}(p'), \hat{a}(p) \} - \{ \hat{a}^\dagger(p'), \hat{a}(p) \} \hat{a}(p') \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' E_{p'} \left( \hat{a}^\dagger(p') \cdot 0 - \delta(p' - p) \hat{a}(p') \right) \\ &= -E_p \hat{a}(p) \end{aligned}$$

となり、結局、

$$[\hat{H}, \hat{a}(p)] = -E_p \hat{a}(p) \quad (6.4.15)$$

が得られる。同様な計算により、

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger(p)] = E_p \hat{a}^\dagger(p) \quad (6.4.16)$$

も得られる。これらは、ボーズ粒子の場合と同じ結果であることに注意しよう。

上では、ハミルトニアンとの交換関係を求めたが、運動量や個数演算子の場合も全く同様である。結果は、

$$[\hat{P}, \hat{a}(p)] = -p \hat{a}(p), \quad [\hat{P}, \hat{a}^\dagger(p)] = p \hat{a}^\dagger(p) \quad (6.4.17)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}(p)] = -\hat{a}(p), \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger(p)] = \hat{a}^\dagger(p) \quad (6.4.18)$$

である。

## 6.5 粒子描像

### 真空

真空  $|0\rangle$  を次で定義する：

$$\hat{a}(p) |0\rangle = 0 \quad \text{for all } p, \quad \langle 0|0\rangle = 1. \quad (6.5.1)$$

そうすれば,

$$\hat{H}|0\rangle = 0, \quad (6.5.2)$$

$$\hat{P}|0\rangle = 0, \quad (6.5.3)$$

$$\hat{N}|0\rangle = 0 \quad (6.5.4)$$

が成り立つので, 確かに  $|0\rangle$  は真空という名前に相応しい. エネルギーも運動量も粒子数もすべてゼロとなる固有状態である.

## 1 粒子状態

励起状態として,

$$|p\rangle \equiv \hat{a}^\dagger(p)|0\rangle \quad (6.5.5)$$

と置けば,

$$\begin{aligned} \hat{H}|p\rangle &= \hat{H}\hat{a}^\dagger(p)|0\rangle \\ &= \left(\hat{a}^\dagger\hat{H} + [\hat{H}, \hat{a}^\dagger(p)]\right)|0\rangle \\ &= \left(\hat{a}^\dagger\hat{H} + E_p\hat{a}^\dagger(p)\right)|0\rangle \\ &= E_p\hat{a}^\dagger(p)|0\rangle \\ &= E_p|p\rangle \end{aligned} \quad (6.5.6)$$

が成り立つ. また同様に,

$$\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle, \quad (6.5.7)$$

$$\hat{N}|p\rangle = |p\rangle \quad (6.5.8)$$

も成り立つ. したがって,  $|p\rangle$  という状態は, 運動量が  $p$ , エネルギーが  $E_p = p^2/(2m)$  の固有状態であり, 質量  $m$  の粒子が 1 個ある状態とみなせる.

また, 内積は,

$$\begin{aligned} \langle p|p'\rangle &= \langle 0|\hat{a}(p)\hat{a}^\dagger(p')|0\rangle \\ &= \langle 0|\hat{a}(p)\hat{a}^\dagger(p') + \hat{a}^\dagger(p')\hat{a}(p)|0\rangle \\ &= \langle 0|\{\hat{a}(p), \hat{a}^\dagger(p')\}|0\rangle \\ &= \langle 0|\delta(p-p')|0\rangle \\ &= \delta(p-p') \end{aligned} \quad (6.5.9)$$

と, いつものデルタ関数の規格化条件を満たしていることがわかる.

## 2 粒子状態

$$|p, p'\rangle = \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}^\dagger(p') |0\rangle \quad (6.5.10)$$

とおけば，交換関係などから，

$$\hat{H}|p, p'\rangle = \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{p'^2}{2m} \right) |p, p'\rangle, \quad (6.5.11)$$

$$\hat{P}|p, p'\rangle = (p + p')|p, p'\rangle, \quad (6.5.12)$$

$$\hat{N}|p, p'\rangle = 2|p, p'\rangle \quad (6.5.13)$$

などが成り立つ．したがって，この状態は運動量が  $p$  の粒子と  $p'$  の粒子が 1 個ずつ存在する状態であることもわかる．しかも，今回は，フェルミ統計性

$$|p, p'\rangle = -|p', p\rangle$$

を満たす．

## 多粒子状態

$$|p_1, p_2, \dots, p_n\rangle = \hat{a}^\dagger(p_1) \hat{a}^\dagger(p_2) \cdots \hat{a}^\dagger(p_n) |0\rangle$$

とおけば，

$$\hat{H}|p_1, p_2, \dots, p_n\rangle = (E_{p_1} + E_{p_2} + \cdots + E_{p_n})|p_1, p_2, \dots, p_n\rangle \quad (6.5.14)$$

$$\hat{P}|p_1, p_2, \dots, p_n\rangle = (p_1 + p_2 + \cdots + p_n)|p_1, p_2, \dots, p_n\rangle \quad (6.5.15)$$

$$\hat{N}|p_1, p_2, \dots, p_n\rangle = n|p_1, p_2, \dots, p_n\rangle \quad (6.5.16)$$

が成り立つことがわかる．この状態は， $n$  個の粒子があり，各粒子がそれぞれ運動量  $p_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) をもつ状態である．しかも，どの二組の運動量を交換してもマイナス符号が現れる．

## 6.6 量子力学との関係

1 粒子状態に限れば，ボーズ統計のときと全く同じ状態が得られたので，1 粒子の量子力学との対応関係も全く同じものが成り立つ．

1 粒子状態  $|\varphi\rangle$  に対応する量子力学の波動関数  $\varphi(x)$  は，

$$\varphi(x) = \langle 0 | \hat{\psi}(x) | \varphi \rangle$$

で与えられる。(シュレーディンガー描像)

もちろん、位置の確定した1粒子状態  $|x\rangle$  は

$$|x\rangle = \hat{\psi}^\dagger(x) |0\rangle$$

で与えられる。 $\hat{\psi}^\dagger(x)$  は点  $x$  に粒子を一個生成する演算子である。

一般の2粒子状態  $|\phi\rangle$  があったとしよう。この状態に対応する2粒子の量子力学の波動関数  $\phi(x_1, x_2)$  は、

$$\phi(x_1, x_2) = \langle 0 | \hat{\psi}(x_1) \hat{\psi}(x_2) | \phi \rangle$$

に対応する。このとき、 $\hat{\psi}^\dagger$  同士の反交換関係から、波動関数のフェルミ統計性

$$\phi(x_1, x_2) = -\phi(x_2, x_1)$$

は自動的に満たされている。

## 6.7 補足：統計性と波動方程式

非相対論的なシュレーディンガー場に対しては、前章のように正準変数に対して交換関係から出発しても、この章のように反交換関係から出発しても、どちらの場合にもハイゼンベルク方程式からシュレーディンガー方程式が導けた。つまり、シュレーディンガー場に対しては、ボーズ統計性とフェルミ統計性のどちらの統計性も持たせることが出来た。

しかし、相対論的な波動方程式に対してはそうはいかないことが知られている。スピンの0, 1, 2, ... と整数スピンの粒子の波動場に対しては、ボーズ統計性しか導入できない。また、スピンの1/2, 3/2, ... と半整数スピンの粒子の波動場に対しては、フェルミ統計性しか導入できない。

このことは、**スピンと統計性**の関係として知られている。

# 第7章 相対論的波動方程式

## 7.1 非相対論的量子力学の復習

相対論的な波動方程式を考える前に、非相対論的な量子力学を復習しておこう。

### 7.1.1 波動方程式

質量  $m$  の非相対論的な自由粒子に対する波動方程式（シュレーディンガー方程式）は、次のようにして作ることができた：

step 1) エネルギー  $E$  と運動量  $\mathbf{p}$  の関係式を書く：

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (7.1.1)$$

step 2)  $E$  と  $\mathbf{p}$  をそれぞれ次の微分演算子に置き換える：

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (7.1.2)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}. \quad (7.1.3)$$

step 3) 置き換えたものを step 1) の式に代入し、それらのうしろに波動関数を置けば完成：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right)^2 \psi(\mathbf{x}, t). \quad (7.1.4)$$

### 7.1.2 確率解釈, 確率の保存

確率解釈によれば（規格化された）波動関数の絶対値の2乗は確率密度を表す。すなわち、

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3 \mathbf{x} \quad (7.1.5)$$

は、時刻  $t$  において粒子が点  $\mathbf{x}$  の周りの微小体積  $d^3\mathbf{x} = dx dy dz$  内に見つかる確率を表す。したがって、特に、これを全空間にわたって足しあげたもの（全確率）は1となる：

$$\int_{\text{全空間}} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x} = 1. \quad (7.1.6)$$

波動関数  $\psi(\mathbf{x}, t)$  がシュレーディンガー方程式にしたがって時間発展をすれば、上の全確率の式における被積分関数も  $t$  とともに変化する。しかし、確率解釈が成り立つためには、全確率は1のままでなければならない。実際、上のシュレーディンガー方程式を使えば、

$$\frac{d}{dt} \int_{\text{全空間}} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3\mathbf{x} = 0 \quad (7.1.7)$$

が成り立つことが示される。これが確率の保存である。

連続の式というものを使えば、確率の保存を容易に示すことができる。確率密度関数を  $\rho(\mathbf{x}, t)$  と置く：

$$\rho(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2. \quad (7.1.8)$$

確率の保存を示すには、

$$\frac{d}{dt} \int_{\text{全空間}} \rho(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} = 0$$

を示せばよい。そこで、次の確率の流れの密度  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  を定義する。

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial \psi^*(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) \right). \quad (7.1.9)$$

シュレーディンガー方程式を使うと、これら  $\rho(\mathbf{x}, t)$  と  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  の間に次の連続の式が成り立つことがわかる：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0. \quad (7.1.10)$$

この式を使えば、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} &= \int_V \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} d^3\mathbf{x} \\ &= - \int_V \text{div} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} \\ &= - \int_S \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S} \end{aligned} \quad (7.1.11)$$

が導かれる。ここで、 $S$  は3次元領域  $V$  の表面であり、 $d\mathbf{S}$  は  $S$  上の面積要素を表すベクトルである（法線方向外向き）。 $V$  として全空間をとれば、 $S$  は無限遠方からなる面となり、無限遠方では  $\psi(\mathbf{x}, t)$  などはゼロとしてよいので、被積分関数  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  も  $S$  上でゼロとなる。結局、連続の式が成り立てば、保存則

$$\frac{d}{dt} \int_{\text{全空間}} \rho(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} = 0 \quad (7.1.12)$$

がいえる。

### 7.1.3 スピン自由度

電子のようにスピンを持つ粒子に対しては、スピンの自由度をも考えなければならない。スピンの1/2の粒子の場合、スピン up と down の二つの状態を取り得るので、状態は2成分の波動関数

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} \quad (7.1.13)$$

で表される。このとき、 $|\psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t)|^2$  は、点  $\mathbf{x}$  においてスピンの上向きの粒子を見いだす確率密度であり、 $|\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t)|^2$  は、点  $\mathbf{x}$  においてスピンの下向きの粒子を見いだす確率密度である。したがって、スピンの向きは問わずに、粒子が点  $\mathbf{x}$  に見いだされる確率密度は、

$$|\psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t)|^2 + |\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (7.1.14)$$

で与えられる。これはまた、

$$\psi^{\dagger}(\mathbf{x}, t) = \left( \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, t) \quad \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, t) \right) \quad (7.1.15)$$

なる  $\psi^{\dagger}(\mathbf{x}, t)$  を用いれば、

$$\psi^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.1.16)$$

で与えられる。実際、行列のかけ算の規則により、

$$\begin{aligned} \psi^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) &= \left( \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, t) \quad \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, t) \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} \\ &= \psi_{\uparrow}^*(\mathbf{x}, t) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t) + \psi_{\downarrow}^*(\mathbf{x}, t) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t) \\ &= |\psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t)|^2 + |\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t)|^2 \end{aligned} \quad (7.1.17)$$

となって、(7.1.14) に一致する。特に、全確率は、

$$\int_{\text{全空間}} \psi^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} \quad (7.1.18)$$

で与えられる。確率の保存のためには、

$$\frac{d}{dt} \int_{\text{全空間}} \psi^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} = 0 \quad (7.1.19)$$

が成り立たなければならない。

シュレーディンガー方程式、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.1.20)$$

におけるハミルトニアン  $\hat{H}$  が、いつものように,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x}) \quad (7.1.21)$$

と書けるとしよう。ただし今の場合、ハミルトニアンが作用する波動関数は2成分であるので、ポテンシャル  $V(\mathbf{x})$  は、一般には、2行2列の行列である。このようなハミルトニアンのもとで  $\psi(\mathbf{x}, t)$  が時間発展をする場合、ポテンシャルの行列  $V$  がエルミート行列、すなわち、

$$V^\dagger = V$$

が成り立てば、確率の保存が成り立つことがわかる。ここで  $V^\dagger$  はもちろん、行列  $V$  のエルミート共役である (随伴行列ともいう)。すなわち、

$$V = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix} \quad \text{のとき} \quad V^\dagger = \begin{pmatrix} V_{11}^* & V_{21}^* \\ V_{12}^* & V_{22}^* \end{pmatrix}.$$

さて、 $V$  がエルミート行列として、確率の保存を確かめてみよう。確率密度を

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.1.22)$$

とし、確率の流れの密度  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  として、

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) \right) \quad (7.1.23)$$

とおくと、連続の式、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0 \quad (7.1.24)$$

が成り立つことが示せる。実際、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) \\ &= \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi + \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x}^2} + V\psi \right)^\dagger \psi + \psi^\dagger \frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x}^2} + V\psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \frac{\partial^2 \psi^\dagger}{\partial \mathbf{x}^2} \psi - \psi^\dagger \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x}^2} \right) - \frac{1}{i\hbar} ((V\psi)^\dagger \psi - \psi^\dagger V\psi) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \frac{\partial^2 \psi^\dagger}{\partial \mathbf{x}^2} \psi - \psi^\dagger \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x}^2} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot \left( \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial \mathbf{x}} \psi - \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{x}} \right) \\ &= -\text{div } \mathbf{j} \end{aligned} \quad (7.1.25)$$



となって連続の式が導かれる．なお，4行目から5行目への変形では，行列の積に対するエルミート共役の式と  $V$  のエルミート性を使って， $(V\psi)^\dagger = \psi^\dagger V^\dagger = \psi^\dagger V$  として，ポテンシャルの項の計算を行った．

このように，多成分の波動関数に対するハミルトニアン<sup>1</sup>のエルミート性は，微分演算子としてだけでなく，行列としてのエルミート性も考えなければならない．一般の物理量を表す演算子も同様である．

スピン角運動量を表す演算子  $\hat{\mathbf{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z)$  は，スピン  $1/2$  の場合には，2行2列の行列で表される：

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_1, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_2, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_3. \quad (7.1.26)$$

ここで， $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  はパウリ行列

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.1.27)$$

である．これらの定義式を見ればわかるように，パウリ行列は3つともエルミート行列である．したがって，スピン演算子  $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$  もエルミート行列である．また，角運動量演算子としての交換関係，

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar\hat{s}_z, \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hbar\hat{s}_x, \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hbar\hat{s}_y, \quad (7.1.28)$$

は，パウリ行列の交換関係，

$$[\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3, \quad [\sigma_2, \sigma_3] = 2i\sigma_1, \quad [\sigma_3, \sigma_1] = 2i\sigma_2, \quad (7.1.29)$$

によって保証されている．パウリ行列の交換関係は，より詳細な次の性質から導くことができる：

$$\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3, \quad \sigma_2\sigma_3 = -\sigma_3\sigma_2 = i\sigma_1, \quad \sigma_3\sigma_1 = -\sigma_1\sigma_3 = i\sigma_2. \quad (7.1.30)$$

また，次の式も成り立つ：

$$(\sigma_1)^2 = (\sigma_2)^2 = (\sigma_3)^2 = 1. \quad (7.1.31)$$

ただし，最右辺において1と書いたのは，2行2列の単位行列のつもりである<sup>1</sup>．異なる  $\sigma_i$  同士が反交換することと，2乗したら単位行列となることを合わせると，

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \quad (7.1.32)$$

と表すこともできる．ここで， $\{, \}$  はもちろん反交換子である．

**問 7.1** パウリ行列の定義 (7.1.27) を使って，パウリ行列の性質 (7.1.30), (7.1.31) が成り立つことを確かめよ．

<sup>1</sup>本当は  $I$  とか  $\mathbf{1}$  とかを使うべきかもしれないが，ここでは簡単に1を使うことにする．次の式の  $\delta_{ij}$  についても， $i=j$  なら  $\delta_{ij} = 1$  となるが，この1も必要に応じて単位行列として理解する．

## 7.2 Klein-Gordon 方程式

相対論的な波動方程式（シュレーディンガー方程式の相対論的なバージョン）を見つけるには、相対論的なエネルギーと運動量の関係から出発すればよいだろう。質量  $m$  の自由粒子を考えれば、エネルギー  $E$  と運動量  $\mathbf{p}$  との間には、

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (7.2.1)$$

が成り立つ ( $c$  は光速)。したがって、 $E$  について解けば、

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (7.2.2)$$

となるが、エネルギーが負となるのを避ければ、

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (7.2.3)$$

である。

### 7.2.1 試み 1

エネルギーと運動量の関係式 (7.2.3) にもとづいて波動方程式を求めてみよう。

step 1) エネルギーと運動量の関係：

$$E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}.$$

step 2)  $E$  と  $\mathbf{p}$  の置き換え：

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t},$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}.$$

step 3) 置き換えたものを step 1) の式に代入し、それらのうしろに波動関数を置く：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4} \psi(\mathbf{x}, t). \quad (7.2.4)$$

これで、一応は得られたが、その結果は次の点で気に入らない。

- ルートの記号の中に微分演算子  $\nabla^2$  が入っているのがイヤだ。

そのため、取り扱いが難しそう。例えば、確率の流れの密度が作れそうにない。

ちゃんと調べてみると、 $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$  を確率密度と解釈したとして、この波動方程式のもとでは、確率密度が光速よりも速く移動することが導かれる。つまり、Einstein の因果律に反する<sup>2</sup>。

<sup>2</sup>ルートをとるとき負のエネルギーの方を捨ててしまった結果によるものらしい。

- 時間  $t$  と空間  $\mathbf{x}$  が対等な形になっていないのがイヤだ.

相対論的であるならば，時間と空間（時間微分と空間微分）は対等に入っているべきだから．

## 7.2.2 試み2：クライン-ゴルドン

試み1では，ルートをとったのが敗因．そこで，ルートをとる前の (7.2.1) にもとづいて考える．

step 1) エネルギーと運動量の関係：

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4.$$

step 2)  $E$  と  $\mathbf{p}$  の置き換え：

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \\ \mathbf{p} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}. \end{aligned}$$

step 3) 置き換えたものを step 1) の式に代入し，それらのうしろに波動関数を置く：

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \psi(\mathbf{x}, t) = \left[c^2 \left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right)^2 + m^2 c^4\right] \psi(\mathbf{x}, t).$$

あるいは，これを整理すると，

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right] \psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (7.2.5)$$

得られた波動方程式は，Klein-Gordon 方程式として知られている<sup>3</sup>．ダランベルシアン  $\square$  を

$$\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (7.2.6)$$

で定義すると，Klein-Gordon 方程式は，

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right] \psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (7.2.7)$$

と書くこともできる．ダランベルシアン  $\square$  はラプラシアン  $\Delta = \nabla^2$  の4次元版とも言える．

Klein-Gordon 方程式は，

<sup>3</sup>Klein-Gordon 方程式を最初に見つけたのはシュレーディンガーである．彼は，この式にもとづいていろいろ調べてみたが，なかなか望みの結果が出なかったため，非相対論的な近似を用いてシュレーディンガー方程式を作ってみたが旨くいったらしい．

- $t$  微分と  $\mathbf{x}$  微分が対等に入っている.

という点で、確かに相対論的な波動方程式であることがわかる. この点で、試み 1 よりは改善している.

しかし、次の点で不満足である：

- 量子力学の波動関数に対する式としては使えない.

$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$  を確率密度として考えることが出来ない. これを確率密度としたとしても確率が保存しなくなるからである.

別に保存量は存在する.

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) \quad (7.2.8)$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi \right) \quad (7.2.9)$$

と置くと、Klein-Gordon 方程式を使うことで、 $\rho$  と  $\mathbf{j}$  が連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (7.2.10)$$

を満たすことを示すことができる. したがって、 $(|\psi|^2)$  の積分は保存しなくとも)

$$\int_{\text{全空間}} \rho(\mathbf{x}, t) d^3\mathbf{x} \quad (7.2.11)$$

は保存する.

$\rho(\mathbf{x}, t)$  が保存量を定義するからといって、 $\rho$  を確率密度と解釈するわけにはいかない. なぜならば、 $\rho$  は  $(|\psi|^2)$  とは違って) 正にも負にもなり得るからである. (確率密度であるからには常に正でなければならない.) 例えば、 $\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i\omega t} u(\mathbf{x})$  の場合には、

$$\rho = \frac{\hbar\omega}{mc^2} |u(\mathbf{x})|^2$$

となる. つまり、 $\omega$  の正負に応じて  $\rho$  の正負が決まる.

正負両方の符号がとれるのは、 $\rho$  を定義する式の中に、時間微分がはいっていたためである. Klein-Gordon 方程式が時間に関して 2 階微分であったため、 $\rho$  の中に  $t$  の 1 階微分がなければ、Klein-Gordon を使って連続の式を示すことができないからである.

- 負エネルギーの解がある.

平面波解を探すため、 $\psi = e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})/\hbar}$  を仮定して、Klein-Gordon 方程式に代入すると、

$$-\frac{E^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} = 0.$$

整理すると,

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$$

が得られる. したがって, エネルギー  $E$  は

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

と正と負の可能性がある.

初期状態として正エネルギー解を選べばいいと思うかもしれない. しかし, 少しでも相互作用を考えると<sup>4</sup>うまく行かないことがわかる. 例えば, 電磁場と相互作用しているとすれば, 正エネルギーの粒子は, 電磁波 (or 光子) を放出してエネルギーを失うことで, 負エネルギー状態に容易に落ちることが出来る. 負エネルギーでは,  $E = -\sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$  であるため, 更に電磁波を放出しながら  $|\mathbf{p}| \rightarrow \infty$  となって,  $E \rightarrow -\infty$  となるであろう.

Klein-Gordon 方程式について, ここまでまとめると,

- Klein-Gordon 方程式は時間に関して 2 階の微分方程式である.
- Klein-Gordon 方程式は相対論的な波動方程式である.
- 確率解釈ができるための, 正定値の保存量が存在しない. したがって, 量子力学の波動関数に対する式としては不適切である.
- 負エネルギー解を含む.

これらのことは互いに関連している. 2 階微分にしたために (ルートがいらなくなって) 相対論的になったのであるが, そのために, 正定値の保存量が存在しなくなったり, 負エネルギー解が現れたりするのである.

## 7.3 Dirac 方程式

### 7.3.1 試み 3 : ディラック

クライン-ゴールドン方程式では, 正定値の保存量がなかったため, 確率解釈がうまくいかなかった. これは Klein-Gordon 方程式が, 時間に関して 2 階の微分方程式であったためである (そのため,  $\rho$  の定義に時間の 1 階微分が含まれてしまった. そうでなければ,  $\rho = \psi^* \psi \geq 0$  とできたかもしれない.) そこで Dirac は, 時間に関する 1 階微分の波動方程式を探した. かといって, (7.2.4) のようなルートの中に空間微分が入るのは困る. 相対論的であるならば, 時間と空間は対等な形で現れなければならない. すなわち, 時間微分が 1 階なら, 空間微分も 1 階でなければならない.

<sup>4</sup>観測される粒子であるならば, 少なくとも観測装置とは相互作用をしなければならない.

これは、相対論的なエネルギーと運動量の関係式

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (7.2.1)$$

において、ルートをとって  $E$  に対する式にしたときに、

$$E = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} c + \beta m c^2 \quad (7.3.1)$$

のように、 $\mathbf{p}$  の 1 次式で与えられることを要求している<sup>5</sup>。

このような式は不可能のように思うかもしれない。しかし、求めている波動方程式が多成分の波動関数に対するものと考えれば、右辺の係数  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  や  $\beta$  が行列であるとしてもいいだろう。行列であれば、ルートが 1 次式になることもあり得るだろう。

では、 $\boldsymbol{\alpha}$ ,  $\beta$  を適当な行列として (7.3.1) 式の 2 乗が、(7.2.1) になるかどうかをみてみよう。ただし、以下では簡単のため、 $c = 1$  の単位系を使うものとし、 $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) = (p_1, p_2, p_3) = (p_i)$  などとする。

$$\begin{aligned} E^2 &= (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m)^2 \\ &= (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})^2 + (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})\beta m + \beta m(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + \beta^2 m^2 \end{aligned}$$

したがって、

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2 \quad (7.3.2)$$

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})\beta + \beta(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) = 0 \quad (7.3.3)$$

$$\beta^2 = 1 \quad (7.3.4)$$

が成り立てば (7.2.1) が再現される<sup>6</sup>。

第 1 式 (7.3.2) を見てみよう。

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})^2 \\ &= (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + m\beta)^2 \\ &= \alpha_1^2 p_1^2 + \alpha_2^2 p_2^2 + \alpha_3^2 p_3^2 \\ &\quad + \alpha_1 p_1 \alpha_2 p_2 + \alpha_2 p_2 \alpha_1 p_1 \\ &\quad + \alpha_2 p_2 \alpha_3 p_3 + \alpha_3 p_3 \alpha_2 p_2 \\ &\quad + \alpha_3 p_3 \alpha_1 p_1 + \alpha_1 p_1 \alpha_3 p_3 \\ &= (\alpha_1)^2 p_1^2 + (\alpha_2)^2 p_2^2 + (\alpha_3)^2 p_3^2 \\ &\quad + (\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1) p_1 p_2 \\ &\quad + (\alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2) p_2 p_3 \\ &\quad + (\alpha_3 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_3) p_3 p_1 \end{aligned}$$

<sup>5</sup>  $\boldsymbol{\alpha}$  と  $\beta$  は無次元量である (そうなるように  $c$  を導入した)。

<sup>6</sup> もちろん、第 1 式と第 3 式の右辺には単位行列を補って考える。同じように、第 2 式の右辺の 0 はゼロ行列 (すべての成分が 0 の行列) である。

これが、任意の  $\mathbf{p}$  に対して

$$(\text{右辺}) = \mathbf{p}^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$$

に等しくなるためには、

$$\begin{cases} (\alpha_1)^2 = (\alpha_2)^2 = (\alpha_3)^2 = 1 \\ \alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1 = 0 \\ \alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_2 = 0 \\ \alpha_3\alpha_1 + \alpha_1\alpha_3 = 0 \end{cases} \quad (7.3.5)$$

が成り立たなければならない<sup>7</sup>。

第2式(7.3.3)からは、

$$(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3)\beta + \beta(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3) = 0.$$

すなわち、

$$(\alpha_1\beta + \beta\alpha_1)p_1 + (\alpha_2\beta + \beta\alpha_2)p_2 + (\alpha_3\beta + \beta\alpha_3)p_3 = 0$$

が任意の  $\mathbf{p}$  に対して成り立たなければならない。これより、

$$\begin{cases} \alpha_1\beta + \beta\alpha_1 = 0 \\ \alpha_2\beta + \beta\alpha_2 = 0 \\ \alpha_3\beta + \beta\alpha_3 = 0 \end{cases} \quad (7.3.6)$$

これらと、第3式(7.3.4)をまとめると ( $i, j = 1, 2, 3$  として)、次のように表すことができる。

$$\begin{cases} \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij} \\ \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0 \\ \beta^2 = 1 \end{cases} \quad (7.3.7)$$

つまり、これら4つの行列  $\beta, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  は、お互いに反交換し、またそれぞれを2乗したら単位行列となる行列である。

また、ハミルトニアン

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m$$

がエルミートでなければならないことを考えると、 $\alpha_i, \beta$  がエルミート行列でなければならないこともわかる。

<sup>7</sup> 1行目の式の最右辺にある1は、単位行列を表している。

上の反交換関係をみるとパウリ行列の満たす反交換関係 (7.1.32) を思い出す。つまり、3個の行列でいいのであれば  $2 \times 2$  行列として答えがわかっている。では、4個の行列が必要な今の場合はどうであろうか。上のような反交換関係を満たす4つのエルミート行列は、4行4列の行列として実現することができるのである：4行4列の行列を2行2列の行列4個をブロック状に並べたものとして、

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.3.8)$$

とすればよい。ここで、ベクトル記法で書いた  $\boldsymbol{\alpha}$  に対する式は、もちろん、

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.3.9)$$

の意味である。このようにパウリ行列を使って定義された  $\alpha_i$  や  $\beta$  が反交換関係 (7.3.7) を満たすことは容易に確認することができる。

**問 7.2**  $A, B, C, D$  を4個の2行2列の行列とし、これらを用いて4行4列の行列  $X$  を

$$X = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

で定義する。このとき、行列  $X$  のエルミート共役  $X^\dagger$  は、

$$X^\dagger = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} A^\dagger & C^\dagger \\ B^\dagger & D^\dagger \end{pmatrix} \quad (7.3.10)$$

となることを確認せよ。

**問 7.3** 4行4列の行列  $X$  を上の問題と同じものとし、さらに行列  $X'$  を2行2列の  $A', B', C', D'$  を用いて同じように表したものとする。すなわち、

$$X = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad X' = \begin{pmatrix} A' & B' \\ C' & D' \end{pmatrix}$$

である。このとき、

$$XX' = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' & B' \\ C' & D' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AA' + BC' & AB' + BD' \\ CA' + DC' & CB' + DD' \end{pmatrix} \quad (7.3.11)$$

が成り立つことを確認せよ。

**問 7.4** 上の公式 (7.3.11) の鑑賞ポイントを言うことにより、記憶にとどめ易くせよ。



問 7.5 (7.3.8), (7.3.9) で定義される 4 つの行列  $\alpha_i, \beta$  がエルミート行列であることを確かめよ. その際, 公式 (7.3.10) とパウリ行列がエルミートであることを使ってよい.

問 7.6 (7.3.8), (7.3.9) で定義される 4 つの行列  $\alpha_i, \beta$  が反交換関係 (7.3.7) を満たすことを確かめよ. その際, 公式 (7.3.11) とパウリ行列の反交換関係 (7.1.32) を使ってよい.

問 7.7 反交換関係 (7.3.7) は, 反交換子  $\{, \}$  の記号を使えば,

$$\begin{aligned} \{\alpha_i, \alpha_j\} &= 2\delta_{ij} \\ \{\alpha_i, \beta\} &= 0 \\ \{\beta, \beta\} &= 2 \end{aligned} \tag{7.3.12}$$

と表すことができることを確認せよ.

問 7.8 次の計算は,  $\alpha_i$  に対する反交換関係 ((7.3.7) の第 1 式 or (7.3.12) の第 1 式) を使って,  $(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$  が成り立つことを確認しているものである. 各ステップごとに根拠を説明せよ.

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})^2 &= \left( \sum_{i=1}^3 \alpha_i p_i \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^3 \alpha_i p_i \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i \alpha_j p_i p_j \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_j \alpha_i p_j p_i \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_j \alpha_i p_i p_j \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) p_i p_j \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \delta_{ij} p_i p_j \\ &= \sum_{i=1}^3 p_i p_i \\ &= \sum_{i=1}^3 (p_i)^2 \\ &= \mathbf{p}^2 \end{aligned}$$

さて、ここまでの議論で、(7.3.8)式で定義される行列  $\alpha_i, \beta$  を使えば、エネルギー  $E$  を  $\mathbf{p}$  と  $\mathbf{x}$  で表したものの、ハミルトニアン  $H(\mathbf{p}, \mathbf{x})$  が  $\mathbf{p}$  の1次式で表すことができた:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m$$

と表されることがわかった。あるいは、光速  $c$  を復活すれば、

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} c + \beta m c^2 \quad (7.3.13)$$

である。これにもとづいて波動方程式を求めてみよう。

**step 1)** エネルギーと運動量の関係:

$$\begin{aligned} E &= H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \\ &= \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} c + \beta m c^2. \end{aligned}$$

**step 2)**  $E$  と  $\mathbf{p}$  の置き換え:

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \\ \mathbf{p} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = -i\hbar \nabla. \end{aligned}$$

**step 3)** 置き換えたものを step 1) の式に代入し、それらのうしろに波動関数を置く:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta m c^2) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.3.14)$$

(7.3.14)式はディラック方程式と呼ばれている。ここで、 $\boldsymbol{\alpha}$  や  $\beta$  が4行4列の行列であるので、波動関数  $\psi(\mathbf{x}, t)$  はもちろん、4成分の波動関数である:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (7.3.15)$$

### 7.3.2 Dirac 方程式における保存量

望み通り、時間に関して1階の(空間に関して1階)の微分方程式が得られたので、「確率の保存」を調べてみよう。いつものように

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.3.16)$$

として,  $\partial\rho/\partial t$  を調べてみよう. そのため, Dirac 方程式をもう一度書いておこう:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\psi + \beta mc^2\psi \quad (7.3.14)$$

これより,  $\psi^\dagger$  に対しては,

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t} = i\hbar c\nabla\psi^\dagger\cdot\boldsymbol{\alpha} + mc^2\psi^\dagger\beta \quad (7.3.17)$$

となる. ここで,  $\boldsymbol{\alpha}$  と  $\beta$  がエルミート行列であることを使った.

これらを使うと,

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger\psi) \\ &= \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi + \psi^\dagger\frac{\partial\psi}{\partial t} \\ &= \frac{1}{-i\hbar}(i\hbar c\nabla\psi^\dagger\cdot\boldsymbol{\alpha} + mc^2\psi^\dagger\beta)\psi + \frac{1}{i\hbar}\psi^\dagger(-i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\psi + \beta mc^2\psi) \\ &= -c(\nabla\psi^\dagger\cdot\boldsymbol{\alpha}\psi + \psi^\dagger\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\psi) + \frac{1}{-i\hbar}(mc^2\psi^\dagger\beta\psi - \psi^\dagger\beta mc^2\psi) \\ &= -\nabla(\psi^\dagger\boldsymbol{\alpha}c\psi). \end{aligned} \quad (7.3.18)$$

したがって, 流れの密度  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  を

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{x}, t)\boldsymbol{\alpha}c\psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.3.19)$$

で定義すれば, 確かに, 連続の式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j} = 0 \quad (7.3.20)$$

が成り立つ. したがって,

$$\frac{d}{dt}\int_{\text{全空間}}\rho(\mathbf{x}, t)d^3\mathbf{x} = 0$$

が成り立ち,  $\rho$  を全空間に渡って積分したものは保存する. しかも, 今回は, この保存量 (の密度) が正であることも容易にわかる:

$$\begin{aligned} \rho = \psi^\dagger\psi &= \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \psi_4^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \\ &= \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 + \psi_3^*\psi_3 + \psi_4^*\psi_4 \\ &= |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 \geq 0. \end{aligned}$$

### 7.3.3 Dirac 方程式の平面波解

そろそろ面倒になったので、 $\hbar = 1, c = 1$  の単位系（自然単位系）で考える。このとき、Dirac 方程式は、

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \psi + \beta m \psi \quad (7.3.21)$$

となる。 $\psi(\mathbf{x}, t)$  に対して平面波の形

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} u \quad (7.3.22)$$

を仮定する。ここで、 $u$  は  $t$  や  $\mathbf{x}$  に依存しない 4 成分の量

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

である。(7.3.22) を (7.3.21) に代入すると、

$$E e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} u = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} u + \beta m e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} u.$$

これを整理すれば、 $u$  が

$$H(\mathbf{p})u = Eu, \quad (7.3.23)$$

を満たせば、(7.3.22) の  $\psi$  が Dirac 方程式の解となる。ここで、 $H(\mathbf{p})$  は、

$$H(\mathbf{p}) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m \quad (7.3.24)$$

なる 4 行 4 列の行列として表されるハミルトニアンである。

したがって、平面波解（運動量の確定している解）を求めるのは、行列  $H(\mathbf{p})$  の固有値問題 (7.3.23) を解けばよいことになる。ここでは、簡単のため、 $\mathbf{p} = \mathbf{0}$  の場合で求めてみよう。このとき、ハミルトニアン  $H(\mathbf{p}) = H(\mathbf{0})$  は

$$H(\mathbf{0}) = \beta m = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m \end{pmatrix} \quad (7.3.25)$$

である。したがって、固有値は  $E = \pm m$  であり、対応する固有ベクトルは、

$$u^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.3.26)$$

である。 $u^{(1)}$  と  $u^{(2)}$  が正エネルギー  $E = +m$  に対応し、 $u^{(3)}$  と  $u^{(4)}$  が負エネルギー  $E = -m$  に対応する。 $\mathbf{p} = \mathbf{0}$  の例で調べただけだが、Dirac 方程式にはやはり負エネルギー解が含まれることがわかった。

参考： $\mathbf{p} \neq 0$  の場合

$\mathbf{p} \neq 0$  の場合の固有値問題もがんばれば求められる。(たかだか4行4列の行列の固有値問題である。) このときの  $H(\mathbf{p})$  は、2行2列の行列のブロックで表すと、

$$H(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} m & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m \end{pmatrix} \quad (7.3.27)$$

である。したがって、

$$\begin{pmatrix} m & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m \end{pmatrix} u = Eu \quad (7.3.28)$$

なる固有値問題を解けばよい。その結果、固有値は

$$E = \pm E_{\mathbf{p}} = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} \quad (7.3.29)$$

であり、対応する固有ベクトルは、2成分の  $\chi^{(s)}$  ( $s = 1, 2$ )

$$\chi^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.3.30)$$

を用いて、

$$u^{(s)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \chi^{(s)} \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_{\mathbf{p}} + m} \chi^{(s)} \end{pmatrix}, \quad (7.3.31)$$

$$u^{(s+2)}(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \frac{-\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_{\mathbf{p}} + m} \chi^{(s)} \\ \chi^{(s)} \end{pmatrix} \quad (7.3.32)$$

で与えられることがわかる。 $u^{(1)}(\mathbf{p})$  と  $u^{(2)}(\mathbf{p})$  が正エネルギー  $E = +E_{\mathbf{p}}$  に対応し、 $u^{(3)}(\mathbf{p})$  と  $u^{(4)}(\mathbf{p})$  が負エネルギー  $E = -E_{\mathbf{p}}$  に対応する。 $N$  は規格化の定数であり、

$$N = \sqrt{E_{\mathbf{p}} + m} \quad (7.3.33)$$

と選べば、

$$u^{(s)\dagger}(\mathbf{p}) u^{(s')}(\mathbf{p}) = 2E_{\mathbf{p}} \delta_{ss'}, \quad (s, s' = 1, 2, 3, 4) \quad (7.3.34)$$

が成り立つ。

**問 7.9** (7.3.31), (7.3.32) を (7.3.28) に代入することにより、 $u^{(1)}(\mathbf{p})$  と  $u^{(2)}(\mathbf{p})$  が固有値  $E = +E_{\mathbf{p}}$  に対応し、 $u^{(3)}(\mathbf{p})$  と  $u^{(4)}(\mathbf{p})$  が固有値  $E = -E_{\mathbf{p}}$  に対応していることを確認せよ。

**問 7.10**  $N = \sqrt{E_{\mathbf{p}} + m}$  のもとでは、(7.3.31), (7.3.32) が (7.3.34) を満たすことを確かめよ。

### 7.3.4 ディラックの海と陽電子

ここまで見てきたように、時間に関して1階の微分方程式を見つけたことにより、ディラックは正定値の保存量を導入することができた。

	Klein-Gordon	Dirac equation
正定値の保存量	No!	Yes
正エネルギーだけにできる?	No!	No (?)

しかしながら、負エネルギー解を避けることはできなかつた ( $E = \pm\sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2}$ )。こ

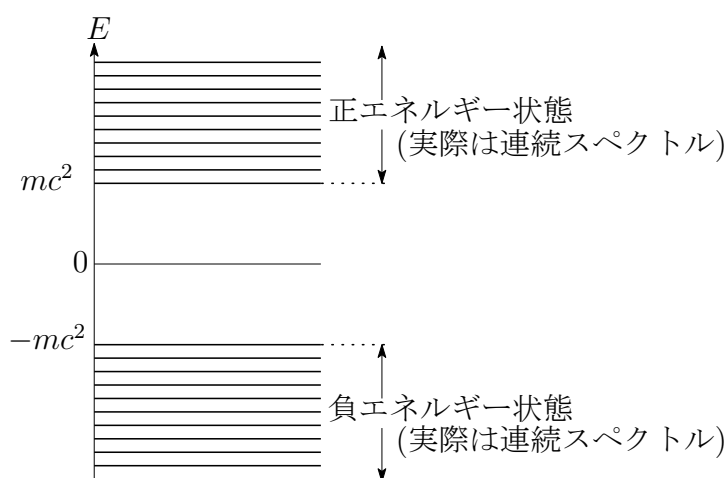


図 7.1: Dirac 方程式の解のエネルギースペクトル

の点では Klein-Gordon 方程式と同じである。初期状態として正エネルギー解しか考えなければいいと思うかもしれないが、電磁場などとの相互作用をかんが得れば、ただちに光子を放出して粒子は負エネルギー状態に落ち込むであろう。

これで万事休す!と思いきや、ディラックは起死回生のアイデアを思いついた。考えている粒子を電子だとしよう。電子にはパウリの排他原理が成り立つ。したがって、もし、すべての負エネルギー状態にすでに電子が存在していれば、正エネルギーの電子が負エネルギーに落ちることができない。これにより、正エネルギーの電子は安定に存在できる。



これは万事急須!

この、負エネルギーの電子に満ちている状態をディラックの海 (Dirac sea) という。

真空は空っぽの状態ではなく、すべての負エネルギーレベルが占有されている状態であると考えるのである。そうすると、真空にも電荷がありその値は  $-\infty$  ということになる。

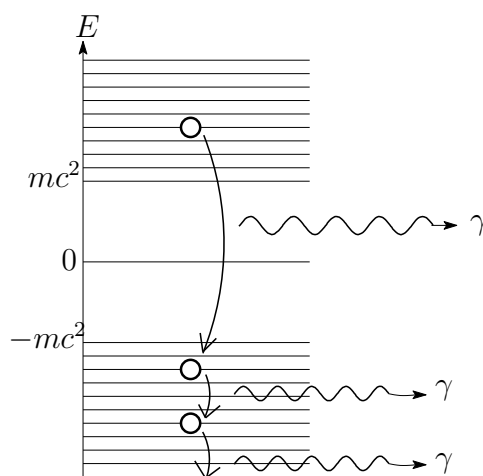


図 7.2: 電子は光子を放出して負エネルギー状態に落ちてしまう

しかし、われわれは、この値を基準として、プラスマイナスどの程度ずれるかで判断しているのである。

ではこのような真空中に、高エネルギーのガンマ線などがやってきて、一個の負エネルギー電子にエネルギーを与えたとしよう。十分に大きなエネルギーを与えられれば、この電子は正エネルギー状態に励起される。そうすると、最初は「何もなかった」真空が、正エネルギーの電子が1個と、負エネルギーの海に開いた穴 (hole) があることになる。この穴 (孔ともかく) は、マイナスの電気で満ちた海の中の孔であるから、われわれにとっては、最初の状態から電荷  $-e$  がなくなったのであるから、結局は、電荷  $+e$  が現れたように見える。

同じように、励起される前の負エネルギー状態の電子の運動量を  $\mathbf{p}$ 、エネルギーを  $E = -E_{\mathbf{p}}$  とすれば、この状態に孔があいたのであれば、この孔は、真空を基準にして運動量  $-\mathbf{p}$ 、エネルギー  $+E_{\mathbf{p}}$  をもつものとして観測される。

こうして、Dirac sea を考えると、電子と質量が全く同じで、電荷の符号だけが逆の粒子の存在が予言される。実際、Dirac の理論が発表されてからまもなく、そのような粒子、陽電子 (positron) が発見された。

このように、Dirac は相対論と量子論の融合を考えることで、反物質の存在を予言したのである。

### 7.3.5 まとめ

相対論的な量子力学の模索をしていて、二つの、相対論的な波動方程式が得られた。Klein-Gordon 方程式と、Dirac 方程式である。

Klein-Gordon は、正定値の保存量もなく、負エネルギー状態も現れたため、量子力学の波動関数としては使えなかった。

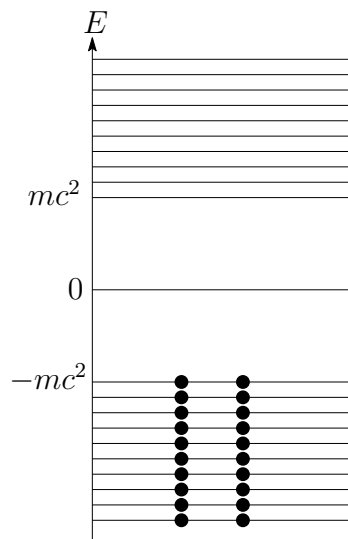


図 7.3: Dirac sea: 真空は負エネルギー状態の電子で満ちている

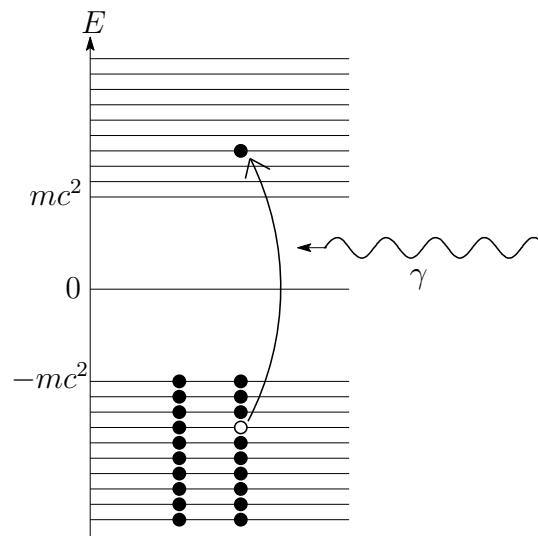


図 7.4: 電子・陽電子の対生成：孔 (hole) は正電荷・正質量の粒子として観測される

Dirac 方程式には、正定値の保存量があった。負エネルギー状態も現れるが、Dirac sea の考え方を使えば、何とか正エネルギーで安定する電子を考えることができた。

	Klein-Gordon	Dirac equation
正定値の保存量	No!	Yes
正エネルギーだけにできる?	No!	Dirac sea で何とか.
1 粒子状態を考えられる?	N.A.	不可. 無限個の負エネルギー電子.
第二量子化すれば	たぶん OK	きっと OK



しかし、そもそも1粒子の相対論的な量子力学を探していたのに、結果的に、無限個の負エネルギー電子を考えなくてはいけなかった。(その結果、対生成や対消滅も考えることになる。)ということは、せつかく正定値保存量が存在できるようになったけれど、電子1個の状態を表す波動関数というのは考えられなくなり、電子数の変化も考えざるを得なくなっている。

粒子数の変化まで考えるのであれば、これは第二量子化をしろということである。Dirac方程式にしたがう波動を古典的な波動場と思い、これを量子化すればいいだろう。

こう考えてくると、Klein-Gordon方程式にしたがう波動関数も、古典的な波動場と考えて量子化するのであれば、第一量子化レベルでの正定値の保存量がないことや、負エネルギーの問題も解決するかもしれない。

というわけで、相対論的量子力学の探索はこの辺にしておいて、次に、相対論的な波動方程式にしたがう場の量子化を考えよう。そのようなもの考えるのが、「相対論的場の量子論」である。

# 第8章 相対論的場の量子論 1 : スカラー場

この章では、スピン0の粒子に対応する、相対論的な波動方程式を満たす場の量子化(第二量子化)を考える。

スピン0の粒子に対応する場は、相対論的なスカラー場(4次元のスカラー場)で表される。スピンの0なので1成分の波動関数であり、Klein-Gordon方程式にしたがう場である。

考えるスカラー場を  $\phi(x) = \phi(\mathbf{x}, t)$  で表そう。  $\phi$  が満たす式は、Klein-Gordon方程式、

$$(\square + m^2)\phi = 0 \tag{8.0.1}$$

である。ここで、もちろん、  $\hbar = c = 1$  の単位系を仮定しており、  $\square = \partial^2/\partial t^2 - \nabla^2$  である。また、  $m$  は対応する粒子の質量である。

## 8.1 解析力学

### 8.1.1 ラグランジアン

上の Klein-Gordon 方程式を Euler-Lagrange 方程式としてもつラグランジアン密度は、  $\phi$  が複素数値をとる場とすると、

$$\mathcal{L} = \dot{\phi}^* \dot{\phi} - \nabla \phi^* \cdot \nabla \phi - m^2 \phi^* \phi \tag{8.1.1}$$

である。ただし、  $\dot{\phi} = \partial\phi/\partial t$  などである。実際、この  $\mathcal{L}$  のもとで作用積分を  $S = \int \mathcal{L} d^3\mathbf{x} dt = \int \mathcal{L} d^4x$  として変分を考えてみよう。いつものように、変分を考えるときには、  $\phi$  とその

複素共役  $\phi^*$  が独立な変数と考えてよい.  $\delta\phi^*$  の変分のもとでは,

$$\begin{aligned}
 0 &= \delta S \\
 &= \int \delta\mathcal{L} d^4x \\
 &= \int \left\{ \delta\dot{\phi}^* \dot{\phi} - \nabla\delta\phi^* \cdot \nabla\phi - m^2\delta\phi^* \phi \right\} d^4x \\
 &= \int \delta\phi^* \left( -\ddot{\phi} + \nabla^2\phi - m^2\phi \right) d^4x \\
 &= - \int \delta\phi^*(x)(\square + m^2)\phi(x) d^4x
 \end{aligned}$$

となる. 任意関数  $\delta\phi^*(x)$  に対して成り立つためには,  $\phi$  が確かに

$$(\square + m^2)\phi(x) = 0$$

を満たさなければならない. 同じように,  $\delta\phi$  のもとでの変分を考えれば,  $\phi^*(x)$  に対する Klein-Gordon 方程式

$$(\square + m^2)\phi^*(x) = 0$$

が導かれる.

$\phi, \phi^*$  が Klein-Gordon 方程式を満たすことは, 作用積分をあらかじめ部分積分をしておいて

$$\begin{aligned}
 S &= \int \mathcal{L} d^4x \\
 &= - \int \phi^*(\square + m^2)\phi d^4x \tag{8.1.2}
 \end{aligned}$$

$$= - \int (\square + m^2)\phi^* \cdot \phi d^4x \tag{8.1.3}$$

と表しておけば, もっとよくわかったかもしれない.  $\delta\phi^*$  の変分を考えるときには二行目の式で変分を考えれば直ちに  $\phi$  に対する Klein-Gordon 方程式が出る. また,  $\delta\phi$  の変分を考えるときには三行目の式で変分を考えれば  $\phi^*$  に対する Klein-Gordon 方程式がすぐに出てくる.

複素スカラー場  $\phi$  を実部と虚部にわけて

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 + i\phi_2) \tag{8.1.4}$$

$$\phi^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 - i\phi_2) \tag{8.1.5}$$

としよう.  $\phi_1$  と  $\phi_2$  は実スカラー場である. この式を,  $\phi$  に対するラグランジアン密度に代入すれば,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left\{ \dot{\phi}_1^2 - (\nabla\phi_1)^2 - m^2\phi_1^2 \right\} + \frac{1}{2} \left\{ \dot{\phi}_2^2 - (\nabla\phi_2)^2 - m^2\phi_2^2 \right\}$$

が得られる。一般に、1個の実スカラー場  $\varphi$  に対するラグランジアン密度は、

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \{ \dot{\varphi}^2 - (\nabla\varphi)^2 - m^2\varphi^2 \}$$

で与えられる。(この Euler-Lagrange 方程式から K-G 方程式が出てくとも容易に確かめることができる。) したがって、複素スカラー場の系は、質量の等しい実スカラー場が二個の系と等価である。

### 8.1.2 共役運動量, ハミルトニアン

ラグランジアン密度 (8.1.1) にもとづいて複素スカラー場に対する解析力学を考える。  $\phi$  に共役な運動量を  $\pi_\phi$ ,  $\phi^*$  に共役な運動量を  $\pi_{\phi^*}$  とすると, (8.1.1) より,

$$\pi_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \dot{\phi}^* \quad (8.1.6)$$

$$\pi_{\phi^*} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^*} = \dot{\phi}. \quad (8.1.7)$$

これより, ハミルトニアン密度は,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \pi_\phi \dot{\phi} + \pi_{\phi^*} \dot{\phi}^* - \mathcal{L} \\ &= \dot{\phi}^* \dot{\phi} + \dot{\phi} \dot{\phi}^* - \left\{ \dot{\phi}^* \dot{\phi} - \nabla\phi^* \cdot \nabla\phi - m^2\phi^*\phi \right\} \\ &= \dot{\phi}^* \dot{\phi} + \nabla\phi^* \cdot \nabla\phi + m^2\phi^*\phi. \end{aligned}$$

すなわち,

$$\mathcal{H} = \pi_\phi \pi_{\phi^*} + \nabla\phi^* \cdot \nabla\phi + m^2\phi^*\phi \quad (8.1.8)$$

である。ハミルトニアンは,

$$H = \int \mathcal{H} d^3\mathbf{x} = \int (\pi_\phi \pi_{\phi^*} + \nabla\phi^* \cdot \nabla\phi + m^2\phi^*\phi) d^3\mathbf{x}.$$

$\pi_\phi = \dot{\phi}^* = (\dot{\phi})^* = (\pi_{\phi^*})^*$  であることに注意すれば,  $\mathcal{H}$  が (したがってまた  $H$  も) 正定値 ( $\mathcal{H} \geq 0$ ) であることがわかる。

### 8.1.3 Poisson 括弧

場の変数  $\phi, \phi^*$  とその共役運動量  $\pi_\phi, \pi_{\phi^*}$  が正準変数である。これらの間には, 次のポアソン括弧式が成り立つ。互いに正準共役どうしではデルタ関数,

$$\{\phi(\mathbf{x}, t), \pi_\phi(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (8.1.9)$$

$$\{\phi^*(\mathbf{x}, t), \pi_{\phi^*}(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (8.1.10)$$

となり、それ以外の組み合わせではゼロとなる。

$$\{\phi(\mathbf{x}, t), \phi(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = \{\phi(\mathbf{x}, t), \phi^*(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = \{\phi^*(\mathbf{x}, t), \phi^*(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = 0, \quad (8.1.11)$$

$$\{\phi(\mathbf{x}, t), \pi_{\phi^*}(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = \{\phi^*(\mathbf{x}, t), \pi_{\phi}(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = 0, \quad (8.1.12)$$

$$\{\pi_{\phi}(\mathbf{x}, t), \pi_{\phi}(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = \{\pi_{\phi}(\mathbf{x}, t), \pi_{\phi^*}(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = \{\pi_{\phi^*}(\mathbf{x}, t), \pi_{\phi^*}(\mathbf{y}, t)\}_{\text{Pb}} = 0. \quad (8.1.13)$$

## 8.2 正準量子化

### 8.2.1 正準交換関係

いつものように、古典的正準変数である、場の変数  $\phi, \phi^*$  とその共役運動量  $\pi_{\phi}, \pi_{\phi^*}$  を、演算子に昇格させる。

$$\phi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.1)$$

$$\phi^*(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.2)$$

$$\pi_{\phi}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\pi}_{\phi}(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.3)$$

$$\pi_{\phi^*}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{x}, t). \quad (8.2.4)$$

ただし、 $\pi_{\phi} = (\pi_{\phi^*})^*$  に対応して、

$$\hat{\pi}_{\phi}(\mathbf{x}, t) = \hat{\pi}_{\phi^*}^\dagger(\mathbf{x}, t) \quad (8.2.5)$$

も成り立っている。

ポアソン括弧 (の  $i$  倍) を交換子に置き換えることで、次の (同時刻) 正準交換関係を設定する：

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_{\phi}(\mathbf{y}, t)] = i\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (8.2.6)$$

$$[\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{y}, t)] = i\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (8.2.7)$$

および、

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}(\mathbf{y}, t)] = [\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] = [\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] = 0, \quad (8.2.8)$$

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_{\phi}^\dagger(\mathbf{y}, t)] = [\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_{\phi}(\mathbf{y}, t)] = 0, \quad (8.2.9)$$

$$[\hat{\pi}_{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_{\phi}(\mathbf{y}, t)] = [\hat{\pi}_{\phi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{y}, t)] = [\hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{y}, t)] = 0. \quad (8.2.10)$$

すなわち、 $\hat{\phi}$  と  $\hat{\pi}_{\phi}$ 、 $\hat{\phi}^\dagger$  と  $\hat{\pi}_{\phi^*}$  の組み合わせのときに交換子はゼロではなく、それ以外の組み合わせはすべてゼロである。

## 8.2.2 ハミルトニアン演算子

場の変数が演算子になったことに対応して、ハミルトニアン密度やハミルトニアンも演算子に昇格する：

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\pi}_\phi \hat{\pi}_{\phi^*} + \nabla \hat{\phi}^\dagger \cdot \nabla \hat{\phi} + m^2 \hat{\phi}^\dagger \hat{\phi}, \quad (8.2.11)$$

$$\hat{H} = \int \hat{\mathcal{H}} d^3 \mathbf{x}. \quad (8.2.12)$$

(8.2.5) を使えば、 $\mathcal{H}$  の第一項は

$$\hat{\pi}_{\phi^*}^\dagger \hat{\pi}_{\phi^*}$$

とかけるので、 $\mathcal{H}$  の正定値性が保証されているのがわかる。

## 8.2.3 ハイゼンベルク方程式

上のハミルトニアン演算子のもと、(ハイゼンベルク描像における) 演算子の時間発展は、ハイゼンベルク方程式

$$\frac{d}{dt} \hat{O}(t) = i[\hat{H}, \hat{O}(t)] \quad (8.2.13)$$

によって記述される。

例えば、

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\phi}}(\mathbf{x}, t) &= i[\hat{H}, \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)] \\ &= i\left[\int \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{y}, t) d^3 \mathbf{y}, \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)\right] \\ &= i \int d^3 \mathbf{y} [\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{y}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)] \\ &= i \int d^3 \mathbf{y} [\hat{\pi}_\phi(\mathbf{y}, t) \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{y}, t) + \nabla \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{y}, t) \cdot \nabla \hat{\phi}(\mathbf{y}, t) + m^2 \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{y}, t) \hat{\phi}(\mathbf{y}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)] \\ &= i \int d^3 \mathbf{y} [\hat{\pi}_\phi(\mathbf{y}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)] \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{y}, t) \\ &= i \int d^3 \mathbf{y} (-i) \delta^3(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{y}, t) \\ &= \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (8.2.14)$$

もちろんここでは、いつものように、正準変数間の正準交換関係はもちろんのこと、交換子積の線形性を用いた。同じように、次のことも容易に示すことができる：

$$\dot{\hat{\phi}}^\dagger(\mathbf{x}, t) = i[\hat{H}, \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t)] = \hat{\pi}_\phi(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.15)$$

$$\dot{\hat{\pi}}_\phi(\mathbf{x}, t) = i[\hat{H}, \hat{\pi}_\phi(\mathbf{x}, t)] = (\nabla^2 - m^2) \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.16)$$

$$\dot{\hat{\pi}}_{\phi^*}(\mathbf{x}, t) = i[\hat{H}, \hat{\pi}_{\phi^*}(\mathbf{x}, t)] = (\nabla^2 - m^2) \hat{\phi}(\mathbf{x}, t). \quad (8.2.17)$$

これらからまた,

$$\ddot{\hat{\phi}}(\mathbf{x}, t) = (\nabla^2 - m^2)\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.18)$$

$$\ddot{\hat{\phi}^\dagger}(\mathbf{x}, t) = (\nabla^2 - m^2)\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.19)$$

が導かれる. これらは,  $\hat{\phi}$ ,  $\hat{\phi}^\dagger$  が Klein-Gordon 方程式

$$(\square + m^2)\hat{\phi}(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.20)$$

$$(\square + m^2)\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \quad (8.2.21)$$

を満たすことに他ならない.

**問 8.1** (8.2.15)~(8.2.21) が成り立つことを確かめよ.

## 8.2.4 平面波解

前章でもやったが, Klein-Gordon 方程式の古典的な解を思い出してみよう. 平面波解の候補として,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}$$

の形を仮定して, Klein-Gordon 方程式

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t) = 0$$

に代入すると,

$$[-E^2 + \mathbf{p}^2 + m^2] e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} = 0$$

となるので,  $E$  が  $\mathbf{p}$  の関数として,

$$E^2 = \mathbf{p}^2 + m^2$$

を満たせば, 上の平面波が解となる. そこで,

$$E_{\mathbf{p}} = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} \quad (8.2.22)$$

と置くと,  $E$  は

$$E = \pm E_{\mathbf{p}} \quad (8.2.23)$$

となり, 正エネルギー解と負エネルギー解,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp [i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \mp E_{\mathbf{p}} t)],$$

が得られる. 負エネルギー解に対しては,  $\mathbf{p}$  を  $-\mathbf{p}$  に置き換えたものを考えることにすれば,

$$E_{-\mathbf{p}} = E_{\mathbf{p}}$$

に注意すると,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp[-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E_{\mathbf{p}} t)],$$

が負エネルギー解である. 4次元運動量ベクトルを  $p = (p^0, \mathbf{p}) = (E_{\mathbf{p}}, \mathbf{p})$  とし, 4次元位置ベクトルを  $x = (x^0, \mathbf{x}) = (t, \mathbf{x})$  とすれば,  $p$  と  $x$  の4次元ベクトルとしての内積は,

$$px = p^0 x^0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} = E_{\mathbf{p}} t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \quad (8.2.24)$$

となる. これを使うと, Klein-Gordon 方程式の平面波解は,

$$\psi(x) = e^{\mp i p x} \quad (8.2.25)$$

と表される. 指数のマイナス符号が正エネルギー解で, プラス符号が負エネルギー解である. 正エネルギー解と負エネルギー解が互いに複素共役になっていることに注意しよう.

以下では,  $x, y, z$  方向に周期  $L$  の周期的境界条件を仮定する. したがって, 許される  $\mathbf{p}$  は,

$$\mathbf{p} = \frac{2\pi \mathbf{n}}{L} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z), \quad (n_x, n_y, n_z \text{ は整数}) \quad (8.2.26)$$

で与えられる.

また, 運動量  $\mathbf{p}$  に対応する正エネルギー解を, 適当な規格化因子をつけて,

$$\varphi_{\mathbf{p}}(x) = \frac{1}{\sqrt{V 2E_{\mathbf{p}}}} e^{-i p x} \quad (8.2.27)$$

で表す. 負エネルギー解はその複素共役,

$$\varphi_{\mathbf{p}}^*(x) = \frac{1}{\sqrt{V 2E_{\mathbf{p}}}} e^{+i p x} \quad (8.2.28)$$

で表される. ここで,  $V$  は全空間の体積  $V = L^3$  である. これらの関数の間には, 次の(直交)関係が成り立つ.

$$\int \varphi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}, t) \varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \delta_{\mathbf{p} \mathbf{p}'} \quad (8.2.29)$$

$$\int \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) \varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \delta_{\mathbf{p}, -\mathbf{p}'} \exp(-2i E_{\mathbf{p}} t) \quad (8.2.30)$$

$$\int \varphi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}, t) \varphi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \delta_{\mathbf{p}, -\mathbf{p}'} \exp(+2i E_{\mathbf{p}} t) \quad (8.2.31)$$

積分範囲はもちろん  $V = L^3$  の全空間である ( $x, y, z$  とも  $-L/2 \sim +L/2$ ).

問 8.2 (8.2.29)~(8.2.31) を確かめよ.



上の直交関係 (8.2.29)~(8.2.31) では, 正エネルギー解同士や負エネルギー解同士はいいが, 正エネルギー解と負エネルギー解が直交しない. しかも, 変な時間依存性  $\exp(\pm 2iE_{\mathbf{p}} t)$  も表れる. そこで, Klein-Gordon 方程式を満たす関数の間の内積として, 次のものを利用する:

$$i \int \varphi_1^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_2(x) d^3 \mathbf{x} \quad (8.2.32)$$

ただし, ここで,  $\partial_0 = \partial/\partial t$  であり,  $\overleftrightarrow{\partial}_0 = \overrightarrow{\partial}_0 - \overleftarrow{\partial}_0$  である. すなわち,

$$\begin{aligned} \varphi_1^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_2(x) &= \varphi_1^*(x) \partial_0 \varphi_2(x) - \partial_0 \varphi_1^*(x) \cdot \varphi_2(x) \\ &= \varphi_1^*(x) \dot{\varphi}_2(x) - \dot{\varphi}_1^*(x) \varphi_2(x). \end{aligned} \quad (8.2.33)$$

この内積を使うと,

$$i \int \varphi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}, t) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \quad (8.2.34)$$

$$i \int \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} = 0, \quad (8.2.35)$$

$$i \int \varphi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}, t) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{x}, t) d^3 \mathbf{x} = 0, \quad (8.2.36)$$

が成り立つ. このように, この内積では正エネルギー解と負エネルギー解が直交するので都合がよい. ( $\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t)$  の規格化因子のルートの中に入っていた,  $2E_{\mathbf{p}}$  はこの内積の結果をきれいにするためだったのである.)

**問 8.3**  $\varphi_1(x)$  と  $\varphi_2(x)$  が Klein-Gordon 方程式  $(\square + m^2)\varphi_j(x) = 0$  ( $j = 1, 2$ ) を満たすならば, (8.2.32) で定義される内積は, 時刻  $t (= x^0)$  に依存しないことを確かめよ.

**問 8.4** (8.2.34)~(8.2.36) を確かめよ.

## 8.2.5 平面波展開と生成消滅演算子

Klein-Gordon 方程式の (周期  $L$  の境界条件のもとでの) 一般解  $\psi(x) = \psi(\mathbf{x}, t)$  は, 基本解である平面波  $\varphi_{\mathbf{p}}(x)$  と  $\varphi_{\mathbf{p}}^*(x)$  の線形結合で表される:

$$\psi(x) = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ a(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}(x) + b^*(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \right\}.$$

ここで,  $a(\mathbf{p})$  と  $b^*(\mathbf{p})$  は展開係数である. 非相対論的なシュレーディンガー方程式の場合と異なり, 展開する基本解には, 負エネルギー解もあることに注意しよう. (負エネルギー

解に対する展開係数を  $b$  ではなく  $b^*$  としたのはあとの都合のためである.)  $\psi$  が与えられたとき, 展開係数を求めるには, 直交関係 (8.2.34)~(8.2.36) を用いる. 例えば,

$$\begin{aligned}
& i \int \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \psi(x) d^3 \mathbf{x} \\
&= i \int d^3 \mathbf{x} \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \sum_{\mathbf{p}'} \left\{ a(\mathbf{p}') \varphi_{\mathbf{p}'}(x) + b^*(\mathbf{p}') \varphi_{\mathbf{p}'}^*(x) \right\} \\
&= \sum_{\mathbf{p}'} \left\{ a(\mathbf{p}') i \int \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}'}(x) d^3 \mathbf{x} + b^*(\mathbf{p}') i \int \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}'}^*(x) d^3 \mathbf{x} \right\} \\
&= \sum_{\mathbf{p}'} \left\{ a(\mathbf{p}') \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} + b^*(\mathbf{p}') 0 \right\} \\
&= a(\mathbf{p})
\end{aligned} \tag{8.2.37}$$

量子化された場の演算子  $\hat{\phi}(x)$ ,  $\hat{\phi}^\dagger(x)$  も Klein-Gordon 方程式を満たすので,  $\varphi_{\mathbf{p}}(x)$  と  $\varphi_{\mathbf{p}}^*(x)$  の線形結合で表すことができる. ただし, 今の場合, 展開係数は演算子となる:

$$\hat{\phi}(x) = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}(x) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \right\}, \tag{8.2.38}$$

$$\hat{\phi}^\dagger(x) = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) + \hat{b}(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}(x) \right\}. \tag{8.2.39}$$

もちろん,  $\hat{\phi}(x)$ ,  $\hat{\phi}^\dagger(x)$  から展開係数  $\hat{a}(\mathbf{p})$ ,  $\hat{b}(\mathbf{p})$ ,  $\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})$ ,  $\hat{b}^\dagger(\mathbf{p})$  を求めるには, 直交関係 (8.2.34)~(8.2.36) を用いればよい:

$$\hat{a}(\mathbf{p}) = i \int \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \hat{\phi}(x) d^3 \mathbf{x}, \tag{8.2.40}$$

$$\hat{b}(\mathbf{p}) = i \int \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \hat{\phi}^\dagger(x) d^3 \mathbf{x}, \tag{8.2.41}$$

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) = i \int \hat{\phi}^\dagger(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}}(x) d^3 \mathbf{x}, \tag{8.2.42}$$

$$\hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) = i \int \hat{\phi}(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}}(x) d^3 \mathbf{x}. \tag{8.2.43}$$

あるいは,  $\overleftrightarrow{\partial}_0$  を具体的に計算して,  $\hat{\phi}(x) = \hat{\pi}_{\phi^*}$ ,  $\hat{\phi}^\dagger(x) = \hat{\pi}_\phi$  を使えば,

$$\hat{a}(\mathbf{p}) = i \int \left\{ \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \hat{\pi}_{\phi^*}(x) - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \hat{\phi}(x) \right\} d^3 \mathbf{x}, \tag{8.2.44}$$

$$\hat{b}(\mathbf{p}) = i \int \left\{ \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \hat{\pi}_\phi(x) - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \hat{\phi}^\dagger(x) \right\} d^3 \mathbf{x}, \tag{8.2.45}$$

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) = i \int \left\{ \hat{\phi}^\dagger(x) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}(x) - \hat{\pi}_\phi(x) \varphi_{\mathbf{p}}(x) \right\} d^3 \mathbf{x}, \tag{8.2.46}$$

$$\hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) = i \int \left\{ \hat{\phi}(x) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}(x) - \hat{\pi}_{\phi^*}(x) \varphi_{\mathbf{p}}(x) \right\} d^3 \mathbf{x} \tag{8.2.47}$$

である。

これらを使えば,  $\hat{a}(\mathbf{p})$ ,  $\hat{b}(\mathbf{p})$ ,  $\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})$ ,  $\hat{b}^\dagger(\mathbf{p})$  の間の交換関係を容易に求めることができる. 例えば,

$$\begin{aligned}
& [\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')] \\
&= \left[ i \int \left\{ \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \hat{\pi}_{\phi^*}(x) - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \hat{\phi}(x) \right\} d^3 \mathbf{x}, i \int \left\{ \hat{\phi}^\dagger(y) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}'}(y) - \hat{\pi}_\phi(y) \varphi_{\mathbf{p}'}(y) \right\} d^3 \mathbf{y}, \right] \\
&= - \int d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{x}' \left\{ \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}'}(y) [\hat{\pi}_{\phi^*}(x), \hat{\phi}^\dagger(y)] + \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \varphi_{\mathbf{p}'}(y) [\hat{\phi}(x), \hat{\pi}_\phi(y)] \right\} \\
&= - \int d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{x}' \left\{ +\varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}'}(y) (-i) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \varphi_{\mathbf{p}'}(y) i \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right\} \\
&= i \int d^3 \mathbf{x} \left\{ \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}'}(x) - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \varphi_{\mathbf{p}'}(x) \right\} \\
&= i \int d^3 \mathbf{x} \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}'}(x) \\
&= \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}. \tag{8.2.48}
\end{aligned}$$

ここでは,  $x$  と  $y$  は同時刻  $x = (\mathbf{x}, t)$ ,  $y = (\mathbf{y}, t)$  として計算した (問 8.3 の結果より, この時刻は自由に選ぶことができる). また, 3 行目では, 4 個の交換子がでるはずであるが, ゼロになる 2 個は最初から省いた. 同じように, 計算すると,

$$\begin{aligned}
& [\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{b}(\mathbf{p}')] \\
&= \left[ i \int \left\{ \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \hat{\pi}_{\phi^*}(x) - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \hat{\phi}(x) \right\} d^3 \mathbf{x}, i \int \left\{ \varphi_{\mathbf{p}'}^*(y) \hat{\pi}_\phi(y) - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}'}^*(y) \hat{\phi}^\dagger(y) \right\} d^3 \mathbf{y}, \right] \\
&= - \int d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{x}' \left\{ -\varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}'}^*(y) [\hat{\pi}_{\phi^*}(x), \hat{\phi}^\dagger(y)] - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \varphi_{\mathbf{p}'}^*(y) [\hat{\phi}(x), \hat{\pi}_\phi(y)] \right\} \\
&= - \int d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{x}' \left\{ -\varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}'}^*(y) (-i) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \varphi_{\mathbf{p}'}^*(y) i \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right\} \\
&= -i \int d^3 \mathbf{x} \left\{ \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}'}^*(x) - \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \varphi_{\mathbf{p}'}^*(x) \right\} \\
&= -i \int d^3 \mathbf{x} \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}'}^*(x) \\
&= 0. \tag{8.2.49}
\end{aligned}$$

その他も同じように計算できる. 結果をまとめると,

$$[\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')] = [\hat{b}(\mathbf{p}), \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}')] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \tag{8.2.50}$$

$$[\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}')] = [\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}), \hat{b}(\mathbf{p}')] = 0, \tag{8.2.51}$$

$$[\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{a}(\mathbf{p}')] = [\hat{b}(\mathbf{p}), \hat{b}(\mathbf{p}')] = [\hat{a}(\mathbf{p}), \hat{b}(\mathbf{p}')] = 0. \tag{8.2.52}$$

これらの交換関係から, 二種類の生成消滅演算子の組があることがわかる. すなわち,  $a(\mathbf{p})$  と  $b(\mathbf{p})$  が消滅演算子であり,  $a^\dagger(\mathbf{p})$  と  $b^\dagger(\mathbf{p})$  が生成演算子である.

問 8.5 (8.2.50)~(8.2.52) を確かめよ.

## 8.2.6 ハミルトニアン<sup>1</sup>の生成消滅演算子による表示

ハミルトニアン (8.2.12) を生成消滅演算子  $\hat{a}(\mathbf{p})$ ,  $\hat{b}(\mathbf{p})$ ,  $\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})$ ,  $\hat{b}^\dagger(\mathbf{p})$  を用いて表してみよう. その前に,  $\hat{H}$  を次のように変形する:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \int \left\{ \hat{\pi}_\phi \hat{\pi}_{\phi^*} + \nabla \hat{\phi}^\dagger \cdot \nabla \hat{\phi} + m^2 \hat{\phi}^\dagger \hat{\phi} \right\} d^3 \mathbf{x} \\
 &= \int \left\{ \dot{\hat{\phi}}^\dagger(x) \dot{\hat{\phi}}(x) - \hat{\phi}^\dagger(x) (\nabla^2 - m^2) \hat{\phi}(x) \right\} d^3 \mathbf{x} \\
 &= \int \left\{ \dot{\hat{\phi}}^\dagger(x) \dot{\hat{\phi}}(x) - \hat{\phi}^\dagger(x) \ddot{\hat{\phi}}(x) \right\} d^3 \mathbf{x} \\
 &= - \int \hat{\phi}^\dagger(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \dot{\hat{\phi}}(x) d^3 \mathbf{x} \tag{8.2.53}
 \end{aligned}$$

1 行目から 2 行目への変形では, 部分積分と  $\hat{\pi}_\phi = \dot{\hat{\phi}}^\dagger$ ,  $\hat{\pi}_{\phi^*} = \dot{\hat{\phi}}$  であることを使った. 3 行目への変形では  $\hat{\phi}$  が Klein-Gordon 方程式を満たすことを使った.

$\hat{\phi}$  の平面波展開 (8.2.38) と,  $\dot{\varphi}_{\mathbf{p}} = -iE_{\mathbf{p}} \varphi_{\mathbf{p}}$  などより,

$$\begin{aligned}
 \dot{\hat{\phi}}(x) &= \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}(\mathbf{p}) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}(x) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \dot{\varphi}_{\mathbf{p}}^*(x) \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{p}} (-iE_{\mathbf{p}}) \left\{ \hat{a}(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}(x) - \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \right\}. \tag{8.2.54}
 \end{aligned}$$

これを, (8.2.53) の最右辺に代入すると,

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= - \int \hat{\phi}^\dagger(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \sum_{\mathbf{p}} (-iE_{\mathbf{p}}) \left\{ \hat{a}(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}(x) - \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) \right\} d^3 \mathbf{x} \\
 &= \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \left\{ i \int \hat{\phi}^\dagger(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}}(x) d^3 \mathbf{x} \cdot \hat{a}(\mathbf{p}) - i \int \hat{\phi}^\dagger(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \varphi_{\mathbf{p}}^*(x) d^3 \mathbf{x} \cdot \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) + \hat{b}(\mathbf{p}) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{b}(\mathbf{p}) + 1 \right\} \tag{8.2.55}
 \end{aligned}$$

が得られる. 最後の行では  $\hat{b}(\mathbf{p})$  と  $\hat{b}^\dagger(\mathbf{p}')$  の間の交換関係を使った.  $\hat{H}$  は次のように表すことができる:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{b}(\mathbf{p}) \right\} + E_0, \tag{8.2.56}$$

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}}. \tag{8.2.57}$$

c数  $E_0$  はこの場のゼロ点振動のエネルギーである。今の場合、ゼロ点エネルギーは無限大ではあるが定数である。c数の定数であれば、エネルギーを測るときの基準点をずらすことでこの  $E_0$  を消すことができる。(こうしても、ハイゼンベルク方程式は変更を受けない。) これ以後は、ゼロ点エネルギーを省いた部分をハミルトニアン演算子として考える:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{b}(\mathbf{p}) \right\}. \quad (8.2.58)$$

### 8.2.7 運動量演算子

4次元運動量ベクトル  $p^\mu = (p^0, \mathbf{p}) = (E_{\mathbf{p}}, \mathbf{p})$  を用いて,

$$\hat{P}^\mu = \sum_{\mathbf{p}} p^\mu \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{b}(\mathbf{p}) \right\} \quad (8.2.59)$$

を定義すると、 $\hat{P}^\mu$  は4次元ベクトルの演算子であり、その第0成分はハミルトニアンに等しい： $\hat{P}^0 = \hat{H}$ 。第0成分がエネルギーの演算子であるような4次元ベクトルは、その空間成分が運動量演算子であるはずである。すなわち、この場の運動量演算子  $\hat{\mathbf{P}}$  は、

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{b}(\mathbf{p}) \right\} \quad (8.2.60)$$

で与えられる。

問 8.6 (8.2.59) で定義される4次元運動量演算子  $\hat{P}^\mu$  ( $\mu = 0, 1, 2, 3$ ) は、

$$\hat{P}^\mu = - \int \hat{\phi}^\dagger(x) \overset{\leftrightarrow}{\partial}_0 \partial^\mu \hat{\phi}(x) d^3\mathbf{x} \quad (8.2.61)$$

(からゼロ点振動部分を省いたもの) で表されることを確認せよ。ただし、この式で、 $\partial^0 = \partial_0 = \partial/\partial t$ ,  $\partial^j = -\partial_j = -\partial/\partial x^j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) である。

### 8.2.8 粒子描像：真空，1粒子状態，多粒子状態

#### 真空

いつものように、真空  $|0\rangle$  を

$$\hat{a}(\mathbf{p})|0\rangle = \hat{b}(\mathbf{p})|0\rangle = 0 \quad \text{for all } \mathbf{p} \quad (8.2.62)$$

で定義する。このとき、

$$\hat{H}|0\rangle = 0, \quad (8.2.63)$$

$$\hat{\mathbf{P}}|0\rangle = 0 \quad (8.2.64)$$

が成り立つ。したがって、 $|0\rangle$  は確かにエネルギーと運動量がゼロの固有状態であることがわかる。すなわち、真空とよぶのにふさわしい状態である。

## 1 粒子状態

真空に生成演算子を1個だけ作用した状態を考えよう。今の場合，生成演算子は  $a^\dagger(\mathbf{p})$  と  $b^\dagger(\mathbf{p})$  の二種類あるので，このような状態も二種類ある：

$$|a; \mathbf{p}\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})|0\rangle, \quad (8.2.65)$$

$$|b; \mathbf{p}\rangle = \hat{b}^\dagger(\mathbf{p})|0\rangle. \quad (8.2.66)$$

この二つの状態は，いずれも，エネルギーが  $E_{\mathbf{p}}$ ，運動量が  $\mathbf{p}$  の固有状態である：

$$\begin{aligned} \hat{H}|a; \mathbf{p}\rangle &= E_{\mathbf{p}}|a; \mathbf{p}\rangle, \\ \hat{H}|b; \mathbf{p}\rangle &= E_{\mathbf{p}}|b; \mathbf{p}\rangle, \\ \hat{P}|a; \mathbf{p}\rangle &= \mathbf{p}|a; \mathbf{p}\rangle, \\ \hat{P}|b; \mathbf{p}\rangle &= \mathbf{p}|b; \mathbf{p}\rangle. \end{aligned} \quad (8.2.67)$$

$E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$  であることから，どちらの状態も，質量  $m$  の粒子が運動量  $\mathbf{p}$  で運動している状態と考えることができる。すなわち，質量の等しい二種類の粒子（a粒子，b粒子）の1粒子状態と考えることができる。

**負エネルギーはどこに行った？** 上の状態には，負エネルギー状態が現れていないことに注意しよう。（ $\hat{H}$  が正定値なのだからあたりまえではあるが。）b粒子に対応する  $\hat{b}^\dagger$  はそもそも負エネルギー解の係数であった。 $\hat{\phi}$  の展開式  $\hat{\phi} = \sum(\hat{a}\varphi + \hat{b}^\dagger\varphi^*)$  を思い出すと， $\hat{a}$  が正エネルギー状態を消滅させる演算子であれば， $\hat{b}^\dagger$  は負エネルギー状態を消滅させる演算子と言える。しかし，負エネルギー状態を消滅させるということは，逆にエネルギーを増やしていることになる。これをb粒子を生成させたと解釈するのである。こうして，負エネルギー解は，正エネルギーのb粒子（a粒子の反粒子）として理解することができる。

問 8.7 (8.2.67) を確かめよ。

## 2 粒子状態，多粒子状態

次の様な2粒子状態を考えることができる：

$$|a; \mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}')|0\rangle, \quad (8.2.68)$$

$$|a; \mathbf{p}; b; \mathbf{p}'\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})\hat{b}^\dagger(\mathbf{p}')|0\rangle. \quad (8.2.69)$$

$$|b; \mathbf{p}, \mathbf{p}'\rangle = \hat{b}^\dagger(\mathbf{p})\hat{b}^\dagger(\mathbf{p}')|0\rangle. \quad (8.2.70)$$

これらの状態は，いずれも，エネルギーが  $E_{\mathbf{p}} + E_{\mathbf{p}'}$ ，運動量が  $\mathbf{p} + \mathbf{p}'$  の状態である。

2粒子状態のエネルギーがこのようになることを確かめるには、ハミルトニアンや運動量演算子と生成消滅演算子との交換関係を使う：

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})] = E_{\mathbf{p}} \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \quad (8.2.71)$$

$$[\hat{H}, \hat{b}^\dagger(\mathbf{p})] = E_{\mathbf{p}} \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \quad (8.2.72)$$

$$[\hat{P}, \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})] = \mathbf{p} \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \quad (8.2.73)$$

$$[\hat{P}, \hat{b}^\dagger(\mathbf{p})] = \mathbf{p} \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \quad (8.2.74)$$

これらから、 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{p})$  と  $\hat{b}^\dagger(\mathbf{p})$  が、エネルギーを  $E_{\mathbf{p}}$  だけ増やし、運動量を  $\mathbf{p}$  だけ増やす演算子であることがわかる。

この交換関係を使えば、一般の多粒子状態 (a 粒子が  $r$  個、b 粒子が  $s$  個の状態) を

$$|a: \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_r; b: \mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_s\rangle = \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}_r) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}'_1) \cdots \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}'_s) |0\rangle \quad (8.2.75)$$

で定義すると、この状態のエネルギーと運動量が

$$E = E_{\mathbf{p}_1} + \cdots + E_{\mathbf{p}_r} + E_{\mathbf{p}'_1} + \cdots + E_{\mathbf{p}'_s}, \quad (8.2.76)$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \cdots + \mathbf{p}_r + \mathbf{p}'_1 + \cdots + \mathbf{p}'_s \quad (8.2.77)$$

であることも直ちにわかる。

## 8.2.9 「電荷」

前章では、相対論的な1粒子の量子力学を探る上で、Klein-Gordon 方程式を満たす場に対する保存量を考えた。この保存量に対応して、連続の式を満たす4次元の流れの密度  $j^\mu = (j^0, \mathbf{j}) = (\rho, \mathbf{j})$  を考えることができた。今の場合は、量子化されているので、これも演算子となっている：

$$\hat{j}^\mu = i \hat{\phi}^\dagger \overleftrightarrow{\partial}^\mu \hat{\phi}, \quad (8.2.78)$$

あるいは、

$$\hat{\rho} = i \hat{\phi}^\dagger \overleftrightarrow{\partial}_0 \hat{\phi}, \quad (8.2.79)$$

$$\hat{\mathbf{j}} = -i \hat{\phi}^\dagger \overleftrightarrow{\nabla} \hat{\phi}. \quad (8.2.80)$$

実際、 $\hat{\phi}$  と  $\hat{\phi}^\dagger$  が Klein-Gordon 方程式を満たすことから、

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot \hat{\mathbf{j}} = 0 \quad (8.2.81)$$

が容易に導ける．これに関する保存量を  $\hat{Q}$  と置くと，

$$\begin{aligned}\hat{Q} &= \int \hat{\rho}(x) d^3x \\ &= i \int \hat{\phi}^\dagger(x) \overleftrightarrow{\partial}_0 \hat{\phi}(x) \\ &= \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) - \hat{b}(\mathbf{p}) \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \right\}.\end{aligned}\quad (8.2.82)$$

あるいは， $\hat{b}$ ， $\hat{b}^\dagger$  に対する交換関係を使えば，

$$\hat{Q} = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) - \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{b}(\mathbf{p}) - 1 \right\}.\quad (8.2.83)$$

括弧内の第3項の  $-1$  からは，(ゼロ点振動からくる) マイナス無限大が出てくるが，これは  $c$  数の定数であり， $Q$  の基準点をずらすことで消すことができる．結局，

$$\hat{Q} = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{a}(\mathbf{p}) - \hat{b}^\dagger(\mathbf{p}) \hat{b}(\mathbf{p}) \right\}\quad (8.2.84)$$

としてよい．この保存量は，第7章でも注意した様に，正定値ではなく，正負どちらの値も取り得る．実際，

$$\hat{Q} |a: \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_r; b: \mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_s\rangle = (r - s) |a: \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_r; b: \mathbf{p}'_1, \dots, \mathbf{p}'_s\rangle\quad (8.2.85)$$

が成り立つ．すなわち， $\hat{Q}$  は， $a$  粒子1個に対して  $+1$ ， $b$  粒子1個に対して  $-1$  を与える．これは次の交換関係によっても表すことができる：

$$[\hat{Q}, \hat{a}^\dagger(\mathbf{p})] = +\hat{a}^\dagger(\mathbf{p}),\quad (8.2.86)$$

$$[\hat{Q}, \hat{b}^\dagger(\mathbf{p})] = -\hat{b}^\dagger(\mathbf{p}).\quad (8.2.87)$$

前章では保存量  $Q$  を確率として解釈しようとしたが，正負のどちらの値もとることができるので，断念せざるを得なかった．しかし，第二量子化された今となっては，このような量で確率を考える必要はなくなった．(確率はケットベクトル間で内積に任せればよい.)

$\hat{Q}$  は正にも負にもなる保存量である．これを「電荷」と考えれば， $a$  粒子は  $+1$  の「電荷」を持ち，その反粒子である  $b$  粒子は  $-1$  の「電荷」を持つとすることができる．複素スカラー場と電磁場との相互作用を考えれば， $\hat{Q}$  は確かに電荷と考えていいことがわかる．

### 8.3 まとめ

Klein-Gordon 方程式にしたがうスカラー場を量子化 (第二量子化) した結果，次のことが導かれた．



- Klein-Gordon 方程式  $(\square + m^2)\phi$  にしたがう場を量子化すれば, 粒子描像が現れる. 質量  $m$  の粒子が二種類 (a 粒子と b 粒子).
- 負エネルギー解の問題は解決された. (ボーズ粒子でも) 負エネルギー解は反粒子として出てくる. Dirac の海は考えていない (ボーズ粒子なのでそもそも考えられない).
- 前章で考えた Klein-Gordon 場に対する保存則は, 確率の保存ではなく, 電荷の保存であった.