

シュレーディンガー場

相対論的な場合を扱う前にシュレーディンガー方程式を使って、場の量子化の典型的な手続きを見ていきます。細かいことは無視して話を進めています。

量子力学は、相対論的量子力学を見ればわかるように、素粒子 (相対論的な粒子) を記述する理論として不十分です。素粒子は量子過程において粒子の生成、消滅を起こすために、粒子数の変化を表す方法が量子論的な段階で必要になります。しかし、1 粒子の記述を基本とする量子力学にこの機能を持たせるのは不便です (質点の力学から連続体の力学が作られたのと同じようなもの)。これをどうにかするのが場の量子化です。この意味で、場の量子化によって粒子性が与えられます。

量子力学での場は波動関数です。波動関数は粒子がどこにいるかを確率として表す関数で、粒子の波動性を反映しています。そして、時間と連続的な位置の関数なので、場の概念に対応します。つまり、波動関数は波動性による確率分布を表す場 (波動場) と言えます。このため、量子化によって粒子が電磁場と同じ立場に来たと言えます。

そして、波動関数は確率分布を表す関数でしかないの、古典的な場の理論で使われる場と同じです。この意味で、量子力学における量子化は、粒子の波動性を説明するために場の概念を粒子に与えたと言え、場という概念に絞れば量子的な意味合いがどこにもないです。これが場の立場から見た量子力学での量子化の結果です (シュレーディンガー方程式は単に古典的な場に対する微分方程式でしかない)。

このような古典的な場を演算子化するのが場の量子論で、ここでは場の量子化の典型的な手続きを見ていきます。素粒子としての必要性を言ってきましたが、ここでは非相対論的として、シュレーディンガー方程式を使います。非相対論的な場合は、多体系の扱いが必要となる物性で使われます。

ちなみに、量子力学での粒子性は、エーレンフェストの定理や古典極限からの古典的な粒子との対応や、最初から複数の粒子がいるとした粒子性です。素粒子の生成、消滅はこれらとは違い、量子論の範囲内で粒子数が増減する現象です。

ポテンシャル $V(\mathbf{x}, t)$ が存在するときのシュレーディンガー方程式は

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

ここでの波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ を古典的な場と考え、対応するラグランジアン密度は

$$\mathcal{L}(\psi, \nabla \psi, \dot{\psi}) = i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V \psi^* \psi \quad (1)$$

「*」は複素共役で、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ と $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ はそれぞれ独立な場とします。 ψ と ψ^* に対するオイラー・ラグランジュ方程式は ($\partial_0 \psi = \partial \psi / \partial t = \dot{\psi}$)

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi^*)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} = 0$$

この二つに (1) を入れれば

$$\begin{aligned}
-V(x,t)\psi^* + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* - i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= 0 \\
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} - V(x,t)\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi &= 0
\end{aligned}$$

正準共役な場 $\pi(\mathbf{x}, t)$ は $\psi(\mathbf{x}, t)$ によって

$$\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}} = i\hbar\psi^*(\mathbf{x}, t)$$

π は ψ^* と対応するので、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ と $\pi(\mathbf{x}, t)$ は独立です。ハミルトニアン密度は

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \pi\frac{\partial\psi}{\partial t} - \mathcal{L} \\
&= \pi\frac{\partial\psi}{\partial t} - i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + V\psi^*\psi \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + V\psi^*\psi
\end{aligned}$$

そして、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
H &= \int d^3x \mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + \int d^3x V(x,t)\psi^*\psi \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\int d^3x \psi^* \cdot \nabla\psi - \int d^3x \psi \cdot \nabla\psi^* \right) + \int d^3x V\psi^*\psi \\
&= \int d^3x \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \right) \psi
\end{aligned} \tag{2}$$

グリーンの定理

$$\int d^3x u(\mathbf{x})\nabla^2 v(\mathbf{x}) + \int d^3x \nabla u \cdot \nabla v = \int_S d\mathbf{s} \cdot (u \cdot \nabla v)$$

を使い、波動関数は無限遠で十分早く 0 になるという条件から、表面積分は 0 にしています。 S は 3 次元積分領域の表面で、 $\mathbf{s}$ は S の法線方向です。(2) は量子力学ではハミルトニアン演算子の期待値です。ここでは、シュレーディンガー方程式のハミルトニアンを 1 粒子のハミルトニアン、(2) をハミルトニアンと呼んでいきます。

正準共役な場 ψ, π のポアッソン括弧は

$$\{\psi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}', t)\}_{PB} = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \tag{3a}$$

$$\{\psi(\mathbf{x}, t), \psi(\mathbf{x}', t)\}_{PB} = \{\pi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}', t)\}_{PB} = 0 \tag{3b}$$

となっています。

ここから場を量子化します。することは単純で、量子力学での位置とその共役量である運動量を演算子化し、交換関係を設定するという正準量子化を、場に当てはめます。

古典場 ψ とその共役な場 π を演算子化し、演算子化したものにはハットをつけて $\hat{\psi}$, $\hat{\pi} = i\hbar\hat{\psi}^\dagger$ として、場の演算子と呼んでいきます。そして、量子力学では正準交換関係の仮定によって位置演算子と運動量演算子の形を与えていたように、演算子化した場は同時刻交換関係 (同じ時間 t での交換関係)

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}(\mathbf{x}', t)] &= i\hbar[\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = i\hbar\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \\ [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}(\mathbf{x}', t)] &= [\hat{\pi}(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}(\mathbf{x}', t)] = 0 \quad ([\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = 0) \end{aligned}$$

を満たすと仮定します。同時刻交換関係 (equal-time commutation relation) は、ETCR と省略して書かれたりします。

次に、場の演算子 $\hat{\psi}$ を古典的な完全正規直交系の関数の組 $u_i(\mathbf{x})$ によって展開します。 $u_i(\mathbf{x})$ は

$$\int d^3x u_i^*(\mathbf{x}) u_j(\mathbf{x}) = \delta_{ij}, \quad \sum_i u_i(\mathbf{x}) u_i^*(\mathbf{x}') = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

となっています。そうすると、 $u_i(\mathbf{x})$ は完全正規直交系なので、 $\hat{\psi}$ と $\hat{\psi}^\dagger$ のフーリエ級数展開を

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) &= \sum_i \hat{a}_i(t) u_i(\mathbf{x}) \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) &= \sum_i \hat{a}_i^\dagger(t) u_i^*(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

として、 $\hat{\psi}$ の演算子としての性質を時間依存する展開係数 $\hat{a}_i(t)$ に持たせます。ここでは、フーリエ級数展開での細かい設定は特に使わないので放って置きますが、例えば一辺が $2l$ の立方体の中として考えます (無限大でフーリエ変換になる)。これを同時刻交換関係に入れると

$$\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = [\hat{\psi}(\mathbf{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t)] = \sum_{i,j} u_i(\mathbf{x}) u_j^*(\mathbf{x}') [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger(t)]$$

最右辺において、演算子 $\hat{a}_i$ の交換関係が

$$[\hat{a}_i(t), \hat{a}_j^\dagger(t)] = \delta_{ij}$$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j(t)] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger(t)] = 0$$

となっているなら、等式として成立します。これが場の量子化の大事な部分で、フーリエ展開の係数を演算子とし、それらによる交換関係が出てきます。

また、ここではボソンを扱っていることになっていて、ボソンでは交換関係ですが、フェルミオンでは反交換関係になります。ボソンで交換関係になるのは、粒子の交換に対して対称 (例えば、 $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$) であることを反映しています (フェルミオンは反交換)。

場の量子化の手続きを簡単にまとめれば

- (1) 場が従う方程式のラグランジアンを求める
- (2) 共役な場を求める
- (3) 場と共役な場を演算子化し、同時刻交換関係を仮定する
- (4) 場の演算子をフーリエ展開したときの展開係数に交換関係を与える

という手順です。

また、量子力学では位置と運動量を演算子化するので、物体の位置を表すのに演算子が使われます。しかし、今見てきたように、場の量子化では位置の演算子は出てきません。これも場の量子論の利点です。

場の演算子の時間発展を加えます。波動関数の時間発展は1粒子のハミルトニアン演算子で与えたのと同じように、場の演算子の時間発展は(2)の場を演算子化したハミルトニアン演算子

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \hat{\psi} \quad (4)$$

で与えます。そして、演算子の時間発展なので、ハイゼンベルク方程式の形によって

$$\dot{\hat{\psi}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\psi}, \hat{H}], \quad \dot{\hat{\pi}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\pi}, \hat{H}] \quad (5)$$

とします。これはシュレーディンガー方程式の形にできます。 $\dot{\hat{\pi}}$ を変形すると

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\pi}} &= i\hbar \dot{\hat{\psi}}^\dagger = i\hbar \left(-\frac{1}{i\hbar} [\hat{\psi}, \hat{H}]^\dagger \right) \\ &= -(\hat{\psi} \hat{H} - \hat{H} \hat{\psi})^\dagger \\ &= [\hat{\psi}^\dagger \hat{H}^\dagger - \hat{H}^\dagger \hat{\psi}^\dagger] \\ &= [\hat{\psi}^\dagger, \hat{H}^\dagger] \\ &= \left[\frac{1}{i\hbar} \hat{\pi}, \hat{H} \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\pi}, \hat{H}] \end{aligned}$$

表記を簡略にするために、シュレーディンガー方程式のハミルトニアン演算子を D として

$$D_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}, t)$$

$[\hat{\psi}, \hat{H}]$ は、(4)を使って、 $(\mathbf{x}, t)$ を (x) と書くことにして

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}, \hat{H}] &= \int d^3x' [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x') D_{x'} \hat{\psi}(x')] \\
&= \int d^3x' ([\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')] D_{x'} \hat{\psi}(x') + \hat{\psi}^\dagger(x') [\hat{\psi}(x), D_{x'} \hat{\psi}(x')]) \\
&= \int d^3x' ([\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')] D_{x'} \hat{\psi}(x') \\
&\quad + \hat{\psi}^\dagger(x') D_{x'} [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')] + \hat{\psi}^\dagger(x') [\hat{\psi}(x), D_{x'}] \hat{\psi}(x')) \\
&= \int d^3x' (\delta^3(x - x') D_{x'} \hat{\psi}(x') \\
&\quad + \hat{\psi}^\dagger(x') \text{big} \{ \hat{\psi}(x) D_{x'} \hat{\psi}(x') - D_{x'} (\hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x')) \} \text{big}) \\
&= D_x \hat{\psi}(x) + \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x') \{ \hat{\psi}(x) D_{x'} \hat{\psi}(x') - D_{x'} (\hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x')) \} \\
&= D_x \hat{\psi}(x) + \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x') \text{big} \{ \hat{\psi}(x) D_{x'} \hat{\psi}(x') - (D_{x'} \hat{\psi}(x)) \hat{\psi}(x') - \hat{\psi}(x) D_{x'} \hat{\psi}(x') \} \text{big} \\
&= D_x \hat{\psi}(x)
\end{aligned}$$

よって

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}, t)) \hat{\psi}$$

として、演算子化された $\hat{\psi}$ はシュレーディンガー方程式の形の式に従います。

場の量子化によって粒子数が扱えるようになったのを見ます。 $u_i(\mathbf{x})$ は時間依存していないので、変数分離によって時間依存しないシュレーディンガー方程式

$$(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x})) u_i(\mathbf{x}) = E_i u_i(\mathbf{x})$$

に従うとします。 E_i はエネルギーです。そうすると、ハミルトニアン演算子は

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) (-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \\
&= \int d^3x \sum_{i,j} \hat{a}_i^\dagger(t) u_i^*(\mathbf{x}) \hat{a}_j(t) E_j u_j(\mathbf{x}) \\
&= \sum_i E_i \hat{a}_i^\dagger(t) \hat{a}_i(t)
\end{aligned} \tag{6}$$

演算子 $\hat{a}_i$ は (5) から

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{\hat{a}}_i(t) &= [\hat{a}_i(t), \hat{H}] \\
&= [\hat{a}_i(t), \sum_j \hat{a}_j^\dagger(t)\hat{a}_j(t)E_j] \\
&= \sum_j E_j [\hat{a}_i(t), \hat{a}_j^\dagger(t)\hat{a}_j(t)] \\
&= \sum_j E_j \hat{a}_j^\dagger(t) [\hat{a}_i(t), \hat{a}_j(t)] + \sum_j E_j [\hat{a}_i(t), \hat{a}_j^\dagger(t)] \hat{a}_j(t) \\
&= \sum_j E_j \hat{a}_j(t) \delta_{ij} \\
&= E_i \hat{a}_i(t)
\end{aligned}$$

これを $t = 0$ で $\hat{a}_i(0) = \hat{a}_i$ として解けば

$$\hat{a}_i(t) = e^{-iE_i t/\hbar} \hat{a}_i(0) = e^{-iE_i t/\hbar} \hat{a}_i$$

(6) に入れば

$$\hat{H} = \sum_i E_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

そうすると、ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ の固有状態 $|H\rangle$ を複数の粒子がいる系として、これを作用させたとき、全体のエネルギーが固有値となるなら、 $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ がエネルギー E_i を持つ粒子の個数になると考えられます (1 粒子のエネルギーのばらつきに対する期待値の式を、場の量子化によって多数の粒子のエネルギーの和という意味に変更している)。これが欲しかった結果で、場の量子化によって複数の粒子をまとめて扱えたことになります。後は、 $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ の作用の仕方を求めればいいです。

$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ から

$$\sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_i \hat{n}_i = \hat{N}$$

として、 $\hat{n}_i, \hat{N}$ を定義し、 $\hat{n}_i$ を粒子数演算子、 $\hat{N}$ を全粒子数演算子と呼びます。 $\hat{n}_i$ は異なった状態 $\hat{n}_j$ との交換関係は

$$\begin{aligned}
[\hat{n}_i, \hat{n}_j] &= [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] \\
&= \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] + [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] \hat{a}_i \\
&= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger [\hat{a}_i, \hat{a}_j] + \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j] \hat{a}_i + [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] \hat{a}_j \hat{a}_i \\
&= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \delta_{ij} - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \delta_{ij} \\
&= 0
\end{aligned}$$

となるので、交換します。 $\hat{N}$ は $\hat{H}$ との交換関係が

$$\begin{aligned}\dot{\hat{N}} &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{N}, \hat{H}] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{i,j} [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] E_j \\ &= 0\end{aligned}$$

となるので、ハミルトニアン演算子と交換します。

$\hat{n}_i, \hat{N}$ の固有値として粒子数を取り出します。しかし、量子力学での状態を変更します。状態をある 1 つの粒子の状態だけとせずに、多粒子状態として

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$$

と与え、この状態は規格化されているとして

$$\langle n'_1, n'_2, \dots | n_1, n_2, \dots \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots$$

とします。このように変更するのは場の量子論では多体系を扱いたいからで、実際に多体系を記述するのに適した理論になっています (「多体系と生成・消滅演算子」参照)。これに i 番目の状態の粒子数に対応する粒子数演算子 $\hat{n}_i$ を作用させれば

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$$

として、 i 番目の状態の粒子数である固有値 n_i を取り出せるとします。このような多粒子状態の基底によるのが場の量子論で使われるヒルベルト空間で、フォック空間 (Fock space) と呼ばれます。

全粒子数 n は全粒子演算子 $\hat{N}$ によって

$$\hat{N} |n_1, n_2, \dots\rangle = \sum_i n_i |n_1, n_2, \dots\rangle = n |n_1, n_2, \dots\rangle$$

演算子 $a_i^\dagger$ を作用させてみると

$$\begin{aligned}
\hat{N}\hat{a}_i^\dagger|n_1, n_2, \dots\rangle &= \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger|n_1, n_2, \dots\rangle \\
&= \sum_j \hat{a}_j^\dagger (\delta_{ij} + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j|n_1, n_2, \dots\rangle) \\
&= \sum_j (\delta_{ij} \hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j|n_1, n_2, \dots\rangle) \\
&= \hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i^\dagger \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j|n_1, n_2, \dots\rangle \\
&= \hat{a}_i^\dagger (1 + \hat{N})|n_1, n_2, \dots\rangle \\
&= (n+1)\hat{a}_i^\dagger|n_1, n_2, \dots\rangle
\end{aligned}$$

同様に、 $\hat{a}_i$ では

$$\hat{N}\hat{a}_i|n_1, n_2, \dots\rangle = (n-1)\hat{a}_i|n_1, n_2, \dots\rangle$$

というわけで、 i 番目の粒子数をそれぞれ増減させています。このため、展開係数 $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ は生成、消滅演算子と呼ばれます。消滅演算子によって

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

となる状態 $|0\rangle$ を何もない真空と定義し、これに生成演算子を作用させて

$$(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle$$

とした状態 (粒子数演算子の固有状態) を基底とする空間がフォック空間です (これはボソンの場合で、フェルミオンではパウリの排他律によって生成演算子の作用の仕方が変わります)。

量子力学では、位置や運動量は演算子に書き換えました。これは、実数 (c 数) を位置の変数として持っている粒子に対して、実数による位置の変数を q 数にするという操作にあたります。この操作によって、量子力学の中には位置に依存する粒子を作るという構造を持たせられなかったとすることが出来ます。なぜなら、 c 数の位置が存在しなくなるからです。これに対して、場の量子論の枠組みでは見てきたように、場の演算子には c 数による位置の変数を持たせることが出来ています。このような性質を持てるために、ある位置 $\mathbf{x}$ に粒子を生成するという構造を作り出せます。