ベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式

演算子の計算において、知らないと高確率で勘違いする関係であるベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式を示します。
演算子にハットをつけていません。

exp において、x, y がただの数のとき指数法則

$$e^{x+y} = e^x e^y$$

を持ちます。しかし、x, y が交換しないときこの関係は成立しません。これを示します。演算子と言っていきますが、行列と思ったほうが感覚的に分かりやすいです。また、成立しない理由は、演算子を A として、e^A の展開は

$$e^A = 1 + A + \frac{1}{2}A^2 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$$

と与えられていることからすぐに分かると思います。1 は恒等演算子（何もしない演算子）です。
量子力学で大抵使われるのは演算子 A, B ($[A, B] \neq 0$) と交換関係 $[A, B]$ が

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0 \tag{1}$$

として交換する場合なので、まずはこの条件を加えて見ていきます。
まず、求めるのに必要となる

$$e^{-\lambda A} B e^{\lambda A}$$

を計算しておきます。交換関係 $[A^n, B]$ は (1) によって

$$\begin{aligned}
[A^n, B] = [AA^{n-1}, B] &= A[A^{n-1}, B] + [A, B]A^{n-1} \qquad ([ab, c] = a[b, c] + [a, c]b) \\
&= A^2[A^{n-2}, B] + A[A, B]A^{n-2} + [A, B]A^{n-1} \\
&= A^2[A^{n-2}, B] + [A, B]A^{n-1} + [A, B]A^{n-1} \\
&\ \ \vdots \\
&= A^{n-1}[A, B] + [A, B]A^{n-1} + [A, B]A^{n-1} + \cdots
\end{aligned}$$

というようになっていて、n 個の項全てが $A^{n-1}[A, B]$ を持つことになります。よって

$$[A^n, B] = n[A, B]A^{n-1}$$

これを使うことで B と $e^{\lambda A}$ の交換関係が

$$
\begin{aligned}
[B, e^{\lambda A}] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!}[B, A^n] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} n[B, A]A^{n-1} &= \lambda[B, A] \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} A^{n-1} \\
&= \lambda[B, A] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} A^n \\
&= \lambda[B, A] e^{\lambda A} \qquad (2)
\end{aligned}
$$

途中で和の範囲が $n = 0$ から $n = 1$ になっているのは $n = 0$ のとき 0 だからです。これに左から $e^{-\lambda A}$ をかけると左辺は

$$e^{-\lambda A}[B, e^{\lambda A}] = e^{-\lambda A}(Be^{\lambda A} - e^{\lambda A}B) = e^{-\lambda A}Be^{\lambda A} - B$$

右辺は、A は $[A, B]$ と交換することから

$$\lambda e^{-\lambda A}[B, A]e^{\lambda A} = \lambda[B, A]$$

よって

$$e^{-\lambda A}Be^{\lambda A} = -\lambda[A, B] + B \qquad (3)$$

となっていることが分かります。
　知りたいのは $e^A e^B$ がどうなるのかなので

$$F(\lambda) = e^{\lambda A}e^{\lambda B}$$

というのを作ります (λ は実数)。これを λ で微分すると、(2) を使って

$$
\begin{aligned}
\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} &= Ae^{\lambda A}e^{\lambda B} + e^{\lambda A}Be^{\lambda B} \\
&= Ae^{\lambda A}e^{\lambda B} + ([e^{\lambda A}, B] + Be^{\lambda A})e^{\lambda B} \\
&= Ae^{\lambda A}e^{\lambda B} + (-\lambda[B, A]e^{\lambda A} + Be^{\lambda A})e^{\lambda B} \\
&= (A + B + \lambda[A, B])e^{\lambda A}e^{\lambda B} \\
&= (A + B + \lambda[A, B])F(\lambda) \qquad (4)
\end{aligned}
$$

これは

$$\frac{dF(\lambda)}{F(\lambda)} = (A + B + \lambda[A, B])d\lambda$$

となっているので、積分によって ($F(\lambda = 0) = 1$)

$$F(\lambda) = \exp\left[\lambda(A + B) + \frac{1}{2}\lambda^2[A, B]\right]$$

よって、$\lambda = 1$ のとき

$$e^A e^B = \exp\left[A + B + \frac{1}{2}[A, B]\right] \tag{5}$$

となり、指数法則が成り立っていないのが分かります。これをベーカー・キャンベル・ハウスドルフ (Baker-Cambell-Hausdorff) の公式と言います。ベーカー・ハウスドルフの公式とかハウスドルフの公式とか言われることもあります。ただし、これは A, B が $[A, B]$ と交換する場合です。

　別の形を求めることもできます。$F(\lambda)$ を

$$F(\lambda) = e^{\lambda B} e^{\lambda A} e^{A+B}$$

として同じようにしていくと、(4) の A, B の文字を入れ替えることで

$$\begin{aligned}\frac{dF}{d\lambda} &= (A + B - \lambda[A, B])e^{\lambda B} e^{A+B} \\ &= (A + B - \lambda[A, B])F\end{aligned}$$

これの解は $F(\lambda = 0) = e^{A+B}$ から

$$F(\lambda) = \exp\left[\lambda(A + B) - \frac{1}{2}\lambda^2[A, B] + A + B\right]$$

$\lambda = -1$ とすることで

$$\begin{aligned}e^{-B} e^{-A} e^{A+B} &= \exp\left[-(A + B) - \frac{1}{2}[A, B] + A + B\right] \\ e^{A+B} &= e^A e^B \exp\left[-\frac{1}{2}[A, B]\right]\end{aligned}$$

となって、逆向きの関係が求まります。

　演算子を具体的に位置演算子と運動量演算子として、指数関数同士での交換関係を導くことが出来ます。(3) での B が B^n のときは、(3) を n 乗すると

$$(e^{-\lambda A} B e^{\lambda A})^n = e^{-\lambda A} B e^{\lambda A} e^{-\lambda A} B e^{\lambda A} e^{-\lambda A} B e^{\lambda A} \cdots = e^{-\lambda A} BBB \cdots e^{\lambda A} = e^{-\lambda A} B^n e^{\lambda A}$$

となるので

$$e^{-\lambda A} B^n e^{\lambda A} = (-\lambda[A, B] + B)^n$$

これを使うことで (v, w は実数)

$$e^{-iwA} e^{ivB} e^{iwA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iv)^n}{n!} e^{-iwA} B^n e^{iwA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iv)^n}{n!} (-iw[A, B] + B)^n = \exp[ivB + vw[A, B]]$$

よくある形にするために虚数 i をつけています。例えば $v = w = 1$ では

$$\begin{aligned}e^{-iA} e^{iB} e^{iA} &= \exp\left[iB + [A, B]\right] \\ e^{iB} e^{iA} &= e^{iA} \exp\left[iB + [A, B]\right]\end{aligned}$$

虚数 i を外しても同様の結果は導けます ($[A,B]$ の符号は反転する)。
　A を運動量演算子 p、B を位置演算子 q とすると、量子条件

$$[q,p]=i\hbar$$

から、位置演算子と運動量演算子による指数関数の交換の関係が

$$\begin{aligned}
e^{-ipw}e^{iqv}e^{ipw} &= \exp\big[iqv+[p,q]vw\big] \\
e^{iqv}e^{ipw} &= e^{ipw}\exp\big[iqv-i\hbar vw\big] \\
e^{iqv}e^{ipw} &= e^{ipw}e^{iqv}e^{-i\hbar vw}
\end{aligned}$$

となっていることが分かります。$i\hbar$ は数なので普通に分けることが出来ます。
　今度は、$[A,B]$ と A,B が交換しない場合を見ていきます。まず、交換しない演算子 A,B ($[A,B]\neq 0$) による

$$F(\lambda)=e^{-\lambda A}Be^{\lambda A}$$

がどうなるのかを求めます (λ は実数)。λ で微分すると

$$\begin{aligned}
\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = -Ae^{-\lambda A}Be^{\lambda A}+e^{-\lambda A}BAe^{\lambda A} &= -\left(Ae^{-\lambda A}Be^{\lambda A}-e^{-\lambda A}Be^{\lambda A}A\right) \\
&= -\left(AF(\lambda)-F(\lambda)A\right) \\
&= -[A,F(\lambda)]
\end{aligned}$$

という微分方程式になります ($F(\lambda)$ には B がいるので A と交換しない)。これは両辺を 0 から λ の範囲で積分すると

$$\begin{aligned}
\int_0^\lambda d\lambda'\frac{dF(\lambda')}{d\lambda'} &= -\int_0^\lambda d\lambda'[A,F(\lambda')] \\
F(\lambda)-B &= -\int_0^\lambda d\lambda'[A,F(\lambda')] \\
F(\lambda) &= B-\int_0^\lambda d\lambda'[A,F(\lambda')]
\end{aligned}$$

$F(\lambda=0)=B$ です。これに対して逐次近似を行います。
　まず、$F(\lambda)=B$ として右辺に代入すれば

$$F^{(1)}(\lambda)=B-\int_0^\lambda d\lambda'[A,B]=B-[A,B]\lambda$$

次は $F^{(1)}(\lambda)$ を入れることで

$$\begin{aligned}
F^{(2)}(\lambda)=B-\int_0^\lambda d\lambda'\big[A,B-[A,B]\lambda\big] &= B-\int_0^\lambda d\lambda'\big([A,B]-[A,[A,B]]\lambda\big) \\
&= B-[A,B]\lambda+\frac{1}{2}[A,[A,B]]\lambda^2
\end{aligned}$$

また $F^{(2)}(\lambda)$ を入れて

$$\begin{aligned}F^{(3)}(\lambda) &= B - \int_0^\lambda d\lambda' \big[A, B - [A,B]\lambda + \frac{1}{2}[A,[A,B]]\lambda^2\big]\\ &= B - [A,B]\lambda + \frac{1}{2}[A,[A,B]]\lambda^2 - \frac{1}{6}[A,[A,[A,B]]]\lambda^3\end{aligned}$$

よって、$F(\lambda)$ は

$$F(\lambda) = e^{-\lambda A}Be^{\lambda A} = B - [A,B]\lambda + \frac{1}{2!}[A,[A,B]]\lambda^2 - \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]]\lambda^3 + \cdots$$

と展開されます。$\lambda = 1$ として、$[A,B]$ と A が交換するとすれば (3) と一致します。
　今度は

$$e^A e^{\lambda B} = e^{G(\lambda)}$$

と置いたとき、$G(\lambda)$ がどうなるのかを見ます。$G(\lambda)$ は対数を使って書き換えれば

$$G(\lambda) = \log[e^A e^{\lambda B}]$$

$e^{G(\lambda)}$ の λ 微分は

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\lambda}e^{G(\lambda)} &= e^A B e^{\lambda B}\\ e^{-G(\lambda)}\frac{d}{d\lambda}e^{G(\lambda)} &= e^{-\lambda B}e^{-A}e^A B e^{\lambda B}\\ &= B\end{aligned} \tag{6}$$

これの左辺から新しく実数 t をくっつけて

$$H(t,\lambda) = e^{-G(\lambda)t}\frac{d}{d\lambda}e^{G(\lambda)t}$$

というのを作ります。これの t 微分を行うと

$$\begin{aligned}\frac{dH(t,\lambda)}{dt} &= -G(\lambda)e^{-G(\lambda)t}\frac{d}{d\lambda}e^{G(\lambda)t} + e^{-G(\lambda)t}\frac{d}{d\lambda}(G(\lambda)e^{G(\lambda)t})\\ &= -G(\lambda)e^{-G(\lambda)t}\frac{d}{d\lambda}e^{G(\lambda)t} + e^{-G(\lambda)t}\frac{dG(\lambda)}{d\lambda}e^{G(\lambda)t} + e^{-G(\lambda)t}G(\lambda)\frac{d}{d\lambda}e^{G(\lambda)t}\\ &= e^{-G(\lambda)t}G'(\lambda)e^{G(\lambda)t}\end{aligned}$$

λ 微分を $G'(\lambda)$ としています。これを 0 から t の範囲で積分して

$$H(t,\lambda) = H(0,\lambda) + \int_0^t d\tau e^{-G(\lambda)\tau}G'(\lambda)e^{G(\lambda)\tau}$$

$H(0,\lambda)$ は

$$H(0,\lambda)=e^{-G(\lambda)t}\frac{d}{d\lambda}e^{G(\lambda)t}|_{t=0}=t\frac{dG(\lambda)}{d\lambda}=0$$

第二項は $F(\lambda)$ と同じ形になっているので

$$\begin{aligned}H(t,\lambda)=&\int_0^t d\tau(G'-[G,G']\tau+\frac{1}{2!}[G,[G,G']]\tau^2-\frac{1}{3!}[G,[G,[G,G']]]\tau^3+\cdots)\\&=G't-\frac{1}{2}[G,G']t^2+\frac{1}{2!}\frac{1}{3}[G,[G,G']]t^3-\frac{1}{3!}\frac{1}{4}[G,[G,[G,G']]]t^4+\cdots\\&=G't-\frac{1}{2!}[G,G']t^2+\frac{1}{3!}[G,[G,G']]t^3-\frac{1}{4!}[G,[G,[G,G']]]t^4+\cdots\end{aligned}\tag{7}$$

これの各項には G' が 1 つだけいて、そこに G による複数の交換関係が構成されるようになっているので、この構成を

$$\begin{aligned}G't-&\frac{1}{2!}[G,G']t^2+\frac{1}{3!}[G,[G,G']]t^3-\frac{1}{4!}[G,[G,[G,G']]]t^4+\cdots\\&=(t-\frac{1}{2!}Gt^2+\frac{1}{3!}G^2t^3-\frac{1}{4!}G^3t^4+\cdots)*G'\end{aligned}$$

と書くことにします。記号「$*$」は演算子が後ろの演算子に作用して交換関係を作る記号とします。例えば

$$A*B=[A,B]\ ,\ A^2*B=[A,[A,B]]$$

のようになっています。この記号はここだけで使うもので、一般的には ad という記号が使われます。主に群論で使われる記号で、$\mathrm{ad}(A)B=[A,B]$ と定義されています。無駄に記号を作っても害があるだけですが、ad を使うと見づらくなりそうだったので、ここでは勝手に「$*$」を定義して使います。

(7) を $t=1$ として

$$\phi(z)=\frac{e^z-1}{z}=\frac{1}{z}(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{n!}-1)=\frac{1}{z}(z+\frac{1}{2!}z^2+\frac{1}{3!}z^3+\cdots)=1+\frac{1}{2!}z+\frac{1}{3!}z^2+\cdots$$

と比較すると

$$H(t=1,\lambda)=\phi(-G_*)G'$$

と書けることが分かります。G が G' と交換関係を作るという意味で G_* としています。これから

$$e^{-G(\lambda)}G'(\lambda)e^{G(\lambda)}=\phi(-G_*)G'$$

となります。

というわけで、微分方程式 (6) は $\phi(-G_*)$ によって

$$\phi(-G_*)G'=B$$

また、新しく ψ を

$$G' = \psi(G_*)B \tag{8}$$

とします。ただし、$G(\lambda) = \log[e^A e^{\lambda B}]$ に対応して

$$\psi(z)\phi(-\log z) = 1$$

と定義して

$$\phi(-\log[e^A e^{\lambda B}])\ ,\ \psi(e^A e^{\lambda B})$$

とします。(8) を λ 積分することで $G(\lambda)$ は

$$G(\lambda) = G(0) + \int_0^\lambda d\lambda' \psi(e^{A_*} e^{\lambda' B_*})B = A + \int_0^\lambda d\lambda' \psi(e^{A_*} e^{\lambda' B_*})B$$

G_* なので A_*, B_* としています。$\lambda = 1$ とすれば

$$G(\lambda = 1) = A + \int_0^1 d\lambda' \psi(e^{A_*} e^{\lambda' B_*})B = A + \int_0^1 d\lambda' \psi(e^{A_*} e^{\lambda' B_*})B$$

これが

$$e^A e^B = e^{G(\lambda=1)}$$

を与えます。

積分部分を厳密に求めることができないので、$\psi(e^{A_*} e^{\lambda' B_*})$ を展開して低次の項を取り出します。今の状況に合わせるために $\phi(z)$ を対数の形にして

$$\phi(-\log z) = \frac{e^{-\log z} - 1}{-\log z} = -\frac{1/z - 1}{\log z} = \frac{z - 1}{z \log z}$$

そうすると、関数 $\psi(z)$ は定義 $\psi(z)\phi(-\log z) = 1$ から

$$\psi(z) = \frac{z \log z}{z - 1}$$

$\psi(e^{A_*} e^{\lambda B_*})$ を展開するために

$$\psi(e^{A_*} e^{\lambda B_*}) = \psi(1 + P_*)$$

として、P_* が小さいとします。そうすると対数の展開から

$$
\begin{aligned}
\psi(1+x) = (1+x)\frac{\log[1+x]}{x} &= \frac{(1+x)}{x}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}x^n \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}x^{n-1} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}x^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n+2}}{n+1}x^n + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}x^n \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+2}}{n+1}x^n + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}x^n \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{((-1)^{n+2} + (-1)^{n+1})n + (-1)^{n+1}}{n(n+1)}x^n \\
&= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n(n+1)}x^n \\
&= 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{6}x^2 + \cdots
\end{aligned}
$$

これから

$$
\psi(e^{A_*}e^{\lambda B_*})B = \psi(1+P_*)B = (1 + \frac{1}{2}P_* - \frac{1}{6}P_*^2 + \cdots)B
$$

ここから交換関係が 2 回までの項を取り出すことにします。

P_*B の項は

$$
P_*B = (e^{A_*}e^{\lambda B_*} - 1)B = e^{A_*}e^{\lambda B_*}B - B = (e^Ae^{\lambda B}) * B - B
$$

e^B が B に作用して交換関係を作っても、B 同士は交換することから

$$
e^{\lambda B} * B = (1 + \lambda B + \frac{1}{2}\lambda^2B^2 + \cdots) * B = B + \lambda[B,B] + \frac{1}{2}\lambda^2[B,[B,B]] + \cdots = B
$$

となります。よって

$$
\begin{aligned}
P_*B &= e^{A_*}e^{\lambda B_*}B - B = e^A * B - B = (1 + A + \frac{1}{2}A^2 + \cdots) * B - B \\
&= B + [A,B] + \frac{1}{2}[A,[A,B]] + \cdots - B \\
&= [A,B] + \frac{1}{2}[A,[A,B]] + \cdots
\end{aligned}
$$

P_*^2B では

$$
\begin{aligned}
P_*^2 B &= (e^{A_*}e^{\lambda B_*}-1)(e^{A_*}e^{\lambda B_*}-1)B = (e^{A_*}e^{\lambda B_*}-1)([A,B]+\frac{1}{2}[A,[A,B]]+\cdots) \\
&= e^{A}e^{\lambda B} * \big([A,B]+\frac{1}{2}[A,[A,B]]\big) - [A,B] - \frac{1}{2}[A,[A,B]]+\cdots \\
&= e^{A} * \big([A,B]+\frac{1}{2}[A,[A,B]+\lambda[B,[A,B]]\big) - [A,B] - \frac{1}{2}[A,[A,B]]+\cdots \\
&= [A,B]+\frac{1}{2}[A,[A,B]+\lambda[B,[A,B]]+[A,[A,B]] - [A,B] - \frac{1}{2}[A,[A,B]]+\cdots \\
&= [A,[A,B]+\lambda[B,[A,B]]+\cdots
\end{aligned}
$$

これらを積分に入れることで

$$
\begin{aligned}
\int_0^1 d\lambda'\psi(e^{A_*}e^{\lambda B_*})B &\simeq \int_0^1 d\lambda'\big(1+\frac{1}{2}P_*(G)-\frac{1}{6}P_*^2(G)\big)B \\
&\simeq \int_0^1 d\lambda'\big(B+\frac{1}{2}\big([A,B]+\frac{1}{2}[A,[A,B]]\big)-\frac{1}{6}\big([A,[A,B]+\lambda'[B,[A,B]]\big)\big) \\
&= \int_0^1 d\lambda'\big(B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{4}[A,[A,B]]-\frac{1}{6}\lambda'[B,[A,B]]-\frac{1}{6}[A,[A,B]]\big) \\
&= B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{4}[A,[A,B]]-\frac{1}{12}[B,[A,B]]-\frac{1}{6}[A,[A,B]] \\
&= B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]-\frac{1}{12}[B,[A,B]]
\end{aligned}
$$

よって

$$
G(\lambda=1) = A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]-\frac{1}{12}[B,[A,B]]
$$

というわけで、交換関係を 2 回まで含む形は

$$
e^A e^B \simeq \exp\big[A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]-\frac{1}{12}[B,[A,B]]\big]
$$

となります。$[A,B]$ と A,B が交換するとすれば、(5) と一致します。
　結果をまとめておくと

$$
\begin{aligned}
e^{-\lambda A}Be^{\lambda A} &= B-[A,B]\lambda+\frac{1}{2!}[A,[A,B]]\lambda^2-\frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]]\lambda^3+\cdots \\
e^A e^B &\simeq \exp\big[A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]-\frac{1}{12}[B,[A,B]]\big]
\end{aligned}
$$

$[A,[A,B]]=[B,[A,B]]=0$ のとき

$$
\begin{aligned}
e^{-\lambda A}B^n e^{\lambda A} &= (B-\lambda[A,B])^n \\
e^A e^B &= \exp\big[A+B+\frac{1}{2}[A,B]\big] \\
e^{A+B} &= e^A e^B \exp\big[-\frac{1}{2}[A,B]\big]
\end{aligned}
$$