正準交換関係の表現

力学から量子力学へ変更する手続きは正準交換関係を通して行われます。このとき、正準交換関係を満たすことしか要求されていないので、実際にどのような演算子を使うかは任意です。このことを簡単に見ていきます。

量子化における正準交換関係は位置演算子 Q と運動量演算子 P によって

$$[Q, P] = i\hbar \ , \ [Q, Q] = 0 \ , \ [P, P] = 0$$

と与えられ、位置演算子と運動量演算子は

$$Q\psi(x,t) = x\psi(x,t) \ , \ P\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)$$

と定義するとされます。しかし、要求されているのは正準交換関係であって、Q, P の具体的な形は要求されていません (量子化の要請は正準交換関係を満たすエルミート演算子としか言っていない)。なので、同じ正準交換関係を満たす異なった演算子が存在できます。このことを調和振動子を使って具体的に見ていきます。

「調和振動子」での生成、消滅演算子を持ってきます。調和振動子のハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2} = \hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - i\frac{p}{m\omega})\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + i\frac{p}{m\omega}) = \hbar\omega a^\dagger a$$

と書けて、$a^\dagger, a$ は

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - i\frac{p}{m\omega}) \ , \ a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + i\frac{p}{m\omega})$$

となっています。x, p を演算子 Q, P にして、$a^\dagger, a$ を生成、消滅演算子にします。このとき Q, P による正準交換関係は生成、消滅演算子の形で

$$[a, a^\dagger] = 1$$

と書き換えられます。そして、a を作用させると 0 になる基底状態 $|0\rangle$ $(a|0\rangle = 0)$ があり、基底状態に $a^\dagger$ を作用させると

$$|\psi_1\rangle = a^\dagger|0\rangle, \ldots, |\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle$$

となります。このように調和振動の状態は $a^\dagger, a, |0\rangle$ によって作られます。

ここで、$[a, a^\dagger] = 1$ は別の演算子で書けないかと考えます ($a^\dagger, a$ が変更されるので Q, P も変更される)。そのために、a を複素数の定数 θ だけ動かして

$$\alpha(\theta) = a + \theta \ , \ \alpha^\dagger(\theta) = a^\dagger + \theta^*$$

としてみます。θ は定数なので

$$[\alpha(\theta), \alpha^\dagger(\theta)] = [a + \theta, a^\dagger + \theta^*] = [a, a^\dagger] = 1$$

このように、交換関係は変わっていません。しかし、$\alpha(\theta)$ を基底状態に作用させると

$$\alpha(\theta)|0\rangle = a|0\rangle + \theta|0\rangle = \theta|0\rangle$$

となって、消えません。これは $\alpha(\theta)$ に変更されたために、基底状態も変更されていると考えます。つまり、基底状態も新しくなって

$$\alpha(\theta)|0\rangle_\theta = 0$$

となる基底状態 $|0\rangle_\theta$ がいるとします。また、$|0\rangle_\theta$ に a を作用させると

$$a|0\rangle_\theta = -\theta|0\rangle_\theta$$

消滅演算子の固有状態なので、$|0\rangle_\theta$ を固有値 $-\theta$ のコヒーレント状態 (coherent state) と言います。

$\alpha^\dagger, \alpha$ の交換関係は $a^\dagger, a$ と同じで、基底状態も与えられているので、a, α は調和振動子での同じ結果を導きます。このように、同じ交換関係に従い、同じ結果を導く異なる演算子がいることが分かります。

どういうときに同じ結果になる演算子が作れるのかを知るために、今の変換が何だったのかを求めます。a から α に変換する

$$\alpha(\theta) = UaU^{-1}\ ,\ \alpha^\dagger(\theta) = (UaU^{-1})^\dagger = (U^{-1})^\dagger a^\dagger U^\dagger = Va^\dagger V^{-1}$$

というユニタリー変換があるとします。U, V はユニタリー演算子です。α は θ を含み、$\alpha^\dagger$ は θ^* を含むので、U は θ に、V は θ^* に依存しているはずです。このような U, V があることを確かめます。

それぞれを θ, θ^* で微分してみれば

$$\begin{aligned}
\frac{d\alpha}{d\theta} &= \frac{dU}{d\theta}aU^{-1} + Ua\frac{dU^{-1}}{d\theta} = 1 \\
\frac{d\alpha^\dagger}{d\theta^*} &= \frac{dV}{d\theta^*}a^\dagger V^{-1} + Va^\dagger\frac{dV^{-1}}{d\theta^*} = 1
\end{aligned}$$

この形から U, V では θ, θ^* は混ざっていないはずです。そして、$[a, a^\dagger] = 1$ を利用して

$$\begin{aligned}
&\frac{dU}{d\theta}aU^{-1} + Ua\frac{dU^{-1}}{d\theta} = U[a, a^\dagger]U^{-1} = UU^{-1} = 1 \\
&\frac{dV}{d\theta^*}a^\dagger V^{-1} + Va^\dagger\frac{dV^{-1}}{d\theta^*} = V[a, a^\dagger]V^{-1} = 1
\end{aligned}$$

と出来ないか考えます。このために

$$U(\theta) = \exp[D(\theta)]\ ,\ V(\theta^*) = \exp[F(\theta^*)]$$

とします。そうすると

$$\frac{dU}{d\theta}aU^{-1} + Ua\frac{dU^{-1}}{d\theta} = U\frac{dD}{d\theta}aU^{-1} - Ua\frac{dD}{d\theta}U^{-1} = U[\frac{dD}{d\theta}, a]U^{-1}$$

よって、$D = -\theta a^\dagger$ となります。$\alpha^\dagger$ でも同様に

$$\frac{dV}{d\theta^*}a^\dagger V^{-1} + Va^\dagger\frac{dV^{-1}}{d\theta^*} = V\frac{dF}{d\theta^*}a^\dagger V^{-1} - Va^\dagger\frac{dF}{d\theta^*}V^{-1} = V[\frac{dF}{d\theta^*}, a^\dagger]V^{-1}$$

から、$F=\theta^* a$ となります。そして、U,V は θ,θ^* が混ざってなければいいので、今の結果から

$$U=V=\exp[\theta^* a-\theta a^\dagger]$$

と出来ます。これを

$$U=\exp[i(-i(\theta^* a-\theta a^\dagger))]=\exp[iG]$$

と書けば、

$$G^\dagger=i(\theta a^\dagger-\theta^* a)=-i(\theta^* a-\theta a^\dagger)=G$$

から、G はエルミートになります。よって、U はユニタリー演算子になっています。実際に

$$U^\dagger=\exp[-iG^\dagger]=\exp[-iG]=U^{-1}$$

となっています。
　変換が正しいことを確かめておきます。ハウスドルフの公式

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

から

$$UaU^{-1}=e^{iG}ae^{-iG}=a+i[G,a]-\frac{1}{2}[G,[G,a]]-\cdots \tag{1}$$

$[G,a]$ は

$$[G,a]=[-i(\theta^* a-\theta a^\dagger),a]=i\theta[a^\dagger,a]=-i\theta$$

このため、(1) の第三項以降は定数との交換関係になるので消えて

$$UaU^{-1}=a+\theta$$

となり、α は a からのユニタリー変換で与えられていることが確かめられます。
　また、新しい基底状態 $|0\rangle_\theta$ は $|0\rangle$ に U が作用して作られるので

$$|0\rangle_\theta=U|0\rangle=\exp[i(-i(\theta^* a-\theta a^\dagger))]|0\rangle=\exp[\theta^* a-\theta a^\dagger]|0\rangle$$

これは A,B が $[A,B]$ と交換するときのハウスドルフの公式

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

によって

$$
\begin{aligned}
e^{-\theta a^\dagger}e^{\theta^* a} &= \exp\big[-\theta a^\dagger+\theta^* a-\frac{1}{2}\theta\theta^*[a^\dagger,a]\big] \\
&= \exp\big[-\theta a^\dagger+\theta^* a+\frac{1}{2}|\theta|^2\big] \\
e^{-|\theta|^2/2}e^{-\theta a^\dagger}e^{\theta^* a} &= U
\end{aligned}
$$

と書き換えられ、$a|0\rangle=0$ なので $e^{\theta^* a}=1+\theta^* a+\cdots$ は 1 になって

$$
|0\rangle_\theta = e^{-|\theta|^2/2}e^{-\theta a^\dagger}e^{\theta^* a}|0\rangle = e^{-|\theta|^2/2}e^{-\theta a^\dagger}|0\rangle
$$

$e^{-\theta a^\dagger}$ が $|0\rangle$ に作用しているので、$|0\rangle_\theta$ は複数の $a^\dagger$ によって生成された状態が無数に重なった状態と解釈できます。
　もう一つ例を出しておきます。a からの変換として

$$
\beta = UaU^{-1}
$$

$$
U=e^{iF}\ ,\ F=\frac{1}{2}i(\theta^* a^2-\theta a^{\dagger 2})
$$

とします $(a^{\dagger 2}=(a^\dagger)^2)$。$F$ はエルミート演算子で、U はユニタリー演算子です。ハウスドルフの公式から

$$
UaU^{-1}=e^{iF}ae^{-iF}=a+i[F,a]-\frac{1}{2}[F,[F,a]]-\frac{1}{3!}i[F,[F,[F,a]]]+\cdots
$$

$[F,a]$ は

$$
\begin{aligned}
[F,a]=\frac{1}{2}i[(\theta^* a^2-\theta a^{\dagger 2}),a]=\frac{1}{2}i\theta^*[a^2,a]-\frac{1}{2}i\theta[a^{\dagger 2},a] &= -\frac{1}{2}i\theta[a^{\dagger 2},a] \\
&= -\frac{1}{2}i\theta(a^\dagger[a^\dagger,a]+[a^\dagger,a]a^\dagger) \\
&= i\theta a^\dagger
\end{aligned}
$$

$[F,a^\dagger]$ は

$$
\begin{aligned}
[F,a^\dagger]=\frac{1}{2}i[(\theta^* a^2-\theta a^{\dagger 2}),a^\dagger]=\frac{1}{2}i\theta^*[a^2,a^\dagger]-\frac{1}{2}i\theta[a^{\dagger 2},a^\dagger] &= \frac{1}{2}i\theta^*[a^2,a^\dagger] \\
&= \frac{1}{2}i\theta(a[a,a^\dagger]+[a,a^\dagger]a) \\
&= i\theta^* a
\end{aligned}
$$

これらから

$$
\begin{aligned}
&[F,a]=i\theta a^\dagger \\
&[F,[F,a]]=i\theta[F,a^\dagger]=-|\theta|^2 a \\
&[F,[F,[F,a]]]=-|\theta|^2[F,a]=-i|\theta|^2\theta^* a^\dagger
\end{aligned}
$$

となるので

$$
\begin{aligned}
UaU^{-1} = e^{iF}ae^{-iF} &= a + i[F,a] - \frac{1}{2}[F,[F,a]] - \frac{1}{3!}i[F,[F,[F,a]]] + \cdots \\
&= a - \theta a^\dagger + \frac{1}{2}|\theta|^2 a - \frac{1}{3!}\theta^2\theta^* a^\dagger + \cdots
\end{aligned}
$$

複素数 θ を極表示にして $\theta = re^{i\phi}$ とすれば

$$
\begin{aligned}
UaU^{-1} &= a - re^{i\phi}a^\dagger + \frac{1}{2}r^2 a - \frac{1}{3!}r^3 e^{i\phi}a^\dagger + \cdots \\
&= a + \frac{1}{2}r^2 a - re^{i\phi}a^\dagger - \frac{1}{3!}r^3 e^{i\phi}a^\dagger \\
&= a(1 + \frac{1}{2}r^2 + \cdots) - e^{i\phi}a^\dagger(r + \frac{1}{3!}r^3 + \cdots)
\end{aligned}
$$

この先も同じ規則性を持つので

$$
\begin{aligned}
\beta(\theta) &= UaU^{-1} = a\cosh r - e^{i\phi}a^\dagger \sinh r \\
\beta^\dagger(\theta) &= Ua^\dagger U^{-1} = a^\dagger \cosh r - e^{-i\phi}a\sinh r
\end{aligned}
$$

となります。これらの交換関係は

$$
\begin{aligned}
[\beta,\beta^\dagger] &= [a\cosh r - e^{i\phi}a^\dagger\sinh r, a^\dagger\cosh r - e^{-i\phi}a\sinh r] \\
&= [a\cosh r, a^\dagger\cosh r] - [e^{i\phi}a^\dagger\sinh r, a^\dagger\cosh r] - [a\cosh r, e^{-i\phi}a\sinh r] + [e^{i\phi}a^\dagger\sinh r, e^{-i\phi}a\sinh r] \\
&= [a,a^\dagger]\cosh^2 r + [a^\dagger,a]\sinh^2 r \\
&= \cosh^2 r - \sinh^2 r \\
&= 1
\end{aligned}
$$

となるので、$a, a^\dagger$ と同じです。というわけで、変換後も同じ正準交換関係です。今の変換によって作られる状態はスクイーズド状態 (squeezed state) と呼ばれます。

ちなみに、コヒーレント状態とスクイーズド状態は量子光学なんかで出てきます。特徴として、コヒーレント状態、スクイーズド状態では

$$
\langle(\Delta P)^2\rangle\langle(\Delta Q)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \qquad (\Delta A = A - \langle A\rangle)
$$

となっています ($\langle\ \rangle$ はそれぞれの $|0\rangle_\theta$ による期待値)。これは最小不確定性状態と言われたりします。スクイーズド状態では cosh, sinh のために $\langle(\Delta P)^2\rangle, \langle(\Delta Q)^2\rangle$ のどちらかをどこまでも大きく取れるので、片方をどこまでも小さく取れます。$\langle(\Delta P)^2\rangle \le \hbar/2$ か $\langle(\Delta Q)^2\rangle \le \hbar/2$ である波束をスクイーズド波と呼び、スクイーズド状態はそれに対応しています。

というわけで、$\alpha(\theta), \beta(\theta)$ は a のユニタリー変換から作られています。a からユニタリー演算子 U による UaU^{-1} で求められるとき、それらはユニタリー同値 (unitary equivalent) と言います。つまり、ユニタリー同値であるとき、同じ状況 ($|0\rangle, [a,a^\dagger]=1 \Leftrightarrow |0\rangle_\theta, [\alpha(\theta),\alpha^\dagger(\theta)]=1$) になります。これが量子力学の数学的な特徴で、正準交

換関係を満たすユニタリー同値なものは物理を変えません。具体的に言えば、通常、正準交換関係での位置演算子と運動量演算子は

$$
Q_S\psi(x) = x\psi(x)\ ,\ P_S\psi(x) = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \tag{3}
$$

と定義しますが、これとユニタリー同値な (ユニタリー変換によって別の形にした)Q, P であれば量子力学の結果は変わらないということです。これがハイゼンベルクの行列力学とシュレーディンガーの波動力学が一致していた理由で、二つの記述はユニタリー同値なので一致していました。

正準交換関係を満たすように選んだ具体的な形を表現 (representation) と言い、(3) をシュレーディンガー表現と言います。また、量子力学で基本的に使われる位置表示と運動量表示はユニタリー同値です。位置表示のことを一般的にシュレーディンガー表現と呼んでいます。

ユニタリー同値な表現の関係はストーン-フォン・ノイマン (Stone-von Neumann) の定理によって与えられています。数学の面倒なことは置いといて、a を実数とし、正準交換関係を満たす位置演算子、運動量演算子 (一般的には正準交換関係を満たすエルミート演算子)Q, P によって

$$
U(a) = \exp[iaP]\ ,\ V(b) = \exp[iaQ]
$$

という演算子を作ります。Q, P がエルミート演算子なので、U, V はユニタリー演算子で

$$
U^\dagger(a)U(a) = 1\ ,\ V^\dagger(a)V = 1
$$
$$
U^\dagger(a) = U(-a)\ ,\ V^\dagger(a) = V(-a)
$$

ハウスドルフの公式 (2) からすぐに分かるように

$$
U(a)U(b) = U(b)U(a) = U(a+b)
$$
$$
V(a)V(b) = V(b)V(a) = V(a+b)
$$

そして、$U(a)V(b), V(b)U(a)$ は正準交換関係から

$$
U(a)V(b) = \exp[iaP + ibQ - \frac{1}{2}ab[P,Q]] = e^{i\hbar ab/2}\exp[iaP + ibQ]
$$
$$
V(b)U(a) = \exp[ibQ + iaP - \frac{1}{2}ab[Q,P]] = e^{-i\hbar ab/2}\exp[iaP + ibQ]
$$

となっているので

$$
U(a)V(b) = e^{i\hbar ab}V(b)U(a)
$$

という、U, V による交換関係が出てきます。これをワイル (Weyl) の正準交換関係と言います。U_S, V_S をシュレーディンガー表現での Q_S, P_S によるものとしたとき、ワイルの正準交換関係を満たす演算子 Q, P による U, V に対して

$$
WU(a)W^{-1} = U_S(a)\ ,\ WV(a)W^{-1} = V_S(a)
$$

となるユニタリー演算子 W が存在します。これがストーン-フォン・ノイマンの定理です（正確にはもっと細かく定義されますが無視してます）。つまり、ワイルの正準交換関係を満たす表現はシュレーディンガー表現とユニタリー同値ということです。

この性質のために、一般的にシュレーディンガー表現を使う量子力学では表現による問題がほとんど前面に出てきません (ただし、シュレーディンガー表現とユニタリー同値な表現以外は物理的に意味がないとまでは言えなく、Reeh による磁場ありの無限大に長い円筒での電子の例とかがあります)。一方で、ストーン-フォン・ノイマンの定理は有限の自由度のときに成立しているので、無限大の自由度を持つ場の量子論には使えません（量子力学は有限個の粒子を扱うので正準変数が有限個)。しかし、非同値な表現が無数にあることが場の量子論を特徴付けています。

ついでの話として、ワイルの正準交換関係に変更する理由を言っておきます。位置演算子と運動量演算子による正準交換関係 $[Q,P]=i\hbar$ は、例えば $N\times N$ 行列によるものとして見ると、成立していないことが分かります。理由は簡単で、両辺のトレースを取ったとき、左辺は 0 になり ($\mathrm{tr}AB=\mathrm{tr}BA$)、右辺は $i\hbar N$ になるからです。有限次元において交換関係は成立しないので、無限大の行列として成立させたのがハイゼンベルクです (ハイゼンベルク表現)。

さらに、$[P,Q^n]$ を計算してみると

$$
\begin{aligned}
[P,Q^n]=[P,QQ^{n-1}]=[P,Q]Q^{n-1}+Q[P,Q^{n-1}]&\\
&=-i\hbar Q^{n-1}+Q[P,Q^{n-1}]\\
&=-i\hbar Q^{n-1}+Q[P,QQ^{n-2}]\\
&=-i\hbar Q^{n-1}+Q[P,Q]Q^{n-2}+Q^2[P,Q^{n-2}]\\
&=-i\hbar Q^{n-1}-i\hbar Q^{n-1}+Q^2[P,Q^{n-2}]\\
&=-in\hbar Q^{n-1}
\end{aligned}
$$

右辺のノルムは

$$
|-in\hbar Q^{n-1}|=n\hbar|Q^{n-1}|
$$

なので、三角不等式から

$$
\begin{aligned}
n\hbar|Q^{n-1}|=|PQ^n-Q^nP|\leq|PQ^n|+|Q^nP|=|PQQ^{n-1}|+|QQ^{n-1}P|&\\
&\leq|P||Q||Q^{n-1}|+|Q||Q^{n-1}||P|\\
&=2|P||Q||Q^{n-1}|
\end{aligned}
$$

そうすると

$$
n\hbar\leq 2|P||Q|
$$

という不等式が任意の $n\geq 1$ で成立する必要があります。このため、$|P|,|Q|$ は同時に有限の値になれなく、任意の大きな値が取れてしまいます。演算子のノルム $|A|$ が有限の値であれば有界、そうでなければ非有界と言います (下の補足も参照)。

このように、正準交換関係を満たす位置演算子、運動量演算子は有界になっていません。このため、位置や運動量は観測量であるとする物理の解釈で問題が起きます。ただし、物理側の事情からすれば位置や運動量はある範囲内に限定して考えるので (例えば実験器具の大きさは有限)、有界でなくても気にしません。

そして、非有界な演算子による交換関係の意味づけが明確に与えられないので、正準交換関係は形式的なものです。これに対処するために、exp に乗せてユニタリー演算子として定義したのがワイルの正準交換関係です (ユニタリー演算子は有界。雑に言えば、$|U|\phi\rangle|^2=\langle\phi|U^\dagger U|\phi\rangle=\langle\phi|\phi\rangle<\infty$ のため)。ただし、有界な演算子 A の $\exp[A]$ はテーラー展開から定義できますが、非有界な演算子では同様に定義できません。非有界な演算子で定義できることを示すにはスペクトル定理が必要になります。

・補足

演算子のノルムの数学的な定義を載せておきます。ここではノルムは $|\ |$ で表記しています。

ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ があり (より一般的にはノルム空間)、演算子 T は $\mathcal{H}_1$ から $\mathcal{H}_2$ への写像とします。このとき、演算子が有界 (bounded) と言ったときは

$$|Tv| \leq \alpha|v|$$

となる定数 $\alpha \geq 0$ が全ての $v \in \mathcal{H}_1$ に対して存在することです（細かく言えば、v は $\mathcal{H}_1$、Tv は $\mathcal{H}_2$ にいるので、それぞれのヒルベルト空間でのノルム）。そうでなければ非有界 (unbounded) となります。

このとき最も小さい α のときを T のノルムとし、上限 sup によって

$$|T| = \sup_{|v|=1} |Tv|$$

と定義します (上限は例えば $a < x < b$ での b のこと)。この sup は $|v| = 1$ での上限のことです。ノルムは

$$|T| = \sup_{|v|\neq 0} \frac{|Tv|}{|v|}$$

と定義しても同じです。もしくは、最も小さい α のことなので下限 inf ($a < x < b$ での a) によって

$$|T| = \inf \alpha \quad\quad (|Tv| \leq \alpha|v|)$$

としても同じ意味です。T が有界であれば $|T|$ は有限です (α がいるから)。