

シュウィンガーの作用原理

解析力学の定式化をほぼそのまま量子論で使える形に持っていくシュウィンガーの作用原理について見ていきます。これは、ポアソン括弧と交換関係を対応させる正準量子化、経路積分による量子化とは別の量子化の方法です。先に古典論の場合を見てから、シュウィンガーの作用原理に移ります。

古典的な最小作用の原理から始めます。作用 W はラグランジアン L から

$$W = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \quad (\dot{q} = \frac{dq}{dt})$$

と定義されます。変分 δq を取り、両端では

$$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$$

と固定し、作用の変分は $\delta W = 0$ とすればオイラー・ラグランジュ方程式が出てきます。しかし、ここでは両端を固定しないようにします。そのために、両端 t_1, t_2 での時間の変化 $\delta t_1 = \delta t(t_1), \delta t_2 = \delta t(t_2)$ を与えます。そうすると

$$\begin{aligned} \delta W &= \int_{t_1+\delta t_1}^{t_2+\delta t_2} dt L(q', \dot{q}', t) - \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \quad (q' = q + \delta q) \\ &= \left(\int_{t_1+\delta t_1}^{t_1} dt + \int_{t_1}^{t_2} dt + \int_{t_2}^{t_2+\delta t_2} dt \right) L(q', \dot{q}', t) - \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt (L' - L) + \left(\int_{t_1+\delta t_1}^{t_1} dt + \int_{t_2}^{t_2+\delta t_2} dt \right) L' \quad (L' = L(q', \dot{q}', t)) \end{aligned}$$

第一項は通常の変分の計算出てくる部分で

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} dt (L' - L) &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta q \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta q \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \left[\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} \end{aligned}$$

第二項は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt_1} \int_{t_1+\delta t_1}^{t_1} dt F(t) &= F(t_1) - F(t_1 + \delta t_1) \frac{d}{dt_1} (t_1 + \delta t_1) = F(t_1) - F(t_1 + \delta t_1) \left(1 + \frac{d}{dt_1} \delta t_1 \right) \\ &\simeq F(t_1) - F(t_1) \left(1 + \frac{d}{dt_1} \delta t_1 \right) - \frac{dF}{dt_1} \delta t_1 \\ &= -F(t_1) \frac{d\delta t_1}{dt_1} - \frac{dF}{dt_1} \delta t_1 \\ &= -\frac{d}{dt_1} (F(t_1) \delta t_1) \end{aligned}$$

から、 δt の 1 次までで ($\delta q \delta t$ の項も無視する)

$$\left(\int_{t_1+\delta t_1}^{t_1} dt + \int_{t_2}^{t_2+\delta t_2} dt \right) L' \simeq \left[L(q, \dot{q}, t) \delta t \right]_{t_1}^{t_2}$$

となります。よって、 δW は

$$\delta W = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta q \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q + L(q, \dot{q}, t) \delta t \right]_{t_1}^{t_2}$$

$L(q, \dot{q}, t) \delta t$ が両端の時間を固定しないことで出て来る項です。第二項は積分の両端に依存しているため、表面項や boundary term と呼ばれます。また、このように変分を取ることは、Weiss の作用原理と呼ばれたりします。 δW が

$$\delta W = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q + L(q, \dot{q}, t) \delta t \right]_{t_1}^{t_2}$$

であることを要求すれば、オイラー・ラグランジュ方程式が出てきます。

L を

$$L = p\dot{q} - H, \quad p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$$

によってハミルトニアン H に変えれば、表面項は

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q + L(q, \dot{q}, t) \delta t = p \delta q + p \dot{q} \delta t - H \delta t = p \delta q + p \frac{dq}{dt} \delta t - H \delta t = p \delta \eta - H \delta t$$

となります。 $\delta \eta$ は

$$t' = t + \delta t$$

$$q'(t) = q(t) + \delta q(t), \quad q'(t') = q(t) + \delta \eta(t)$$

として変換に入ってくるので、 $q(t)$ と $q'(t')$ の差です。実際に

$$q'(t') = q'(t + \delta t) = q'(t) + \frac{dq}{dt} \delta t = q(t) + \delta q(t) + \frac{dq}{dt} \delta t$$

から

$$\delta \eta(t) = \delta q(t) + \frac{dq}{dt} \delta t$$

となります。

このまま先に進んでもいいですが、ハミルトニアンを導入しているため、ハミルトニアンを使った形にします。そのために

$$W = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) = \int_{t_1}^{t_2} dt (p\dot{q} - H(q, p, t))$$

に戻ります。この場合では、変分は q, p に対して取り、両端を固定すれば正準方程式が出てきます。しかし、両端を固定せず、両端での時間の変化 $\delta t_1 = \delta t(t_1), \delta t_2 = \delta t(t_2)$ を与えます。ついでに、両端だけでなく時間そのものを変化させることにし

$$t \Rightarrow t + \delta t$$

とします。時間を変化させるので、 H の時間変化が出てきます。時間の変換を含めるために作用の積分を $\tau = \tau(t)$ から

$$W = \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \frac{dt}{d\tau} (p' \dot{q}' - H'(q', p', \tau))$$

$$(H'(q', p', \tau) = H(q, p, t), q'(\tau) = q(t), p'(\tau) = p(t))$$

と変数変換します。変数変換を行うのは dt の変換

$$dt \Rightarrow (1 + \frac{d\delta t}{dt}) dt$$

における変化部分を取り出すためです。これに変分 δ を作用させれば

$$\begin{aligned} \delta W &= \delta \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \frac{dt}{d\tau} (p' \frac{dq'}{dt} - H'(q', p', \tau)) \\ &= \delta \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau (p' \frac{dq'}{d\tau} - \frac{dt}{d\tau} H'(q', p', \tau)) \\ &= \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau (\delta p' \frac{dq'}{d\tau} + p' \delta \frac{dq'}{d\tau} - \delta \frac{dt}{d\tau} H' - \frac{dt}{d\tau} \delta H') \end{aligned}$$

変分 δ と微分は交換可能なので、第一項と第二項は

$$\delta p' \frac{dq'}{d\tau} + p' \delta \frac{dq'}{d\tau} = \delta p' \frac{dq'}{d\tau} + \frac{d}{d\tau} (p' \delta q') - \frac{dp'}{d\tau} \delta q'$$

同様に、第三項と第四項は

$$-(\delta H' \frac{dt}{d\tau} + H' \delta \frac{dt}{d\tau}) = -(\delta H' \frac{dt}{d\tau} + \frac{d}{d\tau} (H' \delta t) - \frac{dH'}{d\tau} \delta t)$$

よって

$$\begin{aligned} \delta W &= \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau (\delta p' \frac{dq'}{d\tau} - \frac{dp'}{d\tau} \delta q' - \delta H' \frac{dt}{d\tau} + \frac{dH'}{d\tau} \delta t) + \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \frac{d}{d\tau} (p' \delta q' - H' \delta t) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d\tau}{dt} (\delta p \frac{dq}{d\tau} - \frac{dp}{d\tau} \delta q - \delta H \frac{dt}{d\tau} + \frac{dH}{d\tau} \delta t) + \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d\tau}{dt} \frac{d}{d\tau} (p \delta q - H \delta t) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt (\frac{dq}{dt} \delta p - \frac{dp}{dt} \delta q - \delta H + \frac{dH}{dt} \delta t) + \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} (p \delta q - H \delta t) \end{aligned} \quad (1)$$

二行目で τ を t に戻しています。第一項は

$$\delta H = \frac{\partial H}{\partial q} \delta q + \frac{\partial H}{\partial p} \delta p + \frac{\partial H}{\partial t} \delta t$$

から

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{dq}{dt} \delta p - \frac{dp}{dt} \delta q - \delta H + \frac{dH}{dt} \delta t \right) = \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\left(\frac{\partial H}{\partial p} + \frac{dq}{dt} \right) \delta p + \left(\frac{\partial H}{\partial q} - \frac{dp}{dt} \right) \delta q + \left(\frac{dH}{dt} - \frac{\partial H}{\partial t} \right) \delta t \right)$$

第二項は

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} (p \delta q - H \delta t) = \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} G = G|_{t_2} - G|_{t_1} = G(t_2) - G(t_1)$$

よって、 q, p, t の変分による δW は

$$\delta W = \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\left(\frac{\partial H}{\partial p} + \frac{dq}{dt} \right) \delta p + \left(\frac{\partial H}{\partial q} - \frac{dp}{dt} \right) \delta q + \left(\frac{dH}{dt} - \frac{\partial H}{\partial t} \right) \delta t \right) + G(t_2) - G(t_1) \quad (2)$$

δW に対して

$$\delta W = G(t_2) - G(t_1) \quad (3)$$

とすれば

$$\frac{dq}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q}, \quad \frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

となり、正準方程式とハミルトニアン の時間微分の式が出てきます。ハミルトニアン の時間微分の式はエネルギー保存と関係しています。また、これは今の場合 $t + \delta t$ としたことによって出てきていますが、正準方程式が成立していれば自動的に出てくる関係です (dH/dt に正準方程式を使えば $\partial H/\partial t$ になる)。

$G = p\delta q - H\delta t = G_q + G_t$ が何であるかを見ます。そのために正準変換を持ってきます。正準変換における無限小変換は母関数 Z によって

$$Z(q, p, t) = qp + D(q, p, t)$$

と書けます (解析力学の「正準変換」参照)。第一項の qp は恒等変換部分で、 D が変化部分を作る微小量です。このとき、 q, p の変換は

$$\bar{q} = q + \frac{\partial}{\partial p} D(q, p, t) = q + \Delta q, \quad \bar{p} = p - \frac{\partial}{\partial q} D(q, p, t) = p + \Delta p$$

と与えられ、これは正準方程式を変更せずに q, p をずらします。 $\Delta q, \Delta p$ は時間にのみ依存しているとします。適当な関数での $F(\bar{q}, \bar{p})$ と $F(q, p)$ の差を 1 次までで見ると

$$\begin{aligned}
\delta_D F &= F(\bar{q}, \bar{p}) - F(q, p) \simeq F(q, p) + \frac{\partial F}{\partial q} \Delta q + \frac{\partial F}{\partial p} \Delta p - F(q, p) \\
&= \frac{\partial F}{\partial q} \Delta q + \frac{\partial F}{\partial p} \Delta p \\
&= \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial D}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial D}{\partial q} \\
&= \{F, D\}_{PB} \quad (\{F, D\}_{PB} = \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial D}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial D}{\partial q})
\end{aligned}$$

となるので、 F の差は F と D によるポアソン括弧 $\{ \}_{PB}$ で書けます。
 D を $G_q = p\delta q$ とすれば

$$\begin{aligned}
\delta_q q &= \frac{\partial}{\partial p} G_q = \delta q, \quad \delta_q p = \frac{\partial}{\partial q} G_q = 0 \\
\delta_q F &= \{F, G_q\}_{PB} = \{F, p\delta q\}_{PB} = \frac{\partial F}{\partial q} \delta q
\end{aligned} \tag{4}$$

となり、 G_q は位置のみを微小に動かすことが分かります。変分 δq は現実の軌道 q を仮想的な軌道 $q + \delta q$ に動かすとしませんが、これは両端で $\delta q(t_1), \delta q(t_2)$ を 0 にしなければ、 q 全体を動かす無限小変換に対応します。例えば、 δq が定数であれば、 q 全体を並進 (平行移動) する変換となります。

次に時間変化を見てみます。 q, p の時間の微小変化は 1 次までで

$$q(t + \Delta t) = q(t) + \frac{dq}{dt} \Delta t, \quad p(t + \Delta t) = p(t) + \frac{dp}{dt} \Delta t$$

と書けるので、対応する変換は

$$\frac{\partial D}{\partial p} = \frac{dq}{dt} \Delta t, \quad -\frac{\partial D}{\partial q} = \frac{dp}{dt} \Delta t$$

となり、正準方程式から D はハミルトニアン H によって $D = D_t = -G_t = H\delta t$ です。これらから

$$q(t + \delta t) = q(t) + \frac{\partial D_t}{\partial p} \delta t, \quad p(t + \delta t) = p(t) - \frac{\partial D_t}{\partial q} \delta t$$

そうすると、 $F(q, p, t)$ の時間変化による差は

$$\begin{aligned}
\delta_t F &= F(q(t + \delta t), p(t + \delta t), t + \delta t) - F(q(t), p(t), t) \\
&\simeq F(q(t), p(t), t) + \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial D_t}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial D_t}{\partial q} + \frac{\partial F}{\partial t} \delta t - F(q(t), p(t), t) \\
&= \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial D_t}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial D_t}{\partial q} + \frac{\partial F}{\partial t} \delta t \\
&= \{F, D_t\}_{PB} + \frac{\partial F}{\partial t} \delta t \\
&= \{F, H\}_{PB} \delta t + \frac{\partial F}{\partial t} \delta t
\end{aligned} \tag{5}$$

となります。特に F が陽に時間依存していなければ、ハミルトニアン H によるポアソン括弧のみで書けます。これから、 $G_t = -H\delta t$ は微小な時間変化を起こすことが分かります。符号が反転しているのは母関数の符号の定義のためです。

というわけで、 δW における G は位置と時間の無限小変換を起こします (生成子)。これが Weiss の作用原理の特徴で、表面項は生成子を作ります。特に $G(t_2) - G(t_1) = 0$ のとき、 $G(t)$ は両端の時間に依存していないので

$$\frac{d}{dt}G = 0$$

となり、保存量となります。そして、(3) において $\delta W = 0$ とすれば、この G が作る無限小変換に対して作用は不変です。つまり、作用の不変性と保存量の関係になっており、そのままネーターの定理 (作用がある変換で不変 $\delta W = 0$ なら、それに対応する保存量がある) になります。

例えば、 δq を定数とし、 $\delta t = 0$ にすれば (位置の微小な平行移動の変換)

$$\frac{d}{dt}G = \delta q \frac{d}{dt}p = 0$$

から、運動量保存となります。同様に、 $\delta q = 0$ とし、 δt を定数にすれば (全体の時間の基準を δt 動かす)、ハミルトニアンが陽に時間依存していなければ

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

から、エネルギー保存となります。

今見てきた古典的な話を踏まえて量子論に移ります。特に、 δW の形 (2),(3) と、 G は変換の生成子 (4),(5) になっていることが重要です。ここから演算子が出てきますが、おそらく混乱はしないと思うので演算子にハットを付けません。

使う状態は位置や運動量のような観測量の状態とし、観測量の演算子 A に対応する完全正規直交系の状態を $|a_i\rangle$ とします。正規直交関係から

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$$

となっています (δ_{ij} はクロネッカーデルタ)。離散的にしていますが、連続的としても同様の話になります。ここに別の観測量の演算子 B に対応する正規直交系の状態 $|b_i\rangle$ による完全性を使えば

$$|a_i\rangle = \sum_j |b_j\rangle \langle b_j | a_i \rangle$$

という形になります。 $\langle b_j | a_i \rangle$ は複素数で、 $\langle b_j | a_i \rangle^* = \langle a_i | b_j \rangle$ です。 j の和の範囲は可能な状態に対してです (例えば N 個あるなら 1 から N まで)。 $|a_i\rangle, |b_i\rangle$ は観測量に対応するものとしているので、 $\langle b_j | a_i \rangle$ は変換関数 (transformation function) になります。変換関数にさらに完全性を挟めば

$$\langle b_j | a_i \rangle = \sum_k \langle b_j | c_k \rangle \langle c_k | a_i \rangle$$

という形に出来ます。

変換関数に対して変分 δ を作用させることを考えます。 δ は変換関数 $\langle a_i | b_j \rangle$ に対して

$$\delta \langle a_i | b_j \rangle = \delta \left(\sum_k \langle a | c_k \rangle \langle c_k | b \rangle \right) = \sum_k \delta(\langle a | c_k \rangle) \langle c_k | b \rangle + \sum_k \langle a | c_k \rangle \delta(\langle c_k | b \rangle)$$

$$\delta \langle a_i | b_j \rangle^* = \delta \langle b_j | a_i \rangle$$

と作用させます。 $\langle a_i | a_j \rangle$ は δ_{ij} なので $\delta \langle a_i | a_j \rangle = 0$ とします。さらに、変分に対応する演算子 W も作り

$$\delta \langle a_i | b_j \rangle = i \langle a_i | \delta W_{ab} | b_j \rangle$$

と定義します。 δW_{ab} は W_{ab} に δ を作用させたもので、 i は後で示しますが、 δW_{ab} をエルミート演算子にするために付けています。 δW_{ab} は a, b の状態に対する変分の意味で使うので、 a_i, b_j での添え字 i, j とは無関係とします。例えば

$$\delta \langle a_i | a_j \rangle = i \langle a_i | \delta W_{aa} | a_j \rangle$$

とするということです。この場合、 $\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$ から $\delta \langle a_i | a_j \rangle = 0$ とし、 $\delta W_{aa} = 0$ となります。特に混乱は起きないので、ここから $\langle a_i | b_j \rangle$ は $\langle a | b \rangle$ と書いていきます。

δW がエルミート演算子であることを示します。 $\delta \langle a | b \rangle$ は

$$\begin{aligned} \delta \langle a | b \rangle &= \sum_k \delta(\langle a | c_k \rangle) \langle c_k | b \rangle + \sum_k \langle a | c_k \rangle \delta(\langle c_k | b \rangle) \\ &= i \sum_k \langle a | \delta W_{ac} | c_k \rangle \langle c_k | b \rangle + i \sum_k \langle a | c_k \rangle \langle c_k | \delta W_{cb} | b \rangle \end{aligned}$$

$\delta W_{ac}, \delta W_{cb}$ は $|c_k\rangle$ の完全性の和とは無関係に定義しているので

$$\delta \langle a | b \rangle = i \langle a | \delta W_{ac} | b \rangle + i \langle a | \delta W_{cb} | b \rangle = i \langle a | (\delta W_{ac} + \delta W_{cb}) | b \rangle$$

これから

$$\delta W_{ab} = \delta W_{ac} + \delta W_{cb}$$

これに $\delta W_{aa} = 0$ を使えば

$$\delta W_{aa} = \delta W_{ac} + \delta W_{ca} = 0$$

なので

$$\delta W_{ac} = -\delta W_{ca}$$

となり、 δW_{ac} は添え字に対して反対称です。

次にエルミート共役演算子の定義

$$\langle \psi | O^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | O | \psi \rangle^*$$

から、 δW_{ab} のエルミート共役を見てみると

$$\begin{aligned} \delta \langle b | a \rangle &= \delta \langle a | b \rangle^* \\ i \langle b | \delta W_{ba} | a \rangle &= -i \langle a | \delta W_{ab} | b \rangle^* \\ \langle b | \delta W_{ba} | a \rangle &= -\langle b | \delta W_{ab}^\dagger | a \rangle \end{aligned}$$

これに $\delta W_{ba} = -\delta W_{ab}$ を使うことで

$$\delta W_{ab} = \delta W_{ab}^\dagger$$

となるので、 δW_{ab} はエルミート演算子です。

次に状態に時間依存を与えます。なので、変換関数を

$$\langle a; t_2 | b, t_1 \rangle$$

とします。最後に示しますが、この状態はハイゼンベルク描像に対応します (ハイゼンベルク描像では時間依存性は演算子にあるので、状態に時間依存性はないですが、時間を入れることができます。「経路積分」参照)。この δ による変換は

$$\delta \langle a; t_2 | b; t_1 \rangle = i \langle a; t_2 | \delta W_{21} | b; t_1 \rangle \quad (6)$$

とします。 δW の添え字には時間 t の区別の添え字を使っています。そして、この式において、 W をラグランジアン L を演算子化したものによって

$$W_{21} = \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt L \quad (L = L^\dagger)$$

$$\delta \langle a; t_2 | b; t_1 \rangle = i \langle a; t_2 | \delta W_{21} | b; t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a; t_2 | \delta \int_{t_1}^{t_2} dt L | b; t_1 \rangle \quad (7)$$

と仮定したものをシュウィンガーの作用原理 (Schwinger's action principle) や quantum action principle と言います。 \hbar は次元合わせのために入れています (Ldt と \hbar は エネルギー \times 時間の次元、 W は無次元)。 \hbar をかけて $\hbar W$ を W と定義すれば、 W は作用の次元を持ちます。

シュウィンガーの作用原理を仮定することでどうなるのかを見ていきます。まず、 W_{21} の定義は演算子でなければ、解析力学での作用の形そのものなので、最初に見た古典的な場合と同様のことを行います。

ラグランジアン演算子を通常のラグランジアンから

$$L(q, \dot{q}, t) = p\dot{q} - H(q, p, t)$$

q は位置演算子、 p は運動量演算子、 H はハミルトニアン演算子です。しかし、これでは

$$(p\dot{q})^\dagger = \dot{q}p$$

なので (q, p はエルミート演算子で、 $[q, p] \neq 0$)、このままでは L はエルミート演算子ではないです (W はエルミート演算子なので L もエルミート演算子)。このため、エルミート演算子になるように

$$L(q, \dot{q}, t) = \frac{1}{2}(p\dot{q} + \dot{q}p) - H(q, p, t)$$

とし

$$W_{21} = \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{1}{2}(p\dot{q} + \dot{q}p) - H(q, p, t) \right)$$

この q, p, t の変分を考えます。変分を $\delta q, \delta p, \delta t$ とし、それによる変化分を δW_{21} とします。 t を $t = t(\tau)$ と変換し、

$$W_{21} = \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \left(\frac{1}{2} \left(p' \frac{dq'}{d\tau} + \frac{dq'}{d\tau} p' \right) - H'(q', p', \tau) \right) \frac{dt}{d\tau}$$

$q(t) = q'(\tau)$, $p(t) = p'(\tau)$, $H(q, p, t) = H'(q', p', \tau)$ としています。よって、 δW_{21} は

$$\delta W_{21} = \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \left(\frac{1}{2} \left(\delta p' \frac{dq'}{d\tau} + p' \delta \frac{dq'}{d\tau} + \delta \frac{dq'}{d\tau} p' + \frac{dq'}{d\tau} \delta p' \right) - \delta H' \frac{dt}{d\tau} - H' \delta \frac{dt}{d\tau} \right)$$

演算子であるために、 q, p の位置は自由に動かさないことに注意してください。括弧内は

$$\begin{aligned} & \delta p' \frac{dq'}{d\tau} + p' \delta \frac{dq'}{d\tau} + \delta \frac{dq'}{d\tau} p' + \frac{dq'}{d\tau} \delta p' \\ &= \delta p' \frac{dq'}{d\tau} + \frac{d}{d\tau} (p' \delta q') - \frac{dp'}{d\tau} \delta q' + \frac{d}{d\tau} (\delta q' p') - \delta q' \frac{dp'}{d\tau} + \frac{dq'}{d\tau} \delta p' \\ &= \delta p' \frac{dq'}{d\tau} + \frac{dq'}{d\tau} \delta p' - \frac{dp'}{d\tau} \delta q' - \delta q' \frac{dp'}{d\tau} + \frac{d}{d\tau} (p' \delta q') + \frac{d}{d\tau} (\delta q' p') \end{aligned}$$

と変形し、残っている項も同様に

$$-(\delta H' \frac{dt}{d\tau} + H' \delta \frac{dt}{d\tau}) = -(\delta H' \frac{dt}{d\tau} + \frac{d}{d\tau} (H' \delta t) - \frac{dH'}{d\tau} \delta t)$$

と変形します。これらによって

$$\begin{aligned} \delta W_{21} &= \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \left(\frac{1}{2} \left(\delta p' \frac{dq'}{d\tau} + \frac{dq'}{d\tau} \delta p' - \frac{dp'}{d\tau} \delta q' - \delta q' \frac{dp'}{d\tau} \right) - \delta H' \frac{dt}{d\tau} + \frac{dH'}{d\tau} \delta t \right) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \frac{d}{d\tau} \left(\frac{1}{2} (p' \delta q' + \delta q' p') - H' \delta t \right) \end{aligned}$$

ここで1つ要求を入れます。それは、 q, p の変分 $\delta q, \delta p$ は他の演算子と交換できるという要求です (δt はもともと演算子ではないので交換する)。

この要求によって

$$\begin{aligned} \delta p' \frac{dq'}{d\tau} + \frac{dq'}{d\tau} \delta p' - \frac{dp'}{d\tau} \delta q' - \delta q' \frac{dp'}{d\tau} &= \frac{dq'}{d\tau} \delta p' + \frac{dq'}{d\tau} \delta p' - \frac{dp'}{d\tau} \delta q' - \frac{dp'}{d\tau} \delta q' = 2 \frac{dq'}{d\tau} \delta p' - 2 \frac{dp'}{d\tau} \delta q' \\ p' \delta q' + \delta q' p' &= 2 p' \delta q' \end{aligned}$$

となります。 τ を t に戻して

$$\begin{aligned} \delta W_{21} &= \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d\tau}{dt} \left(\frac{dq}{dt} \delta p - \frac{dp}{dt} \delta q - \delta H \frac{dt}{d\tau} + \frac{dH}{d\tau} \delta t + \frac{d}{d\tau} (p \delta q - H \delta t) \right) \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{dq}{dt} \delta p - \frac{dp}{dt} \delta q - \delta H + \frac{dH}{dt} \delta t \right) + \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} (p \delta q - H \delta t) \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{dq}{dt} \delta p - \frac{dp}{dt} \delta q - \delta H + \frac{dH}{dt} \delta t \right) + \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} G \quad (G = p \delta q - H \delta t) \end{aligned}$$

これは (1) と同じなので、

$$\delta W_{21} = \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\delta p \left(\frac{dq}{dt} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) - \left(\frac{dp}{dt} - \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q - \left(\frac{\partial H}{\partial t} - \frac{dH}{dt} \right) \delta t \right) + \frac{1}{\hbar} G(t_2) - \frac{1}{\hbar} G(t_1)$$

このように (2) と同じ形になります。これに対して (3) と同じように

$$\hbar \delta W_{21} = G(t_2) - G(t_1) \quad (8)$$

を要求すれば

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{dH}{dt}$$

となり、正準方程式とハミルトニアン の時間微分の式となります。ただし、 q, p, H は演算子です。というわけで、 q, p, H が従う運動方程式として正準方程式が出てきます。このように、シュウィンガーの作用原理から古典的な作用の変分 δW と同じ形のもが出てきます。

ちなみに、シュウィンガーの作用原理ではラグランジアン演算子の変数全てに対して変分を取ります。他にも外力となる関数（電磁場とか）が入ればそれらに対しても変分を行うこととなります。

ここまでの話では古典論での作用から出てくる状況が量子論で再現されているので、次に G と無限小変換の関係を見ます。まず、無限小変換をユニタリー演算子 U によって

$$U = 1 - \frac{i}{\hbar} K, \quad U^\dagger = U^{-1} = 1 + \frac{i}{\hbar} K$$

とし、 K はエルミート演算子で微量とします。 UU^\dagger を計算すれば K の 1 次までで $UU^\dagger = 1$ になっているのはすぐに分かります（他にエルミート演算子である理由は場の量子論の「 $U(N)$ と $SU(N)$ 」参照）。状態と演算子のユニタリー変換は

$$|a'\rangle = U|a\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} K\right)|a\rangle$$

$$A' = UAU^{-1} = \left(1 - \frac{i}{\hbar} K\right)A\left(1 + \frac{i}{\hbar} K\right) = \left(A - \frac{i}{\hbar} KA\right)\left(1 + \frac{i}{\hbar} K\right) \simeq A - \frac{i}{\hbar} KA + \frac{i}{\hbar} AK = A + \frac{i}{\hbar} [A, K]$$

なので、無限小変換による変化分は

$$\delta|a\rangle = -\frac{i}{\hbar} K|a\rangle \quad (|a'\rangle = |a\rangle + \delta|a\rangle)$$

$$\delta A = -\frac{i}{\hbar} [A, K] \quad (A' = A + \delta A)$$

と書けます。符号の注意ですが、 $A' = A + \delta A$ としているので、 $A' = A(x \pm \delta x)$ に対して

$$A(x + \delta x) - A(x) = \delta A \Rightarrow \frac{dA}{dx} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{\delta A}{\delta x}$$

$$A(x - \delta x) - A(x) = -\delta A \Rightarrow \frac{dA}{dx} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{\delta A}{\delta x}$$

となっています。

無限小変換を変換関数 $\langle a; t_2 | b; t_1 \rangle$ に作用させたときの变化は

$$\delta \langle a; t_2 | b; t_1 \rangle = (\langle a; t_2 | \frac{i}{\hbar} K(t_2) | b; t_1 \rangle - \langle a; t_2 | \frac{i}{\hbar} K(t_1) | b; t_1 \rangle) = \frac{i}{\hbar} \langle a; t_2 | (K(t_2) - K(t_1)) | b; t_1 \rangle$$

となっており ($K(t_{1,2})$ は $t_{1,2}$ での演算子に依存するという意味)、(7) から

$$\hbar \delta W_{21} = K(t_2) - K(t_1)$$

であることとなります。そして、これは (8) と同じ形です。

このため、 K を G から

$$G_q = p \delta q, \quad G_t = -H \delta t \quad (p^\dagger = p, \quad H^\dagger = H)$$

と選ぶことにすれば、 $\delta_q A, \delta_t A$ は

$$\begin{aligned} \delta_q A &= -\frac{i}{\hbar} [A, G_q] = -\frac{i}{\hbar} [A, p \delta q] = -\frac{i}{\hbar} [A, p] \delta q \\ \delta_t A &= -\frac{i}{\hbar} [A, G_t] = -\frac{i}{\hbar} [A, -H \delta t] = \frac{i}{\hbar} [A, H] \delta t \end{aligned}$$

G は古典的な場合での $G^{(c)}$ を演算子にしたものと同じなので、これらと古典的な変換 (4),(5)

$$\begin{aligned} \delta_q^{(c)} F &= \{F, p^{(c)}\}_{PB} \delta q \\ \delta_t^{(c)} F &= \{F, H^{(c)}\}_{PB} \delta t + \frac{\partial F}{\partial t} \delta t \end{aligned}$$

を比較します (c は古典的であることを表しています)。そうすると、交換関係とポアソン括弧を対応させれば、 $\delta_q A$ は位置、 $\delta_t A$ は時間の微小な変化を与えていると考えられます。位置の場合では今の演算子の变化の定義 $A' = A - \delta A$ から $q' = q - \delta q$ です。時間は t から $t + \delta t$ とします。

この置き換えによって、正準交換関係とハイゼンベルク方程式が出てきます。 $\delta_q A$ から、 $\delta_q q$ は δq なので

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} [q, p] \delta q &= \delta q \\ [q, p] &= i\hbar \end{aligned}$$

となり、正準交換関係となります ($\delta_q p \rightarrow [p, p] = 0$)。よって、シュウィンガーの作用原理の仮定は正準交換関係を導きます (位置と運動量のポアソン括弧を交換関係に置き換える正準量子化では正準交換関係を仮定する)。

$\delta_t A$ は時間変化と考えると、時間微分に注意する必要があります。なぜなら、今の変換は演算子に対して行っているものなので、演算子でない時間には作用していないからです ($U^{-1} t U = t U^{-1} U = t$)。このため、 A が陽に時間依存しているときの時間変化

$$\frac{\partial A}{\partial t} \delta t$$

が落ちていきます。言い換えれば

$$\delta f = f(g(t), t) - f(g(t + \delta t), t + \delta t)$$

でなく

$$\delta_t f = f(g(t), t) - f(g(t + \delta t), t)$$

となっているということです。よって、微分で書くなら

$$\delta_t A = -\left(\frac{dA}{dt} - \frac{\partial A}{\partial t}\right)\delta t$$

として、偏微分を除く必要があります。
このことより、時間微分の形にすると

$$\begin{aligned}\delta_t A &= \frac{i}{\hbar}[A, H]\delta t \\ -\left(\frac{dA}{dt} - \frac{\partial A}{\partial t}\right)\delta t &= \frac{i}{\hbar}[A, H]\delta t \\ \frac{dA}{dt} &= -\frac{i}{\hbar}[A, H] + \frac{\partial A}{\partial t}\end{aligned}$$

となります。これを $A = q, p$ にすると $\partial q/\partial t = \partial p/\partial t = 0$ から

$$\frac{dq}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[q, H], \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[p, H]$$

となり、ハイゼンベルク方程式になります。また、 $\delta_q H$ を見てみると (q の変換は $q - \delta q$ とすることに注意)

$$\begin{aligned}\delta_q H &= -\frac{i}{\hbar}[H, p]\delta q \\ \frac{\delta H}{\delta q} &= -\frac{i}{\hbar}[H, p] \\ \frac{\partial H}{\partial q} &= -\frac{i}{\hbar}[H, p] \quad (\delta_q A = A(q) - A(q - \delta q) = \frac{\partial A}{\partial q}\delta q)\end{aligned}$$

となるので、演算子による正準方程式

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[p, H] = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

になります。 q の方程式は、 G_q でなく $G_p = -q\delta p$ を使うことで求められます。この変更はラグランジアンには df/dt の項をつけても正準方程式は不変であることを利用すれば出来ます。

このように、変分によって出てくるポアソン括弧と交換関係に対応させることはシュウィンガーの量子化と呼ばれます。もしくは、シュウィンガーの量子化は、シュウィンガーの作用原理を仮定することを指す場合もあります。

見てきたように、シュウィンガーの作用原理は正準量子化の結果を再現しています。なので、ここで扱っている拘束条件がない場合において、正準量子化と等価になっています。そして、拘束条件がある場合、ディラック括弧と交換関係の対応を取るディラックの量子化と、シュウィンガーの量子化は等価であることが示されています (例えば、「Equivalence between Schwinger and Dirac schemes of quantization」(hep-th/9702104))。

というわけで、シュウィンガーの作用原理は、古典的な作用における

$$\delta^{(c)} W^{(c)} = \delta^{(c)} \int_{t_1}^{t_2} dt L^{(c)} = G^{(c)}(t_2) - G^{(c)}(t_1)$$

と対応させるように、量子論において

$$\delta\langle a; t_2 | b; t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a; t_2 | \delta W_{21} | b; t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a; t_2 | \delta \int_{t_1}^{t_2} dt L | b; t_1 \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a; t_2 | (G(t_2) - G(t_1)) | b; t_1 \rangle$$

と仮定することです (見た目を分かりやすくするために δW_{21} を作用の次元にしています)。この仮定によって、正準交換関係と運動方程式が出てきます。

最後にラグランジアン演算子が出てくることを、シュレーディンガー方程式の仮定から簡単に見ておきます。時間発展はハミルトニアン演算子 H に従うとして、時間発展演算子は

$$U_t(t_2, t_1) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1)\right]$$

と与えます。ハイゼンベルク描像を使うことにし、状態 $|a; t\rangle$ をハイゼンベルク描像とすれば、 $|a; t\rangle$ は

$$|a; t\rangle = U_t^\dagger(t) |a\rangle$$

となります (「経路積分」参照)。 $|a\rangle$ はどちらの描像でも同じですが、 $|a; t\rangle$ はシュレーディンガー描像とは異なっています。 Δt を微小とすれば

$$|a; t + \Delta t\rangle = \left(1 + \frac{i}{\hbar} H \Delta t\right) |a; t\rangle$$

となります。これから変換関数は

$$\langle a; t + \Delta t | b; t \rangle = \langle a; t | \left(1 - \frac{i}{\hbar} H \Delta t\right) | b; t \rangle$$

となり、これにハミルトニアン演算子の変化を起こす変換 δ_h を行い

$$\delta_h \langle a; t + \Delta t | b; t \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle a; t | \delta_h (H \Delta t) | b; t \rangle \simeq -\frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | \Delta t \delta_h H | b; t \rangle$$

$(\Delta t)^2$ を無視することで最右辺にしています。

次に無限小変換を考えます。これはすでに見たように、ユニタリー演算子 U によって

$$|a'; t\rangle = U |a; t\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} K\right) |a; t\rangle$$

$$\delta |a; t\rangle = -\frac{i}{\hbar} K |a; t\rangle$$

と与えられます。位置の平行移動を行うなら、正準交換関係 $[q, p] = i\hbar$ が成立しているとして、 K は運動量演算子 p を使って $p\delta q$ にすればいいので

$$\delta_q |a; t\rangle = -\frac{i}{\hbar} p \delta q |a; t\rangle, \quad \delta_q \langle a; t| = \frac{i}{\hbar} p \delta q \langle a; t|$$

となります。

そうすると、変換関数は

$$\delta_q \langle a; t + \Delta t | b; t \rangle = \langle a; t + \Delta t | \frac{i}{\hbar} p(t + \Delta t) \delta q(t + \Delta t) | b; t \rangle + \langle a; t + \Delta t | \left(-\frac{i}{\hbar} p(t) \delta q(t)\right) | b; t \rangle$$

第一項は

$$p(t + \Delta t)\delta q(t + \Delta t) = \left(p(t) + \frac{dp}{dt}\Delta t\right)\delta q(t + \Delta t) \simeq p(t)\delta q(t + \Delta t)$$

となるので

$$\begin{aligned}\delta_q \langle a; t + \Delta t | b; t \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | p(t) (\delta q(t + \Delta t) - \delta q(t)) | b; t \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | p(t) \delta (q(t + \Delta t) - q(t)) | b; t \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | p(t) \Delta t \delta \frac{dq(t)}{dt} | b; t \rangle\end{aligned}$$

ここで、 $\delta_{q+\dot{q}} = \delta_q + \delta_{\dot{q}}$ を見てみると

$$\delta_{q+\dot{q}} \langle a; t + \Delta t | b; t \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | p(t) \Delta t \delta_q \frac{dq(t)}{dt} | b; t \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | \Delta t \delta_{\dot{q}} H | b; t \rangle$$

ここで $\delta_{\dot{q}}$ も q だけに作用しているとし、 δ_q とすれば

$$\begin{aligned}\delta_{q+\dot{q}} \langle a; t + \Delta t | b; t \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | \delta_q \left(p(t) \frac{dq(t)}{dt}\right) \Delta t | b; t \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | \delta_q H \Delta t | b; t \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | \delta_q \left(p(t) \frac{dq(t)}{dt} - H\right) \Delta t | b; t \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle a; t + \Delta t | \delta_q L_q \Delta t | b; t \rangle\end{aligned}$$

となり、ラグランジアンが定義が出てきます。そして、これは (6) に対応しています。つまり、これを t_1 から t_2 の範囲まで繰り返し、 Δt の連続極限を取ったものが (7) です。

このようにして、変換関数においてラグランジアン演算子が現れます。このとき、時間発展はハミルトニアン演算子に従い、位置演算子と運動量演算子は正準交換関係を満たす、という仮定が使われています。これに対し、先にラグランジアン演算子を導入し (シュウインガーの作用原理を仮定)、その結果として時間発展と正準交換関係が出てきたのが最初に見た流れです (時間発展に対応するのはハイゼンベルク方程式)。