量子論

野村 清英

2021 年 5 月 24 日

はじめに

この講義録は、場の量子論を視野に入れた量子力学を目指している。

量子力学は、20 世紀初頭にプランクの黒体放射の説明で光量子仮説が導入された時に始まった。その後、水素原子のスペクトルを説明するため、電子の波動力学が作られシュレディンガー方程式の形で一応の完成を見た。しかし、当初の動機であった、「電磁場の量子化」はシュレディンガーの形式ではうまく表現出来ない。

場の量子論まで進んではじめて「粒子性と波動性の 2 重性」と言うことに筋の通った説明が出来るのであるが、従来の教授法では「量子力学」を波動力学の形式で教え、次の段階で「場の量子論」を正準量子化ないし経路積分で教えるやりかたであったため、発想の切替が 2 度手間になった。

場の量子論は、素粒子論ばかりでなく、現在ではレーザーや超伝導などを扱う際にも便利な方法である。従って場の量子論まで視野に入れた量子力学の教授法が望まれる。この講義録はそのようなことを目標とする。正準量子化を元にしたテキストはディラックのものが有名であるが、解析力学の知識を前提としていた。ここではそのやりかたをとらずに、(場の量子論で重要な概念である) 生成消滅演算子を、（反）交換関係とエルミート演算子を軸に導入し、場の量子化の雛型となること示す。次にエルミート演算子の交換関係を軸に正準量子化を導入するが、対応原理はむしろ副次的なものになるので、解析力学を前提としない。

このような方法のもう一つのメリットは、偏微分方程式を扱うテクニック（特殊関数）に習熟する必要がないことである。特殊関数そのものを学ぶことにはそれなりの意味があるが、量子力学の本質的要素とは言えない。

目 次

第0章　序説

0.1　基本的実験事実

量子力学は、次のような実験事実を説明するために建設された。

1. 波動の粒子性：

   プランク (Planck) による黒体放射の分析 (1900) から、

   $$E = n\hbar\omega \tag{1}$$

   (E はエネルギー、ω は角周波数、n は 0 又は正の整数、$\hbar = h/2\pi$ で h はプランク定数)、つまり電磁場のエネルギーの量子化（光子）が起こることが示された。ここで $\hbar$ は作用の次元 ([質量] $\times$ [長さ]^2 $\times$ [時間]$^{-1}$ = [エネルギー] $\times$ [時間] = [長さ] $\times$ [運動量]) をもち、

   $$\hbar = 1.05457266(63) \times 10^{-34} J \cdot s \tag{2}$$

   である。光電効果からも電磁波のエネルギーの量子化 (Einstein, 1905) がでてくる。

   運動量についても、コンプトン (Compton) 効果 (1923) から、

   $$P = n\hbar k \tag{3}$$

   (P は運動量、k は波数) と、電磁場が粒子のようにふるまう。電磁場の粒子としての側面を光量子、または光子と呼ぼう。最近では、CCD などを使った実験でも電磁波の粒子性が見られる。

2. 粒子の波動性：

   逆に電子は波動としても振舞う。ド・ブロイ (de Broglie) 波 (1923) と、デヴィッソン・ガーマー (Davisson, Germer) の実験 (Ni 単結晶

表面の回折)(1927)、菊池の実験（雲母による回折）(1928)。これらから、運動量 p の電子は、

$$k(=\frac{2\pi}{\lambda})=\frac{p}{\hbar} \tag{4}$$

という波数 k (もしくは波長 λ) の波として振舞う。最近では電子線ホログラフィー(外村)。

このことは、水素原子のスペクトル構造とも関係する。

中性子回折の実験でも粒子の波動性が示されている。特に、中性子線回折計 (Bonse, 1974) で、粒子の波動性のみならず、スピンの回転対称性、スピノール、量子力学と（一般相対性理論の）等価原理などが調べられている。

3. 粒子の生成消滅：

   電磁場を粒子（光子）として扱う時には、その粒子の生成･消滅を扱うことが必要になる。電子についても、陽電子の発見(Anderson,1932)とともに、粒子・反粒子の生成・消滅の取扱が必要になった。

4. 排他律（フェルミオン）：

   原子の周期率表を説明するにはパウリ (Pauli) の排他律 （あるエネルギー準位に（スピン自由度まで含め）電子が 1 つしか入れない）が必要である。金属電子論（自由フェルミ気体）にも重要である。

5. 不確定性関係:

   座標と運動量など複数の物理量を測定する際に、量子効果で測定精度に限界がある。ハイゼンベルク (Heisenberg) の不確定性関係。

$$\Delta p\Delta q\geq\hbar,\ \Delta E\Delta t\geq\hbar \tag{5}$$

6. 角運動量の量子化：

   軌道角運動量の量子化に関してはゼーマン (Zeeman) 効果 (1896)(原子のスペクトルの磁場中での分裂)、

   スピン角運動量の量子化に関してはシュテルン・ゲルラッハ (Stern, Gerlach) の実験 (1922)。

0.2　応用、発展

1. 素粒子物理学への場の量子論。
2. 素励起: 物性物理での様々な素励起 (フォノン、マグノン、ホール、プラズモン、エキシトン など) による多彩な現象の説明。
3. コヒーレント状態： 量子論はミクロな現象ばかりでなく、マクロにも観測される。例として、超伝導やレーザーでは巨視的に位相の揃ったコヒーレント状態が現れる。
4. NMR,MRI: 角運動量の量子化を利用した計測法。

と言ったものがある。

0.3　粒子性と波動性

「粒子性と波動性の 2 重性」を表現するため、
観測過程 $\leftrightarrow$ 演算子
物理状態 $\leftrightarrow$ 状態ベクトル。
と対応させ、演算子と状態ベクトルの数学を調べ、以上の実験事実を説明しよう。特に、重要なのはエルミート演算子で、期待値が実数であるので、物理量と結びつけられる。

次の章で、量子論の数学的背景となる、線形空間と演算子について議論する。第 2 章で最も単純な交換関係（反交換関係）から生成消滅演算子を導入し個数演算子の性質を調べる。さらに残った位相の自由度に対して時間発展と空間変化、つまり波動性を持たせる。こうすることで「粒子性と波動性の 2 重性」にたいし、自然な表現がなされる。

第 3 章では量子論と古典力学との関連づけを、観測量の交換関係と古典解析力学のポアソン括弧との対応で行なう。正準交換関係不変にする自由度から、平行移動を導入し、これからド・ブロイ波が付随して導出される。

先の章では、コヒーレント状態、角運動量など扱うが、いずれも生成消滅演算子を使い表現することが出来る。

第1章　数学的背景

1.1　線形空間

量子力学の数学的基礎は、線形代数を拡張したものであるが、必ずしも有限次元ではないので注意する必要がある。以下の説明は抽象的な形をとっているが、有限次元のベクトル、行列の場合にも、フーリエ級数のような無限個の次元の場合（この場合、例えば微分操作が演算子として扱える）にも同じく当てはまる。

1.1.1　ベクトル空間、ケットベクトル

ディラック (P. A. M. Dirac) に従い、ケットベクトルもしくはケットと言う記法を導入し、$|\rangle$ と言う記法で表す。複数のケットベクトルを区別するため、$|a\rangle$ のように記号を入れて区別しよう。

以下の性質を持つ集合 V をケットベクトル空間、V の要素をケットベクトルと呼ぶ。

1. 任意の要素 $|a\rangle, |b\rangle \in V$ に対して、その和 $|a\rangle + |b\rangle \in V$ が定まり、以下の性質を持つものとする。

   (a) 結合則
$$|a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle) = (|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle \tag{1.1}$$

   (b) 交換則
$$|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle \tag{1.2}$$

   (c) 零ケットがただ一つ存在し、任意の $|a\rangle \in V$ にたいし
$$0 + |a\rangle = |a\rangle + 0 = |a\rangle \tag{1.3}$$

2. 任意の $|a\rangle \in V$ と $\lambda \in C$ (C は複素数体) にたいして、$\lambda|a\rangle \in V$ で表されるものが定まり、以下の性質持つもとのする。

$$\lambda(|a\rangle + |b\rangle) = \lambda|a\rangle + \lambda|b\rangle \tag{1.4a}$$

$$(\lambda + \mu)|a\rangle = \lambda|a\rangle + \mu|a\rangle \tag{1.4b}$$

$$(\lambda\mu)|a\rangle = \lambda(\mu|a\rangle) \tag{1.4c}$$

1.1.2　双対空間（ブラ空間）と内積

ここで、内積を定義するため、ケットベクトル空間 V の双対空間（ブラベクトル空間）V^* を導入する。また、その要素をブラベクトル $\langle a| \in V^*$ と呼ぶ。ケットベクトルとブラベクトルには 1 対 1 の対応がある。

$$|a\rangle \leftrightarrow \langle a| \tag{1.5a}$$

$$\lambda|a\rangle \leftrightarrow \lambda^*\langle a| \tag{1.5b}$$

2 つのケットベクトル $|a\rangle, |b\rangle \in V$ に対して、以下の性質を持つ複素数を対応させて内積を定義し、これを $\langle a|b\rangle$ と表そう。

$$\langle a|(|b\rangle + |c\rangle) = \langle a|b\rangle + \langle a|c\rangle \tag{1.6a}$$

$$\langle a|(\lambda|b\rangle) = \lambda(\langle a|b\rangle) \tag{1.6b}$$

$$\langle a|b\rangle = (\langle b|a\rangle)^* \tag{1.6c}$$

$$\langle a|a\rangle \geq 0, \text{等号は } |a\rangle = 0 \text{ に限る。} \tag{1.6d}$$

最後の条件は正値計量性であり、確率解釈にとって重要である [1]。

正規直交系

$|a\rangle \neq 0, |b\rangle \neq 0 \in V$ に対して $\langle a|b\rangle = 0$ の時、$|a\rangle, |b\rangle$ は直交すると言う。

ベクトル $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \cdots \in V$ が互いに直交し、かつどれも大きさ 1 の時、つまり、

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{i,j} \tag{1.7}$$

($\delta_{i,j}$ はクロネッカーの記号で、$i \neq j$ の時 0、$i = j$ の時 1）のとき、正規直交系をなすと言う。

[1] この条件を満たさない不定計量もある。

完全性関係

もしも任意の $|\chi\rangle \in V$ が、ある V の正規直交系で次のように展開できる場合

$$|\chi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \tag{1.8}$$

この正規直交系は完全系をなす、もしくは完全正規直交系と呼ぶ。

この関係式に左から $\langle u_j|$ をかけると、

$$\langle u_j|\chi\rangle = \sum_i \delta_{i,j} c_i = c_j \tag{1.9}$$

なので、

$$|\chi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\chi\rangle \tag{1.10}$$

であり、これから、完全性関係は

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| \quad = \quad \hat{I} \tag{1.11}$$

とも表される。ここで、次の性質を持つ恒等演算子 $\hat{I}$

$$\hat{I}|a\rangle = |a\rangle \tag{1.12}$$

を導入した。

正規直交系でなくとも、上記の関係を満たせば完全性を持つと言う。

なお、有限次元のベクトル空間であれば、完全正規直交系は必ず存在するが、無限次元のベクトル空間でもヒルベルト (Hilbert) 空間ならば、(可分性より）完全正規直交系が存在し、(完備性より）展開 (1.10) が収束する。今後、完全正規直交系が存在するベクトル空間を扱うものとする。

1.1.3　演算子

演算子は、任意のケット（ブラ）ベクトルを別のケット（ブラ）ベクトルへ変換させる。

$$|a\rangle \in V \to \hat{X}|a\rangle \in V \tag{1.13a}$$

$$\langle b| \in V^* \to \langle b|\hat{X} \in V^* \tag{1.13b}$$

1. 任意の $|a\rangle \in V$ に対し、

$$\hat{X}|a\rangle = \hat{Y}|a\rangle \tag{1.14}$$

が成り立つ時、$\hat{X} = \hat{Y}$ とする。

2. 任意の $|a\rangle \in V$ に対し、

$$\hat{I}|a\rangle = |a\rangle \tag{1.15}$$

が成り立つ時、$\hat{I}$ を恒等演算子と呼ぶ。恒等演算子を省略して 1 と表すこともある。

3. 任意の $|a\rangle, |b\rangle \in V$ と $\lambda \in C$ にたいし、

$$\hat{X}(|a\rangle + |b\rangle) = \hat{X}|a\rangle + \hat{X}|b\rangle,\ \hat{X}(\lambda|a\rangle) = \lambda(\hat{X}|a\rangle) \tag{1.16}$$

が成り立つ時、$\hat{X}$ を線形演算子と呼ぶ。

4. 演算子の和、スカラー倍を

$$(\hat{X} + \hat{Y})|a\rangle = \hat{X}|a\rangle + \hat{Y}|a\rangle,\ (\lambda\hat{X})|a\rangle = \lambda(\hat{X}|a\rangle) \tag{1.17}$$

で定義する。

(a) 和の結合則

$$\hat{X} + (\hat{Y} + \hat{Z}) = (\hat{X} + \hat{Y}) + \hat{Z} \tag{1.18}$$

(b) 和の交換則

$$\hat{X} + \hat{Y} = \hat{Y} + \hat{X} \tag{1.19}$$

5. 演算子の積を

$$(\hat{X}\hat{Y})|a\rangle = \hat{X}(\hat{Y}|a\rangle) \tag{1.20}$$

で定義する。

(a) 結合法則

$$(\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} = \hat{X}(\hat{Y}\hat{Z}) \tag{1.21}$$

(b) 分配法則

$$(\hat{X} + \hat{Y})\hat{Z} = \hat{X}\hat{Z} + \hat{Y}\hat{Z} \tag{1.22}$$

(c) 交換子

積の交換関係は一般には成り立たない。これに対応し、交換子

$$[\hat{X}, \hat{Y}] \equiv \hat{X}\hat{Y} - \hat{Y}\hat{X} \tag{1.23}$$

と言う演算子を導入する。交換子が零の時、2 つの演算子は交換するという。演算子の冪乗と元の演算子は交換する。

$$[\hat{X}, \hat{X}^k] = 0 \tag{1.24}$$

(d) 逆演算子

演算子 $\hat{X}$ に対し、

$$\hat{X}\hat{Y} = \hat{Y}\hat{X} = \hat{I} \tag{1.25}$$

となるような $\hat{Y}$ が存在する時、$\hat{Y}$ を $\hat{X}$ の逆演算子と呼び、$\hat{Y} \equiv \hat{X}^{-1}$ と記すことにする。

(e)

$$(\hat{X}\hat{Y})^{-1} = \hat{Y}^{-1}\hat{X}^{-1} \tag{1.26}$$

6. 演算子のエルミート共役

任意の $|a\rangle, |b\rangle \in V$ に対し、

$$\langle a|\hat{X}^\dagger|b\rangle = (\langle b|\hat{X}|a\rangle)^* \tag{1.27}$$

を満たす演算子 $\hat{X}^\dagger$ を $\hat{X}$ のエルミート共役と言う。

(a) 定義から以下のことが成り立つ。

$$(\hat{X}^\dagger)^\dagger = \hat{X} \tag{1.28a}$$
$$(\lambda\hat{X})^\dagger = \lambda^*\hat{X}^\dagger \tag{1.28b}$$
$$(\hat{X} + \hat{Y})^\dagger = \hat{X}^\dagger + \hat{Y}^\dagger \tag{1.28c}$$
$$(\hat{X}\hat{Y})^\dagger = \hat{Y}^\dagger\hat{X}^\dagger \tag{1.28d}$$

(b) 演算子が自分自身のエルミート共役に等しい時、

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \tag{1.29}$$

自己エルミートもしくは単にエルミート演算子と呼ぶ。

(c) エルミート演算子同士の和は自己エルミートである。

$$(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}+\hat{B} \tag{1.30}$$

(d) エルミート演算子同士の積は一般には自己エルミートではない。

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B} \tag{1.31}$$

しかし、交換するものどうし $[\hat{A},\hat{B}]=0$ の積 $\hat{A}\hat{B}$ は自己エルミートである。特に 自己エルミート演算子の冪乗 $\hat{A}^k$ は常に自己エルミートである。

(e) 演算子が自分自身のエルミート共役と逆符号の時、

$$\hat{A} = -\hat{A}^\dagger \tag{1.32}$$

反エルミート演算子と呼ぶ。

7. ユニタリー演算子

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I} \tag{1.33}$$

が成り立つ時、$\hat{U}$ をユニタリー演算子と呼ぶ。

(a) ユニタリー演算子同士の和は一般にユニタリーではない。

(b) ユニタリー演算子同士の積はまたユニタリー演算子になる。

8. 相似変換、ユニタリー変換

逆演算子をもつ $\hat{P}$ を考える。このとき、任意の線形演算子 $\hat{X}$ に対して

$$\hat{A}' \equiv \hat{P}^{-1}\hat{X}\hat{P} \tag{1.34}$$

を $\hat{X}$ の相似変換 (similarity transformation) と呼ぶ。相似変換後の積、交換子は、

$$\hat{X}'\hat{Y}' = \hat{P}^{-1}\hat{X}\hat{P}\hat{P}^{-1}\hat{Y}\hat{P} = \hat{P}^{-1}\hat{X}\hat{Y}\hat{P} \tag{1.35a}$$

$$[\hat{X}',\hat{Y}'] = \hat{P}^{-1}[\hat{X},\hat{Y}]\hat{P} \tag{1.35b}$$

となる。

特にユニタリー演算子による相似変換はユニタリー変換[2]と呼ばれる。ユニタリー変換のエルミート共役は

$$(\hat{X}')^\dagger = (\hat{U}^\dagger \hat{X} \hat{U})^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{X}^\dagger \hat{U} \tag{1.36}$$

である。従って、エルミート（反エルミート、ユニタリー）演算子の性質はユニタリー変換後も保たれる。

9. 演算子の関数

(a) 関数 $f(x)$ が

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \tag{1.37}$$

と級数展開出来る場合、形式的に

$$f(\hat{X}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{X}^n \tag{1.38}$$

と演算子の関数が定義できる (なお、$\hat{X}^0 = 1$ と規約する)。ただし収束性などは吟味する必要がある。また、

$$[\hat{X}, f(\hat{X})] = 0$$

である。

(b) 演算子の関数 $f(\hat{X})$ の相似変換は

$$\hat{P}^{-1} f(\hat{X}) \hat{P} = f(\hat{P}^{-1} \hat{X} \hat{P}) \tag{1.39}$$

である。

(c) $f(x)$ が実関数であるならば (展開係数 c_n 実数)、エルミート演算子 $\hat{A}$ に対し、$f(\hat{A})$ もエルミート演算子である。

(d) エルミート演算子 $\hat{A}$ と実数 λ にたいし、

$$\exp(i\lambda\hat{A}) \tag{1.40}$$

はユニタリー演算子である。

[2]線形代数では、ユニタリー演算子のことをユニタリー変換と呼ぶ。混同しないように。

10. 射影演算子

以下の性質を持つ演算子

$$\hat{P}^2 = \hat{P}, \hat{P}^\dagger = \hat{P} \tag{1.41}$$

を射影演算子という。

$$\hat{P}^2 - \hat{P} = \hat{P}(\hat{P} - 1) = 0$$

より、射影演算子の固有値は 0 または 1 である。

$\hat{P}$ を射影演算子とする時、$\hat{Q} \equiv 1 - \hat{P}$ も射影演算子であり、$\hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0$ と互いに直交する。

射影演算子の例として、規格化された状態ベクトル $|u\rangle$ から作られる演算子

$$\hat{P} = |u\rangle\langle u| \tag{1.42}$$

がある。

特に、

$$tr(\hat{P}) = 1 \tag{1.43}$$

という性質を持つ射影演算子を素射影演算子と呼ぶことにする。

演算子の例

1. 恒等演算子は線形演算子である．また自己エルミートであるし，ユニタリーでもある．

2. $$|\alpha\rangle\langle\beta| \tag{1.44}$$

は線形演算子である．この演算子のエルミート共役は

$$(|\alpha\rangle\langle\beta|)^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha| \tag{1.45}$$

である．

演算子の微分

実変数 $t \in R$ に依存する演算子 $\hat{F}(t)$ を考える。この時、

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{\hat{F}(t+\Delta t) - \hat{F}(t)}{(t+\Delta t) - t} = \hat{A} \tag{1.46}$$

という演算子が存在する時、$\hat{F}(t)$ は微分可能である。このとき、$\hat{A}$ を t における微分係数と呼び、今後 $d\hat{F}(t)/dt \equiv \hat{A}$ と記す。$\hat{F}(t), \hat{G}(t)$ が微分可能な場合、以下の式が成立する。

$$\frac{d}{dt}(\hat{F}(t) + \hat{G}(t)) = \frac{d\hat{F}(t)}{dt} + \frac{d\hat{G}(t)}{dt} \tag{1.47}$$

$$\frac{d}{dt}(\hat{F}(t)\hat{G}(t)) = \frac{d\hat{F}(t)}{dt}\hat{G}(t) + \hat{F}(t)\frac{d\hat{G}(t)}{dt} \tag{1.48}$$

さらに、$\hat{F}(t)$ が微分可能で逆演算子が存在する時、

$$\frac{d}{dt}(\hat{F}^{-1}(t)) = -\hat{F}^{-1}(t)\frac{d\hat{F}(t)}{dt}\hat{F}^{-1}(t) \tag{1.49}$$

がなりたつ (問題参照)。

1 パラメータ部分群

ある演算子 $\hat{A}$ に対して、$\hat{F}(t) \equiv \exp(t\hat{A})$ とおくと、

$$\hat{F}(s+t) = \hat{F}(s)\hat{F}(t) \tag{1.50}$$

を満たす。このようなものを 1 パラメータ部分群とよぶ。1 パラメータ部分群の性質として、

$$\hat{F}(0) = 1 \tag{1.51}$$

$$\hat{F}^{-1}(t) = \hat{F}(-t) \tag{1.52}$$

がある。また。

$$\frac{d\hat{F}(t)}{dt} = \hat{F}(t)\hat{A} = \hat{A}\hat{F}(t) \tag{1.53}$$

である。

逆に、$\hat{F}(t)$ が t に関し連続で 1 パラメータ部分群ならば、それは微分可能で適当な演算子 $\hat{A}$ によって $\hat{F}(t) = \exp(t\hat{A})$ と表すことができる。しかも $\hat{A}$ は $\hat{F}(t)$ にたいし一意的に決まる。

1.1.4　固有値、固有状態、エルミート演算子

エルミート演算子の固有値と物理量との関連について重要な定理を示そう。

線形演算子 $\hat{X}$ に対して、零でないケット $|a\rangle$ が次の関係を満たす時、

$$\hat{X}|a\rangle = \lambda|a\rangle \tag{1.54}$$

λ を固有値、$|a\rangle$ を固有ケットと呼ぶ。

特にエルミート演算子の固有値について、次の定理が成り立つ。

定理 1.1 (エルミート演算子の固有値) エルミート演算子の固有値は実数である。また、異なる固有値に属する固有ケットは互いに直交する。

[証明] まず、エルミート演算子 $\hat{A}$ の固有値、固有状態を

$$\hat{A}|v_n\rangle = \lambda_n|v_n\rangle \tag{1.55}$$

と表す。$\hat{A}$ はエルミートであるから、

$$\langle v_m|\hat{A} = \lambda_m^*\langle v_m| \tag{1.56}$$

が成り立つ。*(1.55)* 式両辺に左から $\langle v_m|$ をかけ、*(1.56)* 式両辺に右から $|v_n\rangle$ をかけて差をとると、

$$(\lambda_n - \lambda_m^*)\langle v_m|v_n\rangle = 0 \tag{1.57}$$

が得られる。

$m = n$ の場合は、

$$\lambda_m = \lambda_m^*$$

が得られ、λ_m が実数と言うこと示された。

$m \neq n$ の場合で、かつ $\lambda_m \neq \lambda_n$ の場合は、

$$\langle v_m|v_n\rangle = 0$$

である。*[証明終]*

同じ固有値を持つ固有ケットが複数ある場合を縮退と呼ぶ。縮退している固有ケットの数が有限ならば互いに直交するように選び直すことができる（グラムシュミットの直交化）。

さらに、エルミート演算子の固有ケットを

$$|u_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle v_n|v_n\rangle}}|v_n\rangle \tag{1.58}$$

と規格化すると、$|u_n\rangle$ は正規直交系をなす。

$$\langle u_m|u_n\rangle = \delta_{m,n} \tag{1.59}$$

今後は、特に断りがなけれエルミート演算子の固有ケットとして、正規直交系をとることにする。

オブザーバブル（観測量）

エルミート演算子の固有ケットの系が、正規直交系になるばかりでなく、完全性を満たす場合、[3] このエルミート演算子を観測量またはオブザーバブル (observable) と呼ぶ。物理量と関係する演算子はオブザーバブルとその組合せだけである。あるオブザーバブル $\hat{A}$ は $\hat{A}$ の固有ケットを基底に選ぶと、

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i |u_i\rangle\langle u_i| \tag{1.60}$$

と展開できる。これを固有空間による直交分解又は対角化と呼ぶ。

オブザーバブルの関数

直交分解を使うと、演算子の関数が以下のように与えられる。

$$f(\hat{A}) = \sum_i f(\lambda_i)|u_i\rangle\langle u_i| \tag{1.61}$$

この定義は、$f(x)$ がうまく級数展開できない場合にも当てはまる。

同時対角化

2 つのエルミート演算子が交換する時 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$、同じ固有ケットを共有する。実際、$\hat{A}$ の固有ケット $\hat{A}|u_n\rangle = \lambda_n|u_n\rangle$ に対して、

$$\hat{A}(\hat{B}|u_n\rangle) = \hat{B}\hat{A}|u_n\rangle = \lambda_n(\hat{B}|u_n\rangle) \tag{1.62}$$

[3] 数学的には完全連続なエルミート演算子ならば、固有ベクトルは完全正規直交系をなす。

なので、固有値に縮退がない場合、$\hat{B}|u_n\rangle \propto |u_n\rangle$ である。縮退がある場合でも適切な直交系を選んで同じ固有ケットを共有するようにできる。

この時、$\hat{A}, \hat{B}$ は同時対角化可能であるという。

正規演算子の直交分解

以上のことを一般化しよう。

$$\hat{T}\hat{T}^\dagger - \hat{T}^\dagger\hat{T} = 0 \tag{1.63}$$

を満たす $\hat{T}$ を正規演算子と呼ぼう。例えば、エルミート演算子、反エルミート演算子、ユニタリー演算子は正規演算子である。

定理 1.2 正規演算子 $\hat{T}$ は、$\hat{T} = \hat{H}_1 + i\hat{H}_2$ と表すことができる。ここで $\hat{H}_1, \hat{H}_2$ はエルミート演算子で、$\hat{H}_1\hat{H}_2 = \hat{H}_2\hat{H}_1$ を満たしている。

[証明]

$\hat{T}$ を正規演算子とする。この時、

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{T} + \hat{T}^\dagger}{2},\ \hat{H}_2 = \frac{\hat{T} - \hat{T}^\dagger}{2i}, \tag{1.64}$$

と置くと、$\hat{H}_1, \hat{H}_2$ はエルミート演算子で、$\hat{H}_1\hat{H}_2 = \hat{H}_2\hat{H}_1$ を満たしている。

逆に演算子 $\hat{T}$ が $\hat{H}_1\hat{H}_2 = \hat{H}_2\hat{H}_1$ をみたすエルミート演算子により $\hat{T} = \hat{H}_1 + i\hat{H}_2$ と表されているとする。このとき、$\hat{T}^\dagger = \hat{H}_1 - i\hat{H}_2$ となる。従って、

$$\begin{aligned}
\hat{T}^\dagger\hat{T} &= (\hat{H}_1 - i\hat{H}_2)(\hat{H}_1 + i\hat{H}_2) \\
&= \hat{H}_1^2 + \hat{H}_2^2 + i(\hat{H}_1\hat{H}_2 - \hat{H}_2\hat{H}_1) \\
&= \hat{H}_1^2 + \hat{H}_2^2
\end{aligned} \tag{1.65}$$

同様な計算で $\hat{T}\hat{T}^\dagger = \hat{H}_1^2 + \hat{H}_2^2$ となるので、$\hat{T}^\dagger\hat{T} = \hat{T}\hat{T}^\dagger$

従って、正規演算子もエルミート演算子と同様な条件で対角化可能である。その場合、

$$\hat{T} = \sum_i \mu_i |u_i\rangle\langle u_i| \tag{1.66}$$

(μ は複素数) と表現できる。

1.1.5　直積

複数のベクトル空間の直積を定義しよう。

2つのベクトル空間 $V^{(1)}, V^{(2)}$ をとり、その任意のベクトル $|u^{(1)}\rangle, |v^{(1)}\rangle \in V^{(1)}, |u^{(2)}\rangle, |v^{(2)}\rangle \in V^{(2)}$ と複素数 $\lambda \in C$ にたいして、

$$(|u^{(1)}\rangle + |v^{(1)}\rangle) \otimes |u^{(2)}\rangle = |u^{(1)}\rangle \otimes |u^{(2)}\rangle + |v^{(1)}\rangle \otimes |u^{(2)}\rangle \tag{1.67a}$$

$$|u^{(1)}\rangle \otimes (|u^{(2)}\rangle + |v^{(2)}\rangle) = |u^{(1)}\rangle \otimes |u^{(2)}\rangle + |u^{(1)}\rangle \otimes |v^{(2)}\rangle \tag{1.67b}$$

$$\lambda(|u^{(1)}\rangle \otimes |u^{(2)}\rangle) = (\lambda|u^{(1)}\rangle) \otimes |u^{(2)}\rangle) = |u^{(1)}\rangle \otimes (\lambda|u^{(2)}\rangle) \tag{1.67c}$$

という性質を持つベクトルの直積を定義しよう。このとき、$|u^{(1)}\rangle \otimes |v^{(2)}\rangle$ 全体は、新たなベクトル空間を作る。さらに、内積を

$$(\langle u^{(1)}| \otimes \langle u^{(2)}|)(|v^{(1)}\rangle \otimes |v^{(2)}\rangle) \equiv \langle u^{(1)}|v^{(1)}\rangle\langle u^{(2)}|v^{(2)}\rangle \tag{1.68}$$

で定義したとき、これを、ベクトル空間の直積 $V^{(1)} \otimes V^{(2)}$ と呼ぼう。有限個のベクトル空間の直積も同様に定義できる。

次に演算子の直積を考える。$V^{(1)}$ にたいする演算子を $\hat{A}^{(1)}, \hat{B}^{(1)}, \cdots$ $V^{(2)}$ にたいする演算子を $\hat{A}^{(2)}, \hat{B}^{(2)}, \cdots$ とするとき、任意の $u^{(1)}, v^{(1)} \in V^{(1)}, u^{(2)}, v^{(2)} \in V^{(2)}$ に対して

$$\hat{A}^{(1)}|u^{(1)}\rangle \otimes \hat{B}^{(2)}|v^{(2)}\rangle \in V^{(1)} \otimes V^{(2)} \tag{1.69}$$

であるので、$V^{(1)} \otimes V^{(2)}$ に対する演算子の直積 $\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)}$ を

$$(\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)})(|u^{(1)}\rangle \otimes |v^{(2)}\rangle) = \hat{A}^{(1)}|u^{(1)}\rangle \otimes \hat{B}^{(2)}|v^{(2)}\rangle \tag{1.70}$$

として定義できる。演算子の直積は、以下の性質を持つ。

$$(\hat{A}^{(1)} + \hat{B}^{(1)}) \otimes \hat{C}^{(2)} = \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{C}^{(2)} + \hat{B}^{(1)} \otimes \hat{C}^{(2)} \tag{1.71a}$$

$$\hat{A}^{(1)} \otimes (\hat{B}^{(2)} + \hat{C}^{(2)}) = \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)} + \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{C}^{(2)} \tag{1.71b}$$

$$\lambda(\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)}) = (\lambda\hat{A}^{(1)}) \otimes \hat{B}^{(2)} = \hat{A}^{(1)} \otimes (\lambda\hat{B}^{(2)}) \tag{1.71c}$$

$$(\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)})(\hat{C}^{(1)} \otimes \hat{D}^{(2)}) = (\hat{A}^{(1)}\hat{C}^{(1)}) \otimes (\hat{B}^{(2)}\hat{D}^{(2)}) \tag{1.71d}$$

$$(\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{B}^{(2)})^\dagger = (\hat{A}^{(1)})^\dagger \otimes (\hat{B}^{(2)})^\dagger \tag{1.71e}$$

1.1.6　行列表現

完全系をとると、演算子を行列の形に表現できる。

$$\hat{X} = \sum_{i,j} |u_i\rangle\langle u_i|\hat{X}|u_j\rangle\langle u_j| \tag{1.72}$$

ここで、$\langle u_i|\hat{X}|u_j\rangle$ は正方行列の行列要素と見なすことが出来る。行列 $\{\langle u_i|\hat{X}|u_j\rangle\}$ を基底 $\{|u_j\rangle\}$ に対する行列表現と呼ぼう。

例えば、演算子の積を行列表現すると、

$$\langle u_i|\hat{X}\hat{Y}|u_k\rangle = \sum_j \langle u_i|\hat{X}|u_j\rangle\langle u_j|\hat{Y}|u_k\rangle \tag{1.73}$$

となり、行列の積の形に対応する。

また、エルミート共役は

$$\langle u_i|\hat{X}^\dagger|u_j\rangle = \langle u_j|\hat{X}|u_i\rangle^* \tag{1.74}$$

と、複素転置行列の形に表現される。

同じく、ケットは

$$|\chi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\chi\rangle, \tag{1.75}$$

と表されるので、展開係数 $\langle u_i|\chi\rangle$ をケットの表現、ブラについても同様に

$$\langle\chi| = \sum_i \langle\chi|u_i\rangle\langle u_i|, \tag{1.76}$$

で、展開係数 $\langle\chi|u_i\rangle$ をブラの表現と見なすことができる。

基底の変更

2つの完全正規直交系 $\{|u_i\rangle\}$,$\{|v_i\rangle\}$ を考える。

$$\hat{U} = \sum_i |v_i\rangle\langle u_i| \tag{1.77}$$

という演算子を定義すると、これは

$$\hat{U}|u_i\rangle = |v_i\rangle \tag{1.78}$$

と2つの完全正規直交系を結ぶ変換演算子である。

さらに

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \sum_i\sum_j |u_i\rangle\langle v_i|v_j\rangle\langle u_j| = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = 1 \tag{1.79}$$

が成り立つ。ここで規格直交性と完全性を使った。同様に $\hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$ なので、$\hat{U}$ はユニタリー演算子でもある。

Trace

演算子 $\hat{A}$ のトレース (trace) は完全系での対角成分の和

$$tr(\hat{A}) = \sum_i \langle u_i|\hat{A}|u_i\rangle \tag{1.80}$$

で定義される。有限次元行列に対してはトレースは常に定義されるが、無限次元行列ではトレースは収束する場合にのみ意味を持つ。トレースは、次に示すように特定の表現にはよらない。

$$\begin{aligned}\sum_i \langle u_i|\hat{A}|u_i\rangle &= \sum_{i,j} \langle u_i|v_j\rangle\langle v_j|\hat{A}|u_i\rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle v_j|\hat{A}|u_i\rangle\langle u_i|v_j\rangle \\ &= \sum_j \langle v_j|\hat{A}|v_j\rangle \end{aligned}\tag{1.81}$$

また、以下の式が成り立つ。

$$tr(\hat{A}\hat{B}) = tr(\hat{B}\hat{A}) \tag{1.82a}$$

$$tr(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}) = tr(\hat{A}) \tag{1.82b}$$

$$tr(|\alpha\rangle\langle\beta|) = \langle\beta|\alpha\rangle \tag{1.82c}$$

$$tr(\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{A}^{(2)}) = tr(\hat{A}^{(1)})tr(\hat{A}^{(2)}) \tag{1.82d}$$

対角化

オブザーバブルに対する固有値関係

$$\hat{A}|u_j\rangle = \lambda_j|u_j\rangle \tag{1.83}$$

を行列表現で表すと、

$$\langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle = \lambda_j\langle u_i|u_j\rangle = \lambda_j\delta_{ij} \tag{1.84}$$

つまり、対角行列の形になる。さらに別の完全正規直交系 $\{|v_j\rangle\}$ を持ってくると、

$$\sum_{lm} \langle u_i|v_l\rangle\langle v_l|\hat{A}|v_m\rangle\langle v_m|u_j\rangle = \lambda_j\delta_{ij} \tag{1.85}$$

であるが、これはユニタリー行列による対角化に対応する。

1.1.7　連続スペクトル

これまで簡単化のため、離散的固有値に対応する規格直交化された固有状態を扱った。この関係を固有値スペクトルが連続な場合に拡張しよう。具体的には和を積分で置き換え、クロネッカー記号 $\delta_{m,n}$ をディラックのデルタ関数 $\delta(x-y)$ で置き換える。

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \quad \leftrightarrow \quad \langle x|y\rangle = \delta(x-y) \tag{1.86}$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1} \quad \leftrightarrow \quad \int |x\rangle\langle x| dx = \hat{1} \tag{1.87}$$

デルタ関数については、付録参照。

1.2　エルミート演算子と交換、反交換関係

以上の数学的説明に付け加えて、交換関係と反交換関係を導入しよう。エルミート演算子の固有値が実数であることと、エルミート演算子の関数もエルミート演算子になっていることから、エルミート演算子は物理量と関係する重要性を持つであろう。

次に 2 つのエルミート演算子から別のエルミート演算子を作っていこう。和と差はエルミート演算子になる。ところがエルミート演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ の積は自己エルミートではない。

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B} \tag{1.88}$$

しかし、実数 α に対して、次の演算子は自己エルミートである。

$$e^{i\alpha}\hat{A}\hat{B} + e^{-i\alpha}\hat{B}\hat{A} \tag{1.89}$$

特に $\alpha = 0$ の時、反交換関係

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \tag{1.90}$$

$\alpha = \pi/2$ の時、交換関係に i をかけたもの

$$i[\hat{A}, \hat{B}] \equiv i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \tag{1.91}$$

に帰着する。これらから交換関係、反交換関係の重要性が理解できる。

また、任意の演算子の積は、

$$\hat{A}\hat{B} = (\{\hat{A}, \hat{B}\} + [\hat{A}, \hat{B}])/2 \tag{1.92}$$

と分解される。

1.2.1　交換関係

交換関係は、以下の関係式を満たす。

$$[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}] \tag{1.93a}$$
$$[a\hat{A},\hat{B}]=a[\hat{A},\hat{B}] \tag{1.93b}$$
$$[\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}] \tag{1.93c}$$
$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B} \tag{1.93d}$$
$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]=0 \tag{1.93e}$$

最後の式はヤコビ (Jacobi) の関係式と呼ばれる。古典論でのポアソン括弧式と対応がつく。

1.2.2　反交換関係

反交換関係は、以下の関係式を満たす。

$$\{\hat{A},\hat{B}+\hat{C}\}=\{\hat{A},\hat{B}\}+\{\hat{A},\hat{C}\} \tag{1.94a}$$
$$\{a\hat{A},\hat{B}\}=a\{\hat{A},\hat{B}\} \tag{1.94b}$$
$$\{\hat{A},\hat{B}\}=\{\hat{B},\hat{A}\} \tag{1.94c}$$

1.2.3　演算子の積の交換関係の公式

演算子の積の交換関係を計算する場合

$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B} \tag{1.95}$$

または

$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}\{\hat{B},\hat{C}\}-\{\hat{A},\hat{C}\}\hat{B} \tag{1.96}$$

の公式を用いると便利なことが多い.

1.3 物理的解釈

1.3.1 確率解釈

エルミート演算子の固有値が実数であることから、これは物理量と関係するだろう。しかし、演算子の中には、個数演算子、スピンのように離散的固有値を持つものがある。古典的に考えれば電磁波の強度は連続量であるが、量子力学的には光子の数は離散的に観測されることになる。両者はどう辻褄が合わせられるか？このために確率解釈を導入しよう。同じ物理状態を複数用意し、これらに対して観測を行なうことを考える。当初の観測では固有値のうちどれかに対応する観測結果になる。ただし、どの固有値になるかは確率的に決まる。一度ある固有値に対応する観測結果が得られると、その後同じ観測をしても同じ固有値が観測される。

数式を使って表すと、物理的測定に対応する演算子 $\hat{A}$ にエルミート性だけではなく、完全性も要求し、その固有値、固有ケットを

$$\hat{A}|u_j\rangle = \lambda_j|u_j\rangle \tag{1.97}$$

としよう。すると、任意の規格化された状態が（物理的測定の前には)、

$$|\chi\rangle = \sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\chi\rangle \tag{1.98}$$

と展開できる。測定後には、固有状態の1つ $|u_j\rangle$ に飛び移るが、

$$|\langle u_j|\chi\rangle|^2 \tag{1.99}$$

は固有状態に移る確率と解釈できる。実際、これは0又は正の値をとるし、

$$\sum_j |\langle u_j|\chi\rangle|^2 = \sum_j \langle\chi|u_j\rangle\langle u_j|\chi\rangle = \langle\chi|\chi\rangle = 1 \tag{1.100}$$

と全部の和が1である。

また、状態 $|\chi\rangle$ に対する物理量 $\hat{A}$ の期待値は

$$\langle\chi|\hat{A}|\chi\rangle \tag{1.101}$$

である。実際、$\langle u_m|\hat{A}|u_n\rangle = \lambda_n\delta_{m,n}$ を使うと、

$$\langle\chi|\hat{A}|\chi\rangle = \sum_{m,n}\langle\chi|u_m\rangle\langle u_m|\hat{A}|u_n\rangle\langle u_n|\chi\rangle = \sum_n \lambda_n|\langle\chi|u_n\rangle|^2 \tag{1.102}$$

となるので、平均的測定値と解釈できる。

純粋アンサンブル

今までの話は、1つの物理状態についてであったが、確率を実験的に決めるためにはすべて同一のケット $|\chi\rangle$ で特徴づけられる、複数の独立な物理状態の集合、すなわちアンサンブルに対して何回も同じ測定をすることを考えなければならない。このようなアンサンブルは純粋アンサンブルと呼ばれる。

1.3.2　不確定性関係

ある演算子に対し、平均測定量からのずれを考えよう。

$$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle\chi|\hat{A}|\chi\rangle \tag{1.103}$$

ここで、状態 $|\chi\rangle$ は測定する物理状態に対応する。$(\Delta\hat{A})^2$ の期待値は分散と呼ばれる。

$$\langle\chi|(\Delta\hat{A})^2|\chi\rangle = \langle\chi|\hat{A}^2|\chi\rangle - (\langle\chi|\hat{A}|\chi\rangle)^2 \tag{1.104}$$

定理 1.3 (不確定性関係) *2* つのエルミート演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ にたいし、次の関係が成り立つ。

$$\langle\chi|(\Delta\hat{A})^2|\chi\rangle\langle\chi|(\Delta\hat{B})^2|\chi\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle\chi|[\hat{A}, \hat{B}]|\chi\rangle|^2 \tag{1.105}$$

[証明] まず次のことを示そう。

補助定理 ***1.1*** シュワルツの不等式

$$|\langle a|b\rangle|^2 \leq \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle \tag{1.106}$$

[証明] 任意の複素数 λ に対して

$$(\langle a| + \lambda^*\langle b|)(|a\rangle + \lambda|b\rangle) \geq 0 \tag{1.107}$$

が成り立つ。ここで、$\lambda = -\langle b|a\rangle/\langle b|b\rangle$ とすると、

$$\langle a|a\rangle\langle b|b\rangle - |\langle a|b\rangle|^2 \geq 0 \tag{1.108}$$

[証明終]

次に

$$\Delta\hat{A}|\chi\rangle, \Delta\hat{B}|\chi\rangle \tag{1.109}$$

にたいしシュワルツの不等式 *(1.106)* を使って、$\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}$ のエルミート性を考慮すると、

$$\langle\chi|(\Delta\hat{A})^2|\chi\rangle\langle\chi|(\Delta\hat{B})^2|\chi\rangle \geq |\langle\chi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\chi\rangle|^2 \tag{1.110}$$

が得られる。ところで、

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \tag{1.111}$$

である。

交換子 $[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$ は反エルミート演算子なので、その期待値は純虚数である *(*問題参照*)*。これに対し反交換子 $\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}$ はエルミート的なので、期待値は実数である。

すると、

$$|\langle\chi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\chi\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle\chi|[\hat{A}, \hat{B}]|\chi\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\chi|\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}|\chi\rangle|^2 \tag{1.112}$$

で、右辺第 *2* 項が *0* 又は正より、不等式 *(1.105)* が成立する。*[*証明終*]*

1.4 問題

1. パウリ (Pauli) 行列

   (a) 以下のように定義されるパウリ行列

   $$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.113}$$

   の交換関係を調べてみよ。さらに反交換関係についてはどうか。

   (b) パウリ行列の固有値を求めなさい。次に固有ベクトルを求め、対応するユニタリー行列を構成して対角化を説明しなさい。

   (c) 実数 λ に対して、パウリ行列の関数

   $$\exp(i\lambda\sigma_1) \tag{1.114}$$

   を計算せよ (演算子の関数については (1.38) 式参照)。同様に、$\exp(i\lambda\sigma_2), \exp(i\lambda\sigma_3)$ も計算せよ。

2. (a) エルミート演算子 $\hat{X}, \hat{Y}$ について、以下のことを示しなさい。

   i. 交換子 $[\hat{X}, \hat{Y}]$ が反エルミート演算子 (1.32) であること

   ii. 反交換子 $\{\hat{X}, \hat{Y}\}$ が自己エルミート演算子であること

   (b) 反エルミート演算子 $\hat{Z}$ ($\hat{Z}^\dagger = -\hat{Z}$) の期待値は純虚数であることを示しなさい。

3. 逆演算子の微分

   $\hat{F}(t)$ が微分可能で逆演算子が存在するとき、$\hat{F}(t)\hat{F}^{-1}(t)$ を微分して (1.49) 式を示しなさい。

4. Pauli vector

   3 つのパウリ行列を、$\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ としてベクトルのように扱おう。

   (a) 実ベクトル $\boldsymbol{a} \equiv (a_1, a_2, a_3)$ に対して，$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ を計算し、2 行 2 列の行列で表しなさい.

   (b)

   $$(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}) \tag{1.115}$$

   を示しなさい.

(c) 実単位ベクトル $\boldsymbol{n} \equiv (n_1, n_2, n_3), (\boldsymbol{n}^2 = 1)$ を考える．この時、

$$\exp(i\theta \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \tag{1.116}$$

を計算しなさい．

5. 関数空間

(a) 関数 $f(x), g(x)$ にたいし、その和と定数倍を

$$(f+g)(x) = f(x) + g(x),\ (af)(x) = af(x) \tag{1.117}$$

と定義する時、ベクトルとしての性質を持つことを確かめよ。

(b) 微分操作

$$\frac{d}{dx} f(x) \tag{1.118}$$

が線形演算子の性質を持つことを確認せよ。

(c)

$$\int_a^b f^*(x) g(x) dx \qquad (b > a) \tag{1.119}$$

が内積としての性質を満たしていることを確認せよ。

(d) 区間 $[a, b]$ で、$L \equiv b - a$ とおいた時、

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \exp(2\pi i m x / L) \tag{1.120}$$

(m は整数) が正規直交系をなすことを確かめよ。

第2章　生成消滅演算子

交換関係 (もしくは反交換関係) を元にして、生成消滅演算子を導入し、それから構成されるエルミート演算子の固有値が 0 又は正の整数（交換関係、ボソン)、もしくは 0,1 の固有値（反交換関係、フェルミオン) となることを示そう。この固有値は粒子数と解釈できる。

また、位相の自由度を考察することで、波動性や時間変化とも結び付けられる。従って、生成消滅演算子によって「粒子性と波動性」が統一した形で表現されている。

この章の考察は、そのまま場の量子論へとつながるものである。

2.1　生成消滅演算子 (ボソン)

ある演算子 $\hat{a}$ とそのエルミート共役 $\hat{a}^\dagger$ を考える。

この 2 つの基本要素の積から、自己エルミートな演算子は、

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{2.1}$$

の 2 種類が得られる。これらの和および差は当然自己エルミートな演算子である。最も単純には、差を単位演算子 1 と置くことが考えられる。

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{2.2}$$

(定数倍の違いは、$\hat{a}$ の再定義で吸収される)。これは交換関係を基本にしたことになる。以下の交換関係は自明である。

$$[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \tag{2.3}$$

これらの交換関係を元にすると、次の節の定理で示すように $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有値は 0 又は正の整数である。従って $\hat{n}$ を粒子数を表す個数演算子と解釈できる。

2 種類のエルミート演算子 $\hat{a}\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\hat{a}$ の交換関係の他に、もう一つ、

$$(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2 = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2 \tag{2.4}$$

というエルミート演算子が作られ、これが物理量と関連するだろう。波動の量子化の実験と結びつけるには、エネルギーに対応するハミルトン演算子

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2 = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2) \tag{2.5}$$

と、運動量に当たる演算子

$$\hat{P} = \hbar k(\hat{n} + 1/2) \tag{2.6}$$

を導入し、その固有値の量子性を使えばよい。

上記では単一のモードのみ議論したが、物理系全体としては各モードの個数 $\hat{n}_k$ をとり、エネルギー、運動量はその総和として表す。つまり、全エネルギーは

$$\hat{H} = \hbar\sum_k \omega_k(\hat{n}_k + 1/2) \tag{2.7}$$

全運動量は

$$\hat{P} = \hbar\sum_k k(\hat{n}_k + 1/2) = \hbar\sum_k k\hat{n}_k \tag{2.8}$$

となる (運動量に対しては、k というモードに対し、必ず $-k$ のモードがあるので、定数 1/2 が打ち消し合う)。

ここでエネルギーに入っている定数 $\hbar\omega/2$ には、零点振動エネルギーという物理的意味 [1] があり、超流動などで重要な役割を果たす。

この他に

$$\hat{q} \equiv (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/\sqrt{2},\ \hat{p} \equiv (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)/(i\sqrt{2}), \tag{2.9}$$

もエルミート演算子であり、

$$[\hat{q}, \hat{p}] = (1/2i)[(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)] = i \tag{2.10}$$

であるが、これは次の章でのべる正準交換関係そのものである。

---

[1] 電磁場などでは、$(1/2)\sum_k \hbar\omega_k = \infty$ であるが、カシミール効果という意味づけができる。

2.1.1 個数証明

以下の定理で演算子 $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値が 0 又は正の整数であることを示す。

定理 2.1 次の交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1,\ [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \tag{2.11}$$

を満たす演算子に対し、エルミート演算子 $\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有関係を

$$\hat{n}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle \tag{2.12}$$

としたとき、固有値 ν は *0* 又は正の整数である。

[証明]

1. 次の交換関係

$$[\hat{n}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a} \tag{2.13}$$

から

$$\hat{n}(\hat{a}|\nu\rangle) = (\hat{a}\hat{n} + [\hat{n}, \hat{a}])|\nu\rangle = (\nu - 1)(\hat{a}|\nu\rangle) \tag{2.14}$$

が示される。つまり、$\hat{a}|\nu\rangle$ は固有値 $\nu - 1$ の $\hat{n}$ の固有状態である。この性質から、$\hat{a}$ を消滅演算子と呼ぶ。

2. 正の整数 k にたいし、

$$[\hat{n}, \hat{a}^k] = -k\hat{a}^k \tag{2.15}$$

が成り立つとしよう。この時、

$$[\hat{n}, \hat{a}^{k+1}] = \hat{a}[\hat{n}, \hat{a}^k] + [\hat{n}, \hat{a}]\hat{a}^k = \hat{a}(-k\hat{a}^k) + (-\hat{a})\hat{a}^k = -(k+1)\hat{a}^{k+1} \tag{2.16}$$

となる。したがって、数学的帰納法から任意の正の整数 k に対し

$$[\hat{n}, \hat{a}^k] = -k\hat{a}^k \tag{2.17}$$

が成立する。

これから、

$$\hat{n}(\hat{a}^k|\nu\rangle) = (\nu - k)(\hat{a}^k|\nu\rangle) \tag{2.18}$$

ということがいえる。つまり、$\hat{a}^k|\nu\rangle$ は固有値 $\nu - k$ の固有状態である。

3. 正値計量の条件より、

$$\langle\nu|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{n}|\nu\rangle \geq 0 \tag{2.19}$$

また、

$$\langle\nu|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{n}|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle \tag{2.20}$$

従って、一般に $|\nu\rangle \neq 0$ なら $\hat{n}$ の固有値 $\nu \geq 0$ である *(*等号は, $\hat{a}|\nu\rangle = 0$ の時*)*.

4. ここで任意の正の整数 k にたいし $\hat{a}^k|\nu\rangle \neq 0$ が成り立つとしよう。*2)* から $\hat{a}^k|\nu\rangle$ は固有値 $\nu - k$ の状態である。ところが十分大きな k に対し、$\nu - k < 0$ となり得るので、*3)* の条件と矛盾する。

したがって、背理法から、ある整数 $l(l \geq 0)$ に対して、

$$\hat{a}^k|\nu\rangle \begin{cases} \neq 0 & (k \leq l), \\ = 0 & (k \geq l+1) \end{cases} \tag{2.21}$$

でなくてはならない。この時、$\hat{a}^l|\nu\rangle \neq 0$ に対し

$$\hat{n}\hat{a}^l|\nu\rangle = (\nu - l)\hat{a}^l|\nu\rangle \tag{2.22}$$

かつ

$$\hat{n}\hat{a}^l|\nu\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}^{l+1}|\nu\rangle = 0 \tag{2.23}$$

なので、 $\nu = l$ である。*[*証明終*]*

最後に $\hat{a}^\dagger$ の性質を調べる。

$$[\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \tag{2.24}$$

から

$$\hat{n}\hat{a}^\dagger|\nu\rangle = (\nu + 1)\hat{a}^\dagger|\nu\rangle \tag{2.25}$$

が成り立つ。この性質から、$\hat{a}^\dagger$ を生成演算子と呼ぶ。

2.1.2 個数表示

次に個数演算子の固有状態の規格直交化を行なおう。前節から、$\hat{a}|n\rangle = C|n-1\rangle$ (C :複素定数) である。この規格化定数 C を考察しよう.

$$\langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{n}|n\rangle = n\langle n|n\rangle \tag{2.26}$$

なので、$\langle n|n\rangle = \langle n-1|n-1\rangle = \cdots = \langle 0|0\rangle = 1$ と言う規格化をとると, $|C|^2 = n$ が得られる. 位相の自由度を無視すると、

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{2.27}$$

と表される. 同様に、

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{2.28}$$

である。この操作を繰り返すことで、規格直交系を構成できる。

つまり個数 0 個の真空状態を

$$\hat{a}|0\rangle = 0,\ \langle 0|0\rangle = 1 \tag{2.29}$$

で定義したとき、規格化された固有状態は、

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \tag{2.30}$$

で与えられ、

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \tag{2.31}$$

と言う関係式を満たす (章末問題参照)。

また、生成消滅演算子を個数表示で表すと

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1},\ \langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \tag{2.32}$$

である。

2.1.3 位相と波動

今まで扱った演算子には位相の自由度が残っている。つまり、 $\hat{a} \to \hat{a}(\phi) \equiv \exp(i\phi)\hat{a}$, ($\phi$は実数) で理論（交換関係と個数演算子）が不変である。この自由度の意味は何か？

まず、$\hat{a}(\phi)$ を微分すると

$$\frac{d\hat{a}(\phi)}{d\phi} = i\hat{a}(\phi) = i\left[\hat{a}(\phi), \frac{1}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})\right] \tag{2.33}$$

が得られる。

次に位相変換を行なうユニタリー演算子を導入しよう。

$$\hat{U}(\phi)^\dagger \hat{a}\hat{U}(\phi) = \exp(i\phi)\hat{a} \tag{2.34}$$

$\hat{U}(\phi)$ が微分可能として、$\hat{a}(\phi)$ を微分すると、

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{a}(\phi)}{d\phi} &= \frac{d}{d\phi}(\hat{U}(\phi)^\dagger \hat{a}\hat{U}(\phi)) \\ &= \left[\hat{a}(\phi), \hat{U}(\phi)^\dagger \frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi}\right] \end{aligned} \tag{2.35}$$

と言う別の表式が得られる．ここで，逆演算子の微分 (1.49) を使った．

式 (2.33) と, 式 (2.35) を比較して

$$\begin{aligned}\hat{U}(\phi)^\dagger \frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi} &= \frac{i}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = i\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \\ \therefore \frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi} &= i\hat{U}(\phi)\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \tag{2.36}$$

が導かれる．

ところで，(2.34) から

$$\hat{U}(\phi)^\dagger \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{U}(\phi) = \hat{a}^\dagger\hat{a}, \qquad \therefore [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{U}(\phi)] = 0 \tag{2.37}$$

なので位相変換のユニタリー演算子は個数演算子と交換する．

したがって，式 (2.36) は (2.37) から積分できて，位相変換のユニタリー演算子は

$$\hat{U}(\phi) = \exp(i\phi(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2) \tag{2.38}$$

となる。

位相変換のユニタリー演算子の性質を整理してみよう。

$$\hat{U}(\phi_1)\hat{U}(\phi_2) = \hat{U}(\phi_1 + \phi_2) \tag{2.39a}$$

$$\hat{U}(-\phi) = \hat{U}^{-1}(\phi) \tag{2.39b}$$

$$\hat{U}(0) = 1 \tag{2.39c}$$

以上は 1 パラメータ部分群としての性質である。さらに、

$$\frac{d\hat{U}(\phi)}{d\phi} = i(\hat{n}+1/2)\hat{U}(\phi) \tag{2.40}$$

つまり、個数演算子は、無限小の位相変化の母関数 (generator) である。他に、個数演算子の固有値が整数より、

$$\hat{U}(\phi+4\pi) = \hat{U}(\phi) \tag{2.41}$$

と言う周期性が成り立つ。

波動との関連を考えると、位相の項は、$\phi \to kx - \omega t$ と置き換えられるだろう。先に $x=0$ として時間発展の項のみとると、

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = -i[\hat{a}(t), \omega\hat{n}] \tag{2.42}$$

のようになるが、ハミルトン演算子を使うともっと一般的な関係に表される。例えば、上記のユニタリー演算子は、

$$\hat{U}(t) = \exp(-it\hat{H}/\hbar) \tag{2.43}$$

これは次の章で、対応原理からも正当化される。繰返しになるが、前の位相の関係式を時間の関係式に置き直してみる。

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{a}(t), \hat{H}] \tag{2.44}$$

はハイゼンベルク方程式に当たる（次章 (3.31) 参照)。さらに、

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \frac{\hat{H}}{i\hbar}\hat{U}(t) \tag{2.45}$$

は、時間発展を表すシュレディンガー方程式に相当する。また、無限小の時間発展をとると、

$$\hat{U}(dt) = 1 - idt\hat{H}/\hbar \tag{2.46}$$

つまり、ハミルトン演算子は無限小の時間発展の母関数である。

次に空間に関する項をとると、

$$\frac{d\hat{a}(x)}{dx} = i[\hat{a}(x), k\hat{n}] \tag{2.47}$$

のようになるが、運動量演算子を使うともっと一般的な関係に表現される。

$$\frac{d\hat{a}(x)}{dx} = -\frac{1}{i\hbar}[\hat{a}(x), \hat{P}] \tag{2.48}$$

2.2　生成消滅演算子 (フェルミオン)

前節と同様な考察を行なうが、別の可能性を考えるので、演算子の記号を変え、$\hat{c}$ としよう。

自己エルミートな演算子は、

$$\hat{c}\hat{c}^{\dagger}, \hat{c}^{\dagger}\hat{c} \tag{2.49}$$

の 2 種類定義される。この差 (もちろん和も) は当然自己エルミートな演算子である。前節と異なり、和を単位演算子 1 としてみよう。

$$\{\hat{c}, \hat{c}^{\dagger}\} = 1 \tag{2.50}$$

これは反交換関係を基本にしたことになる。他に

$$\{\hat{c}, \hat{c}\} = \{\hat{c}^{\dagger}, \hat{c}^{\dagger}\} = 0 \tag{2.51}$$

も要請しよう (非自明な要請)。

この反交換関係を元にすると、$\hat{n} \equiv \hat{c}^{\dagger}\hat{c}$ の固有値が 0,1 であることが導かれる。従って $\hat{n}$ を (フェルミ) 個数を表す演算子と解釈できる。

また、

$$(\hat{c}^{\dagger}\hat{c} - \hat{c}\hat{c}^{\dagger})/2 = \hat{c}^{\dagger}\hat{c} - 1/2 \tag{2.52}$$

はエネルギーと結びつけられる。なお、零点エネルギーの符号がボソンの場合と逆である [2] 。

2.2.1　個数証明

演算子 $\hat{n} \equiv \hat{c}^{\dagger}\hat{c}$ の固有値が 0,1 であることを示そう。

定理 2.2 次の反交換関係

$$\{\hat{c}, \hat{c}^{\dagger}\} = 1,\ \{\hat{c}, \hat{c}\} = \{\hat{c}^{\dagger}, \hat{c}^{\dagger}\} = 0 \tag{2.53}$$

を満たす演算子に対し、エルミート演算子 $\hat{n} \equiv \hat{c}^{\dagger}\hat{c}$ の固有関係を

$$\hat{n}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$$

としたとき、固有値 ν は *0* または *1* である。

[2]超対称性が成り立てば、零点エネルギーの発散が互いに打ち消し合う。

[証明] 反交換関係から

$$\hat{n}\hat{n} = \hat{c}^\dagger\hat{c}\hat{c}^\dagger\hat{c} = \hat{c}^\dagger(1 - \hat{c}^\dagger\hat{c})\hat{c} = \hat{c}^\dagger\hat{c} = \hat{n} \tag{2.54}$$

となるので、 $\hat{n}(\hat{n}-1) = 0$ で、 $\hat{n}$ の固有値は *0* または *1* である。*[証明終]*

また、

$$[\hat{n},\hat{c}] = -\hat{c},\ [\hat{n},\hat{c}^\dagger] = \hat{c}^\dagger \tag{2.55}$$

から、$\hat{c},\hat{c}^\dagger$ がそれぞれ消滅、生成演算子に当たる。

2.2.2　個数表示

基底状態は

$$\hat{c}|0\rangle = 0,\ \langle 0|0\rangle = 1 \tag{2.56}$$

で定義される。個数 1 個の状態は、

$$|1\rangle = \hat{c}^\dagger|0\rangle \tag{2.57}$$

で与えられ、この 2 つしか個数の固有状態はない。

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \tag{2.58}$$

2.2.3　位相と波動

フェルミオンの場合の位相と時間発展の関係は、交換関係

$$[\hat{n},\hat{c}] = -\hat{c},\ [\hat{n},\hat{c}^\dagger] = \hat{c}^\dagger \tag{2.59}$$

から、ボソンの場合と全く同様に議論できる。

2.3　複数の種類の個数演算子と U(N)

これまでは、1 種類の生成消滅演算子に限ってきた。これを複数の種類の生成消滅演算子に拡張するには、有限個の場合、

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j},\ [\hat{a}_i,\hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_j^\dagger] = 0 \tag{2.60}$$

とするのが自然である。次に、N 個の生成消滅演算子の系にたいし、N 行 N 列の行列を用い、

$$\hat{b}_i = \sum_j U_{i,j}\hat{a}_j,\ \hat{b}_i^\dagger = \sum_j U_{i,j}^*\hat{a}_j^\dagger \tag{2.61}$$

と言う線形変換を行なおう。ここで、変換後にも

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{i,j},\ [\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0 \tag{2.62}$$

と言う交換関係が成り立つ条件を調べると、N 行 N 列の行列が

$$\sum_{k=1}^N U_{i,k}U_{j,k}^* = \delta_{i,j} \tag{2.63}$$

と言う条件を満たせば良い。これは N 次ユニタリー行列 $U(N)$ に他ならない。

各成分の個数については、変換後は入り混じった形になるが、全成分の個数の和

$$\sum_i^N \hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i = \sum_i^N \hat{b}_i^\dagger\hat{b}_i \tag{2.64}$$

は不変である。

反交換関係（フェルミオン）についても同様な関係がでる。

2.4　物理的考察と場の理論

この章では生成消滅演算子の位相の自由度から、

$$\hat{a}_k \exp(i(kx - \omega t)) \tag{2.65}$$

とする可能性について検討した(ここで各モードを区別するため、k の添字をつけた)。では、波動場を量子化するのにこのモードを重ね合わせたものを使ってはどうか？実際これが正しい処方箋であることが後で示される。なお、k と ω の関係は、波動方程式（偏微分方程式）を適切な境界条件で解くことで与えられる。

逆の立場からは、粒子に付随する生成消滅演算子から位相の自由度が残るので、これに波動の性格を持たせることが出来る。

ところで、生成消滅演算子で書き表した時に、個数演算子が常にハミルトニアンと交換する、つまり保存量とは限らない。一般には外場との相互作用で個数が変化したり、もしくは粒子・反粒子の生成消滅が起きたりする。しかし、適切な演算子をとることで、記述が容易になる。

ここでは述べなかったが、交換関係は保つが、個数を保存しない変換（ボゴリューボフ変換）すると、相互作用で個数が保存しないような問題が、個数を保存する形に置き換えることが出来る。

2.5　問題

1. ベーカー・ハウスドルフ (Baker-Hausdorff) の公式

   演算子 $\hat{G}, \hat{A}$ と複素数 λ に対し、ベーカー・ハウスドルフの公式

$$\begin{aligned}&\exp(\hat{G}\lambda)\hat{A}\exp(-\hat{G}\lambda)\\&= \hat{A} + \lambda[\hat{G}, \hat{A}] + \left(\frac{\lambda^2}{2!}\right)[\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]] + \left(\frac{\lambda^3}{3!}\right)[\hat{G}, [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]]] + \cdots\end{aligned} \tag{2.66}$$

   が成り立つことを証明しよう。方針としては $\lambda = 0$ の近くでテイラー (Taylor) 展開して示そう。

   (a) まず一階微分は

$$\begin{aligned}&\frac{d}{d\lambda}\left[\exp(\hat{G}\lambda)\hat{A}\exp(-\hat{G}\lambda)\right]\\&= \exp(\hat{G}\lambda)[\hat{G}, \hat{A}]\exp(-\hat{G}\lambda)\\&= [\hat{G}, \exp(\hat{G}\lambda)\hat{A}\exp(-\hat{G}\lambda)]\end{aligned} \tag{2.67}$$

   であることを確かめよ。

   (b) 同様にして 2 階微分を求めてみよ。前の問題の結果を繰返し使う。

   (c) 一般項を求めよ。

2. 位相変換

   公式 (2.66) を用いて位相変換のユニタリー演算子

$$\hat{U}(\phi) = \exp(i\phi(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2) \tag{2.68}$$

   によるユニタリー変換

$$\hat{U}^\dagger(\phi)\hat{a}\hat{U}(\phi) \tag{2.69}$$

   を直接計算せよ。

3. ボゴリューボフ (Bogoliubov) 変換

(a) 互いに独立な 2 つの生成消滅演算子の系

$$\begin{aligned}[\hat{a}_k, \hat{a}_k] &= [\hat{a}_{-k}, \hat{a}_{-k}] = 0 \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger] &= [\hat{a}_{-k}, \hat{a}_{-k}^\dagger] = 1 \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_{-k}] &= [\hat{a}_k, \hat{a}_{-k}^\dagger] = 0 \end{aligned} \tag{2.70}$$

を考える。これを

$$\begin{aligned}\hat{b}_k &= u\hat{a}_k + v\hat{a}_{-k}^\dagger \\ \hat{b}_{-k} &= u\hat{a}_{-k} + w\hat{a}_k^\dagger \end{aligned} \tag{2.71}$$

と変換しよう (係数 u, v, w は実数)。変換後に、同じ形の交換関係

$$\begin{aligned}[\hat{b}_k, \hat{b}_k] &= [\hat{b}_{-k}, \hat{b}_{-k}] = 0, \\ [\hat{b}_k, \hat{b}_k^\dagger] &= [\hat{b}_{-k}, \hat{b}_{-k}^\dagger] = 1, \\ [\hat{b}_k, \hat{b}_{-k}] &= 0, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{-k}^\dagger] = 0 \end{aligned} \tag{2.72}$$

となるためには、u, v, w はどのような関係を満たさなければならないか？

(b) 反交換関係を満たす生成消滅演算子に関し、同様な考察をしてみよ。

4. ボゴリューボフ変換 (2)

(a) 演算子

$$\hat{U}_B \equiv \exp(\theta(\hat{a}_k\hat{a}_{-k} - \hat{a}_{-k}^\dagger\hat{a}_k^\dagger)) \tag{2.73}$$

(θ は実数) を扱う。

i. 上記演算子がユニタリー演算子であることを確かめよ。

ii. 次に $\hat{a}_k$ を上記の演算子でユニタリー変換したものを計算し、結果を $\hat{a}_k, \hat{a}_{-k}$ と θ で表しなさい。同様に $\hat{a}_{-k}$ についてもユニタリー変換を求めなさい。

iii. これらの交換関係を確認しなさい。

(b) 反交換関係を満たす生成消滅演算子に関し、同様な考察をしてみよ。

5. ボソンの生成消滅演算子の系を考える。

(a) 数学的帰納法を使って

$$[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^k] = k(\hat{a}^\dagger)^{k-1} \tag{2.74}$$

を示しなさい。

(b)

$$|n\rangle \equiv \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \tag{2.75}$$

としたとき, (2.74) を使って

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{2.76}$$

および

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{2.77}$$

となることを示しなさい。

(c) (2.74) を繰り返し使って、規格直交性

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \tag{2.78}$$

を示しなさい。

第3章　正準交換関係と対応原理

今度はエルミート演算子同士を考える。やはり考えられる最も単純な関係は、（交換関係を元にした場合）エルミート演算子同士の交換関係が反エルミートになることから、

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i \tag{3.1}$$

だろう。

$$[\hat{A}, \hat{A}] = [\hat{B}, \hat{B}] = 0 \tag{3.2}$$

は自明である。これは、前章の生成消滅演算子を使って

$$\hat{A} \equiv (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/\sqrt{2},\ \hat{B} \equiv (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)/(i\sqrt{2}) \tag{3.3}$$

と置いてもでてくる。

以上の交換関係の物理的意味は何か？エルミート演算子は、一般に観測量と結び付く。であるから古典解析力学で類似の関係があるはずである。

また、$\hat{A}$ に定数値を加えても交換関係は不変である。これは、平行移動と関連し、これからすぐにド・ブロイ (de Broglie) 波の関係がでてくる。

3.1　交換関係とポアソン括弧式

まず、交換関係の古典力学での対応物を探すと、ポアソン括弧式がある。

$$[A, B]_{PB} \equiv \frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial q}\frac{\partial A}{\partial p} \tag{3.4}$$

ここで、q, p は座標と、それに共役な運動量である。ポアソン括弧式は交換関係と同じ代数関係 (1.93) を満たす。ただし、物理量同士のポアソン括弧式は物理量であるが、エルミート演算子同士の交換関係は反エルミートになる。だから、

$$[A, B]_{PB} \leftrightarrow i[\hat{A}, \hat{B}]$$

と予想される。ただしこの考察には定数倍の違いが許容される。

この定数について考慮するため、具体例をとろう。古典ポアソン括弧式で特に大事なのは

$$[q,p]_{PB} = 1 \tag{3.5}$$

である。この量子力学版は、

$$[\hat{q},\hat{p}] = i\hbar \tag{3.6}$$

である（正準交換関係）。エルミート演算子同士の交換関係が反エルミートであることを調整するため虚数 i を入れたのと、q,p の積の次元を考慮して、作用の次元をもつ定数 $\hbar$ を導入した。

一般に古典ポアソン括弧と量子力学の交換関係の間に

$$[A,B]_{PB} \leftrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{B}] \tag{3.7}$$

という対応関係がなりたつ。

3.2 平行移動、運動量、座標

3.2.1 平行移動

正準交換関係 $[\hat{q},\hat{p}] = i\hbar$ は $\hat{q} \to \hat{q}' = \hat{q} + l$ (l は任意の実数) の変換に対して不変であり、変換後の $\hat{q}'$ もエルミートである。この変換は物理的には平行移動に当たる。

平行移動を表すユニタリー変換を

$$\hat{U}^\dagger_{trl}(l)\hat{q}\hat{U}_{trl}(l) = \hat{q} + l \tag{3.8a}$$

$$\hat{U}^\dagger_{trl}(l)\hat{p}\hat{U}_{trl}(l) = \hat{p} \tag{3.8b}$$

と定義する．まず，(3.8a) の両辺を l について微分すると，(2.36) と同様な手順で

$$\begin{aligned}\frac{d}{dl}\left(\hat{U}^\dagger_{trl}(l)\hat{q}\hat{U}_{trl}(l)\right) &= 1 \\ &= \left[\hat{U}^\dagger_{trl}(l)\hat{q}\hat{U}_{trl}(l), \hat{U}^\dagger_{trl}(l)\frac{d\hat{U}_{trl}(l)}{dl}\right] \\ &= \left[\hat{q}, \hat{U}^\dagger_{trl}(l)\frac{d\hat{U}_{trl}(l)}{dl}\right] \end{aligned} \tag{3.9}$$

(ここで、逆演算子の微分 (1.49) を使っている) が得られる．また (3.8b) の両辺を l について微分すると，

$$\frac{d}{dl}\left(\hat{U}^{\dagger}_{trl}(l)\hat{p}\hat{U}_{trl}(l)\right) = \left[\hat{p}, \hat{U}^{\dagger}_{trl}(l)\frac{d\hat{U}_{trl}(l)}{dl}\right] = 0 \tag{3.10}$$

これらを正準交換関係 (3.6) と比較すると，

$$\hat{U}^{\dagger}_{trl}(l)\frac{d\hat{U}_{trl}(l)}{dl} = \frac{\hat{p}}{i\hbar} \tag{3.11}$$

が得られる (なお，条件 (3.8b) がない場合には，右辺に座標の関数がある可能性が残る)．この式を整理し，(3.8b) を使うと

$$\frac{d\hat{U}_{trl}(l)}{dl} = \hat{U}_{trl}(l)\frac{\hat{p}}{i\hbar} = \frac{\hat{p}}{i\hbar}\hat{U}_{trl}(l) \tag{3.12}$$

となる．従って平行移動のユニタリー演算子は

$$\hat{U}_{trl}(l) = \exp\left(\frac{\hat{p}l}{i\hbar}\right) \tag{3.13}$$

となる．

平行移動演算子の性質を整理すると、

$$\hat{U}_{trl}(l_1)\hat{U}_{trl}(l_2) = \hat{U}_{trl}(l_1 + l_2) \tag{3.14a}$$

$$\hat{U}_{trl}(-l) = \hat{U}^{-1}_{trl}(l) \tag{3.14b}$$

$$\hat{U}_{trl}(0) = 1 \tag{3.14c}$$

以上は 1 パラメータ部分群としての性質である。さらに，

$$\hat{U}_{trl}(\delta l) \approx 1 + \frac{\hat{p}\delta l}{i\hbar} \tag{3.15}$$

から，運動量は無限小平行移動の生成演算子である．

3.2.2　座標演算子の固有値、固有状態

座標演算子 $\hat{q}$ の固有値、固有ベクトルを考えよう。

　はじめに、

$$\hat{q}|0\rangle = 0 \tag{3.16}$$

という規格化された状態をとろう。
　これに対して

$$\hat{q}\hat{U}_{trl}(l)|0\rangle = \hat{U}_{trl}(l)(\hat{q}+l)|0\rangle = l\hat{U}_{trl}(l)|0\rangle \tag{3.17}$$

なので、$\hat{U}_{trl}(l)|0\rangle$ は固有値 l を持つ $\hat{q}$ の規格化された固有状態であることが分かる。これを,

$$|l\rangle \equiv \hat{U}_{trl}(l)|0\rangle, \quad \hat{q}|l\rangle = l|l\rangle \tag{3.18}$$

と表そう。明らかに固有値スペクトルは連続である。

3.2.3　座標表示の波動関数

　座標演算子に対する規格直交化された固有状態を使って、ある状態ベクトル $|\alpha\rangle$ を表示して見よう。完全性から、$|\alpha\rangle$ は

$$|\alpha\rangle = \int dq|q\rangle\langle q|\alpha\rangle \tag{3.19}$$

と表される。座標の関数である $\langle q|\alpha\rangle$ を物理状態 $|\alpha\rangle$ に対する座標表示の波動関数と呼ぼう。
　ところで、規格化された状態について

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \int dq\langle\alpha|q\rangle\langle q|\alpha\rangle = \int dq|\langle\alpha|q\rangle|^2 = 1 \tag{3.20}$$

である。これは、$|\langle\alpha|q\rangle|^2$ が確率密度と解釈できることを示している。

3.2.4　位置基底での運動量演算子

　運動量演算子と座標表示との関連を調べよう．(3.12) から

$$\hat{p}\hat{U}_{trl}(q) = i\hbar\frac{d\hat{U}_{trl}(q)}{dq}, \quad \hat{U}^{\dagger}_{trl}(q)\hat{p} = -i\hbar\frac{d\hat{U}^{\dagger}_{trl}(q)}{dq} \tag{3.21}$$

である．さらに (3.18) の共役を使うと，任意の状態 $|\alpha\rangle$ について運動量演算子の座標表示は,

$$\langle q|\hat{p}|\alpha\rangle = \langle 0|\hat{U}^{\dagger}_{trl}(q)\hat{p}|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{d}{dq}\langle 0|\hat{U}^{\dagger}_{trl}(q)|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{d}{dq}\langle q|\alpha\rangle \tag{3.22}$$

と言う形になる。

これから、ド・ブロイ波の関係が導かれる。つまり、運動量の固有状態 $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ に対する座標表示の波動関数は、

$$\langle q|\hat{p}|p\rangle = p\langle q|p\rangle = -i\hbar\frac{d}{dq}\langle q|p\rangle \tag{3.23}$$

なので、この微分方程式を解くと

$$\langle q|p\rangle = \exp(\frac{ipq}{\hbar}) \tag{3.24}$$

一般に、(3.22) の手続きを繰返し使うと、

$$\langle q|\hat{p}^k|\alpha\rangle = (-i\hbar)^k\frac{d^k}{dq^k}\langle q|\alpha\rangle \tag{3.25}$$

が成り立つ。

3.2.5　3 次元への一般化

今までは簡単化のため、1 次元の場合を扱ってきた。3 次元へ一般化するには、正準交換関係を

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0,\ [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j} \tag{3.26}$$

とすれば良い。

これらの交換関係は、平行移動の他に 3 次元の直交行列 O(3) ($\sum_j O_{i,j}O_{k,j} = \delta_{i,k}$, ($O_{i,j}$の各成分は実数)) による変換

$$\hat{q}'_i = \sum_j O_{i,j}\hat{q}_j,\ \hat{p}'_i = \sum_j O_{i,j}\hat{p}_j, \tag{3.27}$$

で不変である。これは、回転および空間反転を意味する。

この他、O(3) の変換により、

$$\sum_j \hat{q}_j^2,\ \sum_j \hat{p}_j^2, \tag{3.28}$$

も不変である。

3.3　時間発展とハミルトニアン

古典解析力学で、ハミルトンの運動方程式

$$\frac{dq}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p},\ \frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q} \tag{3.29}$$

が成り立つことを使うと、物理量 $A(p,q,t)$ の時間発展は、ポアソン括弧を用い、

$$\frac{dA}{dt}=\frac{\partial A}{\partial q}\frac{dq}{dt}+\frac{\partial A}{\partial p}\frac{dp}{dt}+\frac{\partial A}{\partial t}=[A,H]_{PB}+\frac{\partial A}{\partial t} \tag{3.30}$$

と表される。この量子力学的対応は、

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}]+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} \tag{3.31}$$

で、ハイゼンベルクの運動方程式とよばれる。

ハイゼンベルクの運動方程式を解いて演算子の時間発展を求めることができる。演算子の初期値を $\hat{A}$ とした時、任意の時刻の $\hat{A}(t)$ は

$$\hat{A}(t)=\hat{U}(t)^{\dagger}\hat{A}\hat{U}(t) \tag{3.32}$$

で表される。$\hat{U}(t)$ は時間発展のユニタリー演算子で、ハミルトニアンが時間にあらわに依存しない場合、$\hat{U}(t)=\exp(-it\hat{H}/\hbar)$ である。

時間発展のユニタリー演算子の性質をもっと詳しく調べよう。

$$\hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2)=\hat{U}(t_1+t_2) \tag{3.33a}$$

$$\hat{U}(-t)=\hat{U}^{-1}(t) \tag{3.33b}$$

$$\lim_{t\to 0}\hat{U}(t)=1 \tag{3.33c}$$

さらに、

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt}=\frac{\hat{H}}{i\hbar}\hat{U}(t) \tag{3.34}$$

また、無限小時間発展を考えると、

$$\hat{U}(\delta t)=1-i\hat{H}\delta t/\hbar \tag{3.35}$$

つまり、ハミルトニアンは無限小時間発展の生成演算子である。

このように、並行移動の演算子と時間発展の演算子の間には類似点がある。相違点は、座標に対しては運動量が共役な演算子であったが、ハミルトン演算子に対しては時間は単なるパラメータであって、演算子の性格を持たない。

3.3.1　対称性と保存量

運動量演算子がハミルトニアンと交換する時、ハイゼンベルク方程式から運動量が保存する。この時、平行移動の演算子（これ自体は運動量演算子の関数）により、ハミルトニアンは不変であり、並進不変性を持つ。

逆に、ハミルトニアンが並進不変ならば、運動量とハミルトニアンが交換し、運動量が保存量となる。

このことはさらに一般化でき、ハミルトニアンがある対称変換で不変ならばそれに共役な物理量が保存する。

3.3.2　シュレディンガー (Schrödinger) 方程式

時間発展に対する別の解釈として、演算子ではなく、状態ベクトルの時間発展が考えられる。時間発展演算子は

$$i\hbar\frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t) \tag{3.36}$$

の微分方程式を満たす。従って、状態の時間発展を $\hat{U}(t)|a\rangle = |a;t\rangle$ と表示すると、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a;t\rangle = \hat{H}|a;t\rangle \tag{3.37}$$

は、時間発展を表すシュレディンガー方程式である。

例えば、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) \tag{3.38}$$

というハミルトニアンをとると、座標表示の波動関数では、

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle q|a;t\rangle &= \langle q|\frac{\hat{p}^2}{2m}|a;t\rangle + \langle q|V(\hat{q})|a;t\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\langle q|a;t\rangle + V(q)\langle q|a;t\rangle \end{aligned} \tag{3.39}$$

と言う偏微分方程式の形になる。

3.4　自由粒子

並進不変なハミルトニアンを考える。最も単純には座標を含まず、運動量のみ含むハミルトニアンであれば良い。 さらに、反転 $\hat{p} \leftrightarrow -\hat{p}$ に対

し不変であることを要請すると、最も単純なハミルトニアンは質量 m の自由粒子に当たる

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \tag{3.40}$$

である。これは、

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}, \hat{H}] = 0 \tag{3.41}$$

なので、運動量が時間変化しない、つまり保存量である。これは対称性と保存則の 1 例である。

ド・ブロイ波、ガウス波束について述べる。

3.5　調和振動子と生成消滅演算子

1 次元調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2} \tag{3.42}$$

であり、ω は角振動数でフックの法則のバネ定数 k と $\omega = \sqrt{k/m}$ の関係がある。まず、ハイゼンベルクの運動方程式 (3.31) から、

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}, \hat{H}] = \frac{\hat{p}}{m} \tag{3.43a}$$

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}, \hat{H}] = -m\omega^2\hat{q} \tag{3.43b}$$

であり、その解は、

$$\hat{q}(t) = \hat{q}(0)\cos\omega t + \hat{p}(0)(m\omega)^{-1}\sin\omega t \tag{3.44a}$$

$$\hat{p}(t) = -\hat{q}(0)m\omega\sin\omega t + \hat{p}(0)\cos\omega t \tag{3.44b}$$

である。

次に 1 次元調和振動子のエネルギー固有値問題を扱う。まず、演算子

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right),\ \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right), \tag{3.45}$$

を導入する。これを逆にとくと、

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger),\ \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \tag{3.46}$$

である。これは正準交換関係から

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{3.47}$$

を満たすので、生成消滅演算子であり、$\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ は個数演算子で、その固有値は 0 又は正の整数である。またハミルトニアン (3.42) は、簡単な計算により

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2) \tag{3.48}$$

と書き直される。これでエネルギー固有値が求まった。

調和振動子の固有状態を座標表示で表してみよう。まず

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{3.49}$$

で定義される基底状態からはじめよう。座標表示でこれは

$$\langle q|\hat{a}|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle q|(\hat{q} + \frac{i\hat{p}}{m\omega})|0\rangle = 0 \tag{3.50}$$

である。さらに (3.22) を使うと

$$\left(q + q_0^2 \frac{d}{dq}\right)\langle q|0\rangle = 0,\ q_0 \equiv \sqrt{\hbar/m\omega} \tag{3.51}$$

の微分方程式が導かれる。この方程式の規格化された解は、

$$\langle q|0\rangle = (\pi^{1/4}\sqrt{q_0})^{-1}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{q}{q_0}\right)^2\right] \tag{3.52}$$

である。励起状態のエネルギー固有関数も同様にして求められる。

$$\begin{aligned}
\langle q|1\rangle &= \langle q|\hat{a}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}q_0}\left(q - q_0^2\frac{d}{dq}\right)\langle q|0\rangle \\
\langle q|2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2!}}\langle q|(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}q_0}\right)^2\left(q - q_0^2\frac{d}{dq}\right)^2\langle q|0\rangle, \cdots
\end{aligned} \tag{3.53}$$

一般項は

$$\langle q|n\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{1}{q_0^{n+1/2}}\right)\left(q - q_0^2\frac{d}{dq}\right)^n \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{q}{q_0}\right)^2\right] \tag{3.54}$$

これらはエルミート多項式に関係する。

エネルギーの固有状態での $\hat{q}, \hat{q}^2, \hat{p}, \hat{p}^2$ の期待値を調べよう。まず、

$$\langle n|\hat{q}|n\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0 \tag{3.55}$$

である。次に、

$$\hat{q}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}((\hat{a})^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \tag{3.56}$$

である。従って、

$$\langle n|\hat{q}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{3.57}$$

同様にして

$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle = \hbar m\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{3.58}$$

これから不確定性関係は、

$$\langle n|(\Delta\hat{q})^2|n\rangle\langle n|(\Delta\hat{p})^2|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2\hbar^2 \tag{3.59}$$

で、特に基底状態では交換関係から期待できる最小の不確定性関係である。

3.6　問題

1. 正準交換関係 $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ を前提とすると、

$$[\hat{q}, G(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial G(\hat{p})}{\partial \hat{p}} \tag{3.60}$$

という交換関係が成り立つことを示そう。

(a) $[\hat{q}, \hat{p}^n] = i\hbar n \hat{p}^{n-1}$ が成り立つ時、$[\hat{q}, \hat{p}^{n+1}] = i\hbar(n+1)\hat{p}^n$ を確かめよ。

したがって、数学的帰納法から、正の整数 n について $[\hat{q}, \hat{p}^n] = i\hbar n \hat{p}^{n-1}$ が成立する。

(b)

$$G(\hat{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n \hat{p}^n \tag{3.61}$$

と級数展開できる場合に、問題冒頭の交換関係を確かめよ。

2. 平行移動演算子

$$\hat{U}_{trl}(l) = \exp\left(\frac{-i\hat{p}l}{\hbar}\right) \tag{3.62}$$

を考える。

(a)

$$[\hat{q}, \hat{U}_{trl}(l)] \tag{3.63}$$

を計算せよ。

(b) 上記の結果を利用して、$\hat{U}_{trl}(l)|q\rangle$ が位置演算子 $\hat{q}$ の固有状態であることを証明せよ。対応する固有値はいくらか。

(c)

$$\hat{U}^\dagger_{trl}(l)\hat{q}^k\hat{U}_{trl}(l) = (\hat{q}+l)^k, \qquad (k\text{ は正の整数}) \tag{3.64}$$

を確かめなさい。したがって座標の任意の関数 $F(\hat{q})$ にたいし、

$$\hat{U}^\dagger_{trl}(l)F(\hat{q})\hat{U}_{trl}(l) = F(\hat{q}+l) \tag{3.65}$$

3.
$$[\hat{p}, F(\hat{q})] = -i\hbar \frac{\partial F(\hat{q})}{\partial \hat{q}} \tag{3.66}$$
という交換関係を示せ。

4. 時間発展のユニタリー演算子
$$\hat{U}(t) = \exp(-it\hat{H}/\hbar) \tag{3.67}$$
にたいして、1次元調和振動子での時間発展のユニタリー変換
$$\hat{U}^\dagger(t)\hat{q}\hat{U}(t), \hat{U}^\dagger(t)\hat{p}\hat{U}(t), \tag{3.68}$$
をベーカーハウスドルフの公式 (2.66) を用いて計算せよ。

5. 調和振動子の固有状態の座標表示 $\langle q|n\rangle$ を $n = 0, 1, 2, 3$ について具体的に求め、グラフで表示してみよ。零点の数は幾つか？
また、偶奇性（パリティ）について、
$$\langle -q|n\rangle = (-1)^n \langle q|n\rangle \tag{3.69}$$
を確認せよ。

第4章　密度演算子と量子統計

量子論には、確率解釈が欠かせない。さらに踏み込んで、量子論と統計力学との関連を議論しよう。

4.1　密度演算子とアンサンブル

4.1.1　純粋アンサンブル

確率を実験的に決めるためにはすべて同一の状態ケット $|\chi\rangle$ で特徴づけられる、複数の独立な物理状態の集合、すなわちアンサンブル (ensemble) に対して何回も同じ測定をすることを考えなければならない。このようなアンサンブルは純粋アンサンブルと呼ばれる。

同一の状態ケットを実験的に用意する手続きとしては、物理量の測定を行なって特定の固有状態に対応するもののみ選び出すことが考えられる。例えば座標の測定を行ない、スリットを通すことで $[q, q+\Delta q]$ の固有値のみ持つ状態を取り出すことができる。これを選択的測定と呼ぼう。選択的測定後に再び同一の物理量の測定を行なうと同じ測定結果（固有値）が得られる。他の例としては、Stern-Gerlach の実験での z 軸方向の上向き（もしくは下向き）スピンの選択的測定がある。

このように用意した純粋アンサンブルに対し、両立しない物理量（座標に対する運動量、x 軸方向のスピン）の測定を行なうと、その測定後に新たな物理量の固有状態のどれかになるが、各固有状態になる確率は内積の 2 乗で決まる。

4.1.2　混合アンサンブルと密度演算子

一般には、当初の物理状態の集合を純粋アンサンブルの形で用意はできない。例えば、熱平衡の元での複数のエネルギー固有状態の分布集合である。

混合アンサンブルでの物理量の期待値

純粋アンサンブルより一般的な状況を表すために混合アンサンブルを導入する。規格化されたケットベクトルの系 $\{|v_j\rangle\}$ [1] に対して、アンサンブルの中で $|v_j\rangle$ が見出される確率を w_j としよう。この時、確率の重み w_j は実数で

$$w_j \geq 0,\ \sum_j w_j = 1 \tag{4.1}$$

という条件を満たす。

混合状態に対するオブザーバブル $\hat{A}$ の期待値は

$$[\hat{A}] = \sum_j w_j \langle v_j|\hat{A}|v_j\rangle = \sum_j \sum_n w_j |\langle v_j|u_n\rangle|^2 \lambda_n \tag{4.2}$$

となる（ここで $|u_n\rangle$ は $\hat{A}$ の固有ケット $\hat{A}|u_n\rangle = \lambda_n|u_n\rangle$ で完全系をなしている)。確率が 2 つの部分の積であることに注意しよう。つまり、w_j はアンサンブルの中に $|v_j\rangle$ という状態が見出される古典的確率、$|\langle v_j|u_n\rangle|^2$ は状態 $|v_j\rangle$ の中から $\hat{A}$ の固有状態 $|u_n\rangle$ が見出される量子的確率である。

密度演算子

これを演算子の形で表すために

$$\hat{\rho} = \sum_j w_j |v_j\rangle\langle v_j| \tag{4.3}$$

という密度演算子を導入する。密度演算子を使うと、物理量の期待値は

$$[\hat{A}] = tr(\hat{\rho}\hat{A}) \tag{4.4}$$

と表すことができる。実際、

$$tr(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_j w_j tr(|v_j\rangle\langle v_j|\hat{A})$$

である。ここでトレースの性質 (1.82) を使って

$$tr(|v_j\rangle\langle v_j|\hat{A}) = \langle v_j|\hat{A}|v_j\rangle$$

したがって

$$tr(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_j w_j \langle v_j|\hat{A}|v_j\rangle \tag{4.5}$$

となる。

[1] $\{|v_j\rangle\}$ は互いに直交している必要はないし、完全系である必要もない

密度演算子の性質

密度演算子の持つ性質を列挙する。

1. 自己エルミート性
$$(\hat{\rho})^\dagger = \hat{\rho} \tag{4.6}$$

2. 正値性

   任意の状態ベクトル $|\phi\rangle$ にたいし
$$\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle \geq 0 \tag{4.7}$$

3. 総和性

   (1.82) を使って
$$tr(\hat{\rho}) = 1 \tag{4.8}$$

逆に以上の性質を持つ演算子は、何らかのアンサンブルを表す密度演算子と考えられる。

純粋アンサンブルの密度演算子

なお、純粋アンサンブルの密度演算子は対角表現ではある状態 $|v_n\rangle$ のみの確率が 1 で他は 0 、つまり

$$w_j = \begin{cases} 1 & j = n \text{ の時} \\ 0 & j \neq n \text{ の時} \end{cases} \tag{4.9}$$

と表されるので、
$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \tag{4.10}$$
という（素射影演算子としての）性質を持つ。これから

$$\hat{\rho}(\hat{\rho} - 1) = 0 \tag{4.11}$$

である。したがって、純粋アンサンブルの密度演算子の固有値は 0 又は 1 である。また、
$$tr(\hat{\rho}^2) = 1 \tag{4.12}$$

が成り立つ。

4.1.3　密度演算子の直積

これまでの説明では単一の状態ベクトル空間のみ考えてきた。ここで 2 つの独立な状態空間 $V^{(1)}, V^{(2)}$ を考えよう。例えば、スピン空間と座標空間や、座標空間の中での 2 つの独立な部分系でも良い。この時の密度演算子を考える。

2 つのベクトル空間 $V^{(1)}, V^{(2)}$ にたいし、密度演算子がそれぞれ $\hat{\rho}^{(1)}, \hat{\rho}^{(2)}$ で与えられているとしよう。このとき、密度演算子の直積

$$\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \tag{4.13}$$

は直積ベクトル空間 $V^{(1)} \otimes V^{(2)}$ での密度演算子である。実際、

$$(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)})^\dagger = \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \tag{4.14a}$$

$$tr(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}) = tr(\hat{\rho}^{(1)})tr(\hat{\rho}^{(2)}) = 1 \tag{4.14b}$$

$$\langle\chi|\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}|\chi\rangle \geq 0 \tag{4.14c}$$

さらに多数の密度演算子の直積 $\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \otimes \hat{\rho}^{(3)} \cdots$ も同様に定義できる。

4.2　エントロピー

アンサンブルの乱雑さの度合を計る物理量を考察する。対角表現で考え、実現しにくい事象、つまり w_j が小さいほど、大きな情報量を持つとする。w_j に対する単調減少関数を $f(w_j)$ とすると、これは情報量の候補となる。この時、情報量の平均値は

$$\sigma = \sum_j w_j f(w_j) \tag{4.15}$$

となる。しかしこれだけでは関数 f の形は決まらない。他に、加法性、つまり 2 つの独立な系の情報量をそれぞれ $\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}$ とすると全系の情報量は和 $\sigma^{(1)} + \sigma^{(2)}$ で表されるということまで要請すると、関数 f は（定数倍の不定性を除き）決まる。

ここで、アンサンブルの乱雑さの度合を計る情報エントロピー

$$\sigma = -[\ln\hat{\rho}] = -tr(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) \tag{4.16}$$

という量を導入しよう。これに関して以下の性質が成り立つ。

1. 密度演算子の重みは $0 \leq w_j \leq 1$ であるので、情報エントロピーは
$$\sigma \geq 0 \tag{4.17}$$
である。

2. 等号 $\sigma = 0$ が成り立つのは純粋状態に対して、かつその時のみである。

3. 情報エントロピーには加法性[2] が成り立つ。合成系の密度演算子を
$$\hat{\rho} \equiv \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)} \tag{4.18}$$
とした時、
$$\ln \hat{\rho} = \ln \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} + \hat{I}^{(1)} \otimes \ln \hat{\rho}^{(2)} \tag{4.19}$$
であるので、
$$\begin{aligned} \sigma &= -tr(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \\ &= -tr((\hat{\rho}^{(1)} \ln \hat{\rho}^{(1)}) \otimes \hat{\rho}^{(2)} + \hat{\rho}^{(1)} \otimes (\hat{\rho}^{(2)} \ln \hat{\rho}^{(2)})) \\ &= -(tr(\hat{\rho}^{(1)} \ln \hat{\rho}^{(1)}) + tr(\hat{\rho}^{(2)} \ln \hat{\rho}^{(2)})) \\ &= \sigma^{(1)} + \sigma^{(2)} \end{aligned} \tag{4.20}$$
ここで、$tr(\hat{\rho}^{(1)}) = tr(\hat{\rho}^{(2)}) = 1$ を使った。

逆に、以上の性質を満たす密度演算子の関数は、情報エントロピーの定数倍となる。

物理系に関する情報が限られている時、その制約の元で情報エントロピーが最大となる状態がもっとも実現しやすい (これは、平衡統計力学の重要な前提である)。その時、$\delta\sigma = 0$ である。情報エントロピーと熱力学的エントロピーの関係は
$$S = k_B \sigma \tag{4.21}$$
(k_B はボルツマン (Boltzmann) 定数) である。

[2]統計力学の言葉でいえば示量性 (extensive) に関係する。

4.2.1　カノニカルアンサンブル

平均エネルギー一定

$$[\hat{H}] = tr(\hat{\rho}\hat{H}) = U \tag{4.22}$$

と規格化条件 $tr(\hat{\rho}) = 1$ の元で情報エントロピー最大となる密度演算子 $\hat{\rho}$ を求めよう。これを示すには、密度演算子の変分をラグランジュの未定係数法を用いて行なう。つまり、

$$\begin{aligned} s &\equiv k_B \Big(\sigma - \beta([\hat{H}] - U) - \gamma(tr(\hat{\rho}) - 1)\Big) \\ &= k_B \Big(-tr(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) - \beta(tr(\hat{\rho}\hat{H}) - U) - \gamma(tr(\hat{\rho}) - 1)\Big) \end{aligned} \tag{4.23}$$

という量が最大となる条件を求めれば良い。

1. まず、$\delta\hat{\rho}$ に関する変分から

$$\delta s = -k_B tr(\delta\hat{\rho}((\ln\hat{\rho} + 1) + \beta\hat{H} + \gamma)) = 0 \tag{4.24}$$

である（ここで $\delta(\ln\hat{\rho}) = \hat{\rho}^{-1}\delta\hat{\rho}$ を使った cf. (4.54)). 任意の変化 $\delta\hat{\rho}$ にたいし上の式が成り立つのは

$$\hat{\rho} = \exp(-\beta\hat{H} - \gamma - 1) \tag{4.25}$$

の時である。

2. 次に β に関する変分から

$$\delta s = -k_B\delta\beta(tr(\hat{\rho}\hat{H}) - U) = 0 \tag{4.26}$$

これが任意の $\delta\beta$ にたいして成り立つためには

$$tr(\hat{\rho}\hat{H}) = U \tag{4.27}$$

でなければならない。

3. 最後に γ に関する変分から

$$\delta s = -k_B\delta\gamma(tr(\hat{\rho}) - 1) = 0 \tag{4.28}$$

したがって

$$tr(\hat{\rho}) = 1 \tag{4.29}$$

でなければならない。

式 (4.25) で γ は規格化条件により消去できて、最終結果は

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\exp(-\beta\hat{H}), \qquad Z \equiv tr(\exp(-\beta\hat{H})) \tag{4.30}$$

ここで、パラメター β が残っているが、これは (4.27) から決めるべきパラメーターで、U の関数 $\beta(U)$ である。

熱力学的関係式

$$\frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{T} \tag{4.31}$$

と比較すると、パラメータ β は、

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \tag{4.32}$$

と熱力学的温度と関係づけられる。(4.30) はカノニカルアンサンブルとよばれ、（エネルギーの平均値が一定での）熱力学平衡を表す。

式 (4.30) の分母 Z を分配関数と呼ぶ。分配関数から自由エネルギー F を

$$F = -\frac{1}{\beta}\ln Z \tag{4.33}$$

で定義する．式 (4.23) に (4.30) を代入すると，

$$s = k_B(\sigma - \beta[H] + \beta U) = \frac{1}{T}(-F + U) \tag{4.34}$$

のように，エントロピー，自由エネルギー，内部エネルギーが関連付けられる．

一般にカノニカルアンサンブルでの物理量の平均は

$$[\hat{A}] = tr(\hat{\rho}\hat{A}) = Z^{-1}tr(\exp(-\beta\hat{H})\hat{A}) \tag{4.35}$$

である。

特に、

$$[\hat{H}] = Z^{-1}tr(\exp(-\beta\hat{H})\hat{H}) = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\ln Z) \tag{4.36}$$

である。

最後に、エントロピー最大という変分条件の代わりに、自由エネルギー

$$f = tr\left(\hat{\rho}\left(\hat{H} + \frac{1}{\beta}\ln\hat{\rho}\right)\right) \tag{4.37}$$

を最小とする条件で変分しても同じカノニカル分布が得られる。

4.2.2　グランドカノニカルアンサンブル

平均エネルギー が

$$tr(\hat{\rho}\hat{H}) = U \tag{4.38}$$

で、平均個数

$$tr(\hat{\rho}\hat{N}) = N \tag{4.39}$$

および規格化条件 $tr(\hat{\rho}) = 1$ の元で情報エントロピー最大となる密度演算子 $\hat{\rho}$ を求めよう。やはり、密度演算子の変分をラグランジュの未定係数法を用いて

$$\begin{aligned} s &\equiv k_B \left(\sigma - \beta([\hat{H}] - U) - \gamma(tr(\hat{\rho}) - 1) + \beta\mu(tr(\hat{\rho}\hat{N}) - N) \right) \\ &= k_B \left(-tr(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) - \beta(tr(\hat{\rho}\hat{H}) - U) - \gamma(tr(\hat{\rho}) - 1) + \beta\mu(tr(\hat{\rho}\hat{N}) - N) \right) \end{aligned} \tag{4.40}$$

という量が最大となる条件を求めれば良い。

$\hat{\rho}$ にたいする変分を行なうと、

$$tr(\delta\hat{\rho}((\ln \hat{\rho} + 1) + \beta\hat{H} - \beta\mu\hat{N} + \gamma)) = 0 \tag{4.41}$$

任意の変化 $\delta\hat{\rho}$ にたいし上の式が成り立つのは

$$\hat{\rho} = \exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}) - \gamma - 1) \tag{4.42}$$

の時である。さらに規格化条件を考慮して、

$$\hat{\rho} = \Xi^{-1} \exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})) \tag{4.43}$$

ここで、Ξ は

$$\Xi \equiv tr(\exp(-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})) \tag{4.44}$$

で定義され、これを大分配関数と呼ぶ。密度演算子 (4.43) に対応するアンサンブルをグランドカノニカルアンサンブルと呼ぶ。

特に、

$$[\hat{H}] - \mu[\hat{N}] = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\ln \Xi) \tag{4.45}$$

および

$$[\hat{N}] = \beta^{-1}\frac{\partial}{\partial\mu}(\ln \Xi) \tag{4.46}$$

である。

4.3　問題

1. 密度行列が対角化できるとし，確率分布 $\{w_j\}$ $(0 \leq w_j \leq 1, \sum_{j=1}^{M} w_j = 1)$ に対し, 情報エントロピーを

$$\sigma = -\sum_{j=1}^{M} w_j \ln w_j, \tag{4.47}$$

で定義する.

(a)

$$x \ln x \leq 0, \quad (\text{for } 0 \leq x \leq 1) \tag{4.48}$$

を確かめなさい．等号成立はどのような場合か？

(b) $\sigma \geq 0$ を示しなさい.

(c) 情報エントロピーが 0 になる時は，純粋アンサンブルであることを示しなさい.

2. 情報エントロピーにたいして，次の不等式が成立する.

$$\sigma = -\sum_{j=1}^{M} w_j \ln w_j \leq \ln M \quad (\text{等号成立は } w_j = 1/M) \tag{4.49}$$

このことを示してみよう.

(a) 次の不等式を確認しなさい.

$$\ln x \leq x - 1 \quad (x \geq 0) \tag{4.50}$$

等号が成立するのはどのような場合か?

(b)

$$\sigma - \ln M = \sum_{j=1}^{M} w_j \ln \frac{1}{w_j M} \tag{4.51}$$

を計算し，前問の不等式を当てはめてみなさい.

3. 演算子 $\hat{X}$ の対数は，形式的には

$$\ln(\hat{X}) = \ln(\hat{I} + (\hat{X} - \hat{I})) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} (\hat{X} - \hat{I})^n \tag{4.52}$$

のように展開できる．これを使って以下のことを示しなさい.

(a) 純粋アンサンブルでは，情報エントロピー

$$\sigma = -tr(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) \tag{4.53}$$

が 0 になることを示しなさい．

(b) パラメータ t について連続で微分可能な演算子 $\hat{X}(t)$ について

$$\frac{d}{dt}\ln(\hat{X}(t)) = \left(\hat{X}(t)\right)^{-1}\left(\frac{d\hat{X}(t)}{dt}\right) \tag{4.54}$$

を示しなさい。(ヒント: $\hat{X}^{-1} = (\hat{I} + (\hat{X} - \hat{I}))^{-1}$ のテイラー展開)

4. 直積空間に対し、対角化できない場合でも (4.19) をしめそう。

(a)

$$\hat{X}^{(1)} \otimes \hat{Y}^{(2)} = (\hat{X}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)})(\hat{I}^{(1)} \otimes \hat{Y}^{(2)}) \tag{4.55}$$

とあらわされることを確認する。また、

$$[(\hat{X}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)}), (\hat{I}^{(1)} \otimes \hat{Y}^{(2)})] = 0 \tag{4.56}$$

となることを確認する。

(b) 次に互いに交換する演算子に対して、

$$\ln(\hat{X}\hat{Y}) = \ln\hat{X} + \ln\hat{Y} \tag{4.57}$$

であることを示す。
ヒント：$\hat{X} = \exp(\ln\hat{X})$ ということと、
および $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ ならば

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A})\exp(\hat{B}) \tag{4.58}$$

ということを用いる。

(c) ベキ展開可能な関数 f に対して、

$$f(\hat{X}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)}) = f(\hat{X}^{(1)}) \otimes \hat{I}^{(2)}, f(\hat{I}^{(1)} \otimes \hat{Y}^{(2)}) = \hat{I}^{(1)} \otimes f(\hat{Y}^{(2)}) \tag{4.59}$$

を示す。

(d) 以上を組み合わせて (4.19) を示せ。

(e)
$$\rho \equiv \rho^{(1)} \otimes \rho^{(2)} \otimes \rho^{(3)} \cdots \tag{4.60}$$
の場合にも、同様な関係を確かめ、情報エントロピーの加法性を示せ。

5. $x, y > 0$ の実数に対して
$$f(xy) = f(x) + f(y) \tag{4.61}$$
を満たす連続関数は、対数関数の定数倍であることを示そう。

(a)
$$f(1) = 0 \tag{4.62}$$
を示しなさい。

(b)
$$f(1/x) = -f(x) \tag{4.63}$$
を示しなさい。

(c) 整数 m について
$$f(x^m) = mf(x) \tag{4.64}$$
を示しなさい。

(d) 正の整数 n について
$$f(x^{1/n}) = \frac{1}{n}f(x) \tag{4.65}$$
を示しなさい。

(e) 正の実数 a と任意の実数 x にたいして
$$f(a^x) = xf(a) \tag{4.66}$$
が成り立つことを示しなさい。(ヒント、まず x が有理数の場合について示しなさい。)

これから、$f(b) = 1$ となる実数 $b > 0$ について、$f(b^x) = x$ となる。これは $f(x)$ が b を底とする対数関数であることを意味する。

6. カノニカル分布

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\exp(-\beta\hat{H}), \qquad Z \equiv tr(\exp(-\beta\hat{H})) \tag{4.67}$$

を考える．

(a)

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \tag{4.68}$$

を計算し，$U \equiv tr(\hat{\rho}\hat{H})$ の関数として表しなさい．

(b)

$$S = -k_B tr(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) \tag{4.69}$$

に、カノニカル分布を代入し、S を β, U, Z で表しなさい。

(c) パラメータ β は, 条件 (4.27) から U の関数、つまり $\beta = \beta(U)$ である。また分配関数は β の関数である（$Z = Z(\beta)$)。これらと、前問の結果を使って

$$\frac{\partial S}{\partial U} \tag{4.70}$$

を計算しなさい。

第5章　コヒーレント状態

この章では、レーザーや超伝導などで重要な役割を果たす、巨視的（マクロ）に位相の揃ったコヒーレント状態について触れる。

正準交換関係で表される演算子と、生成消滅演算子は互いに変換できた。正準交換関係での並進対称性を生成消滅演算子の系に持ち込むと自然にコヒーレント状態がでてくる。

5.1　観測量としての位相

第 2 章で導入したようなミクロな状態を重ねあわせて、マクロな状態を構成するのに、さまざまなモードに関する状態を単に重ね合わせただけでは、位相が互いに打ち消し合うことになる (例えば黒体放射)。

一方、2 章で導入したように、生成消滅演算子には位相の自由度を含めることができた。ところが、個数の固有状態での期待値をとると、

$$\langle n|\hat{a}(\phi)|n\rangle = 0,\ \langle n|\hat{a}^\dagger(\phi)\hat{a}(\phi)|n\rangle = n \tag{5.1}$$

であるので、位相の自由度は観測できない。3 章で導入した調和振動子と生成消滅演算子との対応でも、

$$\langle n|\hat{q}|n\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0 \tag{5.2}$$

であるので、やはり位相の自由度を取り出すことができない。結局、個数の定まった状態では、位相についての情報を得ることができない（これは後で述べる個数と位相の不確定性に関連する)。位相を観測するためには別の状態をとる必要がある。

次節以降で導入するコヒーレント状態を使うと、位相を観測量として考慮することが可能になる。コヒーレント状態では位相をそろえて重ね合わせたものであるので、巨視的に位相が観測できる。

5.2　位相演算子と不確定性

位相を観測量として扱うには、位相をエルミート演算子の形で表すことが必要である。いくつかの方法があるが、その中でディラックによる、生成消滅演算子の位相を演算子として扱う試みを紹介する。

その筋道は以下のようなものである。共役な正準交換関係を考え、

$$[\hat{N}, \hat{\phi}] = i \tag{5.3}$$

とし、さらに $\hat{\phi}$ に位相としての性格を持たせるため、

$$\hat{\phi} \equiv \hat{\phi} + 2\pi \tag{5.4}$$

という周期性を持たせることにする。この周期性をもつ演算子として $\exp(\pm i\hat{\phi})$ を考えると、(5.3) から

$$[\hat{N}, \exp(\pm i\hat{\phi})] = \mp \exp(\pm i\hat{\phi}) \tag{5.5}$$

が成り立つ．したがって，$\hat{N}$ の固有状態 $\hat{N}|N\rangle = N|N\rangle$ にたいして

$$\begin{aligned}\hat{N}\exp(\pm i\hat{\phi})|N\rangle &= ([\hat{N}, \exp(\pm i\hat{\phi})] + \exp(\pm i\hat{\phi})\hat{N})|N\rangle \\ &= (N \mp 1)\exp(\pm i\hat{\phi})|N\rangle \end{aligned} \tag{5.6}$$

なので $\exp(\pm i\hat{\phi})$ は昇降演算子と見なせ、$\hat{N}$ の固有値は整数となる。

さらに、不確定性関係 (1.105) と交換関係から、

$$\begin{gathered}\Delta n \Delta \phi \geq 1/2, \\ \Delta n \equiv \sqrt{\langle(\Delta\hat{N})^2\rangle}, \Delta\phi \equiv \sqrt{\langle(\Delta\hat{\phi})^2\rangle}\end{gathered} \tag{5.7}$$

と言う位相 $\hat{\phi}$ と数 $\hat{N}$ の不確定性関係が成り立つ。

次に、生成消滅演算子との関係を考え、形式的に

$$\hat{a} = \exp(i\hat{\phi})\sqrt{\hat{N}},\ \hat{a}^\dagger = \sqrt{\hat{N}}\exp(-i\hat{\phi}) \tag{5.8}$$

と定義してみよう。すると、

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \exp(i\hat{\phi})\hat{N}\exp(-i\hat{\phi}) - \hat{N} = 1 \tag{5.9}$$

で、生成消滅演算子の交換関係を満たしている。

しかし、上記の議論には問題がある。$\hat{N}$ の固有値は整数であったが、$\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有値は 0 または正の整数であった。この矛盾の起こる原因は、$\hat{N}$ の固有値が負を含む場合に、$\sqrt{\hat{N}}$ がエルミート演算子ではなくなることによる。

逆に生成消滅演算子の系から、(5.8) を通して、位相演算子を定義しようとすると、

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle m|\exp(i\hat{\phi})|n\rangle \tag{5.10}$$

なので、

$$\sqrt{n}\delta_{m,n-1} = \sqrt{n}\langle m|\exp(i\hat{\phi})|n\rangle \tag{5.11}$$

となり、$n \neq 0$ なら $\langle m|\exp(i\hat{\phi})|n\rangle = \delta_{m,n-1}$ から行列要素が決まる。ところが行列要素 $\langle m|\exp(i\hat{\phi})|0\rangle$ は不定である。従って、位相演算子がうまく定義できない。

ディラックの元のアイディアのままでは、生成消滅演算子に対する位相演算子は適切に定義できない。しかし、個数の期待値が十分大きい時 ($n \gg 1$) には近似的に成立し、位相と個数の不確定性関係 (5.7) が成り立つ。

なお、粒子数 $\hat{N}$ が 0 に近い時でも成り立つ位相演算子の定義はいくつか提案されている (Susskind and Glogower, Pegg and Barnett) 。

5.3　コヒーレント状態

ボソンの生成消滅演算子の交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1,\ [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \tag{5.12}$$

を不変にする変換には位相変換の他に、$\hat{a} \to \hat{a} + z$(z: 複素数) がある (正準交換関係での定数項加えることに対応)。この変換では、個数演算子 $\hat{n}$ の形が変わってしまうのであるが、独自の意味がある。この変換を使って消滅演算子の固有状態を作ることが出来るのである。また $z = |z|\exp(i\phi)$ と表すことで振幅 ($|z|$) と位相 (ϕ) の意味を持たせることが出来る。

次のユニタリー演算子

$$\hat{D}(z) = \exp(z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}) \tag{5.13}$$

をとると、ベーカー・ハウスドルフの公式 (2.66) から

$$\hat{D}^\dagger(z)\hat{a}\hat{D}(z) = \hat{a} + z,\ \hat{D}^\dagger(z)\hat{a}^\dagger\hat{D}(z) = \hat{a}^\dagger + z^* \tag{5.14}$$

となる。

　これから、

$$\hat{a}\hat{D}(z)|0\rangle = z\hat{D}(z)|0\rangle \tag{5.15}$$

となる。つまり、$|z\rangle \equiv \hat{D}(z)|0\rangle$ は消滅演算子に対する規格化された固有状態であり、これをコヒーレント状態と呼ぶ。

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle \tag{5.16}$$

のエルミート共役をとると、

$$\langle z|\hat{a}^\dagger = z^*\langle z| \tag{5.17}$$

であるので、

$$\langle z|\hat{a}|z\rangle = z,\ \langle z|\hat{a}^\dagger|z\rangle = z^*, \tag{5.18}$$

となる。

　さらにコヒーレント状態での個数の期待値と揺らぎを考えてみよう。まず、$\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ に対し、コヒーレント状態での個数の期待値は

$$n \equiv \langle z|\hat{n}|z\rangle = |z|^2 \tag{5.19}$$

である．また

$$\langle z|\hat{n}^2|z\rangle = |z|^4 + |z|^2 \tag{5.20}$$

なので、(1.104) からコヒーレント状態に対する個数の分散は

$$\langle z|(\Delta\hat{n})^2|z\rangle = \langle z|\hat{n}^2|z\rangle - (\langle z|\hat{n}|z\rangle)^2 = |z|^2 \tag{5.21}$$

である。個数の揺らぎは $\Delta n \equiv \sqrt{\langle z|(\Delta\hat{n})^2|z\rangle} = |z| = n^{1/2}$ である。

　以上のようにコヒーレント状態の振幅とその揺らぎは平均個数と関連づけられた。ところで個数と位相の揺らぎに関しては $n \gg 1$ の場合に不確定性関係 (5.7) $\Delta n\Delta\phi \geq 1/2$ が成り立つ。特にコヒーレント状態では $n \gg 1$ で最小不確定性関係に近付き、位相の揺らぎは $\Delta\phi = 1/(2n^{1/2})(= 1/(2|z|))$ となり、n (もしくは振幅) が十分大きい時には無視できる。

　これがレーザーや超伝導状態の起源である。

5.4 コヒーレント状態の時間変化、直交位相振幅と不確定性関係

コヒーレント表示での時間発展を考える。ハミルトニアンとして、

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})/2 = \hbar\omega(\hat{n} + 1/2) \tag{5.22}$$

をとろう。パラメーター z は $z = |z|\exp(i\phi)$ と振幅と位相に分けることが出来る。この時、ハイゼンベルク表示で

$$\begin{aligned} \langle z|\hat{a}(t)|z\rangle &= z\exp(-i\omega t) = |z|\exp(i(\phi - \omega t)) \\ \langle z|\hat{a}^\dagger(t)|z\rangle &= |z|\exp(-i(\phi - \omega t)) \end{aligned} \tag{5.23}$$

となる。このようにコヒーレント状態では位相変化がとらえられる。しかし、生成消滅演算子そのものはエルミートではないため観測量とは直接結び付かない。

そこで、生成消滅演算子 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ の実数部、虚数部を

$$\hat{a} \equiv \hat{x}_1 + i\hat{x}_2,\ \hat{a}^\dagger \equiv \hat{x}_1 - i\hat{x}_2 \tag{5.24}$$

のように $\hat{x}_1, \hat{x}_2$ を用いて表すと、これらは自己エルミート演算子であり、観測量に対応すると考えられる。また交換関係

$$[\hat{x}_1, \hat{x}_2] = i/2 \tag{5.25}$$

を満たす。$\hat{x}_1, \hat{x}_2$ を直交位相振幅と呼ぼう。直交位相振幅に対しては、不確定性関係

$$\Delta x_1 \Delta x_2 \geq 1/4 \tag{5.26}$$

が成り立つ。

コヒーレント状態の元では、直交位相振幅は、

$$\langle z|\hat{x}_1|z\rangle = (z + z^*)/2,\ \langle z|\hat{x}_2|z\rangle = (z - z^*)/(2i) \tag{5.27}$$

であり、これらから位相変化が観測可能である。

次にコヒーレント状態での直交位相振幅の揺らぎを考察しよう。

$$\langle z|\hat{x}_1^2|z\rangle = (z^2 + 2z^*z + (z^*)^2 + 1)/4 \tag{5.28}$$

と、$\langle z|\hat{x}_2^2|z\rangle$ のこれに対応する関係から、

$$\Delta x_1^2 = \Delta x_2^2 = 1/4 \tag{5.29}$$

が得られるので、コヒーレント状態の元で直交位相振幅は (z によらず) 最小不確定性関係をみたす。

5.5　コヒーレント状態の非直交性と完全性

消滅演算子は自己エルミートではなかったので、その固有状態は必ずしも直交系を構成しない。しかし、完全性は成り立つ。

キャンベル・ハウスドルフの公式 (5.52) を用いて、

$$\hat{D}(z) = \exp(z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}) = \exp(-|z|^2/2)\exp(z\hat{a}^\dagger)\exp(-z^*\hat{a}) \qquad (5.30)$$

が示される。これからコヒーレント状態は

$$|z\rangle = \exp(-|z|^2/2)\exp(z\hat{a}^\dagger)|0\rangle \qquad (5.31)$$

とも表すことが出来る。従って個数表示では、

$$|z\rangle = \exp(-|z|^2/2)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \qquad (5.32)$$

となる。

これからコヒーレント状態同士の内積について

$$\langle z|z'\rangle = \exp(-\frac{1}{2}|z|^2 - \frac{1}{2}|z'|^2 + z^*z') \qquad (5.33)$$

が成り立ち、コヒーレント状態は直交系を作らない。しかし、

$$|\langle z|z'\rangle|^2 = \exp(-|z-z'|^2) \qquad (5.34)$$

なので、z と z' の差が大きい時には近似的に直交する。

コヒーレント状態は

$$\frac{1}{\pi}\int |z\rangle\langle z|d^2z = \hat{I} \qquad (5.35)$$

のように完全系をなす（導出は演習問題）。

コヒーレント状態のように完全系をなしているが、直交性を満たさない系のことを過剰完全系（overcomplete set) という。

5.6　コヒーレント状態と確率分布関数

コヒーレント状態は直交系を作らないが、完全系であるということから、確率分布の表示にも使える。密度演算子 $\hat{\rho}$ に対して、コヒーレント状態の対角要素をとると

$$\langle z|\hat{\rho}|z\rangle \geq 0 \qquad (5.36)$$

が成り立つ。さらに、完全性 (5.35) から

$$tr(\hat{\rho}) = \frac{1}{\pi}\int \langle z|\hat{\rho}|z\rangle d^2z = 1 \tag{5.37}$$

である。従って、

$$Q(z) = \frac{1}{\pi}\langle z|\hat{\rho}|z\rangle \tag{5.38}$$

は確率分布関数と見なすことができる．

1. 個数の固有状態の密度演算子 ($\hat{\rho} = |n\rangle\langle n|$)

$$Q(z) = \frac{1}{\pi}\langle z|\hat{\rho}|z\rangle = \frac{1}{\pi}|\langle z|n\rangle|^2 = \frac{|z|^{2n}}{\pi n!}\exp(-|z|^2) \tag{5.39}$$

   これは $|z|$ のみの関数で，位相によらない。また $|z|$ を変数とみなした場合、$|z|^2 \approx n$ を最大値とするポアソン分布である．

2. コヒーレント状態の密度演算子 ($\hat{\rho} = |z'\rangle\langle z'|$)

$$Q(z) = \frac{1}{\pi}\langle z|\hat{\rho}|z\rangle = \frac{1}{\pi}|\langle z|z'\rangle|^2 = \frac{1}{\pi}\exp(-|z-z'|^2) \tag{5.40}$$

   これは、z' を中心とするガウス分布の形で、位相による。

3. 黒体放射の場

   まず、単一モードの光子が熱的に励起された状態（例えばナトリウムの輝線スペクトル）に対する密度演算子を求める。n 個の光子が励起される確率は

$$\begin{aligned} w_n &= \frac{\exp(-\beta n\hbar\omega)}{\sum_{m=0}^{\infty}\exp(-\beta m\hbar\omega)} \\ &= [1-\exp(-\beta\hbar\omega)]\exp(-\beta n\hbar\omega) \end{aligned} \tag{5.41}$$

   である ($\beta = 1/k_BT$)。従って密度行列は個数表示で

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_n w_n|n\rangle\langle n| \\ &= [1-\exp(-\beta\hbar\omega)]\sum_n \exp(-\beta n\hbar\omega)|n\rangle\langle n| \end{aligned} \tag{5.42}$$

となる。この時、

$$Q(z)=\frac{1}{\pi}\langle z|\hat{\rho}|z\rangle=\frac{[1-\exp(-\beta\hbar\omega)]}{\pi}\exp(-[1-\exp(-\beta\hbar\omega)]|z|^2) \tag{5.43}$$

という形になる．これは $|z|$ のみの関数で，位相によらない．また $|z|$ を変数とした場合．$|z|=0$ を最大値とするガウス分布である．

4. カオス光

さらに、平均光子数

$$\langle n\rangle=tr(\hat{\rho}\hat{n})=\frac{\exp(-\beta\hbar\omega)}{1-\exp(-\beta\hbar\omega)} \tag{5.44}$$

を使って、以上の式を書き変えることができる。つまり、$\exp(-\beta\hbar\omega)=\langle n\rangle/(1+\langle n\rangle)$ 従って、

$$\hat{\rho}=\frac{1}{1+\langle n\rangle}\sum_m\left(\frac{\langle n\rangle}{1+\langle n\rangle}\right)^m|m\rangle\langle m| \tag{5.45}$$

また、

$$Q(z)=\frac{1}{\pi(1+\langle n\rangle)}\exp\left(-\frac{|z|^2}{1+\langle n\rangle}\right) \tag{5.46}$$

このように表示しておくと、光子分布が熱的にランダムな場合のみならず、光の発生の統計的性質がランダムな場合一般にも当てはまる。たとえば、熱平衡より高い励起準位から発生した光である。

なお、個数固有状態やコヒーレント状態のエントロピーは 0 である (問題参照)。

5.7 問題

1. キャンベル・ハウスドルフ (Campbell-Hausdorff) の公式

   演算子 (もしくは行列) $\hat{X}, \hat{Y}$ に対して、$\exp(\hat{Z}(t)) \equiv \exp(t\hat{X})\exp(t\hat{Y})$ という演算子 $\hat{Z}(t)$ を求めよう。t が小さい時、テイラー展開して、

   $$\hat{Z}(t) = \log(\exp(t\hat{X})\exp(t\hat{Y})) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1}}{m}(\exp(t\hat{X})\exp(t\hat{Y}) - \hat{1})^m \tag{5.47}$$

   から、

   $$\hat{Z}(t) = t(\hat{X}+\hat{Y}) + \frac{t^2}{2}[\hat{X},\hat{Y}] + \frac{t^3}{12}[\hat{X},[\hat{X},\hat{Y}]] + \frac{t^3}{12}[[\hat{X},\hat{Y}],\hat{Y}] + O(t^4) \tag{5.48}$$

   を確認せよ。これをキャンベル・ハウスドルフ (Campbell-Hausdorff) の公式という。なお、キャンベル・ハウスドルフの公式の正確な導出と一般項の形については、連続群論の本など参照。

2. キャンベル・ハウスドルフの公式は、交換子 $[\hat{X}, \hat{Y}]$ が $\hat{X}, \hat{Y}$ と交換する時 ($[\hat{X},[\hat{X},\hat{Y}]] = [\hat{Y},[\hat{X},\hat{Y}]] = 0$)、もっと簡単に導出できる。

   (a) まず、前提条件と数学的帰納法から

   $$[\hat{X}^n, \hat{Y}] = n[\hat{X},\hat{Y}]\hat{X}^{n-1} \tag{5.49}$$

   を示す事ができる。

   (b) したがって、

   $$[\exp(t\hat{X}), \hat{Y}] = [\hat{X},\hat{Y}](t\exp(t\hat{X})) \tag{5.50}$$

   である。

   (c) 次に前問の結果を用いると、演算子に関する微分方程式

   $$\frac{d}{dt}\left(\exp(t\hat{X})\exp(t\hat{Y})\right) = \left(\hat{X}+\hat{Y}+t[\hat{X},\hat{Y}]\right)\left(\exp(t\hat{X})\exp(t\hat{Y})\right) \tag{5.51}$$

   が導かれる。

   (d) これを積分して初期条件を考えると

   $$\exp(t\hat{X})\exp(t\hat{Y}) = \exp\left(t(\hat{X}+\hat{Y}) + \frac{t^2}{2}[\hat{X},\hat{Y}]\right) \tag{5.52}$$

   となる。

3. コヒーレント状態の非直交性

   (a) Baker-Campbell-Hausdorff の公式を用いて、

   $$\hat{D}(z) = \exp(z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}) = \exp(-|z|^2/2)\exp(z\hat{a}^\dagger)\exp(-z^*\hat{a}) \tag{5.53}$$

   を示しなさい.

   (b) 前問の結果を使ってコヒーレント状態は

   $$|z\rangle = \exp(-|z|^2/2)\exp(z\hat{a}^\dagger)|0\rangle \tag{5.54}$$

   とも表すことが出来ることを確認しなさい．さらに

   $$|z\rangle = \exp(-|z|^2/2)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{5.55}$$

   を確認しなさい.

   (c) コヒーレント状態同士の内積 $\langle z|z'\rangle$ を計算しなさい.

   (d)

   $$|\langle z|z'\rangle|^2 = \exp(-|z-z'|^2) \tag{5.56}$$

   を確認しなさい．したがって，異なるコヒーレント状態は非直交だが，$|z-z'| \gg 1$ ではほぼ直交していると見なせる.

4. コヒーレント状態とポアソン分布

   コヒーレント状態で、n 個の粒子を見出す確率は、

   $$|\langle n|z\rangle|^2 = \exp(-|z|^2)\frac{|z|^{2n}}{n!} \tag{5.57}$$

   である（これはポアソン分布の形になっている)。

   (a) 確率分布 $|\langle n|z\rangle|^2$ が最大となるのは、n がいくらの時か（ヒント：n が大きい時に漸近的に成り立つスターリングの公式 $\log n! \approx n(\log n - 1)$ を使え)。

   (b) 分散も計算せよ。

5. コヒーレント状態の完全性

   コヒーレント状態の完全性を示そう。

(a) まず、

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{\pi}\int |z\rangle\langle z| d^2 z \\
= \ &\frac{1}{\pi}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}|m\rangle\langle n|\int \exp(-|z|^2)\frac{z^m(z^*)^n}{\sqrt{m!n!}}d^2 z
\end{aligned} \tag{5.58}
$$

を確認せよ。

(b) 次に

$$
\begin{aligned}
&\int \exp(-|z|^2) z^m (z^*)^n d^2 z \\
= \ &\delta_{m,n}\int \exp(-|z|^2)|z|^{2m} d^2 z
\end{aligned} \tag{5.59}
$$

を示せ（ヒント：2 次元極座標表示を用いる)。

(c) さらに、Γ 関数

$$
\int_0^{\infty} s^n \exp(-s) ds = \Gamma(n+1) = n! \tag{5.60}
$$

を使うと、完全性関係が示される。

6. (a) 個数固有状態の密度行列 ($\hat{\rho} = |n\rangle\langle n|$) が純粋状態であることを示しなさい。したがってエントロピーは 0 である。

(b) コヒーレント状態のエントロピーを求めなさい。

(c) 黒体放射の場の密度演算子を調べ、エントロピーが 0 でないことを示しなさい。

第6章　角運動量と回転とSU(2)

エルミート演算子同士の交換関係が、他のエルミート演算子になるケースを考えよう。

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \tag{6.1}$$

この時、最も単純なのは3つの演算子で閉じた関係を作る場合である。

$$[\hat{C}, \hat{A}] = i\hat{B},\ [\hat{B}, \hat{C}] = i\hat{A} \tag{6.2}$$

これは物理的には角運動量の関係を表している。また、数学的にはSU(2)のリー代数になっている。

6.1　SU(2)の代数と角運動量

上記の交換関係の記法を

$$[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = i\hat{J}_3, \qquad [\hat{J}_2, \hat{J}_3] = i\hat{J}_1, \qquad [\hat{J}_3, \hat{J}_1] = i\hat{J}_2 \tag{6.3}$$

としよう。もっと簡潔には完全反対称テンソル

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & (2\text{つの添字が等しい時}) \\ 1 & (ijk\text{が}123\text{から偶置換で得られる時}) \\ -1 & (ijk\text{が}123\text{から奇置換で得られる時}) \end{cases} \tag{6.4}$$

を使うと

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{J}_k \tag{6.5}$$

とできる。これは角運動量と関係するが、アイソスピン[1]の関係も同じ形に表現されるので、抽象的にSU(2)の代数と記そう。

[1]中性子 n と陽子 p はフェルミオンであり、質量もほぼ等しい。これらを近似的に1つの粒子の異なる量子状態として扱うことが可能で、この量子状態をアイソスピン (p, n では $I = 1/2$) という。他に、3つのパイ中間子 ($\pi^{\pm}, \pi^0$) はアイソスピン $I = 1$ である。

座標や、運動量との交換関係 (後述の (6.73) 参照）も入れてはじめて角運動量と同定すべきであるが、後で触れることにして、まずこの交換関係そのものの性質を調べよう。

6.1.1　固有値と固有状態

$\hat{\boldsymbol{J}}^2$(全角運動量に当たる) を次のように定義した時、

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 \equiv \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 \tag{6.6}$$

$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ は $\hat{J}_j$ と交換する (このようなものをカシミア (Casimir) 演算子という)。

$$[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_k] = 0, (k = 1, 2, 3) \tag{6.7}$$

$\hat{J}_3$ と $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ は互いに交換するので、同時固有状態をとることが出来る。この性質を調べよう。

定理 6.1 交換関係

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \tag{6.8}$$

にたいし、$\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_3$ の固有値を

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 |a, b\rangle = a|a, b\rangle \tag{6.9}$$

$$\hat{J}_3 |a, b\rangle = b|a, b\rangle \tag{6.10}$$

と定義する。この時、$a = j(j + 1), b = -j, -j + 1, \ldots, j - 1, j$ *(*j は整数又は半整数*)* である。

[証明]

1. エルミート共役な *2* つの演算子 $\hat{J}_\pm \equiv \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$ を導入する。これらは上昇演算子 $\hat{J}_+$、下降演算子 $\hat{J}_-$、合わせて昇降演算子と呼ばれる。

   このとき、
   $$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm, \qquad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_3 \tag{6.11}$$
   が成り立つ。

   この交換関係 *(6.11)* から

   $$\hat{\boldsymbol{J}}^2 (\hat{J}_\pm |a, b\rangle) = a(\hat{J}_\pm |a, b\rangle) \tag{6.12}$$

   $$\hat{J}_3 (\hat{J}_\pm |a, b\rangle) = (b \pm 1)(\hat{J}_\pm |a, b\rangle) \tag{6.13}$$

がなりたつ。従って $\hat{J}_\pm$ を $|a,b\rangle$ に n 回繰返しかけることで、固有値 $a, b\pm n$ の状態を作ることが出来る。しかしながらこの操作には上限、下限が存在する。

2. $(\hat{J}_+)^\dagger = \hat{J}_-$ を使って、

$$\langle a,b|\hat{J}_+\hat{J}_-|a,b\rangle \geq 0,\ \langle a,b|\hat{J}_-\hat{J}_+|a,b\rangle \geq 0 \tag{6.14}$$

となることがわかる。さらにこれと、*(6.6)* を書き直した次の式

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{J}_3^2 + \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) \tag{6.15}$$

より、$\langle a,b|a,b\rangle \neq 0$ ならば、$a \geq b^2$ でなければならない。

従って、

$$\hat{J}_+|a,b_{max}\rangle = 0 \tag{6.16}$$

を満たす b_{max} が存在しなくてはならない。同様に

$$\hat{J}_-|a,b_{min}\rangle = 0 \tag{6.17}$$

を満たす、b_{min} が存在する。なお、$b_{max} \geq b_{min}$ である。

3. ところで交換関係 *(6.11)* と *(6.15)* より昇降演算子の積は

$$\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_3(\hat{J}_3+1),\ \hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{J}_3(\hat{J}_3-1), \tag{6.18}$$

と $\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_3$ で表さられる。

さて、式 *(6.16)* は

$$\hat{J}_-\hat{J}_+|a,b_{max}\rangle = 0 \tag{6.19}$$

をも意味している。これから、

$$a = b_{max}(b_{max}+1) \tag{6.20}$$

となる。同様に

$$a = b_{min}(b_{min}-1) \tag{6.21}$$

となる。従って $b_{min} = -b_{max}$ である。

4. 昇降演算子の性質から $b_{max} - b_{min} (= 2j)$ は整数でなければならない。また、$b_{max} - b_{min} = 2b_{max}$ である。したがって、b_{max} は整数又は半整数である。まとめると $a = j(j+1), b = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$ *(*j *は整数、又は半整数)* となる。

/証明終/

今後、$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値を $j(j+1)$、3 軸成分 $\hat{J}_3$ の固有値を m とし、固有状態を $|j,m\rangle$ と記す。つまり、

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j,m\rangle = j(j+1)|j,m\rangle \tag{6.22}$$

$$\hat{J}_3|j,m\rangle = m|j,m\rangle \tag{6.23}$$

とする。

行列要素

固有状態 $|j,m\rangle$ による SU(2) の演算子の行列要素を調べよう。規格化された $|j,m\rangle$ をとると、

$$\langle j',m'|\hat{\boldsymbol{J}}^2|j,m\rangle = j(j+1)\delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \tag{6.24}$$

および、

$$\langle j',m'|\hat{J}_3|j,m\rangle = m\delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \tag{6.25}$$

が成り立つ。$\hat{J}_\pm$ の行列要素を得るには、まず、

$$\langle j,m|\hat{J}_+^\dagger\hat{J}_+|j,m\rangle = \langle j,m|(\hat{J})^2-(\hat{J}_3)^2-\hat{J}_3|j,m\rangle = [j(j+1)-m^2-m] \tag{6.26}$$

を考える。ここで、昇降演算子の性質思い起こすと、

$$\hat{J}_+|j,m\rangle = c_{j,m}^+|j,m+1\rangle \tag{6.27}$$

と表されるので、上の式と比較して

$$|c_{j,m}^+|^2 = [j(j+1)-m(m+1)] = (j-m)(j+m+1) \tag{6.28}$$

が得られる。このようにして、$c_{j,m}^+$ を位相因子を別として決めることが出来る。係数 $c_{j,m}^+$ を正の実数にとると、

$$\hat{J}_+|j,m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j,m+1\rangle \tag{6.29}$$

となる。同様にして

$$\hat{J}_-|j,m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j,m-1\rangle \tag{6.30}$$

を導くことが出来る。まとめると、

$$\langle j',m'|\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\delta_{j,j'}\delta_{m\pm1,m'} \tag{6.31}$$

6.1.2　位相と回転

交換関係 (6.11) は、$\hat{J}_{\pm} \to \exp(\pm i\phi)\hat{J}_{\pm}$($\phi$ 実数) の位相変換に対して不変である。この変換は物理的には回転に対応する。

回転を表すユニタリー演算子は、

$$\exp(-i\hat{J}_3\phi) \tag{6.32}$$

と表される。実際、ベーカー・ハウスドルフの補助定理 (2.66) を使い、

$$\exp(i\hat{J}_3\phi)\hat{J}_{\pm}\exp(-i\hat{J}_3\phi) = \hat{J}_{\pm}\exp(\pm i\phi) \tag{6.33}$$

が導かれる。

次に回転の演算子を固有状態 $|j,m\rangle$ に施してみる。m が整数の時には $\phi = 2\pi$ で元に戻る。ところが m が半整数の時は $\phi = 2\pi$ では -1 の符号をとり、$\phi = 4\pi$ で元に戻る（2 価表現)。このようなものをスピノール [2] と言う。

6.2　シュウィンガー (Schwinger) 表示

6.2.1　Schwinger-boson 表示

SU(2) の代数は、2 種類の独立したボソン生成消滅演算子によっても表現できる。つまり、

$$\begin{aligned} &[\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger] = 1,\ [\hat{a}_1, \hat{a}_1] = [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1^\dagger] = 0, \\ &[\hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger] = 1,\ [\hat{a}_2, \hat{a}_2] = [\hat{a}_2^\dagger, \hat{a}_2^\dagger] = 0, \end{aligned} \tag{6.34}$$

および

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2] = [\hat{a}_1, \hat{a}_2^\dagger] = 0 \tag{6.35}$$

としよう。

ここで、パウリ行列を使って

$$\hat{J}_i = \frac{1}{2}\sum_{j,k} \hat{a}_j^\dagger \sigma_{j,k}^{(i)} \hat{a}_k \tag{6.36}$$

[2] 電子、陽子、中性子はスピン 1/2 を持ち、スピノールで表現される

と置こう。具体的には

$$\hat{J}_1 = \frac{1}{2}[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1] \tag{6.37a}$$

$$\hat{J}_2 = \frac{1}{2i}[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1] \tag{6.37b}$$

$$\hat{J}_3 = \frac{1}{2}[\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2] \tag{6.37c}$$

である。すると $\hat{J}_i$ は SU(2) の交換関係を満たす。

さらに、

$$\hat{J}_+ \equiv \hat{J}_1 + i\hat{J}_2 = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2,\ \hat{J}_- \equiv \hat{J}_1 - i\hat{J}_2 = \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1,\ \hat{N} \equiv \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \tag{6.38}$$

と置くと、容易に

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_3,\ [\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm \hat{J}_\pm, \tag{6.39}$$

が得られる。

次に

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 \equiv \frac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) + \hat{J}_3^2$$

を導入すると、

$$[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}_3] = 0,\ \hat{\boldsymbol{J}}^2 = \left(\frac{1}{2}\right)\hat{N}\left(\frac{\hat{N}}{2} + 1\right) \tag{6.40}$$

となる。このような形にすると、角運動量の固有値の量子化が自然な形になるだけでなく、SU(N) への一般化へもつながっている。

6.2.2　角運動量のコヒーレント表示

シュウィンガー表示と前の章のコヒーレント状態を結びつけると、角運動量のコヒーレント状態が構成できる。これは、角運動量の古典的極限を考えるのに便利である。

$$\hat{D}(\lambda_1, \lambda_2) \equiv \exp(\lambda_1 \hat{a}_1^\dagger - \lambda_1^* \hat{a}_1) \exp(\lambda_2 \hat{a}_2^\dagger - \lambda_2^* \hat{a}_2) \tag{6.41}$$

と置くと、角運動量のコヒーレント状態は

$$|\lambda_1, \lambda_2\rangle = \hat{D}(\lambda_1, \lambda_2)|0\rangle \tag{6.42}$$

で定義される。

特に

$$\lambda_1 = i\sqrt{2j}\exp(-i\phi/2)\cos(\theta/2) \tag{6.43a}$$

$$\lambda_2 = i\sqrt{2j}\exp(i\phi/2)\sin(\theta/2) \tag{6.43b}$$

として、角運動量のコヒーレント状態で (6.37) の期待値をとると、

$$\langle\lambda_1,\lambda_2|\hat{J}_1|\lambda_1,\lambda_2\rangle = j\sin\theta\cos\phi \tag{6.44a}$$

$$\langle\lambda_1,\lambda_2|\hat{J}_2|\lambda_1,\lambda_2\rangle = j\sin\theta\sin\phi \tag{6.44b}$$

$$\langle\lambda_1,\lambda_2|\hat{J}_3|\lambda_1,\lambda_2\rangle = j\cos\theta \tag{6.44c}$$

古典的ベクトルの極座標表示に一致する。

6.3　軌道角運動量と球面調和関数

古典力学では、軌道角運動量は

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{q}\times\boldsymbol{p} \tag{6.45}$$

もしくは

$$\hat{L}_i = \sum_{j,k}\epsilon_{ijk}\hat{q}_j\hat{p}_k \tag{6.46}$$

とあらわされた。対応する演算子の量子論での交換関係を調べる。

6.3.1　軌道角運動量の交換関係

まず、軌道角運動量と座標、運動量との交換関係について、

$$[\hat{L}_i,\hat{q}_j] = i\hbar\sum_k\epsilon_{ijk}\hat{q}_k,\ [\hat{L}_i,\hat{p}_j] = i\hbar\sum_k\epsilon_{ijk}\hat{p}_k \tag{6.47}$$

が示される（演習問題参照）。さらにこれから

$$[\hat{L}_i,\hat{L}_j] = i\hbar\sum_k\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \tag{6.48}$$

が示される。これは、交換関係 (6.3) と（定数倍を除き）同じ形である。従って、その固有値、固有状態は

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2|l,m\rangle &= l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle \\
\hat{L}_3|l,m\rangle &= m\hbar|l,m\rangle
\end{aligned}
\tag{6.49}
$$

となる。ただし、(6.47) によって、回転演算子は座標と運動量も変換させることになる。軌道角運動量の場合は状態の一価性からスピノールのようなものは許されず、整数の角運動量のみをとる。

6.3.2　軌道角運動量の座標表示

軌道角運動量 (6.46) を、座標表示を使って表そう。

直交座標表示では、

$$
\langle \boldsymbol{q}|\hat{L}_i|\alpha\rangle = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} q_j (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial q_k} \langle \boldsymbol{q}|\alpha\rangle \tag{6.50}
$$

という形になる。

一方、極座標表示をとると、$\hat{L}_z$ は

$$
\langle \boldsymbol{q}|\hat{L}_z|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \boldsymbol{q}|\alpha\rangle \tag{6.51}
$$

と表される。

昇降演算子は

$$
\langle \boldsymbol{q}|\hat{L}_\pm|\alpha\rangle = \hbar \exp(\pm i\phi) \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \langle \boldsymbol{q}|\alpha\rangle \tag{6.52}
$$

である。

最後に

$$
\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_3^2 + \frac{1}{2}(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+) \tag{6.53}
$$

および上記の結果を用いて

$$
\langle \boldsymbol{q}|\hat{\boldsymbol{L}}^2|\alpha\rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}) \right] \langle \boldsymbol{q}|\alpha\rangle \tag{6.54}
$$

ところで、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 演算子とラプラシンアンの角度部分とは対応する。そのことを運動エネルギー演算子との対応から示そう。

$$
\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{\boldsymbol{q}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 - (\hat{\boldsymbol{q}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2 + i\hbar\hat{\boldsymbol{q}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \tag{6.55}
$$

ところで、

$$\langle \boldsymbol{q}|\hat{\boldsymbol{q}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\alpha\rangle = \boldsymbol{q}\cdot(-i\hbar\nabla\langle \boldsymbol{q}|\alpha\rangle) = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}\langle \boldsymbol{q}|\alpha\rangle \tag{6.56}$$

同様に

$$\langle \boldsymbol{q}|(\hat{\boldsymbol{q}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2|\alpha\rangle = -\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial}{\partial r}\langle \boldsymbol{q}|\alpha\rangle) \tag{6.57}$$

であるので、

$$\langle \boldsymbol{q}|\hat{\boldsymbol{L}}^2|\alpha\rangle = r^2\langle \boldsymbol{q}|\hat{\boldsymbol{p}}^2|\alpha\rangle + \hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}+2r\frac{\partial}{\partial r}\right)\langle \boldsymbol{q}|\alpha\rangle \tag{6.58}$$

6.3.3　球面調和関数

軌道角運動量 (6.46) の固有状態を、座標表示を使って表そう。

今後、回転対称な系を考え、

$$\langle \boldsymbol{q}|l,m\rangle = R(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.59}$$

と動径部分と角度部分に分離する。角度部分の $Y_l^m(\theta,\phi)$ を球面調和関数と呼ぶ。

まず、$Y_l^m(\theta,\phi)$ の ϕ 依存性は、固有値方程式

$$\langle \boldsymbol{q}|\hat{L}_z|l,m\rangle = m\hbar\langle \boldsymbol{q}|l,m\rangle \tag{6.60}$$

を (6.51) と組み合わせると、

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\theta,\phi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\phi) \tag{6.61}$$

という偏微分方程式の形になり、その解は

$$Y_l^m(\theta,\phi) \propto \exp(im\phi) \tag{6.62}$$

である。

一方、昇降演算子にたいして、

$$\langle \boldsymbol{q}|\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\langle \boldsymbol{q}|l,m\pm 1\rangle \tag{6.63}$$

である。これに (6.52) を用いて

$$\begin{aligned}&\hbar\exp(\pm i\phi)\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right]Y_l^m(\theta,\phi)\\&=\hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}Y_l^{m\pm1}(\theta,\phi)\end{aligned} \tag{6.64}$$

という漸化式が成り立つ。これから一連の Y_l^m が計算できる。

最初に Y_l^{-l} を求める。まず、$Y_l^{-l}(\theta,\phi) \propto \exp(-il\phi)$ である。これに対し下降演算子をほどこすと、

$$\begin{aligned}&\hbar\exp(-i\phi)\left[-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right]Y_l^{-l}(\theta,\phi)\\&=\hbar\exp(-i\phi)\left[-\frac{\partial}{\partial\theta}+l\cot\theta\right]Y_l^{-l}(\theta,\phi)=0\end{aligned}\tag{6.65}$$

という微分方程式が導かれる。この解は、

$$Y_l^{-l}(\theta,\phi)=N_l^{-l}\sin^l\theta\exp(-il\phi)\tag{6.66}$$

である (N_l^{-l} は規格化因子)。規格化因子は、固有状態の規格化条件満たすように次のようにとる。

$$N_l^{-l}=\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\frac{(-1)^l}{2^l l!}\tag{6.67}$$

ただし、位相に関しては $Y_l^0(0,0)$ が正の実数となるようにとった。さらに $Y_l^{-l}(\theta,\phi)$ に上昇演算子 $\hat{L}_+$ をほどこすことで、一般の $Y_l^m(\theta,\phi)$ を求めることができる。

球面調和関数の直交関係と完全性

角運動量の固有状態の規格直交性と完全性などから球面調和関数に関し以下のことがいえる。

1. 直交関係

$$\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta(Y_l^m(\theta,\phi))^*Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi))=\delta_{mm'}\delta_{ll'}\tag{6.68}$$

2. 完全性関係

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=l}(Y_l^m(\theta,\phi))^*Y_l^m(\theta',\phi'))=\frac{\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi')}{\sin\theta}\tag{6.69}$$

3. 複素共役

$$(Y_l^m(\theta,\phi))^*=(-1)^mY_l^{-m}(\theta,\phi))\tag{6.70}$$

4. 偶奇性（パリティ）

$$Y_l^m(\pi-\theta,\phi+\pi)=(-1)^lY_l^m(\theta,\phi)\tag{6.71}$$

6.4　角運動量と回転、スピン

軌道角運動量の交換関係を一般化して角運動量を定義しよう。まず、角運動量相互の関係

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k, \tag{6.72}$$

と、角運動量と座標、運動量との間に成り立つ関係

$$[\hat{J}_i, \hat{q}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{q}_k,\ [\hat{J}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{p}_k \tag{6.73}$$

がある。

6.4.1　回転

座標、運動量、角運動量などの演算子を $\hat{\boldsymbol{V}}$ で表した時、ユニタリー演算子

$$\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e}^{(i)}, \phi) \equiv \exp(-i\hat{\boldsymbol{J}} \cdot \boldsymbol{e}^{(i)}\phi/\hbar) = \exp(-i\hat{J}_i\phi/\hbar) \tag{6.74}$$

(ここで、$\boldsymbol{e}^{(i)}$ は i 軸方向の単位ベクトル）は i 軸回りの角度 ϕ の回転を表す。つまり、

$$\hat{U}^\dagger_{rot}(\boldsymbol{e}^{(i)}, \phi)\hat{V}_j\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e}^{(i)}, \phi) = \sum_{k=1}^{3} R_{jk}(\boldsymbol{e}^{(i)}, \phi)\hat{V}_k \tag{6.75}$$

である。ここで、係数行列 $R_{jk}(\boldsymbol{e}^{(i)}, \phi)$ は各々

$$R(\boldsymbol{e}^{(1)}, \phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & -\sin\phi \\ 0 & \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \tag{6.76a}$$

$$R(\boldsymbol{e}^{(2)}, \phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & 0 & \sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi \end{pmatrix} \tag{6.76b}$$

$$R(\boldsymbol{e}^{(3)}, \phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.76c}$$

である.

一般の回転とオイラー (Euler) 角

一般の回転を表すには 2 つの方法が考えられる。

1. 1 つは、ある回転軸の回りの回転にたいし、

$$\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e}, \phi) \equiv \exp(-i\hat{\boldsymbol{J}} \cdot \boldsymbol{e}\phi/\hbar) \tag{6.77}$$

と表す。ここで、単位ベクトル $\boldsymbol{e}$ は回転軸を表し、ϕ はその軸の回りの回転角度に対応する。

まず、

$$\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e}, \phi_1)\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e}, \phi_2) = \hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e}, \phi_1 + \phi_2) \tag{6.78}$$

であり、また

$$\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e}, 2\pi) = \pm 1 \tag{6.79}$$

である。

この時、回転の演算子による変換は、

$$\hat{U}^{\dagger}_{rot}(\boldsymbol{e}, \phi)\hat{V}_j\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e}, \phi) = \sum_{k=1}^{3} R_{jk}(\boldsymbol{e}, \phi)\hat{V}_k, \tag{6.80a}$$

$$R_{jk}(\boldsymbol{e}, \phi) = (\delta_{jk} - e_j e_k)\cos\phi + e_j e_k - \sum_{l} \epsilon_{jkl} e_l \sin\phi \tag{6.80b}$$

（導出は問題参照）である。この係数行列は、単位ベクトル $\boldsymbol{e}$ を不変に保つことが示せる。

$$\sum_{k} R_{jk} e_k = e_j \tag{6.81}$$

ここで、$(\boldsymbol{e})^2 = 1$ と ϵ_{jkl} が反対称であることを使った。さらに、

$$\sum_{k} R_{jk}(\boldsymbol{e}, \phi_1) R_{kl}(\boldsymbol{e}, \phi_2) = R_{jl}(\boldsymbol{e}, \phi_1 + \phi_2) \tag{6.82}$$

なので、$R(\boldsymbol{e}, \phi)$ は単位ベクトル $\boldsymbol{e}$ を回転軸とする回転に当たる。係数行列 $R_{i,j}$ は 3 次元の直交行列の関係を満たす。

$$\sum_{j=1}^{3} R_{ij} R_{kj} = \delta_{ik} \tag{6.83}$$

2. もう一つは、剛体の回転に対するオイラー角を使う。まず剛体を $\boldsymbol{e}^{(3)}$ 軸の回りに角度 α だけ回転させる。この過程で、剛体に固定した座標軸が $\{\boldsymbol{e}^{(j)}\}$ が $\{\boldsymbol{e}'^{(j)}\}$ と変換する。ただし、$\boldsymbol{e}^{(3)} = \boldsymbol{e}'^{(3)}$ である。次に新しい座標軸 $\boldsymbol{e}'^{(2)}$ の回りに角度 β だけ回転する。剛体に固定した座標軸は $\{\boldsymbol{e}'^{(j)}\}$ が $\{\boldsymbol{e}''^{(j)}\}$ と変換する。最後に 座標軸 $\boldsymbol{e}''^{(3)}$ の回りに角度 γ だけ回転する。

   この時、回転を表す演算子は

$$\begin{aligned}&\hat{U}_{rot}(\alpha\beta\gamma)\\ &= \exp(-i\hat{J}''_3\gamma/\hbar)\exp(-i\hat{J}'_2\beta/\hbar)\exp(-i\hat{J}_3\alpha/\hbar)\end{aligned} \tag{6.84}$$

   ただし、$\hat{J}'_2, \hat{J}''_3$ は変換された軸の回りの角運動量である。これはまた、元の座標軸周りの回転演算子で表示すると、

$$\begin{aligned}&\hat{U}_{rot}(\alpha\beta\gamma)\\ &= \exp(-i\hat{J}_3\alpha/\hbar)\exp(-i\hat{J}_2\beta/\hbar)\exp(-i\hat{J}_3\gamma/\hbar)\end{aligned} \tag{6.85}$$

   と表すことができる。

6.4.2 スカラー演算子、ベクトル演算子、テンソル演算子

1. スカラー演算子

   角運動量演算子と交換する演算子をスカラー演算子 $\hat{S}$ と呼ぶ。

$$[\hat{J}_j, \hat{S}] = 0 \tag{6.86}$$

   スカラー演算子は回転に対して不変な演算子である。

$$\hat{U}^\dagger_{rot}(\boldsymbol{e},\phi)\hat{S}\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e},\phi) = \hat{S} \tag{6.87}$$

   これまでの上げたもののうち、スカラー演算子の例は、$\hat{\boldsymbol{q}}^2, \hat{\boldsymbol{p}}^2, \hat{\boldsymbol{J}}^2$ である。スカラー演算子の関数もスカラー演算子として振舞う。

2. ベクトル演算子

   角運動量演算子と次の交換関係満たす演算子 $\hat{V}_j$

$$[\hat{J}_i, \hat{V}_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar\hat{V}_k \tag{6.88}$$

をベクトル演算子と呼ぶ。ベクトル演算子は回転に対して

$$\hat{U}^{\dagger}_{rot}(\boldsymbol{e},\phi)\hat{V}_i\hat{U}_{rot}(\boldsymbol{e},\phi) = \sum_{j=1}^{3} R_{ij}(\boldsymbol{e},\phi)\hat{V}_j \tag{6.89}$$

と振舞う。今まで上げたもので、ベクトル演算子の例は $\hat{\boldsymbol{q}}, \hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{J}}$ である。

3. テンソル演算子

6.4.3　スピン

角運動量の交換関係 (6.72),(6.73) を満たす演算子の中には、軌道運動量とは異なり、$\hat{J}^2$ が座標や運動量とによらないもの（つまり、$\hat{q}, \hat{p}$ と交換する）があり、これらをスピン（内部角運動量）とよぶ。スピンの大きさは各素粒子に固有のもので、例えば、電子、陽子、中性子、ニュートリノ、ミューオンはスピン 1/2, 光子はスピン 1、パイ中間子はスピン 0 をとる。[3]

一般には粒子系の全角運動量は、軌道角運動量と（複数の粒子の）スピンの合成角運動量になる。

6.5　角運動量の合成

6.5.1　2 つの角運動量の合成

異なる部分空間にある、2 つの角運動量演算子 $\hat{J}^{(1)}_j$ 及び $\hat{J}^{(2)}_j$ を考える $\hat{J}^{(1)}_j, \hat{J}^{(2)}_j$ の各成分は通常の角運動量の交換関係を満たす。

$$\begin{aligned}[\hat{J}^{(1)}_i, \hat{J}^{(1)}_j] &= i\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{J}^{(1)}_k \\ [\hat{J}^{(2)}_i, \hat{J}^{(2)}_j] &= i\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{J}^{(2)}_k \end{aligned} \tag{6.90}$$

しかし、異なる部分空間同士の一組の演算子は交換する。

$$[\hat{J}^{(1)}_i, \hat{J}^{(2)}_j] = 0 \tag{6.91}$$

[3]相対論と量子論を結び付けると、スピンが半整数のものはフェルミオン、整数のものはボソンという関係が示せる。

全角運動量は

$$\hat{J}_k \equiv \hat{J}_k^{(1)} + \hat{J}_k^{(2)} \tag{6.92}$$

で定義する。

全角運動量の交換関係は (6.90) と (6.91) から、

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{J}_k \tag{6.93}$$

である。

この時、基底ケットの選び方として、次の 2 種類がある。

1. $(\hat{J}^{(1)})^2, (\hat{J}^{(2)})^2, \hat{J}_3^{(1)}, \hat{J}_3^{(2)}$ の同時固有ケットをとり、$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ と記されるもの。

2. 全角運動量 $(\hat{J})^2, \hat{J}_3$ の固有ケット、同時に $(\hat{J}^{(1)})^2, (\hat{J}^{(2)})^2$ の固有ケットにも出来る。これを、$|j_1, j_2; J, M\rangle$ と記す。

定理 6.2 角運動量 j_1 と、角運動量 j_2 という状態があったとして、それらの合成系を全角運動量の固有状態に組み直すと、全角運動量の大きさの可能な値は

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \cdots, j_1 + j_2 \tag{6.94}$$

である。

全角運動量の大きさ j の各値に対して $2j+1$ 個の状態からなる $2j+1$ 多重項が一つずつある。

[証明]

1. ケット $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ は $\hat{J}_3$ の固有ケットであり、対応する固有値は

$$M = m_1 + m_2 \tag{6.95}$$

である。

2. J の値の一つ一つに対応して、全角運動量の線形独立な固有ケット $(2J+1)$ 個からなる列がいくつか定められる。列の個数を $N(J)$ とする。一つの列に属するケットは $\hat{J}_+$ または $\hat{J}_-$ を繰返し適用することによって互いに他のものから導き出され、M のとりうる $(2J+1)$ 個の値 $-J, -J+1, \ldots, +J$ にそれぞれ対応する。

それゆえ、固有値 M の縮退の位数を $n(M)$ で表せば、

$$n(M) = \sum_{J \geq |M|} N(J) \tag{6.96}$$

従って

$$N(J) = n(J) - n(J+1) \tag{6.97}$$

ゆえに $N(J)$ を得るためには M のとりうるすべての値に対して $n(M)$ を決めれば良い。ところで、$n(M)$ は

$$M = m_1 + m_2$$

となるような組 (m_1, m_2) の個数である。これを数え上げるには、図表 を使うと分かりやすい。各組 (m_1, m_2) は縦座標 m_1、横座標 m_2 によって表され、$n(M)$ は対角線 $M = m_1 + m_2$ の上にある点の個数である。具体的に考えるため、$j_1 > j_2$ とすれば、

$$n(M) = \begin{cases} 0 & (|M| > j_1 + j_2 \text{のとき}) \\ j_1 + j_2 + 1 - M & (j_1 + j_2 \geq |M| \geq |j_1 - j_2| \text{ のとき}) \\ 2j_2 + 1 & (|j_1 - j_2| \geq |M| \geq 0 \text{ のとき}) \end{cases} \tag{6.98}$$

これらから、

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \cdots, |j_1 - j_2| \text{ に対して } N(J) = 1 \tag{6.99}$$

となる。

6.5.2　クレブシュ・ゴルダン (Clebsch-Gordan) 係数

2 つの表示 $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ と $|j_1, j_2; J, M\rangle$ の間の変換を考える。

$$|j_1, j_2; J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\langle j_1, j_2; m_1, m_2|j_1, j_2; J, M\rangle \tag{6.100}$$

ここで、

$$\sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\langle j_1, j_2; m_1, m_2| = 1 \tag{6.101}$$

を用いた。この変換行列の要素 $\langle j_1, j_2; m_1, m_2|j_1, j_2; J, M\rangle$ をクレブシュ・ゴルダン係数 (以下では記号を省略して $\langle j_1, j_2; m_1, m_2|J, M\rangle$ とする) と呼

ぶ。これは実数に選ぶことができる（すぐ後に述べる実係数の漸化式から、どれか一つの要素を実数にとると、残りはすべて実数)。また、以下の性質を持つ。

1. 選択則
$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2,\ M = m_1 + m_2 \tag{6.102}$$
の時にのみ 0 でない。

2. 直交性
$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J', M' \rangle = \delta_{J,J'} \delta_{M,M'} \tag{6.103a}$$
$$\sum_{J,M} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle j_1, j_2; m_1', m_2' | J, M \rangle = \delta_{m_1,m_1'} \delta_{m_2,m_2'} \tag{6.103b}$$
もともと、クレブシュ・ゴルダン係数はユニタリー変換の係数であり、係数を実数になるようにとったことによる。

また、最初の関係で $J = J', M = M'$ と置くと規格化条件
$$\sum_{m_1, m_2} |\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle|^2 = 1 \tag{6.104}$$
が成り立つ。

3. 漸化式

等式 (6.100) の両辺に $\hat{J}_\pm$ を適用すると
$$\begin{aligned} &\sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1, j_2; m_1 \mp 1, m_2 | J, M \rangle \\ &+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mp 1 | J, M \rangle \end{aligned} \tag{6.105}$$
が得られる。

特に、漸化式を繰返し使うことにより、クレブシュ・ゴルダン係数を求めることがができる。定数倍の不定性は残るが、規格化条件により定めることができる。

6.6 問題

1. スピン歳差運動 (NMR 関連)

   スピンの歳差運動をハイゼンベルク表示で扱おう。ハミルトニアン

$$H = -\left(\frac{eB}{mc}\right)\hat{S}_z(t) = \omega \hat{S}_z(t) \tag{6.106}$$

   を用い演算子 $\hat{S}_x(t), \hat{S}_y(t)$ および $\hat{S}_z(t)$ に対するハイゼンベルクの運動方程式を書け。これらの方程式を解いて、$\hat{S}_{x,y,z}$ を時間の関数として求めよ。

2. 軌道角運動量

   軌道角運動量を

$$\hat{L}_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \hat{q}_j \hat{p}_k \tag{6.107}$$

   のように定義しよう。

   (a) まず、軌道角運動量と、座標、運動量の間の交換関係

$$[\hat{L}_i, \hat{q}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{q}_k,\ [\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{p}_k \tag{6.108}$$

   を確かめよ。

   (b) 次にこれらと、完全反対称テンソル ϵ_{ijk} について成り立つ公式

$$\sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \epsilon_{mnk} = \delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm} \tag{6.109}$$

   を使って

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \tag{6.110}$$

   を示せ。

3. 軌道角運動量と交換関係

$$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{V}_k \tag{6.111}$$

を示すベクトル演算子 $\hat{\boldsymbol{V}}$ を考える。この時、次のユニタリー変換

$$\exp(i\hat{L}_i\phi/\hbar)\hat{V}_j\exp(-i\hat{L}_i\phi/\hbar) \tag{6.112}$$

を計算し、これが i 軸回りの回転を表すことを示せ。

ヒント１：(6.109) を使う。ヒント 2：3 次まで計算すると、それより高次は同じ計算の繰り返し。

4. 球面調和関数

0 次の球面調和関数 Y_0^0、1 次の球面調和関数 $Y_1^{\pm1}, Y_1^0$、2 次の球面調和関数 $Y_2^{\pm2}, Y_2^{\pm1}, Y_1^0$ を計算せよ。パリティなどの関係も調べよ。また、振幅 $|Y_l^m|^2$ を角度の関数として表示してみよ。

5. ベクトル公式

(a) 角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ とベクトル演算子 $\hat{\boldsymbol{V}}$ および、係数ベクトル $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ を考える。

$$[(\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}), (\boldsymbol{v}\cdot\hat{\boldsymbol{V}})] = i\hbar((\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{v})\cdot\hat{\boldsymbol{V}}) \tag{6.113}$$

が成り立つことを示せ。なお、$(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{v})_i = \sum_{jk}\epsilon_{ijk}u_jv_k$ である。

(b) 上記の結果を用い，(6.80) を示しなさい.
なお，

$$\hat{V}_j \equiv \hat{\boldsymbol{V}}\cdot\boldsymbol{j} \tag{6.114}$$

($\boldsymbol{j}$ は直交座標 j 方向の単位ベクトル）とする.

6. スカラー演算子、ベクトル演算子

スカラー演算子 $\hat{S}$ 、ベクトル演算子 $\hat{\boldsymbol{V}}, \hat{\boldsymbol{W}}$ から、別の演算子の合成を考える。

(a) スカラー演算子 $\hat{S}$ の演算子の関数

$$f(\hat{S}) \tag{6.115}$$

はスカラー演算子の交換関係を満たすことを確認せよ。

(b) スカラー演算子とベクトル演算子の積

$$\hat{S}\hat{\boldsymbol{V}} \tag{6.116}$$

がベクトル演算子であることを確認せよ。

(c) ベクトル演算子同士の積

$$\sum_i \hat{V}_i \hat{W}_i \tag{6.117}$$

はスカラー演算子であることを確認せよ。これは、ベクトル記法を用い、$\hat{\boldsymbol{V}} \cdot \hat{\boldsymbol{W}}$ とも表される。

特に、$\hat{\boldsymbol{V}}^2$ 及びその関数はスカラー演算子である。

(d) ベクトル演算子同士の積

$$\sum_{ij} \epsilon_{ijk} \hat{V}_i \hat{W}_j \tag{6.118}$$

はベクトル演算子であることを確認せよ。これは、ベクトル記法を用い、$\hat{\boldsymbol{V}} \times \hat{\boldsymbol{W}}$ とも表される。

‘

第7章　力学的対称性

7.1　2次元等方調和振動子

7.2　3次元等方調和振動子

7.3　水素原子

水素原子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\hat{r}} \tag{7.1}$$

である。ここで、

$$\hat{r} = \sqrt{\sum_j \hat{q}_j^2} \tag{7.2}$$

このハミルトニアンは回転に対し不変なため、軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$ を保存量として持つ。さらに次の演算子を考える。

$$\hat{B}_i = \frac{1}{2m_e}\sum_{j,k}\epsilon_{ijk}(\hat{L}_j\hat{p}_k - \hat{p}_j\hat{L}_k) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{\hat{q}_i}{\hat{r}} \tag{7.3}$$

ベクトル記法で表すと次のようになる。

$$\hat{\boldsymbol{B}} = \frac{1}{2m_e}(\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{L}}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{\hat{\boldsymbol{x}}}{\hat{r}} \tag{7.4}$$

ベクトル $\hat{\boldsymbol{B}}$ をランゲ・レンツ (Runge-Lenz) ベクトル[1] という。

[1] これは既に古典力学でのケプラー（Kepler) 運動で保存量であることが知られていたら（Lagrange)。量子力学の水素原子に応用したのは、1926 年のパウリ (Pauli) である。

ランゲ・レンツベクトルは $\hat{H}$ と可換な保存量である。これを示すために以下の公式を使う。

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{7.5a}$$
$$[\hat{L}_i, \hat{q}_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{q}_k \tag{7.5b}$$
$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{p}_k \tag{7.5c}$$
$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{L}_k \tag{7.5d}$$
$$[\hat{p}_i, \frac{1}{\hat{r}}] = i\hbar\frac{\hat{q}_i}{\hat{r}^3} \tag{7.5e}$$
$$[\hat{L}_i, \frac{1}{\hat{r}}] = [\hat{L}_i, \hat{\boldsymbol{p}}^2] = 0 \tag{7.5f}$$

また完全反対称テンソル ϵ_{ijk} に関して次の公式が成り立つ。

$$\sum_k \epsilon_{ijk}\epsilon_{nmk} = \delta_{im}\delta_{jn} - \delta_{in}\delta_{jm} \tag{7.6}$$

これらを用いて次の交換関係を導くことができる。

$$[\frac{1}{\hat{r}}, \hat{B}_i] = \frac{-i\hbar}{2m_e}\left[(\hat{p}_i\frac{1}{\hat{r}} + \frac{1}{\hat{r}}\hat{p}_i) - \sum_k(\hat{p}_k\frac{\hat{q}_i\hat{q}_k}{\hat{r}^3} + \frac{\hat{q}_i\hat{q}_k}{\hat{r}^3}\hat{p}_k)\right] \tag{7.7a}$$
$$[\hat{\boldsymbol{p}}^2, \hat{B}_i] = -i\hbar\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left[(\hat{p}_i\frac{1}{\hat{r}} + \frac{1}{\hat{r}}\hat{p}_i) - \sum_k(\hat{p}_k\frac{\hat{q}_i\hat{q}_k}{\hat{r}^3} + \frac{\hat{q}_i\hat{q}_k}{\hat{r}^3}\hat{p}_k)\right] \tag{7.7b}$$

これらから、ハミルトニアンとの交換関係は、

$$[\hat{H}, \hat{B}_i] = 0 \tag{7.8}$$

となる。

ランゲ・レンツベクトルの性質を調べよう。

$$[\hat{B}_i, \hat{B}_j] = -\frac{2i\hbar}{m_e}\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{H} \tag{7.9a}$$
$$[\hat{L}_i, \hat{B}_j] = i\hbar\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{B}_k \tag{7.9b}$$

ハミルトニアン $\hat{H}$ は $\hat{L}_i$ 及び $\hat{B}_i$ と可換であるから、特定のエネルギー状態を考えることにすると、$\hat{H}$ をエネルギー固有値 E で置き換えることができる。そこで、交換関係を見やすい形にするために、

$$\hat{A}_i = \left(-\frac{m_e}{2E}\right)^{1/2} \hat{B}_i \tag{7.10}$$

と定義する。水素原子の束縛エネルギーは負であることに注意しよう。すると $\hat{L}_i$ および $\hat{A}_i$ の交換関係は以下のように整理される。

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \tag{7.11a}$$

$$[\hat{L}_i, \hat{A}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{A}_k \tag{7.11b}$$

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \tag{7.11c}$$

さらに

$$\hat{M}_i = \frac{1}{2}(\hat{L}_i + \hat{A}_i),\ \hat{N}_i = \frac{1}{2}(\hat{L}_i - \hat{A}_i), \tag{7.12}$$

によって定義される $\hat{M}_i, \hat{N}_i$ を用いて書き換えると

$$[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{M}_k \tag{7.13a}$$

$$[\hat{N}_i, \hat{N}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{N}_k \tag{7.13b}$$

$$[\hat{M}_i, \hat{N}_j] = 0 \tag{7.13c}$$

このようにすると、互いに 2 つの独立な $SU(2)$ のリー代数の直和になっている。

$SU(2)$ もしくは角運動量の交換関係の結果を利用すると、固有状態は $\hat{\boldsymbol{M}}^2$ と $\hat{M}_3$, $\hat{\boldsymbol{N}}^2$ と $\hat{N}_3$ の固有値によって決まる。

$$\hat{\boldsymbol{M}}^2 = a(a+1)\hbar^2 \qquad (a = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots) \tag{7.14a}$$

$$\hat{M}_3 = \mu\hbar \qquad (\mu = -a, -a+1, \dots, a) \tag{7.14b}$$

$$\hat{\boldsymbol{N}}^2 = b(b+1)\hbar^2 \qquad (b = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots) \tag{7.14c}$$

$$\hat{N}_3 = \nu\hbar \qquad (\nu = -b, -b+1, \dots, b) \tag{7.14d}$$

ところで、ベクトルの関係式から

$$\hat{\boldsymbol{B}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{B}} = 0 \tag{7.15}$$

とランゲ・レンツベクトルは軌道角運動量と直交することが示せる。従って

$$\hat{\boldsymbol{M}}^2 = \hat{\boldsymbol{N}}^2 = \frac{1}{4}(\hat{\boldsymbol{L}}^2 + \hat{\boldsymbol{A}}^2) \tag{7.16}$$

である。このことから固有状態の量子数は $a = b$ でなくてはならない。また、若干の計算の後

$$\hat{\boldsymbol{A}}^2 = -\frac{m_e}{2E}\hat{\boldsymbol{B}}^2 = -(\hat{\boldsymbol{L}}^2 + \hbar^2) - \frac{m_e}{2E}(\frac{e^2}{4\pi\epsilon})^2 \tag{7.17}$$

であることが示せるので、

$$\frac{1}{4}(\hat{\boldsymbol{L}}^2 + \hat{\boldsymbol{A}}^2) = -\frac{1}{4}(\hbar^2 + \frac{m_e}{2E}(\frac{e^2}{4\pi\epsilon})^2) = a(a+1)\hbar^2 \tag{7.18}$$

となる。これよりエネルギー固有値が

$$E = -\frac{m_e}{2\hbar^2(2a+1)^2}(\frac{e^2}{4\pi\epsilon})^2 \tag{7.19}$$

と求まる。ここで $2a + 1 = n$ とおけば、$a = 0, 1/2, 1, \ldots$ であるから $n = 1, 2, 3, \ldots$ となり、これが主量子数である。特定の主量子数当たり、n^2 個の縮退がある。

軌道角運動量量子数との関係は

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{M}} + \hat{\boldsymbol{N}} \tag{7.20}$$

である。角運動量の合成則を使うと、l のとり得る値は $|a - b| \leq l \leq a + b$ であり、$a = b$ であるから、$l = 0, 1, \ldots, n - 1$ となる。

連続群としてみた時 $SU(2) \otimes SU(2)$ の変換に対し、水素原子の特定のエネルギー固有状態が不変ということになる。

第8章　近似法

8.1　時間を含まない摂動論

8.1.1　縮退のない場合

次のハミルトニアンの固有値、固有状態議論したい。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V} \tag{8.1}$$

ここで、$\hat{H}_0$ は厳密に固有状態分かっているとする。

$$\hat{H}_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \tag{8.2}$$

解くべき固有値問題は、

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{8.3}$$

である。

エネルギー準位のずれ

$$\Delta_n = E_n - E_n^0 \tag{8.4}$$

を導入すると、次のように書き直される。

$$(E_n^0 - \hat{H}_0)|n\rangle = (\lambda\hat{V} - \Delta_n)|n\rangle \tag{8.5}$$

基本的には逆演算子 $(E_n^0 - \hat{H}_0)^{-1}$ をかけるとこの方程式解ける。

しかし、上の式の右辺に含まれる $|n^{(0)}\rangle$ のような状態の扱いを考慮しなければばならない。

そこで次のような射影演算子導入する。

$$\hat{Q} \equiv 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{m\neq n} |m^0\rangle\langle m^0|,\ \hat{Q}^2 = \hat{Q} \tag{8.6}$$

次の式が

$$\langle n^{(0)}|(\lambda\hat{V}-\Delta_n)|n\rangle = 0 \tag{8.7}$$

成り立つので、

$$\hat{Q}(\lambda\hat{V}-\Delta_n)|n\rangle = (\lambda\hat{V}-\Delta_n)|n\rangle \tag{8.8}$$

である。

　したがって、(8.5) の一つの解は、

$$|n\rangle = (E_n^0-\hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}(\lambda\hat{V}-\Delta_n)|n\rangle \tag{8.9}$$

である。ところが、$\lambda\to 0$ の時、$|n\rangle\to|n^{(0)}\rangle,\ \Delta_n\to 0$ となるべきだが、上の解はこの条件を満たしていない。条件に合う解は、

$$|n\rangle = c_n(\lambda)|n^{(0)}\rangle + (E_n^0-\hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}(\lambda\hat{V}-\Delta_n)|n\rangle \tag{8.10}$$

である。ここで、

$$\lim_{\lambda\to 0} c_n(\lambda) = 1 \tag{8.11}$$

であり、

$$c_n(\lambda) = \langle n^{(0)}|n\rangle \tag{8.12}$$

である ($\hat{Q}$ と $(E_n^0-\hat{H}_0)^{-1}$ が交換することに注意)。。

　規格化条件として、

$$\langle n^{(0)}|n\rangle = 1 \tag{8.13}$$

を選ぶと、

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + (E_n^0-\hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}(\lambda\hat{V}-\Delta_n)|n\rangle \tag{8.14}$$

また、

$$\Delta_n = \langle n^{(0)}|\lambda\hat{V}|n\rangle \tag{8.15}$$

これら (8.14),(8.15) を逐次的にとくと摂動の結果でる。

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \cdots \tag{8.16}$$

$$\Delta_n = \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \cdots \tag{8.17}$$

と置くと、

1. 1 次摂動

(a) エネルギー

$$\Delta_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle \tag{8.18}$$

(b) 状態

$$|n^1\rangle = (E_n^0 - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}\hat{V}|n^{(0)}\rangle \tag{8.19}$$

ここで、$\hat{Q}\Delta_n|n^{(0)}\rangle = 0$ を使った。

2. 2 次摂動

(a) エネルギー

$$\begin{aligned}\Delta_n^{(2)} &= \langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(1)}\rangle \\ &= \langle n^{(0)}|\hat{V}(E_n^0 - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}\hat{V}|n^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{8.20}$$

(b) 状態

$$\begin{aligned}|n^2\rangle &= (E_n^0 - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}\hat{V}(E_n^0 - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}\hat{V}|n^{(0)}\rangle \\ &\quad - (E_n^0 - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}\langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle(E_n^0 - \hat{H}_0)^{-1}\hat{Q}\hat{V}|n^{(0)}\rangle\end{aligned} \tag{8.21}$$

8.1.2 縮退のある場合

8.2 時間を含む摂動論

8.2.1 相互作用表示

第9章　散乱の理論

次のハミルトニアンの固有値、固有状態議論したい。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V \tag{9.1}$$

ここで、$\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \tag{9.2}$$

また、摂動項 $\hat{V}$ は局所的である。

$\hat{H}_0$ の固有状態を $|\phi\rangle$ とする。

$$\hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle \tag{9.3}$$

解くべき方程式

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{9.4}$$

(注意：ここでのエネルギー E は無摂動状態と同じものであるが、これは摂動項 $\hat{V}$ の局所性により保証される)。

解は、

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + (E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon)^{-1}\hat{V}|\psi^{(\pm)}\rangle \tag{9.5}$$

これはリップマン・シュウィンガー (Lipmann-Schwinger) 方程式と呼ばれるものである。

9.1　ボルン (Born) 近似

第10章　ゲージ変換

一様に位相を変えても、観測される物理現象には影響を与えない。ところで、位相が場所により（もしくは時間により）変化している場合にはどうなるだろうか？この位相変化によって観測される物理量が変わらないと言う要請をすると、ゲージ場が自然に導かれることになる。

10.1　位相とゲージ変換

これまで、ユニタリー演算子が重要な役割を果たすことを見てきた。ユニタリー演算子のうち、もっとも単純なものは

$$U = \exp(i\Lambda) \tag{10.1}$$

であり、これによるユニタリー変換は任意の演算子に対し、

$$U^\dagger \hat{A} U = \hat{A} \tag{10.2}$$

なので、物理量を不変に保ったままになる。

ここで、Λ を定数ではなく、座標 $\hat{q}$ の関数 $\Lambda(\hat{q})$ とするとどうなるだろうか？当然座標および座標の関数は、この変換によって不変である。運動量 $\hat{p}$ は

$$\begin{aligned}
\exp(-i\Lambda(\hat{q}))\hat{p}\exp(i\Lambda(\hat{q})) &= \exp(-i\Lambda(\hat{q}))\,[\hat{p}, \exp(i\Lambda(\hat{q}))] + \hat{p} \\
&= \exp(-i\Lambda(\hat{q}))(-i\hbar)\nabla\exp(i\Lambda(\hat{q}) + \hat{p} \\
&= \hat{p} + \hbar\nabla\Lambda
\end{aligned} \tag{10.3}$$

と変化する。

この位相変化によって観測結果が変わらないと言う要請をすると、どうなるであろうか？このためには、運動量を観測量ととらえるのではなく、

$$\hat{p} - A \tag{10.4}$$

と言う組合せの観測量を考え、上記の位相変換にともなう運動量の変化分を打ち消すように A が変換する

$$A \to A' = A + \hbar \nabla \Lambda \tag{10.5}$$

ことを要請すると良い。この関係式は電磁場のベクトルポテンシャルに対するゲージ変換に他ならない。

第11章　場の理論

11.1　クライン・ゴルドンの場

第2章でも触れたように生成消滅演算子を各モードについて重ね合わせると、場の量子化が出来る。その例として、次の波動方程式をとる。

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + m^2\right]\phi(x) = 0 \tag{11.1}$$

これをフーリエ変換したものから、

$$\omega^2 - c^2k^2 - m^2 = 0 \tag{11.2}$$

が成り立つ。

各モードについて、拘束条件をつけた上で、生成消滅演算子の重ね合わせをとると、

$$\int d^3k d\omega \tag{11.3}$$

11.2　電磁場

付 録A　超関数とデルタ関数

A.1　デルタ関数

任意の関数 $f(x)$（と言っても制限あるが） に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta(x-y) = f(y) \tag{A.1}$$

が成り立つ時、$\delta(x)$ を Dirac のデルタ関数と呼ぶ。また、デルタ関数は、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx\delta(x) &= 1 \\ \delta(x) &= 0 \ (x \neq 0) \end{aligned} \tag{A.2}$$

と言う形でも定義できる。

主な性質。

$$\delta(x) = \delta(-x) \tag{A.3}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \tag{A.4}$$

$$x\delta(x) = 0 \tag{A.5}$$

連続な関数 $f(x)$ のデルタ関数は、

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i) \tag{A.6}$$

である。ただし、x_i は $f(x)$ の零点

$$f(x_i) = 0$$

である。

デルタ関数の表現

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx)dk \tag{A.7}$$

A.2　階段関数

次の階段関数 (Heaviside)

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1/2 & x = 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \tag{A.8}$$

は Dirac のデルタ関数と密接に関係する。つまり、

$$\frac{d}{dx}H(x) = \delta(x) \tag{A.9}$$

付 録B　行列とリー代数

付 録C　解析力学

量子論のためには、古典力学を抽象化した解析力学の形にしておくことが有用である。こうすると、変分原理で物理法則が一般的に扱え、対称性なども見通し良くなる。また、統計力学でも、多自由度の問題の変分原理と言うことで、密接に関連する。ここでは、解析力学の復習をし、場の解析力学へ拡張する。

C.1　解析力学

C.1.1　最小作用の原理

自由度が N の物理系の一般化座標と一般化速度とを、それぞれ $q_i, \dot{q}_i (i = 1, 2, \ldots N)$ とし、その物理系のラグランジアン

$$L(q; \dot{q}) \tag{C.1}$$

が与えられているとする。この時、作用と言う量

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q; \dot{q}) \tag{C.2}$$

を定義しよう。作用が最小となる条件を調べてみる。

変数 $q_i, \dot{q}_i$ を微小変化させた時、作用は

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q; \dot{q}) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right] \end{aligned} \tag{C.3}$$

となる。右辺第 2 項は、

$$\delta \dot{q}_i = \delta \frac{dq_i}{dt} = \frac{d}{dt} \delta q_i \tag{C.4}$$

を用いると、

$$\begin{aligned}\int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\frac{d}{dt}\delta q_i &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i\right) - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\delta q_i\right] \\ &= -\int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\delta q_i \end{aligned} \tag{C.5}$$

ただし、初期条件として $t = t_1, t_2$ で、

$$\delta q_i = 0$$

とした。

　したがって作用の微小変化は

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\right]\delta q_i \tag{C.6}$$

となる。微小な座標の変化 δq_i に対し、元の作用が最小となる、つまり、$\delta S = 0$ となるためには

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \tag{C.7}$$

が成立しなければならない。これをオイラー・ラグランジュ方程式 (Euler-Lagrange) という。

例

$$L = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - U(q) \tag{C.8}$$

から

$$\frac{\partial L}{\partial q} = -\frac{\partial U(q)}{\partial q},\ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q} \tag{C.9}$$

従ってオイラー・ラグランジュ方程式は

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial U(q)}{\partial q} \tag{C.10}$$

となる。

座標変換

ある一組の一般化座標 q_i でラグランジアンが与えられたとしよう。別の一組の一般化座標 Q_i を使って変数変換する。この時、

$$q_i = q_i(Q_1, Q_2, \cdots, Q_N) \tag{C.11}$$

のように古い座標変数が新しい座標変数の関数として書き表されるとする。
このとき、オイラー・ラグランジュ方程式は

$$\frac{\partial L}{\partial Q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}\right) = 0 \tag{C.12}$$

となり、同じ形をしている。

C.1.2　運動量とハミルトニアン

次に共役運動量を

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{C.13}$$

で定義する。共役運動量は $q_i, \dot{q}_i$ の関数であるが、これを逆に解いて $\dot{q}_i$ を q_i, p_i の関数として表すことが出来るものとする。
この時、ハミルトニアンは

$$H(q;p) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \tag{C.14}$$

で定義され、 q_i, p_i の関数である。
すると、共役運動量の定義より、

$$\begin{aligned} dH &= \sum_i \left(dp_i \dot{q}_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right) \\ &= \sum_i \left(\dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i \right) \\ &\equiv \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \right) \end{aligned} \tag{C.15}$$

従って、オイラー・ラグランジュ方程式 (C.7) を使って整理すると、

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{C.16a}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{C.16b}$$

となる。これをハミルトン (Hamilton) の方程式、又は正準方程式という。

例

$$L = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - U(q) \tag{C.17}$$

に対して、

$$p = m\dot{q} \tag{C.18}$$

従って

$$H(q,p) = \frac{1}{2m}p^2 + U(q) \tag{C.19}$$

これは（運動エネルギー）＋（ポテンシャルエネルギー）の形で、全エネルギーと言う意味を持つ。

C.1.3 正準変換

ハミルトニアン形式での独立変数は $q_1, \cdots, q_N$ とそれに共役な運動量 $p_1, \cdots, p_N$ である。一般にこれらの独立変数の間の変換を考えることができるが、その中でハミルトンの運動方程式の形を変えないものを正準変換と言う。変換

$$q_i = q_i(Q_1, \cdots, Q_N, P_1, \cdots, P_N) \tag{C.20a}$$
$$p_i = p_i(Q_1, \cdots, Q_N, P_1, \cdots, P_N) \tag{C.20b}$$

とその逆変換が与えられている時、これが正準変換となる条件を調べよう。

正準変換が成り立っているとすると、定義から新しいハミルトニアン

$$K = K(Q; P) \tag{C.21}$$

があり、

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{\partial K}{\partial P_i} \tag{C.22a}$$
$$\frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \tag{C.22b}$$

が成立しなければならない。そのための条件は、

$$\bar{L} = \sum_i p_i \dot{q}_i - H(q;p) = \sum_i P_i \dot{Q}_i - K(Q;P) + \frac{dW}{dt} \tag{C.23}$$

である。つまり、(C.20) を (C.23) の左辺に代入した時、右辺の形になっていれば正準変換である。

この時、W は正準変数の関数で変換の母関数とよぶ。

C.1.4　ポアソン括弧

ある変換が正準変換かどうか判定するのには、ポアソン括弧を用いると簡単になる。

$$[A, B]_{PB} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \tag{C.24}$$

特に正準変数に関しては、

$$[q_i, q_j]_{PB} = 0 \tag{C.25a}$$
$$[p_i, p_j]_{PB} = 0 \tag{C.25b}$$
$$[q_i, p_j]_{PB} = \delta_{i,j} \tag{C.25c}$$

がなりたつ。これを基本ポアソン括弧と言う。

ポアソン括弧は正準変換により不変である。

$$[A, B]_{PB} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i}\frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \tag{C.26}$$
$$= \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial Q_i}\frac{\partial B}{\partial P_i} - \frac{\partial B}{\partial Q_i}\frac{\partial A}{\partial P_i} \right) \tag{C.27}$$

逆にポアソン括弧式の形を不変に保つ変換は正準変換である。

ポアソン括弧の性質

ポアソン括弧に対して以下の性質が成り立つ。

$$[\hat{A}, \hat{B}+\hat{C}]_{PB} = [\hat{A}, \hat{B}]_{PB} + [\hat{A}, \hat{C}]_{PB} \tag{C.28a}$$
$$[a\hat{A}, \hat{B}]_{PB} = a[\hat{A}, \hat{B}]_{PB} \tag{C.28b}$$
$$[\hat{A}, \hat{B}]_{PB} = -[\hat{B}, \hat{A}]_{PB} \tag{C.28c}$$
$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]_{PB} = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]_{PB} + [\hat{A}, \hat{C}]_{PB}\hat{B} \tag{C.28d}$$
$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]_{PB}]_{PB} + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]_{PB}]_{PB} + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]_{PB}]_{PB} = 0 \tag{C.28e}$$

逆に、これらの関係式と基本ポアソン括弧 (C.25) から、ポアソン括弧 の定義式 (C.24) が導かれる。

ポアソン括弧と運動方程式

ポアソン括弧を用いると、正準方程式は

$$\frac{dq_i}{dt} = [q_i, H]_{PB} \tag{C.29a}$$
$$\frac{dp_i}{dt} = [p_i, H]_{PB} \tag{C.29b}$$

となる。一般に、正準変数でかかれた物理量 $F(q,p,t)$ は

$$\begin{aligned}\frac{dF}{dt} &= \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}\right) + \frac{\partial F}{\partial t} \\ &= [F, H]_{PB} + \frac{\partial F}{\partial t}\end{aligned} \tag{C.30}$$

(ここで正準方程式 (C.16) を使った) のように時間発展する。

C.2 場の解析力学

(電磁場のような) 古典場を一般に $\varphi_i(x)$ と書こう。

C.2.1　作用

この時、作用積分が

$$S[\varphi] = \int d^4x \mathcal{L}(\varphi_i(x), \partial_\mu \varphi_i(x)) \tag{C.31}$$

で与えられているとする。これを場 $\varphi_i(x)$ で変分して

$$\begin{aligned}
\delta S &= \sum_i \int d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_i} \delta\varphi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi_i)} \delta(\partial_\mu \varphi_i) \right) && \text{(C.32)} \\
&= \sum_i \int d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_i} \delta\varphi_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi_i)} \partial_\mu(\delta \varphi_i) \right) \\
&= \sum_i \int d^4x \left\{ \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_i} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi_i)} \right) \right) \delta\varphi_i + \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi_i)} \delta\varphi_i \right) \right\} \\
&= \sum_i \int d^4x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_i} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi_i)} \right) \right) \delta\varphi_i && \text{(C.33)}
\end{aligned}$$

が得られる (ここで、表面積分の寄与を落した)。変分 $\delta\varphi$ は任意なので、$\delta S = 0$ が成り立つためにはオイラーラグランジュの方程式

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_i(x)} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \varphi_i(x))} \right) = 0 \tag{C.34}$$

が成り立たなくてはならない。

C.2.2　ハミルトニアン密度

φ に対する共役運動量を

$$\pi_i \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_i} \tag{C.35}$$

で定義する。

このときハミルトニアン密度は

$$\mathcal{H} \equiv \sum_i \pi_i \dot{\varphi}_i - \mathcal{L} \tag{C.36}$$

である。

C.2.3　ポアソン括弧

同時刻でのポアソン括弧も定義できる。

$$[\varphi_i(\boldsymbol{x},t),\varphi_j(\boldsymbol{x}',t)]_{PB}=0 \tag{C.37a}$$

$$[\pi_i(\boldsymbol{x},t),\pi_j(\boldsymbol{x}',t)]_{PB}=0 \tag{C.37b}$$

$$[\varphi_i(\boldsymbol{x},t),\pi_j(\boldsymbol{x}',t)]_{PB}=\delta_{ij}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{C.37c}$$

C.2.4　ネーターカレントと保存量

作用積分 S が ϵ をパラメータとする無限小変換

$$\varphi_i \to \varphi_i' = \varphi_i + \epsilon G_i(\varphi) \tag{C.38}$$

の下で不変、$S[\varphi]=S[\varphi']$ とする。つまり、

$$\begin{aligned}\delta\mathcal{L} &= \sum_i \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_i}\epsilon G_i(\varphi)+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\varphi_i)}\epsilon\partial_\mu G_i(\varphi)\right)\\ &= \epsilon\sum_i\left[\partial_\mu\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\varphi_i)}\right)G_i(\varphi)+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\varphi_i)}\partial_\mu G_i(\varphi)\right]\end{aligned} \tag{C.39}$$

一方、作用積分の不変性はラグランジアン密度の変化分が全微分であること、つまり

$$\delta\mathcal{L}=\mathcal{L}(\varphi'(x),\partial_\mu\varphi'(x))-\mathcal{L}(\varphi(x),\partial_\mu\varphi(x))=\epsilon\partial_\mu X^\mu(\varphi(x)) \tag{C.40}$$

の形の恒等式で書ける X^μ があることを意味している。

この 2 つの表式から

$$j^\mu(x)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\varphi_i)}G_i(\varphi(x))+X^\mu(\varphi(x)) \tag{C.41}$$

なるカレントの保存則

$$\partial_\mu j^\mu(x)=0 \tag{C.42}$$

が従う。(C.41) をネーター (Noether) カレントと呼ぶ。