

〈量子力学〉

文責：瓶詰め kh

<http://kh750stoli.blog.shinobi.jp/>

ver.20200528

はじめに

量子力学は難しいということがよく言われる。その一因となるのは、量子力学が扱う現象を日常的な経験と結び付ける困難であろう。そこで多くの教科書では、量子力学の形成史を辿り、**輻射の理論**や**光の粒子性**、**電磁気学**と矛盾する**Rutherfordの原子模型**、不可解な不連続性を見せる**原子スペクトル**といった、量子力学特有の不可解さを学習者に迫体験させるアプローチをとる。歴史上重要な仮説には量子力学を理解するために欠かせないアイデアが含まれているため教育的ではあるのだが、仮説同士の関係や整合性はなかなか見えてこないため、量子力学の全体像を掴むのは難しい。

そこで本書では、このようなアプローチの教科書を補う形で、整合性を重視して量子力学の全体像を描くことを試みたい。

本書では第1章で、量子力学の記述に利用される基本的な計算規則を整備し、その規則を用いて一般的な形で量子力学の原理を述べる。その後の話は基本的にこの計算規則の枠内に収まるように行い、人為的な操作と思われる仮定はなるべく導入しないよう注意しつつ話を進める。量子力学の計算はややこしいものが多いので、途中計算はなるべく詳しく追うようにした(ただし一部、証明なしで用いている積分公式もあるので、そこは天下り的になってしまった)。

第2章では、量子力学の入門書で扱われる典型的な話題である**固有値問題**を議論していく。水素原子の節まで読めば、量子力学の基本的な知識は身に付いたと言えるのではないだろうか。ある程度計算練習を行った後は、量子力学における粒子の概念に深く関わる**スピン角運動量**や**粒子の統計性**といった性質の解説を行い、**相対性理論**との関連も簡単に論じることとする。

第3章から扱う内容はやや発展的なものとなる。応用上は**電磁場の量子力学的取り扱い**にも関わる**場の量子論**(第3章)と、様々な実験の記述に利用される**散乱の量子論**(第5章)が重要であるが、**相対論**と量子力学の関係を掘り下げる第4章も、物理学の基本法則を理解するのに役立つものと思われる。

第2章以下の幅広い話題は全て、第1章で提示した原理と計算規則に基づいて理解することができる。この本を読み終えた後、量子力学の少数の原理が持つ広大な射程を感じ取っていただければ、望外の喜びである。

目次

第 1 章	〈量子力学〉の原理	1
1.1	用語と記法	2
1.2	状態と物理量	11
1.3	同時測定可能性	13
1.3.1	物理量の不確定性	13
1.3.2	位置と運動量の表現	16
1.4	状態の変化	19
1.4.1	時間発展	19
1.4.2	測定の影響	21
1.5	第 1 章のまとめ	22
第 2 章	質点系の〈量子力学〉	25
2.1	自由粒子	25
2.1.1	自由粒子の一般解	25
2.1.2	自由粒子の初期値問題	26
2.2	調和振動子	28
2.2.1	調和振動子のエネルギー固有値	28
2.2.2	調和振動子のエネルギー固有状態	29
2.3	角運動量	30
2.3.1	角運動量と極座標表示	32
2.3.2	角運動量の固有値	33
2.3.3	角運動量の固有状態	35
2.3.4	角運動量固有状態の完全性	37
2.4	水素原子	38
2.4.1	自由度の分離	39
2.4.2	水素原子のエネルギー固有値	40
2.4.3	固有状態の規格化	42
2.5	ハミルトニアンの設定	46
2.5.1	最小作用の原理	46
2.5.2	Hamilton 形式	48
2.5.3	正準量子化	49
2.6	一様磁場中の荷電粒子	50
2.6.1	固有値の解析	50

2.6.2	固有状態の性質	52
2.7	内部自由度	53
2.7.1	Zeeman 効果	53
2.7.2	スピンの取り扱い	54
2.7.3	同種粒子の多体系	55
2.7.4	統計性の帰結	57
2.8	Dirac 方程式	59
2.8.1	相対論の復習	60
2.8.2	Klein-Gordon 方程式	64
2.8.3	Dirac 方程式の発見	65
2.8.4	スピンと角運動量	67
2.8.5	Zeeman 効果の導出	68
2.8.6	ベクトルでない四成分量	70
2.8.7	スピノルの発見	71
2.8.8	負エネルギー問題	76
2.9	第 2 章のまとめ	77
第 3 章	〈場の量子論〉	79
3.1	弦の振動	79
3.1.1	波動方程式の復習	79
3.1.2	Poisson 括弧の問題	81
3.1.3	汎関数微分	82
3.1.4	弦振動の量子論	84
3.2	de Broglie 場	87
3.2.1	物質波の量子化	87
3.2.2	多粒子系の時間発展	89
3.2.3	ポテンシャル系のハミルトニアン	90
3.2.4	粒子の統計性	92
3.2.5	異種粒子から成る系	93
3.2.6	個数演算子の固有状態	94
3.2.7	まとめと補足	96
3.3	Heisenberg 描像	98
3.3.1	ユニタリー変換	98
3.3.2	Heisenberg 描像	98
3.4	Klein-Gordon 場	99
3.4.1	Klein-Gordon 場のラグランジアン	100
3.4.2	生成・消滅演算子	101
3.4.3	Klein-Gordon 場のエネルギー	102
3.5	Dirac 場	103
3.5.1	Dirac 場のラグランジアン	104
3.5.2	自由 Dirac 場の一般解	106
3.5.3	Dirac 場のエネルギー	107

3.5.4	正準反交換関係の確認	108
3.6	電磁場	109
3.6.1	Maxwell 方程式	110
3.6.2	相対論的 Maxwell 方程式のラグランジアン	111
3.6.3	ゲージ変換	112
3.6.4	正準量子化	112
3.6.5	電磁場のハミルトニアン	114
3.6.6	Lorenz ゲージ条件の導入	115
3.6.7	電荷の保存則	118
3.7	第 3 章のまとめ	119
第 4 章	スピン・統計定理	121
4.1	Lorentz 変換の表現論	121
4.1.1	Lorentz 変換の分解	121
4.1.2	Lorentz 変換の表現	123
4.1.3	表現に潜むスピノル	124
4.1.4	Dirac 場の表現	126
4.1.5	ベクトル場の表現	127
4.2	スピノル算法	128
4.2.1	点付き添え字と点なし添え字	128
4.2.2	スピノルとスカラー	129
4.2.3	スピノルの複素共役	130
4.2.4	スピノルとベクトル	132
4.2.5	角運動量の合成	135
4.2.6	スピノルの構成	137
4.3	スピン・統計定理	138
4.3.1	相対論における積分	139
4.3.2	スピンの振る舞い	141
4.3.3	因果律	142
4.3.4	定理の証明	143
4.4	第 4 章のまとめ	146
第 5 章	〈散乱の量子論〉	147
5.1	散乱実験の設定	147
5.1.1	散乱実験が成り立つ条件	149
5.1.2	散乱断面積の概念	151
5.2	散乱問題の定式化	152
5.2.1	S 行列と T 行列	152
5.2.2	相互作用描像	153
5.2.3	初期状態に対する近似	155
5.2.4	S 行列の形式解	156
5.2.5	Lippmann-Schwinger 方程式	158

5.2.6	散乱断面積の公式	159
5.2.7	Born 近似	161
5.3	Rutherford 散乱	162
5.4	原子の発光	163
5.4.1	ハミルトニアン	163
5.4.2	光の散乱理論とその注釈	164
5.4.3	放出過程の記述	165
5.4.4	行列要素の計算	166
5.4.5	励起状態の寿命	168
5.4.6	光子のスピン角運動量	169
5.5	第 5 章のまとめ	170
付録 A	量子力学の数学的基礎	173
A.1	Hilbert 空間	174
A.1.1	内積空間の完備性	174
A.1.2	可分性と稠密な部分集合	176
A.1.3	関数空間	177
A.2	線形演算子	178
A.2.1	演算子の有界性	178
A.2.2	演算子の定義域	179
A.2.3	演算子の Hermite 共役	180
A.3	スペクトル定理	181
A.3.1	スペクトル族	182
A.3.2	有界演算子のスペクトル定理	182
A.3.3	ユニタリー演算子のスペクトル分解	183
A.3.4	非有界演算子のスペクトル展開	184
	索引	186

第 1 章

〈量子力学〉の原理

第 1 章では、本書の議論の基礎となる 6 つの原理について解説を行う。始めに、6 つの原理がどのようなものか見ておくことにしよう。量子力学のエッセンスとなる考えは、この 1 ページ分の原理に要約できる。

原理 1 重ね合わせの原理

時刻 t における系の状態は、状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ で指定される。

原理 2 物理量の統計的性質

(i) 物理量 A は次の性質を満たす自己共役演算子 \hat{A} で表される。

- (エルミート性) $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$
- (固有ベクトルの完全性) $\int_{-\infty}^{\infty} da |a\rangle\langle a| = \hat{I}$.

ここで、 $|a\rangle$ は固有値 a に属す \hat{A} の固有ベクトルで、 $\langle a|a'\rangle = \delta(a-a')$ を満たすよう正規直交化されているものとする。

(ii) 時刻 t における物理量 A の測定値 a が不等式 $\alpha < a < \alpha'$ を満たす確率は $\int_{\alpha}^{\alpha'} da |\langle a|\psi(t)\rangle|^2$ で与えられる。

原理 3 不確定性原理

$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ を演算子 \hat{A}, \hat{B} の交換子という。物理量 \hat{A}, \hat{B} に対し $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ が成り立つならば

$$\hat{A}|ab\rangle = a|ab\rangle, \hat{B}|ab\rangle = b|ab\rangle, \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db |ab\rangle\langle ab| = \hat{I} \quad (1.0.1)$$

を満たす同時固有状態の完全系 $\{|ab\rangle | -\infty < a, b < \infty\}$ が存在し、 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ ならば、このような完全系は存在しない。

原理 4 正準交換関係

質点の位置を表す座標 q_i とそれに対応する運動量 p_i の間には次の正準交換関係が成り立つ。

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (1.0.2)$$

原理 5 時間発展方程式

系の状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展はハミルトニアンという物理量 \hat{H} によって定まる方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.0.3)$$

に従う。

原理 6 射影公準

物理量 A の測定を行い、測定値 a が $\alpha < a < \alpha'$ の範囲に見出されたときの系の状態は、射影演算子 $\int_{\alpha}^{\alpha'} da |a\rangle\langle a|$ の固有値 1 に属す固有状態である。

第1章では、読者がこの原理を読んで理解できるように解説を行う。まずは記号や用語の意味、扱い方から学んでいくことにしよう。

1.1 用語と記法

古典力学では、質点の位置、運動量といった測定可能な量、すなわち物理量によって系の状態を記述した。これに対し量子力学では線形代数の計算規則に従う状態ベクトルという量を用いて系の状態を記述し、系の状態から物理量の情報を導く際には固有値・固有ベクトルといった線形代数の概念を利用する。系の状態と物理量を、線形代数の概念を用いて区別すること。量子力学の最も革新的な部分はこの点にあると言えるだろう。

線形代数を用いる量子力学では、ベクトルや行列に相当する $|\psi\rangle, \hat{A}$ といった記号が基本的な計算ツールになる。量子力学の記述に $|\psi\rangle, \langle\psi|, \hat{A}, \langle\psi|\phi\rangle$ といった記号を用いるやり方は、量子力学黎明期の物理学者 **Dirac** ^{ディラック} によって考案されたもので、ブラケット記法と呼ばれる。括弧の記号 $\langle \rangle$ を英語でブラケットといい、これをブラ記号とケット記号に分けたのがブラケット記法である。

この節では、ブラケット記法を活用するための基礎となる用語および計算規則を提示する。目的はあくまで量子力学の数学的な枠組みを整備することにあり、様々な記号に対する物理的な意味付けは次節以降に行う。

用語 1 状態ベクトル

- ケット記号 $|\psi\rangle, |\phi\rangle, \dots$ で表される量を状態ベクトルという。系がとり得る状態を表す状態ベクトルの集合を状態空間と呼ぶ。
- 状態空間は複素ベクトル空間を成す。つまり、任意の2つの状態ベクトル $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対し、これらの線形結合 $a|\psi\rangle + b|\phi\rangle$ (a, b は複素数) も系の状態を表す。
- 線形結合の計算に関して、状態ベクトルは3次元のベクトルと同じ感覚で扱うことができる。例えば
 - 状態ベクトルの等式 $|\psi\rangle = |\phi\rangle$ が成り立つとき、両辺に同じ状態ベクトルを加えた等式 $|\psi\rangle + |\varphi\rangle = |\phi\rangle + |\varphi\rangle$ が成り立つ。
 - ベクトルの係数は複素数の計算規則でまとめることができる。つまり、 $a|\psi\rangle + b|\psi\rangle = (a+b)|\psi\rangle$, $a(b|\psi\rangle) = (ab)|\psi\rangle$ である。
 - 任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対し $|\psi\rangle + |\emptyset\rangle = |\psi\rangle$ を満たす状態ベクトル $|\emptyset\rangle$ を零ベクトルと呼ぶ。 $|\psi\rangle - |\psi\rangle = 0|\psi\rangle$ は零ベクトルである。零ベクトルの性質を満たす状態ベクトルはただ1つである。実際、零ベクトルの性質を満たす2つのベクトル $|\emptyset\rangle, |\emptyset'\rangle$ をとれば $|\emptyset\rangle = |\emptyset\rangle + |\emptyset'\rangle = |\emptyset'\rangle$ が成り立つ。

用語 2 双対ベクトル

- ブラ記号 $\langle\psi|, \langle\phi|, \dots$ で表される量を双対ベクトルあるいは $|\psi\rangle, |\phi\rangle, \dots$ の ^{エルミート} **Hermitian**

共役という。双対ベクトルは、状態ベクトルを縦ベクトルと見なせば、横ベクトルに相当する量である。双対ベクトルの集合を双対空間という。

- 状態ベクトルと双対ベクトルは 1 対 1 に対応が付く。この対応関係は、ベクトルの複素共役と転置をとる操作に相当し、ダガー記号 \dagger を用いて $|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|$, $\langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle$ と表される。状態の線形結合をとった際、その双対ベクトルは $(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle)^\dagger = a^*\langle\psi| + b^*\langle\phi|$ (記号*は複素共役を表す) で与えられる。
- 状態ベクトルに双対ベクトルをかけた量 $\langle\psi|\phi\rangle$ を $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ の内積という。内積は一般に複素数の値をとり、次の 3 性質を満たす。
 - (線形性) $\langle\psi|(a|\phi\rangle + b|\varphi\rangle) = a\langle\psi|\phi\rangle + b\langle\psi|\varphi\rangle$ (a, b は任意の複素数)
 - (双対性) $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$
 - (正定値性) 不等式 $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$ が成り立つ。また、 $\langle\psi|\psi\rangle = 0$ が成り立つのは $|\psi\rangle = |\emptyset\rangle$ の場合に限られる。
 ここで、 $|\psi\rangle, |\phi\rangle, |\varphi\rangle$ は任意の状態ベクトルである。
- $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ を $|\psi\rangle$ のノルム (規格, 大きさのこと) といい、ノルムが 1 のベクトルを単位ベクトルという。2 つのベクトルの内積が 0 になる場合、これらは互いに直交しているという。

ノルムと直交性について、次の定理は基本的である。

定理 1 グラム・シュミット Gram-Schmidt の直交化法

ベクトルの組 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^N$ が与えられたとき、線形結合によってこれらを、正規直交性

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

を満たす $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^N$ に直すことができる。具体的には、 $|\phi_1\rangle = |\psi_1\rangle / \sqrt{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}$,

$$|\phi_i\rangle = \frac{|\psi_i\rangle - \sum_{j=1}^{i-1} \langle\phi_j|\psi_i\rangle |\phi_j\rangle}{\sqrt{\langle\psi_i|\psi_i\rangle - \sum_{j=1}^{i-1} \langle\phi_j|\psi_i\rangle \langle\psi_i|\phi_j\rangle}} \quad (i \geq 2)$$

とおけばよい。 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^N$ および $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^N$ の線形結合で書き表される状態ベクトルの集合は一致する。この定理は $N = \infty$ の場合にも利用できる。

用語 3 線形演算子

- ハット記号付きの量 \hat{A}, \hat{B}, \dots で表される演算子は、ある状態ベクトルを他の状態ベクトルに変える働き (演算) を表す量のことである。例えば、演算子 \hat{A} (エーハットと読む) が状態 $|\psi\rangle$ を $|\phi\rangle$ に変化させる場合、これを $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ で表す。
- 任意の状態ベクトルの線形結合 $a|\psi\rangle + b|\phi\rangle$ に対し線形性

$$\hat{A}(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = a\hat{A}|\psi\rangle + b\hat{A}|\phi\rangle \quad (1.1.1)$$

を満たす演算子を線形演算子という。状態ベクトルを縦ベクトルと見なしたとき、線形演算子は行列に相当する量である。

- 任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対し $\hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$ が成り立つとき、演算子 \hat{A}, \hat{B} は等しいといい、 $\hat{A} = \hat{B}$ で表す。

- 線形演算子 \hat{A} と任意の状態ベクトル $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対して

$$\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* \quad (1.1.2)$$

を満たす線形演算子 \hat{A}^\dagger を \hat{A} の **Hermite 共役** という。 $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ の順番で混乱した時は等式 $(\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$ を覚えておくと役立つ。演算子の積の Hermite 共役は $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ で与えられる。

- 状態ベクトルを変化させない演算子、つまり、任意の状態ベクトルに対し $\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ を満たす演算子 \hat{I} を **恒等演算子** という。演算子 \hat{A} に対し $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} = \hat{I}$ を満たす \hat{B} が存在するとき、 \hat{B} は \hat{A} の **逆演算子** であるといい、 $\hat{B} = \hat{A}^{-1}$ と表す。
- 状態ベクトルに複素数 c をかける演算は $c\hat{I}$ で表せる。これを省略して $c\hat{I} = c$ と表すこともある。
- $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ を満たす線形演算子を **Hermite 演算子** という。その他、**対称演算子**、**自己共役演算子** という言い方もある。数学ではこれらの用語の区別によって微妙な違いを表すのだが、この点については付録で述べることにする。
- $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$ を満たす \hat{U} を **ユニタリー演算子** という。
- 内積 $\langle\psi|\phi\rangle$ は複素数であるが、 $\hat{A} = |\psi\rangle\langle\phi|$ は線形演算子である。この形の演算子による演算の結果は、内積を用いて $\hat{A}|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\phi|\varphi\rangle = \langle\phi|\varphi\rangle|\psi\rangle$ と計算される。

用語 4 完全系

- 状態ベクトルの集合 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^N$ が与えられれば、線形結合 $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N c_i|\psi_i\rangle$ の形で様々な状態を表現できる。集合 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^N$ が状態空間の任意の状態 $|\psi\rangle$ に対し線形結合による表現 $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N c_i|\psi_i\rangle$ を持つとき、この集合は **完全系** であるという。状態空間はたいてい無限次元なので、これを意識して以下では $N = \infty$ とする。
- Gramm-Schmidt の直交化法より、完全系 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^\infty$ は正規直交性を満たすように選ぶことができる。正規直交性を満たす完全系を **完全正規直交系** という。
- 任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ は完全正規直交系 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^\infty$ を用いて $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^\infty c_i|\psi_i\rangle$ と展開できる。展開係数は $c_j = \langle\psi_j|\psi\rangle$ で与えられる。これは、展開式の両辺に $\langle\psi_j|$ を作用させることで容易に導ける。
- 以上より、状態ベクトルの完全正規直交系による展開は $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^\infty |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle$ と書ける。したがって、 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^\infty$ が完全正規直交系であることは $\sum_{i=1}^\infty |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \hat{I}$ と同値である。
- 線形演算子 \hat{A} に対し、 $A_{ij} = \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle$ とおけば、線形演算子による演算は

$$\begin{aligned} \hat{A} \left(\sum_{j=1}^\infty c_j |\psi_j\rangle \right) &= \sum_{j=1}^\infty c_j \hat{A} |\psi_j\rangle = \sum_{i,j=1}^\infty c_j |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle \\ &= \sum_{i=1}^\infty \left(\sum_{j=1}^\infty A_{ij} c_j \right) |\psi_i\rangle \end{aligned}$$

と表せる. したがって, 完全正規直交系 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ に属す状態ベクトルを

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, |\psi_4\rangle = \dots$$

と書き表せば, 状態ベクトルおよび線形演算子は無限次元行列を用いて

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix}, \hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \dots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

と表現される. \hat{A} による演算を特徴付ける量 $A_{ij} = \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle$ を \hat{A} の行列要素という.

- 無限次元のベクトルや行列を直接書き下す表記は手間と紙面を食うので, 行列表記が視覚的に役立つ場合を除けばあまり用いられない. 線形演算子を表す際は状態ベクトルと双対ベクトルを用いた表記 $\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{\infty} A_{ij}|\psi_i\rangle\langle\psi_j|$ が便利である.

用語 5 微分積分記号

- $f(a)$ を複素関数としよう. 実数パラメータ a に依存する状態ベクトル $|\psi_a\rangle$ の微分積分を記号

$$\frac{d}{da}|\psi_a\rangle, \int_b^c da f(a)|\psi_a\rangle \quad (1.1.3)$$

で表し, これを任意の状態ベクトル $|\phi\rangle$ (ただし, $|\phi\rangle$ は a に依存しない) に対し

$$\langle\phi|\frac{d}{da}|\psi_a\rangle = \frac{d}{da}\langle\phi|\psi_a\rangle, \langle\phi|\int_b^c da f(a)|\psi_a\rangle = \int_b^c da f(a)\langle\phi|\psi_a\rangle \quad (1.1.4)$$

を満たす状態ベクトルと定義する.

- (1.1.3) の Hermite 共役

$$\left(\frac{d}{da}|\psi_a\rangle\right)^\dagger = \frac{d}{da}\langle\psi_a|, \left(\int_b^c da f(a)|\psi_a\rangle\right)^\dagger = \int_b^c da f^*(a)\langle\psi_a| \quad (1.1.5)$$

は, パラメータ a に依存しない任意の状態ベクトル $|\phi\rangle$ に対し

$$\left(\frac{d}{da}\langle\psi_a|\right)|\phi\rangle = \frac{d}{da}\langle\psi_a|\phi\rangle, \left(\int_b^c da f^*(a)\langle\psi_a|\right)|\phi\rangle = \int_b^c da f^*(a)\langle\psi_a|\phi\rangle \quad (1.1.6)$$

を満たす双対ベクトルに等しい.

- パラメータ a に依存する演算子 \hat{A}_a の微積分も, a によらない任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対し

$$\langle\phi|\left(\frac{d}{da}\hat{A}_a\right)|\psi\rangle = \frac{d}{da}\langle\phi|\hat{A}_a|\psi\rangle, \quad (1.1.7)$$

$$\langle\phi|\left(\int_b^c da f(a)\hat{A}_a\right)|\psi\rangle = \int_b^c da f(a)\langle\phi|\hat{A}_a|\psi\rangle \quad (1.1.8)$$

を満たす演算子と定義する.

定理 2 微積分の公式

状態ベクトル, 線形演算子の微積分において, 次の公式が成り立つ.

- パラメータに依存する項が積になっている場合, その微分は^{ライプニッツ}Leibniz則に従う. つまり, パラメータ依存する因子ごとに微分してその和をとることで計算結果が得られる.

$$\frac{d}{da} (\hat{A}_a |\psi_a\rangle) = \left(\frac{d}{da} \hat{A}_a \right) |\psi_a\rangle + \hat{A}_a \left(\frac{d}{da} |\psi_a\rangle \right), \quad (1.1.9)$$

$$\frac{d}{da} (\hat{A}_a \hat{B}_a) = \left(\frac{d}{da} \hat{A}_a \right) \hat{B}_a + \hat{A}_a \left(\frac{d}{da} \hat{B}_a \right). \quad (1.1.10)$$

- 状態ベクトルと演算子の微積分は微分積分学の基本定理を満たす. つまり,

$$\int_b^c da \frac{d}{da} (f(a) |\psi_a\rangle) = f(c) |\psi_c\rangle - f(b) |\psi_b\rangle, \quad (1.1.11)$$

$$\int_b^c da \frac{d}{da} (f(a) \hat{A}_a) = f(c) \hat{A}_c - f(b) \hat{A}_b. \quad (1.1.12)$$

証明 微分について. 完全正規直交系 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ の性質 $\hat{I} = \sum_{i=1}^{\infty} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ を利用して, 任意の $|\phi\rangle$ との内積の性質を調べる.

$$\begin{aligned} \langle\phi| \frac{d}{da} (\hat{A}_a |\psi_a\rangle) &= \frac{d}{da} \langle\phi| \hat{A}_a |\psi_a\rangle = \frac{d}{da} \langle\phi| \hat{A}_a \hat{I} |\psi_a\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \frac{d}{da} \langle\phi| \hat{A}_a |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \psi_a\rangle, \end{aligned}$$

右辺の $\langle\phi| \hat{A}_a |\psi_i\rangle, \langle\psi_i| \psi_a\rangle$ はそれぞれ a を変数とする複素関数であるから,

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(\left(\frac{d}{da} \langle\phi| \hat{A}_a |\psi_i\rangle \right) \langle\psi_i| \psi_a\rangle + \langle\phi| \hat{A}_a |\psi_i\rangle \left(\frac{d}{da} \langle\psi_i| \psi_a\rangle \right) \right) \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(\langle\phi| \left(\frac{d}{da} \hat{A}_a \right) |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \psi_a\rangle + \langle\phi| \hat{A}_a |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \left(\frac{d}{da} |\psi_a\rangle \right) \right) \\ &= \langle\phi| \left(\frac{d}{da} \hat{A}_a \right) |\psi_a\rangle + \langle\phi| \hat{A}_a \left(\frac{d}{da} |\psi_a\rangle \right). \end{aligned}$$

積分について. 内積と微分積分の順序を入れ換えて, 複素関数の積分を実行する.

$$\begin{aligned} \langle\phi| \int_b^c da \frac{d}{da} (f(a) |\psi_a\rangle) &= \int_b^c da \frac{d}{da} (f(a) \langle\phi| \psi_a\rangle) \\ &= f(c) \langle\phi| \psi_c\rangle - f(b) \langle\phi| \psi_b\rangle. \end{aligned}$$

(証明終)

状態ベクトルの積分 $\int_{-\infty}^{\infty} da f(a) |\psi_a\rangle$ をとる操作と線形結合 $\sum_{i=1}^{\infty} c_i |\psi_i\rangle$ をとる操作は, 添え字の値が連続的か離散的 (飛び飛び) かという違いはあるが, 同じように考えることができる. そこで, 状態ベクトルの線形結合と積分をまとめて重ね合わせと呼ぶことにする. パラメータ a に依存する状態ベクトルの集合 $S = \{|\psi_a\rangle \mid -\infty < a < \infty\}$ が与えられれば, 積分表示

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da f(a) |\psi_a\rangle, |\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da g(a) |\psi_a\rangle, \dots$$

の形で様々な状態を表現できる。線形結合の場合と同様に、集合 S が状態空間の任意の状態 $|\psi\rangle$ に対し積分表示による表現 $|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da f(a)|\psi_a\rangle$ を持つとき、この集合は完全系であるという。

続いて、^{フーリエ}Fourier解析の基礎事項と、Dirac の δ 関数の扱いについて述べよう。これらは積分表示の数学的背景を与える概念であり、最も基本的な物理量である位置と運動量を表現する際に用いられる基本的なツールでもある。

用語 6 Fourier 解析

- (Fourier 展開) 閉区間 $[-L/2, L/2]$ 上で定義された関数を三角関数の和で表したものが Fourier 展開である。三角関数を Euler の公式 $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ を用いて指数関数に直すと、Fourier 展開の式は

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{L} f_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right), \quad (1.1.13)$$

$$f_n = \int_{-L/2}^{L/2} dy f(y) \exp\left(-i\frac{2\pi n}{L}y\right) \quad (1.1.14)$$

で与えられる。展開係数を与える式 (1.1.14) は (1.1.13) から、公式

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx \exp\left(i\frac{2\pi(n-m)}{L}x\right) = L\delta_{nm}$$

を利用することで得られる。Fourier 展開は ^{ディリクレ}Dirichlet条件¹⁾と呼ばれる条件を満たす、広いクラスの関数に対し可能であることが知られている。例えば、閉区間上で連続な関数は Fourier 展開可能である。

- (Fourier の積分定理) 無限区間上で定義された関数に対し Fourier 展開を拡張したものが Fourier 積分表示である。絶対可積分性 $\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)| < \infty$ を持つ関数 $f(x)$ が無限区間 $(-\infty, \infty)$ で Dirichlet 条件を満たすならば、積分表示

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k) \exp(ikx), \quad (1.1.15)$$

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \exp(-ikx) \quad (1.1.16)$$

が成り立つ。これを **Fourier の積分定理**という。展開係数に相当する関数 $\tilde{f}(k)$ を **Fourier 変換**という。

- Fourier 展開の式と Fourier 積分表示の式を別々に覚える必要はない。Fourier 積分表示は Fourier 展開の $L \rightarrow \infty$ の極限をとる方法で導けるからである。

$\Delta k = \frac{2\pi}{L}, k_n = n\Delta k$ とおくと、Fourier 展開の式は

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{L} f_n \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right)$$

¹⁾ Dirichlet 条件は次の 3 つの条件で与えられる。(1) f が有界、つまり $|f(x)| < M$ ($-L/2 \leq x \leq L/2$) を満たす正の定数 M が存在し、(2) f が極値をとる回数が有限であり、(3) f の不連続点の数が有限である。Dirichlet 条件に立脚した Fourier 展開および Fourier 積分表示の議論は、例えば寺沢寛一『自然科学者のための数学概論』(岩波書店 1983 改版第 1 刷発行)で丁寧に述べられている。

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dy f(y) \exp(-i\frac{2\pi n}{L}y) \exp\left(i\frac{2\pi n}{L}x\right) \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta k \int_{-L/2}^{L/2} dy f(y) \exp(-ik_n y) \exp(ik_n x)
\end{aligned}$$

と書ける. ここで, 積分 $\int_{-L/2}^{L/2} dy$ を $\int_{-\infty}^{\infty} dy$ で置き換えると, 残りの部分は積分の定義を与える形

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta k \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \exp(-ik_n y) \exp(ik_n x)$$

になるので, 形式的に $\Delta k \rightarrow 0$ の極限をとれば, Fourier 積分表示

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left(\int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \exp(-iky) \right) \exp(ikx) \quad (1.1.17)$$

が得られる. 積分 $\int_{-L/2}^{L/2} dy$ を $\int_{-\infty}^{\infty} dy$ で置き換える際, 原点から十分に遠い領域での $|f(y)|$ の値は非常に小さく, 積分への寄与が無視できるという仮定が必要になる. 絶対可積分性はこの仮定が成り立つための十分条件として理解できる.

Fourier 積分表示 (1.1.17) の二重積分の順序を入れ換えると

$$\begin{aligned}
f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{2\pi} \exp(ik(x-y)) \right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \delta(x-y)
\end{aligned} \quad (1.1.18)$$

となる. このとき右辺の積分中で $\delta(x-y)$ とおいた量が δ 関数である. 特殊な振る舞いを持つ δ 関数であるが, まずは細かい点にこだわらず, 直感的にその定義と性質を述べることにしよう.

用語 7 Dirac の δ 関数

- δ 関数 とは, 任意の連続関数 f に対し

$$f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x) \quad (1.1.19)$$

を満たす量として定義される.

- $\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(-x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(-y) \delta(y) = f(0)$ であるから, $\delta(-x)$ もまた (1.1.19) を満たす. したがって,

$$\delta(x) = \delta(-x) \quad (1.1.20)$$

が成り立つ.

- δ 関数の引数をシフトした量 $\delta(x-y)$ の働きを考えよう. $y-x=z$ とおけば $\int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \delta(x-y) = \int_{-\infty}^{\infty} dz f(x+z) \delta(z) = f(x+z)|_{z=0} = f(x)$ であるから,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \delta(x-y) \quad (1.1.21)$$

が成り立つ.

- 合成関数の微分法を適用すると,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\delta(x-y) &= \frac{d(x-y)}{dx} \frac{d}{d(x-y)}\delta(x-y) \\ &= -\frac{d(x-y)}{dy} \frac{d}{d(x-y)}\delta(x-y) = -\frac{d}{dy}\delta(x-y),\end{aligned}\quad (1.1.22)$$

$$\frac{d^n}{dx^n}\delta(x-y) = (-1)^n \frac{d^n}{dy^n}\delta(x-y) \quad (1.1.23)$$

が成り立つので, (1.1.21) の x 微分から δ 関数の微分が満たす公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \frac{d}{dy}\delta(x-y) = -\frac{d}{dx}f(x) \quad (1.1.24)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \frac{d^n}{dy^n}\delta(x-y) = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n}f(x) \quad (1.1.25)$$

が得られる. この公式の別の導出として, (1.1.24), (1.1.25) の左辺から出発し, $\delta(x-y)$ が $x-y \neq 0$ の点で 0 になると考えて部分積分を実行する方法もある.

数学的には δ 関数は汎関数という概念を介して定義される. その考え方について簡単に触れておこう.

用語 8 汎関数

- 実数 x に複素数 $f(x)$ を対応させる働き f は関数と呼ばれるが, (1.1.19) を満たす関数 $\delta(x)$ をとることはできないから, δ 関数はこの意味で関数と呼べる量ではない. δ 関数は数学的には線形汎関数という概念を用いて定式化される.
- 関数 f に複素数 $T[f]$ を対応させる働き T を汎関数という. 任意の複素数 a, b と関数 f, g に対し $T[af + bg] = aT[f] + bT[g]$ を満たす汎関数を線形汎関数という. 例えば, 複素関数 ϕ を用いて汎関数

$$T_\phi[f] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) f(x) \quad (1.1.26)$$

を定義すれば, これは線形汎関数になる.

- 一般の線形汎関数 T を形式的に

$$T[f] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_T(x) f(x) \quad (1.1.27)$$

と表してみよう. このとき, $\phi_T(x)$ は必ずしも関数であるとは限らないが, その積分結果は汎関数 T の働きを用いて定義される. (1.1.27) は普通に関数の積分 (1.1.26) を含む広い意味での積分と言える. δ 関数の積分は (1.1.27) の意味で定義される.

- x で連続な関数 f に対し定義される汎関数 $\delta_x[f] = f(x)$ を (1.1.27) の形

$$\delta_x[f] = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \delta(x-y) \quad (1.1.28)$$

で書けば δ 関数が現れる. 同様に, x で n 回微分可能な関数 f に対し

$$\delta_x^{(n)}[f] = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} f(x) \quad (1.1.29)$$

で定義される汎関数 $\delta_x^{(n)}$ が δ 関数の微分に対応する.

- (1.1.27) における $\phi_T(x)$ は対応する汎関数 T の働きによって特徴付けられる量なので, 汎関数 $T[f] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_T(x) f(x)$ と $T'[f] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_{T'}(x) f(x)$ が等しい時, 等号 $\phi_T(x) = \phi_{T'}(x)$ で表すことにする. $=$ 記号をこの意味で用いれば, (1.1.18) は

$$2\pi\delta(x-y) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ik(x-y)) \quad (1.1.30)$$

と表せる. 右辺の積分は値を持たないため, 右辺を $x-y$ の関数として考えることは無意味であるが, その x, y 積分中での働きは汎関数として意味を持つ. 量子力学の数学的基礎を与える関数解析学や Hilbert 空間論では, このように, 数学的概念を広い意味で捉え直す (拡張する) 方法が詳しく議論される.

最後に, 量子力学における状態と物理量の意味付けに関わる概念である固有値と固有ベクトルについて述べよう. 特に, δ 関数を用いて表現される連続固有状態の概念は次の節で重要になる.

用語 9 固有値と固有ベクトル

- 線形演算子 \hat{A} に対し, $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ (a は複素数) を満たす $|\psi\rangle$ でない状態ベクトル $|\psi\rangle$ を固有値 a に属す \hat{A} の固有ベクトル(固有状態)であるという.
- Hermite 演算子 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ の固有値は実数である. 実際, $|\psi\rangle$ を固有値 a に属す \hat{A} の固有ベクトルとすると, Hermite 共役の定義から $\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^* = a^*\langle\psi|\psi\rangle$. 一方, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ なので $\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = a\langle\psi|\psi\rangle$. $|\psi\rangle \neq |\emptyset\rangle$ なので, $a = a^*$ が示される.
- 異なる固有値に属す Hermite 演算子の固有ベクトルは直交する. 実際, $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$, $\hat{A}|\phi\rangle = b|\phi\rangle$ とおけば $\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = a\langle\psi|\phi\rangle = b\langle\psi|\phi\rangle$, したがって $a \neq b$ ならば $\langle\psi|\phi\rangle = 0$ が示される.
- $\hat{P}^2 = \hat{P}$ を満たす Hermite 演算子 \hat{P} を射影演算子という. 固有値 a に属す \hat{P} の固有ベクトルを $|\psi\rangle$ とすれば, $|\emptyset\rangle = (\hat{P}^2 - \hat{P})|\psi\rangle = a(a-1)|\psi\rangle$ が成り立たねばならないので, \hat{P} の固有値は 0 か 1 に限られる.

用語 10 連続固有状態

- 量子力学で扱う演算子は無限次元ベクトル空間上の線形演算子であり, その固有値は連続的な実数値 (複素数値) をとることがあり得る. 特に, 連続的な固有値を持つ Hermite 演算子は物理量を表現する際に重要な役割を果たす.
- \hat{A} の固有値 a に属す固有状態を $|a\rangle$ で表そう. \hat{A} が Hermite 演算子である場合, a は実数値に限られる. 異なる固有値に属す Hermite 演算子の固有状態は直交するので, $a \neq a'$ ならば $\langle a|a'\rangle = 0$ である. 可算個の状態ベクトル $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ の正規直交条件 $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$ に対応して, 連続固有状態に対する正規直交条件は

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a-a') \quad (1.1.31)$$

で与えられる. たいていの場合, 連続固有状態 $|a\rangle$ は (1.1.31) を満たす正規直交系に選ぶのが便利である.

- 連続固有状態 $|a\rangle$ はパラメータ a に依存する状態ベクトルであるから, 積分を用い

て重ね合わせの状態

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da\psi(a)|a\rangle \quad (1.1.32)$$

を作ることができる。連続固有状態が正規直交化されていれば、積分の重みを与える関数 $\psi(a)$ は内積と $\langle a|\psi\rangle = \psi(a)$ で関係付けられる。

1.2 状態と物理量

量子力学における物理量とは、測定可能な量のことであり、物理量は測定によってその値（測定値）が定まる。一般に物理量の測定値は確率的な振る舞いを示すため、各時刻において物理量が定まった値を持つと考えることはできない。そこで量子力学では、物理量の代わりに状態ベクトルを用いて各時刻における系の状態を表す。これが量子力学の第一の原理である。

原理 1 重ね合わせの原理

時刻 t における系の状態は、状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ で指定される。

時刻 t における物理量の測定値の振る舞いは系の状態 $|\psi(t)\rangle$ から定まる。しかし、この原理では状態と測定値の関係は述べられていない。そこで以下に、固有値の概念を用いて状態から物理量の振る舞いを導く方法を述べよう。

量子力学では、物理量 A は線形演算子 \hat{A} で表現され、 \hat{A} の固有値は、 A の測定値として得られる値を表すものと解釈する。物理量は実数値をとるため、物理量に対応する演算子は Hermite 演算子である。測定により物理量の取る値が知られている場合、この物理量は知られている測定値を固有値に含む演算子で表現される。

量子力学では物理量の測定値が離散的な値に限られる場合もあり得るが、しばらくは自然な発想として、測定値が任意の実数値を取り得る物理量について考えよう。系の状態が \hat{A} の固有値 a に属する固有状態 $|a\rangle$ に等しいとき、物理量 A は確定値 a を持つという。今、任意の実数 a に対し、これを測定値として持つ状態 $|a\rangle$ が存在し、状態空間がベクトル空間を成すことから、様々な固有状態の重ね合わせ

$$\int_{-\infty}^{\infty} da\psi(a)|a\rangle \quad (1.2.1)$$

で表される系の状態が考えられる。状態 $|a\rangle$ では A は確定した値 a を持つと言えるが、異なる固有状態の重ね合わせの状態 (1.2.1) では A は確定した値を持たない。すなわち、その測定値は確率的な振る舞いを示すようになる。一般に、状態 $|\psi\rangle$ にある系に対し A の測定を行ったとき、不等式 $a_1 < a < a_2$ を満たす測定値 a が得られる確率は

$$\int_{a_1}^{a_2} da |\langle a|\psi\rangle|^2 \quad (1.2.2)$$

で与えられる。物理量は測定可能な量であり、測定を行えば確率 1 で何らかの実数値が得られるはずである。したがって、系の状態を表す状態ベクトル $|\psi\rangle$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} da |\langle a|\psi\rangle|^2 = 1 \quad (1.2.3)$$

を満たすよう規格化されている必要がある。規格化できない零ベクトルは物理量の測定値に関する情報を持たないため、零ベクトルに対応する系の状態は存在しないと考えてよい。

物理量の統計的性質を求めるには、 $\langle a|\psi\rangle$ を計算する必要がある。系が (1.2.1) で表される場合は、 $\langle a|a'\rangle = \delta(a - a')$ を用いて容易に計算が実行でき、値 $\langle a|\psi\rangle = \psi(a)$ が得られる。それでは、系の状態 $|\psi\rangle$ が \hat{A} の固有状態の重ね合わせで書けない場合の計算はどう考えればよいだろうか。結論から言えば、物理量が測定可能であることから、このような場合について考えなくて良いことが言える。以下でこれを示そう。

定理 3 (物理量の固有状態の完全性)

任意の状態ベクトルは物理量の固有状態の重ね合わせで書くことができる。

証明 物理量 \hat{A} の固有状態の重ね合わせは次のように表せる。

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da|a\rangle\langle a|\psi\rangle. \quad (1.2.4)$$

この表記が任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して可能であることは、完全性条件と呼ばれる条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} da|a\rangle\langle a| = \hat{I} \quad (1.2.5)$$

と同値である。そこで、完全性条件が成り立たないと仮定したとき、物理量が測定可能であることと矛盾が生じることを示そう。

線形演算子 $\hat{P} = \int_{-\infty}^{\infty} da|a\rangle\langle a|$ が \hat{I} と異なるならば、 $\hat{P}|\varphi\rangle \neq |\varphi\rangle$ を満たす状態 $|\varphi\rangle$ が存在する。今、 $|\psi\rangle = \hat{P}|\varphi\rangle - |\varphi\rangle$ とおけば、

$$\begin{aligned} \langle a|\psi\rangle &= \langle a|\left(\int_{-\infty}^{\infty} da'|a'\rangle\langle a'|\varphi\rangle - |\varphi\rangle\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} da'\delta(a - a')\langle a'|\varphi\rangle - \langle a|\varphi\rangle \\ &= \langle a|\varphi\rangle - \langle a|\varphi\rangle = 0, \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

従って、状態 $|\psi\rangle$ にある系では、どのような実数 a を選んでも、物理量がこの値をとる確率は 0 となる。これは物理量が測定可能であることと矛盾する。よって、固有状態の完全性 (1.2.5) が成り立たねばならないことが示された。

(証明終)

以上より、測定可能な量である物理量を表す線形演算子は、固有状態の完全系を持つ Hermite 演算子でなければならない。このような演算子を本書では自己共役演算子と呼ぶことにする²⁾。以上の内容を量子力学の第二の原理としてまとめよう。

原理 2 物理量の統計的性質

(i) 物理量 A は次の性質を満たす自己共役演算子 \hat{A} で表される。

²⁾ 物理学の書籍では Hermite 演算子と自己共役演算子を区別せず用いることも多い。本書では固有ベクトルの完全性を強調して自己共役演算子という用語を用いるが、これは数学的に厳密に Hermite 演算子、自己共役演算子を区別する立場ともまた異なる。言わば、大胆なやり方で本質を提示する物理の立場と、概念を繊細に分析する数学の立場の折衷案を取ったつもりである。数学における Hermite 演算子および自己共役演算子の区別に関しては付録で簡単に触れるので、本書の立場の適否に関しては読者各人に判断してもらいたい。

- (エルミート性) $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$
 - (固有ベクトルの完全性) $|a\rangle$ を正規直交した, 固有値 a に属す \hat{A} の固有ベクトルとすると, $\int_{-\infty}^{\infty} da |a\rangle\langle a| = \hat{I}$ が成り立つ.
- (ii) 時刻 t における物理量 A の測定値 a が不等式 $\alpha < a < \alpha'$ を満たす値をとる確率は $\int_{\alpha}^{\alpha'} da |\langle a|\psi(t)\rangle|^2$ で与えられる.

ところで, 量子力学では物理量が離散的な値をとる場合があると述べた. 具体的な例は第2章で扱うことになるが, この場合, 原理2は次のように修正して扱えば良い.

- (i)' 物理量 A は次の性質を満たす自己共役演算子 \hat{A} で表される.
- (エルミート性) $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$
 - (固有ベクトルの完全性) $|a_i\rangle$ を正規直交 ($\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$) した, 固有値 a_i に属す \hat{A} の固有ベクトルとすると, $\sum_{i=1}^{\infty} |a_i\rangle\langle a_i| = \hat{I}$ が成り立つ.
- (ii)' 時刻 t における物理量 A の測定値が a_i である確率は $|\langle a_i|\psi(t)\rangle|^2$ で与えられる.

また, 測定値が離散的な値 a_1, a_2, \dots と連続的な値 $b < a < c$ に跨る場合もあり得る. このとき, 正規直交条件, 完全性条件および $\alpha < a < \alpha'$ を満たす測定値 a が得られる確率は

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}, \langle a_i|a\rangle = 0, \langle a|a'\rangle = \delta(a - a'), \quad (1.2.7)$$

$$\hat{I} = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i\rangle\langle a_i| + \int_b^c da |a\rangle\langle a|, \quad (1.2.8)$$

$$\sum_{\alpha < a_i < \alpha'} |\langle a_i|\psi(t)\rangle|^2 + \int_{\alpha}^{\alpha'} da |\langle a|\psi(t)\rangle|^2 \quad (1.2.9)$$

で与えられる.

系が状態 $|\psi\rangle$ にあるときの物理量の統計的性質は原理2に従って求められる. $|\psi\rangle$ は $\langle \psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da |\langle a|\psi\rangle|^2 = 1$ を満たすよう規格化される. このとき,

$$\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle \psi|\hat{A} \left(\int_{-\infty}^{\infty} da |a\rangle\langle a|\psi\rangle \right) = \int_{-\infty}^{\infty} da a |\langle a|\psi\rangle|^2$$

は物理量の値を確率密度の重みで積分した量であるから, A の期待値を表す. 系の状態が明らかな場合, 期待値を表す左辺の量を $\langle \hat{A} \rangle$ と省略することもある. 同様に, 物理量 A の分散は $\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \psi|(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2|\psi\rangle$ で与えられる.

さて, ここまでは1種類の物理量に着目した話であった. 次の節では, 例えば, 位置と運動量, ベクトル量の x 成分と y 成分といった, 複数の物理量の扱いについて述べる.

1.3 同時測定可能性

1.3.1 物理量の不確定性

量子力学では測定が系に与える影響が考慮される. 複数の物理量を扱う場合, ある物理量の測定が他の物理量の測定結果に与える影響を考えなければならない. 測定における物理量 \hat{A}, \hat{B} 相互の関係は $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ で定義される交換子によって特徴付けられる. 交換子の意味付けと共に, 複数の物理量を扱うための数学的な枠組みを提示するのが次の原理である.

原理3 不確定性原理

物理量 \hat{A}, \hat{B} に対し $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ が成り立つならば

$$\hat{A}|ab\rangle = a|ab\rangle, \hat{B}|ab\rangle = b|ab\rangle, \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db |ab\rangle \langle ab| = \hat{I} \quad (1.3.1)$$

を満たす同時固有状態の完全系 $\{|ab\rangle | -\infty < a, b < \infty\}$ が存在し, $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ ならば, このような完全系は存在しない.

演算子 \hat{A}, \hat{B} が $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ を満たすとき, これらは交換する (可換である) といい, そうでない場合は交換しない (非可換である) という.

ちなみに, この原理は状態ベクトルの計算規則から導くことができる. 状態ベクトルの計算規則の深い理解にもつながる問題であるから, その導出過程を示しておこう.

定理4 原理3の証明・前半

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ を満たす物理量 \hat{A}, \hat{B} には同時固有状態の完全系が存在する.

証明 $\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} da a|a\rangle \langle a|, \hat{B} = \int_{-\infty}^{\infty} db b|b\rangle \langle b|$ に注意すると, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db ab(|a\rangle \langle a|b\rangle \langle b| - |b\rangle \langle b|a\rangle \langle a|) = 0 \quad (1.3.2)$$

と書ける. 従って

$$|a\rangle \langle a|b\rangle \langle b| = |b\rangle \langle b|a\rangle \langle a| \quad (1.3.3)$$

が成り立つだろう.³⁾ 今, $\hat{P}(a, b) = |a\rangle \langle a|b\rangle \langle b| = |b\rangle \langle b|a\rangle \langle a|$ とおけば

$$\hat{A}\hat{P}(a, b) = a\hat{P}(a, b), \hat{B}\hat{P}(a, b) = b\hat{P}(a, b) \quad (1.3.4)$$

が成り立つから, 任意の状態 $|\psi\rangle$ に対し, $\hat{P}(a, b)|\psi\rangle$ が (零でなければ) 固有値 a, b に属す \hat{A}, \hat{B} の同時固有状態となる.⁴⁾

同時固有状態の存在が言えたので, 次にこれの完全性を示そう. $\langle ab|a'b'\rangle = \delta(a - a')\delta(b - b')$ を満たすよう規格化された同時固有状態 $|ab\rangle$ をとれば, 任意の $|\psi\rangle$ に対し $\hat{P}(a, b)|\psi\rangle \propto |ab\rangle$ が成り立つから $\hat{P}(a, b) = |ab\rangle \langle \psi_{ab}|$ と書くことができる. $\hat{P}(a, b)$ の Hermite 性から $|\psi_{ab}\rangle = C(a, b)|ab\rangle$ ($C(a, b)$ は実数値の係数) が示される. $\hat{P}(a, b)\hat{P}(a', b') = C(a, b)\delta(a - a')\delta(b - b')\hat{P}(a, b)$ を用いると

$$\begin{aligned} \hat{I} &= \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db \hat{P}(a, b) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db \int_{-\infty}^{\infty} da' \int_{-\infty}^{\infty} db' \hat{P}(a, b)\hat{P}(a', b') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db \int_{-\infty}^{\infty} da' \int_{-\infty}^{\infty} db' C(a, b)\delta(a - a')\delta(b - b')\hat{P}(a, b) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db C(a, b)\hat{P}(a, b), \end{aligned}$$

³⁾ 実は, 同時固有状態の存在に関しては, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ よりも (1.3.3) が成り立つことが重要である. 実際, Hilbert 空間の概念を基礎に量子力学の枠組みを構成する際は, 同時測定可能な物理量に対し (1.3.3) が成り立つことを要請する.

⁴⁾ ある a, b の値の組に対し任意の状態 $|\psi\rangle$ が $\hat{P}(a, b)|\psi\rangle = |\emptyset\rangle$ を満たす, すなわち, ある a, b の組に対する同時固有状態が存在しないということはあり得る. 後に角運動量に関係して, それぞれ $l = 0, 1, 2, \dots$ および $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ という値をとる二つの量の同時固有状態 $|l, m\rangle$ を扱うが, その際, l, m の値は $-l \leq m \leq l$ に制限される.

従って $C(a, b) = 1$ であり, $|ab\rangle$ の完全性 $\hat{I} = \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db |ab\rangle \langle ab|$ が得られる.

一般に, $[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = 0$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$) を満たす n 個の物理量 $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$ に対し,

$$\hat{P}(a_1, \dots, a_n) = |a_1\rangle \langle a_1| a_2\rangle \langle a_2| \cdots |a_{n-1}\rangle \langle a_{n-1}| a_n\rangle \langle a_n| \quad (1.3.5)$$

$$\hat{A}_i \hat{P}(a_1, \dots, a_n) = a_i \hat{P}(a_1, \dots, a_n) \quad (1.3.6)$$

を用いて同様の議論を行えば, 同時固有状態 $|a_1 a_2 \cdots a_n\rangle$ の存在と完全性が示される.

(証明終)

定理 5 原理 3 の証明・後半

交換しない物理量は同時固有状態の完全系を持たない.

証明 対偶が容易に示せる. 同時固有状態の完全系が存在する場合, 任意の $|\psi\rangle$ に対し

$$[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle = [\hat{A}, \hat{B}] \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db |ab\rangle \langle ab|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db (ab - ba) |ab\rangle \langle ab|\psi\rangle = |\emptyset\rangle$$

が成り立つから, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ が成り立たねばならない.

(証明終)

原理 3 は本書ではこれも原理として採用する. 複数の物理量を扱う際の出発点はまぎれもなくこの定理であるからだ.

交換する物理量 $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_n$ の同時確率分布(結合確率分布)は内積 $\langle a_1 \cdots a_n | \psi \rangle$ から計算される. 例えば, 不等式 $\alpha_i < a_i < \alpha'_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$) を満たす測定値の組 a_1, a_2, \dots, a_n が得られる確率は

$$\int_{\alpha_1}^{\alpha'_1} da_1 \cdots \int_{\alpha_n}^{\alpha'_n} da_n |\langle a_1 \cdots a_n | \psi \rangle|^2$$

で与えられる. 原理的には確率密度関数 $|\langle a_1 \cdots a_n | \psi \rangle|^2$ は任意の形を取り得る. 確率密度が n 次元空間の狭い領域に集中している場合, 物理量の組の値はほとんど定まっていると考えて良いだろう. この意味で, 交換する物理量の値は同時に定まると言える. 一方, \hat{A}, \hat{B} が交換しない場合, これらが同時に定まることはない. この事実は次の定理で与えられる.

定理 6 不確定性関係

交換関係 $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ に従う物理量を考える. このとき, 任意の状態に対し, これらの標準偏差 $\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle}$, $\Delta B = \sqrt{\langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \rangle}$ は次の不等式に従う.

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|. \quad (1.3.7)$$

証明 系の状態を $|\psi\rangle$ とし, $\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, $\Delta \hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$ と略記する.

$$\hat{X} = \lambda \Delta \hat{A} - i \Delta \hat{B} \quad (1.3.8)$$

という演算子を考えよう. λ は任意の実数値を取るものとする. 状態ベクトル $\hat{X}|\psi\rangle$ のノルムは内積の性質から $\langle \hat{X}^\dagger \hat{X} \rangle \geq 0$ を満たす. $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$, $\langle \hat{B} \rangle = \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle$ は複素数であり, 演算子と交換することに注意すると,

$$\langle \hat{X}^\dagger \hat{X} \rangle = \langle (\lambda \Delta \hat{A} + i \Delta \hat{B})(\lambda \Delta \hat{A} - i \Delta \hat{B}) \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \lambda^2 \Delta \hat{A}^2 + \Delta \hat{B}^2 - i\lambda[\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] \rangle \\
&= \lambda^2 \Delta A^2 + \Delta B^2 + \lambda \langle \hat{C} \rangle \geq 0
\end{aligned} \tag{1.3.9}$$

が任意の実数 λ に対し成り立つことがわかる。ここで λ の2次関数である (1.3.9) 左辺の判別式を考えれば、不等式 $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|$ が得られる。

(証明終)

したがって、交換しない物理量の一方 \hat{A} が精度よく定まっている状態 ($\Delta A \sim 0$) において、もう一方の物理量 \hat{B} の不確かさ ΔB は増大し、 \hat{B} の測定値は大きなランダム性を示すことになる⁵⁾。

1.3.2 位置と運動量の表現

原理4 正準交換関係

質点の位置を表す座標 q_i とそれに対応する運動量 p_i の間には次の正準交換関係が成り立つ。

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \tag{1.3.10}$$

この原理によって、位置と運動量が同時に精度良く定まらない物理量であることが規定される。位置と運動量の不確かさ $\Delta q \Delta p$ は エネルギー \times 時間 の次元を持ち、その下限は原理中の定数 \hbar (この記号はエイチバーと読む) で与えられる。 \hbar は実験を通じて

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \tag{1.3.11}$$

という値が知られている。定数 $h = 2\pi\hbar$ は、^{プランク}Planck定数という名前を持つ。

質点系の物理量の同時測定可能性は、正準交換関係に規定される。位置と運動量は同時に測定できないから、(計算上の利点がなければ) 系の状態は座標あるいは運動量の固有状態の重ね合わせで表現するのが自然だろう。この場合、状態ベクトルの計算は系の状態を指定する展開係数 $\langle q_1 \cdots q_f | \psi(t) \rangle$, $\langle p_1 \cdots p_f | \psi(t) \rangle$ (f は系の自由度) の計算に帰着する。

ここで直交座標系における位置および運動量の計算を詳しく見ることにしよう。以下、直交座標 \hat{x}_i および運動量 \hat{p}_i の固有状態 $|x_1 \cdots x_f\rangle$, $|p_1 \cdots p_f\rangle$ を $|x\rangle$, $|p\rangle$ 、多重積分 $\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_f$ および $\delta(x_1)\delta(x_2)\cdots\delta(x_f)$ を $\int d^f x$, $\delta^f(x)$ などと省略する。

まず、座標に注目してみよう。状態ベクトル $|\psi\rangle$ は展開係数 $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$ によって特徴付けられる。位置演算子 \hat{x}_i を $|\psi\rangle$ に作用させた結果は

$$\hat{x}_i |\psi\rangle = \hat{x}_i \int d^f x \psi(x) |x\rangle = \int d^f x x_i \psi(x) |x\rangle \tag{1.3.12}$$

であるから、展開係数に注目すれば位置演算子の働きは $\hat{x}_i : \psi(x) \mapsto x_i \psi(x)$ と表せる。それでは、運動量演算子の展開係数に対する働きはどのように表されるだろうか。これは正準交換関係を利用して導くことができる。まず、

$$\langle x | [\hat{x}_i, \hat{p}_j] | x' \rangle = \langle x | (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i) | x' \rangle = (x_i - x'_i) \langle x | \hat{p}_j | x' \rangle \tag{1.3.13}$$

⁵⁾ ただし、系が $\hat{C}|\psi\rangle = |\emptyset\rangle$ を満たす状態 $|\psi\rangle$ にある場合を除く。ちなみに、この状態 $|\psi\rangle$ が \hat{A}, \hat{B} の同時固有状態となることもあり得るが、このような同時固有状態の集合が完全系を成すことはない。

に注意すれば, 正準交換関係の行列要素が次の式で δ 関数と関連付けられる.

$$(x_i - x'_i)\langle x|\hat{p}_j|x'\rangle = \langle x|i\hbar|x'\rangle = i\hbar\delta_{ij}\delta^f(x - x'). \quad (1.3.14)$$

この式と Taylor 展開 $\langle x'|\psi\rangle = \langle x|\psi\rangle + \sum_i(x'_i - x_i)\frac{\partial}{\partial x_i}\langle x|\psi\rangle + \dots$ を用いれば

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}_j|\psi\rangle &= \int d^f x' \langle x|\hat{p}_j|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle = \int d^f x' \langle x|\hat{p}_j|x'\rangle \left(\langle x|\psi\rangle + \sum_i(x'_i - x_i)\frac{\partial}{\partial x_i}\langle x|\psi\rangle + \dots \right) \\ &= \langle x|\psi\rangle \int d^f x' \langle x|\hat{p}_j|x'\rangle + \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i}\langle x|\psi\rangle \right) \int d^f x' (x'_i - x_i)\langle x|\hat{p}_j|x'\rangle + \dots \\ &= \langle x|\psi\rangle \int d^f x' \langle x|\hat{p}_j|x'\rangle - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}\langle x|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.3.15)$$

という式が得られる. Taylor 展開の 2 次以上の項は $(x - x')\delta(x - x') = 0$ から消える. 第 1 項には x 依存性を持つ未知の量 $\int d^f x' \langle x|\hat{p}_j|x'\rangle$ が含まれる. これを $f_j(x)$ とおけば運動量演算子の働きは

$$\hat{p}_j : \psi(x) \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x) + f_j(x)\psi(x) \quad (1.3.16)$$

と表せる. これを運動量演算子の微分演算子による表現という.

運動量演算子の表現には未知量 f_j が含まれているが, その値を求める必要はない. ここで物理量の固有状態に関して注釈を述べよう. 物理量の固有状態は正規直交条件を満たすよう規格化されるが, $|x\rangle$ に位相因子 $e^{i\theta}$ (θ は実数. 一般に x 依存性があってもよい) をかけた状態もまた正規直交条件を満たす固有状態となる. つまり, 固有状態には位相因子の任意性がある. f_j は実は, この任意性に起因して現れる見掛けの量なのである. これを見るために, f_j の性質を調べていこう.

\hat{p}_j は Hermite 演算子であり, 任意の状態ベクトル $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対し $\langle \phi|\hat{p}_j|\psi\rangle = \langle \psi|\hat{p}_j|\phi\rangle^*$ を満たす. (1.3.16) を用いて計算すると

$$\begin{aligned} \langle \phi|\hat{p}_j|\psi\rangle &= \int d^f x \langle \phi|x\rangle \langle x|\hat{p}_j|\psi\rangle = \int d^f x \langle \phi|x\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} + f_j(x) \right) \langle x|\psi\rangle \quad (1.3.17) \\ \langle \psi|\hat{p}_j|\phi\rangle^* &= \left(\int d^f x \langle \psi|x\rangle \langle x|\hat{p}_j|\phi\rangle \right)^* = \left(\int d^f x \langle \psi|x\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} + f_j(x) \right) \langle x|\phi\rangle \right)^* \\ &= \int d^f x \langle x|\psi\rangle \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} + f_j^*(x) \right) \langle \phi|x\rangle \\ &= \int d^{f-1} x \left[-\frac{\hbar}{i} \langle x|\psi\rangle \langle \phi|x\rangle \right]_{x_i=-\infty}^{x_i=\infty} + \int d^f x \langle \phi|x\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} + f_j^*(x) \right) \langle x|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.3.18)$$

となる. 無限遠方に存在する質点は測定にかからないから $\lim_{x_i \rightarrow \pm\infty} \langle x|\psi\rangle = 0$ であり, 比較により $f_j = f_j^*$ が得られる. すなわち, f_j は実関数である. また, 運動量の 2 次式の働きは

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}_j\hat{p}_k|\psi\rangle &= \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} + f_j(x) \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} + f_k(x) \right) \langle x|\psi\rangle \\ &= \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f_k}{\partial x_j} + f_k(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} + f_j(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} + f_j(x) f_k(x) \right) \langle x|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.3.19)$$

であり、運動量同士の交換関係から

$$0 = \langle x | [\hat{p}_j, \hat{p}_k] | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial f_k}{\partial x_j} - \frac{\partial f_j}{\partial x_k} \right) \langle x | \psi \rangle \Rightarrow \frac{\partial f_k}{\partial x_j} = \frac{\partial f_j}{\partial x_k} \quad (1.3.20)$$

が成り立つ。この性質から、多成分量 f_j を $f_j = \frac{\partial F}{\partial x_j}$ によって与えるポテンシャル関数 F の存在が言える。さて、これまで用いていた固有状態 $|x\rangle$ に対し固有状態 $|x_F\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}F(x)\right)|x\rangle$ を定義すれば、これは

$$\begin{aligned} \langle x_F | \hat{p}_j | \psi \rangle &= \int d^f x' \langle x_F | \hat{p}_j | x'_F \rangle \langle x'_F | \psi \rangle = \int d^f x' \langle x_F | \hat{p}_j | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle \\ &= \int d^f x' \langle x_F | \hat{p}_j | x' \rangle \left(\langle x | \psi \rangle + \sum_i (x'_i - x_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \langle x | \psi \rangle + \dots \right) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}F(x)\right) \left(\langle x | \psi \rangle \int d^f x' \langle x | \hat{p}_j | x' \rangle - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \langle x | \psi \rangle \right) \\ &= \langle x_F | \psi \rangle \frac{\partial F}{\partial x_j} - i\hbar \exp\left(\frac{i}{\hbar}F(x)\right) \frac{\partial}{\partial x_j} \langle x | \psi \rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle x_F | \psi \rangle \end{aligned} \quad (1.3.21)$$

を満たし、未知量を含まない。以下では、位置の固有状態 $|x\rangle$ と言え、この $|x_F\rangle$ を表すものとする。また、運動量の固有状態 $|p\rangle$ も同様に、

$$\langle p | \hat{x}_j | \psi \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \langle p | \psi \rangle \quad (1.3.22)$$

を満たすものが選ばれているものとする。

状態ベクトルの具体的な計算には展開係数 $\langle x | \psi \rangle, \langle p | \psi \rangle$ に対する演算子の働きを用いる。例えば、位置と運動量を組み合わせて作られる物理量 $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$ の固有ベクトル $|\phi\rangle$ を求める問題は偏微分方程式の固有値問題

$$A\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) \langle x | \phi \rangle = a \langle x | \phi \rangle \quad (1.3.23)$$

あるいは

$$A\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, p\right) \langle p | \phi \rangle = a \langle p | \phi \rangle \quad (1.3.24)$$

に帰着する。計算に $\langle x | \psi \rangle$ を用いる方法を座標表示といい、 $\langle p | \psi \rangle$ を用いる方法を運動量表示という。表示の選択は計算上便利なように選べばよい。問題によっては座標や運動量以外の物理量による表示が役立つこともあるだろう。

ここで、表示を切り替える方法についても述べておこう。座標表示、運動量表示の状態ベクトルは積分変換

$$\langle x | \psi \rangle = \int d^f p \langle x | p \rangle \langle p | \psi \rangle, \quad \langle p | \psi \rangle = \int d^f x \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle$$

によって結び付いている。積分を特徴付ける $\langle x | p \rangle = \langle p | x \rangle^*$ は偏微分方程式

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \langle x | p \rangle = \langle x | \hat{p}_j | p \rangle = p_j \langle x | p \rangle, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \langle p | x \rangle = \langle p | \hat{x}_j | x \rangle = x_j \langle p | x \rangle \quad (1.3.25)$$

の解であるから, x, p に依存しない定数 C を用いて $\langle x|p\rangle = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^f p_j x_j\right)$ と書くことができる. δ 関数の積分表示 $2\pi\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ikx)$ と

$$\delta^f(x - x') = \int d^f p \langle x|p\rangle \langle p|x'\rangle = \int d^f p |C|^2 \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^f p_j (x_j - x'_j)\right) \quad (1.3.26)$$

を比較すれば $|C| = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right)^f$ が成り立つ. C は一般に複素数値を取り得るが, 位置および運動量の確率の計算に影響は出ないので $C = |C|$ としてよい. すると, 座標表示と運動量表示の変換は Fourier 変換

$$\begin{aligned} \langle x|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^f} \int d^f p \langle p|\psi\rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^f p_j x_j\right) \\ \langle p|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^f} \int d^f x \langle x|\psi\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^f p_j x_j\right) \end{aligned}$$

で与えられることがわかる.

1.4 状態の変化

1.4.1 時間発展

時間経過に伴い変化が生じる様を時間発展という. 古典力学では質点に作用する力の法則によって系の時間発展が定まる. 量子力学における系の時間発展は次の原理に従う.

原理 5 時間発展方程式

系の状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展はハミルトニアンという物理量 \hat{H} によって定まる方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.4.1)$$

に従う.

ハミルトニアンは系のエネルギーを座標と運動量を用いた形 $\hat{H} = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)$ で書き表したものである. 例えば, ポテンシャル $V(x, y, z, t)$ のもと 3次元空間を運動する質量 m の質点のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \hat{V}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, t) \quad (1.4.2)$$

である. ハミルトニアンは系の自由度や相互作用の詳細に関する情報を含んでおり, 個々の系を特徴付ける役割を果たす. 個々の系のハミルトニアンとその取り扱いについては第 2 章の例題で扱うことにして, ここでは時間発展方程式が一般的に満たす性質を調べる. まず, 最も基本的な定理である確率の保存則について述べよう. これは物理量がどの時刻でも確率 1 で測定可能であることを保証するものであり, これにより時間発展方程式が確率論的な枠組みと整合性を持つことが示される.

定理 7 確率の保存則

$t = 0$ で規格化された状態ベクトルは $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle \psi(0)|\psi(0)\rangle = 1$ を満たす.

証明

$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ の計算を考える. $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ なので

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \left(-i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right)^\dagger = \left(-\hat{H} | \psi(t) \rangle \right)^\dagger = -\langle \psi(t) | \hat{H},$$

従って

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \left(i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left(i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) \\ &= -\langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle = 0. \end{aligned}$$

よって $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ は t に依存せず その値は $\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 1$ に等しい. (証明終)

この証明方法を応用すると, 物理量の保存則に関係する次の定理が得られる.

定理 8 期待値の時間発展

- 時刻 t に依存しない物理量 \hat{A} の期待値 $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$ の時間発展は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi(t) \rangle \quad (1.4.3)$$

で与えられる. 特に, $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ が成り立つ場合, $\langle \hat{A} \rangle$ は保存量となる.

- \hat{A} が時刻 t に依存する場合 (例えば運動量 \hat{p} に t をかけた量 $\hat{A} = \hat{p}t$ の振る舞いを見たい場合など), (1.4.3) は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | [\hat{A}(t), \hat{H}] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left(i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) \right) | \psi(t) \rangle \quad (1.4.4)$$

となり, 演算子の微分に対する振る舞いを評価する必要があるが生じる.

続いて, 時間発展方程式の解法について述べよう. 時間について1階の微分方程式は, 時間積分を実行して解くことができる. $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)$ を $\hat{H}(t)$ と略記して, 時間発展方程式の両辺を積分すると

$$| \psi(t) \rangle = | \psi(0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1) | \psi(t_1) \rangle \quad (1.4.5)$$

となるが, 右辺の $| \psi(t_1) \rangle$ も同様に

$$| \psi(t_1) \rangle = | \psi(0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_2) | \psi(t_2) \rangle \quad (1.4.6)$$

と置くことができるので, 右辺の積分中の $| \psi(t_n) \rangle$ を $| \psi(0) \rangle$ に次々置き換えていくと

$$\begin{aligned} | \psi(t) \rangle &= | \psi(0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1) | \psi(0) \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) | \psi(0) \rangle + \dots \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n) | \psi(0) \rangle + \dots \end{aligned} \quad (1.4.7)$$

という級数の形で解が得られる.⁶⁾ この式を $| \psi(t) \rangle = \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle$ と略記したときの $\hat{U}(t)$ を時間発展演算子という. 特に, ハミルトニアンが時間に依存しない場合, 右辺の多重積分

⁶⁾ この解法は逐次代入法と呼ばれる.

は公式 $\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n = \frac{1}{n!} t^n$ を用いて処理できるため、時間発展演算子は演算子の指数関数

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n t^n}{n! \hbar^n} \hat{H}^n = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \quad (1.4.8)$$

で与えられる。これを用いると、ハミルトニアン (エネルギー) の固有状態 $|E\rangle$ の重ね合わせ $|\psi(t)\rangle = \int dE \psi(E, t) |E\rangle$ の展開係数 $\psi(E, t)$ は

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) |\psi(0)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \int dE \psi(E, 0) |E\rangle \\ &= \int dE \psi(E, 0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) |E\rangle \end{aligned} \quad (1.4.9)$$

より、初期条件から定まる値 $\psi(E, t) = \psi(E, 0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right)$ で与えられることがわかる。

形式的にはこのように解ける時間発展方程式であるが、これを **Schrödinger** 方程式と^{シュレディンガー}呼ばれる偏微分方程式として扱う方法もある。Schrödinger 方程式とは、座標表示の時間発展方程式のことである。前節で示したように、直交座標による表示では運動量演算子は単純に座標の微分で表せるから

$$\begin{aligned} \langle x | i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle(t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi(t)\rangle, \\ \langle x | \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}, t) |\psi\rangle(t) &= H\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, t\right) \langle x | \psi(t)\rangle, \end{aligned}$$

したがって、 $\langle x | \psi(t)\rangle = \psi(x, t)$ とおけば、Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, t\right) \psi(x, t) \quad (1.4.10)$$

となる。一般に Schrödinger 方程式は、例えばハミルトニアン (1.4.2) に対する式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z, t) + V(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) \quad (1.4.11)$$

のように、運動エネルギーの項に起因する 2 階偏微分方程式となる。比較的簡単な偏微分方程式はその解法が系統的に調べられており、解法が知られていない問題であっても数値計算によってその振る舞いを調べることはできる。

ハミルトニアンが時間を含まない場合、時間発展方程式の一般解は (1.4.9) で与えられるが、ここから位置や運動量の確率分布の時間発展を求めるには、座標表示、運動量表示でのエネルギー固有状態 $\langle x | E \rangle$, $\langle p | E \rangle$ を固有値問題

$$E \langle x | E \rangle = H\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) \langle x | E \rangle \quad (1.4.12)$$

の解として求める必要がある。(1.4.12) は時間を含まない **Schrödinger** 方程式とも呼ばれる。

1.4.2 測定の影響

系の状態が与えられたならば、物理量の測定値が従う確率分布が定まる。しかし、状態と測定値の関係はこれに留まらない。逆に、測定によって物理量の測定値が与えられたとしよう。このとき、系の状態は測定結果に応じた状態にあることが知られている。こういった、測定と状態の間の関係は次の原理に規定される。

原理6 射影公準

物理量 A の測定を行い、測定値 a が $\alpha < a < \alpha'$ の範囲に見出されたときの系の状態は、射影演算子 $\int_{\alpha}^{\alpha'} da |a\rangle\langle a|$ の固有値 1 に属す固有状態である。

射影演算子とは、 $\hat{P}^2 = \hat{P}$ を満たす演算子 \hat{P} のことであった。 $\hat{P} = \int_{\alpha}^{\alpha'} da |a\rangle\langle a|$ が $\hat{P}^2 = \hat{P}$ を満たすことは容易に証明できる。

複数の物理量の測定を行った場合、すなわち、同時測定可能な物理量 A_1, \dots, A_n の測定値 a_1, \dots, a_n がそれぞれ $\alpha_i < a_i < \alpha'_i$ を満たす測定結果が得られたとき、系の状態は射影演算子 $\int_{\alpha_1}^{\alpha'_1} da_1 \cdots \int_{\alpha_n}^{\alpha'_n} da_n |a_1 \cdots a_n\rangle\langle a_1 \cdots a_n|$ の固有値 1 に属す固有状態となる。

様々な実験における物理量の振る舞いを予測するには、その系の状態に関する知識が必要になる。ここで、射影公準は大きな役目を果たす。物理量を高い精度 ($|\alpha' - \alpha| \ll 1$) で測定すれば、系の状態はこの狭い範囲の固有状態の重ね合わせに限定されるためである。

離散的な固有値 a_1, a_2, \dots を持つ物理量 \hat{A} の測定を行い、 $\alpha < a < \alpha'$ を満たす測定値が得られたならば、系の状態は重ね合わせの状態 $\sum_{\alpha < a_i < \alpha'} c_i |a_i\rangle$ に移る。特に、測定精度が高く、 $\alpha < a_i < \alpha'$ を満たす a_i がただ一つ定まる場合、測定後の状態は固有状態 $|a_i\rangle$ であり、連続固有状態の場合のような曖昧さは残らない。

物理量の測定結果は確率的に決まるため、測定の前後での系の変化は確率的な性格を持つ。これは、時間発展方程式を考える限り、系の状態が過去の状態からただ一つ定まることと対照的である。状態の変化の原因として、自然に生じる時間発展の他に測定という人為的な操作を考えねばならないことは多少不自然にも思われるため、より“自然な”理解を求める様々な解釈の試み⁷⁾が為されている。量子力学の解釈の問題は興味深い話題ではあるが、込み入った話でもあるので、本書では立ち入らないことにする。

1.5 第1章のまとめ

量子力学の原理に関する一通りの説明が済んだので、一般的な形で要点を述べておこう。

- 量子力学では、時刻 t における系の状態はノルム 1 の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ によって記述され、物理量 A は状態ベクトルに作用する自己共役演算子 \hat{A} で表される。物理量の固有状態は完全正規直交系を成すので、系の状態は固有状態の重ね合わせ

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da \psi(a, t) |a\rangle, |\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t) |a_i\rangle, \text{ または}$$

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} da \psi(a, t) |a\rangle + \sum_i c_i(t) |a_i\rangle$$

で書くことができる。物理量の測定値は一般に確率的振る舞いを示し、時刻 t に $\alpha < a < \alpha'$ を満たす測定値 a が得られる確率は、

$$\int_{\alpha}^{\alpha'} da |\psi(a, t)|^2, \sum_{\alpha < a_i < \alpha'} |c_i(t)|^2, \text{ または}$$

$$\int_{\alpha}^{\alpha'} da |\psi(a, t)|^2 + \sum_{\alpha < a_i < \alpha'} |c_i(t)|^2$$

⁷⁾ こうした解釈の試みは、白井仁人・東 克明・森田邦久・渡辺鉄平『量子という謎 量子力学の哲学入門』（勤草書房 2012）に詳しい。

で与えられる.

- 複数の物理量の同時確率分布を与える枠組みは、物理量の交換関係に規定される. 交換する物理量 \hat{A}, \hat{B} には完全系を成す同時固有状態 $|ab\rangle$ が存在し、同時確率分布 $|\langle ab|\psi\rangle|^2$ が問題なく定義される. 一方、交換しない物理量、例えば交換関係が $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \neq 0$ で与えられる物理量 \hat{A}, \hat{B} は固有状態の完全系を持たず、確率分布の形が不確定性関係 $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|$ による制限を受けるため、一般にこれらの量が同時に定まると考えることはできない.
- 質点系の基本的な物理量である座標と運動量は正準交換関係と呼ばれる交換関係を満たす. 正準交換関係から、運動量演算子が座標の微分で表せること、逆に座標演算子が運動量の微分で表せることがわかる.
- 物理量の値については、測定を行わない限り確かなことは言えない. しかし、測定が行われない間も系は何らかの状態にあり、その状態は与えられたハミルトニアンに従って時間発展する.
- 測定を行えば、物理量の値は (測定精度の許す範囲で) 定まる. 測定により物理量 \hat{A} の値 a が $\alpha < a < \alpha'$ の範囲にあることがわかっている場合、系の状態が重ね合わせの状態

$$\int_{\alpha}^{\alpha'} da \psi(a, t) |a\rangle, \sum_{\alpha < a_i < \alpha'} c_i(t) |a_i\rangle, \text{ または}$$

$$\int_{\alpha}^{\alpha'} da \psi(a, t) |a\rangle + \sum_{\alpha < a_i < \alpha'} c_i(t) |a_i\rangle$$

にあることが言える.

- ハミルトニアンから定まる時間発展を考える限り、未来の状態は過去の状態から一意に定まる. 一方、物理量の測定値は確率的に振る舞うため、測定後に系がどのような状態にあるかは確率的にしか言えない. (この点を指して、時間発展による系の変化は因果的であり、測定による系の変化は非因果的であるという.)

最後に、第1章を書くにあたって参考にした教科書や、さらなる考察に役立つと思われる文献をいくつか挙げておきたい. まずは、筆者が大学時代に使った教科書

[1] 倉本義夫・江澤潤一 『量子力学』 (現代物理学 [基礎シリーズ]) (朝倉書店 2008)

である. この本の5章と6章の題材についてあれこれ考えたときの体験が本書を書く原動力となったように思うので、謝辞と共に紹介しておきたい. 次に、ブラケット記法を考案した Dirac による有名な教科書

[2] P. A. M. Dirac “The Principles of Quantum Mechanics” (Oxford University Press 1958)

を挙げておく. Dirac 本人によるブラケット記法は粗削りだが生き生きとした表現力が宿っているように感じられる. 今でも靈感が欲しいときはこの本を読み返すことが多い. この本の邦訳はなぜか骨董品のような古い字体のものしかなかったのだが、最近見やすい字体で書かれたものが出たようなので、そちらで読むのも良いと思う.

量子力学の計算に必要な Fourier 解析や複素関数論の考えをしっかりと学びたいならば

[3] 寺沢寛一 『自然科学者のための数学概論 (増訂版)』 (岩波書店 1983 改版第1刷発行)

を勧める. この本は抽象的な概念より具体的な計算を重視しているため, 手を動かす練習になるかと思う. Fourier 解析や δ 関数に関する簡潔な記述が見たければ,

[4] 後藤憲一・山本邦夫・神吉健 『詳解物理応用数学演習』 (共立出版 1979 初版1刷発行)

が参考になるかと思う. ブラケット記法に関する抽象的な概念を知りたいければ,

[5] 新井朝雄・江沢洋 『量子力学の数学的基礎 I・II』 (朝倉書店 1999)

という数学書が詳しい. この本の内容に関しては, 本書の付録で簡単な解説を付けた.

測定に関する議論は, 例えば

[6] 白井仁人・東 克明・森田邦久・渡辺鉄平 『量子という謎 量子力学の哲学入門』 (勁草書房 2012)

によくまとめられているように思う. 測定に関する議論は, 最近では量子コンピュータとの関連で注目を集めているようであり, 今後の進展が楽しみな分野である.

第 2 章

質点系の 〈 量子力学 〉

この章では代表的な質点系を例題にして量子力学の計算を行う。この計算は個々の系の解析に主眼を置いた具体的なものである。量子力学の計算は調和振動子のような単純な系であってもそれなりに複雑であるため、途中で何をやっているか忘れてしまうことも多い。そうならないためにも、計算の目的は常に意識すべきである。本章の計算の基本目標は

- ハミルトニアン固有値の性質を調べ、あり得る固有状態をすべて求める。
- 固有状態の座標表示を与える式を導く。

ことにある。調和振動子および角運動量の解析手法はそれ自体重要な話題であるが、ここではあくまで、上記の目標にとって必要な範囲に焦点を当てて解説を行い、それ以上の内容は続く章で必要に応じて補足する。これらの例題を一通り眺めれば、正準交換関係を基礎とする位置と運動量の振る舞いから多彩な量子力学的現象が帰結することが理解できるだろう。

例題を一通り見た後は、次章で扱う場の量子論を学ぶモチベーションとして、古典力学の質点系をベースに考えていては見えてこない、スピン角運動量および統計性と呼ばれる性質、および相対論的量子力学の問題点に関する解説を行う。

2.1 自由粒子

2.1.1 自由粒子の一般解

自由粒子は、最も単純な系である。3次元空間を運動する質量 m の自由粒子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \quad (2.1.1)$$

で与えられる。運動量の固有状態 $|\mathbf{p}\rangle = |p_x p_y p_z\rangle$ は明らかにエネルギー $E(\mathbf{p}) = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ を持つハミルトニアンの固有状態である。また、このハミルトニアンは時間に依存しないため、時間発展方程式は解 $|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi(0)\rangle$ を持つ。この解を運動量表示で表せば

$$\langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle = \langle \mathbf{p} | \psi(0) \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E(\mathbf{p}) t\right) \quad (2.1.2)$$

となるから、運動量の確率密度関数 $|\langle p|\psi(t)\rangle|^2$ は変化しないことがわかる。座標表示の解はこれの Fourier 変換

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \int \frac{d^3p}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \langle p|\psi(0)\rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - E(\mathbf{p})t)\right] \quad (2.1.3)$$

で与えられる。これは、任意関数 $\langle p|\psi(0)\rangle$ を含む、自由粒子の Schrödinger 方程式の一般解である。 $\langle p|\psi(0)\rangle$ の具体形を与えれば、これに対応する初期条件を持つ系の振る舞いが予測できる。

2.1.2 自由粒子の初期値問題

ここで、具体的な初期条件を与えて、自由粒子の振る舞いを調べてみよう。話を簡単にするため、1次元の状態

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p|\psi(0)\rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2t}{2m}\right)\right] \quad (2.1.4)$$

に対し、初期条件

$$\langle p|\psi(0)\rangle = \sqrt{\frac{1}{b\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2b^2} - \frac{i}{\hbar}px_0\right] \quad (2.1.5)$$

を与えて計算を行う。指数関数の肩が2次式(正確には、無限遠で $-\infty$ となる2次式)になっている関数は **Gauss関数** と呼ばれ、正の実部を持つ複素数 λ と任意の複素数 c に対し成り立つ次の公式が物理ではよく使われる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda(x-c)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad (2.1.6)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (x-c)^2 e^{-\lambda(x-c)^2} = -\frac{\partial}{\partial \lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda(x-c)^2} = \frac{1}{2\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad (2.1.7)$$

さて、運動量の確率密度関数は

$$|\langle p|\psi(0)\rangle|^2 = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{b^2}\right] \quad (2.1.8)$$

であり、運動量の期待値は明らかに p_0 で、分散は公式 (2.1.7) から求まり、 $b^2/2$ となる。位置の期待値は、運動量表示で計算すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \langle \psi(0)|p\rangle \cdot i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p|\psi(0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \left(-\frac{i\hbar}{b^2}(p-p_0) + x_0\right) |\langle p|\psi(0)\rangle|^2 = x_0$$

である。これでひとまず、パラメータ b, p_0, x_0 の意味は明らかになった。

ここで位置の確率密度関数の形を見ておこう。Fourier 積分表示に (2.1.5) を代入し、整理した後公式 (2.1.6) で積分を行うと

$$\begin{aligned} \langle x|\psi(0)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar b\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2b^2} + \frac{i}{\hbar}p(x-x_0)\right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar b\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{1}{2b^2}\left(p-p_0 - \frac{ib^2}{\hbar}(x-x_0)\right)^2 - \frac{b^2}{2\hbar^2}(x-x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0(x-x_0)\right] \\ &= \exp\left[-\frac{b^2}{2\hbar^2}(x-x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0(x-x_0)\right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar b\sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{1}{2b^2} \left(p - p_0 - \frac{ib^2}{\hbar}(x - x_0) \right)^2 \right] \\ & = \sqrt{\frac{b}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{b^2}{2\hbar^2}(x - x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0(x - x_0) \right], \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

よって、位置の確率密度関数も Gauss 関数になる。公式 (2.1.7) を用いれば位置の分散は $\hbar^2/2b^2$ だとわかる。つまり、この状態における位置と運動量の不確かさは、不確定性関係が許容する最小値 $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ をとる。

初期状態の性質がわかったところで時間発展の計算に移ろう。運動量の確率分布は不変なので、座標表示の状態

$$\langle x | \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar b\sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{(p - p_0)^2}{2b^2} + \frac{i}{\hbar}p(x - x_0) - \frac{ip^2 t}{2m\hbar} \right] \quad (2.1.10)$$

の計算を行う。指数関数の肩の部分を略記

$$\lambda = \frac{1}{2b^2} + \frac{it}{2m\hbar} = \frac{m\hbar + ib^2 t}{2m\hbar b^2} \quad (2.1.11)$$

を用いて p 依存性を持つ部分と他の部分に分けると

$$\begin{aligned} [\dots] & = -\lambda p^2 + p \left(\frac{p_0}{b^2} + \frac{i(x - x_0)}{\hbar} \right) - \frac{p_0^2}{2b^2} \\ & = -\lambda \left(p - \frac{1}{2\lambda} \left(\frac{p_0}{b^2} + \frac{i(x - x_0)}{\hbar} \right) \right)^2 + \frac{1}{4\lambda} \left(\frac{p_0}{b^2} + \frac{i(x - x_0)}{\hbar} \right)^2 - \frac{p_0^2}{2b^2} \end{aligned}$$

となる。λ の実部は正なので、(2.1.6) を用いて p 積分を行うと

$$\begin{aligned} \langle x | \psi(t) \rangle & = \frac{1}{\sqrt{2\lambda\hbar b\sqrt{\pi}}} \exp \left[\frac{1}{4\lambda} \left(\frac{p_0}{b^2} + \frac{i(x - x_0)}{\hbar} \right)^2 - \frac{p_0^2}{2b^2} \right] \\ & = \frac{1}{\sqrt{2\lambda\hbar b\sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{1}{2\lambda b^2} \frac{b^2}{2\hbar^2}(x - x_0)^2 + \frac{1}{2\lambda b^2} \frac{i}{\hbar}p_0(x - x_0) + \frac{p_0^2}{2b^2} \left(\frac{1}{2\lambda b^2} - 1 \right) \right] \\ & = \sqrt{\frac{1}{1 + i\frac{b^2 t}{m\hbar}}} \frac{b}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{1}{1 + i\frac{b^2 t}{m\hbar}} \left(\frac{b^2}{2\hbar^2}(x - x_0)^2 - \frac{i}{\hbar}p_0(x - x_0) + i\frac{p_0^2 t}{2m\hbar} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

となる。煩雑な式であるが、ここから位置の確率密度関数を計算すると

$$|\langle x | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{b}{\hbar\sqrt{\pi} \left(1 + \frac{b^4 t^2}{m^2 \hbar^2} \right)} \exp \left[-\frac{b^2}{\hbar^2 \left(1 + \frac{b^4 t^2}{m^2 \hbar^2} \right)} \left(x - x_0 - \frac{p_0 t}{m} \right)^2 \right] \quad (2.1.13)$$

という結果が得られる。これを見ると、確率密度のピークが $x = x_0 + p_0 t/m$ で等速直線運動すること、位置の確率分布が時間と共に広がっていくことがわかる。確率分布の広がりが生じるのは、系の状態が様々な運動量固有状態の重ね合わせであることに関連する。確率分布の運動において、 p_0 より大きい（小さい）運動量固有状態がピークの移動より速い（遅い）運動に寄与すると考えると、ピークを置き去りにする・される運動によって確率分布の広がりが説明できる。実際、運動量のばらつきを表す b が大きいほど分布の広がりは速い。

2.2 調和振動子

調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2\hat{x}^2 \quad (2.2.1)$$

で与えられる。調和振動子は離散的なエネルギー固有値を持つ系である。このことは、応用上重要な生成・消滅演算子を用いる方法で示すことができる。

2.2.1 調和振動子のエネルギー固有値

まず、見通しを良くするため、ハミルトニアンの形を整えよう。パラメータ $\hbar\omega$ はエネルギーの次元を持つので、ハミルトニアンを $\hbar\omega$ で割った量は無次元の量となる。自由粒子の初期値問題の計算を見ればわかるように、次元を持つ量の計算は単位を換算する係数が多く煩雑になりがちである。計算に現れる量が無次元量になるよう前もって整理しておけば、この手間を減らすことができる。位置と運動量には無次元量

$$\hat{\xi} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \quad \hat{\pi} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p} \quad (2.2.2)$$

が対応しており、これを用いるとハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 \right) = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{\pi}^2 + \hat{\xi}^2) \quad (2.2.3)$$

と表せる。 $\hat{\xi}, \hat{\pi}$ は交換関係 $[\hat{\xi}, \hat{\pi}] = i$ に従う。さらに、

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi} + i\hat{\pi}) \quad (2.2.4)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi} - i\hat{\pi}) \quad (2.2.5)$$

で定義される生成演算子 \hat{a}^\dagger 、消滅演算子 \hat{a} を用いてハミルトニアンの2次式の“因数分解”を行うと、次の形が得られる。

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.2.6)$$

今、考察対象となる演算子は $\hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ から $\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\hat{a}$ に移った。ここでハミルトニアンの固有値の解析に入ろう。以下、 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ とおき、その固有値および固有状態を $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ とおく。まず、恒等的に成り立つ式 $\langle n|\hat{N}|n\rangle = n\langle n|n\rangle$ に注目して固有値 n のとり得る値を調べよう。 $n \neq 0$ の場合、左辺が $\hat{a}|n\rangle$ のノルムの2乗であり、 $\langle n|n\rangle$ の値も正であることから、 $n > 0$ が成り立たねばならない。 $n = 0$ の場合も、両辺共に0となるから矛盾は生じない。よって、 $n \geq 0$ が言える。

生成・消滅演算子の交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (2.2.7)$$

および、演算子の積に関する交換関係の公式 $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ を用いれば

$$\begin{cases} [\hat{a}, \hat{N}] = \hat{a} \\ [\hat{a}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{a}^\dagger \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{N}\hat{a} = \hat{a}(\hat{N} - 1) \\ \hat{N}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1) \end{cases} \quad (2.2.8)$$

という式が得られる。これは、 $\hat{a}|n\rangle$ および $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ がそれぞれ、固有値 $n-1, n+1$ に属す \hat{N} の固有状態になることを示している。 \hat{a} を $|n\rangle$ にかけて固有値 $n-1$ を持つ状態が作られるが、 \hat{N} の固有値は非負なので、何度も \hat{a} をかけていけば、どこかで $\hat{a}|n_0\rangle = |\emptyset\rangle$ を満たす固有状態 $|n_0\rangle$ にたどり着く。ところが、このような状態は $|0\rangle$ 以外あり得ない。 $\hat{N}|n_0\rangle = \hat{a}^\dagger|\emptyset\rangle = |\emptyset\rangle = 0|n_0\rangle$ であるからだ。¹⁾ 固有状態の系列 $|n\rangle, \hat{a}|n\rangle, \hat{a}^2|n\rangle, \dots$ は必ず $|0\rangle$ で終わるので、それぞれが持つ固有値の系列は $n, n-1, n-2, \dots, 2, 1, 0$ となる。つまり、 \hat{N} の固有値は $0, 1, 2, \dots$ に限られる。“数えられる何か” の数を表す $0, 1, 2, \dots$ を固有値に持つ \hat{N} は 個数演算子と呼ばれる。

ちなみに、調和振動子のエネルギーは最も低い場合でも $\hbar\omega/2$ であり、0 とはならない。これは定性的に言えば、不確定性のため位置と運動量がともに 0 にはならないために生じる現象であり、^{ゼロ} 零点振動と呼ばれる。また、零点振動のエネルギーを 零点エネルギー と呼ぶこともある。

2.2.2 調和振動子のエネルギー固有状態

調和振動子のエネルギー固有値が得られたので、続いてこれに対応するエネルギー固有状態を求めていこう。以下、記号 $|n\rangle$ は $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ を満たすよう正規直交化された固有状態を表すものとする。

まずは、最低のエネルギーを持つ基底状態 $|0\rangle$ を求めよう。 $|0\rangle$ を特徴付ける式 $\hat{a}|0\rangle = |\emptyset\rangle$ は座標表示で微分方程式

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \langle x|0\rangle = 0 \quad (2.2.9)$$

に帰着する。この 1 階常微分方程式は一般解 $\langle x|0\rangle = C \exp(-\xi^2/2)$ を持つ。規格化を考慮して任意定数 C を決めれば、基底状態の具体形

$$\langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (2.2.10)$$

が得られる。基底状態は $\hat{a}|0\rangle = |\emptyset\rangle$ から一意に定まることに注意しよう。

続いて、基底状態より高いエネルギーを持つ状態である、励起状態を求めよう。 $|n\rangle$ は $|0\rangle$ に \hat{a}^\dagger を n 回かけて規格化することで得られる。 $\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_n|n+1\rangle$ とおくと

$$|c_n|^2 = \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|n\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle = n+1 \quad (2.2.11)$$

が成り立つ。 c_n は一般に複素数であるが、 $|n\rangle$ の定義には絶対値 1 の複素数をかける任意性があるので、 $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ としてよい。よって、 n 番目の励起状態は

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}} \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n-1}} \cdots \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{1}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (2.2.12)$$

与えられることがわかった。これは座標表示では

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \langle x|0\rangle$$

¹⁾ 余談であるが、零ベクトルに $|\emptyset\rangle$ という記号を用いたのは、状態ベクトルであることを明示しつつ $|0\rangle$ と区別するためである。

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)
\end{aligned} \tag{2.2.13}$$

という式になる。三行目では、 n 次の多項式を表す記号 $H_n(\xi)$ を

$$H_n(\xi) = \exp\left(\frac{1}{2}\xi^2\right) \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \tag{2.2.14}$$

で定義し用いた。 $H_n(\xi)$ は **Hermite** 多項式という名前で知られている。

以上、調和振動子のエネルギー固有状態を座標表示の形で求めることができた。必要があれば、運動量表示も同様に求められる。これで、一般の状態

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \exp\left[-i\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega t\right] |n\rangle \tag{2.2.15}$$

にある系の性質が、(一応) Hermite 多項式の公式から計算可能になった。最も単純で興味深いのは、初期状態がエネルギー固有状態 $|\psi(0)\rangle = |n\rangle$ で与えられる場合である。この場合、あらゆる物理量の確率分布が時間に依存しないことが示せる。このような性質から、ハミルトニアンの離散固有状態は定常状態と呼ばれる。原子や分子といった安定して存在する物質は何らかの定常状態にあると考えられるため、物質の量子論において定常状態の果たす役割は大きい。

最後に、練習として状態 $|n\rangle$ の $\Delta x, \Delta p$ を計算してみよう。異なるエネルギー固有状態は直交するので、

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \tag{2.2.16}$$

$$\hat{p} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \tag{2.2.17}$$

から $\langle n|\hat{x}|n\rangle = 0, \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$ が言える。これに注意して位置と運動量の分散を計算すると、

$$\begin{aligned}
\Delta x^2 &= \langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2)|n\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right),
\end{aligned} \tag{2.2.18}$$

$$\begin{aligned}
\Delta p^2 &= \langle n|\hat{p}^2|n\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle n|(\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2)|n\rangle \\
&= m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right).
\end{aligned} \tag{2.2.19}$$

という結果が得られる。

2.3 角運動量

古典力学同様、ポテンシャルが球対称性を持つ系では、**角運動量**を用いた解析が有効である。座標 $\hat{\mathbf{x}}$, 運動量 $\hat{\mathbf{p}}$ を持つ質点の角運動量は、ベクトルの外積を用いて

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \Leftrightarrow \begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{cases} \tag{2.3.1}$$

と定義される。角運動量は \hbar と同じ次元を持つ。

この節では、角運動量の固有値、固有状態の性質を解説する。始めに、角運動量の基本的な交換関係を導いておこう。それには、^{レヴィチヴィタ}Levi-Civitaの記号と呼ばれる

$$\epsilon_{123} = \epsilon_{312} = \epsilon_{231} = 1, \epsilon_{213} = \epsilon_{321} = \epsilon_{132} = -1 \quad (2.3.2)$$

を用いた $\hat{L}_i = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$ という表記が便利である。

Levi-Civita の記号 ϵ_{ijk} の性質は、添え字の入れ替えで符号が変わることである。

$$\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik} = -\epsilon_{ikj} = -\epsilon_{kji} \quad (2.3.3)$$

この性質から、 $\hat{A}_{jk} = \hat{A}_{kj}$ を満たす任意の演算子に対し、

$$\sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{A}_{jk} = \frac{1}{2} \sum_{jk} (\epsilon_{ijk} \hat{A}_{jk} + \epsilon_{ikj} \hat{A}_{kj}) = \frac{1}{2} \sum_{jk} (\epsilon_{ijk} + \epsilon_{ikj}) \hat{A}_{jk} = 0 \quad (2.3.4)$$

が成り立つ。また、角運動量のような外積で与えられる量の計算には公式

$$\sum_k \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{jl} \delta_{im} \quad (2.3.5)$$

が役立つ。これの証明を述べよう。まず、 $i = j$ または $l = m$ ならば両辺は共に 0 になり等しいので、問題は $i \neq j, l \neq m$ の場合である。この場合、 $l \neq i, j$ または $m \neq i, j$ ならば両辺は 0 となり等しい。残る $i = l, j = m$ または $i = m, j = l$ の場合も、 $\sum_k \epsilon_{ijk} \epsilon_{kij} = -\sum_k \epsilon_{ijk} \epsilon_{kji} = 1$ に注意すれば公式が成り立つことが確かめられる。

定理 9 角運動量の基本的性質

- (i) $\hat{\mathbf{L}}$ は Hermite 演算子である。
- (ii) 角運動量の各成分は交換関係 $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$ に従う。
- (iii) $[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$ が成り立つ。

証明

- (i) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$, $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ に注意する。

$$\begin{aligned} (\hat{L}_i)^\dagger &= \sum_{jk} \epsilon_{ijk} (\hat{x}_j \hat{p}_k)^\dagger = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{p}_k^\dagger \hat{x}_j^\dagger = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{p}_k \hat{x}_j \\ &= \sum_{jk} \epsilon_{ijk} (\hat{x}_j \hat{p}_k - i\hbar \delta_{kj}) = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k = \hat{L}_i. \end{aligned}$$

- (ii) 始めに公式 $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ を用い、(2.3.5) を活用して式変形を行う。

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= \sum_{klmn} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} [\hat{x}_k \hat{p}_l, \hat{x}_m \hat{p}_n] = \sum_{klmn} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} ([\hat{x}_k \hat{p}_l, \hat{x}_m] \hat{p}_n + \hat{x}_m [\hat{x}_k \hat{p}_l, \hat{p}_n]) \\ &= i\hbar \sum_{klmn} \epsilon_{ikl} \epsilon_{jmn} (-\delta_{lm} \hat{x}_k \hat{p}_n + \delta_{kn} \hat{x}_m \hat{p}_l), \end{aligned}$$

第1項、第2項でそれぞれ m, n の和を取り、第1項の n を m に書き直せば、

$$= i\hbar \sum_{klm} \epsilon_{ikl} (-\epsilon_{jlm} \hat{x}_k \hat{p}_m + \epsilon_{jmk} \hat{x}_m \hat{p}_l)$$

$$\begin{aligned}
&= i\hbar \left(\sum_{km} (\delta_{ij}\delta_{km} - \delta_{im}\delta_{kj}) \hat{x}_k \hat{p}_m + \sum_{lm} (\delta_{lj}\delta_{im} - \delta_{lm}\delta_{ij}) \hat{x}_m \hat{p}_l \right) \\
&= i\hbar \sum_{km} ((\delta_{ij}\delta_{km} - \delta_{im}\delta_{kj}) \hat{x}_k \hat{p}_m + (\delta_{kj}\delta_{im} - \delta_{km}\delta_{ij}) \hat{x}_m \hat{p}_k),
\end{aligned}$$

後半の項の k, m をそれぞれ m, k と書き直して整理すると

$$\begin{aligned}
&= i\hbar \sum_{km} (\delta_{mj}\delta_{ik} - \delta_{im}\delta_{kj}) \hat{x}_k \hat{p}_m \\
&= i\hbar \sum_{kml} \epsilon_{ijl} \epsilon_{lkm} \hat{x}_k \hat{p}_m = i\hbar \sum_l \epsilon_{ijl} \hat{L}_l.
\end{aligned}$$

ちなみに、この式はベクトルの等式で書けば $\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar \hat{\mathbf{L}}$ となる。同じベクトルの外積が 0 になるという性質がここでは成り立たないことに注意しよう。

(iii) (2.3.4) を用いる。

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_i, \hat{\mathbf{L}}^2] &= \sum_j [\hat{L}_i, \hat{L}_j^2] = \sum_j (\hat{L}_j [\hat{L}_i, \hat{L}_j] + [\hat{L}_i, \hat{L}_j] \hat{L}_j) \\
&= i\hbar \sum_{jk} \epsilon_{ijk} (\hat{L}_j \hat{L}_k + \hat{L}_k \hat{L}_j) = 0.
\end{aligned}$$

(証明終)

2.3.1 角運動量と極座標表示

続いて、角運動量と系の球対称性の関係について述べる。 $\hat{\mathbf{L}}$ は座標表示で

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \times \nabla \langle \mathbf{x} | \quad (2.3.6)$$

と表せる。

$$\begin{cases} x(r, \theta, \varphi) = r \sin \theta \cos \varphi \\ y(r, \theta, \varphi) = r \sin \theta \sin \varphi \\ z(r, \theta, \varphi) = r \cos \theta \end{cases} \quad (2.3.7)$$

で与えられる極座標では、

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_r &= \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \mathbf{e}_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi \\ \cos \theta \sin \varphi \\ -\sin \theta \end{pmatrix}, \mathbf{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \text{ において} \\
\mathbf{x} = r\mathbf{e}_r, \nabla &= \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \mathbf{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \text{ 従って} \\
\mathbf{x} \times \nabla &= \mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin \theta} \mathbf{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}, \quad (2.3.8)
\end{aligned}$$

従って、角運動量は動径方向の座標およびその微分を含まない。よって、質点の原点からの距離を表す演算子

$$\hat{r} = \int d^3x \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| \quad (2.3.9)$$

と角運動量は可換であり、同時固有状態を持つ。後に示すように、この同時固有状態は完全性をなすため、角運動量固有状態は系の角度依存性に関する全情報を担うことになる。

ポテンシャルが \hat{r} の関数で与えられる中心力系では, \hat{r} と $\hat{\mathbf{L}}$ の同時固有状態を用いた解析が役立つ. これを見るため, 角運動量とハミルトニアンとの関係を見ておこう. $\hat{\mathbf{L}}^2$ は $\sum_k \delta_{kk} = \delta_{11} + \delta_{22} + \delta_{33} = 3$ に注意すれば,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2 &= \sum_{ijklm} \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_l \hat{p}_m \\ &= \sum_{jklm} (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) (\hat{x}_j \hat{x}_l \hat{p}_k \hat{p}_m - i\hbar \delta_{kl} \hat{x}_j \hat{p}_m) \\ &= \sum_{jk} (\hat{x}_j \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{p}_k - i\hbar \delta_{kj} \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{x}_k \hat{p}_k \hat{p}_j + i\hbar \delta_{kk} \hat{x}_j \hat{p}_j) \\ &= \sum_{jk} (\hat{x}_j \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{p}_k - 2i\hbar \delta_{kj} \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{p}_j \hat{x}_k \hat{p}_k + i\hbar \delta_{kk} \hat{x}_j \hat{p}_j) \\ &= \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}}\end{aligned}\quad (2.3.10)$$

となる. よって, $(\hat{\mathbf{x}}^2)^{-1} = \int d^3x (x^2 + y^2 + z^2)^{-1} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|$ とおけば運動エネルギーを

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = (\hat{\mathbf{x}}^2)^{-1} \left((\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 - i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{L}}^2 \right)\quad (2.3.11)$$

と書くことができる. 演算子 $\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ の座標表示 $-i\hbar \mathbf{x} \cdot \nabla$ は極座標で $-i\hbar r \frac{\partial}{\partial r}$ なので, ハミルトニアンの極座標表示での固有値方程式は

$$\begin{aligned}E \langle \mathbf{x}(r, \theta, \varphi) | \psi \rangle &= \langle \mathbf{x}(r, \theta, \varphi) | \left(\frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V}(\hat{r}) \right) | \psi \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + r \frac{\partial}{\partial r} \right) \langle \mathbf{x}(r, \theta, \varphi) | \psi \rangle + \frac{1}{2mr^2} \langle \mathbf{x}(r, \theta, \varphi) | \hat{\mathbf{L}}^2 | \psi \rangle \\ &\quad + V(r) \langle \mathbf{x}(r, \theta, \varphi) | \psi \rangle\end{aligned}$$

となるが, ハミルトニアンと $\hat{\mathbf{L}}^2$ は同時固有状態を持つので, $\hat{\mathbf{L}}^2 | \psi \rangle = \hbar^2 \lambda | \psi \rangle$ とおくことで, さらなる簡略化が可能である.

$$E \langle \mathbf{x}(r, \theta, \varphi) | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\lambda}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right) \langle \mathbf{x}(r, \theta, \varphi) | \psi \rangle\quad (2.3.12)$$

このように, 球対称性を持つハミルトニアンの固有値方程式は r を変数とする常微分方程式に帰着させることができる. その具体的な計算は, 水素原子の例を通じて学ぶことになるだろう.

2.3.2 角運動量の固有値

それでは, 角運動量の固有値の解析に入ろう. 出発点は角運動量の交換関係 $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$, $[\hat{L}_i, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$ である. 略記 $\hat{\ell} = \hat{\mathbf{L}}/\hbar$ を用いれば, 交換関係は

$$[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{\ell}_k \Leftrightarrow \begin{cases} [\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = i\hat{\ell}_z \\ [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x] = i\hat{\ell}_y \\ [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_y] = -i\hat{\ell}_x \end{cases}\quad (2.3.13)$$

$$[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}^2] = 0\quad (2.3.14)$$

となる. 角運動量の各成分は交換しないが, $\hat{\ell}^2$ と例えば $\hat{\ell}_z$ は交換するので, 同時固有状態を考えることができる. $\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_z$ の固有値をそれぞれ λ, m とおいて, 同時固有状態 $|\lambda, m\rangle$ の性質を調べよう.

任意の状態に対し $\hat{\ell}_i^2$ の期待値は非負であるから,

$$\langle \lambda, m | (\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2) | \lambda, m \rangle = (\lambda - m^2) \langle \lambda, m | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | (\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2) | \lambda, m \rangle \geq 0, \quad (2.3.15)$$

従って, 不等式 $-\sqrt{\lambda} \leq m \leq \sqrt{\lambda}$ が成り立ち, m の値が λ の値によって制限されることがわかる.

調和振動子の計算と同じ要領で

$$\hat{\ell}_{\pm} = \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y \quad (2.3.16)$$

という演算子を定義すれば, 交換関係 (2.3.13) より,

$$[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_{\pm}] = \pm \hat{\ell}_{\pm} \Leftrightarrow \hat{\ell}_z \hat{\ell}_{\pm} = \hat{\ell}_{\pm} (\hat{\ell}_z \pm 1) \quad (2.3.17)$$

が成り立つ. $\hat{\ell}_z$ の固有値を増減させる $\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-$ はそれぞれ昇演算子, 降演算子と呼ばれる. 昇降演算子は $\hat{\ell}^2$ と交換するので, λ の値は昇降演算子をかけても変わらない. $|\lambda, m\rangle$ に昇降演算子をかけていけば, $-\sqrt{\lambda} \leq m \leq \sqrt{\lambda}$ から

$$\hat{\ell}_+ |\lambda, l\rangle = |\emptyset\rangle, \hat{\ell}_- |\lambda, l'\rangle = |\emptyset\rangle \quad (2.3.18)$$

を満たす固有状態に行き着く. $\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hat{\ell}_z = \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hat{\ell}_z$ に注意して, $\hat{\ell}^2 |\lambda, l\rangle, \hat{\ell}^2 |\lambda, l'\rangle$ を計算すれば, $\lambda = l(l+1) = l'(l'-1)$ という関係が得られ, $(l+l')(l-l'+1) = 0, l \geq l'$ なので, $l' = -l$ が成り立つ.

さて, l, l' は $\hat{\ell}_z$ の固有値 m から整数値だけずれた値であるから, $l-l'$ もまた整数値となる. このことを踏まえれば, l, m の取り得る値は

$$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots \quad (2.3.19)$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l \quad (2.3.20)$$

ということになる. $\hat{\ell}^2$ の固有値 λ の値は l から決まり, λ の値よりも l の値を見た方が m の値にかかる制限がわかりやすいので, 以下では同時固有状態を $|l, m\rangle$ で表すことにする.

これまでに述べたのは, $\hat{\ell}$ の交換関係から言えることであった. 続いて, 角運動量の元々の定義 $\hat{L}_i = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k$ から言えることを述べよう. 以下, 記号を省略して $|\mathbf{x}(r, \theta, \varphi)\rangle = |r, \theta, \varphi\rangle$ と書くことにする. まず,

$$\begin{aligned} \langle r, \theta, \varphi | \hat{\mathbf{L}} &= -i\hbar \mathbf{x} \times \nabla \langle r, \theta, \varphi |, \\ \mathbf{x} \times \nabla &= e_{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin \theta} e_{\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

から $\hat{\ell}_{\pm}, \hat{\ell}_z$ を計算すると

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{\ell}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \quad (2.3.21)$$

$$\langle r, \theta, \varphi | \hat{\ell}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \theta, \varphi | \quad (2.3.22)$$

となる. 微分方程式 $m \langle r, \theta, \varphi | l, m \rangle = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle r, \theta, \varphi | l, m \rangle$ から, $\langle r, \theta, \varphi | l, m \rangle$ の φ 依存性は

$$\langle r, \theta, \varphi | l, m \rangle = F(r, \theta) e^{im\varphi} \quad (2.3.23)$$

という形に限られるので, $x_i(r, \theta, 0) = x_i(r, \theta, 2\pi)$ に留意すると,

$$1 = e^{2\pi im}, \text{ すなわち, } m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.3.24)$$

が成り立たねばならない。したがって, l の取り得る値は

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.3.25)$$

に限定される。

2.3.3 角運動量の固有状態

続いて, 角運動量の規格化された固有状態を求めたい。まずは, \hat{r} と角運動量の同時固有状態 $|r', l, m\rangle$ に注目しよう, この状態は, $\hat{l}_\pm |r', l, \pm l\rangle = |\theta\rangle$ を解いて $|r', l, \pm l\rangle$ を求め, これに昇降演算子を作用させることで得られる。 $|r', l, \pm l\rangle$ を与える式は (2.3.21) から, 微分方程式

$$e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | r', l, \pm l \rangle = 0 \quad (2.3.26)$$

に帰着する。ここでは $|r', l, -l\rangle$ を求めてから昇演算子を作用させるアプローチをとることにしよう。 $\langle r, \theta, \varphi | r', l, -l \rangle$ の φ 依存性は $e^{-il\varphi}$ で与えられるので, (2.3.26) は

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + l \cot \theta \right) \langle r, \theta, \varphi | r', l, -l \rangle = 0 \quad (2.3.27)$$

と書き直せる。この微分方程式の解は $\sin^l \theta$ なので, $\langle r, \theta, \varphi | r', l, -l \rangle$ の θ 依存性を取り出せば

$$\langle r, \theta, \varphi | r', l, -l \rangle = A(r, r') \cdot B \sin^l \theta e^{-il\varphi} \quad (2.3.28)$$

となる。これに昇演算子をかけて得られる固有状態は

$$\langle r, \theta, \varphi | r', l, m \rangle = A(r, r') Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (2.3.29)$$

という形に書ける。

\hat{r} の固有状態の規格化に関する $A(r, r')$ は極座標での完全性条件

$$\hat{I} = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin \theta |r\theta\varphi\rangle \langle r\theta\varphi| \quad (2.3.30)$$

から得られる $|r, \theta, \varphi\rangle$ の正規直交条件

$$\langle r, \theta, \varphi | r', \theta', \varphi' \rangle = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (2.3.31)$$

に従って, 次のように定義することにしよう。

$$A(r, r') = \frac{1}{r^2} \delta(r - r'). \quad (2.3.32)$$

角度依存性を担う $Y_{l,m}$ の部分は離散固有状態に対応するので, 正規直交条件

$$\delta_{ll'} \delta_{mm'} = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l',m'}(\theta, \varphi) \quad (2.3.33)$$

を満たすようにしたい. この点に留意して $Y_{l,m}$ の導出を進めよう. 始めに (2.3.28) で与えられる $Y_{l,-l}$ の規格化を行い, 次の式を得る.

$$1 = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |B|^2 \sin^{2l+1} \theta = 2\pi |B|^2 \int_0^\pi d\theta \sin^{2l+1} \theta. \quad (2.3.34)$$

右辺の積分の具体系は, これを I_l とおいて計算すれば, 次のように求まる.

$$\begin{aligned} I_l &= \int_0^\pi d\theta \sin^{2l+1} \theta = - \int_1^{-1} d \cos \theta (1 - \cos^2 \theta)^l = \int_{-1}^1 dx (1 - x^2)^l \\ &= I_{l-1} - \int_{-1}^1 dx x^2 (1 - x^2)^{l-1} = I_{l-1} + \frac{1}{2l} \int_{-1}^1 dx x \frac{d}{dx} (1 - x^2)^l \\ &= I_{l-1} - \frac{1}{2l} \int_{-1}^1 dx (1 - x^2)^l = I_{l-1} - \frac{1}{2l} I_l \text{ であり, } I_0 = 2 \text{ なので,} \\ I_l &= \frac{2l}{2l+1} I_{l-1} = \frac{2l}{2l+1} \cdot \frac{2(l-1)}{2l-1} \cdot \frac{2(l-2)}{2l-3} \cdots \frac{2(l-(l-2))}{5} \cdot \frac{2(l-(l-1))}{3} \cdot 2 \\ &= 2^{l+1} l! \frac{1}{(2l+1) \cdot (2l-1) \cdot (2l-3) \cdots 5 \cdot 3} = 2^{l+1} l! \frac{2^l (l!)}{(2l+1)!} = 2^{2l+1} \frac{(l!)^2}{(2l+1)!}. \end{aligned}$$

規格化定数として正の実数を選べば, (2.3.34) は

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2^{l+1} l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{\pi}}, \\ Y_{l,-l}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2^{l+1} l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{\pi}} \sin^l \theta e^{-il\varphi} \end{aligned} \quad (2.3.35)$$

となる.

一般の固有状態 $|r', l, m\rangle$ は, $|r', l, -l\rangle$ に $\hat{\ell}_+^{l+m}$ をかければ得られる. 問題はその規格化であるが,

$$\hat{\ell}_\pm |r', l, m\rangle = C_\pm(l, m) |r', l, m \pm 1\rangle \quad (2.3.36)$$

とおけば, $\hat{\ell}_+^\dagger = \hat{\ell}_-$, $\hat{\ell}_\pm \hat{\ell}_\mp = \hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 \pm \hat{\ell}_z$ から

$$\begin{aligned} \langle r, l, m | \hat{\ell}_\pm \hat{\ell}_\mp | r', l, m \rangle &= (l(l+1) - m^2 \pm m) \frac{\delta(r-r')}{r^2} = |C_\mp(l, m)|^2 \frac{\delta(r-r')}{r^2}, \\ \text{従って, } |C_\pm(l, m)| &= \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \end{aligned} \quad (2.3.37)$$

という関係式が得られる. 固有状態の位相因子の任意性を用いて, $C_+(l, m)$ が正の実数になるようにすれば, $C_-(l, m)$ もまた正の実数となる (これは $\hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- |l, m\rangle$ の計算からすぐに示せる) ので, 規格化された固有状態は

$$|r', l, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} \hat{\ell}_+ |r', l, m-1\rangle \quad (2.3.38)$$

という関係式に従う. ここから $Y_{l,m}$ の漸化式を求めると

$$\begin{aligned} Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - (m-1) \cot \theta \right) Y_{l,m-1}(\theta, \varphi) \\ &= \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} \sin^{m-1} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin^{-m+1} \theta Y_{l,m-1}(\theta, \varphi)) \\ &= \frac{-e^{i\varphi}}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} \sin^m \theta \frac{\partial}{\partial \cos \theta} (\sin^{-m+1} \theta Y_{l,m-1}(\theta, \varphi)) \end{aligned}$$

(2.3.39)

となる. この漸化式を用いて右辺の $Y_{l,m-1}$ を $Y_{l,m-2}, Y_{l,m-3}, \dots$ に書き換えていくと, 最終的に $Y_{l,-l} = Y_{l,m-(l+m)}$ に行き着く. (2.3.35) を代入して計算を行い, 整理すると,

$$\begin{aligned} Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= (-1)^{l+m} e^{i(l+m)\varphi} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!(2l)!}} \sin^m \theta \frac{\partial^{l+m}}{(\partial \cos \theta)^{l+m}} (\sin^l \theta Y_{l,-l}(\theta, \varphi)) \\ &= \frac{(-1)^{l+m}}{2^{l+1} l!} \sqrt{\frac{2l+1}{\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \left(\sin^m \theta \frac{\partial^{l+m}}{(\partial \cos \theta)^{l+m}} \sin^{2l} \theta \right) e^{im\varphi} \end{aligned} \quad (2.3.40)$$

という式が得られる. この式の右辺で定義される θ, φ の関数 $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ は, 球面調和関数という名前で知られている. $l = 0, 1$ の場合に (2.3.40) を計算すると次のようになる.

$$\begin{aligned} Y_{0,0}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r} \\ Y_{1,0}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \end{aligned}$$

球面調和関数は l の値が増えるに従い複雑さを増すため, 公式集の活用が必須となるだろう. 符号など, 一部の因子が違う定義を採用しているものもあるので, 注意が必要である.

2.3.4 角運動量固有状態の完全性

ここまでの議論で, 角運動量の全ての固有値, 固有状態を与える式が得られた. こうして得られた角運動量の固有状態の完全性, つまり,

$$\hat{I} = \sum_{l,m} \int_{-\infty}^{\infty} r^2 dr |r, l, m\rangle \langle r, l, m| \quad (2.3.41)$$

を示そう. それには,

$$\sum_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l,m}^*(\theta', \varphi') = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (2.3.42)$$

が言えれば十分である. この式が示せれば,

$$\begin{aligned} \langle r, \theta, \varphi | r', \theta', \varphi' \rangle &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi'), \\ \langle r, \theta, \varphi | r', l, m \rangle &= \frac{1}{r^2} \delta(r - r') Y_{l,m}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

から

$$\sum_{l,m} \int_{-\infty}^{\infty} r^2 dr |r, l, m\rangle \langle r, l, m| = \int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin \theta |r\theta\varphi\rangle \langle r\theta\varphi| = \hat{I}. \quad (2.3.43)$$

を示すのは容易である.

(2.3.42) は, “任意の関数” $f(\theta, \varphi)$ に対し展開式

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

$$c_{l,m} = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi f(\theta, \varphi) Y_{l,m}^*(\theta, \varphi)$$

が成り立つことと同値である。“任意の関数”とは言っても、例えば $c_{l,m}$ を定義する積分が発散する関数を選んだ場合、明らかにこの式は成り立たないことに注意しよう。つまり、この証明を厳密なものにするには、考察対象とする関数をしっかりと限定した上で“任意の”という言い回しを用いねばならない。ここでは、 $\cos\theta$ の Taylor 級数で与えられる関数を $f_m(\theta)$ として、

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_m(\theta) e^{im\varphi} \quad (2.3.44)$$

という形で書ける任意関数を対象に証明を行う。

まず、 $\xi = \cos\theta$ において、 $Y_{l,m}$ の ξ 依存性を m ごとに調べてみる。

$$m > 0 \Rightarrow Y_{l,m} \propto (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} (1 - \xi^2)^l \propto (1 - \xi^2)^{m/2} \times (\xi \text{ の } l - m \text{ 次式})$$

$$m = 0 \Rightarrow Y_{l,0} \propto \frac{d^l}{d\xi^l} (1 - \xi^2)^l \propto (\xi \text{ の } l \text{ 次式})$$

$$m < 0 \Rightarrow Y_{l,m} \propto \left(\frac{1}{1 - \xi^2} \right)^{|m|/2} \frac{d^{l-|m|}}{d\xi^{l-|m|}} (1 - \xi^2)^l \propto (1 - \xi^2)^{|m|/2} \times (\xi \text{ の } l - |m| \text{ 次式}),$$

従って、 $e^{im\varphi}$ の係数には $l = |m|, |m| + 1, |m| + 2, \dots$ に対応して $1, \xi, \xi^2, \dots$ という因子が含まれる。 $m = 0$ の場合は明らかに、 $\{Y_{l,0}\}_{l=0}^{\infty}$ の重ね合わせによって ξ の Taylor 級数が表現できる。 $m \neq 0$ の場合、 $(1 - \xi^2)^{|m|/2}$ という因子のため、話が複雑になるが、 $(1 - \xi^2)^{\pm m/2}$ が収束半径 1 で Taylor 展開可能であり、Taylor 級数で表せる関数の積も Taylor 級数で表せることを考慮すれば、任意の Taylor 級数 $\sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$ に対し

$$(1 - \xi^2)^{|m|/2} \times \sum_{l=|m|}^{\infty} c_{l,m} \times (\xi \text{ の } l - |m| \text{ 次式}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

を満たす係数 $\{c_{l,m}\}_{l=|m|}^{\infty}$ が存在する。

従って、 ξ の任意の Taylor 級数 $f_m(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$ は

$$f_m(\theta) = \sum_{l=|m|}^{\infty} c_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) e^{-im\varphi} \quad (2.3.45)$$

と表すことができ、考察対象となる任意関数 $f(\theta, \varphi)$ は

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_m(\theta) e^{im\varphi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{l=|m|}^{\infty} c_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (2.3.46)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (2.3.47)$$

と書ける。以上、角運動量が物理量であり、その固有状態が完全系を成すことが示された。

2.4 水素原子

水素原子は、陽子と電子が Coulomb 力で結合した状態にある系である。Coulomb 力で引き合う陽子と電子を記述する系のハミルトニアンは、陽子、電子に関係する量を添え字

p, e で表せば

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_p^2}{2m_p} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}} \quad (2.4.1)$$

で与えられる. e, ϵ_0 は素電荷および真空の誘電率であり, ポテンシャルを表す演算子は座標表示で

$$\frac{1}{\hat{r}} = \int d^3x_p d^3x_e \frac{1}{\sqrt{(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_e)^2}} |\mathbf{x}_p \mathbf{x}_e\rangle \langle \mathbf{x}_p \mathbf{x}_e| \quad (2.4.2)$$

と定義される.

2.4.1 自由度の分離

6 自由度の系である水素原子の解析は, 古典力学の中心力系と同様に, 重心運動と相対運動の分離, 角度成分と動径成分の分離を利用して行われる.

まずは, 次の座標変換で重心運動と相対運動を分離しよう.

$$\mathbf{X} = \frac{m_e}{m_e + m_p} \mathbf{x}_e + \frac{m_p}{m_e + m_p} \mathbf{x}_p \quad (2.4.3)$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_e - \mathbf{x}_p \quad (2.4.4)$$

線形変換 $\mathbf{x}_p, \mathbf{x}_e \rightarrow \mathbf{X}, \mathbf{x}$ を与える行列の行列式は 1 なので, 体積要素の変換則は $d^3x_p d^3x_e = d^3X d^3x$ となる. 従って, 重心・相対座標の固有状態 $|\mathbf{X}\mathbf{x}\rangle$ の完全性は

$$\hat{I} = \int d^3x_p d^3x_e |\mathbf{x}_p \mathbf{x}_e\rangle \langle \mathbf{x}_p \mathbf{x}_e| = \int d^3X d^3x |\mathbf{X}\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{X}\mathbf{x}| \quad (2.4.5)$$

で与えられる. \mathbf{X}, \mathbf{x} の自由度に対応する運動量演算子 $\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{p}}$ は座標表示で

$$\hat{\mathbf{P}} \langle \mathbf{X}\mathbf{x}| = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \langle \mathbf{X}\mathbf{x}| \quad (2.4.6)$$

$$\hat{\mathbf{p}} \langle \mathbf{X}\mathbf{x}| = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \langle \mathbf{X}\mathbf{x}| \quad (2.4.7)$$

である. ただし, 分母にベクトルが現れる記号 $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$ は成分 $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$ を持つベクトルの略記とする. 偏微分の変換則から, これらは元の運動量演算子と

$$\hat{\mathbf{p}}_p = \frac{m_p}{m_p + m_e} \hat{\mathbf{P}} - \hat{\mathbf{p}} \quad (2.4.8)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_e = \frac{m_e}{m_p + m_e} \hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{p}} \quad (2.4.9)$$

という関係にあることがわかる. これを用いてハミルトニアンを書き換えると,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}}, \quad (2.4.10)$$

$$\text{ただし, } M = m_p + m_e, \frac{1}{m} = \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_e} \quad (2.4.11)$$

となる. 重心の運動に関係する第 1 項と相対運動に関係する残りの部分は可換であり, 同時固有状態を持つ. 第 1 項の固有値を E_{CM} , 残りの部分の固有値を E と書けば, 水素原子のエネルギー固有値問題は

$$\hat{H} |E_{CM}, E\rangle = (E_{CM} + E) |E_{CM}, E\rangle, \quad (2.4.12)$$

$$\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M}|E_{CM}, E\rangle = E_{CM}|E_{CM}, E\rangle, \quad (2.4.13)$$

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hat{r}}\right)|E_{CM}, E\rangle = E|E_{CM}, E\rangle \quad (2.4.14)$$

に帰着する。(2.4.13)は自由粒子と同じ問題であるから、固有状態を座標表示したとき、その \mathbf{X} 依存性は $\mathbf{P}^2 = 2ME_{CM}$ を満たすベクトル \mathbf{P} を用いて

$$\langle \mathbf{X}\mathbf{x} | E_{CM}, E \rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\mathbf{X}}\varphi(\mathbf{x}, E) \quad (2.4.15)$$

という形になることがわかる。

重心運動の振る舞いが得られたので、続いて相対運動の解析に入ろう。ここで角運動量に関する知識が役立つ。以下、簡略化のため重心の自由度を省略する。相対運動の角運動量演算子 $\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$ は(2.4.14)で与えられるハミルトニアンと可換であり、同時固有状態 $|E, l, m\rangle$ を持つ。この状態は角運動量固有状態であるから、球面調和関数で与えられる θ, φ 依存性を持ち、その座標表示は

$$\langle r, \theta, \varphi | E, l, m \rangle = R(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (2.4.16)$$

と書ける。動径成分 $R(r)$ を求める方程式は、(2.3.12)にポテンシャルの具体形を代入した

$$ER(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2 r} \right) R(r) \quad (2.4.17)$$

で与えられる。

こうして、6自由度の系であった水素原子の問題を1自由度 r の問題に帰着させることができた。続いて、動径成分の解析を行い、水素原子のエネルギー固有状態を求めよう。

2.4.2 水素原子のエネルギー固有値

水素原子は電子が陽子の周辺に束縛されている状態であるから、ここで興味があるのは $\lim_{r \rightarrow \infty} |R(r)|^2 = 0$ を満たすエネルギー固有状態である。まず、(2.4.17)を変形して

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2 r} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) R(r) = 0 \quad (2.4.18)$$

とおく。さらに、 $R(r)$ に作用する演算子の部分が無次元になるよう、**Bohr** 半径²⁾

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \quad (2.4.19)$$

を用いた無次元量 $\rho = r/a_B, \lambda = 2ma_B^2 E/\hbar^2$ を導入すると、この式は次のように書ける。

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} + \lambda \right) R(\rho) = 0. \quad (2.4.20)$$

こうして得られた方程式の解の形を定性的に調べよう。まず、 $\rho \rightarrow \infty$ の極限では ρ^{-1}, ρ^{-2} の寄与が無視できると考えられるので、遠方での解の振る舞いは

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \lambda \right) R(\rho) = 0 \Rightarrow R(\rho) \propto \exp[\pm i\sqrt{\lambda}\rho] = \exp\left[\pm i\sqrt{\frac{2ma_B^2 E}{\hbar^2}}\rho\right] \quad (2.4.21)$$

²⁾ 正確に言えば、Bohr 半径は換算質量 m ではなく電子質量 m_e を用いて定義される。

となる. 従って, $\lim_{\rho \rightarrow \infty} |R(\rho)|^2 = 0$ を満たす解は $E < 0$ の場合にのみ存在し, 遠方での解の概形は $\kappa = |\sqrt{\lambda}| = \sqrt{2ma_B^2|E|}/\hbar$ において, $\exp[-\kappa\rho]$ となる. 続いて $\rho \rightarrow 0$ の極限を考えると $R(\rho)$ の原点付近の振る舞いは

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R(\rho) = 0 \Rightarrow R(\rho) \propto \rho^l, \rho^{-l-1} \quad (2.4.22)$$

となることがわかる.

解の概形がある程度見えてきたので, Taylor 級数の形で $R(\rho)$ を求めよう. 考えられる解は, 原点付近の振る舞いの対応した, 次の 2 パターンである.

$$R(\rho) = \begin{cases} e^{-\kappa\rho} \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^{i+l} \\ e^{-\kappa\rho} \sum_{i=0}^{\infty} b_i \rho^{i-l-1} \end{cases} \quad (2.4.23)$$

エネルギーが負なので $\lambda = -\kappa^2$ であることに注意して, この式を (2.4.20) に代入しよう. 微分を行う項の計算結果は

$$\begin{aligned} e^{\kappa\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} R(\rho) &= \begin{cases} \sum_{i=0}^{\infty} a_i [\kappa^2 \rho^{i+l} - 2\kappa(i+l)\rho^{i+l-1} + (i+l)(i+l-1)\rho^{i+l-2}] \\ \sum_{i=0}^{\infty} b_i [\kappa^2 \rho^{i-l-1} - 2\kappa(i-l-1)\rho^{i-l-2} + (i-l-1)(i-l-2)\rho^{i-l-3}] \end{cases} \\ e^{\kappa\rho} \frac{2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} R(\rho) &= \begin{cases} \sum_{i=0}^{\infty} a_i [-2\kappa\rho^{i+l-1} + 2(i+l)\rho^{i+l-2}] \\ \sum_{i=0}^{\infty} b_i [-2\kappa\rho^{i-l-2} + 2(i-l-1)\rho^{i-l-3}] \end{cases} \end{aligned}$$

であり, κ^2 の項は (2.4.20) の第 5 項と相殺する. (2.4.20) の残りの項も加えて計算, 整理すると

$$\begin{aligned} 0 &= \begin{cases} \sum_{i=0}^{\infty} a_i \left[-2\kappa(i+l+1 - \frac{1}{\kappa})\rho^{i+l-1} + \underbrace{i(i+2l+1)\rho^{i+l-2}} \right] \\ \sum_{i=0}^{\infty} b_i \left[-2\kappa(i-l - \frac{1}{\kappa})\rho^{i-l-2} + \underbrace{i(i-2l-1)\rho^{i+l-3}} \right] \end{cases} \\ &= \begin{cases} \sum_{i=0}^{\infty} [-2\kappa(i+l+1 - \frac{1}{\kappa})a_i + (i+1)(i+2l+2)a_{i+1}] \rho^{i+l-1} \\ \sum_{i=0}^{\infty} [-2\kappa(i-l - \frac{1}{\kappa})b_i + (i+1)(i-2l)b_{i+1}] \rho^{i-l-2} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.4.24)$$

となる. 2 行目への式変形では, 波線部で $i=0$ の寄与が消えることを利用して次数を揃えている. ρ の係数が各次数で 0 になることから, 漸化式

$$a_{i+1} = \frac{2\kappa(i+l+1) - 2}{(i+1)(i+2l+2)} a_i \quad (2.4.25)$$

$$b_i = \frac{(i+1)(i-2l)}{2\kappa(i-l) - 2} b_{i+1} \quad (2.4.26)$$

が得られる.

ここで, b_i の漸化式を見ると, $b_{2l} = 0$ なので, ここから $b_{2l-1}, \dots, b_0 = 0$ が帰結する. すなわち, 係数 b_i の展開式は原点付近で $R(\rho) \propto \rho^{-l-1}$ となる振る舞いを与えないことになる. $i > 2l$ に対して, $i = j + 2l + 1 (j \geq 0)$ とおけば, 漸化式は

$$b_{j+2l+2} = \frac{2\kappa(j+l+1) - 2}{(j+1)(j+2l+2)} b_{j+2l+1}$$

と書き直せる. これは結局のところ, 係数 a_i を与える漸化式と変わらない.

以上より b_i について考えなくてよいことがわかったので, a_i の解析に入ろう. Taylor 級数 $\sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^{i+l}$ は $\lim_{i \rightarrow \infty} |a_{i+1}/a_i| = 0$ を満たすので, その収束半径は無限大である.

級数の収束性が確かめられたので、この級数を解に用いて問題は生じないように思える。しかし実は、この無限級数の遠方での振る舞いは $\lim_{\rho \rightarrow \infty} |R(\rho)|^2 = 0$ に抵触してしまう。これは、遠方で級数の値に大きく寄与する $i \gg 1$ の係数が近似的に

$$a_{i+1} \approx \frac{2\kappa}{i} a_i \approx \frac{2\kappa}{i+1} a_i \quad (2.4.27)$$

を満たし、 ρ の低次の振る舞いを無視する近似で

$$R(\rho) = e^{-\kappa\rho} \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^{i+l} \approx a_0 e^{-\kappa\rho} \rho^l \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} (2\kappa)^i \rho^i = a_0 \rho^l e^{\kappa\rho} \quad (2.4.28)$$

となることから言える。

ρ の高次の項はこのような問題を生じるが、 κ が特別な値、すなわち

$$\kappa = \frac{1}{n}, \quad n = l+1, l+2, \dots \quad (2.4.29)$$

の場合には、 $0 = a_{n-l} = a_{n-l+1} = a_{n-l+2} = \dots$ が成り立ち、高次の項が消えるため、遠方での振る舞いに問題は生じない。以上の理由で、水素原子のエネルギーは離散的な値

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.4.30)$$

に限定される。エネルギーの次元を持つ係数は

$$\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} = 13.6\text{eV} \quad (2.4.31)$$

の値を持つ。ここで、単位 eV (エレクトロンボルト) は電子に 1 ボルトの電圧をかけて得られるエネルギー $1.6 \times 10^{-19}\text{J}$ に等しい。

2.4.3 固有状態の規格化

水素原子のエネルギー固有値は自然数 n を与えれば定まるから、これまで $|E, l, m\rangle$ と書いていた同時固有状態は $|n, l, m\rangle$ と表せる。角運動量の固有値は $l \leq n-1, -l \leq m \leq l$ に従う。これは離散固有状態であるから、 $\langle n, l, m | n, l, m \rangle = 1$ に規格化するのが自然であろう。以下では、規格化された固有状態を求めたいが、これには長い計算を要するため、始めにゴールとなる方程式を定理の形で提示しておく。

定理 10 水素原子のエネルギー固有状態を $\langle r, \theta, \varphi | n, l, m \rangle = R(\rho) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ と表したとき、規格化条件

$$1 = a_B^3 \int_0^\infty \rho^2 d\rho R(\rho)^2 \quad (2.4.32)$$

を満たす関数 $R(\rho)$ は、漸化式 (2.4.25) に従う a_i を用いて

$$R(\rho) = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)! a_B^3}} \left(\frac{2}{n}\right)^{2l+3} \cdot \exp\left[-\frac{1}{n}\rho\right] \sum_{i=0}^{n-l-1} \frac{a_i}{a_0} \rho^{i+l} \quad (2.4.33)$$

で与えられる。これは、

$$L_i^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} \left[e^x \frac{d^t}{dx^t} x^t e^{-x} \right] \quad (2.4.34)$$

で定義される Laguerre 陪多項式を用いた表式

$$R(\rho) = -\sqrt{\left(\frac{2}{na_B}\right)^3} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} \cdot \left(\frac{2}{n}\rho\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2}{n}\rho\right) \exp\left[-\frac{1}{n}\rho\right] \quad (2.4.35)$$

と等価である。

証明・第1段階：展開係数の Laguerre 陪多項式による表示

簡略化のため、途中計算で頻出する次の量を

$$q = n - l - 1, s = 2l + 1 \quad (2.4.36)$$

で表す。 $\langle r, \theta, \varphi | n, l, m \rangle$ の動径成分

$$R(\rho) = e^{-\frac{1}{n}\rho} \sum_{i=0}^q a_i \rho^{i+l} \quad (2.4.37)$$

の係数は、漸化式から

$$\begin{aligned} a_i &= -\frac{2}{n} \frac{n-l-i}{i(i+2l+1)} a_{i-1} = -\frac{2}{n} \frac{n-l-i}{i(i+2l+1)} \times -\frac{2}{n} \frac{n-l-i+1}{(i-1)(i-1+2l+1)} a_{i-2} \\ &= -\frac{2}{n} \frac{n-l-i}{i(i+2l+1)} \times \cdots \times -\frac{2}{n} \frac{n-l-1}{1 \cdot (1+2l+1)} a_0 \\ &= \left(-\frac{2}{n}\right)^i \frac{1}{i!} \frac{(n-l-1)!}{(n-l-i-1)!} \frac{(2l+1)!}{(2l+i+1)!} a_0, \quad s = 2l+1 \text{ とおいて,} \\ &= \left(-\frac{2}{n}\right)^i \frac{1}{i!} \frac{q!}{(q-i)!} \frac{s!}{(s+i)!} a_0 \end{aligned} \quad (2.4.38)$$

で与えられる。

まずは、複数回微分を行う際の公式

$$\frac{d^n}{dx^n} (f(x)g(x)) = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{d^k f}{dx^k} \frac{d^{n-k} g}{dx^{n-k}} \quad (2.4.39)$$

に注意して、Laguerre 多項式と $R(\rho)$ の関係を明示しておこう。変形・整理を行う個所には波線部を引いておくので、長く退屈な式変形であるが、1行ずつ進んでいただきたい。

$$\begin{aligned} L_{q+s}^s\left(\frac{2}{n}\rho\right) &= \left(\frac{n}{2}\right)^s \frac{d^s}{d\rho^s} \left[e^{\frac{2}{n}\rho} \frac{d^{q+s}}{d\rho^{q+s}} \rho^{q+s} e^{-\frac{2}{n}\rho} \right] \\ &= \left(\frac{n}{2}\right)^s \frac{d^s}{d\rho^s} \left[e^{\frac{2}{n}\rho} \sum_{k=0}^{q+s} \frac{(q+s)!}{k!(q+s-k)!} \left(\frac{d^k}{d\rho^k} \rho^{q+s} \right) \left(\frac{d^{q+s-k}}{d\rho^{q+s-k}} e^{-\frac{2}{n}\rho} \right) \right] \\ &= \left(\frac{n}{2}\right)^s \frac{d^s}{d\rho^s} \left[\sum_{k=0}^{q+s} \frac{(q+s)!}{k!(q+s-k)!} \frac{(q+s)!}{(q+s-k)!} \left(-\frac{2}{n}\right)^{q+s-k} \rho^{q+s-k} \right] \\ &= \left(\frac{n}{2}\right)^s \left[\sum_{k=0}^q \frac{(q+s)!}{k!(q+s-k)!} \frac{(q+s)!}{(q+s-k)!} \left(-\frac{2}{n}\right)^{q+s-k} \frac{(q+s-k)!}{(q-k)!} \rho^{q-k} \right] \\ &= (-1)^s \left[\sum_{k=0}^q \left(-\frac{2}{n}\right)^{q-k} \frac{((q+s)!)^2}{k!(q+s-k)!(q-k)!} \rho^{q-k} \right], \quad \text{ここで } q-k=i \text{ とおけば,} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (-1)^s \left[\sum_{i=0}^q \left(-\frac{2}{n}\right)^i \frac{((q+s)!)^2}{i!(q-i)!(s+i)!} \rho^i \right], \text{これを (2.4.38) と比較して,} \\
&= (-1)^s \frac{((q+s)!)^2}{q!s!} \times \frac{1}{a_0} \sum_{i=0}^q a_i \rho^i, \tag{2.4.40}
\end{aligned}$$

この式を整理して、次の関係を得る。

$$\sum_{i=0}^q a_i \rho^i = a_0 \frac{(-1)^s q!s!}{((q+s)!)^2} L_{q+s}^s \left(\frac{2}{n}\rho\right) \tag{2.4.41}$$

続いて、これを (2.4.32) に代入し、次の形に整理する。

$$1 = a_B^3 a_0^2 \frac{(-1)^s q!s!}{((q+s)!)^2} \int_0^\infty d\rho e^{-\frac{2}{n}\rho} \left(\sum_{i=0}^q \frac{a_i}{a_0} \rho^{i+s+1} \right) L_{q+s}^s \left(\frac{2}{n}\rho\right) \tag{2.4.42}$$

証明・第2段階：部分積分による解析

右辺の積分は $\rho = 0, \infty$ で 0 になる因子 $\rho e^{-\frac{2}{n}\rho}$ のため、部分積分による解析が有効である。Laguerre 多項式は

$$\begin{aligned}
L_{q+s}^s \left(\frac{2}{n}\rho\right) &= \left(\frac{n}{2}\right)^s \frac{d^s}{d\rho^s} \left[e^{\frac{2}{n}\rho} \frac{d^{q+s}}{d\rho^{q+s}} \rho^{q+s} e^{-\frac{2}{n}\rho} \right] \\
&= \sum_{k=0}^s \left(\frac{n}{2}\right)^k \frac{s!}{k!(s-k)!} e^{\frac{2}{n}\rho} \left[\frac{d^{q+s+k}}{d\rho^{q+s+k}} \rho^{q+s} e^{-\frac{2}{n}\rho} \right] \tag{2.4.43}
\end{aligned}$$

と変形できるので、部分積分により

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty d\rho e^{-\frac{2}{n}\rho} \left(\sum_{i=0}^q \frac{a_i}{a_0} \rho^{i+s+1} \right) L_{q+s}^s \left(\frac{2}{n}\rho\right) \\
&= \sum_{k=0}^s \left(\frac{n}{2}\right)^k \frac{s!}{k!(s-k)!} \int_0^\infty d\rho \left(\sum_{i=0}^q \frac{a_i}{a_0} \rho^{i+s+1} \right) \left[\frac{d^{q+s+k}}{d\rho^{q+s+k}} \rho^{q+s} e^{-\frac{2}{n}\rho} \right] \\
&= \sum_{k=0}^s \left(\frac{n}{2}\right)^k \frac{(-1)^{q+s} s!}{k!(s-k)!} \int_0^\infty d\rho \left(\sum_{i=q-1}^q \frac{a_i (i+s+1)!}{a_0 (i+1-q)!} \rho^{i+1-q} \right) \left[\frac{d^k}{d\rho^k} \rho^{q+s} e^{-\frac{2}{n}\rho} \right] \\
&= \sum_{k=0}^s \left(\frac{n}{2}\right)^k \frac{(-1)^{q+s} s!}{k!(s-k)!} \int_0^\infty d\rho \left(\frac{a_q}{a_0} (q+s+1)! \rho + \frac{a_{q-1}}{a_0} (q+s)! \right) \left[\frac{d^k}{d\rho^k} \rho^{q+s} e^{-\frac{2}{n}\rho} \right],
\end{aligned}$$

$q+s \geq 1$ に注意すると、 $k \geq 2$ の項は因子 $\rho e^{-2\rho/n}$ のため消える。よって、

$$\begin{aligned}
&= (-1)^{q+s} \int_0^\infty d\rho \left(\frac{a_q}{a_0} (q+s+1)! \rho + \frac{a_{q-1}}{a_0} (q+s)! \right) \rho^{q+s} e^{-\frac{2}{n}\rho} \\
&\quad + s(-1)^{q+s+1} \left(\frac{n}{2}\right) \int_0^\infty d\rho \frac{a_q}{a_0} (q+s+1)! \rho^{q+s} e^{-\frac{2}{n}\rho}. \tag{2.4.44}
\end{aligned}$$

ここで積分公式

$$\int_0^\infty dx x^n e^{-\lambda x} = \left(-\frac{\partial}{\partial \lambda}\right)^n \int_0^\infty dx e^{-\lambda x} = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}$$

を用いて (2.4.44) の積分を行えば,

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty d\rho e^{-\frac{2}{n}\rho} \left(\sum_{i=0}^q \frac{a_i}{a_0} \rho^{i+s+1} \right) L_{q+s}^s \left(\frac{2}{n}\rho \right) \\
&= - \left(-\frac{n}{2} \right)^{q+s+1} \frac{a_q}{a_0} ((q+s+1)!)^2 \left[\frac{n}{2} + \frac{1}{(q+s+1)^2} \frac{a_{q-1}}{a_q} - \frac{s}{q+s+1} \frac{n}{2} \right] \\
&= - \left(-\frac{n}{2} \right)^{q+s+1} \frac{a_q}{a_0} ((q+s+1)!)^2 \left[\frac{n(q+1)}{2(q+s+1)} + \frac{1}{(q+s+1)^2} \frac{a_{q-1}}{a_q} \right] \quad (2.4.45)
\end{aligned}$$

となる.

証明・第3段階: 式の整理と仕上げ

a_i の漸化式から得られる

$$\begin{aligned}
\frac{a_q}{a_0} &= \left(-\frac{2}{n} \right)^q \frac{s!}{(q+s)!} \\
\frac{a_{q-1}}{a_q} &= -\frac{nq(q+s)}{2}
\end{aligned}$$

を (2.4.45) に代入して整理すれば,

$$\int_0^\infty d\rho e^{-\frac{2}{n}\rho} \left(\sum_{i=0}^q \frac{a_i}{a_0} \rho^{i+s+1} \right) L_{q+s}^s \left(\frac{2}{n}\rho \right) = \left(-\frac{n}{2} \right)^{s+2} s!(q+s)!(2q+s+1)$$

となり, 規格化の式の積分が求まる. 規格化の式から, a_0 を与える式は

$$\begin{aligned}
1 &= a_B^3 a_0^2 \frac{(-1)^s q! s!}{((q+s)!)^2} \int_0^\infty d\rho e^{-\frac{2}{n}\rho} \left(\sum_{i=0}^q \frac{a_i}{a_0} \rho^{i+s+1} \right) L_{q+s}^s \left(\frac{2}{n}\rho \right) \\
&= a_B^3 a_0^2 \frac{(-1)^s q! s!}{((q+s)!)^2} \cdot \left(-\frac{n}{2} \right)^{s+2} s!(q+s)!(2q+s+1) \\
&= a_B^3 a_0^2 \frac{q!(s!)^2(2q+s+1)}{(q+s)!} \left(\frac{n}{2} \right)^{s+2}, \text{ 従って,} \\
a_0 &= \frac{1}{s!} \sqrt{\frac{(q+s)!}{q!(2q+s+1)a_B^3}} \left(\frac{2}{n} \right)^{s+2}, \quad q = n-l-1, s = 2l+1 \text{ より,} \\
&= \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!a_B^3}} \left(\frac{2}{n} \right)^{2l+3} \quad (2.4.46)
\end{aligned}$$

となる.

こうして得られた a_0 を用いれば, 求めたかった動径成分を与える式

$$\begin{aligned}
R(\rho) &= e^{-\frac{1}{n}\rho} \sum_{i=0}^q a_i \rho^{i+l} = a_0 e^{-\frac{1}{n}\rho} \rho^l \sum_{i=0}^q \frac{a_i}{a_0} \rho^i \\
&= \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!a_B^3}} \left(\frac{2}{n} \right)^{2l+3} \cdot \exp \left[-\frac{1}{n}\rho \right] \sum_{i=0}^{n-l-1} \frac{a_i}{a_0} \rho^{i+l} \quad (2.4.33)
\end{aligned}$$

および, これと等価な

$$R(\rho) = e^{-\frac{1}{n}\rho} \sum_{i=0}^q a_i \rho^{i+l} = \underbrace{a_0}_{\sim} e^{-\frac{1}{n}\rho} \rho^l \underbrace{\sum_{i=0}^q \frac{a_i}{a_0} \rho^i}_{\sim}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{s!} \sqrt{\frac{(q+s)!}{q!(2q+s+1)a_B^3}} \left(\frac{2}{n}\right)^{s+2} \cdot e^{-\frac{1}{n}\rho} \rho^l \cdot \frac{(-1)^s q! s!}{((q+s)!)^2} L_{q+s}^s\left(\frac{2}{n}\rho\right) \\
&= (-1)^s \sqrt{\frac{q!}{(2q+s+1)((q+s)!)^3 a_B^3}} \left(\frac{2}{n}\right)^{s+2} \cdot e^{-\frac{1}{n}\rho} \rho^l \cdot L_{q+s}^s\left(\frac{2}{n}\rho\right), \\
&= -\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3 a_B^3}} \left(\frac{2}{n}\right)^{2l+3} \cdot e^{-\frac{1}{n}\rho} \rho^l \cdot L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2}{n}\rho\right) \\
&= -\sqrt{\left(\frac{2}{na_B}\right)^3} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} \cdot \left(\frac{2}{n}\rho\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2}{n}\rho\right) \exp\left[-\frac{1}{n}\rho\right] \quad (2.4.35)
\end{aligned}$$

が得られる.

(証明終)

2.5 ハミルトニアンの設定

ここまで、ハミルトニアンが運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和で表される系を扱ってきた。続いて、磁場の影響を受ける粒子の振る舞いを見たいのだが、この系のハミルトニアンの形が曲者である。まずは、その形を見ておくのが手取り早いだろう。ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ から導かれる磁場の影響下にある質量 m 、電荷 q の粒子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}, t) \right)^2 \quad (2.5.1)$$

で与えられる。一体いかにして導かれたのか、想像しがたい形である。

量子力学を用いて様々な系の解析を行う際には、古典力学のモデルを元にハミルトニアンの形を考えることが多い。この磁場中の粒子のハミルトニアンも、古典力学の知識の上に打ち立てられたものである。古典力学的なモデルを量子力学的に書き直す操作は量子化と呼ばれる。

この節では、古典力学(解析力学)の復習をしつつ、最も基本的な量子化の方法である正準量子化の手続きについて解説を行う。目標は荷電粒子のハミルトニアンの導出にあるが、第3章で場の量子論の枠組みを探る足掛かりとして、正準量子化は大きな役割を果たすことになる。

2.5.1 最小作用の原理

正準量子化は^{ハミルトン}**Hamilton形式**と呼ばれる形で定式化された古典力学モデルに立脚した量子化の手法である。ここでは解析力学の復習として、運動方程式が知られている系をHamilton形式に書き直す方法を述べるところから話を始めよう。

f 自由度の質点系の座標変数を x 、その時間に関する1階微分を \dot{x} 、2階微分を \ddot{x} で表そう。力学では、時刻 t_1 から t_2 の間に座標が $x(t_1)$ から $x(t_2)$ に変化する過程は運動方程式によって規定される。解析力学においてこの過程を規定する法則は**最小作用の原理**と呼ばれる。

原理 最小作用の原理

配置が $x(t_1)$ から $x(t_2)$ に変化する過程を表す $x(t)$ は、作用積分と呼ばれる量

$$S[x(t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(x(t), \dot{x}(t), t)$$

に最小値 (正確に言えば停留値であればよい) を与える $x(t)$ でなければならない。

最小作用の原理を基礎とする古典力学の定式化の方法は^{ラグランジュ}**Lagrange**形式と呼ばれる。作用積分は時間の関数 $x(t)$ から定まる値を返す量、すなわち汎関数であり、積分中の L (これをラグランジアンと呼ぶ) によって特徴付けられる。

続いて、作用積分が最小値 (停留値) を取るための条件を判別する方法について述べよう。 $x(t)$ に絶対値が微小な関数 $\delta x(t)$ で表される変化を加えた場合、作用積分の値は

$$\begin{aligned} \delta S[x(t)] &= S[x(t) + \delta x(t)] - S[x(t)] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt (L(x(t) + \delta x(t), \dot{x}(t) + \delta \dot{x}(t), t) - L(x(t), \dot{x}(t), t)) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^f \left(\delta x_i(t) \frac{\partial L}{\partial x_i} + \delta \dot{x}_i(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) + (\delta x \text{ の高次項} \rightarrow \text{無視}) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^f \delta x_i(t) \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) + \sum_{i=1}^f \left[\delta x_i(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right]_{t=t_1}^{t=t_2} \end{aligned}$$

で表される変化を受ける。今は定まった $x(t_1)$ から $x(t_2)$ に移る過程を考えているので、出発点および到達点が変わらないよう、 $\delta x(t_1) = \delta x(t_2) = 0$ とすると、作用積分の変化は

$$\delta S[x(t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^f \delta x_i(t) \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \quad (2.5.2)$$

となる。

微分可能な関数 $f(x)$ が点 x_0 で最小値を取る場合、 x_0 近傍での f の微小変化 $f(x_0 + dx) - f(x_0)$ は dx の一次で 0 となる。同様に、 $S[x(t)]$ が関数 $x(t)$ に対し最小値を取るならば、微分係数に相当する量である $\delta S[x(t)]$ は 0 となるだろう。逆に言えば、 $S[x(t)]$ に最小値を与える $x(t)$ に対しどのような微小変化 $\delta x(t)$ を加えても

$$0 = \delta S[x(t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^f \delta x_i(t) \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) \quad (2.5.3)$$

が成り立たねばならない。こうして、作用積分に最小値を与える関数 $x(t)$ が満たすべき条件として、^{オイラー-ラグランジュ}**Euler-Lagrange**方程式と呼ばれる f 個の微分方程式

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \quad (2.5.4)$$

が得られる。ラグランジアンは、この方程式が運動方程式を与えるように決める。その形は以下で見るように、それほど難しいものではない。

運動方程式 $m\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla V$ を導くポテンシャル系のラグランジアンは

$$L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t)) = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2(t) - V(\mathbf{x}(t)) \quad (2.5.5)$$

で与えられる。ポテンシャル系であれば、運動エネルギーからポテンシャルエネルギーを引くことで容易にラグランジアンが得られる。

荷電粒子の運動方程式は

$$m\ddot{\mathbf{x}}(t) = q\mathbf{E}(\mathbf{x}(t), t) + q\dot{\mathbf{x}}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}(t), t) \quad (2.5.6)$$

である。電磁場 \mathbf{E}, \mathbf{B} は、スカラーポテンシャル ϕ とベクトルポテンシャル \mathbf{A} を用いて

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.5.7)$$

と書くことができる。この運動方程式を導くラグランジアンは

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}(t), \dot{\mathbf{x}}(t), t) &= \frac{m}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 + q\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}(t), t) - q\phi(\mathbf{x}(t), t) \\ &= \sum_{j=x,y,z} \frac{m}{2}\dot{x}_j^2 + q \sum_{j=x,y,z} \dot{x}_j A_j - q\phi \end{aligned} \quad (2.5.8)$$

で与えられる。実際、Euler-Lagrange 方程式

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}_i} L - \frac{\partial}{\partial x_i} L &= \frac{d}{dt} (m\dot{x}_i + qA_i) - q \sum_{j=x,y,z} \dot{x}_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i} + q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \\ &= m\ddot{x}_i + q \sum_{j=x,y,z} \dot{x}_j \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right) + q \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.5.9)$$

と運動方程式の各成分

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_i(t) &= qE_i + q \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \dot{x}_j(t) B_k \\ &= q \left(-\frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + q \sum_{j,k,l,m} \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} \dot{x}_j(t) \frac{\partial A_m}{\partial x_l} \\ &= q \left(-\frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + q \sum_{j,l,m} (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \dot{x}_j(t) \frac{\partial A_m}{\partial x_l} \\ &= q \left(-\frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) + q \sum_j \dot{x}_j(t) \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (2.5.10)$$

を見比べることで、これらが同じであることが確かめられる。

2.5.2 Hamilton 形式

Hamilton 形式では、座標 x と運動量 p の関数であるハミルトニアン H を用いて基本法則の記述を行う。Lagrange 形式から Hamilton 形式へ移行する際、これらは

$$p_i = \frac{\partial}{\partial \dot{x}_i} L(x, \dot{x}, t), \quad (2.5.11)$$

$$H(x, p, t) = \sum_{i=1}^f p_i \dot{x}_i - L(x, \dot{x}, t) \quad (2.5.12)$$

で定義される。具体的に、荷電粒子のラグランジアン

$$L(x(t), \dot{x}(t), t) = \sum_{i=x,y,z} \frac{m}{2}\dot{x}_i^2 + q \sum_{i=x,y,z} \dot{x}_i A_i - q\phi$$

を代入すると, $p_i = m\dot{x}_i + qA_i(x, t)$ なので, ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H(x, p, t) &= \sum_{i=x,y,z} \left(p_i \dot{x}_i - \frac{m}{2} \dot{x}_i^2 - q\dot{x}_i A_i \right) + q\phi \\ &= \sum_{i=x,y,z} \frac{1}{2m} (p_i - qA_i)^2 + q\phi \end{aligned} \quad (2.5.13)$$

である.

続いて, $x(t), p(t)$ の時間発展をハミルトニアンを用いて表そう. x の時間微分は運動量の定義から

$$\dot{x}_i = \frac{1}{m} (p_i - qA_i) = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (2.5.14)$$

となる. 運動量の時間微分は Euler-Lagrange 方程式から得られ

$$\begin{aligned} \dot{p}_i &= \frac{\partial}{\partial x_i} L = q \sum_{j=x,y,z} \dot{x}_j \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \\ &= q \sum_{j=x,y,z} (p_j - qA_j) \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (2.5.15)$$

と書ける. これらをまとめた Hamilton 形式での時間発展方程式

$$\begin{cases} \dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \end{cases} \quad (2.5.16)$$

を **Hamilton 方程式** という.

2.5.3 正準量子化

古典力学のモデルを Hamilton 形式に書き換えたら, あとは単純な置き換え $(x, p) \rightarrow (\hat{x}, \hat{p})$ を行うだけで, 量子力学的ハミルトニアンが得られる. 例えば荷電粒子の運動を記述するハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H(x, p, t) &= \sum_{i=x,y,z} \frac{1}{2m} (p_i - qA_i(x, t))^2 + q\phi(x, t) \\ \rightarrow \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}, t) &= \sum_{i=x,y,z} \frac{1}{2m} (\hat{p}_i - q\hat{A}_i(\hat{x}, t))^2 + q\hat{\phi}(\hat{x}, t) \end{aligned} \quad (2.5.17)$$

となる. 以上, 正準量子化の手続きをまとめておこう.

- (i) 運動方程式を導くラグランジアンを見つける.
- (ii) ラグランジアンからハミルトニアン $H(x, p, t)$ の具体形を求める.
- (iii) 置き換え $(x, p) \rightarrow (\hat{x}, \hat{p})$ を行う.

Hamilton 形式は面白いことに, 量子力学に通じる部分を多く持っている. 特に興味深いのは, **Poisson**^{ポアッソン}括弧式と呼ばれる量

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \quad (2.5.18)$$

と交換関係の類似性である。例えば、関数 $A(x, p, t)$ の時間発展は、Hamilton 方程式から

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}A &= \sum_{i=1}^f \left(\dot{x}_i \frac{\partial A}{\partial x_i} + \dot{p}_i \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) + \frac{\partial A}{\partial t} \\ &= \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial A}{\partial x_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) + \frac{\partial A}{\partial t} \\ &= \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.5.19)$$

となるが、これは期待値の時間発展の式

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \left([\hat{A}(t), \hat{H}] + i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) \right) | \psi(t) \rangle \quad (1.4.4)$$

と似ている。ここから Poisson 括弧式と交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ が

$$\{A, B\} \leftrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (2.5.20)$$

という対応を持つことが予想され、実際、様々な物理量に対し、例えば

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \leftrightarrow [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (2.5.21)$$

$$\{L_i, L_j\} = \sum_k \epsilon_{ijk} L_k \leftrightarrow [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (2.5.22)$$

のような対応関係が確かめられる。この対応のため、Hamilton 形式での知見が直接量子力学系の解析に役立つことも多い。

2.6 一様磁場中の荷電粒子

z 軸と平行な一様磁場のもとでの荷電粒子の振る舞いを調べよう。一様磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ を導くベクトルポテンシャルにはゲージ変換の任意性があるが、ここでは対称ゲージと呼ばれる $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \left(-\frac{By}{2}, \frac{Bx}{2}, 0\right)$ を取って議論を行う。すると、電荷 q 、質量 m_0 の荷電粒子のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_0} \left(\hat{p}_x + \frac{qB}{2} \hat{y} \right)^2 + \frac{1}{2m_0} \left(\hat{p}_y - \frac{qB}{2} \hat{x} \right)^2 + \frac{1}{2m_0} \hat{p}_z^2 \\ &= \hat{H}_B + \frac{1}{2m_0} \hat{p}_z^2 \end{aligned} \quad (2.6.1)$$

と書ける。 \hat{H}_B と第3項と可換なので、これらは同時固有状態を持つ。同時固有状態の z 依存性は既に扱った自由粒子と同じなので、問題は固有値問題

$$\hat{H}_B |E\rangle = E |E\rangle \quad (2.6.2)$$

に帰着する。

2.6.1 固有値の解析

H_B は位置と運動量の2次式であり、調和振動子のように“因数分解”を行い、生成・消滅演算子を導く解析が有効である。まず、

$$\begin{cases} \hat{\pi}_x = \hat{p}_x + \frac{qB}{2} \hat{y} \\ \hat{\pi}_y = \hat{p}_y - \frac{qB}{2} \hat{x} \end{cases} \quad (2.6.3)$$

とおけば、これらは交換関係

$$[\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = iqB\hbar \quad (2.6.4)$$

から互いに位置・運動量のような関係にある量だとわかる。これらと交換する1次結合

$$\begin{cases} \hat{X} = \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{1}{qB}\hat{p}_y \\ \hat{Y} = \frac{1}{2}\hat{y} - \frac{1}{qB}\hat{p}_x \end{cases} \quad (2.6.5)$$

を作ると、交換関係

$$[\hat{X}, \hat{Y}] = -i\frac{\hbar}{qB} \quad (2.6.6)$$

が成り立ち、これらも位置・運動量の関係にあることがわかる。例えば \hat{p}_x と \hat{y} の同時固有状態 $|p_x, y\rangle$ (これは完全系を成す) を見れば、これは明らかに $\hat{\pi}_x, \hat{Y}$ の同時固有状態でもあるから、 $\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y, \hat{X}, \hat{Y}$ の交換する2組の同時固有状態は完全系を成す。

今、長さおよび振動数の次元を持つパラメータ

$$r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{|qB|}}, \quad \omega_c = \frac{|qB|\hbar}{m_0} = \frac{\hbar}{m_0 r_0^2} \quad (2.6.7)$$

が作れるので、これを用いて演算子を無次元化したい。 qB は符号をとりだして、 $qB = \pm|qB| = \pm m_0 \omega_c = \pm \hbar / r_0^2$ と書けるので、

$$\begin{cases} \hat{\pi}_x = \hat{p}_x \pm \frac{\hbar}{2r_0^2}\hat{y} \\ \hat{\pi}_y = \hat{p}_y \mp \frac{\hbar}{2r_0^2}\hat{x} \\ \hat{X} = \frac{1}{2}\hat{x} \pm \frac{r_0^2}{\hbar}\hat{p}_y \\ \hat{Y} = \frac{1}{2}\hat{y} \mp \frac{r_0^2}{\hbar}\hat{p}_x \\ [\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] = \pm i\frac{\hbar^2}{r_0^2}, \quad [\hat{X}, \hat{Y}] = \mp i r_0^2 \end{cases}$$

は無次元の演算子の式、

$$\hat{\xi}_+ = \frac{r_0}{\hbar}\hat{\pi}_x, \quad \hat{\xi}_- = \frac{r_0}{\hbar}\hat{\pi}_y, \quad [\hat{\xi}_\pm, \hat{\xi}_\mp] = i \quad (2.6.8)$$

$$\hat{\eta}_- = \frac{1}{r_0}\hat{X}, \quad \hat{\eta}_+ = \frac{1}{r_0}\hat{Y}, \quad [\hat{\eta}_\pm, \hat{\eta}_\mp] = i \quad (2.6.9)$$

に帰着する。続いて、調和振動子と同じように、生成・消滅演算子を定義する。

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi}_\pm + i\hat{\xi}_\mp), \quad \hat{a}_\pm^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\xi}_\pm - i\hat{\xi}_\mp) \quad (2.6.10)$$

$$\hat{b}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\eta}_\pm + i\hat{\eta}_\mp), \quad \hat{b}_\pm^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\eta}_\pm - i\hat{\eta}_\mp) \quad (2.6.11)$$

こうして得られた生成・消滅演算子に対し、 $\hat{a}_\pm|0,0\rangle = |\emptyset\rangle$ かつ $\hat{b}_\pm|0,0\rangle = |\emptyset\rangle$ を満たす状態 $|0,0\rangle$ を求め、生成演算子を作用させれば、調和振動子の完全正規直交系

$$|n,l\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{l!}} (\hat{a}_\pm^\dagger)^n (\hat{b}_\pm^\dagger)^l |0,0\rangle \quad (2.6.12)$$

が得られる。ハミルトニアンは

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2m_0}(\hat{\pi}_x^2 + \hat{\pi}_y^2) = \hbar\omega_c(\hat{a}_\pm^\dagger\hat{a}_\pm + \frac{1}{2}) \quad (2.6.13)$$

なので、状態 $|n,l\rangle$ はエネルギー $\hbar\omega_c(n+1/2)$ を持つ。

2.6.2 固有状態の性質

ハミルトニアン固有状態を成す完全系が形式的に求まったが、ここで気になるのはエネルギーに関係しない謎のパラメータ l である。これは実は角運動量と関係する量である。 x, y と ξ, η を換算する式

$$\hat{x} = \hat{X} \mp \frac{r_0^2}{\hbar} \hat{\pi}_y = r_0 (\hat{\eta}_- \mp \hat{\xi}_-) = \mp r_0 (\hat{\xi}_- \mp \hat{\eta}_-) \quad (2.6.14)$$

$$\hat{y} = \hat{Y} \pm \frac{r_0^2}{\hbar} \hat{\pi}_x = r_0 (\hat{\eta}_+ \pm \hat{\xi}_+) = \pm r_0 (\hat{\xi}_+ \pm \hat{\eta}_+) \quad (2.6.15)$$

$$\hat{p}_x = \frac{1}{2} \left(\hat{\pi}_x \mp \frac{\hbar}{r_0^2} \hat{Y} \right) = \frac{\hbar}{2r_0} (\hat{\xi}_+ \mp \hat{\eta}_+) \quad (2.6.16)$$

$$\hat{p}_y = \frac{1}{2} \left(\hat{\pi}_y \pm \frac{\hbar}{r_0^2} \hat{X} \right) = \frac{\hbar}{2r_0} (\hat{\xi}_- \pm \hat{\eta}_-) \quad (2.6.17)$$

を用いて角運動量を計算すると

$$\begin{aligned} \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x &= \frac{\hbar}{2} \left(\mp(\hat{\xi}_-^2 - \hat{\eta}_-^2) \mp(\hat{\xi}_+^2 - \hat{\eta}_+^2) \right) = \mp \frac{\hbar}{2} (\hat{\xi}_+^2 + \hat{\xi}_-^2 - \hat{\eta}_+^2 - \hat{\eta}_-^2) \\ &= \mp \hbar (\hat{a}_\pm^\dagger \hat{a}_\pm - \hat{b}_\pm^\dagger \hat{b}_\pm) \end{aligned} \quad (2.6.18)$$

となるから、その固有値は

$$\hat{L}_z |n, l\rangle = \mp \hbar (n - l) |n, l\rangle \quad (2.6.19)$$

となる。符号の違いは直感的には、荷電粒子の運動が qB の正負に応じて時計回りか反時計回り（それぞれ、回転の中心からの見ると角運動量が負、正）になることに対応していると考えられ、エネルギーに相当する n の増加に応じて角運動量が負または正の寄与を受ける点はこのイメージで理解できる。

最後に、エネルギー固有状態の座標表示 $\langle x, y | n, l \rangle$ の形を求めよう。まずは、 $qB > 0$ の場合から。 $\hat{\xi}_+, \hat{\eta}_+$ の同時固有状態を用い、調和振動子の計算を参照しつつ解析を進める。

$|p_x, y\rangle$ が $\hat{\xi}_+, \hat{\eta}_+$ の同時固有状態であることから、規格化された固有状態 $|n, l\rangle$ は $|0, 0\rangle$ から

$$\begin{aligned} \langle p_x, y | n, l \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{l!}} \langle p_x, y | (\hat{a}_+^\dagger)^n (\hat{b}_+^\dagger)^l | 0, 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{\sqrt{2^l l!}} \left(\xi_+ - \frac{\partial}{\partial \xi_+} \right)^n \left(\eta_+ - \frac{\partial}{\partial \eta_+} \right)^l \langle p_x, y | 0, 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.6.20)$$

という関係で求められる。ここで、 ξ_+, η_+ が次の関係に従うことに注意せよ。

$$\begin{cases} \xi_+ = \frac{r_0}{\hbar} p_x + \frac{1}{2r_0} y \\ \eta_+ = \frac{1}{2r_0} y - \frac{r_0}{\hbar} p_x \end{cases} \quad (2.6.21)$$

$dp_x dy = \hbar d\xi_+ d\eta_+$ に注意すれば、 $\int dp_x dy |\langle p_x, y | 0, 0 \rangle|^2 = 1$ を満たすよう規格化された状態は

$$\langle p_x, y | 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\xi_+^2 + \eta_+^2)\right] = \frac{1}{\sqrt{\hbar\pi}} \exp\left[-\frac{r_0^2}{\hbar^2} p_x^2 - \frac{1}{4r_0^2} y^2\right] \quad (2.6.22)$$

で与えられる。よって (2.6.20) は Hermite 多項式を用いて

$$\langle p_x, y | n, l \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+l} \hbar \pi n! l!}} H_n \left(\frac{r_0}{\hbar} p_x + \frac{1}{2r_0} y \right) H_l \left(\frac{1}{2r_0} y - \frac{r_0}{\hbar} p_x \right) \exp\left[-\frac{r_0^2}{\hbar^2} p_x^2 - \frac{1}{4r_0^2} y^2\right] \quad (2.6.23)$$

と書き直せる。座標表示は Fourier 変換の式

$$\langle x, y | n, l \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \langle p_x, y | n, l \rangle \quad (2.6.24)$$

にこれを代入して計算すれば求まる。

$qB < 0$ の場合も同じような計算だが、流れは記しておく。用いるのは ξ_-, η_- の同時固有状態 $|x, p_y\rangle$ である。規格化された固有状態 $|n, l\rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle x, p_y | n, l \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{l!}} \langle x, p_y | (\hat{a}_-^\dagger)^n (\hat{b}_-^\dagger)^l | 0, 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{\sqrt{2^l l!}} \left(\xi_- - \frac{\partial}{\partial \xi_-} \right)^n \left(\eta_- - \frac{\partial}{\partial \eta_-} \right)^l \langle x, p_y | 0, 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.6.25)$$

であり、これを

$$\begin{cases} \xi_- = \frac{r_0}{\hbar} p_y + \frac{1}{2r_0} x \\ \eta_- = \frac{1}{2r_0} x - \frac{r_0}{\hbar} p_y \end{cases} \quad (2.6.26)$$

用いて整理すると、

$$\langle x, p_y | n, l \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+l} \hbar \pi n! l!}} H_n \left(\frac{r_0}{\hbar} p_y + \frac{1}{2r_0} x \right) H_l \left(\frac{1}{2r_0} x - \frac{r_0}{\hbar} p_y \right) \exp \left[-\frac{r_0^2}{\hbar^2} p_y^2 - \frac{1}{4r_0^2} x^2 \right] \quad (2.6.27)$$

となる。座標表示は Fourier 変換の式

$$\langle x, y | n, l \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_y e^{\frac{i}{\hbar} p_y y} \langle x, p_y | n, l \rangle \quad (2.6.28)$$

を計算すれば求まる。

2.7 内部自由度

ここまでの例題では様々な系のハミルトニアン固有状態を求め、その座標表示を計算した。ハミルトニアンの固有状態が分かれば系の時間発展が定まり、位置の確率分布は系の状態の座標表示、運動量の確率分布はその Fourier 変換から求められる。位置や運動量といった物理量の、量子力学における振る舞いはこうして理解可能である。

さて、古典力学の立場では、位置や運動量、エネルギーや角運動量の振る舞いが理解できたなら、粒子についてそれ以上調べることはないように思われる。ところが、自然が教えるところでは、量子力学における粒子の振る舞いはもう少し複雑であり、位置や運動量の自由度に加え、内部自由度と呼ばれる、それぞれの粒子が担う特殊な自由度を考慮しなければならない。この節では、スピンおよび統計性と呼ばれる内部自由度と、その取扱いについて簡単に解説を行う。

2.7.1 Zeeman 効果

量子力学的な粒子はそれぞれがスピンという、“自転のような”角運動量を持つことが知られており、これは電磁場中での粒子の振る舞いに影響を及ぼす。例えば、スカラー・ベクトルポテンシャル $\hat{\phi}, \hat{A}$ で表される電磁場の下での電子の運動を考えてみよう。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}})^2 - e\hat{\phi} \quad (2.7.1)$$

ベクトルポテンシャルが弱い一様磁場を与える $\mathbf{A} = \left(-\frac{By}{2}, \frac{Bx}{2}, 0\right)$ であり, B^2 が無視できるとしてハミルトニアンを変形すると

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - e\hat{\phi} + \frac{e}{2m_e}B(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - e\hat{\phi} + \frac{e}{2m_e}B\hat{L}_z \quad (2.7.2)$$

のように, 磁場の影響を電子の角運動量に依存する形で取り出せる.

磁場は原子中の電子にも影響を与える. 例えばスカラーポテンシャルを

$$\hat{\phi} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}} \quad (2.7.3)$$

とにおいて,³⁾ 水素原子中の電子の振る舞いを見てみよう. この電子のエネルギー固有状態は3つの整数で指定される $|n, l, m\rangle$ である. エネルギー固有値は \hat{L}_z に固有値 hm を代入して,

$$E_{n,m} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} + \frac{e\hbar}{2m_e} Bm, \quad n = 1, 2, \dots, -l \leq m \leq l \quad (2.7.4)$$

となる. よって, 始めは同じエネルギー固有値にあった $2l+1$ 個の状態は, m の値に応じて $e\hbar B/2m_e$ 刻みで異なるエネルギーを持つ $2l+1$ 個の状態に分裂する. 磁場中の原子のエネルギー固有状態に見られるこの分裂は **Zeeman** 効果という名前で知られる.

さて, ここからがスピンの話である. 量子数 l を持つ状態は $2l+1$ 個に分裂するはずであるが, 実際の原子では, 角運動量 m の部分に ± 1 の補正が加わったエネルギー固有値

$$E_{n,m} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} + \frac{e\hbar}{2m_e} B(m \pm 1) \quad (2.7.5)$$

が観測される. 物理学者を悩ませたこの ± 1 の寄与は **異常 Zeeman** 効果と呼ばれる. その起源となるのがスピンと呼ばれる内部自由度である.

2.7.2 スピンの取り扱い

スピンの数学的形式は, 値 ± 1 を取る謎の量を量子力学の枠組みの中で忠実に表現するだけで得られる. まず, 謎の \pm を区別するため, エネルギー固有状態を $|n, l, m, \pm\rangle$ と書いたとき,

$$\hat{S}_z |n, l, m, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |n, l, m, \pm\rangle \quad (2.7.6)$$

で定義される演算子 \hat{S}_z を“スピン角運動量”の z 成分と呼ぶことにしよう. スピンの昇降演算子は $|+\rangle, |-\rangle$ (以下, n, l, m は省略する) が成す2次元複素ベクトル空間上で次のように定義される.

$$\hat{S}_+ |+\rangle = |\emptyset\rangle, \quad \hat{S}_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle, \quad (2.7.7)$$

$$\hat{S}_- |+\rangle = \hbar |-\rangle, \quad \hat{S}_- |-\rangle = |\emptyset\rangle. \quad (2.7.8)$$

さらに, 角運動量の議論を参考に, スピンの x, y 成分を

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-), \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2i} (\hat{S}_+ - \hat{S}_-). \quad (2.7.9)$$

³⁾ 陽子の自由度は簡略化のため省略する.

と定義して、交換関係を調べてみよう。それには

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.7.10)$$

とおく表現が便利である。この表現の下では、スピンの演算子はそれぞれ

$$\begin{aligned} \hat{S}_z &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.7.11)$$

と書ける。ここから行列の交換関係を計算すれば、

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \quad (2.7.12)$$

という、角運動量 $\hat{\mathbf{L}}$ と同じ交換関係が成り立つことが確かめられる。こうして、 $|\pm\rangle$ が表す謎の自由度から、形式的に角運動量と同じ交換関係を持つスピン演算子 $\hat{\mathbf{S}}$ が得られた。

ちなみに、 $2J+1$ 個 ($J = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$) の値を持つ物理量があれば、角運動量と同じ交換関係に従う演算子を定義することはいつでも可能である。規格化された固有状態に適当な順番を付けて $| -J \rangle, | -J+1 \rangle, \dots, | J-1 \rangle, | J \rangle$ と書いて、

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm |M\rangle &= \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} |M \pm 1\rangle \\ \hat{J}_z |M\rangle &= M |M\rangle \\ \hat{J}_x &= \frac{1}{2} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \\ \hat{J}_y &= \frac{1}{2i} (\hat{J}_+ - \hat{J}_-) \end{aligned}$$

という演算子を定義すれば良い。すると交換関係 $[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hat{J}_\pm$ から $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y$, $[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x$ が、直接計算によって3つ目の交換関係

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] |M\rangle &= \frac{1}{4i} [\hat{J}_+ + \hat{J}_-, \hat{J}_+ - \hat{J}_-] |M\rangle \\ &= \frac{i}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_- \hat{J}_+) |M\rangle \\ &= \frac{i}{2} ((J - M + 1)(J + M) - (J - M)(J + M + 1)) |M\rangle \\ &= iM |M\rangle = i\hat{J}_z |M\rangle \end{aligned}$$

が成り立つことがわかるだろう。

角運動量と同じ交換関係に従うスピン演算子であるが、これが角運動量の一つだと断言するにはまだ根拠が弱い。より直接的にスピンと角運動量の関係を示すには、Dirac による相対論的量子力学の知見を借りる必要があるが、それには相対論の復習など準備が必要なので、解説は第2章の第2章の最後に回すことにする。ここでは、粒子が持つもう1つの内部自由度である統計性に話を移したい。

2.7.3 同種粒子の多体系

粒子の統計性が見られるのは、同じ種類の粒子が複数存在する系である。これまで扱った1粒子系や、異なる粒子である陽子と電子から成る水素原子では、統計性は現れない。

同種粒子系のハミルトニアン⁴⁾の典型的な形は次のようなものである。

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}_n^2 + \sum_{n=1}^N \hat{U}(\hat{\mathbf{x}}_n) + \sum_{1 \leq n < m \leq N} \hat{V}(|\hat{\mathbf{x}}_n - \hat{\mathbf{x}}_m|) \quad (2.7.13)$$

強調すべき点は、個々の粒子の自由度を表す演算子を入れ替えてもハミルトニアンが変化しないことである。最も単純な $N = 2$ の場合で考えると、

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2, \hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2) &= \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}_2, \hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2) \\ &= \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{p}}_1) = \hat{H}(\hat{\mathbf{x}}_2, \hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{p}}_1) \end{aligned}$$

が成り立つ。

このハミルトニアン⁴⁾の固有状態を $|\psi\rangle$ 、そのエネルギーを E で表せば、座標表示 $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ が従う Schrödinger 方程式は

$$H\left(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \frac{\hbar}{i} \nabla_1, \frac{\hbar}{i} \nabla_2\right) \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \quad (2.7.14)$$

である。ハミルトニアン⁴⁾の性質から

$$H\left(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \frac{\hbar}{i} \nabla_1, \frac{\hbar}{i} \nabla_2\right) \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = H\left(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, \frac{\hbar}{i} \nabla_2, \frac{\hbar}{i} \nabla_1\right) \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = E \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$$

が成り立つので、座標表示が $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi' \rangle = \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$ で与えられる状態 $|\psi'\rangle$ もまた、エネルギー E に属すハミルトニアン⁴⁾の固有状態であることがわかる。

粒子を入れ換える操作は演算子

$$\hat{P}_{12} |\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle = |\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1\rangle, \quad (2.7.15)$$

$$\hat{P}_{12} = \int d^3x_1 d^3x_2 |\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1\rangle \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2| \quad (2.7.16)$$

で表せる。これはハミルトニアン⁴⁾と交換する Hermite 演算子である。 $\hat{P}_{12}^2 = \hat{I}$ が成り立つことから、 \hat{P}_{12} の固有値は ± 1 に限られる。さらに、任意の状態は

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(\hat{I} + \hat{P}_{12})|\psi\rangle + \frac{1}{2}(\hat{I} - \hat{P}_{12})|\psi\rangle \quad (2.7.17)$$

と書き表すことができるが、

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{2}(\hat{I} + \hat{P}_{12})|\psi\rangle \quad (2.7.18)$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{2}(\hat{I} - \hat{P}_{12})|\psi\rangle \quad (2.7.19)$$

はそれぞれ \hat{P}_{12} の固有値 ± 1 に属す固有状態である。任意の状態が \hat{P}_{12} の固有状態で展開できるので、 \hat{P}_{12} は物理量である。2 個以上の粒子が存在する系においても同様にして、粒子の交換を行う演算子

$$\hat{P}_{ij} |\cdots \mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{x}_j \cdots\rangle = |\cdots \mathbf{x}_j, \dots, \mathbf{x}_i \cdots\rangle \quad (2.7.20)$$

4) \hat{V} は粒子間の相互作用、 \hat{U} はハミルトニアン⁴⁾に書かれていない外部から受ける力⁴⁾を表すポテンシャルを表す。例えば原子中の電子のモデルでは、 \hat{V} は電子間の Coulomb 相互作用、 \hat{U} は原子核が電子に及ぼす引力を表す。実際のハミルトニアン⁴⁾は磁場やスピンの効果も加わり、もう少し複雑になる。

が $\hat{P}_{ij}^2 = 1$ を満たす、ハミルトニアンと交換する物理量であることが示せる。よって、同種粒子系のエネルギー固有状態は演算子 \hat{P}_{ij} との同時固有状態に取ることができる。

入れ換え操作は無数に考えられるが、ハミルトニアンと \hat{P}_{ij} の同時固有状態の解析はどのように行ったら良いだろうか。実はこの問題に関しては自然の側から単純な答えが与えられている。それが粒子の統計性とと呼ばれる次の法則である。

原理 粒子の統計性

N 個の同種粒子から成る系において、個々の粒子に関する物理量 (例えば、 \mathbf{x}_i や \mathbf{p}_i やスピンの値) を ξ_i で表して、これらを入れ換える演算子

$$\hat{P}_{ij}|\cdots\xi_i, \dots, \xi_j, \dots\rangle = |\cdots\xi_j, \dots, \xi_i, \dots\rangle \quad (2.7.21)$$

を考える。このとき同種粒子系の任意の状態 $|\psi\rangle$ は、全ての i, j に対し

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ij}|\psi\rangle &= +|\psi\rangle \quad \text{または} \\ \hat{P}_{ij}|\psi\rangle &= -|\psi\rangle \end{aligned}$$

を満たす。符号は粒子の種類によってのみ定まり、+ の固有値を持つ粒子は^{ボース}**Bose**統計に従う、または **Bose** 粒子であるといい、- の固有値を持つ粒子は^{フェルミ}**Fermi**統計に従う、または **Fermi** 粒子であるという。

粒子の統計性を考慮すれば、入れ換え演算子 \hat{P}_{ij} は実質 $+\hat{I}$ または $-\hat{I}$ として扱えるので、これがハミルトニアンと同時固有状態を持つことは自明であり、これはもはや考える必要もない問題であると言えよう。

2.7.4 統計性の帰結

続いて、様々な自然現象の説明に粒子の統計性がどのように関わるのかを見ることにしよう。

まず、粒子の統計性の直接の帰結として、粒子の不可弁別性と呼ばれる性質がある。これは、同種の粒子は原理的に区別 (弁別) することができない、というものである。例えば、2 粒子系の位置を考えると、入れ換え演算子の固有状態 (2.7.18), (2.7.19) に対し

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi_+ \rangle = \frac{1}{2} (\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi \rangle + \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 | \psi \rangle) = \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 | \psi_+ \rangle \quad (2.7.22)$$

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi_- \rangle = \frac{1}{2} (\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi \rangle - \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 | \psi \rangle) = -\langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 | \psi_- \rangle \quad (2.7.23)$$

が成り立つから、粒子 1 が \mathbf{x}_1 に存在する確率と粒子 2 が \mathbf{x}_1 に存在する確率は常に等しい。従って、粒子が 1 つ、位置 \mathbf{x} に見出されたとき、これが粒子 1 である確率と粒子 2 である確率は等しく $1/2$ である。仮に、確率 1 で 1 番目の粒子こそが位置 \mathbf{x} にあるのだと言えるならば、これは粒子の統計性に反してしまう。よって、粒子に付けた番号というものを測定によって決定することはできない (不可弁別性)。

不可弁別性は統計力学において重要な役割を果たす。統計力学は多数の粒子から成る系の熱力学的性質を、個々の粒子の振る舞いを与える確率的モデルによって説明することを試みる。確率モデルの設定には系が取り得る状態の数を数える必要があるが、個々の粒子を区別して数えた場合と区別せず数えた場合では出来上がる確率モデルも異なったものと

なる。どちらのモデルが正しいかは実験による検証が可能であり、不可弁別性を考慮したモデルが実験結果をうまく説明することが知られている。

さらに Fermi 粒子の状態は Pauli の排他律と呼ばれる法則に従う。これは、Fermi 粒子が同じ状態にあることを禁止する法則である。例えば電子は Fermi 粒子であることが知られており、その座標とスピンの組をまとめて $\xi = (\mathbf{x}, \pm 1/2)$ と表せば、多電子系の状態 $|\psi\rangle$ は ξ の交換に関して反対称な状態と与えられる。すなわち、

$$\langle \xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots | \psi \rangle = -\langle \xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots | \psi \rangle \quad (2.7.24)$$

が任意の i, j の組み合わせに対し成り立つ。ここから、ある i, j の組に対し座標とスピンの組が同じ値 $\xi_i = \xi_j = \xi$ をとる場合を考えると

$$\langle \xi_1, \dots, \xi, \dots, \xi, \dots | \psi \rangle = -\langle \xi_1, \dots, \xi, \dots, \xi, \dots | \psi \rangle = 0 \quad (2.7.25)$$

が成り立つから、2つ以上の Fermi 粒子が同じ位置・スピンを占める確率（確率密度）は自動的に 0 となる。ただし、スピンの異なる 2つの Fermi 粒子は同じ位置に存在する可能性を持つことに注意しよう。例えば $\xi_i = (\mathbf{x}, +1/2)$, $\xi_j = (\mathbf{x}, -1/2)$ の場合に確率密度関数 $|\langle \xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots | \psi \rangle|^2$ が 0 以外の値をとることはあり得る。

一見単純な Pauli の排他律であるが、その帰結は我々の世界を根底から支配するほどに大きい。というのも、我々の身の回りの物質は元素で出来ており、元素の化学的性質は原子核に束縛されている電子の振る舞いによって決まるのだが、その電子は Pauli の排他律に従うからだ。

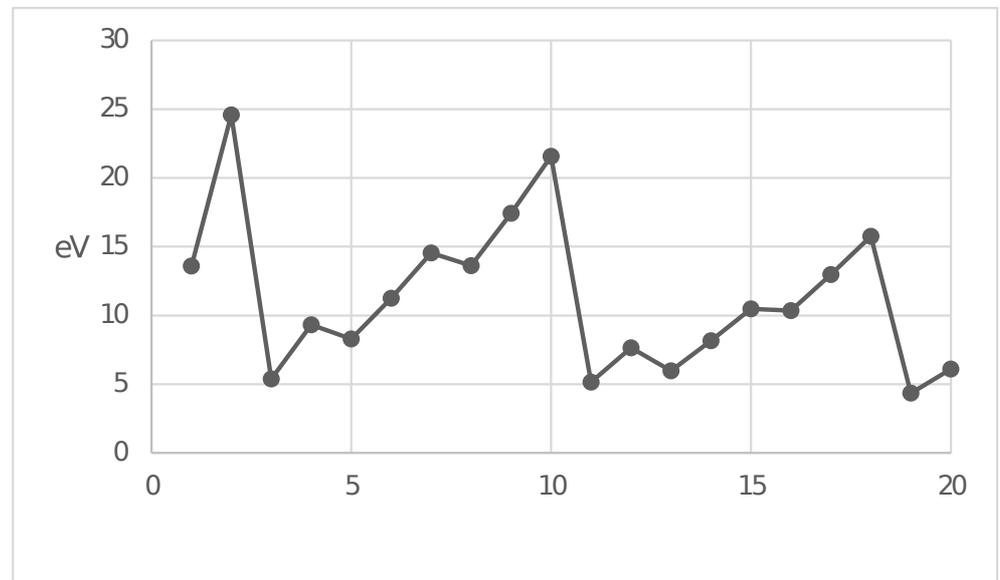


図 2.1 原子の第一イオン化エネルギー（測定値）

例として、元素の第一イオン化エネルギーと呼ばれる量の振る舞いを見てみよう。第一イオン化エネルギーとは原子から電子を 1つ引き剥がし、+1 のイオンにするために必要なエネルギーのことである。図を見ればわかるように、原子番号とともに緩やかに増加するイオン化エネルギーは希ガス元素を表す原子番号 2, 10, 18, ... の部分でピークに達したのち急落する。

原子番号 Z の原子核に束縛されている電子は、水素原子のエネルギー固有値の e^2 を Ze^2 に置き換えた

$$E_n = -Z^2 \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \times 13.6\text{eV} \quad (2.7.26)$$

で与えられる束縛エネルギーを持つと期待される。電子を原子核から引き剥がすには、この束縛エネルギーの絶対値に等しいエネルギーを与えなければならない。水素の場合、 $Z = 1, n = 1$ を代入した値 13.6eV が第一イオン化エネルギーと一致していることがわかる。この式に $Z = 2$ を代入するとヘリウムの第一イオン化エネルギーは水素の4倍になるはずであるが、実際は2倍弱に留まっている。これは、負電荷を持つ電子が原子核周辺に存在することで原子核のCoulomb引力が弱められるためである。電子が原子核のCoulomb引力を弱める効果は遮蔽と呼ばれる。遮蔽があるとはいえ、原子番号が増加するとCoulomb引力が強まる傾向に変わりはない。これがイオン化エネルギーは徐々に増加する仕組みである。

さて、続いてイオン化エネルギーが急落する理由について説明しよう。水素原子の解析を思い出せば、電子の束縛状態は3つの整数 n, l, m によって指定される。 n は自然数で l, m は不等式 $l \leq n - 1, -l \leq m \leq l$ に従う。同じ l の値に対し m は異なる $2l + 1$ 個の値を持つことができる。さらにスピンがあるため、エネルギー E_n を持つ束縛状態の数は

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) \times 2 = (n(n - 1) + n) \times 2 = 2n^2 \quad (2.7.27)$$

となる。従って、 n が $1, 2, 3, \dots$ と増加するに従って束縛状態の数は $2, 8, 18, \dots$ と増加していく。

ここでPauliの排他律の出番である。電子の状態は $\xi = (n, l, m, \pm)$ の組み合わせで指定されるが、Pauliの排他律は複数の電子が同じ ξ の値を持つことを禁止する。そのためヘリウムでは2つの電子がどちらも $n = 1$ の状態に存在することが可能であるが、原子番号3のリチウムでは電子が1つ、束縛エネルギーが小さい $n = 2$ の状態に入ることになる。束縛エネルギーの小さい電子を一つ引き剥がすのは比較的容易であるため、ここでイオン化エネルギーの急落が見られることになる。原子番号10番のネオンから11番ナトリウムに移る際の急落も同様。次の急落は n が3から4に移る28番になると思いきや、18番から19番に移るところで起きる。これは電子の位置の確率密度関数が l の増加とともに広がるために生じる⁵⁾。離れた位置にある電子は、原子核の近くに存在する電子による遮蔽の効果を大きく受ける分、束縛エネルギー少なくなる。

原子番号がさらに増えていくと電子の振る舞いも複雑になるが、第一イオン化エネルギーが緩やかな上昇と急落を見せる点是不変である。このように、Pauliの排他律は100近い元素に対し成り立つ普遍的な法則の地盤を支えているのである。

2.8 Dirac 方程式

この節では、相対論的効果を量子力学に取り入れる試みを見ていきたい。実は、これまでに用いてきた質点系の枠組みで相対論的量子力学を扱おうと、時間発展方程式の形が

⁵⁾ これは直観的には、 l とともに遠心力が増大するためだと考えてよい。具体的な計算で確かめたい場合は水素原子の半径の期待値を $n = 3, l = 0, 1, 2$ それぞれの場合で計算してみると良いだろう。

Lorentz 不変にならなかつたり、粒子の運動エネルギーがマイナスになったりと奇妙な帰結が生じてしまう。これらの問題は次の章で扱う場の量子論の枠組みにおいて解決を見るのだが、ここで質点系の量子力学の限界を知っておくことは場の量子論を学ぶ動機付けとして有益であろう。

さて、いろいろと問題を含む相対論的量子力学だが、その中で生まれた Dirac の理論からはスピンが角運動量的一种であることなど、面白い帰結が多く導かれる。そこで、スピンのいかなる量か理解するためにも、Dirac の理論を詳しく見ていくことにしたい。

2.8.1 相対論の復習

力を受けずに運動する粒子が等速直線運動しているように見える座標系 (位置と時刻を表す変数の組) を慣性系と呼ぶ。特殊相対性理論は

- (特殊相対性原理) 互いに等速直線運動する慣性系の間で成り立つ物理法則が同じ形をとること
- (光速不変の原理) 光の速さが慣性系によらない定数になること

を基礎とする物理理論である。この仮定に至るまでの経緯も興味深い話題ではあるのだが、ここでの関心はあくまで相対論の数学的形式を量子力学に取り込むことである。相対論の背景に関しては読者の予備知識と勉強に任せることにして、最小限必要な点を見ていきたい。

慣性系 S で用いられる座標変数 (t, x, y, z) と慣性系 S' で用いられる座標変数 (t', x', y', z') の間に成り立つ換算式を **Lorentz 変換** という。光速不変の原理から、変換の前後で電磁波が従う波動方程式の形が変化してはならないので、Lorentz 変換は

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t'^2} - \nabla'^2 \quad (2.8.1)$$

を満たすものでなければならない。このような変換を求める際は、 $(x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z)$ で定義される四成分のベクトル x^μ (上の μ は添え字であって累乗の記号でないことに注意) を用い、これらの変数による微分を

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \partial'_\mu = \frac{\partial}{\partial x'^\mu} \quad (2.8.2)$$

と略記するのが便利である。また、ここからの計算は微分の連鎖律

$$dx'^\mu = \sum_{\nu=0}^3 \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} dx^\nu = \sum_{\nu=0}^3 (\partial_\nu x'^\mu) dx^\nu \quad (2.8.3)$$

$$\partial'_\mu = \sum_{\nu=0}^3 \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \partial_\nu = \sum_{\nu=0}^3 (\partial'_\mu x^\nu) \partial_\nu \quad (2.8.4)$$

のように、和をとる添え字記号が上下セットで現れることが多いため、上下セットの添え字については和の記号を省略することにした。例を書いておけば、

$$A^\mu B_\mu = \sum_{\mu=0}^3 A^\mu B_\mu, \quad A^{\mu\nu} B_\nu = \sum_{\nu=0}^3 A^{\mu\nu} B_\nu, \quad A_{\mu\nu\rho} B^{\nu\rho} = \sum_{\nu,\rho=0}^3 A_{\mu\nu\rho} B^{\nu\rho}$$

のようになる。慣れない読者は和の記号を書きながら読み進めると良いだろう。

それでは, Lorentz 変換の話に入ろう. 行列 Λ による変換とその逆変換

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \quad (2.8.5)$$

$$x^{\mu} = (\Lambda^{-1})^{\mu}_{\nu} x'^{\nu} \quad (2.8.6)$$

を考えると, 座標 x^{μ} による微分 ∂_{μ} は変換則

$$\partial'_{\mu} = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} \partial_{\nu} = (\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} \partial_{\nu}, \quad (2.8.7)$$

$$\partial_{\mu} = \frac{\partial x'^{\nu}}{\partial x^{\mu}} \partial'_{\nu} = \Lambda^{\nu}_{\mu} \partial'_{\nu} \quad (2.8.8)$$

に従わねばならない. これを見ると, x^{μ} とその微分 ∂_{μ} の変換則は入れ替わったような関係にあることがわかる. 実は, 四成分量 x^{μ} と ∂_{μ} の添え字の位置を上下に分けたのは, これらの変換性の違いを見やすくする工夫なのである. ∂_{μ} と同じ変換則に従う四成分のベクトルは共変ベクトル, x^{μ} と同じ変換則に従うベクトルは反変ベクトルという呼び名を持つ. 逆変換が

$$(\Lambda^{-1})^{\rho}_{\mu} \Lambda^{\mu}_{\nu} = \delta^{\rho}_{\nu} = \begin{cases} 1 & (\rho = \nu) \\ 0 & (\rho \neq \nu) \end{cases} \quad (2.8.9)$$

を満たすことに注意すれば, 共変ベクトルと反変ベクトルが持つ性質

$$A'^{\mu} B'_{\mu} = (\Lambda^{\mu}_{\nu} A^{\nu}) \left((\Lambda^{-1})^{\rho}_{\mu} B_{\rho} \right) = (\Lambda^{-1})^{\rho}_{\mu} \Lambda^{\mu}_{\nu} A^{\nu} B_{\rho} = A^{\nu} B_{\nu} \quad (2.8.10)$$

が示される. つまり, 上下の添え字の和を取った部分は変換性が互いに打ち消しあうため変換の前後でその形が変わらないということである.

形が変わらない量. これが (2.8.1) を満たす変換を求めるヒントを与える. つまり, $(\partial^0, \partial^1, \partial^2, \partial^3) = (\partial_0, -\partial_1, -\partial_2, -\partial_3)$ とおいて得られる ∂^{μ} が反変ベクトルと同じ変換則に従えば光速不変の原理は守られるということだ. ここで, 計量テンソルと呼ばれる量

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \begin{cases} 1 & (\mu = \nu = 0) \\ -1 & (\mu = \nu = 1, 2, 3) \\ 0 & (\mu \neq \nu) \end{cases} \quad (2.8.11)$$

を導入すれば, $\partial^{\mu} = g^{\mu\nu} \partial_{\nu}$ と書ける. これを用いて光速不変の原理を書き表せば

$$\partial'^{\mu} \partial'_{\mu} = g_{\mu\nu} \partial'^{\mu} \partial'^{\nu} = g_{\mu\nu} \Lambda^{\mu}_{\rho} \Lambda^{\nu}_{\sigma} \partial^{\rho} \partial^{\sigma} = g_{\rho\sigma} \partial^{\rho} \partial^{\sigma} = \partial^{\rho} \partial_{\rho} \quad (2.8.12)$$

となるが, この式の 3 番目と 4 番目の部分が Lorentz 変換の満たすべき条件

$$g_{\mu\nu} \Lambda^{\mu}_{\rho} \Lambda^{\nu}_{\sigma} = g_{\rho\sigma} \quad (2.8.13)$$

を与える. $\Lambda^{\mu}_{\nu}, g_{\mu\nu}$ に対応する行列

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \Lambda^0_0 & \Lambda^0_1 & \Lambda^0_2 & \Lambda^0_3 \\ \Lambda^1_0 & \Lambda^1_1 & \Lambda^1_2 & \Lambda^1_3 \\ \Lambda^2_0 & \Lambda^2_1 & \Lambda^2_2 & \Lambda^2_3 \\ \Lambda^3_0 & \Lambda^3_1 & \Lambda^3_2 & \Lambda^3_3 \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

を用いればこの条件は

$$\Lambda^T g \Lambda = g \quad (2.8.14)$$

と書ける. ここで, Λ^T は Λ の転置行列を表す.

行列による座標変換が Lorentz 変換か否かを判別する指針が得られたので, Lorentz 変換の例をいくつか見ていこう.

例1 x 軸方向への Lorentz ブースト

速度の次元を持つパラメータ v を用いて

$$\beta = \frac{v}{c}, \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

という量を定義する。この時、

$$\begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.8.15)$$

で与えられる変換は Lorentz 変換である。この変換で結びつく慣性系 S, S' の関係は

$$\begin{cases} ct' = \gamma(ct - \beta x) \\ x' = \gamma(x - \beta ct) \\ y' = y \\ z' = z \end{cases}$$

で与えられるが、 $x' = y' = z' = 0$ を満たす S' の原点は、 S では $x = \beta ct = vt, y = 0, z = 0$ に従って運動しているように見える。従って、この変換は元の慣性系から見て x 軸方向に速度 v で等速直線運動する慣性系への変換を表す。この変換は x 軸方向への Lorentz ブーストと呼ばれる。

例2 任意方向への Lorentz ブースト

Lorentz ブーストを任意の方向に拡張することは難しくない。まず速度ベクトル \mathbf{v} から

$$\beta = \frac{\mathbf{v}}{c}, \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

という量を定義する。続いて、 S の位置ベクトル \mathbf{x} を \mathbf{v} と平行な部分 \mathbf{x}_{\parallel} と垂直な部分 \mathbf{x}_{\perp} に分解する。

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{\parallel} + \mathbf{x}_{\perp}, \quad \mathbf{x}_{\parallel} = \frac{\beta}{|\beta|^2}(\beta \cdot \mathbf{x}), \quad \mathbf{x}_{\perp} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_{\parallel}$$

こうすると、 \mathbf{x}_{\parallel} 方向が直前の例で見た x 軸方向に相当するので、変換は次のようになるはずである。

$$\begin{cases} ct' = \gamma(ct - \beta \cdot \mathbf{x}) \\ \mathbf{x}'_{\parallel} = \gamma(\mathbf{x}_{\parallel} - \beta ct) \\ \mathbf{x}'_{\perp} = \mathbf{x}_{\perp} \end{cases}$$

これを $\mathbf{x}' = \mathbf{x}'_{\parallel} + \mathbf{x}'_{\perp}$ に関する式に直せば

$$\begin{cases} ct' = \gamma(ct - \beta \cdot \mathbf{x}) \\ \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \left(\frac{(\gamma-1)\beta \cdot \mathbf{x}}{|\beta|^2} - \gamma ct \right) \beta \end{cases} \quad (2.8.16)$$

となり、複雑な式ではあるがこれは確かに Lorentz 変換の要件を満たす。

例3 z 軸周りの回転

Lorentz 変換としてはブースト変換が有名であるが、Lorentz 変換の要件を満たす変換はブーストに留まらない。例えば z 軸周りに角度 θ だけ回転した座標系に移る変換

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.8.17)$$

もまた Lorentz 変換の条件を満たすことがわかるだろう。

特殊相対性原理から物理法則は、こういった Lorentz 変換で結び付く慣性系の選択によらず同じ形を取らねばならない。物理法則は多くの場合、方程式の形で与えられる。従って、物理法則の形が変わらないことを保証するには、まず方程式に現れる量が受ける変換則を押さえておかねばならない。その上で方程式の形が変わらないようにするためには、次のことが成り立たねばならない。

- 変換則の不確かな量を物理法則に持ち込んではいならない。
- 物理法則を表す方程式の両辺は、同じ変換則に従う量で与えられなければならない。

変換則が明らかかな量として基本的なのは、ベクトルの変換則を基に定義されるテンソルという量である。これに関して、箇条書きでまとめておこう。

- $\partial^\mu \partial_\mu = \partial'^\mu \partial'_\mu$, $A^\mu B_\mu = A'^\mu B'_\mu$ のように任意の慣性系での値が一致する量はスカラーまたは **0 階** のテンソルという。
- 行列による変換 $A'^\mu = \Lambda^\mu_\nu A^\nu$ によって対応付けられる量を反変ベクトル、行列による変換 $A'_\mu = (\Lambda^{-1})^\nu_\mu A_\nu$ によって対応付けられる量を共変ベクトルという。ベクトルは **1 階** のテンソルともいう。添え字は $A^\mu = g^{\mu\nu} A_\nu$, $A_\mu = g_{\mu\nu} A^\nu$ に従って上げ下げが可能である。
- ベクトルの積 $A^\mu B^\nu$ と同じ変換則、すなわち $T'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma T^{\rho\sigma}$ に従う量 $T^{\mu\nu}$ は **2 階** の反変テンソルといい、 $A_\mu B_\nu$ と同じ変換則に従う量 $T_{\mu\nu}$ を **2 階** の共変テンソル、 $A^\mu B_\nu$, $A_\mu B^\nu$ と同じ変換則に従う量 T^μ_ν , T_μ^ν を **2 階** の混合テンソルという。
- 一般に、和をとらない添え字を n 個持つ量を **n 階** のテンソルという。例えば $T^{\mu\nu\rho}$ は **3 階** のテンソル、 $T^{\mu\nu\rho}$ は添え字 ρ で和をとっているので **2 階** のテンソルとなる。

テンソルを含む方程式のうち、例えば両辺の変換則が等しい $\partial_\mu F^{\mu\nu} = J^\nu$ は物理法則に用いることが可能な形であるが、変換則が異なる $\partial_\mu F^\mu_\nu = J^\nu$ は、例えある慣性系で成り立っていても、別の慣性系の量に変換すると方程式の形が変わってしまうので、基本的物理法則にふさわしい形ではない。

相対論の基礎に関しては以上の点を踏まえておけば十分だろう。より詳しい説明に関しては必要に応じて補足することにして、実際に量子力学の問題に相対論を適用する試みに入ろう。

2.8.2 Klein-Gordon 方程式

力を受けない質量 m の質点の運動は相対論では作用積分

$$S[\mathbf{x}(t)] = -mc \int ds = -mc \int dt \sqrt{c^2 - \dot{\mathbf{x}}^2} \quad (2.8.18)$$

で与えられる. 線素 $ds = \sqrt{dx^\mu dx_\mu}$ がスカラーであることからこの作用積分が特殊相対性原理の要請を満たすことは容易にわかるだろう. このラグランジアンは $|\dot{\mathbf{x}}|/c$ が十分小さいとき

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = -mc\sqrt{c^2 - \dot{\mathbf{x}}^2} \simeq mc^2 + \frac{m}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 \quad (2.8.19)$$

に帰着するので, 非相対論的ラグランジアンを相対論に拡張したものとわかる.

このラグランジアンからハミルトニアンを作り, 正準量子化の手続きを行ってみよう. 運動量およびハミルトニアンを計算すると

$$\mathbf{p} = mc \frac{\dot{\mathbf{x}}}{\sqrt{c^2 - \dot{\mathbf{x}}^2}}, \quad H = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - L = c\sqrt{m^2c^2 + \mathbf{p}^2} \quad (2.8.20)$$

となるから, 運動量を演算子で置き換えて得られる時間発展方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = \hat{H} |\phi(t)\rangle, \quad \hat{H} = c\sqrt{m^2c^2 + \hat{\mathbf{p}}^2} \quad (2.8.21)$$

となるはずである. このハミルトニアンは一応, 運動量表示で定義可能ではある. しかし, 運動量が平方根の中に入っているこの形は Lorentz 変換における不変性がわかりにくい欠点がある.

より明らかな Lorentz 不変性を持った理論としては, エネルギーと運動量が満たす関係式 $p^\mu p_\mu - m^2c^2 = H^2/c^2 - \mathbf{p}^2 - m^2c^2 = 0$ を出発点にするやり方がある. 座標表示では置き換え $\hat{H} \rightarrow i\hbar\partial_0, \hat{p}_i \rightarrow -i\hbar\partial_i$ ($i = 1, 2, 3$) によって時間発展方程式が得られるので,

$$(\hat{H}^2/c^2 - \hat{\mathbf{p}}^2 - m^2c^2)|\phi(t)\rangle = |\emptyset\rangle$$

に置き換えを施し整理することで

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2} \right) \phi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.8.22)$$

という方程式が得られる. この方程式は クライン ゴルドン Klein-Gordon 方程式という名で知られている.

Lorentz 不変性においては理想的な Klein-Gordon 方程式ではあるが, 2 階の微分方程式であるこの方程式には, 確率の保存則 $\frac{d}{dt} \int d^3x |\phi(\mathbf{x}, t)|^2 = 0$ を満たさない解が含まれるという問題がある. 実際, Klein-Gordon 方程式の一般解は $\omega_k = c\sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2c^2/\hbar^2}$ とおいて

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} (f(\mathbf{k})e^{-i\omega_k t} + g(\mathbf{k})e^{i\omega_k t}) \quad (2.8.23)$$

という形で与えられるが, 公式 $\int d^3x e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} = (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ に注意して確率の計算を実行すると

$$\begin{aligned} \int d^3x |\phi(\mathbf{x}, t)|^2 &= (2\pi)^3 \int d^3k |f(\mathbf{k})e^{-i\omega_k t} + g(\mathbf{k})e^{i\omega_k t}|^2 \\ &= (2\pi)^3 \int d^3k (|f(\mathbf{k})|^2 + |g(\mathbf{k})|^2 + g^*(\mathbf{k})f(\mathbf{k})e^{-2i\omega_k t} + f^*(\mathbf{k})g(\mathbf{k})e^{2i\omega_k t}) \end{aligned} \quad (2.8.24)$$

となり, 時間依存性が残されることがわかる.

2.8.3 Dirac 方程式の発見

Klein-Gordon 方程式に従う $\phi(\mathbf{x}, t)$ に対しては、確率の保存則は必ずしも保証されない。この欠点を改善するため、Dirac は時間と空間が同じ形で含まれる 1 階の微分方程式を考案した。この方程式は **Dirac 方程式** と呼ばれる。時間発展方程式が時間微分について 1 階なら、ハミルトニアン の Hermite 性から確率の保存則は即座に導かれるので、何も悩む必要は生じない。

Dirac の発想は、Klein-Gordon 方程式の 2 階微分が実は

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} = \partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} = \left(-i\gamma^\nu \partial_\nu - \frac{mc}{\hbar} \right) \left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \quad (2.8.25)$$

という形に “因数分解” 可能で、系の状態 $\psi(\mathbf{x}, t)$ が 1 階微分方程式

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.8.26)$$

を満たすおかげで Klein-Gordon 方程式が成り立っているのだ、というものだ。因数分解の形から、係数 γ^μ は

$$\begin{aligned} \partial^\mu \partial_\mu &= \gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu = \frac{1}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) \partial_\mu \partial_\nu \\ \Rightarrow \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu &= 2g^{\mu\nu} \end{aligned} \quad (2.8.27)$$

を満たさねばならないが、そのためには行列を用いて γ^μ を表現せねばならず、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ もまた複数の成分を持つ量として扱わねばならない。突飛な発想であるが、この要請に従って $\psi(\mathbf{x}, t)$ を多成分量と考えることでスピンの自由度を理論に組み込む余地が生まれる。

続いて行列 γ^μ の具体的な形を調べていこう。時間と空間の成分を分けると γ^μ が満たすべき条件は

$$(\gamma^0)^2 = 1 \quad (2.8.28)$$

$$(\gamma^1)^2 = (\gamma^2)^2 = (\gamma^3)^2 = -1 \quad (2.8.29)$$

$$\gamma^\mu \gamma^\nu = -\gamma^\nu \gamma^\mu \quad (\mu \neq \nu) \quad (2.8.30)$$

となる。ここからまず次のことが言える。

定理 11 γ 行列の Hermite 共役

行列 γ の Hermite 共役は次の性質を満たす。

$$\gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger, \quad \gamma^i = -(\gamma^i)^\dagger \quad (2.8.31)$$

証明

$(\gamma^0)^2 = 1$ を用いると (2.8.26) は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left(-i\hbar c \sum_{i=1}^3 \gamma^0 \gamma^i \partial_i + mc^2 \gamma^0 \right) \psi(\mathbf{x}, t)$$

という形で書ける。座標表示での運動量演算子が $-i\hbar \partial_i$ であることを考慮すると、右辺のハミルトニアンに対応する部分が Hermite 性を持つためには

$$\gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger, \quad \gamma^0 \gamma^i = (\gamma^0 \gamma^i)^\dagger = (\gamma^i)^\dagger (\gamma^0)^\dagger = (\gamma^i)^\dagger \gamma^0 \quad (i = 1, 2, 3)$$

が成り立たねばならない. ここで, 2 番目の式と $(\gamma^0)^2 = 1, \gamma^0\gamma^i = -\gamma^i\gamma^0$ から

$$(\gamma^i)^\dagger = (\gamma^i)^\dagger\gamma^0\gamma^0 = \gamma^0\gamma^i\gamma^0 = -\gamma^i\gamma^0\gamma^0 = -\gamma^i$$

が導かれる. (証明終)

定理 12 γ 行列の対角和

γ 行列の対角和は 0 である.⁶⁾

証明 対角和の性質

$$\text{tr}(AB) = \sum_i \sum_j A_{ij}B_{ji} = \sum_j \sum_i B_{ji}A_{ij} = \text{tr}(BA) \quad (2.8.33)$$

を用いて導ける. $(\gamma^0)^2 = -(\gamma^i)^2 = 1$ から

$$\begin{aligned} \text{tr}(\gamma^0) &= -\text{tr}(\gamma^0(\gamma^i)^2) = \text{tr}(\gamma^i\gamma^0\gamma^i) \\ &= \text{tr}((\gamma^i)^2\gamma^0) = -\text{tr}(\gamma^0), \end{aligned} \quad (2.8.34)$$

$$\begin{aligned} \text{tr}(\gamma^i) &= \text{tr}(\gamma^i(\gamma^0)^2) = -\text{tr}(\gamma^0\gamma^i\gamma^0) \\ &= -\text{tr}((\gamma^0)^2\gamma^i) = -\text{tr}(\gamma^i). \end{aligned} \quad (2.8.35)$$

それぞれの式中で行列を入れ換える際, 1 行目では $\gamma^0\gamma^i = -\gamma^i\gamma^0$ を, 2 行目では公式 $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$ を用いる. (証明終)

これらの定理を参考に, γ 行列の候補となる $n \times n$ 行列について考えよう. γ^0 の固有値は $(\gamma^0)^2 = 1$ から ± 1 に限定されるので, γ^0 の固有ベクトル e_i (これは γ^0 の Hermite 性から互いに直交するようにとれる) を

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, e_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots, e_n = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

と表せば γ^0 は

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.8.36)$$

と書ける. γ^0 の対角和が 0 であることから対角成分の 1 と -1 は同数含まねばならないので, 行列の次元 n は偶数となる.

よって, まず考えられるのが 2×2 複素行列である. 2 次元では, 対角和が 0 となる独立な Hermite 行列として **Pauli** 行列と呼ばれる

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.8.37)$$

⁶⁾ 行列の対角成分を足しあげた量を対角和またはトレースといい, 記号 tr で表す. 例えば ij 成分が A_{ij} で与えられる n 次元行列の対角和は

$$\text{tr}A = \sum_{i=1}^n A_{ii} \quad (2.8.32)$$

である.

が取れる。これはスピンの表現に現れた行列であった。ここでの議論では性質

$$\begin{aligned}\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i &= 2\delta_{ij}, & \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i &= 2i\sum_{k=1}^3\epsilon_{ijk}\sigma_k \\ \Rightarrow \sigma_i\sigma_j &= \delta_{ij} + i\sum_{k=1}^3\epsilon_{ijk}\sigma_k\end{aligned}\quad (2.8.38)$$

を用いると便利である。条件 $\gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger, \gamma^i = -(\gamma^i)^\dagger$ からは $\gamma^0 = \sigma_3, \gamma^i = i\sigma_i$ という候補が考えられるが、これは残念ながら $\gamma^0\gamma^3 = -\gamma^3\gamma^0$ を満たさない (他の性質は成り立つ)。結局、2次元では対角和が0となる行列が3つの Pauli 行列 (とその線形結合) に限られ、これらと独立な4つ目の行列が存在しないせいで γ 行列が求まらないことがわかる。

2次元の γ 行列は存在しないが、その次の 4×4 複素行列の γ 行列は存在する。例えば、 $\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ とおいて

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}\quad (2.8.39)$$

と定義すれば、

$$\gamma^0\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix},\quad (2.8.40)$$

$$\gamma^i\gamma^j = \begin{pmatrix} -\sigma_i\sigma_j & 0 \\ 0 & -\sigma_i\sigma_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_j\sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_j\sigma_i \end{pmatrix} = -\gamma^j\gamma^i \quad (i \neq j)\quad (2.8.41)$$

から γ 行列の満たすべき性質が確かめられる。このように表現された γ 行列を **Dirac 表示** の γ 行列という。ちなみに、Dirac 表示以外の γ 行列の表現も存在し、例えば

$$\gamma^0 = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{bmatrix}$$

で定義される ^{ワイル}Weyl 表示などがあるが、本書の内容では Dirac 表示が便利なので、以下の議論では Dirac 表示を用いることにする。

2.8.4 スピンと角運動量

γ 行列の存在が確かめられたので、Dirac 方程式から得られる帰結を見てみよう。まずは、スピンを考えず定義した角運動量がハミルトニアンと交換しないことを示す。座標表示でのハミルトニアンおよび角運動量は

$$H = -i\hbar c \sum_{i=1}^3 \gamma^0\gamma^i\partial_i + mc^2\gamma^0, \quad L_j = \frac{\hbar}{i} \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{jkl}x^k\partial_l\quad (2.8.42)$$

与えられ、交換関係 $[\partial_i, x^j] = \delta^j_i$ に注意すれば

$$\begin{aligned}[H, L_j] &= -\hbar^2 c \sum_{i,k,l} \gamma^0\gamma^i\epsilon_{jkl}[\partial_i, x^k\partial_l] = -\hbar^2 c \sum_{i,k,l} \gamma^0\gamma^i\epsilon_{jkl}\delta^k_i\partial_l \\ &= -\hbar^2 c \sum_{i,l} \epsilon_{jil}\gamma^0\gamma^i\partial_l \neq 0\end{aligned}\quad (2.8.43)$$

となる。

続いてハミルトニアンと交換する角運動量を定義するため、 L_j に何らかの項 S_j を加えて修正を行いたい。加える項 S_j の形は相対性原理からある程度推測が付く。まず考えられるのは、角運動量と同じ添え字構造を持った

$$S_j = A \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{jkl} \gamma^k \gamma^l$$

という形である。定数 A は後で決めることにして、ハミルトニアンとの交換関係を見てみよう。この計算では公式 $\gamma^0 \gamma^i \gamma^j = \gamma^i \gamma^j \gamma^0$, $\gamma^i \gamma^j = 2g^{ij} - \gamma^j \gamma^i$, $g^{ij} = -\delta^i_j$ が役立つ。

$$\begin{aligned} [H, S_j] &= -i\hbar c A \sum_{i,k,l} \epsilon_{jkl} [\gamma^0 \gamma^i, \gamma^k \gamma^l] \partial_i = -i\hbar c A \sum_{i,k,l} \epsilon_{jkl} (\gamma^0 \gamma^i \gamma^k \gamma^l - \gamma^k \gamma^l \gamma^0 \gamma^i) \partial_i \\ &= -i\hbar c A \sum_{i,k,l} \epsilon_{jkl} \gamma^0 (\gamma^i \gamma^k \gamma^l - \gamma^k \gamma^l \gamma^i) \partial_i \\ &= -i\hbar c A \sum_{i,k,l} \epsilon_{jkl} \gamma^0 (\gamma^i \gamma^k \gamma^l + \gamma^k (\gamma^i \gamma^l - 2g^{il})) \partial_i \\ &= -i\hbar c A \sum_{i,k,l} \epsilon_{jkl} \gamma^0 (\gamma^i \gamma^k \gamma^l + (2g^{ik} - \gamma^i \gamma^k) \gamma^l - 2\gamma^k g^{il}) \partial_i \\ &= -2i\hbar c A \sum_{i,k,l} \epsilon_{jkl} \gamma^0 (g^{ik} \gamma^l - \gamma^k g^{il}) \partial_i = -4i\hbar c A \sum_{i,k,l} \epsilon_{jkl} g^{ik} \gamma^0 \gamma^l \partial_i \\ &= 4i\hbar c A \sum_{i,l} \epsilon_{jil} \gamma^0 \gamma^l \partial_i = -4i\hbar c A \sum_{i,l} \epsilon_{jil} \gamma^0 \gamma^i \partial_l \end{aligned} \quad (2.8.44)$$

これを $[H, L_j] = \hbar^2 c \sum_{i,l} \epsilon_{jil} \gamma^0 \gamma^i \partial_l$ と比較すると、 $A = i\hbar/4$ としたとき

$$[H, L_j + S_j] = 0 \quad (2.8.45)$$

が成り立つことがわかる。以上より、ハミルトニアンと交換する角運動量の真の姿が得られたことになる。

ここで、 $\gamma^i \gamma^j = \begin{pmatrix} -\sigma_i \sigma_j & 0 \\ 0 & -\sigma_i \sigma_j \end{pmatrix}$ に注意して例えば S_3 の形を見れば、

$$\begin{aligned} S_3 &= \frac{i\hbar}{4} (\gamma^1 \gamma^2 - \gamma^2 \gamma^1) = \frac{i\hbar}{4} \begin{pmatrix} \sigma_2 \sigma_1 - \sigma_2 \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \sigma_1 - \sigma_2 \sigma_1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{i\hbar}{4} \begin{pmatrix} -2i\sigma_3 & 0 \\ 0 & -2i\sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるので、 S_j がスピンと同様、固有値 $\pm\hbar/2$ を持つことがわかる。こうして、スピンの起源が角運動量を表す行列 S_j にあることが見えてきた。

保存量となる正しい角運動量の姿は $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ となる。これらを言葉で区別したいときは $\mathbf{J}, \mathbf{L}, \mathbf{S}$ に対しそれぞれ全角運動量、軌道角運動量、スピン角運動量という呼び名を用いると良い。

2.8.5 Zeeman 効果の導出

スピンの起源は角運動量を表す演算子 S_j にあるらしい。この点をより直接見るために、非相対論的電子の Zeeman 効果を Dirac 方程式から導いてみよう。

電子に対する電磁場の影響は、ハミルトニアンと運動量を $\hat{H} \rightarrow \hat{H} - e\hat{\phi}, \hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}$ と書き換えることによって取り入れることができる。よって、電磁ポテンシャルの定義 $A^\mu = (\phi, c\mathbf{A})$ を用いて電子のハミルトニアンを書けば

$$\begin{aligned} H &= -i\hbar c \sum_{i=1}^3 \gamma^0 \gamma^i \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) + m_e c^2 \gamma^0 - eA^0 \\ &= -i\hbar c \sum_{i=1}^3 \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) + m_e c^2 \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix} - eA^0 \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.8.46)$$

となる。今は磁場の影響に注目して、 $A^0 = 0$ として計算を行うことにする。

4成分量 ψ を2成分量 ξ, η を用い $\psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar} \\ \eta(\mathbf{x})e^{-iEt/\hbar} \end{pmatrix}$ とおけば、ハミルトニアンの固有値を求める問題は

$$\begin{cases} E\xi = -i\hbar c \sum_{i=1}^3 \sigma_i \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) \eta + m_e c^2 \xi \\ E\eta = -i\hbar c \sum_{i=1}^3 \sigma_i \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) \xi - m_e c^2 \eta \end{cases} \quad (2.8.47)$$

となる。この式を変形して

$$\begin{cases} \xi = \frac{-i\hbar c}{E - m_e c^2} \sum_{i=1}^3 \sigma_i \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) \eta \\ \eta = \frac{-i\hbar c}{E + m_e c^2} \sum_{i=1}^3 \sigma_i \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) \xi \end{cases}, \quad (2.8.48)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \xi = -\frac{\hbar^2 c^2}{E^2 - m_e^2 c^4} \sum_{i,j=1}^3 \sigma_i \sigma_j \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) \left(\partial_j + \frac{ie}{\hbar c} A^j \right) \xi \\ \eta = -\frac{\hbar^2 c^2}{E^2 - m_e^2 c^4} \sum_{i,j=1}^3 \sigma_i \sigma_j \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) \left(\partial_j + \frac{ie}{\hbar c} A^j \right) \eta \end{cases} \quad (2.8.49)$$

と置き、 $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k$ を代入し、 $T_{ij} = T_{ji} \Rightarrow \sum_{i,j} \epsilon_{kij} T_{ij} = 0$ という Levi-Civita 記号の性質を繰り返し用いて整理すると

$$\begin{aligned} -\frac{E^2 - m_e^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \xi &= \sum_{i=1}^3 \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right)^2 \xi + \sum_{i,j,k=1}^3 i \epsilon_{ijk} \sigma_k \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right) \left(\partial_j + \frac{ie}{\hbar c} A^j \right) \xi \\ &= \sum_{i=1}^3 \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right)^2 \xi - \frac{e}{\hbar c} \sum_{i,j,k=1}^3 \sigma_k \epsilon_{kij} (\partial_i A^j + A^i \partial_j) \xi \\ &= \sum_{i=1}^3 \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right)^2 \xi - \frac{e}{\hbar c} \sum_{i,j,k=1}^3 \sigma_k \epsilon_{kij} \left(\frac{\partial A^j}{\partial x^i} + A^j \partial_i + A^i \partial_j \right) \xi \\ &= \sum_{i=1}^3 \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} A^i \right)^2 \xi - \frac{e}{\hbar c} \sum_{i,j,k=1}^3 \sigma_k \epsilon_{kij} \frac{\partial A^j}{\partial x^i} \xi \\ &= \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \xi - \frac{e}{\hbar} \sum_{k=1}^3 \sigma_k B_k \xi \end{aligned} \quad (2.8.50)$$

という結果が得られる。最後の磁束密度への書き換え $\sum_{i,j} \epsilon_{kij} \frac{\partial A^j}{\partial x^i} = c(\nabla \times \mathbf{A})_k = cB_k$ に注意しよう。 η の式も同様である。

ここで、非相対論極限として条件 $\mathcal{E} = E - m_e c^2 \ll m_e c^2$ を考えよう。このとき成り立つ近似式 $E^2 - m_e^2 c^4 = (E + m_e c^2)(E - m_e c^2) \approx 2m_e c^2 \mathcal{E}$ を用いると

$$\mathcal{E} \xi = \frac{1}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right)^2 \xi + \frac{e\hbar}{2m_e} \sum_{k=1}^3 \sigma_k B_k \xi,$$

スピン演算子 S_k と Pauli 行列 σ_k の関係は $S_k = \hbar\sigma_k/2$ なので

$$\mathcal{E}\xi = \frac{1}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right)^2 \xi + \frac{e}{m_e} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \xi \quad (2.8.51)$$

という方程式が得られる. 例として磁場が $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ の一様磁場である場合を考えると, スピンによるエネルギーの補正は eBS_z/m_e で与えられ, この項は固有値 $\pm e\hbar B/2m_e$ を持つ. 以上, Dirac 方程式が Zeeman 効果を正しく再現することが確かめられた.

2.8.6 ベクトルでない四成分量

Dirac の考えに従って状態 $\psi(\mathbf{x}, t)$ を四成分量にして理論を作ると, その帰結としてスピンや Zeeman 効果が導かれる. ところで, この四成分量 $\psi(\mathbf{x}, t)$ の Lorentz 変換に対する振る舞いに関してはまだ何も言っていなかった. 相対性原理から, 基本方程式に変換性の不透明な量が現れてはならないので, $\psi(\mathbf{x}, t)$ の変換性もきちんと定義しておかなければならない.

$\psi(\mathbf{x}, t)$ の成分は 4 つあるので, 真っ先に思いつくのはこれがベクトルだという予想である. つまり, Dirac 方程式の添え字構造が

$$\begin{aligned} \left(i(\gamma^\mu)^\rho{}_\sigma \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \delta^\rho{}_\sigma \right) \psi^\sigma(\mathbf{x}, t) &= 0 \quad \text{または,} \\ \left(i(\gamma^\mu)_{\rho\sigma} \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} g_{\rho\sigma} \right) \psi^\sigma(\mathbf{x}, t) &= 0 \end{aligned}$$

だということだ. 添え字を見ると問題がないように思えるが, 実はこの変換則は $\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}$ に抵触してしまう. 具体的に説明しよう.

$$\begin{aligned} (\gamma^1)^\rho{}_\sigma &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{の添え字を下げた} \\ (\gamma^1)_{\rho\sigma} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

を Γ で表せば, これは 2 階のテンソルで変換則 $\Gamma' = \Lambda^T \Gamma \Lambda$ に従う. ここで Lorentz 変換として

$$\begin{aligned} \Lambda &= \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (x \text{ 軸方向へのブースト}) \text{ を考えると,} \\ \Gamma' &= \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \beta\gamma & \gamma \\ 0 & 0 & -\gamma & -\beta\gamma \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるので, 変換後の γ'^1 は

$$\begin{aligned} (\gamma'^1)^\rho{}_\sigma &= g^{\rho\mu}(\gamma'^1)_{\mu\sigma} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \beta\gamma & \gamma \\ 0 & 0 & -\gamma & -\beta\gamma \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \beta\gamma & \gamma \\ 0 & 0 & \gamma & \beta\gamma \\ \beta\gamma & -\gamma & 0 & 0 \\ -\gamma & \beta\gamma & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるが, これは $\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}$ とハミルトニアン H の Hermite 性の帰結として成り立つべき $(\gamma'^1)^\dagger = -\gamma'^1$ を満たさない形になっている. 従って, 四成分 $\psi(\mathbf{x}, t)$ をベクトルと考えることはできない.

2.8.7 スピノルの発見

系の状態 $\psi(\mathbf{x}, t)$ がベクトルで表せない (成分の数から他のテンソルでも表せないだろう) となると, 相対論の観点から Dirac 方程式は不適切だということになる. 数学的な形式の中にスピンに関する性質を取り込むことに成功した Dirac 方程式は, その数学的形式ゆえに破綻してしまうのか. 否である. Dirac 方程式はここでも曲芸的な逆転の発想を見せてくれる. すなわち, 状態 $\psi(\mathbf{x}, t)$ がテンソルで表せないなら, テンソルで表さなければいいのだ. さて, やや筆が滑ってしまったが, 要するに状態の変換則の問題はテンソルとは異なる変換則に従う量の発明によって解決を見る. この量をスピノルという.

それでは, スピノルの変換則というものを調べていこう. 今の課題は Lorentz 変換 $x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ に対応する新たな変換則 $\psi'(\mathbf{x}', t') = S_\Lambda \psi(\mathbf{x}, t)$ を考案することで, 異なる慣性系で同じ形の Dirac 方程式, すなわち

$$\begin{aligned} \left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(\mathbf{x}, t) &= 0 \\ \left(i\gamma'^\mu \partial'_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(\mathbf{x}', t') &= 0 \end{aligned}$$

が成り立つようにすることだ.⁷⁾ そのために S_Λ が満たすべき条件は

$$S_\Lambda \gamma^\mu \partial_\mu S_\Lambda^{-1} = \gamma'^\mu \partial'_\mu \quad (2.8.52)$$

である.

行列 S_Λ の姿を追っていくため, 無限小変換というものを考えたい. Lorentz ブーストや回転に含まれる速度や角度を表すパラメータがごく小さい値をとる場合, 元の系とごく小さな相対速度を持って移動する座標系, 元の系とわずかにずれた座標軸を持つ系への Lorentz 変換が考えられる. こういった変換を無限小 Lorentz 変換と言う. 今, 微小量を ϵ で表せば無限小 Lorentz 変換は

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \epsilon \omega^\mu{}_\nu \quad (2.8.53)$$

⁷⁾ 変換後の Dirac 方程式の γ に ' が付かないことに注意しよう. つまり, γ 行列は $g^{\mu\nu}$ のように, 変換の前後で形を変えない量ということになる. Dirac 方程式の変換則としては $\gamma'^\mu\gamma'^\nu + \gamma'^\nu\gamma'^\mu = 2g^{\mu\nu}$ を満たす γ' を用いて

$$\left(i\gamma'^\mu \partial'_\mu + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(\mathbf{x}', t') = 0$$

という方程式が成り立てば十分であるように思われるが, この場合, 慣性系ごとに Dirac 方程式を表す連立方程式の形が変わってしまう.

と表すことができる。ε の高次の項は無視できるので、Lorentz 変換の性質 $g_{\rho\sigma} = g_{\mu\nu}\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\sigma = g_{\mu\nu}(\delta^\mu{}_\rho + \epsilon\omega^\mu{}_\rho)(\delta^\nu{}_\sigma + \epsilon\omega^\nu{}_\sigma) = g_{\rho\sigma} + \epsilon(\omega_{\rho\sigma} + \omega_{\sigma\rho})$ から行列 $\omega_{\rho\sigma}$ は

$$\omega_{\rho\sigma} = -\omega_{\sigma\rho} \quad (2.8.54)$$

を満たさねばならない。無限小変換 (2.8.53) の逆変換は

$$(\Lambda^{-1})^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu - \epsilon\omega^\mu{}_\nu \quad (2.8.55)$$

で与えられる。

無限小変換と有限変換の関係は後で述べることにして、まずは無限小変換 (2.8.53) に対する $\psi(\mathbf{x}, t)$ の変換則を求めよう。変換行列を、 $S_\Lambda = 1 + \epsilon\Omega$ と置くと、 S_Λ が満たすべき条件 $S_\Lambda\gamma^\mu\partial_\mu S_\Lambda^{-1} = \gamma^\mu\partial'_\mu$ は

$$\begin{aligned} (1 + \epsilon\Omega)\gamma^\mu\partial_\mu(1 - \epsilon\Omega) &= \gamma^\mu(\delta^\nu{}_\mu - \epsilon\omega^\nu{}_\mu)\partial_\nu \\ \Rightarrow (\Omega\gamma^\mu - \gamma^\mu\Omega)\partial_\mu &= -\gamma^\mu\omega^\nu{}_\mu\partial_\nu = -\gamma^\nu\omega^\mu{}_\nu\partial_\mu \\ \Rightarrow \Omega\gamma^\mu - \gamma^\mu\Omega &= -\omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu \end{aligned} \quad (2.8.56)$$

と整理できる。ここから行列 Ω が $\omega^\mu{}_\nu$ の 1 次式で与えられるという予想が立てられる。そこで、 $\omega_{\mu\nu}, \gamma^\mu$ を組み合わせて添え字のない Ω を作ることを考えると、 A を定数として

$$\Omega = A\omega_{\rho\sigma}\gamma^\rho\gamma^\sigma = \frac{1}{2}A\omega_{\rho\sigma}(\gamma^\rho\gamma^\sigma - \gamma^\sigma\gamma^\rho) \quad (2.8.57)$$

という形が候補となる。⁸⁾ 実際、交換関係から

$$\begin{aligned} \Omega\gamma^\mu - \gamma^\mu\Omega &= A\omega_{\rho\sigma}(\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^\mu - \gamma^\mu\gamma^\rho\gamma^\sigma) \\ &= A\omega_{\rho\sigma}(\gamma^\rho g^{\mu\sigma} - g^{\mu\rho}\gamma^\sigma) = -2A\omega^\mu{}_\sigma\gamma^\sigma \end{aligned} \quad (2.8.58)$$

となるので、 $A = 1/2$ とすればこの Ω が求めるべき変換則を与えることがわかる。

続いて、一般の Lorentz 変換に対する状態の変換則を考えるため、無限小変換から有限変換を導く方法の解説に入ろう。その基本的な発想は積分と同じである。まず、無限小 Lorentz 変換 $\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \epsilon\omega^\mu{}_\nu$ を繰り返して得られるベクトルを

$$x^\mu(n\epsilon) = x^\mu((n-1)\epsilon) + \epsilon\omega^\mu{}_\nu x^\nu((n-1)\epsilon), \quad \text{ただし, } x^\mu(0) = x^\mu \quad (2.8.59)$$

とおいてみる。すると、積分を導くのに便利な形

$$x^\mu(n\epsilon) = x^\mu + \sum_{i=1}^n (x^\mu(i\epsilon) - x^\mu((i-1)\epsilon)) = x^\mu + \sum_{i=1}^n \epsilon\omega^\mu{}_\nu x^\nu((i-1)\epsilon) \quad (2.8.60)$$

が得られ、この積分を実行すると次の式が得られる。

$$x^\mu(a) = x^\mu + \int_0^a d\epsilon\omega^\mu{}_\nu x^\nu(\epsilon) \quad (2.8.61)$$

変換 $x^\mu \rightarrow x^\mu(a)$ は Lorentz 変換である。これは実際に、

$$\frac{d}{da}g_{\mu\nu}x^\mu(a)x^\nu(a) = g_{\mu\nu}(\omega^\mu{}_\rho x^\rho(a)x^\nu(a) + x^\mu(a) \cdot \omega^\nu{}_\rho x^\rho(a))$$

⁸⁾ $\omega_{\rho\sigma}$ は反対称行列なので

$$\omega_{\rho\sigma}\gamma^\rho\gamma^\sigma = \frac{1}{2}\omega_{\rho\sigma}(\gamma^\rho\gamma^\sigma - \gamma^\sigma\gamma^\rho) + \frac{1}{2}\omega_{\rho\sigma}(\gamma^\rho\gamma^\sigma + \gamma^\sigma\gamma^\rho) = \frac{1}{2}\omega_{\rho\sigma}(\gamma^\rho\gamma^\sigma - \gamma^\sigma\gamma^\rho)$$

となることに注意。

$$\begin{aligned}
&= \omega_{\nu\rho} x^\rho(a) x^\nu(a) + \omega_{\mu\rho} x^\mu(a) x^\rho(a) \\
&= \omega_{\mu\rho} (x^\rho(a) x^\mu(a) + x^\mu(a) x^\rho(a)) = 0
\end{aligned} \tag{2.8.62}$$

が成り立つことから確かめられる。変換 $x^\mu \rightarrow x^\mu(a)$ の具体的な形は逐次代入法によって得られる。第 1 章の時間発展方程式の節で行った議論を思い出しながら計算を行うと

$$\begin{aligned}
x^\mu(a) &= x^\mu + \int_0^a d\epsilon_1 \omega^\mu{}_{\nu_1} x^{\nu_1}(\epsilon_1) \\
&= x^\mu + \int_0^a d\epsilon_1 \omega^\mu{}_{\nu_1} x^{\nu_1} + \int_0^a d\epsilon_1 \int_0^{\epsilon_1} d\epsilon_2 \omega^\mu{}_{\nu_1} \omega^{\nu_1}{}_{\nu_2} x^{\nu_2}(\epsilon_2) = \dots \\
&= x^\mu + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^a d\epsilon_1 \int_0^{\epsilon_1} d\epsilon_2 \dots \int_0^{\epsilon_{n-1}} d\epsilon_n \omega^\mu{}_{\nu_1} \omega^{\nu_1}{}_{\nu_2} \dots \omega^{\nu_{n-1}}{}_{\nu_n} x^{\nu_n} \\
&= x^\mu + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \omega^\mu{}_{\nu_1} \omega^{\nu_1}{}_{\nu_2} \dots \omega^{\nu_{n-1}}{}_{\nu_n} x^{\nu_n}
\end{aligned} \tag{2.8.63}$$

という結果が得られる。従って、無限小変換を繰り返して得られる行列は $\omega = \omega^\mu{}_\nu$ を肩を持つ指数関数 $\exp[a\omega]$ の形になっている。行列の積の部分が増えるので、後の議論では

$$(\omega^0)^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu, \quad (\omega^n)^\mu{}_\nu = \omega^\mu{}_{\nu_1} \omega^{\nu_1}{}_{\nu_2} \dots \omega^{\nu_{n-1}}{}_{\nu_n} \quad (n \geq 1) \tag{2.8.64}$$

$$(\exp[a\omega])^\mu{}_\nu = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} (\omega^n)^\mu{}_\nu \tag{2.8.65}$$

という略記を用いることにする。主要な Lorentz 変換はこの方法で無限小変換から構成できる。例を見ておこう。

例 4 x 軸方向への Lorentz ブースト

$\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu}$ を満たす行列 $\omega^\mu{}_\nu$ として例えば

$$\omega = \omega^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ を考えると } \omega^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ なので,}$$

$$\begin{aligned}
\exp[a\omega] &= 1 + \omega^2 \left(\frac{1}{2!} a^2 + \frac{1}{4!} a^4 + \dots \right) + \omega \left(a + \frac{1}{3!} a^3 + \frac{1}{5!} a^5 + \dots \right) \\
&= \begin{pmatrix} \cosh a & -\sinh a & 0 & 0 \\ -\sinh a & \cosh a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.8.66}$$

が成り立つ。ここで、 $\cosh a = \gamma$, $\sinh a = \beta\gamma$ とおけば、これは x 軸方向への Lorentz ブースト

$$\begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と同等であることがわかる。

ちなみに、任意方向の Lorentz ブースト $\exp[a\omega]$ は

$$\begin{cases} ct' = \gamma(ct - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{x}) \\ \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \left(\frac{(\gamma-1)\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{x}}{\beta^2} - \gamma ct \right) \boldsymbol{\beta} \end{cases} \quad (\gamma = \cosh a, \beta\gamma = \sinh a)$$

は, $\beta = \beta(\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta) = \beta(A, B, C)$ とおいたとき

$$\omega = \omega^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 0 & -A & -B & -C \\ -A & 0 & 0 & 0 \\ -B & 0 & 0 & 0 \\ -C & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

とすれば得られる. $A^2 + B^2 + C^2 = 1$ から

$$\omega^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & AA & AB & AC \\ 0 & AB & BB & BC \\ 0 & AC & BC & CC \end{pmatrix}, \quad \omega^3 = \begin{pmatrix} 0 & -A & -B & -C \\ -A & 0 & 0 & 0 \\ -B & 0 & 0 & 0 \\ -C & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \omega$$

となることに注意すれば確かめるのは容易である.

例5 z 軸周りの回転

同様に,

$$\omega = \omega^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ を考えると } \omega^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ となるので,}$$

$$\begin{aligned} \exp[a\omega] &= 1 - \omega^2 \left(-\frac{1}{2!}a^2 + \frac{1}{4!}a^4 - \dots \right) + \omega \left(a - \frac{1}{3!}a^3 + \frac{1}{5!}a^5 - \dots \right) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos a & \sin a & 0 \\ 0 & -\sin a & \cos a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.8.67)$$

が成り立つ. これは見ての通り, z 軸周り角度 a の回転を表す.

それでは, 以上の議論を踏まえて, 一般の Lorentz 変換に対する状態の変換則が問題なく定義されることを証明しよう.

定理13 状態の変換則

Lorentz 変換 $\Lambda^\mu{}_\nu = (\exp[a\omega])^\mu{}_\nu$ に対する状態の変換 S_Λ を

$$S_\Lambda = \exp[a\Omega] \quad (2.8.68)$$

で定義すれば, これは状態の変換則が満たすべき条件 $S_\Lambda \gamma^\mu S_\Lambda^{-1} \partial_\mu = \gamma^\mu \partial'_\mu$ を満たす.

証明

行列 $\Omega = \omega_{\rho\sigma} \gamma^\rho \gamma^\sigma / 2$ の性質 $\Omega \gamma^\mu = \gamma^\mu \Omega - \omega^\mu{}_\nu \gamma^\nu$ を用いて

$$\exp[a\Omega] \gamma^\mu = (\exp[-a\omega])^\mu{}_\nu \gamma^\nu \exp[a\Omega] = (\Lambda^{-1})^\mu{}_\nu \gamma^\nu \exp[a\Omega] \quad (2.8.69)$$

を示せば十分. 指数関数は展開して処理していきたいが, それには

$$\begin{aligned} \Omega \gamma^\mu &= \gamma^\mu \Omega - \omega^\mu{}_\nu \gamma^\nu \\ \Omega^2 \gamma^\mu &= \gamma^\mu \Omega^2 - 2\omega^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega + (\omega^2)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \\ \Omega^3 \gamma^\mu &= \gamma^\mu \Omega^3 - 3\omega^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^2 + 3(\omega^2)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega - (\omega^3)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \end{aligned}$$

から予想される等式

$$\Omega^n \gamma^\mu = \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j n!}{(n-j)! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n-j} \quad (2.8.70)$$

を証明しておく必要がある.

(2.8.70) の証明 ある n に対し (2.8.70) が成り立つならば,

$$\begin{aligned} \Omega^{n+1} \gamma^\mu &= \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j n!}{(n-j)! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \left(\gamma^\nu \Omega^{n+1-j} - \underbrace{\omega^\nu{}_\rho \gamma^\rho \Omega^{n-j}} \right) \\ &= \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j n!}{(n-j)! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n+1-j} + \underbrace{\sum_{j=0}^n \frac{(-1)^{j+1} n!}{(n-j)! j!} (\omega^{j+1})^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n-j}} \\ &= \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j n!}{(n-j)! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n+1-j} \\ &\quad + \sum_{\substack{j+1=1 \\ j=0}}^n \frac{(-1)^{j+1} n!}{(n+1-(j+1))! (j+1-1)!} (\omega^{j+1})^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n+1-(j+1)} \\ &= \gamma^\mu \Omega^{n+1} + \sum_{j=1}^n \frac{(-1)^j n!}{(n-j)! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n+1-j} \\ &\quad + \sum_{j=1}^n \frac{(-1)^j n!}{(n+1-j)! (j-1)!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n+1-j} \\ &= \gamma^\mu \Omega^{n+1} + \sum_{j=1}^n \frac{(-1)^j (n+1)!}{(n+1-j)! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n+1-j} \end{aligned} \quad (2.8.71)$$

となるので数学的帰納法が使える. ((2.8.70) 証明終)

これを用いて (2.8.69) の左辺を変形すると

$$\begin{aligned} \exp[a\Omega] \gamma^\mu &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \Omega^n \gamma^\mu = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j a^n}{(n-j)! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n-j} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{n=j}^{\infty} \frac{(-1)^j a^n}{(n-j)! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^{n-j} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^j a^N a^j}{N! j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Omega^N \\ &= \left(\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j a^j}{j!} (\omega^j)^\mu{}_\nu \gamma^\nu \right) \left(\sum_{N=0}^{\infty} \frac{a^N}{N!} \Omega^N \right) \\ &= (\exp[-a\omega])^\mu{}_\nu \gamma^\nu \exp[a\Omega], \end{aligned}$$

従って (2.8.69) が成り立つことが確かめられた. (証明終)

以上より, テンソルとは異なる変換則の存在と, その変換則に従うスピノルという量の存在が証明されたことになる. ここに至ってようやく我々は, Dirac 方程式が特殊相対性原理を満たすと言うことができる.

Dirac 方程式の変換則に関する事項を要約しておこう. $\Lambda^\mu{}_\nu = (\exp[a\omega])^\mu{}_\nu$ という形の

Lorentz 変換で慣性系 S, S' が結び付いているとき, Dirac 方程式

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.8.72)$$

に従う状態 $\psi(\mathbf{x}, t)$ の変換は

$$\psi'(\mathbf{x}', t') = \exp[a\Omega] \psi(\mathbf{x}, t), \quad \Omega = \frac{1}{2} \omega_{\rho\sigma} \gamma^\rho \gamma^\sigma$$

で行われる. このとき, S' 系では Dirac 方程式

$$\left(i\gamma^\mu \partial'_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right) \psi'(\mathbf{x}', t') = 0$$

が成り立つ.

2.8.8 負エネルギー問題

変換則の問題を解決した Dirac 方程式であるが, 最後に 1 つ, 負エネルギー問題と呼ばれる問題が残される. これは相対論的量子力学が抱える問題と言ってもよい.

電磁場のない系, すなわち自由粒子のエネルギー固有状態を

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{p}) \\ \eta(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] \quad (2.8.73)$$

の形で求めたい. Zeeman 効果の節と同様の計算を行うと固有値問題

$$\begin{cases} E\xi = c \sum_{i=1}^3 \sigma_i p_i \eta + mc^2 \xi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \eta + mc^2 \xi \\ E\eta = c \sum_{i=1}^3 \sigma_i p_i \xi - mc^2 \eta = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \xi - mc^2 \eta \end{cases} \quad (2.8.74)$$

が得られるが, Dirac 方程式の解は Klein-Gordon 方程式の解でもあることから, E の値は $E_\pm = \pm c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2}$ に限られる. $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ の静止状態でのエネルギー固有値 $\pm mc^2$ に対する固有状態はそれぞれ

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \xi \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{imc^2 t}{\hbar}\right], \quad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ \eta \end{pmatrix} \exp\left[+\frac{imc^2 t}{\hbar}\right] \quad (2.8.75)$$

で与えられ, $\lim \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{0}$ の極限でこれらに収束するエネルギー固有状態は

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{p}) \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_+ + mc^2} \xi(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E_+ t)\right], \quad (2.8.76)$$

$$\psi_- = \begin{pmatrix} \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_- - mc^2} \eta(\mathbf{p}) \\ \eta(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E_- t)\right] \quad (2.8.77)$$

となる. ψ_\pm に含まれる $\xi(\mathbf{p}), \eta(\mathbf{p})$ は 0 でなければ任意にとって良い.

このように, Dirac 方程式の解には運動エネルギーが正である解 ψ_+ のみならず, 負の運動エネルギーを持つ ψ_- が含まれる. 正負のエネルギーを持つ解が両方あり得るならば, 例えば 2 粒子の弾性衝突の前後で運動エネルギーの和 $m_1 v_1^2/2 + m_2 v_2^2/2$ ではなく $m_1 v_1^2/2 - m_2 v_2^2/2$ が保存する形のエネルギー保存則もあり得ることになるが, これは止まっている 2 粒子が突然逆方向に動き出してもエネルギー保存則に反しないという話なので, 不合理である.

Klein-Gordon 方程式においても, その一般解

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} (f(\mathbf{k}) e^{-i\omega_k t} + g(\mathbf{k}) e^{i\omega_k t})$$

に確率の保存則 $\int d^3x |\phi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1$ を満たさない解が含まれるという問題があった。

どうやら、相対論的量子力学では、時間依存性 $\exp[\pm iEt/\hbar]$ を持つ項を重ね合わせてしまうと悪いことが起きるようなので、系の状態を考えると正エネルギー固有状態と負エネルギー固有状態の重ね合わせを禁じるルールを作るという抜け道が考えられる。しかし、この規則があると、エネルギー固有状態を苦労して求めた後、いちいちその Fourier 変換の形を調べねばならないし、そもそも固有状態が ψ_{\pm} の片方だけの重ね合わせで書けるとい保証もないから、役に立ちそうもない。

このように相対論的量子力学には、異なる時間依存性を持つ解のために生じるややこしい問題が残されている。この問題は場の量子論の立場から相対論的量子力学を再構築することですっきり解決するので、楽しみにしていただきたい。

2.9 第2章のまとめ

さて、この章では質点系の古典力学モデルを通じて、物理量の確率分布が実際に計算できること、物理量は従うべき交換関係など様々な理由で離散化し得ること、そこから元素の周期律のような様々な現象が帰結することを学んできた。さらに、量子力学にはスピンや統計性のような、質点系のモデルを超えた性質さえ記述できる可能性があることを見た。

とはいえ、量子力学の話はこれで終わりではない。スピンや統計性の詳細、相対論的量子力学の負エネルギー問題、何より、量子力学の入門書で最初に学ぶ光の粒子性を扱うために必要な話を我々はしていない。そう、量子力学の話は、質点系だけではまだ半分なのである。そこで次の章からは量子力学が扱う残り半分の世界、すなわち場の量子論に踏み込んでいくことになる。

第3章

〈場の量子論〉

電場や磁場、電荷密度などのように、空間の各点で定義される量を場という。身近な例では、流体の密度や流れ、波動の形で伝わるエネルギーは場を用いて記述される。偏微分方程式で与えられる場の物理法則は電磁気学、流体力学、熱現象に天体物理学といった幅広い分野で活用される。場の概念は、質点の概念に並ぶ古典物理学の花形といってよいだろう。

これから学ぶ場の量子論とは、場の概念、狭く言えば波動の概念を基調に展開される量子力学の理論のことである。量子論の初期の段階では、物質の本性が粒子か波動かということが大きな問題であったが、出来上がった量子力学は物質の粒子・波動としての両側面を同時に扱う理論の形で落ち着いた。質点系の量子力学はその土台に重ね合わせの概念、すなわち波の性質を取り入れており、場の量子論は光や弾性体の振動、液体表面のさざ波といった波動が自然に粒子としての性質を持つような理論形式を持っている。この意味で、「質点系の」「場の」量子論という区別はあまり重要ではなく、どちらも「量子論」であることに違いはない。

とはいえ、場の量子論には量子力学にない利点が多くある。粒子の統計性や相対性原理を自然に取り入れることが可能な定式化の手法、系を構成する粒子の数が変化する現象（例えば、 β 崩壊）が扱える点、そして何より、粒子と場を同じ実在として対等に扱うその理論形式は単純でありながら、奥深い。

この章では始めに、場の量子論の理論形式を（やや場当たりの、発見法的なやり方であるが）描き出すことを試みる。ある程度場の量子論の姿が見えてきたところで、理論の全体像や解釈を第1章の基本原則と対比させて述べることにする。その後、相対論的なモデルが持つ問題が場の量子論では自然に解消される点を示したい。

3.1 弦の振動

まずは古典的な場のモデルとして最も単純な、弦の振動のモデルから出発しよう。このモデルを通じて場の扱いの復習をした後、場の量子化の手続きを踏み込むことにする。

3.1.1 波動方程式の復習

$x = 0, L$ を端点として、長さ L の弦を張ることを考えよう。弦の線密度を ρ 、張力を T 、時刻 t 、位置 x における弦の振幅を $A(x, t)$ で表すと、これは偏微分方程式

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} A(x, t) - T \frac{\partial^2}{\partial x^2} A(x, t) = 0 \quad (3.1.1)$$

に従って振動するのだった. この方程式は波動方程式と呼ばれ, 速度 $v = \sqrt{T/\rho}$ で伝わる波を表す. また, 波動方程式に従う弦の振動はエネルギー保存則を満たす. その際保存する振動のエネルギーはハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2} \int_0^L \left(\rho \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)^2 + T \left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)^2 \right) dx \quad (3.1.2)$$

の形で与えられる. 実際, $A(0, t) = A(L, t) = 0$ に注意して部分積分を行うと

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H &= \int_0^L \left(\rho \frac{\partial A}{\partial t} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + T \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial^2 A}{\partial x \partial t} \right) dx \\ &= \int_0^L \left(\rho \frac{\partial A}{\partial t} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + T \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial t} \right) - T \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \frac{\partial A}{\partial t} \right) dx \\ &= \int_0^L T \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial t} \right) dx = \left[T \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial t} \right]_{x=0}^{x=L} = 0 \end{aligned}$$

となるから, 確かに保存則が成り立っていることがわかる.

波動方程式の一般解となる $A(x, t)$ は A_n, α_n を任意定数として

$$A(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \cos \left(\frac{n\pi}{L} vt + \alpha_n \right) \quad (3.1.3)$$

で与えられるが, 後の議論のためにはこれを

$$A(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \left(C_n \exp \left[-i \frac{n\pi}{L} vt \right] + C_n^* \exp \left[i \frac{n\pi}{L} vt \right] \right) \quad (3.1.4)$$

という形で表したほうが都合がよい. 一般解に対する系のエネルギーは三角関数の直交性

$$\int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \sin \frac{m\pi x}{L} dx = \int_0^L \cos \frac{n\pi x}{L} \cos \frac{m\pi x}{L} dx = \frac{L}{2} \delta_{nm} \quad (3.1.5)$$

を用いて計算でき, その結果は次のようになる.

$$H = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2 \pi^2 T}{4L} A_n^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2 \pi^2 T}{L} |C_n|^2 \quad (3.1.6)$$

波動方程式は最小作用の原理から導くこともできる. これは量子化を行う際に重要な点となる. 弦振動のハミルトニアン (3.1.2) を見ると, 第1項が運動エネルギー, 第2項がポテンシャルエネルギーと考えられるので, これに対するラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2} \int_0^L \left(\rho \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)^2 - T \left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)^2 \right) dx = \int_0^L \mathcal{L}(\partial_t A, \partial_x A) dx \quad (3.1.7)$$

だと推測される. このラグランジアンに対する作用積分は, ラグランジアン密度(今の場合, 線密度と言ってもよい)と呼ばれる \mathcal{L} を用いて

$$S[A(x, t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L \mathcal{L}(\partial_t A, \partial_x A) dx \quad (3.1.8)$$

で与えられる. この汎関数 S の引数になっている $A(x, t)$ に, 系の初期条件および境界条件を変えない微小変動 $\delta A(x, t)$, すなわち $\delta A(x, t_1) = \delta A(x, t_2) = \delta A(0, t) = \delta A(L, t) = 0$ を満たす微小な関数を加えると, 作用積分の値は微小量の1次で

$$\delta S[A(x, t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L \left[\frac{\partial \delta A}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t A)} + \frac{\partial \delta A}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_x A)} \right] dx$$

$$\begin{aligned}
&= - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L \delta A \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t A)} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_x A)} \right] dx \\
&= - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L \delta A \left[\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} A(x, t) - T \frac{\partial^2}{\partial x^2} A(x, t) \right] dx \quad (3.1.9)
\end{aligned}$$

という変動を受ける。最小作用の原理は、系の振る舞いは作用積分が最小値 (停留値) をとる, すなわち $\delta S[A(x, t)] = 0$ を満たす $A(x, t)$ によって与えられるというものであり, 今の場合, この条件は $A(x, t)$ が波動方程式を満たすことと等価である。

波動方程式の問題が最小作用の原理の形で書けることで, 質点系で学んだ正準量子化とのアナロジーが使えるようになる。次の節では正準量子化の方法を参考に, 弦の振動の量子化を試みることにしたい。

3.1.2 Poisson 括弧の問題

正準量子化の手順は「ラグランジアンを作る」「ハミルトン形式に移行する」「Poisson 括弧式を正準交換関係に置き換える」の 3 ステップである。まずは, Lagrange 形式の弦の理論を Hamilton 形式に書き直すことを考えよう。

とりあえず, 運動量およびハミルトニアンに相当する量としては

$$P(x, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t A(x, t))} = \rho \frac{\partial A}{\partial t} \quad (3.1.10)$$

$$\begin{aligned}
H &= \int_0^L P(x, t) \partial_t A(x, t) dx - L = \int_0^L \left(\frac{1}{2\rho} P^2 + \frac{1}{2} T \left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)^2 \right) dx \\
&= \int_0^L \mathcal{H} dx \quad (3.1.11)
\end{aligned}$$

という量が考えられる。積分中の \mathcal{H} はハミルトニアン密度と呼ぶことにしよう。このハミルトニアンは系のエネルギー (3.1.2) と一致している。

ハミルトニアンを用いると作用積分は

$$S[A(x, t), P(x, t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L (P(x, t) \partial_t A(x, t) - \mathcal{H}) dx \quad (3.1.12)$$

で与えられるので, 最小作用の原理は

$$\begin{aligned}
\delta S[A(x, t), P(x, t)] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \left(\delta P \left(\partial_t A - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P} \right) + \left(P \frac{\partial (\delta A)}{\partial t} - \frac{\partial (\delta A)}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_x A)} \right) \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \left(\delta P \left(\partial_t A - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P} \right) - \delta A \left(\frac{\partial P}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_x A)} \right) \right) \\
&= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \left(\delta P \left(\partial_t A - \frac{P}{\rho} \right) - \delta A \left(\frac{\partial P}{\partial t} - T \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \right) \right) = 0 \quad (3.1.13)
\end{aligned}$$

となり, ここから波動方程式と等価な Hamilton 方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} A(x, t) = \frac{1}{\rho} P \\ \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = T \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \end{cases} \quad (3.1.14)$$

が得られる。

質点系では、ここで位置と運動量を演算子に置き換えて量子化が完了するのだが、今の場合、どのような交換関係を場の演算子 \hat{A}, \hat{P} に課すべきかが不明である。しかし、交換関係は Poisson 括弧式の置き換え $\{X, Y\} \rightarrow \frac{1}{\hbar}[\hat{X}, \hat{Y}]$ になっていたのだから、場の理論における Poisson 括弧式が分かれば交換関係の形も示されるのではないだろうか。ということで、次なる課題は場の理論における Poisson 括弧式を求めることである。まずは、括弧式が満たすべき条件として、次の点を押さえておこう。

1. Hamilton 方程式との兼ね合いから、 $\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{1}{\rho}P = \{A(x, t), H\}$ および $\frac{\partial P}{\partial t} = T\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} = \{P(x, t), H\}$ が成り立たねばならない。(H の場所には \mathcal{H} が用いられる可能性もある)
2. 弦の振幅 $A(x, t)$ および運動量 $P(x, t)$ は位置 x にある弦の構成粒子の位置、運動量はその起源であると考えられる。異なる粒子の位置、運動量の Poisson 括弧式は 0 となるので、 $\{A(x, t), A(y, t)\} = 0, \{P(x, t), P(y, t)\} = 0$ および、 $x \neq y$ に対し $\{A(x, t), P(y, t)\} = 0$ が成り立たねばならない。

また、座標変数 q , 運動量変数 p を持つ f 自由度の質点系の Poisson 括弧式

$$\{X, Y\} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial X}{\partial q_i} \frac{\partial Y}{\partial p_i} - \frac{\partial Y}{\partial q_i} \frac{\partial X}{\partial p_i} \right)$$

の形も参考になるだろう。質点系の粒子のラベル i に相当するのが場の理論における座標 x なので、まず思いつくのは

$$\{X, Y\} = \int_0^L dx \left(\frac{\partial X}{\partial A(x, t)} \frac{\partial Y}{\partial P(x, t)} - \frac{\partial Y}{\partial A(x, t)} \frac{\partial X}{\partial P(x, t)} \right) \quad (3.1.15)$$

という形の式である。しかし、この式の Y に $H = \int_0^L dx \mathcal{H}(\partial_x A, P)$ や \mathcal{H} を代入してもまともな計算ができないことはすぐにわかるだろう。 H はそもそも関数 $A(x, t), P(x, t)$ の形から定まる汎関数であるし、 \mathcal{H} の引数である $\partial_x A$ を微分するのにこの定義中の $\partial/\partial A$ は適さないからだ。そもそも右辺の次元が XY/\hbar と等しくないという問題もある。

3.1.3 汎関数微分

このように一筋縄ではいかない Poisson 括弧の問題であるが、困難の時は飛躍の時でもある。我々も Dirac に倣って、数式を踏み台に新たな数学的概念へ飛躍することにしよう。

そもそも Hamilton 方程式 $\partial_t A = \frac{1}{\rho}P, \partial_t P = T\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}$ の右辺がどこからやってきたかと言えば、汎関数 $H[A, P] = \int_0^L dx \mathcal{H}(\partial_x A, P)$ の微小変化

$$\begin{aligned} \delta H[A, P] &= \int_0^L dx \left(\delta P(x, t) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P} + \delta A(x, t) \left(-\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_x A)} \right) \right) \\ &= \int_0^L dx \left(\delta P(x, t) \frac{P(x, t)}{\rho} + \delta A(x, t) \left(-T \frac{\partial^2 A(x, t)}{\partial x^2} \right) \right) \end{aligned}$$

に現れる波線部の項がその起源なのであった。波線部は汎関数 H の形が与えられればはっきりと定まるので、汎関数 H に対しこれらを対応させる

$$\frac{\delta H}{\delta P(x, t)} = \frac{P(x, t)}{\rho}, \quad \frac{\delta H}{\delta A(x, t)} = -T \frac{\partial^2 A(x, t)}{\partial x^2} \quad (3.1.16)$$

という演算は問題なく定義できる. Hamilton 方程式を再現する Poisson 括弧式を定義したいなら, 目的の項を直接導くこの演算, 汎関数微分を用いるのが手っ取り早いはずだ.

汎関数微分の基礎は, 最小作用の原理で行うような微小変動の計算であるが, いちいち部分積分を行うのも面倒である. 以下で述べるいくつかの計算規則を押さえておけば部分積分の手間を減らせるので, 参考にしていただきたい. 以下しばらく, t を省略する.

1. $F[A, P] = \int_0^L dx' f(A(x'), P(x'))$ という形の汎関数 F の汎関数微分は

$$\frac{\delta F}{\delta A(x)} = \frac{\partial}{\partial A} f(A(x), P(x)), \quad \frac{\delta F}{\delta P(x)} = \frac{\partial}{\partial P} f(A(x), P(x)) \quad (3.1.17)$$

で与えられる. 積分変数だった x' が, 微分を行う $\delta A(x), \delta P(x)$ の引数 x に変わること注意到しよう.

2. 関数 $A(x), P(x)$ も δ 関数を用いて

$$A(x) = \int_0^L dx' A(x') \delta(x - x'), \quad P(x) = \int_0^L dx' P(x') \delta(x - x')$$

と書けるので, 汎関数の一種とみなせる. これを汎関数微分の定義に当てはめると

$$\frac{\delta A(x)}{\delta A(y)} = \delta(x - y), \quad \frac{\delta P(x)}{\delta P(y)} = \delta(x - y) \quad (3.1.18)$$

$$\frac{\delta P(x)}{\delta A(y)} = 0, \quad \frac{\delta A(x)}{\delta P(y)} = 0 \quad (3.1.19)$$

という関係式が得られる.

3. A, P の微分に依存する汎関数, 例えば $F[A] = \int_0^L dx' f(\partial_x A(x'))$ の汎関数微分は

$$\frac{\delta F}{\delta A(x)} = - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial (\partial_x A)} \quad (3.1.20)$$

で与えられる. ちなみに, 高階微分を含む項は本書では扱わないが, n 階微分依存性を持つ $F[A] = \int_0^L dx' f(\partial_x^n A(x'))$ の汎関数微分は

$$\frac{\delta F}{\delta A(x)} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \frac{\partial f}{\partial (\partial_x^n A)} \quad (3.1.21)$$

で定義される.

4. 計算規則 3 は実は δ 関数の微分と同じ性質である. これに関連して, 公式

$$\frac{\delta(\partial_x^n A(x))}{\delta A(y)} = \partial_x^n \frac{\delta A(x)}{\delta A(y)} = \partial_x^n \delta(x - y) \quad (3.1.22)$$

を覚えておくると一般の汎関数微分の計算に役立つ. この性質から汎関数微分の操作は通常の微分をすり抜けて行えることがわかるが, 積分についても同様の性質

$$\frac{\delta}{\delta A(y)} \int_0^L dx = \int_0^L dx \frac{\delta}{\delta A(y)} \quad (3.1.23)$$

が成り立つとして問題は生じない.

これらの計算規則に慣れてくれば, たいていの汎関数微分は苦勞せず計算できる. 例えば $F[A, P] = \int_0^L dx f(P, A, \partial_x A)$ の汎関数微分などは

$$\frac{\delta F}{\delta A(x)} = \frac{\int_0^L dx' \left(\delta P(x') \frac{\partial f}{\partial P} + \delta A(x') \frac{\partial f}{\partial A} + (\delta \partial_x A(x')) \frac{\partial f}{\partial (\partial_x A)} \right)}{\delta A(x)}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^L dx' \left(\frac{\delta P(x')}{\delta A(x)} \frac{\partial f}{\partial P} + \frac{\delta A(x')}{\delta A(x)} \frac{\partial f}{\partial A} + \frac{\delta \partial_x A(x')}{\delta A(x)} \frac{\partial f}{\partial (\partial_x A)} \right) \\
&= \frac{\partial f}{\partial A} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial (\partial_x A)}
\end{aligned}$$

という具合に、一息で計算できる。

さて、汎関数微分について一通り解説したところで Poisson 括弧の話に戻ろう。結論から言えば、Poisson 括弧の候補 (3.1.15) の偏微分を汎関数微分に置き換えた

$$\{X, Y\} = \int_0^L dx \left(\frac{\delta X}{\delta A(x, t)} \frac{\delta Y}{\delta P(x, t)} - \frac{\delta Y}{\delta A(x, t)} \frac{\delta X}{\delta P(x, t)} \right) \quad (3.1.24)$$

が求めるべき Poisson 括弧式になる。実際、この定義で計算を行うと

$$\{A(x, t), H\} = \int_0^L dx' \delta(x-x') \frac{P(x', t)}{\rho} = \frac{P(x, t)}{\rho} \quad (3.1.25)$$

$$\{P(x, t), H\} = \int_0^L dx' T \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} A(x', t) \right) \delta(x-x') = T \frac{\partial^2}{\partial x^2} A(x, t) \quad (3.1.26)$$

$$\{A(x, t), P(y, t)\} = \delta(x-y), \quad \{A(x, t), A(y, t)\} = 0, \quad \{P(x, t), P(y, t)\} = 0 \quad (3.1.27)$$

という具合に、Poisson 括弧式が満たすべき性質が成り立つことが確かめられる。

3.1.4 弦振動の量子論

Poisson 括弧式が得られたので、いよいよ弦の量子論に入ろう。置き換え $\{X, Y\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{X}, \hat{Y}]$ によって得られる正準交換関係は

$$[\hat{A}(x), \hat{P}(y)] = i\hbar \delta(x-y), \quad [\hat{A}(x), \hat{A}(y)] = 0, \quad [\hat{P}(x), \hat{P}(y)] = 0 \quad (3.1.28)$$

であり、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \int_0^L dx \left(\frac{1}{2\rho} \hat{P}(x)^2 + \frac{1}{2} T (\partial_x \hat{A}(x))^2 \right)$$

で与えられる。A, P が持っていた時間依存性は系の状態 (記号 |S(t)) で表そう) に移ることになり、その時間発展は $i\hbar \frac{d}{dt} |S(t)\rangle = \hat{H} |S(t)\rangle$ に従う。

さらに、これは場の量子論の流儀とでもいうべきであろうか、 $\hat{A}(x), \hat{P}(x), \partial_x \hat{A}(x)$ といった基本的な演算子が

$$\hat{A}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) (\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger) \quad (3.1.29)$$

$$\hat{P}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \rho \frac{n\pi v}{iL} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) (\hat{C}_n - \hat{C}_n^\dagger) \quad (3.1.30)$$

$$\partial_x \hat{A}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) (\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger) \quad (3.1.31)$$

という形で表現されるという仮定もおくことにする。これは波動方程式の一般解

$$A(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \left(C_n \exp\left[-i\frac{n\pi}{L}vt\right] + C_n^* \exp\left[i\frac{n\pi}{L}vt\right] \right)$$

の任意定数 C_n に置き換え操作

$$C_n \exp \left[-i \frac{n\pi}{L} vt \right] \rightarrow \hat{C}_n, \quad C_n^* \exp \left[i \frac{n\pi}{L} vt \right] \rightarrow \hat{C}_n^\dagger \quad (3.1.32)$$

を施した式であり, $\hat{P}(x), \partial_x \hat{A}(x)$ の形も同様の置き換えにより得られる. やや突飛の思える仮定であるが, この仮定は議論を非常に見通し良くしてくれるので, 議論の出発点として採用することにしたい.

続いて, (3.1.29), (3.1.30), (3.1.31) における \hat{C}_n の性質について踏み込むことにしよう. 正準交換関係に三角関数による展開式を代入すると

$$\begin{aligned} [\hat{A}(x), \hat{P}(y)] &= \sum_{n,m=1}^{\infty} \rho \frac{m\pi v}{iL} \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \sin \left(\frac{m\pi}{L} y \right) [\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m - \hat{C}_m^\dagger] \\ &= i\hbar \delta(x-y) \end{aligned} \quad (3.1.33)$$

$$[\hat{A}(x), \hat{A}(y)] = \sum_{n,m=1}^{\infty} \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \sin \left(\frac{m\pi}{L} y \right) [\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m + \hat{C}_m^\dagger] = 0 \quad (3.1.34)$$

$$\begin{aligned} [\hat{P}(x), \hat{P}(y)] &= - \left(\frac{\rho\pi v}{L} \right)^2 \sum_{n,m=1}^{\infty} nm \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \sin \left(\frac{m\pi}{L} y \right) [\hat{C}_n - \hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m - \hat{C}_m^\dagger] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.1.35)$$

という式が得られるが, ここで (3.1.33) と, $f(0) = f(L) = 0$ を満たす任意の関数¹⁾ に対し成り立つ関係式

$$\frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \sin \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \sin \left(\frac{n\pi}{L} y \right) = \delta(x-y) \quad (3.1.36)$$

を比較すると, \hat{C}_n が満たす条件は

$$[\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m - \hat{C}_m^\dagger] = - \frac{2\hbar}{m\rho\pi v} \delta_{nm} \quad (3.1.37)$$

$$[\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m + \hat{C}_m^\dagger] = [\hat{C}_n - \hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m - \hat{C}_m^\dagger] = 0 \quad (3.1.38)$$

に帰着することがわかる. これを整理すると \hat{C}_n の性質が得られるのだが, 途中計算がやや煩雑なので結論を述べてから計算の概要を示すことにする.

定理 14

$$[\hat{C}_n, \hat{C}_m] = [\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m^\dagger] = 0, \quad [\hat{C}_n, \hat{C}_m^\dagger] = \frac{\hbar}{m\rho\pi v} \delta_{nm} \quad (3.1.39)$$

が成り立つ.

証明 (3.1.38) の 2 式から

$$[\hat{C}_n, \hat{C}_m] = -[\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m^\dagger], \quad [\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m] = -[\hat{C}_n, \hat{C}_m^\dagger] \quad (3.1.40)$$

という式が得られるので, (3.1.37) は

$$[\hat{C}_n, \hat{C}_m] + [\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m] = \frac{-\hbar}{m\rho\pi v} \delta_{nm} \quad (3.1.41)$$

¹⁾ このような関数は $\sin(n\pi x/L)$ の重ね合わせで書ける.

となる。\$[\hat{C}_n, \hat{C}_n] = 0\$ に留意すると \$n = m\$ の場合に (3.1.39) が成り立つことが確かめられる。\$n \neq m\$ の場合には、\$\delta_{nm} = 0\$ から \$[\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m] = [\hat{C}_m, \hat{C}_n^\dagger]\$ が成り立つので、(3.1.40) から出発して関係式

$$[\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m] = -[\hat{C}_n, \hat{C}_m^\dagger] = [\hat{C}_m^\dagger, \hat{C}_n] = [\hat{C}_n, \hat{C}_m] = -[\hat{C}_m, \hat{C}_n] = -[\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m] \quad (3.1.42)$$

が導かれ、\$[\hat{C}_n^\dagger, \hat{C}_m] = 0\$ および \$[\hat{C}_n, \hat{C}_m] = 0\$ が帰結する。(証明終)

こうして \$\hat{C}_n\$ の交換関係が得られたわけだが、ここで \$\hat{c}_n = \sqrt{n\rho\pi v/\hbar}\hat{C}_n\$ とおけば、その交換関係は

$$[\hat{c}_n, \hat{c}_m] = [\hat{c}_n^\dagger, \hat{c}_m^\dagger] = 0, [\hat{c}_n, \hat{c}_m^\dagger] = \delta_{nm} \quad (3.1.43)$$

であり、多数の調和振動子の生成・消滅演算子の交換関係に他ならないことがわかる。

どうやら、弦の振動は多数の調和振動子の振る舞いに帰着するようである。ということは、系のエネルギーも調和振動子と似たような振る舞いを見せるのではなからうか。この予想と共に、ハミルトニアンを見ていくことにしよう。公式

$$\int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \sin \frac{m\pi x}{L} dx = \int_0^L \cos \frac{n\pi x}{L} \cos \frac{m\pi x}{L} dx = \frac{L}{2} \delta_{nm} \quad (3.1.44)$$

に留意してハミルトニアンに三角関数の展開式を代入すると、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{n,m=1}^{\infty} \frac{-nm\rho\pi^2 v^2}{2L^2} \cdot \frac{L}{2} \delta_{nm} \cdot (\hat{C}_n - \hat{C}_n^\dagger)(\hat{C}_m - \hat{C}_m^\dagger) \\ &\quad + \sum_{n,m=1}^{\infty} \frac{Tnm\pi^2}{2L^2} \cdot \frac{L}{2} \delta_{nm} \cdot (\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger)(\hat{C}_m + \hat{C}_m^\dagger) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Tn^2\pi^2}{4L} \left((\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger)(\hat{C}_n + \hat{C}_n^\dagger) - (\hat{C}_n - \hat{C}_n^\dagger)(\hat{C}_n - \hat{C}_n^\dagger) \right) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Tn^2\pi^2}{2L} \left(\hat{C}_n \hat{C}_n^\dagger + \hat{C}_n^\dagger \hat{C}_n \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \hbar \frac{n\pi v}{2L} (\hat{c}_n \hat{c}_n^\dagger + \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \hbar \frac{n\pi v}{L} \left(\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.1.45)$$

という具合に整理できる。

ここで注意しなければならないのだが、最後の式の2番目の項である零点エネルギーを足上げると無限大になってしまう。これは場の量子論の扱う系が無限自由度であることに起因しており、他の場の理論においても現れる問題である。無限大とは言え、エネルギー中の定数項なので、通常はこれを無視して計算が行われる。²⁾

ここで、\$n\$ 番目の振動モードの角振動数が \$\omega_n = n\pi v/L\$ であったことを意識すると、零点エネルギーを無視したハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{\infty} \hbar \frac{n\pi v}{L} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n = \sum_{n=1}^{\infty} \hbar \omega_n \hat{N}_n \quad (3.1.46)$$

²⁾ 通常は、と言ったが、実は零点エネルギーはCasimir効果と呼ばれる現象において意味を持つことが知られている。本書では零点エネルギーを無視する方針で議論を行うが、零点振動が物理的に無意味な概念でないことは覚えておくとうまいだろう。

と書ける。エネルギー固有値は各振動モードの個数演算子 \hat{N}_n の固有値を指定すると定まるので、エネルギー固有状態は無数個の整数の組をラベルに持つ $|N_1, N_2, \dots\rangle$ で表せる。

ところで、個数演算子が現れたことで、場（波動）の理論と粒子の理論を結び付ける道が生まれたことに気付いただろうか。実は、場の量子論では生成・消滅演算子、個数演算子を介して電子や光子、その他あらゆる粒子の存在が意味付けられる。この点において、（電子のように）「本当に存在する粒子」と（調和振動子のエネルギーのように）「偶然、生成・消滅演算子の交換関係に従っているに過ぎないもの」の間に差異はもはや存在しない。そういうわけなので、生成・消滅・個数演算子の3つ組があったら、それに対応する粒子が存在すると言ってよい。

以上の観点から言えば、弦の振動に対応する粒子も当然存在する。振動、すなわち音に対応するこの粒子は音子またはフォノンという名前と呼ばれる。弦のエネルギー固有状態 $|N_1, N_2, \dots\rangle$ は、エネルギー $\hbar\omega_1, \hbar\omega_2, \dots$ を持つフォノンがそれぞれ N_1, N_2, \dots 個ずつ存在する多粒子状態と解釈される。弦に限らず、太鼓の膜や固体中を伝わる振動（音）に対応する粒子もフォノンと呼ばれる。

3.2 de Broglie 場

量子力学の黎明期において、フランスの物理学者^{ド・ブ ロ イ} de Broglie は、電磁波が粒子の性質を持つならば逆も然りで、電子のような粒子も波の性質を持つのではないかと提唱した。電子に付随する波（これを物質波と呼ぶことにしよう）が従う波動方程式の研究は Schrödinger によって為され、試行錯誤の果てに水素原子のエネルギーを再現する方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{x}|} \psi(\mathbf{x}, t)$$

が見出された。波動関数と呼ばれる $\psi(\mathbf{x}, t)$ はその後、 $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ を位置の確率密度関数と考える^{ボルン} Born の確率解釈を経て、物理量の確率分布との関連で意味付けが為されるようになる。本書でもこれまで、確率の計算を介して $\psi(\mathbf{x}, t)$ または $|\psi(t)\rangle$ の意味付けを行う立場を取ってきた。

量子力学において、確率のみが意味を持つという立場で言えば、波動関数を電磁波のような、空間を伝わる波と考えるより、単に確率の計算に便宜的に用いられる量と考えたほうが実情に即している。これは、今まで行った計算を振り返っても納得できることだろう。しかし我々は、波動の概念と量子力学を結び付ける場の量子論の考えに辿り着いた。以下では実際に

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) \quad (3.2.1)$$

のような方程式に従う $\psi(\mathbf{x}, t)$ という波（de Broglie 場）が実際にあるものと考え、場の量子化の方法を適用することになるが、その帰結を見れば、“空間を伝わる波 $\psi(\mathbf{x}, t)$ ” というモデルがハミルトニアンを与えられた質点系のモデルと同等、あるいはそれ以上に重要な意味を内包することがわかるはずだ。

3.2.1 物質波の量子化

前の節で得られた場の量子化の手続きは、要約すると次のようになる。

1. 場 $\phi_a(x, t)$ (電磁場のように多分量の場もあるので添え字 a, b, c, \dots を付ける) が従う偏微分方程式を導くラグランジアン密度 $\mathcal{L}(\phi_a, \partial_t \phi_a, \partial_i \phi_a)$ を求める.
2. 場の正準共役³⁾ とハミルトニアン密度

$$\pi_a(x, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \phi_a)}$$

$$\mathcal{H}(\phi_a, \pi_a, \partial_i \phi_a) = \sum_a \pi_a \partial_t \phi_a - \mathcal{L}$$

を定義して Hamilton 形式に移行する.

3. 正準交換関係

$$[\hat{\phi}_a(x), \hat{\pi}_b(y)] = i\hbar \delta_{ab} \delta(x - y), \quad [\hat{\phi}_a(x), \hat{\phi}_b(y)] = 0, \quad [\hat{\pi}_a(x), \hat{\pi}_b(y)] = 0$$

を課して量子化を行う.

4. 演算子の交換関係から生成・消滅演算子を探し, 場に対応する粒子の存在を導く. このとき, 必要に応じて $\hat{\phi}_a(x), \hat{\pi}_a(x)$ を x の関数の完全系を用いて展開するなどのテクニックを使うと良い.

まずは, (3.2.1) をこの手続きで量子化してみよう. ラグランジアン密度は

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^* \partial_t \psi - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) \quad (3.2.2)$$

をとればよい. すると, 作用積分 $S[\psi] = \int dt \int d^3x \mathcal{L}$ の微小変動は

$$\delta S[\psi] = \int dt \int d^3x \left[\delta \psi^* \left(i\hbar \partial_t \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \right) + \left(-i\hbar \partial_t \psi^* + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* \right) \delta \psi \right]$$

となる. $\psi(\mathbf{x}, t)$ の正準共役が $\pi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \psi^*(\mathbf{x}, t)$ となることから, 正準交換関係は

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})] = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})] = 0 \quad (3.2.3)$$

という形で与えられる.

正準交換関係から, $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ そのものが消滅演算子と見なせることに注意しよう. 実際,

$$\hat{N} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \Rightarrow [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{N}] = \hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{N}] = -\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \quad (3.2.4)$$

という交換関係が成り立ち, $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{N}$ は生成・消滅・個数演算子の3つ組を成す. de Broglie 場の生成・消滅演算子の姿はこれに限らない. $\hat{\psi}$ の Fourier 積分表示

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{2\pi}} \hat{a}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (3.2.5)$$

を考えよう. 正準交換関係にこれを代入すると

$$[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})] = \int \frac{d^3k d^3k'}{(2\pi)^3} [\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{y}}$$

$$= \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \quad (3.2.6)$$

という式が得られるので, 比較により交換関係 $[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')] = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ が導かれる. また, $[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}(\mathbf{k}')] = 0$ も同様に示せる. $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$ は位置 \mathbf{x} に粒子を生成する演算子, $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ は運動量 $\hbar \mathbf{k}$ を持つ粒子を生成する演算子と解釈できるだろう.

³⁾ 座標と運動量の関係にある量のこと. 弦の場合はたまたま, 正準共役が質量 × 速度で与えられる運動量と似た形になっていたが, 一般にこの関係は言えないので, こう呼ぶことにする.

3.2.2 多粒子系の時間発展

de Broglie 場のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x (\nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})) \cdot (\nabla \hat{\psi}(\mathbf{x})) \quad (3.2.7)$$

で与えられるが、これは $\hat{\psi}$ の Fourier 積分表示を用いて

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} d^3k d^3k' (-i\mathbf{k}\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})) \cdot (i\mathbf{k}'\hat{a}(\mathbf{k}')) e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{x}} \\ &= \int d^3k d^3k' \frac{\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{2m} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}') \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \int d^3k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

という表式に直せる。ハミルトニアンの固有状態としては、粒子が存在しない真空の状態、すなわち $\hat{a}(\mathbf{k})|0\rangle = |0\rangle$ を満たす状態 $|0\rangle$ の他、これに生成演算子を作用させた n 粒子状態

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n) |0\rangle \quad (3.2.9)$$

が考えられる。これは、運動量 $\hbar\mathbf{k}_1, \hbar\mathbf{k}_2, \dots, \hbar\mathbf{k}_n$ を持つ計 n 個の粒子が存在する状態を表す。エネルギー固有値は交換関係 $[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_i)] = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}_i)$ から計算でき、

$$\begin{aligned} \hat{H} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n) |0\rangle &= \int d^3k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n) |0\rangle \\ &= \int d^3k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \left(\delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}(\mathbf{k}) \right) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n) |0\rangle = \cdots \\ &= \sum_{i=1}^n \int d^3k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_{i-1}) \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}_i) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_{i+1}) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n) |0\rangle \\ &= \left(\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_i^2}{2m} \right) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n) |0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

となる。見ての通り、これはそれぞれの粒子が持つ運動エネルギーの合計に等しい。

エネルギー固有状態 (3.2.9) が得られたので、これらの重ね合わせで表される状態の時間発展が計算可能になる。例えば

$$\begin{aligned} |A(t)\rangle &= \int d^{3n}k A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n, t) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_n) |0\rangle \\ \Rightarrow A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n, t) &= A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n, 0) \exp \left[-\frac{i\hbar t}{2m} (\mathbf{k}_1^2 + \cdots + \mathbf{k}_n^2) \right] \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

という関係式が時間発展方程式 $i\hbar \frac{d}{dt} |A(t)\rangle = \hat{H} |A(t)\rangle$ から容易に導ける。

系の状態を (3.2.9) の重ね合わせで書く運動量表示は自由粒子と相性のいい方法だが、この後ポテンシャルの影響を取り入れることも考えて、座標表示の時間発展方程式の形も見ておきたい。そこで、

$$|\Psi(t)\rangle = \int d^{3n}x \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle \quad (3.2.12)$$

と表される状態に (3.2.7) を作用させてみる。

$$\hat{H} |\Psi(t)\rangle = \int d^3x \int d^{3n}x \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})) \cdot \nabla \left(\hat{\psi}(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) \right) |0\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^n \int d^3x \int d^{3n}x \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})) \cdot (\nabla \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i-1}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i+1}) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle,$$

ここで, 公式 $\int d^3x f(\mathbf{x}) \nabla \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = -\nabla_i f(\mathbf{x}_i)$ を用いて \mathbf{x} 積分を行って,

$$= \sum_{i=1}^n \int d^{3n}x \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \frac{\hbar^2}{2m} (-\nabla_i^2 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_i)) \times \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i-1}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i+1}) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle,$$

さらに, $\lim_{|\mathbf{x}_i| \rightarrow \infty} \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) = 0$ に注意して部分積分を実行すると,

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^n \int d^{3n}x \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \right) \\ &\quad \times \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i-1}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_i) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i+1}) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle \\ &= \sum_{i=1}^n \int d^{3n}x \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \right) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

という結果が得られる. すなわち, 座標表示の展開係数はハミルトニアンによって

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \mapsto \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \right) \quad (3.2.14)$$

という変換を受けることになる. 従って, 展開係数 Ψ に着目すれば, 時間発展方程式は偏微分方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \right) \quad (3.2.15)$$

に帰着する. これは多体系の Schrödinger 方程式に他ならない.

3.2.3 ポテンシャル系のハミルトニアン

こうして, 場の量子論が質点系の量子力学を含むことが見えてきたので, 一息にポテンシャル系までの拡張を行ってしまおう.

定理 15 ポテンシャル力を受ける多体系

Schrödinger 方程式が

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\mathbf{x}_i) \right) \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \quad (3.2.16)$$

である系のハミルトニアン密度は

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})) \cdot (\nabla \hat{\psi}(\mathbf{x})) + V(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (3.2.17)$$

で与えられる.

証明 正準交換関係 (3.2.3) から容易に

$$V(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle = \sum_{i=1}^n V(\mathbf{x}_i) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle \quad (3.2.18)$$

が示せる. これを積分すれば求めるべき Schrödinger 方程式が得られる. (証明終)

定理 16 相互作用する同種粒子系

Schrödinger 方程式が

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) = \left(\sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} V(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) \right) \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t) \quad (3.2.19)$$

である系のハミルトニアン密度は

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})) \cdot (\nabla \hat{\psi}(\mathbf{x})) + \frac{1}{2} \int d^3y V(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (3.2.20)$$

で与えられる.

証明 正準交換関係を用いて地道に計算を行う.

$$\begin{aligned} & V(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle \\ &= V(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \sum_{i=1}^n \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i-1}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i+1}) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle \\ &= V(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \delta^3(\mathbf{y} - \mathbf{x}_j) \\ & \quad \times \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i-1}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i+1}) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{j-1}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{j+1}) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle \\ &= V(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \delta^3(\mathbf{y} - \mathbf{x}_j) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n) |0\rangle, \end{aligned} \quad (3.2.21)$$

これを \mathbf{x}, \mathbf{y} で積分し, $V(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) = V(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|)$ に注意すれば $\sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i} V(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) = 2 \sum_{1 \leq i < j \leq n} V(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)$ なので, 求めるべき項が得られる. (証明終)

さて, やや天下一の相互作用ポテンシャルを導入してしまったが, その働きを調べると面白いことがわかる. Fourier 積分表示 $V(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) = \int d^3K \tilde{V}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})}$ を用いて相互作用ポテンシャルを運動量表示で書き直してみよう.

$$\begin{aligned} & \int d^3x d^3y V(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \\ &= \int \frac{d^3x d^3y}{(2\pi)^6} d^3K d^3k_1 d^3k_2 d^3k_3 d^3k_4 \tilde{V}(\mathbf{K}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \hat{a}(\mathbf{k}_3) \hat{a}(\mathbf{k}_4) \\ & \quad \times \exp[i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{x} + i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{K}) \cdot \mathbf{y}] \\ &= \int d^3K d^3k_1 d^3k_2 d^3k_3 d^3k_4 \tilde{V}(\mathbf{K}) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \hat{a}(\mathbf{k}_3) \hat{a}(\mathbf{k}_4) \delta^3(\mathbf{K} - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_4) \delta^3(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{K}) \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

見づらい式になったが, 重要な点はここで \mathbf{K} 積分を実行すると, ポテンシャルが

$$\tilde{V}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_1) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2) \hat{a}(\mathbf{k}_3) \hat{a}(\mathbf{k}_4) \delta(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \quad (3.2.23)$$

という因子の重ね合わせに帰着することである. 2粒子が相互作用すると, 運動量の合計は変わらないが, それぞれが持つ運動量は変化するのであった. (3.2.23) は運動量 $\hbar\mathbf{k}_3, \hbar\mathbf{k}_4$ を持つ粒子を消して, 代わりに運動量 $\hbar\mathbf{k}_1, \hbar\mathbf{k}_2$ を持つ粒子を生成する働きを持ち, 最後の δ 関数のおかげで, 運動量の合計 $\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ は生成・消滅の前後で保たれるから, これはまさに相互作用による運動量の変化をもたらす. 古典力学では運動量に変化しても粒子の存在は不変であると考えられるが, 場の量子論においては, 運動量が変わる瞬間ごとに粒子は生まれ変わっているというわけである.

3.2.4 粒子の統計性

場の量子化によって、質点系の記述に欠かせない位置、運動量概念や、Schrödinger 方程式が得られるので、質点系の量子力学を再現するのに十分な能力を場の量子論が備えていることがわかった。しかし、場の量子論の効用はこれに留まらない。実は、 n 粒子状態の展開係数 $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, t)$, $A(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n, t)$ は粒子の入れ替えに關し対称になっていたのだが、気付いただろうか。例えば、2 粒子状態において $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$ が成り立つとしてみると、

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \int d^3x_1 d^3x_2 \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) |0\rangle \\ &= - \int d^3x_1 d^3x_2 \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) |0\rangle = -|\Psi\rangle \end{aligned} \quad (3.2.24)$$

となるから、自動的に $|\Psi\rangle = |\emptyset\rangle$ となってしまう。従って、物理的に意味を持つ重ね合わせを作るために、展開係数は $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$ を満たさねばならない。この条件は、場の量子化を通じて得られた粒子が Bose 粒子であることを意味している。

以上の考察を元に、Fermi 統計に従う場の量子化の方法を導くことはそれほど難しいことではない。Fermi 統計は、展開係数 $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$ を持つ状態が

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \int d^3x_1 d^3x_2 \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) |0\rangle \\ &= \int d^3x_1 d^3x_2 \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) |0\rangle \\ &= -|\Psi\rangle = - \int d^3x_1 d^3x_2 \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) |0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.25)$$

を満たせば成り立つが、これは生成演算子の入れ替えに際し $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) = -\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1)$ が成り立つことと同値である。よって、Fermi 粒子の生成・消滅演算子は、反交換子と呼ばれる記号

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (3.2.26)$$

を用いて定義される

$$\{\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \{\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})\} = \{\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})\} = 0 \quad (3.2.27)$$

という関係(反交換関係)に従うことが予想される。

上記の反交換関係を仮定すれば Fermi 統計は導けるが、このような変更を行って、質点系の記述に支障は出ないものだろうか。調べてみよう。

まず、粒子としての記述が可能となるためには生成・消滅・個数演算子の3つ組が必要となるのであった。この点に関しては、反交換関係から、交換関係

$$[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})] = -\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})] = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \quad (3.2.28)$$

がすぐに導けるので、 $\hat{N} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x})$ が従う交換関係

$$[\hat{N}, \hat{\psi}(\mathbf{y})] = -\hat{\psi}(\mathbf{y}), \quad [\hat{N}, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})] = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) \quad (3.2.29)$$

が導ける。従って、 $\hat{\psi}^\dagger, \hat{\psi}, \hat{N}$ はそれぞれ生成・消滅・個数演算子の役割を果たすことが確認できた。

続いて、多体系の Schrödinger 方程式の導出があるが、結論から言えば、これも問題なく導ける。Bose 統計の計算と重なる部分も多いので、ここでは要点だけ述べることにする。Fermi 粒子に対する計算では、 (-1) の因子が余分に現れる。例えば、

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n)|0\rangle \\ &= \sum_{i=1}^n (-1)^{i-1} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i-1})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i+1})\cdots\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n)|0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.30)$$

という具合である。しかし、幸いなことに、多体 Schrödinger 方程式を導くハミルトニアン中の $\psi(\mathbf{x})$ に対しては、ペアとなる $\psi^\dagger(\mathbf{x})$ が必ず含まれており、これが (-1) の因子を消去する働きをしてくれる。従って直前の式に $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$ を掛ければ、

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n)|0\rangle \\ &= \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^n (-1)^{i-1} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i-1})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_{i+1})\cdots\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n)|0\rangle \\ &= \sum_{i=1}^n \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_n)|0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

というように、Bose 統計の場合と同じ計算結果が得られる。

以上より、場の演算子 $\hat{\psi}$ が従う交換関係を反交換関係に置き換える処方によって、Fermi 粒子に対する場の量子論が問題なく定式化できることがわかった。統計性を考慮して正しい場の演算子を導くには、考察対象の場に対応する粒子が Bose 粒子である場合は正準交換関係を、Fermi 粒子である場合には交換子を反交換子に置き換えた正準反交換関係を用いて量子化を行えば良い。

質点系の量子力学においては、基本となる理論に付け足す形で扱わねばならなかった統計性であるが、場の量子論においては理論を定式化する段階で重要な位置を占めている。このことは、統計性の詳細を理論的に調べる際に大きな意味を持つ。

3.2.5 異種粒子から成る系

異なる質量、電荷、スピンなどを持つ異なる粒子が混在する系の扱いについても触れておきたい。粒子の種類をギリシャ文字 λ で区別すると、このような系のラグランジアン密度は様々な場 $\phi_{\lambda a}$ (添え字 a は場が複数の成分を持つ場合に用いる) を含んだ形 $\mathcal{L}(\phi_{\lambda a}, \partial_t \phi_{\lambda a}, \partial_i \phi_{\lambda a})$ で与えられる。この場合の量子化の手順を考えよう。以下しばらく、交換子と反交換子をまとめて

$$[\hat{A}, \hat{B}]_{\pm} = \hat{A}\hat{B} \pm \hat{B}\hat{A} \quad (3.2.32)$$

で表す。

同種粒子、すなわち添え字 λ が共通する成分に対しては、これまでの延長で、統計性に応じた正準交換・反交換関係

$$[\hat{\phi}_{\lambda a}(\mathbf{x}), \hat{\pi}_{\lambda b}(\mathbf{y})]_{\pm} = i\hbar \delta_{ab} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [\hat{\phi}_{\lambda a}(\mathbf{x}), \hat{\phi}_{\lambda b}(\mathbf{y})]_{\pm} = 0, \quad [\hat{\pi}_{\lambda a}(\mathbf{x}), \hat{\pi}_{\lambda b}(\mathbf{y})]_{\pm} = 0 \quad (3.2.33)$$

を課せば良いと考えられる。

一方、異なる粒子に対する演算子の交換・反交換関係の設定は自明ではないので、 $\lambda, \lambda' (\lambda \neq \lambda')$ の組に対する関係

$$[\hat{\phi}_{\lambda a}(\mathbf{x}), \hat{\pi}_{\lambda' b}(\mathbf{y})]_{\pm} = 0, \quad [\hat{\phi}_{\lambda a}(\mathbf{x}), \hat{\phi}_{\lambda' b}(\mathbf{y})]_{\pm} = 0, \quad [\hat{\pi}_{\lambda a}(\mathbf{x}), \hat{\pi}_{\lambda' b}(\mathbf{y})]_{\pm} = 0$$

について、本書では暫定的に、次の規則を設けることにする。

- Bose 粒子の演算子の間には正準交換関係を課す
- Fermi 粒子の演算子の間には正準反交換関係を課す
- Bose 粒子と Fermi 粒子の演算子の間には交換関係を課す

後の議論で様々な種類の粒子が現れた場合はこの規則に従い、問題が生じたらその都度考えることにしたい。⁴⁾

3.2.6 個数演算子の固有状態

添え字 a, b で表される、スピンなどの自由度を持つ粒子の生成・消滅演算子は

$$[\hat{a}_a(\mathbf{x}), \hat{a}_b^\dagger(\mathbf{y})]_{\pm} = \delta_{ab} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [\hat{a}_a(\mathbf{x}), \hat{a}_b(\mathbf{y})]_{\pm} = 0$$

という関係に従う。以下、簡略化のため、座標やスピンをまとめる略記

$$q \leftrightarrow (\mathbf{x}, a), \quad \delta_{qq'} \leftrightarrow \delta_{ab} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \sum_q \leftrightarrow \sum_a \int d^3x \quad (3.2.34)$$

を用いて議論を行うことにする。位置の代わりに、運動量、エネルギーで区別される生成・消滅演算子を考えても話は同じである。この略記を用いると、交換・反交換関係は

$$[\hat{a}_q, \hat{a}_{q'}^\dagger]_{\pm} = \delta_{qq'}, \quad [\hat{a}_q, \hat{a}_{q'}]_{\pm} = 0 \quad (3.2.35)$$

と表せる。

$\hat{N} = \sum_q \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q$ で定まる個数演算子は見ての通り Hermite 演算子であり、その固有状態 $\hat{a}_{q_n}^\dagger \cdots \hat{a}_{q_1}^\dagger |0\rangle$ は質点系を含む幅広い状態の記述に利用できるため、完全系を成すと考えられる。すなわち、個数演算子は場の量子論における基本的な物理量だと言える。従って、個数演算子の固有状態に適切な規格化を施せば、どのような物理量 q を担う粒子がいくつ、いかなる確率で存在するかということを問えるようになる。そこで以下では、個数演算子の固有状態の性質を調べ、適切な規格化を行う方法について述べたい。

多粒子状態のうち、最も基本的な状態は粒子が1つも存在しない真空の状態 $|0\rangle$ である。 $\hat{N}|0\rangle = 0|0\rangle = |\emptyset\rangle$ から、

$$0 = \langle 0 | \hat{N} | 0 \rangle = \sum_q \langle 0 | \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q | 0 \rangle \quad (3.2.36)$$

が成り立つので、真空は任意の q に対し $\hat{a}_q |0\rangle = |\emptyset\rangle$ を満たさねばならない。真空を表す状態 $|0\rangle$ は $\langle 0 | 0 \rangle = 1$ を満たすよう規格化されているものとする。

生成演算子を真空に作用させると、多粒子状態が得られる。規格化のためにはその内積の振る舞いを調べておきたい。まずは1粒子状態 $\hat{a}_q^\dagger |0\rangle, \hat{a}_r^\dagger |0\rangle$ の内積から例を見ていこう。

$$\langle 0 | \hat{a}_q \hat{a}_r^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | (\delta_{qr} \pm \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_q) | 0 \rangle = \delta_{qr} \langle 0 | 0 \rangle = \delta_{qr}$$

⁴⁾ 2番目の規則は、陽子と中性子のような性質の似た粒子を、別の状態にある同一の粒子と見なしてモデルを作る際に利用されることがある。3番目の規則に関しては根拠があるわけではないが、演算子の交換でいちいち -1 の因子を考えなくて済むよう導入した。 -1 の因子が出ないように、2番目の規則を交換関係にすることもある。

± の符号は Bose 粒子の場合に正, Fermi 粒子の場合に負になる. 同様に, 2 粒子状態, 3 粒子状態の内積を計算すると,

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{a}_{q_1}\hat{a}_{q_2}\hat{a}_{r_2}^\dagger\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle &= \delta_{q_1r_1}\delta_{q_2r_2} \pm \delta_{q_1r_2}\delta_{q_2r_1} \\ \langle 0|\hat{a}_{q_1}\hat{a}_{q_2}\hat{a}_{q_3}\hat{a}_{r_3}^\dagger\hat{a}_{r_2}^\dagger\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle &= \delta_{q_1r_1}\delta_{q_2r_2}\delta_{q_3r_3} + \delta_{q_1r_2}\delta_{q_2r_3}\delta_{q_3r_1} + \delta_{q_1r_3}\delta_{q_2r_1}\delta_{q_3r_2} \\ &\quad \pm \delta_{q_1r_1}\delta_{q_2r_3}\delta_{q_3r_2} \pm \delta_{q_1r_3}\delta_{q_2r_2}\delta_{q_3r_1} \pm \delta_{q_1r_2}\delta_{q_2r_1}\delta_{q_3r_3}\end{aligned}$$

という結果が得られる. これを見ると, q, r の組み合わせの数だけ項が現れること, 項の数が粒子数の階乗に等しいことがわかる. Fermi 粒子の場合, r の並び方に応じて正負の符号が現れる. $(1, 2, 3)$ を偶数回入れ替えてできる $(2, 3, 1), (3, 1, 2)$ に対しては正, 奇数回の入れ替えを必要とする $(1, 3, 2), (3, 2, 1), (2, 1, 3)$ に対しては負の符号が現れる. この結果を一般の n 粒子系に拡張したものが, 次の定理となる.

定理 17 n 粒子状態の内積

n 粒子状態の内積は, Bose 粒子, Fermi 粒子に対しそれぞれ

$$\langle 0|\hat{a}_{q_1}\cdots\hat{a}_{q_n}\hat{a}_{r_n}^\dagger\cdots\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle = \sum_p \delta_{q_1r_{p_1}}\delta_{q_2r_{p_2}}\cdots\delta_{q_nr_{p_n}} \quad (3.2.37)$$

$$\langle 0|\hat{a}_{q_1}\cdots\hat{a}_{q_n}\hat{a}_{r_n}^\dagger\cdots\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle = \sum_p \text{sgn}(p)\delta_{q_1r_{p_1}}\delta_{q_2r_{p_2}}\cdots\delta_{q_nr_{p_n}} \quad (3.2.38)$$

与えられる. ここで, \sum_p は $n!$ 通りある r の添え字の並び替え全パターンについての和を表すものとする. また, $\text{sgn}(p)$ の値は, (p_1, p_2, \dots, p_n) が $(1, 2, \dots, n)$ の偶数回入れ替えた結果になっている場合は $+1$, 奇数回入れ替えた結果になっている場合は -1 とする.⁵⁾

証明 添え字の並べ方 p に応じた符号を $(\pm)_p$ で表せば, 内積の形は

$$\langle 0|\hat{a}_{q_1}\cdots\hat{a}_{q_n}\hat{a}_{r_n}^\dagger\cdots\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle = \sum_p (\pm)_p \delta_{q_1r_{p_1}}\delta_{q_2r_{p_2}}\cdots\delta_{q_nr_{p_n}} \quad (3.2.39)$$

と書ける. この点は $n = 2, 3$ の計算を参考に各自で確かめてもらいたい. Bose 粒子の場合, 並べ方によらず $(\pm)_p = +1$ となることは容易に確かめられるので, ここでは Fermi 粒子の場合に, $(\pm)_p = \text{sgn}(p)$ となることを確かめたい.

$n!$ 個ある項をすべて調べるのは困難だが, 特定の並べ方に注目してその係数を調べることは比較的容易である. 例えば $n = 3$ の場合に $\delta_{q_1r_1}\delta_{q_2r_3}\delta_{q_3r_2}$ の係数を調べてみる.

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{a}_{q_1}\hat{a}_{q_2}\hat{a}_{q_3}\hat{a}_{r_3}^\dagger\hat{a}_{r_2}^\dagger\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle &= -\langle 0|\hat{a}_{q_1}\hat{a}_{q_2}\hat{a}_{q_3}\hat{a}_{r_2}^\dagger\hat{a}_{r_3}^\dagger\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle \\ &= -\langle 0|\hat{a}_{q_1}\hat{a}_{q_2}\hat{a}_{r_3}^\dagger\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle\delta_{q_3r_2} + \langle 0|\hat{a}_{q_1}\hat{a}_{q_2}\hat{a}_{r_2}^\dagger\hat{a}_{q_3}\hat{a}_{r_3}^\dagger\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle \\ &= -\langle 0|\hat{a}_{q_1}\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle\delta_{q_2r_3}\delta_{q_3r_2} + \langle 0|\hat{a}_{q_1}\hat{a}_{r_3}^\dagger\hat{a}_{q_2}\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle\delta_{q_3r_2} + \cdots \\ &= -\delta_{q_1r_1}\delta_{q_2r_3}\delta_{q_3r_2} + \cdots\end{aligned} \quad (3.2.40)$$

このように, \cdots 部分の計算をしなくても係数が負だということはわかる. この方法を一般の場合に適用すれば, $\delta_{q_1r_{p_1}}\delta_{q_2r_{p_2}}\cdots\delta_{q_nr_{p_n}}$ の係数を求めることができ, その結果は,

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{a}_{q_1}\cdots\hat{a}_{q_n}\hat{a}_{r_n}^\dagger\cdots\hat{a}_{r_1}^\dagger|0\rangle &= \text{sgn}(p)\langle 0|\hat{a}_{q_1}\cdots\hat{a}_{q_n}\hat{a}_{r_{p_n}}^\dagger\cdots\hat{a}_{r_{p_1}}^\dagger|0\rangle \\ &= \text{sgn}(p)\langle 0|\hat{a}_{q_1}\cdots\hat{a}_{q_{n-1}}\hat{a}_{r_{p_{n-1}}}^\dagger\cdots\hat{a}_{r_{p_1}}^\dagger|0\rangle\delta_{q_nr_{p_n}}\end{aligned}$$

⁵⁾ sgn はシグナムと読む. この記号は線形代数でも用いられるもので, 互換, 置換といった用語で検索すると詳しい解説が得られるだろう. ちなみに, $n = 3$ の場合は $\text{sgn}(p) = \epsilon_{p_1p_2p_3}$ (Levi-Civita の記号) が成り立つ.

$$\begin{aligned}
& - \operatorname{sgn}(p) \langle 0 | \hat{a}_{q_1} \cdots \hat{a}_{q_{n-1}} \hat{a}_{r_{p_n}}^\dagger \hat{a}_{q_n} \hat{a}_{r_{p_{n-1}}}^\dagger \cdots \hat{a}_{r_{p_1}}^\dagger | 0 \rangle \\
& = \operatorname{sgn}(p) \langle 0 | \hat{a}_{q_1} \cdots \hat{a}_{q_{n-2}} \hat{a}_{r_{p_{n-2}}}^\dagger \cdots \hat{a}_{r_{p_1}}^\dagger | 0 \rangle \delta_{q_{n-1} r_{p_{n-1}}} \delta_{q_n r_{p_n}} - \operatorname{sgn}(p) \times \cdots \\
& = \cdots = \operatorname{sgn}(p) \delta_{q_1 r_{p_1}} \delta_{q_2 r_{p_2}} \cdots \delta_{q_n r_{p_n}} - \operatorname{sgn}(p) \times \cdots
\end{aligned} \tag{3.2.41}$$

となる。省略した部分の計算（消滅演算子を右に送っていく操作）で $\delta_{q_1 r_{p_1}} \delta_{q_2 r_{p_2}} \cdots \delta_{q_n r_{p_n}}$ が再び現れることはないから、この係数が $\operatorname{sgn}(p)$ であることが確かめられた。

(証明終)

こうして得られた内積の性質から、Bose 粒子、Fermi 粒子問わず、

$$|q_1, q_2, \dots, q_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}_{q_n}^\dagger \hat{a}_{q_{n-1}}^\dagger \cdots \hat{a}_{q_1}^\dagger |0\rangle \tag{3.2.42}$$

とおけば、これが完全性条件

$$\hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{q_1, \dots, q_n} |q_1, q_2, \dots, q_n\rangle \langle q_1, q_2, \dots, q_n| \tag{3.2.43}$$

を満たす、規格化された固有状態となることがわかる。証明は、粒子数が異なる状態が直交すること、内積の公式 (3.2.37), (3.2.38) から

$$\begin{aligned}
& \sum_{q_1, \dots, q_n} |q_1, q_2, \dots, q_n\rangle \langle q_1, q_2, \dots, q_n | r_1, r_2, \dots, r_n \rangle \\
& = \sum_p (\operatorname{sgn}(p)) \sum_{q_1, \dots, q_n} \frac{1}{n!} |q_1, q_2, \dots, q_n\rangle \delta_{q_1 r_{p_1}} \delta_{q_2 r_{p_2}} \cdots \delta_{q_n r_{p_n}} \\
& = \sum_p (\operatorname{sgn}(p)) \frac{1}{n!} |r_{p_1}, r_{p_2}, \dots, r_{p_n}\rangle = \sum_p (\operatorname{sgn}(p))^2 \frac{1}{n!} |r_1, r_2, \dots, r_n\rangle \\
& = \sum_p \frac{1}{n!} |r_1, r_2, \dots, r_n\rangle = |r_1, r_2, \dots, r_n\rangle
\end{aligned} \tag{3.2.44}$$

が成り立つことから確かめられる。(Bose 粒子の場合 $\operatorname{sgn}(p) = 1$ として考える。結論は変わらない。)

今、系の状態が $|\mathcal{S}\rangle$ で与えられているとすれば、 q_1, q_2, \dots, q_n で表される位置やスピンを持つ n 個の粒子が観測される確率は $|\langle q_1, q_2, \dots, q_n | \mathcal{S} \rangle|^2$ で計算できることになる。質点系の量子力学では粒子数を固定して考えていたが、場の量子論では、系にいくつ粒子が存在するか、という段階から議論することがができる。この点は、系を構成する粒子の種類・個数が変わる β 崩壊のような現象を扱う際、大きな利点となる。

3.2.7 まとめと補足

質点系の量子力学と場の量子論をつなぐ de Broglie 場の理論には、場の量子論のエッセンスとも言える基本的な考えが詰まっている。場の量子論の抽象的な計算を行う際に、何をしているか見失わないためにも、これまでの流れは押さえておいてもらいたい。最後に、重要な点を箇条書きでまとめておく。

- 1 粒子の Schrödinger 方程式を空間を伝わる波の方程式と見なし、場の量子化の方法を適用すると、ある位置を占める粒子、あるいは、ある運動量を持つ粒子などの生成・消滅演算子が得られる。

- 生成・消滅演算子からは個数演算子を作ることができる。個数演算子の固有状態は定まった数の粒子から成る質点系の状態を表す。
- 場の量子化を行う際に、正準交換関係と正準反交換関係どちらを課したかによって、粒子の統計性が決まる。
- ハミルトニアンに項を付け加えることで、外部から働く力や粒子間の相互作用の効果を取り入れることも可能である。

さらに、第 1 章で提示した 6 つの原理との関連から場の量子論を見直すと、次のことが言えるだろう。

- 系の状態は状態ベクトルで表されるので、重ね合わせの原理はそのまま成り立つ。ただし、記号 ψ を場の演算子に用いるので、状態 (state) を表す記号は $|\mathcal{S}(t)\rangle$ などとしたほうが良いだろう。系の時間発展がハミルトニアンを用いた時間発展方程式 $i\hbar \frac{d}{dt} |\mathcal{S}(t)\rangle = \hat{H} |\mathcal{S}(t)\rangle$ で与えられる点も変わらない。
- 物理量の同時測定可能性を規定する不確定性原理は元々、状態ベクトルの計算規則から半ば自動的に導かれる性格のものであったので、場の量子論においても成り立つだろう。ただし、後述するように場の量子論における物理量は、質点系とはやや異なった性格を持つ。
- 質点系では、基本的な物理量である位置と運動量の交換関係が基礎にあり、ここから様々な物理量の表現が与えられる。一方、場の量子論では場の演算子とその正準共役 ($\hat{\phi}_{\lambda a}, \hat{\pi}_{\lambda a}$) の交換・反交換関係が演算子の関係を規定するが、これらは必ずしも物理量とみなせるわけではない。
- 物理量の測定に関連する原理 2：物理量の統計的性質、原理 6：射影公準の扱いには注釈が必要だろう。質点系の量子力学では、物理量の固有状態を介して系の状態が意味付けされた。系の状態が例えば、「物理量 A が値 a を持つとわかっている状態 $|a\rangle$ 」の重ね合わせで書けるからこそ、確率法則の形で状態ベクトルが意味を持つのである。
- 従って、原理 2、原理 6 を用いる際には、測定と対応する固有状態を持つ演算子が必要となる。場の量子論でこの役割を担うのは、個数演算子である。個数演算子の固有状態は、「位置 \mathbf{x} にスピン $+\hbar/2$ を持った粒子が 1 つ存在する」「エネルギー E_1 を持った粒子が 3 つ、 E_2 を持った粒子が 1 つ存在する」といった形で明確な意味を持つので、これを用いれば、確率の計算は問題なく行える。例えば、系の状態を $|\mathcal{S}\rangle$ で表すとき、位置 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ にある n 個の粒子が見出される確率は、規格化された n 粒子状態

$$|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}_{\mathbf{x}_n}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{x}_{n-1}}^\dagger \cdots \hat{a}_{\mathbf{x}_1}^\dagger |0\rangle$$

を用いて、 $|\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n | \mathcal{S} \rangle|^2$ で与えられる。

- つまり、場の量子論において系の状態を眺める際には、「どういう粒子がいくつ存在するか」という視点が基本となる。「ある物理量がいかなる値をとるか」という見方はあまり便利とは言えない。例えば、粒子の位置を表す演算子として、 $\hat{X} = \int d^3x x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x})$ という演算子を考えることもできる⁶⁾が、この演算子にあ

⁶⁾ 1 粒子系ではこれは位置演算子そのものであるが、多粒子系では系の重心のような量を表す。場の量子論

る固有値 $\mathbf{X} = \mathbf{x}_1 + \cdots + \mathbf{x}_n$ を与える $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ の組み合わせは無数に存在するので、その測定値がわかっていても、系の状態の詳細がわかったとは言えない。

3.3 Heisenberg 描像

3.3.1 ユニタリー変換

続いて、相対論的な粒子の記述を考えていきたいが、これまで見てきた場の量子論では、時間変数と空間変数の扱いが異なっており、このままでは相対論との相性が悪い。例えば、系の状態を表す $|S(t)\rangle$ には空間変数が含まれておらず、置き換え $\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}(\mathbf{x})$ によって得られる演算子からは時間依存性が抜け落ちてしまっている。

時間と空間を平等に扱うため、以下では、ユニタリー演算子 ($\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I}$ を満たす \hat{U} をユニタリー演算子というのだった) を用いて理論を書き換えるという操作を行う。まず、状態および演算子 $|\psi\rangle, \langle\psi|, \hat{A}$ に対し、ユニタリー演算子 \hat{U} を用いた量

$$|\psi_U\rangle = \hat{U}|\psi\rangle, \langle\psi_U| = \langle\psi|\hat{U}^\dagger, \hat{A}_U = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger \quad (3.3.1)$$

を定義しよう。これらを、状態および演算子のユニタリー変換という。ユニタリー変換の重要な性質は次のようにまとめることができる。

定理 18 ユニタリー変換の性質

$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I}$ から、次の性質が成り立つ。

- 状態のユニタリー変換の内積は不変である。すなわち、 $\langle\phi_U|\psi_U\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$ が任意の状態 $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対し成り立つ。
- 演算子のユニタリー変換は元の演算子と同じ固有値を持つ。例えば、 $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ ならば

$$\hat{A}_U|a_U\rangle = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger\hat{U}|a\rangle = \hat{U}\hat{A}|a\rangle = a\hat{U}|a\rangle = a|a_U\rangle \quad (3.3.2)$$

が成り立つから、 \hat{A} の任意の固有値は同時に \hat{A}_U の固有値でもある。これは逆も然りで、 \hat{A}_U の任意の固有値が \hat{A} の固有値であることも示せる。

- 演算子のユニタリー変換は同じ交換関係、反交換関係に従う。すなわち、

$$[\hat{A}, \hat{B}]_\pm = \hat{C} \Leftrightarrow [\hat{A}_U, \hat{B}_U]_\pm = \hat{C}_U \quad (3.3.3)$$

が成り立つ。

確率の計算に用いる内積を始め、計算に現れる量の間関係はユニタリー変換の前後で変わらないことがわかる。従って、与えられた状態と演算子の組 $|\psi\rangle, \langle\psi|, \hat{A}$ をそっくりそのままユニタリー変換 $|\psi_U\rangle, \langle\psi_U|, \hat{A}_U$ に置き換えても、得られる計算結果は変わらない。

3.3.2 Heisenberg 描像

ハミルトニアンに時間依存性がない場合、時間発展方程式の解は、 $|\psi(t)\rangle = \exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t]|\psi(0)\rangle$ と表せるのだった。ここで、時間発展演算子 $\hat{U}_t^\dagger = \exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t]$ はユニ

では個々の粒子を区別しないため、場の演算子を用いて個々の粒子の位置を表すことはできない。

タリー演算子である⁷⁾. 今, \hat{U}_t によるユニタリー変換

$$|\psi_H\rangle = \hat{U}_t|\psi\rangle, \hat{A}_H = \hat{U}_t\hat{A}\hat{U}_t^\dagger \quad (3.3.4)$$

を考えよう. この変換の結果, 時刻 t における系の状態を表す $|\psi(t)\rangle$ は時間依存性を持たない $|\psi_H\rangle = |\psi(0)\rangle$ となり, 一方, 物理量を始めとする演算子やその固有状態など, 時間依存性を持たなかった量は時間依存性を獲得することになる. 物理量を表す演算子が時間と共に移り変わるこの理論を **Heisenberg 描像の量子論** といい, 状態が時間依存性を担う元の理論を **Schrödinger 描像の量子論** という.

Heisenberg 描像では, 時刻 t における物理量 A の確率を求める際に

$$\hat{A}_H(t)|a_H(t)\rangle = a|a_H(t)\rangle, \hat{I} = \int da|a_H(t)\rangle\langle a_H(t)| \quad (3.3.5)$$

を満たす固有状態 $|a_H(t)\rangle$ を用いて, $|\langle a_H(t)|\psi_H\rangle|^2$ を計算すればよい. 対応関係

$$\langle a_H(t)|\psi_H\rangle = \langle a|\psi(t)\rangle \quad (3.3.6)$$

から, 得られる結果は Schrödinger 描像と変わらない. 時間発展を考える際には $|a_H(t)\rangle$ の時間依存性を調べることになるが, エネルギー固有状態さえ求めれば

$$|a_H(t)\rangle = \int dE|E\rangle\langle E|a_H(0)\rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar}Et\right] \quad (3.3.7)$$

という表示が成り立つので, 少なくとも形式的な計算は可能となる. 始めにエネルギー固有状態の性質を調べる必要があるという点は Schrödinger 描像と同じである.

Heisenberg 描像に移行すると時間依存性が状態から演算子に移るため, 時間・空間変数をまとめて扱いたい相対論的場の量子論にとって都合が良い. Schrödinger 描像での状態や演算子 $|\mathcal{S}(t)\rangle, \hat{\psi}(\mathbf{x})$ は, Heisenberg 描像では $|\mathcal{S}_H\rangle, \hat{\psi}_H(\mathbf{x}, t)$ となり, 時間・空間変数がまとまった形になっている.

続く相対論的場の量子論の議論の際, 特に断りがなければ Heisenberg 描像で考えることとし, 例えば $\hat{\psi}(x)$ と書いたら $\hat{\psi}_H(\mathbf{x}, t)$ を表すものとする. ちなみに, 正準交換・反交換関係を課す際は

$$[\hat{\phi}_a(\mathbf{x}, t), \hat{\pi}_b(\mathbf{y}, t)]_\pm = i\hbar\delta_{ab}\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (3.3.8)$$

のように, 同時刻の演算子について条件を課すことになるが, これは縦線の後ろに補助条件を記す

$$[\hat{\phi}_a(x), \hat{\pi}_b(y)]_\pm \Big|_{x^0=y^0} = i\hbar\delta_{ab}\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (3.3.9)$$

という方法で表すことが出来る.

3.4 Klein-Gordon 場

Heisenberg 描像によって時間・空間変数が対等に扱えるようになったので, 相対論的場の量子論の話に入ろう. まずは, Klein-Gordon 方程式

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\phi(\mathbf{x}, t) = 0$$

⁷⁾ 第1章とは記法を変えてあることに注意.

に従う場 $\phi(x)$, すなわち Klein-Gordon 場について考えたい. これはもっとも単純な相対論的量子場であり, 場の量子論のテキストでは計算練習や, 様々な現象を解析するためのモデルに利用されることが多い. 本書では第2章で, 相対論的量子力学の問題点を示す例として取り上げたが, 以下では場の量子論の視点から, Klein-Gordon 方程式の問題点を見直していくことになる.

第2章の終わりでは, 相対論的量子力学に負エネルギー問題と呼ばれる問題が付きまとうことを見た. ここで要約を言えば, Klein-Gordon 方程式の量子力学においては, 確率密度を与える量が定かでないという問題があった. 確率密度を表す量の候補としては $|\phi(\mathbf{x}, t)|^2$ が考えられるが, これが確率の保存則を満たすためには, Klein-Gordon 方程式の解 (Fourier 積分表示)

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} (f(\mathbf{k})e^{-i\omega_k t} + g(\mathbf{k})e^{i\omega_k t}), \quad \omega_k = c\sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2c^2/\hbar^2}$$

における Fourier 展開係数 $f(\mathbf{k}), g(\mathbf{k})$ のいずれかを 0 とする制限をかけねばならない. しかし, 積分表示の形をいちいち考えなければならないというのは不便なので, より自然に確率の保存則を満たす理論が求められる.

場の量子論においては, Klein-Gordon 方程式に従う場 ϕ を用いて Hermite 性を持つハミルトニアンを書き下せるので, 確率の保存則に関する問題は生じない. 従って, Fourier 展開係数 f_k, g_k に対する制限は必要ない. 以下ではこのような, 場の量子論の利点について見ていくことになる. まずは Klein-Gordon 場の量子化から考えていくことにしよう.

3.4.1 Klein-Gordon 場のラグランジアン

Klein-Gordon 場 ϕ は一般に複素数値をとるが, ここでは計算を簡単にするため, 実数値をとる場合を考える. この場合, 条件 $\hat{\phi}^\dagger = \hat{\phi}$ から $\hat{f}(\mathbf{k}) = \hat{g}^\dagger(-\mathbf{k}), \hat{g}(\mathbf{k}) = \hat{f}^\dagger(-\mathbf{k})$ という関係が成り立つので, Fourier 積分表示は

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(x) &= \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} (\hat{f}(\mathbf{k})e^{-i\omega_k t} + \hat{f}^\dagger(-\mathbf{k})e^{i\omega_k t}) \\ &= \int d^3k (\hat{f}(\mathbf{k})e^{-ikx} + \hat{f}^\dagger(\mathbf{k})e^{ikx}) \end{aligned} \quad (3.4.1)$$

という形になる. ($kx = \omega_k t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x} = k^\mu x_\mu$ という略記を用いた.)

場が実数値をとる場合, Klein-Gordon 方程式を導くラグランジアンは

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi(x)\partial^\mu\phi(x) - \frac{m^2c^2}{2\hbar^2}\phi^2(x) \quad (3.4.2)$$

と書ける. Hamilton 形式への移行のため, 時間微分が見える形で書けば

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2c^2}\partial_t\phi(x)\partial_t\phi(x) - \frac{1}{2}\nabla\phi(x)\cdot\nabla\phi(x) - \frac{m^2c^2}{2\hbar^2}\phi^2(x) \quad (3.4.3)$$

となり, 場の正準共役 $\pi(x)$ およびハミルトニアン密度は

$$\pi(x) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\phi)} = \frac{1}{c^2}\partial_t\phi(x) \quad (3.4.4)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \pi(x)\partial_t\phi(x) - \mathcal{L} \\ &= \frac{c^2}{2}\pi(x)\pi(x) + \frac{1}{2}\nabla\phi(x)\cdot\nabla\phi(x) + \frac{m^2c^2}{2\hbar^2}\phi^2(x) \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

で与えられる。ここで、正準交換関係を課せば Bose 粒子系、反交換関係を課せば Fermi 粒子系を記述する量子論が得られるはずである。ひとまずは、統計性に中立的なやり方で量子化を行い、話を進めよう（こうすると後で面白いことがわかる）。今は Heisenberg 描像で考えているので、

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\pi}(y)]_{\pm} \Big|_{x^0=y^0} = i\hbar\delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{y}), \quad [\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)]_{\pm} \Big|_{x^0=y^0} = 0, \quad [\hat{\pi}(x), \hat{\pi}(y)]_{\pm} \Big|_{x^0=y^0} = 0 \quad (3.4.6)$$

が演算子の関係を規定する方程式となる。de Broglie 場の場合と違い、 $\hat{\phi}(x)$ 自体は位置 \mathbf{x} に粒子を生成・消滅させる演算子とは見なせないことに注意しよう。

3.4.2 生成・消滅演算子

続いて、生成・消滅演算子が現れることを見るため、Fourier 積分表示から $\hat{f}(\mathbf{k}), \hat{f}^\dagger(\mathbf{k})$ の交換関係を調べる。せっかく Heisenberg 描像にしたところであるが、今は時間依存性のない $\hat{f}(\mathbf{k})$ について調べればよい⁸⁾ので、 $x^0 = y^0 = 0$ として考える。このときの Fourier 積分表示は

$$\hat{\phi}(x) = \int d^3k (\hat{f}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \hat{f}^\dagger(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) \quad (3.4.7)$$

$$\hat{\pi}(x) = \frac{i}{c^2} \int d^3k \omega_k (-\hat{f}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \hat{f}^\dagger(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}) \quad (3.4.8)$$

であり、Schrödinger 描像の演算子に一致する。ここから、弦の振動で行ったように、この式を交換子に代入して \hat{f}, \hat{f}^\dagger を調べてもよいのだが³⁾、その方法はやや面倒である。そこでまずは、Fourier 積分表示に $\exp[-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}]$ をかけて x 積分を行う。すると

$$\int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} \hat{\phi}(x)e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} = \hat{f}(\mathbf{q}) + \hat{f}^\dagger(-\mathbf{q}), \quad (3.4.9)$$

$$\int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} \hat{\pi}(x)e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} = -\frac{i}{c^2}\omega_q \hat{f}(\mathbf{q}) + \frac{i}{c^2}\omega_q \hat{f}^\dagger(-\mathbf{q}), \quad (3.4.10)$$

となるので、整理すると

$$\hat{f}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} \left(\hat{\phi}(x) - \frac{c^2}{i\omega_q} \hat{\pi}(x) \right) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.4.11)$$

$$\hat{f}^\dagger(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} \left(\hat{\phi}(x) + \frac{c^2}{i\omega_q} \hat{\pi}(x) \right) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.4.12)$$

という関係式が得られる。すると交換子は

$$[\hat{f}(\mathbf{k}), \hat{f}(\mathbf{q})]_{\pm} = \frac{1}{4} \int \frac{d^3x d^3y}{(2\pi)^6} \left[\hat{\phi}(x) - \frac{c^2}{i\omega_k} \hat{\pi}(x), \hat{\phi}(y) - \frac{c^2}{i\omega_q} \hat{\pi}(y) \right]_{\pm} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}$$

というように書けるので、 $\hat{\phi}, \hat{\pi}$ の交換・反交換関係を利用して計算が可能となる。 $[\hat{A}, \hat{B}]_{\pm} = \pm[\hat{B}, \hat{A}]_{\pm}$ に注意して計算を行えば、

$$[\hat{f}(\mathbf{k}), \hat{f}(\mathbf{q})]_{\pm} = -\frac{\hbar c^2}{4\omega_k(2\pi)^3} (1 \pm 1) \delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (3.4.13)$$

⁸⁾ 相互作用がある場合は、 $f(\mathbf{k})$ が時間依存性を持つと考える必要があるが、実は、時間発展演算子のユニタリ性から、ある時刻の交換関係は異なる時刻の交換関係と同じ関係で結ばれるため、時刻に 0 を代入して調べても問題は生じない。よって、交換関係を調べるときは計算が楽になる時刻を選んで考えてよいことになる。

$$[\hat{f}^\dagger(\mathbf{k}), \hat{f}^\dagger(\mathbf{q})]_\pm = \frac{\hbar c^2}{4\omega_k(2\pi)^3} (1 \pm 1) \delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (3.4.14)$$

$$[\hat{f}(\mathbf{k}), \hat{f}^\dagger(\mathbf{q})]_\pm = \frac{\hbar c^2}{4\omega_k(2\pi)^3} (1 \mp 1) \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \quad (3.4.15)$$

という結果が得られる。さらに、式を見やすくするために

$$\hat{f}(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega_k(2\pi)^3}} \hat{a}(\mathbf{k}) \quad (3.4.16)$$

という関係に従う $\hat{a}(\mathbf{k})$ を用いて整理しておく。

$$[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}(\mathbf{q})]_\pm = -[\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{q})]_\pm = -\frac{(1 \pm 1)}{2} \delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (3.4.17)$$

$$[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{q})]_\pm = \frac{(1 \mp 1)}{2} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \quad (3.4.18)$$

Bose 統計の場合、 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}), \hat{a}(\mathbf{k})$ は生成・消滅演算子と同じ交換関係に従うことがわかる。一方、Fermi 統計の場合、 $[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}(\mathbf{q})]_+ = -\delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q}), [\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{q})]_+ = 0$ となるため、これらを生成・消滅演算子とは見なせないことがわかる。

3.4.3 Klein-Gordon 場のエネルギー

(3.4.17), (3.4.18) より、Klein-Gordon 場の積分表示

$$\hat{\phi}(x) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega_k}} (\hat{a}(\mathbf{k})e^{-ikx} + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})e^{ikx}) \quad (3.4.19)$$

に現れる \hat{a}, \hat{a}^\dagger の性質は統計性に依じて大きく変わる。特に Fermi 統計を考えた場合、これらは生成・消滅演算子にならないという問題がある。さらに、以下で見ると、Fermi 統計に従う Klein-Gordon 場はエネルギーに関する問題も抱えることになる。

Klein-Gordon 場の Fourier 積分表示をハミルトニアン の式

$$\hat{H} = \int d^3x \left(\frac{c^2}{2} \hat{\pi}(x) \hat{\pi}(x) + \frac{1}{2} \nabla \hat{\phi}(x) \cdot \nabla \hat{\phi}(x) + \frac{m^2 c^2}{2\hbar^2} \hat{\phi}^2(x) \right) \quad (3.4.20)$$

に代入してみよう。簡略化のため $t = 0$ として計算を行うと、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} \int d^3x \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{\hbar^2 c^4}{4\omega_k \omega_q}} \times \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}] \\ &\quad \times \left(\left(-\frac{1}{c^2} \omega_k \omega_q - \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} \right) (\hat{a}(\mathbf{k}) - \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k})) (\hat{a}(\mathbf{q}) - \hat{a}^\dagger(-\mathbf{q})) \right. \\ &\quad \left. + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} (\hat{a}(\mathbf{k}) + \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k})) (\hat{a}(\mathbf{q}) + \hat{a}^\dagger(-\mathbf{q})) \right), \end{aligned}$$

$\int d^3x \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}] = (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ なので、

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar^2 c^4}{4\omega_k^2}} \times \left(\left(-\frac{1}{c^2} \omega_k^2 + \mathbf{k}^2 \right) (\hat{a}(\mathbf{k}) - \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k})) (\hat{a}(-\mathbf{k}) - \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})) \right. \\ &\quad \left. + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} (\hat{a}(\mathbf{k}) + \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k})) (\hat{a}(-\mathbf{k}) + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})) \right), \end{aligned}$$

演算子の順番を変えないよう注意しながら整理すると,

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \int d^3k \sqrt{\frac{\hbar^2 c^4}{4\omega_k^2}} \times \left(\left(-\frac{1}{c^2} \omega_k^2 + \mathbf{k}^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) (\hat{a}(\mathbf{k})\hat{a}(-\mathbf{k}) + \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k})\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{c^2} \omega_k^2 - \mathbf{k}^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) (\hat{a}(\mathbf{k})\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) + \hat{a}^\dagger(-\mathbf{k})\hat{a}(-\mathbf{k})) \right), \end{aligned}$$

最後に, $\omega_k^2 = \mathbf{k}^2 c^2 + m^2 c^4 / \hbar^2$ なので,

$$= \int d^3k \frac{\hbar \omega_k}{2} (\hat{a}(\mathbf{k})\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}(\mathbf{k})) \quad (3.4.21)$$

という結果が得られる.

ここで, (3.4.17), (3.4.18) に注目しよう. まず, 量子化の手続きで Fermi 統計を考えた場合, 積分中の $\hat{a}(\mathbf{k})\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}(\mathbf{k})$ が定数となり, 単一のエネルギー固有値しか存在しないことになる. これはもちろん, 相対論的粒子の記述を与える理論とはならない. 量子化の手続きに Bose 統計を考えた場合, ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \int d^3k \hbar \omega_k \left(\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \delta^3(0) \right) \quad (3.4.22)$$

となり, 零点エネルギーを表す第 2 項を無視すれば, 運動エネルギー×粒子数の形となっており, 自由粒子系のエネルギーを正しく再現する. 従って, Klein-Gordon 場の量子論が意味を持つためには, Bose 統計を考えねばならないことがわかる. これは相対論的場の量子論の特徴で, 例えば次節で扱う Dirac 場の場合, 粒子の統計性は Fermi 統計に限定されることになる. 統計性は粒子のスピンによって決まり, スピンの大きさが整数 $0, 1, 2, \dots$ ならば Bose 統計, 半整数 $1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ならば Fermi 統計となる. これをスピン・統計定理といい, 詳細は第 4 章で論じることになる.

さて, ここまで来れば, $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}), \hat{a}(\mathbf{k})$ を運動量 $\hbar \mathbf{k}$ を持つ粒子の生成・消滅演算子と解釈しても良いだろう. 生成演算子があれば de Broglie 場と同様に, 真空 $|0\rangle$ から n 粒子系の状態を作ることができる. 確率保存則に関しては, ハミルトニアンが与えられているので問題は生じない.

ちなみに, 位置に関する生成・消滅演算子と解釈される, 交換関係 $[\hat{A}(x), \hat{A}^\dagger(y)] = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), [\hat{A}(x), \hat{A}(y)] = 0$ に従う演算子は, $\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ から構成することができる. 従って, 原理的には Klein-Gordon 場に対応する粒子がどこに存在するか, その確率を議論することも可能である. よって我々は, 確率の保存則を満たし, 位置や運動量, エネルギーといった物理量の振る舞いを予測できる理論を得たことになる.

3.5 Dirac 場

前節では場の量子論の枠組みにおいて, Klein-Gordon 方程式が抱えていた確率の問題が解消することを見た. 続いて, Dirac 方程式の負エネルギー問題がどのように解決を見るのか, 調べていくことにする.

出発点は Dirac 方程式

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(x) = 0 \quad (3.5.1)$$

である。簡単に復習しておく、 γ^μ は 4×4 行列であり、その基本的な性質は

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \Rightarrow (\gamma^0)^2 = 1, (\gamma^i)^2 = -1 \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.5.2)$$

である。Dirac 方程式のハミルトニアン (座標表示) は

$$H = -i\hbar c \sum_{i=1}^3 \gamma^0 \gamma^i \partial_i + mc^2 \gamma^0 \quad (3.5.3)$$

で与えられるが、これが Hermite 性を持つために、 γ 行列は

$$\gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger, \quad \gamma^i = -(\gamma^i)^\dagger \quad (i = 1, 2, 3) \quad (3.5.4)$$

を満たさねばならない。 γ 行列の具体的な形は 2×2 複素行列

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.5.5)$$

を用いて

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5.6)$$

で与えられる (Dirac 表示)。

$\psi(x)$, すなわち **Dirac 場** の変換則はこの γ 行列を用いて定義される。具体的に述べておこう。 $\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu}$ を満たす行列 $\omega^\mu{}_\nu$ と実数 a を用いて $\Lambda^\mu{}_\nu = (\exp[a\omega])^\mu{}_\nu$ という形に書ける Lorentz 変換を考えたとき、この変換に対応する $\psi(x)$ の変換行列は

$$S_\Lambda = \exp[a\Omega], \quad \Omega = \frac{1}{2} \omega_{\rho\sigma} \gamma^\rho \gamma^\sigma = \frac{1}{4} \omega_{\rho\sigma} (\gamma^\rho \gamma^\sigma - \gamma^\sigma \gamma^\rho) \quad (3.5.7)$$

で与えられる。ここまで思い出せば、Dirac 場の量子化の準備としては十分である。それでは、本題に入ろう。

3.5.1 Dirac 場のラグランジアン

まずは Dirac 場のラグランジアンを形を考えよう。de Broglie 場のラグランジアン

$$\mathcal{L} = i\hbar \psi^* \partial_t \psi - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi)$$

を参考に、時間微分の項が同じ形になるようにすると、

$$\mathcal{L} = c\psi^\dagger(x) \gamma^0 (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi(x) \quad (3.5.8)$$

というラグランジアン密度が得られる。ここで、 $\psi^\dagger(x)$ は複素成分を持つ縦ベクトル $\psi(x)$ の Hermite 共役に対応する横ベクトルを意味する。このラグランジアンが Dirac 方程式を導くことは容易に確かめられるのだが、問題はこのラグランジアンが相対論的に不変な形になっているか、という点である。というのも、Lorentz 不変に見える $\gamma^\mu \partial_\mu$ の横の γ^0 が明らかに浮いているからだ。

しかし、結論を言えば、このラグランジアン密度は Lorentz 不変であることが確かめられる。このことを証明するには、変換 $\psi(x) \rightarrow \psi'(x') = S_\Lambda \psi(x)$ の前後での不変性、すなわち

$$c\psi^\dagger(x) \gamma^0 (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi(x) = c\psi'^\dagger(x') \gamma^0 (i\hbar \gamma^\mu \partial'_\mu - mc) \psi'(x') \quad (3.5.9)$$

が言えればよい。ここでは左辺を変形して右辺を導いてみよう。Lorentz 変換 $S_\Lambda = \exp[a\Omega]$ の逆変換 $S_\Lambda^{-1} = \exp[-a\Omega]$ が $S_\Lambda \gamma^\mu \partial_\mu S_\Lambda^{-1} = \gamma^\mu \partial'_\mu$ を満たすことに注意すると、

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= c\psi^\dagger(x) \gamma^0 S_\Lambda^{-1} S_\Lambda (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) S_\Lambda^{-1} S_\Lambda \psi(x) \\ &= c\psi^\dagger(x) \gamma^0 S_\Lambda^{-1} (i\hbar \gamma^\mu \partial'_\mu - mc) \psi'(x') \end{aligned} \quad (3.5.10)$$

となる。つまり、 $\gamma^0 S_\Lambda^{-1} = S_\Lambda^\dagger \gamma^0$ を示せば、ラグランジアン密度の Lorentz 不変性が言えることになる。

さて、 $S_\Lambda = \exp[a\Omega]$, $S_\Lambda^{-1} = \exp[-a\Omega]$, $S_\Lambda^\dagger = \exp[a\Omega^\dagger]$ に注意すれば、 $\gamma^0 S_\Lambda^{-1} = S_\Lambda^\dagger \gamma^0$ の証明は $-\gamma^0 \Omega = \Omega^\dagger \gamma^0$ に帰着することがわかる。 γ^0 との交換関係を見るには時間成分と空間成分を分けるのが都合がよい。そこで行列 Ω を

$$\Omega = \frac{1}{2} \omega_{\rho\sigma} \gamma^\rho \gamma^\sigma = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (\omega_{0i} \gamma^0 \gamma^i + \omega_{i0} \gamma^i \gamma^0) + \sum_{i,j=1}^3 \omega_{ij} \gamma^i \gamma^j \quad (3.5.11)$$

と書く。次に、 $\gamma^0 = (\gamma^0)^\dagger$, $\gamma^i = -(\gamma^i)^\dagger$ および $\omega_{\rho\sigma} = -\omega_{\sigma\rho}$ に注意して Ω^\dagger を計算すると

$$\begin{aligned} \Omega^\dagger &= \frac{1}{2} \omega_{\rho\sigma} (\gamma^\rho \gamma^\sigma)^\dagger = \frac{1}{2} \omega_{\rho\sigma} (\gamma^\sigma)^\dagger (\gamma^\rho)^\dagger \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (\omega_{i0} (\gamma^0)^\dagger (\gamma^i)^\dagger + \omega_{0i} (\gamma^i)^\dagger (\gamma^0)^\dagger) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \omega_{ji} (\gamma^i)^\dagger (\gamma^j)^\dagger \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (\omega_{i0} \gamma^0 \gamma^i + \omega_{0i} \gamma^i \gamma^0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \omega_{ji} \gamma^i \gamma^j \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (\omega_{0i} \gamma^0 \gamma^i + \omega_{i0} \gamma^i \gamma^0) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \omega_{ij} \gamma^i \gamma^j \end{aligned} \quad (3.5.12)$$

となるので、 Ω^\dagger の右に γ^0 を掛けて、 $\gamma^0 \gamma^i = -\gamma^i \gamma^0$ に注意して、左に γ^0 が来る形に直してもらいたい。 $\Omega^\dagger \gamma^0 = -\gamma^0 \Omega$ が得られるはずだ。これで、ラグランジアン密度の Lorentz 不変性が示されたことになる。

ところで、Lorentz 変換を表す S_Λ は一般に $S_\Lambda^{-1} \neq S_\Lambda^\dagger$ であるからユニタリー変換ではない。 Ω^\dagger の式を見れば、ユニタリー性の破れは Lorentz ブーストの部分で生まれていることがわかる。ラグランジアン密度に含まれる γ^0 は、Lorentz ブーストが作るユニタリー性の破れを補う役割を持つというわけだ。

Lorentz 不変なラグランジアン密度が得られたので、量子化の手続きに進もう。ラグランジアン密度は、 γ^μ や ψ の成分を明示し、時間変数が見える形で表せば

$$\mathcal{L} = \psi_a^*(x) \left(i\hbar \delta_{ab} \partial_t + i\hbar c \sum_{i=1}^3 (\gamma^0 \gamma^i)_{ab} \partial_i - mc^2 (\gamma^0)_{ab} \right) \psi_b(x) \quad (3.5.13)$$

となる。ここで、ペアを作っている γ^μ, ψ の添え字 a, b については和をとっている。 δ_{ab} は 4×4 単位行列 1 の成分を表す。場 $\psi_a(x)$ の正準共役は $\pi_a(x) = i\hbar \psi_a^*(x)$ となるから、正準交換・反交換関係は de Broglie 場と似たような形

$$[\hat{\psi}_a(x), \hat{\psi}_b^\dagger(y)]_\pm \Big|_{x^0=y^0} = \delta_{ab} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [\hat{\psi}_a(x), \hat{\psi}_b(y)]_\pm \Big|_{x^0=y^0} = 0 \quad (3.5.14)$$

で与えられる。

ハミルトニアン密度を $\mathcal{H} = \pi_a \partial_t \psi_a - \mathcal{L}$ から計算すると、ラグランジアンから時間微分を含む項が消え、残りにマイナスを掛けた形になる。従って、ハミルトニアン密度を表す演算子は

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\psi}_a^\dagger(x) \left(-i\hbar c \sum_{i=1}^3 (\gamma^0 \gamma^i)_{ab} \partial_i + mc^2 (\gamma^0)_{ab} \right) \hat{\psi}_b(x) \quad (3.5.15)$$

となる。これは Dirac 方程式の議論で見たものと同じようなハミルトニアンである。果たして負エネルギー問題は解決しているのだろうか？

3.5.2 自由 Dirac 場の一般解

ここで、Klein-Gordon 場と同様に、Fourier 積分表示を用いてハミルトニアン of の形を見直してみたい。まずは Dirac 方程式の一般解の形から復習していこう。Dirac 表示の γ 行列は、

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.5.16)$$

という 2×2 行列を用いて

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5.17)$$

と書ける。このとき、正負のエネルギーを持つ固有状態の形は

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) \\ \frac{\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\hbar \omega_k + mc^2} \xi(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_k t)], \quad (3.5.18)$$

$$\psi_- = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\hbar \omega_k + mc^2} \eta(\mathbf{k}) \\ \eta(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \omega_k t)] \quad (3.5.19)$$

となるのだった。 $\xi(\mathbf{k}), \eta(\mathbf{k})$ は零ベクトルでなければ任意にとってよい。従って、同じ \mathbf{k} を持つエネルギー固有ベクトルは 4 つの独立なベクトルの重ね合わせで書けることになる。ここで、具体的な計算のため、4 つの独立なベクトルを

$$u_1(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar \omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} \sigma_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\hbar \omega_k + mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad u_2(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar \omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} \sigma_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \frac{\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\hbar \omega_k + mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (3.5.20)$$

$$v_1(-\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar \omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} -\frac{\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\hbar \omega_k + mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \sigma_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad v_2(-\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar \omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} -\frac{\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\hbar \omega_k + mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (3.5.21)$$

で定義すれば、 $\hat{\psi}(x)$ の Fourier 積分表示は

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{s=1,2} \int \frac{d^3 k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar \omega_k}} (\hat{a}_s(\mathbf{k}) u_s(\mathbf{k}) e^{-ikx} + \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k}) v_s(\mathbf{k}) e^{ikx}) \quad (3.5.22)$$

という形になる。 $\hat{a}_s(\mathbf{k}), \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})$ は量子化によって演算子となった Fourier 展開係数である。 \mathbf{k} に依存する謎の因子が多いが、これは後の計算の手間を減らすために付けたものである。

ちなみに、 $u_s(\mathbf{k})$ と $v_s(\mathbf{k})$ の添え字 $s = 1, 2$ はスピンの自由度を表すのだが、Dirac 方程式のハミルトニアンとスピン角運動量演算子が交換しない事情もあり、 $s = 1, 2$ がスピン $\pm \hbar/2$ の固有状態に対応するわけではないことに注意しよう。

3.5.3 Dirac 場のエネルギー

Klein-Gordon 場の議論の流れを辿れば、次は正準交換・反交換関係を用いて $\hat{a}_s(\mathbf{k}), \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})$ の性質を調べるところであるが、Dirac 場の 4 成分量の交換子の組み合わせは 10 種類以上考えられるので、闇雲に計算を行っても行き詰まるだけである。そこでまずは、ハミルトニアンを調べ、 $\hat{a}_s(\mathbf{k}), \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})$ の性質についてヒントを探ろう。さらに、ハミルトニアン具体的な姿がわかれば負エネルギー問題を解決する方法も見えてくる。

時間依存性については考える必要がないので、以下、時刻の変数を 0 とおいて計算を行う。Dirac 場のハミルトニアン

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \left(-i\hbar c \sum_{i=1}^3 \gamma^0 \gamma^i \partial_i + mc^2 (\gamma^0) \right) \hat{\psi}(x) \quad (3.5.23)$$

は ψ の間に Dirac 方程式のハミルトニアン (H_D と表す) が挟まった形になっている。これに Fourier 積分表示

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x) &= \sum_{s=1,2} \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar\omega_k}} \left(\hat{a}_s(\mathbf{k}) u_s(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k}) v_s(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right) \\ &= \sum_{s=1,2} \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar\omega_k}} \left(\hat{a}_s(\mathbf{k}) u_s(\mathbf{k}) + \hat{b}_s^\dagger(-\mathbf{k}) v_s(-\mathbf{k}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (3.5.24)$$

を代入すると、 $u_s(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, v_s(-\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ がそれぞれ、 H_D の固有値 $\pm\hbar\omega_k$ に属す固有ベクトルなので、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{s,s'=1,2} \int d^3x \frac{mc^2 d^3q d^3k}{(2\pi)^3 \hbar \sqrt{\omega_q \omega_k}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}} \\ &\quad \times \left(\hat{a}_{s'}^\dagger(\mathbf{q}) u_{s'}^\dagger(\mathbf{q}) + \hat{b}_{s'}^\dagger(-\mathbf{q}) v_{s'}^\dagger(-\mathbf{q}) \right) \times \hbar\omega_k \left(\hat{a}_s(\mathbf{k}) u_s(\mathbf{k}) - \hat{b}_s^\dagger(-\mathbf{k}) v_s(-\mathbf{k}) \right) \\ &= \sum_{s,s'=1,2} \int d^3k mc^2 \left(\hat{a}_{s'}^\dagger(\mathbf{k}) u_{s'}^\dagger(\mathbf{k}) + \hat{b}_{s'}^\dagger(-\mathbf{k}) v_{s'}^\dagger(-\mathbf{k}) \right) \times \left(\hat{a}_s(\mathbf{k}) u_s(\mathbf{k}) - \hat{b}_s^\dagger(-\mathbf{k}) v_s(-\mathbf{k}) \right) \end{aligned} \quad (3.5.25)$$

という形まで整理できる。ここで、

$$\frac{\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\hbar\omega_k + mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar c}{\hbar\omega_k + mc^2} \begin{pmatrix} k_z \\ k_x + ik_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix} \quad (3.5.26)$$

$$\frac{\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}}{\hbar\omega_k + mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar c}{\hbar\omega_k + mc^2} \begin{pmatrix} k_x - ik_y \\ -k_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_k^* \\ -A_k \end{pmatrix} \quad (3.5.27)$$

とおけば、

$$u_1(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar\omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ A_k \\ B_k \end{pmatrix}, \quad u_2(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar\omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ B_k^* \\ -A_k \end{pmatrix}, \quad (3.5.28)$$

$$v_1(-\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar\omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} -B_k^* \\ A_k \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_2(-\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\hbar\omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} -A_k \\ -B_k \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.5.29)$$

となる.

$$\begin{aligned} (1 + A_k^2 + |B_k|^2) &= \frac{(\hbar\omega_k + mc^2)^2 + \hbar^2 c^2 \mathbf{k}^2}{(\hbar\omega_k + mc^2)^2} = \frac{(\hbar\omega_k + mc^2)^2 + \hbar^2 \omega_k^2 - m^2 c^4}{(\hbar\omega_k + mc^2)^2} \\ &= \frac{\hbar\omega_k}{\hbar\omega_k + mc^2} \end{aligned} \quad (3.5.30)$$

に注意して内積の計算を行えば,

$$u_{s'}^\dagger(\mathbf{k})u_s(\mathbf{k}) = v_{s'}^\dagger(-\mathbf{k})v_s(-\mathbf{k}) = \frac{\hbar\omega_k}{mc^2} \delta_{ss'}, \quad u_{s'}^\dagger(\mathbf{k})v_s(-\mathbf{k}) = 0 \quad (3.5.31)$$

という結果が得られる. これを用いてハミルトニアンを計算を進めると,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{s=1,2} \int d^3k \hbar\omega_k \left(\hat{a}_s^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_s(\mathbf{k}) - \hat{b}_s(-\mathbf{k})\hat{b}_s^\dagger(-\mathbf{k}) \right) \\ &= \sum_{s=1,2} \int d^3k \hbar\omega_k \left(\hat{a}_s^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_s(\mathbf{k}) - \hat{b}_s(\mathbf{k})\hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k}) \right) \end{aligned} \quad (3.5.32)$$

という式が得られる. ここまで, 演算子の順序は一切変えていない.

ここから, $\hat{a}_s^\dagger(\mathbf{k}), \hat{a}_s(\mathbf{k})$ がそれぞれ生成・消滅演算子に対応することが見て取れる. 一方, $\hat{b}_s(\mathbf{k}), \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})$ の項の解釈であるが, まず, $\hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})$ を消滅演算子と見なすと負エネルギーが生じてしまうことがわかる. よって, $\hat{b}_s(\mathbf{k})$ が消滅演算子となるのだが, ここで, 統計性の違いが生む

$$[\hat{b}_s(\mathbf{k}), \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})]_{\pm} = \delta^3(0) \Rightarrow \hat{b}_s(\mathbf{k})\hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k}) = \mp \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})\hat{b}_s(\mathbf{k}) + \delta^3(0) \quad (3.5.33)$$

という性質が重要になってくる. $\hat{b}_s(\mathbf{k})\hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})$ の符号を正に変えるためには, Fermi 統計の反交換関係を課さねばならない. 反交換関係を用いれば, 零点エネルギーを除いたハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{s=1,2} \int d^3k \hbar\omega_k \left(\hat{a}_s^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}_s(\mathbf{k}) + \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k})\hat{b}_s(\mathbf{k}) \right) \quad (3.5.34)$$

という形になる. これは正のエネルギー \times 個数演算子の形になっており, 負エネルギー問題を生じない.

負エネルギー問題を生じない“正しい”量子論では, Dirac 方程式に従う粒子は自動的に Fermi 粒子になる. これは, Dirac 方程式に従う電子がなぜ Fermi 粒子であるかという, 根源的な問いの一つの答えとなるものである. また, Dirac 場では粒子の生成・消滅演算子が \hat{a}, \hat{b} の2種類あるが, これは反粒子と呼ばれる粒子の存在を示している. 反粒子は元の粒子と同じ質量, 符号だけ異なる電荷を持つ粒子で, 例えば電子の反粒子は陽電子と呼ばれる.

3.5.4 正準反交換関係の確認

ハミルトニアンの形から, Fourier 展開係数は生成・消滅演算子の反交換関係, 例えば,

$$[\hat{a}_s(\mathbf{k}), \hat{a}_{s'}^\dagger(\mathbf{q})]_+ = \delta_{ss'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad [\hat{a}_s(\mathbf{k}), \hat{a}_{s'}(\mathbf{q})]_+ = 0 \quad (3.5.35)$$

$$[\hat{b}_s(\mathbf{k}), \hat{b}_{s'}^\dagger(\mathbf{q})]_+ = \delta_{ss'} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad [\hat{b}_s(\mathbf{k}), \hat{b}_{s'}(\mathbf{q})]_+ = 0 \quad (3.5.36)$$

に従うと考えられる. ここでは, この関係式を仮定したとき, Dirac 場の正準反交換関係がきちんと成り立っていることを確かめたい.

Dirac 場の Fourier 積分表示

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{s=1,2} \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar\omega_k}} \left(\hat{a}_s(\mathbf{k})u_s(\mathbf{k}) + \hat{b}_s^\dagger(-\mathbf{k})v_s(-\mathbf{k}) \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

の被積分量は, (3.5.28), (3.5.29) を用いると

$$\sum_{s=1,2} \left(\hat{a}_s(\mathbf{k})u_s(\mathbf{k}) + \hat{b}_s^\dagger(-\mathbf{k})v_s(-\mathbf{k}) \right) = \sqrt{\frac{\hbar\omega_k + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} \hat{a}_1(\mathbf{k}) - B_k^* \hat{b}_1^\dagger(-\mathbf{k}) - A_k \hat{b}_2^\dagger(-\mathbf{k}) \\ \hat{a}_2(\mathbf{k}) + A_k \hat{b}_1^\dagger(-\mathbf{k}) - B_k \hat{b}_2^\dagger(-\mathbf{k}) \\ A_k \hat{a}_1(\mathbf{k}) + B_k^* \hat{a}_2(\mathbf{k}) + \hat{b}_2^\dagger(-\mathbf{k}) \\ B_k \hat{a}_1(\mathbf{k}) - A_k \hat{a}_2(\mathbf{k}) + \hat{b}_1^\dagger(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (3.5.37)$$

という形だとわかる. 生成演算子同士, 消滅演算子同士は反交換するので, この式を見れば $[\hat{\psi}_a(x), \hat{\psi}_b(y)]_+ = 0$ であることがわかる.

次の問題は $\hat{\psi}^\dagger$ を含む計算である. まず, Fourier 積分表示とその中の被積分量を書き下すと

$$\hat{\psi}^\dagger(y) = \sum_{s'=1,2} \int \frac{d^3q}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar\omega_q}} \left(\hat{a}_{s'}^\dagger(\mathbf{q})u_{s'}^\dagger(\mathbf{q}) + \hat{b}_{s'}(-\mathbf{q})v_{s'}^\dagger(-\mathbf{q}) \right) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{y}}$$

$$\sum_{s'=1,2} \left(\hat{a}_{s'}^\dagger(\mathbf{q})u_{s'}^\dagger(\mathbf{q}) + \hat{b}_{s'}(-\mathbf{q})v_{s'}^\dagger(-\mathbf{q}) \right) = \sqrt{\frac{\hbar\omega_q + mc^2}{mc^2}} \begin{pmatrix} \hat{a}_1^\dagger(\mathbf{q}) - B_q \hat{b}_1(-\mathbf{q}) - A_q \hat{b}_2(-\mathbf{q}) \\ \hat{a}_2^\dagger(\mathbf{q}) + A_q \hat{b}_1(-\mathbf{q}) - B_q^* \hat{b}_2(-\mathbf{q}) \\ A_q \hat{a}_1^\dagger(\mathbf{q}) + B_q \hat{a}_2^\dagger(\mathbf{q}) + \hat{b}_2(-\mathbf{q}) \\ B_q^* \hat{a}_1^\dagger(\mathbf{q}) - A_q \hat{a}_2^\dagger(\mathbf{q}) + \hat{b}_1(-\mathbf{q}) \end{pmatrix}^T \quad (3.5.38)$$

となる (u^\dagger などは横ベクトルなので転置の記号 T を用いた). 被積分量は 4 成分とも, $1, A, B$ の因子を一つずつ持った演算子の和になっているので, 同じ成分同士の反交換関係は同じ結果

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_a(x), \hat{\psi}_a^\dagger(y)]_+ &= \int \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega_q + mc^2}{\hbar\omega_k} (1 + A_k^2 + |B_k|^2) \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \\ &= \int \frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^3} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \end{aligned} \quad (3.5.39)$$

に帰着し, これは Dirac 場の正準反交換関係と整合する. 最後に, 異なる成分の組に対する $[\hat{\psi}_a(x), \hat{\psi}_b^\dagger(y)]_+$ について考えよう. $1-2, 1-3, 1-4, 2-3, 2-4, 3-4$ の 6 パターンがあり面倒であるが, 異なる成分の組には $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{b}_1, \hat{b}_2$ のうち 2 つのみが共通に含まれるので, それらの係数を比較すれば, 確かに反交換することが確かめられる. 以上, Dirac 場の正準反交換関係が確かに成り立つことが確かめられた⁹⁾.

3.6 電磁場

これまで, 相対論的粒子の記述を念頭に置き, Klein-Gordon 場と Dirac 場の量子論について解説を行った. これらに続いて解説するのは, 電子レンジや携帯電話など, 身近な科学技術を根底で支えている電磁場の扱いである.

⁹⁾ 余談であるが, 正準交換・反交換関係から出発して生成・消滅演算子の交換・反交換関係を導く計算も示したかったところである. しかし, 交換子の組み合わせが整理しきれないほど多かったので, これについては断念せざるを得なかった. 特別な運動量, 例えば $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ のように z 成分しか持たない場合に対しては多少計算が楽になるので, 感覚を掴みたい読者は簡略化した計算を行うのも良いだろう.

電磁場は、量子論のそもそもの発端と言ってよい **Planck** の輻射理論の主役である。しかし、場の概念に立脚する電磁場の扱いが、粒子系のハミルトニアンから出発する Schrödinger 方程式の理論と異なるために、本格的な解説は後回しにされがちだ。本書でもこれまで、粒子系の量子力学を基礎として場の量子論の説明を行ってきたために、電磁場は後回しになってしまった。

電磁場は最も身近な場と言ってよいが、一風変わった場の量子化の手続きを必要とする特殊性がある。その詳細は以下で見ていくことにしよう。

3.6.1 Maxwell 方程式

さて、電磁場、すなわち電場 \mathbf{E} と磁場 \mathbf{B} は ^{マックスウェル}Maxwell 方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{x}, t) \quad (3.6.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (3.6.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = \mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \quad (3.6.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (3.6.4)$$

に従う場のことである。 ρ, \mathbf{j} は電荷密度、電流密度を表し、定数 ϵ_0, μ_0 は真空の誘電率および透磁率と呼ばれる。Maxwell 方程式は上から順に、電荷の周りに放射状の電場が生じること、磁石は N 極と S 極が必ずセットになっていること、電流の周りに磁場が生じること（および、電荷の保存則）、磁場の変化が電場を生み出すこと（電磁誘導の法則）を表している。

Maxwell 方程式からは様々な帰結が得られるのだが、なんといっても面白いのは、電磁波の存在が言えることだろう。電荷と電流をひとまず無視すると、(3.6.3)、(3.6.4) から

$$\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) \quad (3.6.5)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = -\nabla \times \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon_0 \mu_0} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) \quad (3.6.6)$$

という式が得られるが、ここでベクトル解析の公式 $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{X}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{X}) - \nabla^2 \mathbf{X}$ と、 $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ に注意すれば、電磁場が波動方程式

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad \nabla^2 \mathbf{B} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (3.6.7)$$

に従うことがわかる。この方程式に従う電磁波の速さ、すなわち光の速さは $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ で与えられる。

波動方程式の解として例えば、波数 \mathbf{k} を持つ

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_1 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_k t), \quad \omega_k = c|\mathbf{k}| \quad (3.6.8)$$

という形を仮定すると、(3.6.1) から、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_1 = 0$ という関係が得られる。これは、ベクトル \mathbf{k} の方向に進む電磁波は、これと垂直な方向で振動する成分を持つ横波であることを表している。 \mathbf{k} と垂直な方向での振動の様式は様々で、例えば \mathbf{k} と \mathbf{E}_1 とも直交するベクトル \mathbf{E}_2 を用いて

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_1 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_k t) + \mathbf{E}_2 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_k t) \quad (3.6.9)$$

と表される解であれば、電場の向きを表すベクトル \mathbf{E} は、 \mathbf{k} を軸にして回転することになる。 $\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2$ のようなベクトルは偏極ベクトルと呼ばれ、電磁波の振動方向の偏りを記述する役割を持つ。

3.6.2 相対論的 Maxwell 方程式のラグランジアン

続いて、Maxwell 方程式を導くラグランジアンを求めよう。まずは、式を見やすくするため、Maxwell 方程式を相対論的な形式に書き換えることから始める。電磁場 \mathbf{E}, \mathbf{B} はポテンシャル ϕ, \mathbf{A} を用いて

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (3.6.10)$$

と書くことができる。このことは、(3.6.2), (3.6.4) より保証される。電磁波の計算に用いたベクトル解析の公式を用い、(3.6.1), (3.6.3) をポテンシャルに関する方程式に書き直すと、

$$\begin{aligned} -\nabla^2\phi - \frac{\partial}{\partial t}\nabla \cdot \mathbf{A} &= \frac{1}{\epsilon_0}\rho(\mathbf{x}, t) \\ \Rightarrow \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi - \nabla^2\phi - \frac{\partial}{\partial t}\left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\phi\right) &= \frac{1}{\epsilon_0}\rho(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (3.6.11)$$

$$\begin{aligned} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\phi + \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}) &= \mu_0\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \\ \Rightarrow \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{A} - \nabla^2\mathbf{A} + \nabla\left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\phi\right) &= \mu_0\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (3.6.12)$$

という形に整理できる。ここで、相対論の記法 $A^\mu = (\phi, \mathbf{A}c)$, $J^\mu = (\rho/\epsilon_0, \mu_0c\mathbf{j})$ を用いてこれらの式を書き直せば、

$$\partial_\nu\partial^\nu A^\mu - \partial^\mu\partial_\nu A^\nu = J^\mu \quad (3.6.13)$$

という、相対性原理に適った形になっていることがわかる。また、相対論の記法では電場と磁場は 2 階テンソルの成分になっており、

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -cB_z & cB_y \\ -E_y & cB_z & 0 & -cB_x \\ -E_z & -cB_y & cB_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6.14)$$

という形で表せる。このテンソルは添え字を上げると

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -cB_z & cB_y \\ E_y & cB_z & 0 & -cB_x \\ E_z & -cB_y & cB_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6.15)$$

となる。

Maxwell 方程式 (3.6.3) を導くラグランジアン密度は、これまでに見た $A^\mu, F_{\mu\nu}$ を用いて、次の形で書ける。

$$\mathcal{L} = -\frac{\epsilon_0}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \epsilon_0 J_\mu A^\mu = -\frac{\epsilon_0}{2}(-\mathbf{E}^2 + c^2\mathbf{B}^2) - \rho\phi + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} \quad (3.6.16)$$

最小作用の原理の計算は $F_{\mu\nu}$ の部分が面倒であるが、次のように行えばよい。

$$\delta \int d^3x F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = 2 \int d^3x (\partial_\mu\delta A_\nu - \delta\partial_\nu A_\mu) F^{\mu\nu} = 2 \int d^3x (\partial_\mu\delta A_\nu - \partial_\nu\delta A_\mu) F^{\mu\nu}$$

$$\begin{aligned}
&= 2 \int d^3x \partial_\mu \delta A_\nu (F^{\mu\nu} - F^{\nu\mu}) = 4 \int d^3x \partial_\mu \delta A_\nu F^{\mu\nu} \\
&= -4 \int d^3x \delta A_\nu \partial_\mu F^{\mu\nu}
\end{aligned} \tag{3.6.17}$$

和をとる添え字の読み替えや, $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$ に注意しよう.

こうして求まったラグランジアンであるが, ここから A^μ と共役な変数 $\pi_\mu = \partial\mathcal{L}/\partial(\partial_t A^\mu)$ を計算していくと, $\pi_0 = 0$ となってしまうことがわかる. これは悩ましい問題である. 量子化の際は相対性原理を考慮して, A^μ, π_μ の4成分を同じように扱いたいからだ. そこで用いるのが, π_0 が0にならないよう細工を施してから量子化を行う方法である. その方法の背景となるのが, 次に解説するゲージ変換である.

3.6.3 ゲージ変換

電場と磁場は電磁ポテンシャル A^μ を用いて表現できる. しかし, その表現方法は一通りではなく, 同じ \mathbf{E}, \mathbf{B} を与える A^μ は無数に存在することが知られている. 実際, 電磁ポテンシャルに任意の関数 λ の微分を加えても電磁場 $F_{\mu\nu}$ は変化しない. 実際,

$$A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \lambda \tag{3.6.18}$$

を電磁場の式に代入し, $\partial_\mu \partial_\nu \lambda = \partial_\nu \partial_\mu \lambda$ を用いれば

$$\begin{aligned}
F'^{\mu\nu} &= \partial_\mu A'_\nu - \partial_\nu A'_\mu = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + (\partial_\mu \partial_\nu - \partial_\nu \partial_\mu) \lambda \\
&= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = F_{\mu\nu}
\end{aligned} \tag{3.6.19}$$

となる. 電磁場を不変に保つ変換 (3.6.18) のことをゲージ変換という.

ゲージ変換をうまく用いると, ゲージ条件と呼ばれる性質をポテンシャルが満たすようにできるので, 問題の簡略化に役立つ. ゲージ条件の例としては $\partial_\mu A'^\mu = 0$ で特徴付けられる^{ローレンツ}Lorenzゲージ条件¹⁰⁾や $\nabla \cdot \mathbf{A}' = 0$ が成り立つようにする Coulomb ゲージ条件がある. 例えば Maxwell 方程式 $\partial_\nu \partial^\nu A^\mu - \partial^\mu \partial_\nu A^\nu = J^\mu$ は, Lorenz ゲージ条件 $\partial_\nu A'^\nu = 0$ が成り立つようにすれば微分演算子の構造が簡潔な $\partial_\nu \partial^\nu A'^\mu = J^\mu$ という形に直せる.

ゲージ条件を導く λ が本当に存在するかということについても触れておこう. λ が従うべき条件は, 変換後の A'^μ が満たす条件式から与えられる. 例えば Lorenz ゲージ条件の場合,

$$0 = \partial_\mu A'^\mu = \partial_\mu A^\mu + \partial_\mu \partial^\mu \lambda \tag{3.6.20}$$

という偏微分方程式によって λ が定まることになる. ちなみに, この偏微分方程式は Fourier 積分表示を行い展開係数を比較することで解くことができるので, Lorenz ゲージ条件は安心して用いてよい.

3.6.4 正準量子化

Lorenz ゲージ条件を満たす電磁ポテンシャルは

$$\partial_\nu \partial^\nu A^\mu = J^\mu \tag{3.6.21}$$

¹⁰⁾ 混同されることも多いが, Lorenz 変換の Lorenz とは別人らしい. Lorenz はローレンスと読むという話も聞く.

に従う。左辺を見ればわかるように、これは質量 0 の Klein-Gordon 方程式と同じ形になっているので、この方程式を導くラグランジアンは簡潔に

$$\mathcal{L} = -\frac{\epsilon_0}{2} \partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu - \epsilon_0 J_\mu A^\mu \quad (3.6.22)$$

と書ける。このラグランジアンであれば、 $\pi_0 = 0$ とはならないため、量子化の手続きが行える。ただし、(3.6.22) から出発して (3.6.21) を導いたとき、自動的に Lorenz ゲージ条件 $\partial_\mu A^\mu = 0$ が成り立つわけではない点には注意しよう。つまり、(3.6.22) から出発して電磁気学を論じる場合、Lorenz ゲージ条件 $\partial_\mu A^\mu = 0$ を別途付け足さなければならない。

Lorenz ゲージ条件については後述することにして、まずはラグランジアン密度 (3.6.22) から場の正準共役を計算し、量子化を行おう。 $\partial_t = c\partial^0$ に注意すれば、

$$\pi_\nu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t A^\nu)} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 A^\nu)} = -\frac{\epsilon_0}{c} \partial_0 A_\nu \quad (3.6.23)$$

となる。電磁場に付随する粒子、すなわち光子は Bose 粒子であることが知られているので、量子化の条件は

$$[\hat{A}^\mu(x), \hat{\pi}_\nu(y)] \Big|_{x^0=y^0} = i\hbar \delta^\mu_\nu \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (3.6.24)$$

$$[\hat{A}^\mu(x), \hat{A}^\nu(y)] \Big|_{x^0=y^0} = 0, \quad [\hat{\pi}_\mu(x), \hat{\pi}_\nu(y)] \Big|_{x^0=y^0} = 0 \quad (3.6.25)$$

となる。

正準交換関係が得られたので、次は生成・消滅演算子の交換関係に従う量を求めよう。 $J^\mu = 0$ の場合、Lorenz ゲージの Maxwell 方程式に従う電磁ポテンシャルおよび、その正準共役の Fourier 積分表示は、次のように書ける。

$$\hat{A}^\mu(x) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\epsilon_0 \omega_k}} (\hat{a}^\mu(\mathbf{k}) e^{-ikx} + \hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{k}) e^{ikx}) \quad (3.6.26)$$

$$\hat{\pi}^\mu(x) = i \frac{\epsilon_0}{c} \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\epsilon_0 \omega_k}} \frac{\omega_k}{c} (\hat{a}^\mu(\mathbf{k}) e^{-ikx} - \hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{k}) e^{ikx}) \quad (3.6.27)$$

ここで、計算の簡略化のため、積分中の因子は調整してある。時刻を 0 とおけば、この Fourier 積分表示から、 \hat{a} の積分表示

$$\hat{A}^\mu(x) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\epsilon_0 \omega_k}} (\hat{a}^\mu(\mathbf{k}) + \hat{a}^{\mu\dagger}(-\mathbf{k})) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.6.28)$$

$$\hat{\pi}^\mu(x) = i \frac{\epsilon_0}{c} \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\epsilon_0 \omega_k}} \frac{\omega_k}{c} (\hat{a}^\mu(\mathbf{k}) - \hat{a}^{\mu\dagger}(-\mathbf{k})) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.6.29)$$

$$\Rightarrow \hat{a}^\mu(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \omega_k}{(2\pi)^3 2\hbar c^2}} \int d^3x \left(\hat{A}^\mu(x) - \frac{ic^2}{\epsilon_0 \omega_k} \hat{\pi}^\mu(x) \right) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.6.30)$$

が得られるので、Klein-Gordon 場で行ったように、 $\hat{A}^\mu, \hat{\pi}^\mu$ の交換関係を用いて

$$[\hat{a}^\mu(\mathbf{k}), \hat{a}^{\nu\dagger}(\mathbf{q})] = -g^{\mu\nu} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad [\hat{a}^\mu(\mathbf{k}), \hat{a}^\nu(\mathbf{q})] = 0 \quad (3.6.31)$$

という交換関係が得られる。時間成分と空間成分の扱いが異なっており、 $\hat{a}^{0\dagger}, \hat{a}^i$ が消滅演算子で、 $\hat{a}^0, \hat{a}^{i\dagger}$ が生成演算子となる。

3.6.5 電磁場のハミルトニアン

続いて、電磁場のハミルトニアンを生成・消滅演算子を用いた形で求めたい。ラグランジアン密度は $\mathcal{L} = -\frac{\epsilon_0}{2}\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu$ 、正準共役は $\pi_\nu = -\frac{\epsilon_0}{c}\partial_0 A_\nu$ なので、ハミルトニアン密度の式は

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= c\hat{\pi}_\mu\partial_0\hat{A}^\mu - \hat{\mathcal{L}} \\ &= -\epsilon_0\partial_0\hat{A}_\mu\partial_0\hat{A}^\mu + \frac{\epsilon_0}{2}\partial_\mu A_\nu\partial^\mu A^\nu \\ &= -\frac{\epsilon_0}{2}\left(\partial_0\hat{A}_\mu\partial_0\hat{A}^\mu + \sum_{i=1}^3\partial_i A_\mu\partial_i A^\mu\right)\end{aligned}\quad (3.6.32)$$

と書ける。

それぞれの項に

$$\partial_\mu\hat{A}^\nu(x)\Big|_{x^0=0} = i\int\frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}}\sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\epsilon_0\omega_k}}k_\mu(-\hat{a}^\nu(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \hat{a}^{\nu\dagger}(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}})\quad (3.6.33)$$

を代入して計算すると、まず前半の項が、

$$\begin{aligned}\epsilon_0\int d^3x\partial_0\hat{A}_\mu\partial_0\hat{A}^\mu &= -\int d^3x\int\frac{d^3k d^3q}{(2\pi)^3}\frac{\hbar c^2}{2\sqrt{\omega_k\omega_q}} \\ &\quad \times k_0q_0(-\hat{a}_\mu(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}})(-\hat{a}^\mu(\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} + \hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{q})e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}) \\ &= -\int d^3k d^3q\frac{\hbar c^2}{2\omega_k}\times k_0q_0((\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(\mathbf{q}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{q}))\delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\ &\quad - (\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{q}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(\mathbf{q}))\delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q})) \\ &= -\int d^3k\frac{\hbar\omega_k}{2}(\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(-\mathbf{k}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(-\mathbf{k})) \\ &\quad + \int d^3k\frac{\hbar\omega_k}{2}(\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{k}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(\mathbf{k}))\end{aligned}\quad (3.6.34)$$

となる。続いて後半の項、 $k_iq_i\delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = -k_ik_i\delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ 、 $\sum_{i=1}^3k_ik_i = \omega_k^2/c^2$ に注意して同様の計算を行えば、

$$\begin{aligned}\epsilon_0\sum_{i=1}^3\int d^3x\partial_i\hat{A}_\mu\partial_i\hat{A}^\mu &= -\sum_{i=1}^3\int d^3k d^3q\frac{\hbar c^2}{2\omega_k}\times k_ik_i((\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(\mathbf{q}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{q}))\delta^3(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\ &\quad - (\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{q}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(\mathbf{q}))\delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q})) \\ &= \int d^3k\frac{\hbar\omega_k}{2}(\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(-\mathbf{k}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(-\mathbf{k})) \\ &\quad + \int d^3k\frac{\hbar\omega_k}{2}(\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{k}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(\mathbf{k}))\end{aligned}\quad (3.6.35)$$

となることがわかる。

これらの項を足し上げてハミルトニアンを計算すると、

$$\hat{H} = \int d^3x\hat{\mathcal{H}} = -\int d^3k\frac{\hbar\omega_k}{2}(\hat{a}_\mu(\mathbf{k})\hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{k}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\mathbf{k})\hat{a}^\mu(\mathbf{k}))$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^3 \int d^3k \frac{\hbar\omega_k}{2} (\hat{a}^i(\mathbf{k})\hat{a}^{i\dagger}(\mathbf{k}) + \hat{a}^{i\dagger}(\mathbf{k})\hat{a}^i(\mathbf{k})) \\
&\quad - \int d^3k \frac{\hbar\omega_k}{2} (\hat{a}^0(\mathbf{k})\hat{a}^{0\dagger}(\mathbf{k}) + \hat{a}^{0\dagger}(\mathbf{k})\hat{a}^0(\mathbf{k}))
\end{aligned} \tag{3.6.36}$$

という結果が得られる。これを見ると、時間成分の \hat{a}^0 を含む部分が負エネルギー項になっていることがわかる。この負エネルギー問題は、次の節で Lorenz ゲージ条件を用いることで解決を見る。

3.6.6 Lorenz ゲージ条件の導入

これまで、ラグランジアンを書き換え、量子化を行い、ハミルトニアンを計算を行った。その結果、負エネルギー問題が現れたので、最後の仕上げとして、Lorenz ゲージ条件の導入を行い、この問題を取り除くことにしたい。

場の量子論における Lorenz ゲージ条件は、 $\partial_\mu \hat{A}^\mu = 0$ とでもなるのだろうか。しかし、左辺の演算子の Fourier 積分表示は

$$\partial_\mu \hat{A}^\mu(x) = i \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\epsilon_0 \omega_k}} k_\mu (-\hat{a}^\mu(\mathbf{k})e^{-ikx} + \hat{a}^{\mu\dagger}(\mathbf{k})e^{ikx}) \tag{3.6.37}$$

であり、明らかに 0 ではないように見える。

0 でない演算子が 0 となる。一見矛盾した状況ではあるが、これを実現するトリックを考えることはできる。例えば、次の行列とベクトルを考えてみよう。

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, |e_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |e_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |e_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

今、明らかに $\hat{A} \neq 0$ ではある。しかし、話を $|e_1\rangle, |e_2\rangle$ の重ね合わせで書けるベクトル空間に限定したらどうだろう。 \hat{A} の振る舞いは実質 0 と同じになる。つまり、演算子の振る舞いは状態ベクトルの使用方法、すなわち重ね合わせの原理に制限をかけることである程度コントロールできるのである。

完全系を成す状態ベクトル $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^\infty$ が与えられているとき、演算子 \hat{A} の性質は行列要素 $\langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle$ によって規定される。 $\hat{A} = 0$ という条件を課したい場合は、任意の状態 $|\phi_i\rangle, |\phi_j\rangle$ を選んだ時に、必ず $\langle\phi_i|\hat{A}|\phi_j\rangle = 0$ が成り立つようにベクトルの集合 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^\infty$ を選び、この集合を用いて状態空間を構成すればよい。もちろん、このようなベクトルの集合が見つからない場合もあるだろうが、電磁場の場合は幸い、適切な状態ベクトルの選定が可能である。

方針が見えたところで、Lorenz ゲージ条件を要請してみよう。ただし、数学的な扱いは生成・消滅演算子のほうがイメージしやすいので、Lorenz ゲージ条件の代わりに、条件

$$\langle\psi|k_\mu \hat{a}^\mu(\mathbf{k})|\phi\rangle = \langle\psi|\left(k_0 \hat{a}^0(\mathbf{k}) + \sum_{i=1}^3 k_i \hat{a}^i(\mathbf{k})\right)|\phi\rangle = 0 \tag{3.6.38}$$

を課すことにする。この条件を考える際は、3 つの互いに直交する単位ベクトル $\ell =$

$(\ell^1, \ell^2, \ell^3), \mathbf{m} = (m^1, m^2, m^3), \mathbf{n} = (n^1, n^2, n^3) = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ を用いて, 新しい演算子

$$\begin{pmatrix} \hat{c}^0(\mathbf{k}) \\ \hat{c}^1(\mathbf{k}) \\ \hat{c}^2(\mathbf{k}) \\ \hat{c}^3(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ell^1 & \ell^2 & \ell^3 \\ 0 & m^1 & m^2 & m^3 \\ 0 & n^1 & n^2 & n^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}^0(\mathbf{k}) \\ \hat{a}^1(\mathbf{k}) \\ \hat{a}^2(\mathbf{k}) \\ \hat{a}^3(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{a}^0(\mathbf{k}) \\ \sum_{i=1}^3 \ell^i \hat{a}^i(\mathbf{k}) \\ \sum_{i=1}^3 m^i \hat{a}^i(\mathbf{k}) \\ \sum_{i=1}^3 n^i \hat{a}^i(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (3.6.39)$$

を導入するのが便利である. 一般的に

$$[A_\mu \hat{a}^\mu(\mathbf{k}), B_\nu \hat{a}^{\nu\dagger}(\mathbf{q})] = -A_\mu B_\nu g^{\mu\nu} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = -A_\mu B^\mu \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \quad (3.6.40)$$

という式が成り立つことから, これら新しい演算子は, 元の生成・消滅演算子と同じ交換関係

$$[\hat{c}^\mu(\mathbf{k}), \hat{c}^{\nu\dagger}(\mathbf{q})] = -g^{\mu\nu} \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad [\hat{c}^\mu(\mathbf{k}), \hat{c}^\nu(\mathbf{q})] = 0 \quad (3.6.41)$$

に従う. また, 生成・消滅演算子の変換行列とその転置行列

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ell^1 & \ell^2 & \ell^3 \\ 0 & m^1 & m^2 & m^3 \\ 0 & n^1 & n^2 & n^3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ell^1 & m^1 & n^1 \\ 0 & \ell^2 & m^2 & n^2 \\ 0 & \ell^3 & m^3 & n^3 \end{pmatrix} \quad (3.6.42)$$

が逆行列となっているので, 空間部分の 2 乗の和は変化しない. すなわち, $\sum_{i=1}^3 \hat{a}^i \hat{a}^i = \sum_{i=1}^3 \hat{c}^i \hat{c}^i$ などが成り立つので, 新しい演算子を用いてもハミルトニアンは変わらない.

この新しい生成・消滅演算子を用いると, 条件 (3.6.38) は

$$\langle \psi | (\hat{c}^0(\mathbf{k}) - \hat{c}^3(\mathbf{k})) | \phi \rangle = 0 \quad (3.6.43)$$

と書ける. この条件によって負エネルギー問題が解決することを見よう. ハミルトニアン

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i=1}^3 \int d^3k \frac{\hbar\omega_k}{2} (\hat{c}^i(\mathbf{k}) \hat{c}^{i\dagger}(\mathbf{k}) + \hat{c}^{i\dagger}(\mathbf{k}) \hat{c}^i(\mathbf{k})) \\ &\quad - \int d^3k \frac{\hbar\omega_k}{2} (\hat{c}^0(\mathbf{k}) \hat{c}^{0\dagger}(\mathbf{k}) + \hat{c}^{0\dagger}(\mathbf{k}) \hat{c}^0(\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (3.6.44)$$

の一部, $\hat{c}^3(\mathbf{k}) \hat{c}^{3\dagger}(\mathbf{k}) - \hat{c}^0(\mathbf{k}) \hat{c}^{0\dagger}(\mathbf{k})$ を取り出して考えてみる. (3.6.43) が成り立つ状態空間の完全正規直交系を $\{|\psi_n\rangle\}_n$ で表すと, 完全性条件 $\hat{I} = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ から,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{c}^3(\mathbf{k}) \hat{c}^{3\dagger}(\mathbf{k}) | \phi \rangle &= \sum_n \langle \psi | \hat{c}^3(\mathbf{k}) | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{c}^{3\dagger}(\mathbf{k}) | \phi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | \hat{c}^0(\mathbf{k}) | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{c}^{0\dagger}(\mathbf{k}) | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{c}^0(\mathbf{k}) \hat{c}^{0\dagger}(\mathbf{k}) | \phi \rangle \end{aligned} \quad (3.6.45)$$

という関係が言えるので, \hat{c}^3 が担う自由度が, ハミルトニアンの行列要素から負エネルギー項の寄与を打ち消すことがわかる.

続いて, 肝心の (3.6.43) を満たす状態空間の存在を示しておこう. 多粒子系の状態は一般に, 真空 $|0\rangle$ に生成演算子を掛けることで構成できるので, \mathbf{k} を省略すると, 次のような形になる.

$$|n_0, n_1, n_2, n_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_0! n_1! n_2! n_3!}} (\hat{c}^0)^{n_0} (\hat{c}^{1\dagger})^{n_1} (\hat{c}^{2\dagger})^{n_2} (\hat{c}^{3\dagger})^{n_3} |0\rangle \quad (3.6.46)$$

目的とする状態空間の構成方法の一つは, $n_0, n_3 = 0$ となる状態のみを用いることだ. こうすると

$$\langle 0, n_1, n_2, 0 | \hat{c}^0 = \langle \emptyset |, \quad \hat{c}^3 | 0, n_1, n_2, 0 \rangle = | \emptyset \rangle \quad (3.6.47)$$

が成り立つから, 行列要素から \hat{c}^0, \hat{c}^3 が完全に消え, Lorenz ゲージ条件が成り立つ.

\hat{c}^0, \hat{c}^3 を消し去る方法の他にも Lorenz ゲージ条件を成り立たせる方法はあるかもしれないが, 話が複雑かつ不毛な方向に進むと思われるので, 考えないことにしたい. ただ, $\hat{c}^0, \hat{c}^3 = 0$ という条件が持つ意味を理解すれば, これらの項の扱いがそれほど重要な問題でないことがわかるので, 少し解説しておこう. $\hat{c}^0, \hat{c}^3 = 0$ となる状態空間では電磁ポテンシャルの時間成分について $\hat{A}^0 = 0$ が成り立ち, 空間成分は, $\hat{a}^i = \ell^i \hat{c}^1 + m^i \hat{c}^2$ を $\hat{a}^i = \sum_{a=1,2} E_a^i(\mathbf{k}) \hat{c}^a$ と書き表すことで,

$$\hat{A}^i(x) = \sum_{a=1,2} \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\epsilon_0 \omega_k}} E_a^i(\mathbf{k}) (\hat{c}^a(\mathbf{k}) e^{-ikx} + \hat{c}^{a\dagger}(\mathbf{k}) e^{ikx}) \quad (3.6.48)$$

または

$$\hat{A}(x) = \sum_{a=1,2} \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k}} \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) (\hat{c}^a(\mathbf{k}) e^{-ikx} + \hat{c}^{a\dagger}(\mathbf{k}) e^{ikx}) \quad (3.6.49)$$

と書ける¹¹⁾. \mathbf{k} と直交するベクトルである \mathbf{E}_a はすなわち, 偏極ベクトルに他ならない. つまり, 条件 $\hat{c}^0, \hat{c}^3 = 0$ は電磁ポテンシャルから偏極ベクトル以外の余分な項を取り除く役割を持つ. \hat{c}^0, \hat{c}^3 を含む項が残る場合であっても, Lorenz ゲージ条件が成り立ってさえいれば, 電場, 磁場が 2 つの偏極ベクトルの重ね合わせで書けることは変わらないから, 少なくとも荷電粒子と電磁場の相互作用を考えないうちは, \hat{c}^0, \hat{c}^3 の扱いについてそれほど神経質にならなくてよい.

最後に (3.6.46) に関連して, 注釈を述べておきたい. 本書では交換関係の形を基準に $\hat{a}^{0\dagger}$ が消滅演算子だと考えており, 真空の性質として

$$\hat{a}^{0\dagger} | 0 \rangle = | \emptyset \rangle, \quad \hat{a}^i | 0 \rangle = | \emptyset \rangle \quad (3.6.50)$$

が成り立つものとしている. 一方, 多数の他の文献では真空の性質として

$$\hat{a}^\mu | 0 \rangle = | \emptyset \rangle \quad (3.6.51)$$

が成り立つことを要請して話を進めている. この場合多粒子状態は

$$| n_0, n_1, n_2, n_3 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_0! n_1! n_2! n_3!}} (\hat{c}^{0\dagger})^{n_0} (\hat{c}^{1\dagger})^{n_1} (\hat{c}^{2\dagger})^{n_2} (\hat{c}^{3\dagger})^{n_3} | 0 \rangle \quad (3.6.52)$$

と与えられる. あえて多数派と異なる話の進め方をしたが, これは別に多数派が間違っている! と主張したいわけではなく, 単に形式を重んじる本書の趣味に合わせただけである. まあ, どうせ無視できる項の問題なので, どちらでも良いだろうというのが本音だ. 実際, どちらの方法も一長一短で, どちらが正しいとは言い難い. 本書の方法では, Lorentz 変換をしたとき $\hat{a}^{0\dagger}$ に生成演算子 $\hat{a}^{i\dagger}$ が混ざってしまう点が悩ましい. 真空に生成演算子を掛けた結果を $| \emptyset \rangle$ として良いのか, ということだ. 他の文献で用いられている方法ではこの問題は生じないが, 内積の正定値性と反する式

$$\langle 0 | \hat{a}^0 \hat{a}^{0\dagger} | 0 \rangle = \langle 0 | (-\delta^3(0) + \hat{a}^{0\dagger} \hat{a}^0) | 0 \rangle = -\delta^3(0) \langle 0 | 0 \rangle < 0 \quad (3.6.53)$$

¹¹⁾ ここで, $\mathbf{E}_1(\mathbf{k}) = \mathbf{l}, \mathbf{E}_2(\mathbf{k}) = \mathbf{m}$ である.

が成り立ってしまう負ノルムの問題が生じる。このように、電磁場の定式化には奥深い数学的な問題が付きまとうのだが、どうせ無視できる項の話なので、深入りするのはやめておこう。鶏を割くのに牛刀を用いることなかれ。物理的に意味のない問題にこだわって数学に凝ることなかれ。

3.6.7 電荷の保存則

電磁場の量子化の手続きについて一通り見たので、これまで無視してきた電荷、電流の項の扱いについても触れておくことにしよう。

最も身近な荷電粒子、すなわち電子に対応する場は Dirac 場であり、Dirac 場に対する電磁場の影響は、微分の項を置き換えるだけで簡単に取り入れることができる。(2.8.46)を参考にすれば、電磁場が存在する場合の Dirac 場のハミルトニアンは

$$\hat{H}_D = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \left(-i\hbar c \sum_{i=1}^3 \gamma^0 \gamma^i \left(\partial_i + \frac{ie}{\hbar c} \hat{A}^i(x) \right) + mc^2(\gamma^0) - e\hat{A}^0(x) \right) \hat{\psi}(x) \quad (3.6.54)$$

となる。電磁場と Dirac 場の相互作用を表す項を取り出せば¹²⁾

$$\begin{aligned} \hat{H}_I &= \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \left(e \sum_{i=1}^3 \gamma^0 \gamma^i \hat{A}^i(x) - e\hat{A}^0(x) \right) \hat{\psi}(x) \\ &= -e \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^\mu \hat{\psi}(x) \hat{A}_\mu(x) \end{aligned} \quad (3.6.55)$$

が荷電粒子と電磁場の相互作用を表すことになる。

Maxwell 方程式を導くラグランジアン密度

$$\mathcal{L} = -\frac{\epsilon_0}{2} \partial_\mu A_\nu \partial^\mu A^\nu - \epsilon_0 J^\mu A_\mu$$

と \hat{H}_I を比較すると、次の対応関係が得られる。

$$\begin{aligned} \epsilon_0 \int d^3x J^\mu A_\mu &\leftrightarrow -e \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^\mu \hat{\psi}(x) \hat{A}_\mu(x) \\ \Rightarrow J^\mu(x) &\leftrightarrow -\frac{e}{\epsilon_0} \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^\mu \hat{\psi}(x) \end{aligned} \quad (3.6.56)$$

ここで、 $J^\mu = (\rho/\epsilon_0, \mu_0 c \mathbf{j})$ という定義を思い出せば、電荷密度を表す演算子は $\hat{\rho}(x) = -e\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)$ と書けるので、系全体に存在する電荷の総量を表す演算子は

$$\hat{Q}(t) = -e \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \quad (3.6.57)$$

となる。

場の量子論においても、電荷は保存量である。すなわち、 $\hat{Q}(t)$ とハミルトニアンは可換である。Dirac 場、電磁場および、その間の相互作用を取り入れたハミルトニアンは次の式で与えられる。

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \left(-i\hbar c \sum_{i=1}^3 \gamma^0 \gamma^i \partial_i + mc^2(\gamma^0) \right) \hat{\psi}(x)$$

¹²⁾ 電磁場の演算子と Dirac 場の演算子は交換するものとして計算を行っている。

$$\begin{aligned}
& -\frac{\epsilon_0}{2} \int d^3x \left(\partial_0 \hat{A}_\mu \partial_0 \hat{A}^\mu + \sum_{i=1}^3 \partial_i A_\mu \partial_i A^\mu \right) \\
& - e \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^\mu \hat{\psi}(x) \hat{A}_\mu(x)
\end{aligned} \tag{3.6.58}$$

電磁場の演算子と $\hat{Q}(t)$ が交換することは自明である。一方, Dirac 場の演算子を含む, $\hat{A} = \hat{\psi}_a^\dagger(x) \Gamma_{ab} \hat{\psi}_b(x)$, $\hat{B} = \hat{\psi}_a^\dagger(x) \Gamma_{ab} \partial_\mu \hat{\psi}_b(x)$ という形の演算子の計算に関しては, 正準反交換関係を変形した式

$$\hat{\psi}_a(x) \hat{\psi}_b^\dagger(y) = -\hat{\psi}_b^\dagger(y) \hat{\psi}_a(x) + \delta_{ab} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \hat{\psi}_a(x) \hat{\psi}_b(y) = -\hat{\psi}_b(y) \hat{\psi}_a(x) \tag{3.6.59}$$

を用いて得られる交換関係

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}_a(x), \hat{Q}(t)] &= -e \sum_b \int d^3y \left(\hat{\psi}_a(x) \hat{\psi}_b^\dagger(y) \hat{\psi}_b(y) - \hat{\psi}_b^\dagger(y) \hat{\psi}_b(y) \hat{\psi}_a(x) \right) \\
&= -e \sum_b \int d^3y \hat{\psi}_b(y) \delta_{ab} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = -e \hat{\psi}_a(x)
\end{aligned} \tag{3.6.60}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\psi}_a^\dagger(x), \hat{Q}(t)] &= -e \sum_b \int d^3y \left(\hat{\psi}_a^\dagger(x) \hat{\psi}_b^\dagger(y) \hat{\psi}_b(y) - \hat{\psi}_b^\dagger(y) \hat{\psi}_b(y) \hat{\psi}_a^\dagger(x) \right) \\
&= -e \sum_b \int d^3y \left(-\hat{\psi}_b^\dagger(y) \delta_{ab} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right) = e \hat{\psi}_a^\dagger(x)
\end{aligned} \tag{3.6.61}$$

が役立つ。この式を用いれば, $[\hat{Q}(t), \hat{A}] = 0$, $[\hat{Q}(t), \hat{B}] = 0$ を示すのは容易である。

ちなみに, Dirac 場の Fourier 積分表示を $\hat{Q}(t)$ に代入すると, 次の結果が得られる.¹³⁾

$$\hat{Q}(t) = -e \sum_{s=1,2} \int d^3k \left(\hat{a}_s^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}_s(\mathbf{k}) - \hat{b}_s^\dagger(\mathbf{k}) \hat{b}_s(\mathbf{k}) + \delta^3(\mathbf{0}) \right) \tag{3.6.62}$$

計算上生じる $\delta^3(\mathbf{0})$ を無視すると, $\hat{Q}(t)$ の固有値は $-e \times (\text{電子の数} - \text{陽電子の数})$ となる。これは陽電子が電子と逆符号の電荷を持つことを表している。

3.7 第3章のまとめ

第3章では, Hamilton 形式のアナロジーを頼りに, 場 (波動) を扱う量子力学の枠組みを設定し, その結果として, 弦の振動に物質波, 相対論的な場を含む幅広い系のハミルトニアンが「 $\hbar\omega \times$ 粒子数」の形に帰着することを見た。これら, 全く異なる場の間に, このような普遍性が成り立つことは驚くべき結果である。

第2章からの宿題としては, 統計性の扱い方と負エネルギー問題の話題を扱った。場の量子論における粒子の統計性は, 定式化の段階で考えるべき基本的な概念となっている。この点は, 統計性を考えなくてもある程度の議論が行える質点系とは対照的である。負エネルギー問題が解消することを示す際には, Klein-Gordon 場と Dirac 場の統計性が制限されることを見た。これは相対論的な場が持つ性質にも関係する話であり, 第2章からの宿題であるスピンの扱いと共に, 第4章で掘り下げることにする。

¹³⁾ ここでは話を簡単にするために, 電磁場の存在を無視した Dirac 場の関係式を用いている。

第3章は次の2冊

- [1] 柏太郎『新版 演習 場の量子論』(株式会社サイエンス社 2009 新版第2刷発行)
- [2] 江澤潤一『量子場の理論』(現代物理学 [基礎シリーズ]) (朝倉書店 2008 初版第1刷)

を参考に, 詳細を埋める形で書いた. 省略した話題も多いので, 参考にしてほしい.

第 4 章

スピン・統計定理

第 3 章では負エネルギー問題の観点から、Klein-Gordon 場や Dirac 場の統計性が決定されることを見た。場のモデルに応じて粒子の統計性が決まることは相対論的場の量子論の大きな特徴である。一般に、粒子の統計性は、その粒子のスピン大きさが整数 $0, 1, 2, \dots$ なら Bose 統計、半整数 $1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ならば Fermi 統計となることが知られている。この法則はスピン・統計定理と呼ばれる。スピン・統計定理は電子や光子や音子、陽子と中性子およびこれらから成り立つ原子核を始めとする、幅広い粒子に対し成り立つ普遍的な法則である。この章では、スピンおよび統計性の話の締めくくりとして、個々のモデルを超えてスピン・統計定理が成り立つ理由を解説する。

スピン・統計定理の証明において基本的な役割を演じるのは、相対性原理に基づくスピノルの変換則である。スピノルの例は第 2 章の Dirac 方程式のところでも見たが、この章ではより一般的・体系的にスピノルというものを論じることになる。その他、計算を進めるうえで必要な、角運動量の扱いについても掘り下げを行う。

4.1 Lorentz 変換の表現論

4.1.1 Lorentz 変換の分解

角運動量と同じ交換関係 $[A_i, A_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} A_k$ に従う量のことを角運動量代数という。角運動量代数 A は例えば行列であったり演算子であったりするのだが、交換関係が同じならば扱いもあまり変わらない。角運動量とは無関係な問題であっても、変形によって角運動量代数の問題に帰着できることは多く、その場合は、角運動量の知識を解析に役立てることができる。

第 2 章では発見的なやり方で、テンソルの枠に収まらない変換則に従う量、スピノルが存在することを示したが、この章ではもう少し系統的に、角運動量代数の知識を用いてスピノルの構成を行いたい。その第一歩として、Lorentz 変換の理論を角運動量代数の言葉に翻訳することを考えよう。

無限小 Lorentz 変換は、 $\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu}$ を満たす行列と無限小パラメータ ϵ を用いて $\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \epsilon \omega^\mu{}_\nu$ という形で与えられ、一般の Lorentz 変換は無限小変換を繰り返すことで得られる。Lorentz 変換を特徴付ける行列 $\omega^\mu{}_\nu$ と角運動量代数の関係を示すため、まずは、この行列を次の形で表すことにしよう。

$$\omega^\mu{}_\nu = -\frac{i}{2} \omega_{\rho\sigma} (M^{\rho\sigma})^\mu{}_\nu, \quad (M^{\rho\sigma})^\mu{}_\nu = i (g^{\mu\rho} \delta^\sigma{}_\nu - g^{\mu\sigma} \delta^\rho{}_\nu) \quad (4.1.1)$$

やや天下一の導入となったが、右の式で定義された $(M^{\rho\sigma})^\mu{}_\nu$ を左の式に代入すると、確かに等号が成り立つことが確かめられる。複素数を導入したのは、角運動量代数に話を持っていくためである。

(4.1.1) の意味についても簡単に触れておきたい。 $(M^{\rho\sigma})^\mu{}_\nu$ を書き下すと

$$\begin{aligned} (M^{10})^\mu{}_\nu &= i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & (M^{20})^\mu{}_\nu &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ (M^{30})^\mu{}_\nu &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & (M^{32})^\mu{}_\nu &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ (M^{13})^\mu{}_\nu &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & (M^{21})^\mu{}_\nu &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

となるが、これらはそれぞれ、 x, y, z 軸方向への Lorentz ブーストと、 x, y, z 軸周りの回転に対応していることがわかる。すなわち、(4.1.1) は無限小 Lorentz 変換を表す $\omega^\mu{}_\nu$ を基本的な 6 つの変換の重ね合わせで表したことに相当する。

ここで、行列 M 同士の交換関係について考えよう。添え字の構造を角運動量代数と揃えるため、ブーストと回転に対応する行列を $K_1 = -M^{10}, K_2 = -M^{20}, K_3 = -M^{30}, J_1 = -M^{32}, J_2 = -M^{13}, J_3 = -M^{21}$ と表せば、次の結果が得られる。

$$[K_i, K_j] = -i \sum_k \epsilon_{ijk} J_k, \quad [K_i, J_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} K_k, \quad [J_i, J_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} J_k \quad (4.1.3)$$

交換子の組み合わせは K 同士、 J 同士の計 6 通りと、 K, J の組み合わせの 9 通り、計 15 通りあって面倒だが、計算自体は単純なので、各自で確認してもらいたい。また、2 番目の交換関係から $[K_i, J_j] = [J_i, K_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} K_k$ が成り立つことにも注意しよう。

座標系の回転に相当する J_i の交換関係は角運動量代数と同じであるが、ブーストを含む部分はそうではない。Lorentz 変換を角運動量代数に帰着させるためには、さらに、次のような変換を行えばよい。

$$A_i = \frac{1}{2}(J_i + iK_i), \quad B_i = \frac{1}{2}(J_i - iK_i) \quad (4.1.4)$$

このように定義された行列 A_i, B_j の交換関係を調べると、次の結果が得られる。

$$[A_i, A_j] = \frac{1}{4}[J_i + iK_i, J_j + iK_j] = \frac{i}{4} \sum_k \epsilon_{ijk} (2J_k + 2iK_k) = i \sum_k \epsilon_{ijk} A_k, \quad (4.1.5)$$

$$[B_i, B_j] = \frac{1}{4}[J_i - iK_i, J_j - iK_j] = \frac{i}{4} \sum_k \epsilon_{ijk} (2J_k - 2iK_k) = i \sum_k \epsilon_{ijk} B_k, \quad (4.1.6)$$

$$[A_i, B_j] = \frac{1}{4}[J_i + iK_i, J_j - iK_j] = 0 \quad (4.1.7)$$

こうして、Lorentz 変換が 2 つの独立な角運動量代数 A_i, B_i に分解されることがわかった。

ここで後の議論のため、 A_i, B_i を用いて Lorentz 変換を書き直しておこう。6 つのパラメータ $\omega_{\rho\sigma}$ を $\omega_i = a\omega_{i0}, \theta_1 = -a\omega_{23}, \theta_2 = -a\omega_{31}, \theta_3 = -a\omega_{12}$ と表し、 $K_i =$

$-M^{i0}, J_1 = M^{23}, J_2 = M^{31}, J_3 = M^{12}$ および, $J_i = A_i + B_i, iK_i = A_i - B_i$ に注意して変形を行う. 得られるのは次の結果である.

$$\begin{aligned}\Lambda^\mu{}_\nu &= (\exp[a\omega])^\mu{}_\nu = \left(\exp \left[-\frac{i}{2} a\omega_{\rho\sigma} M^{\rho\sigma} \right] \right)^\mu{}_\nu \\ &= \left(\exp \left[i \sum_{i=1}^3 (\omega_i K_i + \theta_i J_i) \right] \right)^\mu{}_\nu \\ &= \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 (\omega_i (A_i - B_i) + i\theta_i (A_i + B_i)) \right] \right)^\mu{}_\nu \\ &= \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 ((\omega_i + i\theta_i) A_i + (i\theta_i - \omega_i) B_i) \right] \right)^\mu{}_\nu\end{aligned}\quad (4.1.8)$$

4.1.2 Lorentz 変換の表現

スピノルの定式化は角運動量代数 A_i, B_i (これらは **A** スピン, **B** スピンと呼ばれる) の助けを借りて行われるのだが, その方法を説明する前に, **Lorentz 変換の表現**の話をおきたい. ここで言う表現というのは, 様々な計算規則に潜む法則性を探求する代数学の用語である. 代数学では実数や複素数, ベクトルや行列など一定の計算規則に従うものの集合を群, 環, 体といったカテゴリーに分類してその性質を論じる. その中に, 群, 環, 体といった代数学の対象を行列を用いて表す方法について論じる分野があり, それを表現論という.

表現論の考えは物理学ではありふれたものであり, 言われなければ気付かないほどである. Lorentz 変換を例に考えてみよう. 3つの慣性系 S, S', S'' を考え, S と S', S' と S'', S と S'' を結ぶ Lorentz 変換を Λ, Θ, Ξ で表すことにする. 変換 Ξ を行うことは2つの変換 Λ, Θ を行うことと等価であるから, このことを $\Xi = \Theta\Lambda$ と表すことにする. Lorentz 変換の具体的な形は, S と S', S' と S'' のベクトルの変換則

$$V'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu V^\nu, \quad V''^\mu = \Theta^\mu{}_\nu V'^\nu = \Theta^\mu{}_\rho \Lambda^\rho{}_\nu V^\nu = \Xi^\mu{}_\nu V^\nu \quad (4.1.9)$$

に現れる変換行列によって指定されるが, このとき既に, 例えば慣性系 S と S' を結び付ける役割をする変換 Λ が行列 $\Lambda^\mu{}_\nu$ で“表現”されたことになる.

ここで, $\Xi = \Theta\Lambda$ に対応する変換行列は Θ, Λ に対応する行列の積になっている. 表現の概念はこの性質を抽象化したものであり, その定義を述べると次のようになる.

用語 11 Lorentz 変換の表現

任意の Lorentz 変換 Λ, Θ に対し

$$D(\Theta\Lambda)^i{}_k = \sum_j D(\Theta)^i{}_j D(\Lambda)^j{}_k \quad (4.1.10)$$

を満たす行列 $D(\Lambda)^i{}_j, D(\Theta)^i{}_j$ が定まるとき, Lorentz 変換と行列の対応付け $D: \Lambda \mapsto D(\Lambda)^i{}_j$ を **Lorentz 変換の表現** といい, $D(\Lambda)^i{}_j$ を Λ の表現行列という.

ベクトルの変換則における対応付け $\Lambda \mapsto \Lambda^\mu{}_\nu$ は最も基本的な Lorentz 変換の表現であるが, Lorentz 変換の表現はこれに留まらない. 例えば2階の反変テンソルは

$$\begin{aligned}T'^{\mu\nu} &= \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\sigma T^{\rho\sigma} \\ T''^{\mu\nu} &= \Theta^\mu{}_\rho \Theta^\nu{}_\sigma T'^{\rho\sigma} = \Theta^\mu{}_\rho \Theta^\nu{}_\sigma \Lambda^\rho{}_\alpha \Lambda^\sigma{}_\beta T^{\alpha\beta} \\ &= (\Theta^\mu{}_\rho \Lambda^\rho{}_\alpha) (\Theta^\nu{}_\sigma \Lambda^\sigma{}_\beta) T^{\alpha\beta} = \Xi^\mu{}_\alpha \Xi^\nu{}_\beta T^{\alpha\beta}\end{aligned}$$

という変換則に従うが、ここで添え字の組を1文字で $i = (\mu, \nu), j = (\rho, \sigma), k = (\alpha, \beta)$ などと表し、

$$i = 1, 2, 3, \dots, 16 \leftrightarrow (\mu, \nu) = (0, 0), (0, 1), (0, 2), (0, 3), (1, 0), (1, 1), \dots, (3, 3)$$

というような順番を付けたとき、 $D(\Lambda)^i_j = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma$ で定義される 16×16 正方行列 D が

$$D(\Theta\Lambda)^i_k = \sum_j D(\Theta)^i_j D(\Lambda)^j_k \quad (4.1.11)$$

を満たすことがわかる。すなわち、これも一種の Lorentz 変換の表現となっている。他に、Lorentz 変換の種類に関わらず $D(\Lambda) = 1$ とすれば、 $D(\Theta\Lambda) = 1 = 1 \times 1 = D(\Theta)D(\Lambda)$ が成り立つから、これも一種の表現であると言える。 $D(\Lambda) = 1$ とするこの表現はスカラーの変換則に対応する。

4.1.3 表現に潜むスピノル

Lorentz 変換の表現にはスカラー、ベクトル、テンソルの変換則が内包されることがわかったので、続いて、スピノルの変換則が Lorentz 変換の表現に含まれていることを示そう。ここで Lorentz 変換が角運動量代数 A_i, B_i に帰着するという事実が役立つ。

まずは、 A_i, B_i の表現行列 $D(A_i), D(B_i)$ を一般的な形で表しておきたい。これには第2章の角運動量の知識が役立つので、復習から話を始めよう。交換関係 $[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{\ell}_k$ に従う Hermite 演算子には

$$\sum_{i=1}^3 \hat{\ell}_i^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle, \quad \hat{\ell}_3 |l, m\rangle = m |l, m\rangle \quad (4.1.12)$$

を満たす固有状態 $|l, m\rangle$ が存在するのであった。 $\hat{\ell}_3$ がスピンを表す場合も考慮すれば、角運動量の大きさ l の値は $l = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ に、 m の値は $2l + 1$ 個の値 $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ に制限される。また、固有状態が規格化されていれば、昇降演算子 $\hat{\ell}_\pm = \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y$ の性質として

$$\hat{\ell}_\pm |l, m\rangle = C_\pm(l, m) |l, m \pm 1\rangle, \quad C_\pm(l, m) = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \quad (4.1.13)$$

が成り立つ。昇降演算子の係数は $C_+(l, l) = C_+(l, -l-1) = C_-(l, -l) = C_-(l, l+1) = 0$ を満たすので、 m が絶対値が l より大きくなることはない。角運動量の大きさ l を固定すれば、 $\hat{\ell}_3, \hat{\ell}_\pm$ の行列要素は、

$$\langle l, m | \hat{\ell}_3 | l, m' \rangle = m \delta_{m, m'}, \quad \langle l, m | \hat{\ell}_\pm | l, m' \rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \delta_{m, m' \pm 1} \quad (4.1.14)$$

で与えられる。 $\hat{\ell}_1, \hat{\ell}_2$ の行列要素もこの式から導くことができる。

2種類の可換な角運動量演算子 \hat{A}, \hat{B} がある場合、系の状態はこれらの規格化された固有状態 $|A, a, B, b\rangle$ の重ね合わせで書くことができる。これら固有状態の性質は

$$\sum_{i=1}^3 \hat{A}_i^2 |A, a, B, b\rangle = A(A+1) |A, a, B, b\rangle, \quad \hat{A}_3 |A, a, B, b\rangle = a |A, a, B, b\rangle \quad (4.1.15)$$

$$\sum_{i=1}^3 \hat{B}_i^2 |A, a, B, b\rangle = B(B+1) |A, a, B, b\rangle, \quad \hat{B}_3 |A, a, B, b\rangle = b |A, a, B, b\rangle \quad (4.1.16)$$

$$\hat{A}_\pm |A, a, B, b\rangle = \sqrt{(A \mp a)(A \pm a + 1)} |A, a \pm 1, B, b\rangle \quad (4.1.17)$$

$$\hat{B}_\pm |A, a, B, b\rangle = \sqrt{(B \mp b)(B \pm b + 1)} |A, a, B, b \pm 1\rangle \quad (4.1.18)$$

と書き下せる. 添え字が多くて面倒なので, 角運動量の大きさ A, B を固定して $|A, a, B, b\rangle = |a, b\rangle$ と略記しよう. こうすると, \hat{A}, \hat{B} の行列要素は

$$\langle ab | \hat{A}_3 | a' b' \rangle = a \delta_{a, a'} \delta_{b, b'}, \quad \langle ab | \hat{B}_3 | a' b' \rangle = b \delta_{a, a'} \delta_{b, b'}, \quad (4.1.19)$$

$$\langle ab | \hat{A}_\pm | a' b' \rangle = \sqrt{(A \mp a)(A \pm a + 1)} \delta_{a, a' \pm 1} \delta_{b, b'} \quad (4.1.20)$$

$$\langle ab | \hat{B}_\pm | a' b' \rangle = \sqrt{(B \mp b)(B \pm b + 1)} \delta_{a, a'} \delta_{b, b' \pm 1} \quad (4.1.21)$$

となる.

ここまで来れば, A_i, B_i の表現行列 $D(A_i), D(B_i)$ を定義することは容易い. 要は, 先ほど見た可換な角運動量 \hat{A}, \hat{B} の行列要素を用いて

$$D(A_3)_{ab; a' b'} = a \delta_{a, a'} \delta_{b, b'}, \quad D(B_3)_{ab; a' b'} = b \delta_{a, a'} \delta_{b, b'}, \quad (4.1.22)$$

$$D(A_1 \pm i A_2)_{ab; a' b'} = \sqrt{(A \mp a)(A \pm a + 1)} \delta_{a, a' \pm 1} \delta_{b, b'} \quad (4.1.23)$$

$$D(B_1 \pm i B_2)_{ab; a' b'} = \sqrt{(B \mp b)(B \pm b + 1)} \delta_{a, a'} \delta_{b, b' \pm 1} \quad (4.1.24)$$

という, 4つの添え字を持った“行列”を導入し, これらの“行列”の積を

$$(D(X)D(Y))_{ab; a' b'} = \sum_{a'', b''} D(X)_{ab; a'' b''} D(Y)_{a'' b''; a' b'} \quad (4.1.25)$$

という計算規則で定義してやればよい. 添え字の組 ab や $a' b'$ は, 表現行列の成分を指定する $D(X)^i_j$ の i, j に相当すると考えてもらいたい. その上で, A_i, B_i の線形結合や積に相当する表現を

$$D(c_1 X + c_2 Y)_{ab; a' b'} = c_1 D(X)_{ab; a' b'} + c_2 D(Y)_{ab; a' b'} \quad (4.1.26)$$

$$(D(XY))_{ab; a' b'} = (D(X)D(Y))_{ab; a' b'} \quad (4.1.27)$$

と定義すれば, 量子力学の計算結果をそのまま流用できるようになるので, $D(A_i), D(B_i)$ が互いに可換な角運動量代数になることが示せる.

(4.1.26), (4.1.27) を組み合わせれば, 例えば $f(A_1) = \exp A_1 = 1 + A_1 + A_1^2/2 \cdots$ のように, A_i, B_i の級数の形で書ける行列の表現は, 単に A_i, B_i を $D(A_i), D(B_i)$ に置き換えるだけで得られることがわかる. Lorentz 変換の行列もまた,

$$\Lambda^\mu_\nu = (\exp[a\omega])^\mu_\nu = \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 ((\omega_i + i\theta_i)A_i + (i\theta_i - \omega_i)B_i) \right] \right)^\mu_\nu$$

のように A_i, B_i の無限級数で書ける形になっているので, このルールが適用される. 従って, Lorentz 変換の表現は

$$D(\Lambda)_{ab; a' b'} = \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 ((\omega_i + i\theta_i)D(A_i) + (i\theta_i - \omega_i)D(B_i)) \right] \right)_{ab; a' b'} \quad (4.1.28)$$

で定義されることになる.

こうして得られた Lorentz 変換の表現行列を用いれば, 添え字 ab の組み合わせに相当する $(2A+1) \times (2B+1)$ 個の成分を持つ量 ψ_{ab} の変換則が

$$\psi'_{ab} = \sum_{a', b'} D(\Lambda)_{ab; a' b'} \psi_{a' b'} \quad (4.1.29)$$

によって定まる. ここで, 例えば $A = 1/2, B = 0$ の表現を考えてみると, 変換を受ける ψ_{a_0} は 2 成分量となるから, これはテンソルの変換則に従う量ではない. すなわち, これがスピノルとなる.

4.1.4 Dirac 場の表現

ここまでの話で, Lorentz 変換の一般的な表現の中にスピノルの概念が含まれることがわかった. ここで表現の考えに慣れる練習として, Dirac 場の変換則を表現論の観点から見直してみよう.

Dirac 場 $\psi(x)$ の変換行列は

$$S_\Lambda = \exp[a\Omega], \quad \Omega = \frac{1}{2}\omega_{\rho\sigma}\gamma^\rho\gamma^\sigma = \frac{1}{4}\omega_{\rho\sigma}(\gamma^\rho\gamma^\sigma - \gamma^\sigma\gamma^\rho) \quad (4.1.30)$$

で与えられる. この変換と, 対応する Lorentz 変換の式

$$\Lambda^\mu{}_\nu = (\exp[a\omega])^\mu{}_\nu = \left(\exp \left[-\frac{i}{2}a\omega_{\rho\sigma}M^{\rho\sigma} \right] \right)^\mu{}_\nu \quad (4.1.31)$$

と比較すれば, $M^{\rho\sigma} \leftrightarrow i\gamma^\rho\gamma^\sigma$ という対応関係が得られるように見えるが, すぐ後で見ると, 表現が角運動量代数となる表現としては $M^{\rho\sigma} \leftrightarrow \frac{i}{2}\gamma^\rho\gamma^\sigma$ が正しい. 公式

$$\begin{aligned} \sigma_i\sigma_j &= \delta_{ij} + i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \gamma^i\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \\ \gamma^i\gamma^j &= \begin{pmatrix} -\sigma_i\sigma_j & 0 \\ 0 & -\sigma_i\sigma_j \end{pmatrix} = -i \sum_k \epsilon_{ijk} \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} \quad (i \neq j) \end{aligned}$$

を用いて, ブースト, 回転および A, B 行列の表現を具体的に書き下すと, 次のようになる.

$$K_i = -M^{i0} \leftrightarrow D(K_i) = -\frac{i}{2}\gamma^i\gamma^0 = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.1.32)$$

$$J_1 = M^{23} \leftrightarrow D(J_1) = \frac{i}{2}\gamma^2\gamma^3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{pmatrix} \quad (4.1.33)$$

$$J_2 = M^{31} \leftrightarrow D(J_2) = \frac{i}{2}\gamma^3\gamma^1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \quad (4.1.34)$$

$$J_3 = M^{12} \leftrightarrow D(J_3) = \frac{i}{2}\gamma^1\gamma^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad (4.1.35)$$

$$A_i = \frac{1}{2}(J_i + iK_i) \leftrightarrow D(A_i) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \sigma_i & -\sigma_i \\ -\sigma_i & \sigma_i \end{pmatrix} \quad (4.1.36)$$

$$B_i = \frac{1}{2}(J_i - iK_i) \leftrightarrow D(B_i) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \sigma_i & \sigma_i \\ \sigma_i & \sigma_i \end{pmatrix} \quad (4.1.37)$$

ここで, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ を $D(A_3), D(B_3)$ に代入して計算を行うと,

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \psi_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \psi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.1.38)$$

に対し,

$$\begin{aligned} D(A_3)\psi_1 &= \frac{1}{2}\psi_1, & D(A_3)\psi_2 &= -\frac{1}{2}\psi_2, \\ D(B_3)\psi_3 &= \frac{1}{2}\psi_3, & D(B_3)\psi_4 &= -\frac{1}{2}\psi_4, \end{aligned}$$

$$D(A_3)\psi_3 = D(A_3)\psi_4 = D(B_3)\psi_1 = D(B_3)\psi_2 = 0$$

という計算結果が得られる。よって、Dirac 場は $A = 1/2, B = 0$ の表現に対応する ψ_1, ψ_2 と $A = 0, B = 1/2$ の表現に対応する ψ_3, ψ_4 の重ね合わせとなっていることがわかる。

スピン角運動量の z 成分を表す行列

$$S_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

は $S_3 = D(J_3) = D(A_3) + D(B_3)$ で与えられる。ここから、複数の成分を持つ場のスピン角運動量は表現行列 $D(J_i)$ を用いて定義すればよいと考えられる。

4.1.5 ベクトル場の表現

次に、電磁場のように 4 成分のベクトル (1 階のテンソル) で与えられる場について考えてみよう。ベクトル場の変換行列はベクトルの変換行列と同じである。すなわち、 $D(\Lambda)^\mu{}_\nu = \Lambda^\mu{}_\nu$ が成り立つ。角運動量代数 A, B

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{2}(J_1 + iK_1) = -\frac{1}{2}(M^{32} + iM^{10}), & B_1 &= \frac{1}{2}(J_1 - iK_1) = -\frac{1}{2}(M^{32} - iM^{10}) \\ A_2 &= \frac{1}{2}(J_2 + iK_2) = -\frac{1}{2}(M^{13} + iM^{20}), & B_2 &= \frac{1}{2}(J_2 - iK_2) = -\frac{1}{2}(M^{13} - iM^{20}) \\ A_3 &= \frac{1}{2}(J_3 + iK_3) = -\frac{1}{2}(M^{21} + iM^{30}), & B_3 &= \frac{1}{2}(J_3 - iK_3) = -\frac{1}{2}(M^{21} - iM^{30}) \end{aligned}$$

を (4.1.2) を用いて書き下すと、次のようになる。

$$\begin{aligned} A_1 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, & B_1 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ A_2 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & B_2 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ A_3 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & B_3 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

A_3, B_3 の同時固有ベクトルとしては、次の 4 種類のベクトルを考えることができる。

$$\psi_{++} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{--} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{+-} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \psi_{-+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.1.39)$$

これらはそれぞれ、 A_3, B_3 の固有値の組 $(+1/2, +1/2)$, $(-1/2, -1/2)$, $(+1/2, -1/2)$, $(-1/2, +1/2)$ に対応する固有ベクトルである。従って、ベクトル場の表現は $A = 1/2, B = 1/2$ の表現となっていることがわかる。

4.2 スピノル算法

前節では、テンソルとスピノルが表現の概念によって統一的に理解できることを見た。次に行うのは、Lorentz 変換の表現をより基本的な要素に分解して理解することだ。例えば、テンソル $T^{\mu\nu}$ の変換則は、ベクトルの積 $V^\mu U^\nu$ と同じ変換則であるから、この意味で、テンソルの変換則はより基本的なベクトルの変換則より構成されると理解できる。さらに、スピノルの変換則はベクトルの変換則からは得られないが、逆は可能であることが知られている。よって、変換則を考える際に最も基本的な量はスピノル、より正確に言えば、 $A = 1/2, B = 0$ と $A = 0, B = 1/2$ の表現行列によって変換を受ける2成分のスピノルということになる。あらゆる変換則の根底にあるスピノルの変換則を押さえることで得られる恩恵は測り知れない。その直接の帰結としてはスピン・統計定理が待っている。それでは、本題に入ろう。

4.2.1 点付き添え字と点なし添え字

様々な変換則に従うテンソル、スピノルは $A = 1/2, B = 0$ と $A = 0, B = 1/2$ の表現行列によって変換される2成分スピノルを組み合わせる構成できる。この重要性から、これらの2成分には専用の添え字を用いた解析方法が用意されている。ここでは、その計算方法の詳細を見ていくことにしよう。

スピノルの計算では、 A, B の表現を区別するため、点を付けた添え字と付けない添え字を用いる。Lorentz 変換の表現行列は一般に

$$D(\Lambda)_{ab;a'b'} = \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 ((\omega_i + i\theta_i)D(A_i) + (i\theta_i - \omega_i)D(B_i)) \right] \right)_{ab;a'b'} \quad (4.2.1)$$

と書けるが、Pauli 行列を用いて $D(A_i) = \frac{1}{2}\sigma_i, D(B_i) = 0$ で与えられる表現の添え字は点を付けて、次のように表す。1 に点が付いた部分をアルファベットの i と混同しないように注意しよう。

$$D(A_i)^{\dot{\alpha}}_{\dot{\beta}} = \frac{1}{2}(\sigma_i)^{\dot{\alpha}}_{\dot{\beta}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (\sigma_i)^1_1 & (\sigma_i)^1_2 \\ (\sigma_i)^2_1 & (\sigma_i)^2_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_i \quad (4.2.2)$$

これに対し、 $D(A_i) = 0, D(B_i) = \frac{1}{2}\sigma_i$ で与えられる表現の添え字には点を付けず、次のように表す。

$$D(B_i)_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\sigma_i)_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (\sigma_i)_1^1 & (\sigma_i)_1^2 \\ (\sigma_i)_2^1 & (\sigma_i)_2^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_i \quad (4.2.3)$$

一番右の添え字が付いていない Pauli 行列には

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.2.4)$$

を代入して成分を比較してもらいたい。同じ行列で表される変換を、わざわざ添え字の位置を変えて定義するのは一見嫌がらせのようだが、A スピンと B スピンの添え字の上下は、複素共役を取る操作との兼ね合いもあってこのようになっている。一応、合理的な理由もあるので、嫌にならないでやってほしい。

$D(A_i), D(B_i)$ が定義できれば, Lorentz 変換の表現, すなわち, あらゆる変換則の基礎となる, 点なしスピノル ξ_α と点付きスピノル η^α の変換則は容易に得られる. その変換則を与えるのが次式である.

$$\begin{aligned}\xi'_\alpha &= D(\Lambda)_\alpha{}^\beta \xi_\beta = \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 (i\theta_i - \omega_i) D(B_i) \right] \right)_\alpha{}^\beta \xi_\beta \\ &= \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (i\theta_i - \omega_i) \sigma_i \right] \right)_\alpha{}^\beta \xi_\beta\end{aligned}\quad (4.2.5)$$

$$\begin{aligned}\eta'^{\dot{\alpha}} &= D(\Lambda)^{\dot{\alpha}}{}_{\dot{\beta}} \eta^{\dot{\beta}} = \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 (\omega_i + i\theta_i) D(A_i) \right] \right)^{\dot{\alpha}}{}_{\dot{\beta}} \eta^{\dot{\beta}} \\ &= \left(\exp \left[\sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (\omega_i + i\theta_i) \sigma_i \right] \right)^{\dot{\alpha}}{}_{\dot{\beta}} \eta^{\dot{\beta}}\end{aligned}\quad (4.2.6)$$

上下に同じ記号が現れたときに和をとるのは, テンソル添え字と同様である.

4.2.2 スピノルとスカラー

スピノル算法の添え字はテンソル同様, 上げ下げが可能である. 添え字の上げ下げは, 2×2 反対称行列

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \epsilon^{\alpha\beta} = \epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} = \epsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\quad (4.2.7)$$

を用いた式

$$\begin{aligned}\xi^\alpha &= \epsilon^{\alpha\beta} \xi_\beta, \quad \eta^{\dot{\alpha}} = \epsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \eta_{\dot{\beta}} \\ \xi_\alpha &= \xi^\beta \epsilon_{\beta\alpha} (= -\epsilon_{\alpha\beta} \xi^\beta), \quad \eta_{\dot{\alpha}} = \eta^{\dot{\beta}} \epsilon_{\dot{\beta}\dot{\alpha}} (= -\epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} \eta^{\dot{\beta}})\end{aligned}\quad (4.2.8)$$

で定義される. $\epsilon_{\alpha\beta} = -\epsilon_{\beta\alpha}$ なので, 添え字の位置には注意してもらいたい. 添え字の位置を間違えると, 添え字を動かして戻したときに, 余計なマイナスが現れてしまう.

添え字の移動がこのように定義されている理由についても触れておこう. 実は, この規則で添え字の移動を定義すると, 上下の添え字で和を取った量 $\xi^{\dot{\alpha}} \eta_{\dot{\alpha}}, \xi^\alpha \eta_\alpha$ がスカラーとなるのである. 相対論的な不変量を作りやすいように記法を定義したわけだ.

$\xi^{\dot{\alpha}} \eta_{\dot{\alpha}}, \xi^\alpha \eta_\alpha$ がスカラーとなることは, 比較的簡単に確かめられる. その準備としては次の定理がわかっているだけでよい.

定理 19 対角和と行列式

任意の複素正方行列 A に対し, $\det(e^A) = e^{\text{tr}(A)}$ が成り立つ. ここで, $\det(e^A)$ は e^A の行列式, $\text{tr}(A)$ は A の対角和を表す.

証明 微分方程式

$$\frac{d}{dt} \det(e^{At}) = \text{tr}(A) \det(e^{At})\quad (4.2.9)$$

が成り立つことを示せば $\det(e^{At}) = e^{\text{tr}(A)t}$ が言えるので証明が完了する. ここでは, 関心のある 2×2 正方行列について証明を行うことにし, $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ とおく.

一般に, $\det(AB) = \det(A) \det(B)$ が成り立つので, 微分の定義に立ち返って計算を行えば

$$\frac{d}{dt} \det(e^{At}) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \left(\det(e^{A(t+h)}) - \det(e^{At}) \right) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \left(\det(e^{Ah}) - 1 \right) \det(e^{At})$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \left(\begin{vmatrix} 1+ha & hb \\ hc & 1+hd \end{vmatrix} - 1 \right) \det(e^{At}) \\
&= (a+d) \det(e^{At}) = \text{tr}(A) \det(e^{At})
\end{aligned} \tag{4.2.10}$$

が得られる。途中、微小量 h の高次の項を消しながら計算を行った。(証明終)

Pauli 行列の対角和はいずれも 0 なので, Lorentz 変換の表現行列 $D(\Lambda)_{\alpha}^{\beta}, D(\Lambda)^{\dot{\alpha}}_{\dot{\beta}}$ の行列式は $e^0 = 1$ となる。従って, $D(\Lambda)_{\alpha}^{\beta} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ とおけば $ad - bc = 1$ となる。この点を踏まえて, $\xi^{\alpha} \eta_{\alpha}$ がスカラーであることを示そう。添え字の上げ下げ $\xi^{\alpha} = \epsilon^{\alpha\beta} \xi_{\beta}, \xi_{\alpha} = \xi^{\beta} \epsilon_{\beta\alpha}$ と変換則 $\xi'_{\alpha} = D(\Lambda)_{\alpha}^{\beta} \xi_{\beta}$ を用いれば,

$$\begin{aligned}
\xi'^{\alpha} \eta'_{\alpha} &= \epsilon^{\alpha\beta} \xi'_{\beta} \eta'_{\alpha} = \epsilon^{\alpha\beta} D(\Lambda)_{\beta}^{\gamma} D(\Lambda)_{\alpha}^{\rho} \xi_{\gamma} \eta_{\rho} \\
&= \epsilon^{\alpha\beta} D(\Lambda)_{\beta}^{\gamma} D(\Lambda)_{\alpha}^{\rho} \epsilon_{\sigma\gamma} \xi^{\sigma} \eta_{\rho} \\
&= \xi^{\sigma} \left(\epsilon_{\sigma\gamma} D(\Lambda)_{\beta}^{\gamma} \epsilon^{\alpha\beta} D(\Lambda)_{\alpha}^{\rho} \right) \eta_{\rho} \\
&= -\xi^{\sigma} \left(\epsilon_{\sigma\gamma} D(\Lambda)_{\beta}^{\gamma} \epsilon^{\beta\alpha} D(\Lambda)_{\alpha}^{\rho} \right) \eta_{\rho} = -\xi^{\sigma} M_{\sigma}^{\rho} \eta_{\rho}
\end{aligned} \tag{4.2.11}$$

という, 4つの行列を巻き込んだ方程式が得られる。 M_{σ}^{ρ} とおいた行列の計算は, 添え字の上下で和を取るルールを用いて行列表示の計算に帰着させることができる。

$$\begin{aligned}
M_{\sigma}^{\rho} &= \epsilon_{\sigma\gamma} D(\Lambda)_{\beta}^{\gamma} \epsilon^{\beta\alpha} D(\Lambda)_{\alpha}^{\rho} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} b & d \\ -a & -c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & d \\ -a & -b \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} bc - ad & 0 \\ 0 & bc - ad \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -\delta_{\sigma}^{\rho}
\end{aligned} \tag{4.2.12}$$

こうして得られた結果より,

$$\xi'^{\alpha} \eta'_{\alpha} = -\xi^{\sigma} M_{\sigma}^{\rho} \eta_{\rho} = \xi^{\sigma} \delta_{\sigma}^{\rho} \eta_{\rho} = \xi^{\rho} \eta_{\rho} \tag{4.2.13}$$

という関係が得られるので, $\xi^{\alpha} \eta_{\alpha}$ はスカラーであることが示された。繰り返しになるので省略するが, $\xi^{\dot{\alpha}} \eta_{\dot{\alpha}}$ がスカラーであることも同様に証明できる。

4.2.3 スピノルの複素共役

スピノルは複素数を成分とする量であるから, 成分の複素共役をとる操作を考えることができる。一般に, スピノルの変換行列にも複素数が含まれるため, スピノルの複素共役は元のスピノルと同一の変換則に従うとは限らない。

それでは, スピノルの複素共役はどのような変換則に従うのだろうか。変換則 (4.2.5), (4.2.6) を参照しつつ考えてみよう。まず, スピノルの変換則の成分表示 $\xi'_{\alpha} = D(\Lambda)_{\alpha}^{\beta} \xi_{\beta}, \eta'^{\dot{\alpha}} = D(\Lambda)^{\dot{\alpha}}_{\dot{\beta}} \eta^{\dot{\beta}}$ の複素共役をとれば, $(\xi'_{\alpha})^* = (D(\Lambda)_{\alpha}^{\beta})^* (\xi_{\beta})^*, (\eta'^{\dot{\alpha}})^* = (D(\Lambda)^{\dot{\alpha}}_{\dot{\beta}})^* (\eta^{\dot{\beta}})^*$ という関係が成り立つため, 変換行列自体は単に, $D(\Lambda)$ の成分を複素共役に置き換えれば得られることになる。

$D(\Lambda)$ の複素共役は、指数関数の中身を複素共役に置き換えれば得られる。Pauli 行列の複素共役 (転置は取らないので Hermite 共役ではない！)

$$\sigma_1^* = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2^* = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.2.14)$$

を用いれば、指数部の変化は次のように書ける。

$$\xi_\alpha : \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (i\theta_i - \omega_i) \sigma_i \rightarrow \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (-i\theta_i - \omega_i) \sigma_i^* = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (\omega_i + i\theta_i) (-\sigma_i^*) \quad (4.2.15)$$

$$\eta^{\dot{\alpha}} : \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (\omega_i + i\theta_i) \sigma_i \rightarrow \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (\omega_i - i\theta_i) \sigma_i^* = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (i\theta_i - \omega_i) (-\sigma_i^*) \quad (4.2.16)$$

ここで、パラメータ ω_i, θ_i への依存性が点付きスピノルと点なしスピノルで逆になっている点に注意しよう。さらに、複素共役をとることで得られる関係式

$$\begin{aligned} \left[\frac{\sigma_i}{2}, \frac{\sigma_j}{2} \right] &= i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{\sigma_k}{2} \Leftrightarrow \left[\frac{\sigma_i^*}{2}, \frac{\sigma_j^*}{2} \right] = -i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{\sigma_k^*}{2} \\ &\Leftrightarrow \left[\frac{-\sigma_i^*}{2}, \frac{-\sigma_j^*}{2} \right] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{-\sigma_k^*}{2} \end{aligned} \quad (4.2.17)$$

より、 $-\frac{1}{2}\sigma_i^*$ もまた、角運動量代数となっていることがわかる。ここから、 $(\xi_\alpha)^*$ は $D(A_i) = -\frac{1}{2}\sigma_i^*, D(B_i) = 0$ として得られる表現行列に、 $(\eta^{\dot{\alpha}})^*$ は $D(A_i) = 0, D(B_i) = -\frac{1}{2}\sigma_i^*$ として得られる表現行列によって変換を受けるスピノルだということが言える。

また新しい変換則が出てきて面倒に思われたかもしれない。しかし実は、これらの変換則は $\xi_{\dot{\alpha}}, \eta^{\alpha}$ の変換則と同一であることがわかる。実際に計算を行って確かめよう。 $\xi^{\alpha}\eta_{\alpha} = \epsilon^{\alpha\beta}\xi_{\beta}\eta_{\alpha} = -\epsilon^{\beta\alpha}\xi_{\beta}\eta_{\alpha} = -\xi_{\beta}\eta^{\beta}$ に注意すれば、添え字を動かしたスピノルの変換則は

$$\begin{aligned} \xi'_{\dot{\alpha}} &= D_{\dot{\alpha}}^{\beta}\xi_{\beta} \Rightarrow \xi'^{\alpha} = -D^{\alpha}_{\dot{\beta}}\xi^{\dot{\beta}}, \quad -D^{\alpha}_{\dot{\beta}} = -\epsilon^{\alpha\rho}D_{\rho}^{\sigma}\epsilon_{\sigma\dot{\beta}} \\ \eta'^{\dot{\alpha}} &= D^{\dot{\alpha}}_{\beta}\eta^{\beta} \Rightarrow \eta_{\dot{\alpha}} = -D_{\dot{\alpha}}^{\dot{\beta}}\eta_{\dot{\beta}}, \quad -D_{\dot{\alpha}}^{\dot{\beta}} = -\epsilon_{\dot{\rho}\dot{\alpha}}D^{\dot{\rho}}_{\sigma}\epsilon^{\beta\dot{\sigma}} \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

となる。点なしスピノルの場合について、計算例を見ると次のようになる。

$$D_{\alpha}^{\beta} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \Rightarrow -D^{\alpha}_{\beta} = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d & -c \\ -b & a \end{pmatrix} \quad (4.2.19)$$

D の部分に Pauli 行列を入れれば、 $D_{\alpha}^{\beta} = \sigma_i \Rightarrow -D^{\alpha}_{\beta} = -\sigma_i^*$ が確かめられる。点付きの場合の同様である。

以上より、点なし・点付きスピノルの複素共役の変換則はそれぞれ、同じ位置に添え字を持つ点付き・点なしスピノルの変換則と一致することがわかった。この事情を踏まえ、変換則を明示するために、複素共役を取った結果を

$$(\xi_{\alpha})^* = \xi_{\dot{\alpha}}^*, \quad (\eta^{\dot{\alpha}})^* = \eta^{*\alpha} \quad (4.2.20)$$

と表すことにしよう。括弧を付けない右辺を見れば変換則がわかる仕組みである。

4.2.4 スピノルとベクトル

続いて、スピノルからベクトルを作る方法の解説を行い、スピノルの変換則がテンソルの変換則を基礎付けることを示す。

考察の出発点となるのは、4.1.5節で見た、ベクトルに対する AB スピンの行列および

$$\begin{aligned}
 A_1 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, & B_1 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \\
 A_2 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & B_2 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 A_3 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & B_3 &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

の式である。この行列の固有ベクトルと、例えば $\xi_\alpha^{\dot{\beta}}$ という添え字構造を持つ $A = 1/2, B = 1/2$ スピン行列の固有スピノルを比較すれば、四元ベクトルと2成分スピノルの関係が見えてくるはずだ。

さて、これらの行列は $A = 1/2, B = 1/2$ の表現行列となっているのだが、AB スピンの表現として σ_i と $-\sigma_i^*$ のどちらを用いる表現なのかがわからない。そこで、もう少し詳しい情報を得るため、昇降演算子に相当する行列に注目してみよう。 $\sigma_\pm = \sigma_1 \pm i\sigma_2$ で定義される、昇降を表す行列は

$$\frac{1}{2}\sigma_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2}\sigma_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad -\frac{1}{2}\sigma_+^* = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad -\frac{1}{2}\sigma_-^* = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2.21)$$

となっており、表現による違いが現れるからである。 $A_\pm = A_1 \pm iA_2, B_\pm = B_1 \pm iB_2$ で定義される行列を計算すると、

$$A_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & -i & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 & -i \\ 0 & +1 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad A_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & +i & 0 \\ -1 & 0 & 0 & +1 \\ +i & 0 & 0 & -i \\ 0 & -1 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2.22)$$

$$B_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & +i & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ +i & 0 & 0 & -i \\ 0 & +1 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad B_- = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -i & 0 \\ 1 & 0 & 0 & +1 \\ -i & 0 & 0 & -i \\ 0 & -1 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2.23)$$

となるのがわかる。これを、固有値 $(A_3, B_3) = (+1/2, +1/2), (-1/2, -1/2), (+1/2, -1/2), (-1/2, +1/2)$ を持つ AB スピンの同時固有ベクトル（ただし、計算を見通し良くするため定数を掛けてある）

$$\psi_{++} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{--} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{+-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \psi_{-+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

作用させた結果は、次のようになる。

$$\begin{aligned} A_+\psi_{-+} &= \psi_{++}, & A_+\psi_{--} &= \psi_{+-}, & A_-\psi_{++} &= \psi_{-+}, & A_-\psi_{+-} &= \psi_{--}, \\ B_+\psi_{+-} &= \psi_{++}, & B_+\psi_{--} &= \psi_{-+}, & B_-\psi_{++} &= \psi_{+-}, & B_-\psi_{-+} &= \psi_{--} \end{aligned} \quad (4.2.24)$$

ちなみに、 $A_+\psi_{++} = 0$ などは $(A_{\pm})^2 = (B_{\pm})^2 = 0$ から自動的に言える。

以上の結果を利用して、表現の型が $\sigma_i, -\sigma_i^*$ のどちらなのかを調べてみよう。まずは、A スピンの場合、ユニタリー変換

$$U = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \psi_{++}^{\dagger} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \psi_{-+}^{\dagger} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \psi_{+-}^{\dagger} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \psi_{--}^{\dagger} \quad (4.2.25)$$

を用いて

$$U\psi_{++} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad U\psi_{-+} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad U\psi_{+-} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad U\psi_{--} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.2.26)$$

という基底に移ると楽である。ユニタリー変換で対応する行列やベクトル (A_{\pm}, ψ と $UA_{\pm}U^{\dagger}, U\psi$) の間に成り立つ関係式は変換の前後で変わらない。例えば、

$$A_+\psi_{-+} = \psi_{++} \Leftrightarrow (UA_+U^{\dagger})(U\psi_{-+}) = U\psi_{++}$$

といった具合である。この性質を踏まえて、(4.2.24) を利用すれば、変換後の行列 A の成分を読み取ることができる。

$$UA_+U^{\dagger} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad UA_-U^{\dagger} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.2.27)$$

$$\Rightarrow UA_1U^{\dagger} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad UA_2U^{\dagger} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{bmatrix} \quad (4.2.28)$$

これを見れば、 A_i の表現は本質的には σ_i を用いた表現と同じだということがわかる。同様に、B スピンの表現行列も、

$$U\psi_{++} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad U\psi_{+-} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad U\psi_{-+} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad U\psi_{--} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.2.29)$$

となる基底で計算することで、 σ_i を用いた表現と同じだということがわかる。以上より、ベクトルの変換則は σ_i によって変換を受ける $A = 1/2, B = 1/2$ のスピノル、すなわち $\xi_{\beta}^{\dot{\alpha}}$ の変換則に帰着することがわかった。ここで、A スピンの添え字が $\dot{\alpha}$ で、B スピンの添え字が β である。

それでは、ベクトルとスピノルの対応を述べよう。相対論的な4成分のベクトルは、内積を用いて

$$V = \begin{pmatrix} V^0 \\ V^1 \\ V^2 \\ V^3 \end{pmatrix} = \psi_{++}(\psi_{++}^{\dagger}V) + \psi_{--}(\psi_{--}^{\dagger}V) + \psi_{+-}(\psi_{+-}^{\dagger}V) + \psi_{-+}(\psi_{-+}^{\dagger}V)$$

$$= \frac{V^1 - iV_2}{\sqrt{2}}\psi_{++} + \frac{-V^1 - iV_2}{\sqrt{2}}\psi_{--} + \frac{V^0 - V_3}{\sqrt{2}}\psi_{+-} + \frac{-V^0 - V_3}{\sqrt{2}}\psi_{-+} \quad (4.2.30)$$

という形に展開される。 A_3, B_3 の固有ベクトル, 固有スピノルの対応から, $\psi_{++}, \psi_{+-}, \psi_{-+}, \psi_{--}$ はそれぞれ, スピノルの四成分 $\xi_1^{\dot{1}}, \xi_2^{\dot{1}}, \xi_1^{\dot{2}}, \xi_2^{\dot{2}}$ と対応関係にある。そこで, 読み替えのルール

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{++} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{+-} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{-+} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{--} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.2.31)$$

を適用し,¹⁾ ベクトル V^μ に対応するスピノルを

$$V_{\beta\dot{\alpha}} = \begin{pmatrix} V_1^{\dot{1}} & V_1^{\dot{2}} \\ V_2^{\dot{1}} & V_2^{\dot{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V^1 - iV^2 & -V^0 - V^3 \\ V^0 - V^3 & -V^1 - iV^2 \end{pmatrix} \quad (4.2.32)$$

と定義する。このスピノルは, 添え字を動かすと

$$\begin{aligned} V_{\beta\dot{\alpha}} &= V_{\beta\dot{\gamma}}\epsilon_{\dot{\gamma}\dot{\alpha}} = \begin{pmatrix} V^1 - iV^2 & -V^0 - V^3 \\ V^0 - V^3 & -V^1 - iV^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} V^0 + V^3 & V^1 - iV^2 \\ V^1 + iV^2 & V^0 - V^3 \end{pmatrix} = V^\mu(\sigma_\mu)_{\beta\dot{\alpha}} \end{aligned} \quad (4.2.33)$$

という, 比較に便利な形になる。

以上より, ベクトルに対応するスピノルを求める方法が得られた。逆に, 点付き・点なし添え字を1つずつ持つスピノル $\xi_{\beta\dot{\alpha}}$ に対応するベクトルは

$$\begin{aligned} \xi_{\beta\dot{\alpha}} &= \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V^0 + V^3 & V^1 - iV^2 \\ V^1 + iV^2 & V^0 - V^3 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow V^0 &= \frac{a+d}{2}, \quad V^1 = \frac{b+c}{2}, \quad V^2 = \frac{ib-ic}{2}, \quad V^3 = \frac{a-d}{2} \end{aligned} \quad (4.2.34)$$

という計算で求められる。

スピノルとベクトルの移行をもう少し体系的に行うためには, $(\bar{\sigma}^\mu)^{\dot{\alpha}\beta} = \sigma_\mu$ で定義される新しい行列を導入する必要がある。この行列は,

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

を見ながら計算してもらえばわかるのだが,

$$2\delta^\mu_\nu = (\bar{\sigma}^\mu)^{\dot{\alpha}\beta}(\sigma_\nu)_{\beta\dot{\alpha}} \quad (4.2.35)$$

という性質を持っているため, (4.2.33) の両辺に作用させることで, スピノルからベクトルを導く式

$$V^\mu = \frac{1}{2}(\bar{\sigma}^\mu)^{\dot{\alpha}\beta}(V)_{\beta\dot{\alpha}} \quad (4.2.36)$$

が得られる。

¹⁾ このように定義すると, $V_{\beta\dot{\alpha}}$ を行列と見なして計算した行列式が, ちょうどスカラー $(V^0)^2 - (V^1)^2 - (V^2)^2 - (V^3)^2$ と一致する。スピノルに対する Lorentz 変換行列の行列式は 1 なので, 変換後の $V_{\beta\dot{\alpha}}$ も同じ行列式の値を持つことが保証される。

スピノルとベクトルの換算の規則は、点付き・点なしスピノルの積と同じ変換則に従う高階のスピノル(例えば、 $\xi^{\dot{\alpha}}\eta^{\dot{\beta}}$, $\xi^{\dot{\alpha}}\eta_{\dot{\beta}}$, $\xi_{\dot{\alpha}}\eta_{\dot{\beta}}$ は 2 階のスピノル, $\xi^{\dot{\alpha}}\eta^{\dot{\beta}}\zeta_{\dot{\gamma}}$ は 3 階のスピノルである)を簡略化する際に役立つ。例えば、5 階のスピノル $\xi_{\dot{\alpha}_1\dot{\alpha}_2\dot{\alpha}_3\dot{\beta}_1\dot{\beta}_2}$ は

$$\xi_{\mu_1;\dot{\alpha}_2\dot{\alpha}_3\dot{\beta}_2} = \frac{1}{2}(\bar{\sigma}^{\mu})^{\dot{\alpha}_1\dot{\beta}_1}\xi_{\dot{\alpha}_1\dot{\alpha}_2\dot{\alpha}_3\dot{\beta}_1\dot{\beta}_2}, \quad \xi_{\mu_1\mu_2;\dot{\alpha}_3} = \frac{1}{2}(\bar{\sigma}^{\mu})^{\dot{\alpha}_2\dot{\beta}_2}\xi_{\mu_1;\dot{\alpha}_2\dot{\alpha}_3\dot{\beta}_2} \quad (4.2.37)$$

というように、点付き・点なしスピノルの組をテンソル添え字に変えることで添え字の数を減らすことができる。特に、点付き・点なし添え字を同数持つスピノルは、スピノル添え字を持たないテンソルに変換することが可能である。

4.2.5 角運動量の合成

ベクトルやテンソルが点付き・点なしスピノルから作られることがわかったので、一般の表現を点付き・点なしスピノルから構成する方法に話を進めたい。ここで必要になる計算技法は、角運動量の合成と呼ばれるものである。

角運動量の合成の説明にはブラケット記法が便利なので、第 2 章を思い出しつつ、議論を行う。まずは、交換する 2 種類の角運動量演算子 \hat{M}_i, \hat{N}_i を考える。これらの同時固有状態 $|M, N, \mu, \nu\rangle$ は

$$\begin{aligned} \hat{M}_3|M, N, \mu, \nu\rangle &= \mu|M, N, \mu, \nu\rangle, \quad \sum_{i=1}^3 \hat{M}_i^2|M, N, \mu, \nu\rangle = M(M+1)|M, N, \mu, \nu\rangle, \\ \hat{N}_3|M, N, \mu, \nu\rangle &= \nu|M, N, \mu, \nu\rangle, \quad \sum_{i=1}^3 \hat{N}_i^2|M, N, \mu, \nu\rangle = N(N+1)|M, N, \mu, \nu\rangle \end{aligned}$$

を満たすものとする。角運動量 \hat{M}, \hat{N} の自由度に関して、この固有状態は完全系を成す。このとき、 $\hat{J}_i = \hat{M}_i + \hat{N}_i$ で定義される \hat{J}_i を \hat{M}_i, \hat{N}_i の合成角運動量という。 \hat{M}_i, \hat{N}_i は可換なので、 \hat{J}_i が角運動量代数となることは自明である。

ここでは、 \hat{J}_i の固有状態を \hat{M}_i, \hat{N}_i の固有状態から構成する方法を考えたい。まず、 \hat{J}_i の固有状態を指定する固有値の組を求めるため、関連する演算子の交換関係を見ておくと、

$$\begin{aligned} [\hat{M}_i, \sum_{j=1}^3 \hat{M}_j^2] &= 0, \quad [\hat{N}_i, \sum_{j=1}^3 \hat{N}_j^2] = 0 \Rightarrow [\hat{J}_i, \sum_{j=1}^3 \hat{M}_j^2] = [\hat{J}_i, \sum_{j=1}^3 \hat{N}_j^2] = 0, \\ [\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \Rightarrow [\hat{J}_i, \sum_{j=1}^3 \hat{J}_j^2] = 0, \\ [\sum_{i=1}^3 \hat{M}_i^2, \sum_{j=1}^3 \hat{J}_j^2] &= [\sum_{i=1}^3 \hat{M}_i^2, \sum_{j=1}^3 2\hat{M}_j\hat{N}_j] = 2 \sum_{j=1}^3 [\sum_{i=1}^3 \hat{M}_i^2, \hat{M}_j]\hat{N}_j = 0, \\ [\sum_{i=1}^3 \hat{N}_i^2, \sum_{j=1}^3 \hat{J}_j^2] &= [\sum_{i=1}^3 \hat{N}_i^2, \sum_{j=1}^3 2\hat{M}_j\hat{N}_j] = 2 \sum_{j=1}^3 [\sum_{i=1}^3 \hat{N}_i^2, \hat{N}_j]\hat{M}_j = 0 \end{aligned}$$

となるので、 $\sum_{i=1}^3 \hat{J}_i^2, \hat{J}_3, \sum_{i=1}^3 \hat{M}_i^2, \sum_{i=1}^3 \hat{N}_i^2$ が互いに可換となることがわかる。よって、 \hat{J}_i の固有状態はこれらの演算子の固有値を用いて $|J, m; M, N\rangle$ と書ける。ただし、4 つの記号を書き続けるのは面倒なので、以下、 M, N を固定して \hat{J}_i の固有状態を $|J, m\rangle$ と略記することにした。

記法が整ったので、本題に入るとしよう。 M, N の値を固定して、合成角運動量の固有状態 $|J, m\rangle$ を $|M, N, \mu, \nu\rangle$ の重ね合わせで構成することを考える。このとき、次のことが言える。

- M, N の値が固定されているので、 $|M, N, \mu, \nu\rangle$ の線形結合で作られるベクトル空間の次元は $(2M+1)(2N+1)$ 次元である。従って、独立な固有状態 $|J, m\rangle$ の数が $(2M+1)(2N+1)$ を超えることはない。

- \hat{J}_3 の固有値 m は $-M - N \leq m \leq M + N$ の値をとる.
- \hat{J}_3 の固有値が m となる状態は, $\mu + \nu = m$ を満たす $|M, N, \mu, \nu\rangle$ の重ね合わせで与えられる. このことから, \hat{J}_3 の特定の固有値に属すベクトル空間の次元がわかる. $M \geq N$ の場合, \hat{J}_3 の固有値と μ, ν の組の関係は次の表

\hat{J}_3 の固有値 m の値	(μ, ν) の値
$M + N$	(M, N)
$M + N - 1$	$(M, N - 1), (M - 1, N)$
$M + N - 2$	$(M, N - 2), (M - 1, N - 1), (M - 2, N)$
\vdots	\vdots
$M - N$	$(M, -N), (M - 1, -N + 1), \dots, (M - 2N, N)$
\vdots	\vdots
$N - M$	$(2N - M, -N), (2N - M - 1, -N + 1), \dots, (-M, N)$
\vdots	\vdots
$2 - M - N$	$(-M + 2, -N), (-M + 1, -N + 1), (-M, -N + 2)$
$1 - M - N$	$(-M + 1, -N), (-M, -N + 1)$
$-M - N$	$(-M, -N)$

のようになる. 基本的には, m の値が $M + N$ または $-M - N$ から離れるにつれて, μ, ν の組み合わせはひとつずつ増えていく. しかし, μ, ν の絶対値は M, N を超えられない制約があるので, $m = |M - N|$ のところで固有状態の数は頭打ちとなっている.

これらの点を踏まえると, 得られる固有状態 $|J, m\rangle$ について, 次のことが言える.

定理 20 合成角運動量の固有状態

一定の M, N を持つ状態 $|M, N, \mu, \nu\rangle$ の重ね合わせで作られる合成角運動量の固有状態 $|J, m\rangle$ としては, $J = M + N, M + N - 1, M + N - 2, \dots, |M - N|$ となる状態がそれぞれ $2M + 2N + 1, 2M + 2N - 1, 2M + 2N - 3, \dots, 2|M - N| + 1$ 個, 計 $(2M + 1)(2N + 1)$ 個存在する.

証明 $M \geq N$ の場合について, m と (μ, ν) の組の表を見ながら考えてもらいたい.

まずわかるのは, $\hat{J}_+|M, N, M, N\rangle = |\emptyset\rangle$ なので $|M + N, M + N\rangle = |M, N, M, N\rangle$ が成り立つことである. ここから, $|M, N, M, N\rangle$ に降演算子 \hat{J}_- を繰り返し作用させることで $|M + N, M + N - 1\rangle, \dots, |M + N, -M - N\rangle$ が得られる. 従って, $J = M + N$ の状態は $2M + 2N + 1$ 個存在することになる.

次に, $m = M + N - 1$ の状態について考えよう. $m = M + N - 1$ の状態から成るベクトル空間の次元は 2 であるから, 既に得られた $|M + N, M + N - 1\rangle$ と直交するベクトル $|\psi(M + N - 1)\rangle$ が取れる. このとき, $\hat{J}_+|\psi(M + N - 1)\rangle$ は $|\emptyset\rangle$ でなければ \hat{J}_3 の固有値 $M + N$ に属す固有ベクトルとなるが, 直交条件

$$\begin{aligned} \langle M + N, M + N - 1 | \psi(M + N - 1) \rangle &= 0 \\ \Rightarrow \langle M + N, M + N | \hat{J}_+ | \psi(M + N - 1) \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (4.2.38)$$

が成り立つので, $\hat{J}_+|\psi(M + N - 1)\rangle = |\emptyset\rangle$ が結論される (有限次元ベクトル空間の任意のベクトルと直交するベクトルは $|\emptyset\rangle$ 以外存在しないことに注意せよ). この性質から, $|\psi(M + N - 1)\rangle$ は角運動量の大きさ $J = M + N - 1$ を持つ状態ということになるので,

この状態を $|M+N-1, M+N-1\rangle$ と置いて、これに降演算子を繰り返し作用させることで $J = M+N-1$ の状態 $2M+2N-1$ 個が得られる。

続く $m = M+N-2$ の状態についても、既に求めた $|M+N, M+N-2\rangle, |M+N-1, M+N-2\rangle$ とは直交する状態を取ることが出来て (Gramm-Schmidt の直交化法を用いる), これが $|M+N-2, M+N-2\rangle$ となる。性質 $\hat{J}_+ |M+N-2, M+N-2\rangle = |0\rangle$ は $J = M+N-1$ の場合と同様に, $|M+N, M+N-2\rangle, |M+N-1, M+N-2\rangle$ と $|M+N-2, M+N-2\rangle$ が直交することを用いて示せる。

以下, 同様の手続きを繰り返すことで, 角運動量の大きさが 1 ずつ減っていく状態の系列を求めることができる。 $J = |M-N|$ の系列まで計算を行えば, 独立な状態が合計 $(2M+1)(2N+1)$ 個得られるため, $|M, N, \mu, \nu\rangle$ の重ね合わせで作られる固有状態をすべて求めたことになる。(証明終)

以上より, 合成角運動量 $|J, m\rangle$ が $|M, N, \mu, \nu\rangle$ の重ね合わせの形

$$|J, m\rangle = \sum_{\mu, \nu} C_{m\mu\nu}^{JMN} |M, N, \mu, \nu\rangle \quad (4.2.39)$$

で書けることが証明された。展開係数 $C_{m\mu\nu}^{JMN}$ は クレブシュゴルダン Clebsch-Gordan 係数という名前が付けられており, よく使われる値は角運動量の公式集²⁾にまとめられている。

また, 合成角運動量の大きさが整数となるか半整数となるかは $M+N$ が整数か半整数かによって決まることに注意しておこう。この事実はスピン・統計定理を導く際に役立つ。

4.2.6 スピノルの構成

角運動量の合成の話が済んだので, Lorentz 変換の一般の表現を, 点付き・点なしスピノルを組み合わせることで構成する方法の解説に入ろう。

3 つ以上の可換な角運動量代数, 例えば $\hat{M}, \hat{N}, \hat{K}$ の合成角運動量 $\hat{J} = \hat{M} + \hat{N} + \hat{K}$ の固有状態は, 合成角運動量 $\hat{M} + \hat{N}$ の固有状態を求めてから \hat{K} との合成を行うことで求まる。その手続きは合成を重ねるほど面倒になるが, 角運動量の大きさが最大値 $J = M+N+K$ (J, M, N, K はそれぞれの角運動量の大きさである) をとる状態を構成することは容易である。 $\hat{M}, \hat{N}, \hat{K}$ の z 成分がそれぞれ M, N, K となる同時固有状態を $|J = M+N+K, m = M+N+K\rangle$ とおいて, これに降演算子 \hat{J}_- を掛けていけばよい。

大きさ J の角運動量代数は, 大きさ $1/2$ の角運動量代数 $\hat{S}_i^{(n)}$ ($n = 1, 2, \dots, 2J$) から構成できる。まず, $\hat{S}_i^{(n)}$ の規格化された固有状態

$$\hat{S}_3^{(n)} |s_1, \dots, s_{2J}\rangle = s_n |s_1, \dots, s_{2J}\rangle, \quad s_n = \pm \frac{1}{2} \quad (4.2.40)$$

を用いて,

$$|J, J\rangle = |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, \dots, +\frac{1}{2}\rangle \quad (4.2.41)$$

²⁾ 一例をあげておく。洋書であるが, 次の書籍は有名で, 多くの論文でこの本の記法が利用されている。

という状態を定義する。ここで、合成角運動量の演算子

$$\hat{J}_i = \sum_{n=1}^{2J} \hat{S}_i^{(n)}, \quad \hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2 \quad (4.2.42)$$

を定義すれば $\hat{J}_+|J, J\rangle = |\emptyset\rangle, \hat{J}_-|J, J\rangle = J|J, J\rangle$ が言えるので、 $|J, J\rangle$ は角運動量の大きさ J を持つ状態だとわかる。 \hat{J}_i は角運動量代数であるから、漸化式

$$|J, m-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{(J+m)(J-m+1)}} \hat{J}_- |J, m\rangle \quad (4.2.43)$$

を用いれば規格化された固有状態 $|J, m\rangle$ ($-J \leq m \leq J$) が得られる。

一般に、角運動量代数 \hat{J}_i とその固有状態 $|J, m\rangle$ ($-J \leq m \leq J$) が与えられた場合、次の対応

$$\begin{aligned} \hat{J}_i &\leftrightarrow \sum_{n=1}^{2J} \hat{S}_i^{(n)} \\ |J, J\rangle &\leftrightarrow \left| +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, \dots, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ |J, J-1\rangle &\leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2J}} \left(\sum_{n=1}^{2J} \hat{S}_-^{(n)} \right) \left| +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, \dots, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4.2.44)$$

に従って \hat{J}_i に関する量を $\hat{S}_i^{(n)}$ に関する量に置き換えてしまっても計算結果が変わらない。従って、大きさ J の角運動量代数の振る舞いを $2J$ 個の角運動量代数 $\hat{S}_i^{(n)}$ の振る舞いに帰着させて考えることはいつでも可能である。

状態ベクトルをテンソルやスピノルのような多成分量に、角運動量代数を行列 (添え字は2個とは限らないが) に置き換えても、この対応関係は変わらないので、一般的な変換則

$$\psi'_{ab} = \sum_{a', b'} D(\Lambda)_{ab; a'b'} \psi_{a'b'}$$

に従う ψ_{ab} の添え字も同様にして、点付き・点なし添え字を用いた形

$$\psi_{\alpha_1 \dots \alpha_{2A} \beta_1 \dots \beta_{2B}}$$

に直すことができる。

4.3 スピン・統計定理

証明に必要な角運動量の知識は以上である。ようやく、本題のスピン・統計定理の話に入ることができる。始めに、証明の全体像を説明しておきたい。

まず、考察対象としては、一般的な変換則

$$\hat{\psi}'_{ab}(x') = \sum_{a', b'} D(\Lambda)_{ab; a'b'} \hat{\psi}_{a'b'}(x) \quad (4.3.1)$$

に従う、大きさ S のスピンを持つ場を考える。場の Fourier 積分表示としては、運動量 $\hbar\mathbf{k}$ を持ち、スピン角運動量の自由度に相当する $2S+1$ 通りのラベル s を持つ粒子の消滅演

算子 $\hat{a}(\mathbf{k}, s)$, 反粒子の生成演算子 $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, s)$ を用いる³⁾次の形を仮定する.

$$\hat{\psi}_{ab}(x) = \sum_{s=-S}^S \int \frac{d^3k}{\sqrt{k^0}} \left(\kappa \hat{a}(\mathbf{k}, s) u_{ab}(\mathbf{k}, s) e^{-ikx} + \lambda \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, s) v_{ab}(\mathbf{k}, s) e^{ikx} \right) \quad (4.3.2)$$

κ, λ は $\mathbf{x}, \mathbf{k}, s$ によらない複素定数である. 波数ベクトルの第 0 成分は, Klein-Gordon 方程式が成り立つよう

$$k^0 = \frac{\omega_k}{c} = \frac{\sqrt{m^2 c^2 + \hbar^2 \mathbf{k}^2}}{\hbar} \quad (4.3.3)$$

とする. 粒子の質量 m は 0 であっても構わない.

生成・消滅演算子の交換・反交換関係は

$$[\hat{a}(\mathbf{k}_1, s_1), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2, s_2)]_{\pm} = \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{s_1 s_2}, \quad [\hat{a}(\mathbf{k}_1, s_1), \hat{a}(\mathbf{k}_2, s_2)]_{\pm} = 0 \quad (4.3.4)$$

$$[\hat{b}(\mathbf{k}_1, s_1), \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}_2, s_2)]_{\pm} = \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{s_1 s_2}, \quad [\hat{b}(\mathbf{k}_1, s_1), \hat{b}(\mathbf{k}_2, s_2)]_{\pm} = 0 \quad (4.3.5)$$

$$[\hat{a}(\mathbf{k}_1, s_1), \hat{b}(\mathbf{k}_2, s_2)]_{\pm} = [\hat{a}(\mathbf{k}_1, s_1), \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}_2, s_2)]_{\pm} = 0 \quad (4.3.6)$$

とする. Klein-Gordon 場, 電磁場のように $\hat{a} = \hat{b}$ となる場合は, 1 行目の式のみを用いて考察を行えばよい. これら, Fourier 積分表示に含まれる様々な量の変換性については, 4.3.1 節で解説を行う.

スピン・統計定理には, 場の形の他に, もう一つ重要な仮定が必要となる. それは, 遠方にある物体による影響が, 光の速さを超えて伝わることはないという因果律の仮定である. 因果律の話は 4.3.3 節で解説を行う.

場の形の仮定と因果律の要請, これに角運動量の知識を組み合わせることで, スピン・統計定理が導出される. 証明の流れはこんなところである. それでは, 詳細を詰めていくことにしよう.

4.3.1 相対論における積分

Lorentz 変換に対する場の Fourier 積分表示の振る舞いをはっきりさせるには, 波数の“体積要素” d^3k の変換性を調べる必要がある.

公式 $\det(e^A) = e^{\text{tr}(A)}$ に注意すると, 無限小変換 (対角和は 0 である) から作られる Lorentz 変換の行列式は 1 であることがわかる. 従って, 4次元の“体積要素” $d^4k = d^4k'$ は不変であり, $f(k) = f'(k')$ を満たすスカラー関数 f に対し,

$$\int d^4k f(k) = \int d^4k' f'(k') \quad (4.3.7)$$

が成り立つことがわかる. この種の Lorentz 不変な積分を, 場の Fourier 積分表示に合わせてカスタマイズすることを考えよう.

場の Fourier 積分表示では, 波数ベクトルの時間成分の値が $\hbar k^0 = \sqrt{m^2 c^2 + \hbar^2 \mathbf{k}^2}$ に固定されている. この性質は積分に δ 関数を追加することで取り入れることができるはずだ. 例えば,

$$\int d^4k f(k) \delta\left(k^\mu k_\mu - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) = \int d^4k' f'(k') \delta\left(k'^\mu k'_\mu - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \quad (4.3.8)$$

³⁾ この生成・消滅演算子は必ずしも「定まったスピンを持つ粒子を生成・消滅させる演算子」と見なせるものでなくてもよい.

もまた Lorentz 不変な積分である。しかし、積分区間を $(-\infty, \infty)$ としてこの式の k^0 積分を行うと、 δ 関数の引数が 0 となる 2 点 $\hbar k^0 = \pm\sqrt{m^2c^2 + \hbar^2\mathbf{k}^2}$ の寄与がペアになって現れてしまう。

$k^0 \geq 0$ の寄与のみを取り出すには、 k^0 の積分区間を非負の領域に限定すれば良い。この操作を行っても積分が Lorentz 不変になることは、次の定理によって保証される。

定理 21 時間成分の符号の振る舞い

$k^\mu k_\mu \geq 0$ を満たす波数ベクトル k^μ がブーストまたは回転により k'^μ に変換されるものとする。このとき、 k^0 と k'^0 の正負は一致する。

証明 時間成分が不変である回転の場合は自明なので、ブーストの場合について証明を行う。一般方向の Lorentz ブーストを行って得られる新しい波数ベクトルの時間成分は $k'^0 = \gamma(k^0 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{k})$ で与えられる。ここで、 $|\boldsymbol{\beta}| \leq 1$ が成り立つことに注意しよう。

$k^0 \geq 0$ の場合、 $k^0 = |\mathbf{k}| \geq |\mathbf{k}|$ となるので、内積に対し一般的に成り立つ不等式 $\pm\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{k} \leq |\boldsymbol{\beta}||\mathbf{k}|$ を用いて

$$k'^0 = \gamma(k^0 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{k}) \geq \gamma(k^0 - |\boldsymbol{\beta}||\mathbf{k}|) \geq \gamma(k^0 - |\mathbf{k}|) \geq 0 \quad (4.3.9)$$

となることがわかる。 $k^0 \leq 0$ の場合、 $-k^0 = |\mathbf{k}| \geq |\mathbf{k}|$ なので、同様にして

$$k'^0 = \gamma(k^0 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{k}) \leq \gamma(k^0 + |\boldsymbol{\beta}||\mathbf{k}|) \leq \gamma(k^0 + |\mathbf{k}|) \leq 0 \quad (4.3.10)$$

となることがわかる。(証明終)

$\hbar k^0 = \pm\sqrt{m^2c^2 + \hbar^2\mathbf{k}^2}$ の符号が Lorentz 変換の前後で変わらないことから、積分区間を調整して δ 関数から $k^0 \geq 0$ の寄与だけを取り出しても相対性原理に抵触しない。よって、一見して変換性がわかりにくい次の積分も、Lorentz 不変性を持つ。

$$\int d^4k f(k) \delta\left(2\sqrt{\mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}} \left(k^0 - \sqrt{\mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}}\right)\right) \quad (4.3.11)$$

k^0 の係数は、 δ 関数の引数の因数分解

$$k^\mu k_\mu - \frac{m^2c^2}{\hbar^2} = \left(k^0 + \sqrt{\mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}}\right) \left(k^0 - \sqrt{\mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}}\right) \quad (4.3.12)$$

における左の因子の、 $\hbar k^0 = \sqrt{m^2c^2 + \hbar^2\mathbf{k}^2}$ での値である。ここで、 δ 関数の公式

$$\int dx f(x) \delta(ax) = \int \frac{dy}{a} f\left(\frac{y}{a}\right) \delta(y) = \frac{1}{|a|} f(0) \quad (4.3.13)$$

を用いて k^0 積分を行うと、(4.3.11) は次のように書き直せる。

$$\int \frac{d^3k}{2\sqrt{\mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}}} f(k), \quad \text{ただし, } k^0 = \sqrt{\mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}} \quad (4.3.14)$$

よって、この形の積分も、 $f(k)$ がスカラーならば Lorentz 不変だということになる。

これまでスカラーの積分について述べたことは、一般のテンソル、スピノルに対しても拡張できる。例えば成分の対応が $f'^\mu(k') = \Lambda^\mu_\nu f^\nu(k)$ で与えられるベクトルの場合、積分の変換則は

$$\int \frac{d^3k'}{\sqrt{\mathbf{k}'^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}}} f'^\mu(k') = \int \frac{d^3k}{\sqrt{\mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}}} \Lambda^\mu_\nu f^\nu(k) \quad (4.3.15)$$

となる.

以上を踏まえて, 場の Fourier 積分表示を見直してみよう. 積分表示の式は変形して

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_{ab}(x) &= \sum_{s=-S}^S \int \frac{d^3k}{\sqrt{k^0}} \left(\kappa \hat{a}(\mathbf{k}, s) u_{ab}(\mathbf{k}, s) e^{-ikx} + \lambda \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, s) v_{ab}(\mathbf{k}, s) e^{ikx} \right) \\ &= \sum_{s=-S}^S \int \frac{d^3k}{k^0} \left(\kappa \sqrt{k^0} \hat{a}(\mathbf{k}, s) u_{ab}(\mathbf{k}, s) e^{-ikx} + \lambda \sqrt{k^0} \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, s) v_{ab}(\mathbf{k}, s) e^{ikx} \right)\end{aligned}$$

と整理できる. 波数の体積要素は $d^3k/k^0 = d^3k'/k'^0$ を満たす不変量であり, 添え字の構造を担う u, v の変換則は

$$u'_{ab}(\mathbf{k}', s) = \sum_{a', b'} D(\Lambda)_{ab; a'b'} u_{a'b'}(\mathbf{k}, s), \quad (4.3.16)$$

$$v'_{ab}(\mathbf{k}', s) = \sum_{a', b'} D(\Lambda)_{ab; a'b'} v_{a'b'}(\mathbf{k}, s) \quad (4.3.17)$$

であるから, 生成・消滅演算子の変換則は, Fourier 積分表示

$$\hat{\psi}'_{ab}(x') = \sum_{s=-S}^S \int \frac{d^3k'}{\sqrt{k'^0}} \left(\kappa \hat{a}'(\mathbf{k}', s) u'_{ab}(\mathbf{k}', s) e^{-ik'x'} + \lambda \hat{b}'^\dagger(\mathbf{k}', s) v'_{ab}(\mathbf{k}', s) e^{ik'x'} \right)$$

と変換則 $\hat{\psi}'_{ab}(x') = \sum_{a', b'} D(\Lambda)_{ab; a'b'} \hat{\psi}_{a'b'}(x)$ の整合性から,

$$\sqrt{k^0} \hat{a}(\mathbf{k}, s) = \sqrt{k'^0} \hat{a}'(\mathbf{k}', s) \quad (4.3.18)$$

と定義すれば良いことがわかる.

4.3.2 スピンの振る舞い

続いて, スピンに関する u, v について掘り下げを行う. Dirac 場の例から, 場のスピン角運動量に相当する行列は $D(J_i)_{ab; a'b'}$ であると考えられるので, 粒子およびその反粒子が定まったスピンを持つために, u, v は次の条件を満たす必要がある.

$$\sum_{a', b'} D(\sum_{i=1}^3 J_i^2)_{ab; a'b'} u_{a'b'}(\mathbf{k}, s) = S(S+1) u_{ab}(\mathbf{k}, s) \quad (4.3.19)$$

$$\sum_{a', b'} D(\sum_{i=1}^3 J_i^2)_{ab; a'b'} v_{a'b'}(\mathbf{k}, s) = S(S+1) v_{ab}(\mathbf{k}, s) \quad (4.3.20)$$

この条件の Lorentz 不変性は, $[J_i, J_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} J_k$, $[K_i, J_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} K_k$ から角運動量の大きさ $\sum_j J_j^2$ が J_i, K_i と可換となることから保証される.

この条件は固有値問題であり, u, v には規格化の自由度および, $2S+1$ 個の独立な成分の選び方に関し任意性が残される. 今はなるべく一般的な議論を行うため, これらの任意性を残したまま話を進めたいのだが, 粒子と反粒子を平等に扱う立場から, 一つだけ仮定を設けたい. その仮定とは, u, v が, $\sum_s U_{ss'}^* U_{ss''} = \delta_{s's''}$ を満たすユニタリ行列による変換

$$u_{ab}(\mathbf{k}, s) = \sum_{s'=-S}^S U_{ss'} v_{ab}(\mathbf{k}, s') \quad (4.3.21)$$

によって結び付いているというものである. この仮定によって, 例えば $u_{ab}(\mathbf{k}, s) = 10v_{ab}(\mathbf{k}, s)$ のようなアンバランスな規格化は除外される. また, この仮定から成り立つ

公式

$$\sum_{s=-S}^S u_{ab}(\mathbf{k}, s) u_{ab}^*(\mathbf{k}, s) = \sum_{s=-S}^S v_{ab}(\mathbf{k}, s) v_{ab}^*(\mathbf{k}, s) \quad (4.3.22)$$

はスピン・統計定理の証明で重要になる。

4.3.3 因果律

相対論で言う因果律とは、遠方にある物体の影響が光速を超えて伝わることはないという考えである。スピン・統計定理を導くためには、この因果律に関する仮定が必要となる。この仮定は突飛なものではなく、以前に見た量子場も持っていた性質でもある。例えば、Klein-Gordon 場の正準交換関係

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\pi}(y)] \Big|_{x^0=y^0} = i\hbar\delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{y}), \quad [\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)] \Big|_{x^0=y^0} = 0, \quad [\hat{\pi}(x), \hat{\pi}(y)] \Big|_{x^0=y^0} = 0$$

を見ると、 $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ ならばいずれの交換関係も 0 になっている。この性質が因果律である。

因果律が成り立たないとどのようなことが起きるか、大雑把な式を用いて説明してみよう。相互作用がなければ、ハミルトニアンはエネルギー \times 粒子数の形 $\int d^3k \hbar\omega_k \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k})$ になるので、そのラグランジアンは一般に、

$$L = \sum_{ab;a'b'} \int d^3x \Gamma_{ab;a'b'} \psi_{ab}^*(x) \psi_{a'b'}(x) \quad (4.3.23)$$

というような 2 次式の形で書けるはずである (ψ, ψ^* に作用する微分演算子 ∂_μ は Γ の中にまとめてあるものとする)。ここから得られるハミルトニアン $\hat{H} = \int d^3x \hat{\mathcal{H}}(x)$ を用いて、例えば $\psi^\dagger(y)|0\rangle$ という状態の時間発展を考えてみよう。 $\hat{H}|0\rangle = |0\rangle$ に注意すると、

$$\hat{H} \psi^\dagger(y)|0\rangle = \int d^3x \hat{\mathcal{H}}(x) \psi^\dagger(y)|0\rangle = \int d^3x [\hat{\mathcal{H}}(x), \psi^\dagger(y)]|0\rangle \quad (4.3.24)$$

という式が成り立つ。右辺は様々な点 \mathbf{x} におけるハミルトニアン密度 $\hat{\mathcal{H}}(x)$ が $\psi^\dagger(y)$ に与える影響を足し上げた量になっているので、離れた 2 点 $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ に対する交換子 $[\hat{\mathcal{H}}(x), \psi(y)^\dagger]$ が 0 にならないとすると、離れた点にある場 $\hat{\psi}(x), \hat{\pi}(x)$ が $\hat{\mathcal{H}}(x)$ を介して $\psi(y)^\dagger$ の時間発展に影響を及ぼすことになってしまう。

このような事情から、離れた 2 点における場の演算子やその正準共役の交換・反交換関係は 0 となることが望ましい。そうであれば、離れた点のハミルトニアン密度 (2 次式である) と場の演算子の交換関係が 0 となってくれるからだ。

そこで、影響が及ぶことがない時空上の 2 点、すなわち

$$(x^\mu - y^\mu)(x_\mu - y_\mu) < 0 \quad (4.3.25)$$

を満たす x, y に対し、場の演算子が

$$[\hat{\psi}_{ab}(x), \hat{\psi}_{a'b'}^\dagger(y)]_\pm = [\hat{\psi}_{ab}(x), \hat{\psi}_{a'b'}(y)]_\pm = 0 \quad (4.3.26)$$

を満たすことを要請したい。場の正準共役は一般に場の演算子の微分を用いて書けるので、この要請が成り立っていれば自動的に因果律を満たしてくれる。

4.3.4 定理の証明

これまでに導入した概念を用い、スピン・統計定理を正確に述べると、次のようになる。

定理 22 スピン・統計定理

変換則 $\hat{\psi}'_{ab}(x') = \sum_{a',b'} D(\Lambda)_{ab;a'b'} \hat{\psi}_{a'b'}(x)$ に従う場 $\hat{\psi}_{ab}(x)$ が, Fourier 積分表示

$$\hat{\psi}_{ab}(x) = \sum_{s=-S}^S \int \frac{d^3k}{\sqrt{k^0}} \left(\kappa \hat{a}(\mathbf{k}, s) u_{ab}(\mathbf{k}, s) e^{-ikx} + \lambda \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, s) v_{ab}(\mathbf{k}, s) e^{ikx} \right)$$

を持ち、因果律

$$[\hat{\psi}_{ab}(x), \hat{\psi}'_{a'b'}(y)]_{\pm} = [\hat{\psi}_{ab}(x), \hat{\psi}_{a'b'}(y)]_{\pm} = 0$$

を満たすものとする。このとき、この場に付随する粒子・反粒子の統計性はスピンの大きさ S によって決まり、 S が整数なら Bose 統計、半整数なら Fermi 統計となる。

証明 因果律の式に Fourier 積分表示を代入し、その結果の解析を行う。

証明・第 1 段階：式の整理

まず、場の演算子の Hermite 共役と生成・消滅演算子の式

$$\begin{aligned} \hat{\psi}'_{a'b'}(y) &= \sum_{s'=-S}^S \int \frac{d^3q}{\sqrt{q^0}} \left(\kappa^* \hat{a}^\dagger(\mathbf{q}, s') u_{a'b'}^*(\mathbf{q}, s') e^{iqy} + \lambda^* \hat{b}(\mathbf{q}, s') v_{a'b'}^*(\mathbf{q}, s') e^{-iqy} \right) \\ [\hat{a}(\mathbf{k}, s), \hat{a}^\dagger(\mathbf{q}, s')]_{\pm} &= \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta_{ss'}, \quad [\hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, s), \hat{b}(\mathbf{q}, s')]_{\pm} = \pm \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta_{ss'} \end{aligned}$$

を見ながら計算を行えば、因果律の式の左辺は

$$\begin{aligned} &[\hat{\psi}_{ab}(x), \hat{\psi}'_{a'b'}(y)]_{\pm} = \sum_{s,s'=-S}^S \int \frac{d^3k}{\sqrt{k^0}} \frac{d^3q}{\sqrt{q^0}} \\ &\times \left(|\kappa|^2 u_{ab}(\mathbf{k}, s) u_{a'b'}^*(\mathbf{q}, s') e^{i(qy-kx)} \pm |\lambda|^2 v_{ab}(\mathbf{k}, s) v_{a'b'}^*(\mathbf{q}, s') e^{i(kx-xy)} \right) \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \delta_{ss'} \\ &= \sum_{s=-S}^S \int \frac{d^3k}{k^0} \left(|\kappa|^2 u_{ab}(\mathbf{k}, s) u_{a'b'}^*(\mathbf{k}, s) e^{ik(y-x)} \pm |\lambda|^2 v_{ab}(\mathbf{k}, s) v_{a'b'}^*(\mathbf{k}, s) e^{ik(x-y)} \right) \\ &= \int \frac{d^3k}{k^0} \pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k}) \left(|\kappa|^2 e^{ik(y-x)} \pm |\lambda|^2 e^{ik(x-y)} \right) \end{aligned} \quad (4.3.27)$$

とまとめることができる。最後の式で導入した略記は

$$\pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k}) = \sum_{s=-S}^S u_{ab}(\mathbf{k}, s) u_{a'b'}^*(\mathbf{k}, s) = \sum_{s=-S}^S v_{ab}(\mathbf{k}, s) v_{a'b'}^*(\mathbf{k}, s) \quad (4.3.28)$$

である。以下、この項をスピン和と呼ぶことにしよう。

証明・第 2 段階：添え字構造の解析

スピン和 $\pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k})$ の性質をスピノル算法の視点から調べることにする。角運動量の合成のところで述べたように、大きさ A, B の角運動量代数によって変換を受ける $u_{ab}(\mathbf{k}, s)$ の振る舞いは、 $2A, 2B$ 個の点付き・点なしスピノル $u_{\dot{\alpha}_1 \dots \dot{\alpha}_{2A} \beta_1 \dots \beta_{2B}}(\mathbf{k}, s)$ に置

き換えて理解することができる。点付き・点なしスピノルの添え字には、複素共役で移り変わる性質 $(\xi_\alpha)^* = \xi_{\dot{\alpha}}^*$, $(\eta_{\dot{\alpha}})^* = \eta_{\alpha}^*$ があるので, $u_{ab}^*(\mathbf{k}, s)$ を点付き・点なしスピノルに置き換えた量は, $u_{\alpha_1 \dots \alpha_{2A} \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_{2B}}^*(\mathbf{k}, s)$ という添え字の構造を持つ。

従って, $\pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k})$ を点付き・点なしスピノルに置き換えると, その添え字構造は

$$\pi_{\dot{\alpha}_1 \dots \dot{\alpha}_{2A} \beta_1 \dots \beta_{2B}; \alpha'_1 \dots \alpha'_{2A} \dot{\beta}'_1 \dots \dot{\beta}'_{2B}} \quad (4.3.29)$$

と書ける。点付き・点なし添え字の組は変換 $V^\mu = \frac{1}{2}(\bar{\sigma}^\mu)^{\dot{\alpha}\beta}(V)_{\beta\dot{\alpha}}$ によってテンソル添え字に置き換えられるので, 多分量 $\pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k})$ は結局, $2A + 2B$ 階のテンソルに帰着することがわかる。

証明・第3段階：スピン和の偶奇性

スピン和と等価な $2A + 2B$ 階のテンソルは一般に, $k^\mu, g^{\mu\nu}$ を組み合わせた多項式となるはずだ (スカラー $k^\mu k_\mu = m^2 c^2 / \hbar^2$ の無限級数を考えても良いが, これは結局ただの定数に過ぎない)。この多項式中の k^μ の次数であるが, これは $2A + 2B$ が偶数なら偶数次, 奇数なら奇数次のみがあり得る。このことから,

$$\pi_{ab;a'b'}(-k^0, -\mathbf{k}) = (-1)^{2A+2B} \pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k})$$

という性質が言える。また, $2A + 2B$ の偶奇性は $2S$ の偶奇性と一致する⁴⁾ので, この式は

$$\pi_{ab;a'b'}(-k^0, -\mathbf{k}) = (-1)^{2S} \pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k}) \quad (4.3.30)$$

と書くこともできる。

さらに, $k^0 = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2 c^2 / \hbar^2}$ という関係が成り立つことから, k^0 の2乗を \mathbf{k} の2乗に書き直すことができるので, $\pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k})$ は

$$\pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k}) = P_{ab;a'b'}(\mathbf{k}) + k^0 Q_{ab;a'b'}(\mathbf{k}) \quad (4.3.31)$$

という形で表せる。このとき, P, Q は

$$P_{ab;a'b'}(-\mathbf{k}) = (-1)^{2S} P_{ab;a'b'}(\mathbf{k}), \quad Q_{ab;a'b'}(-\mathbf{k}) = -(-1)^{2S} Q_{ab;a'b'}(\mathbf{k}) \quad (4.3.32)$$

を満たす \mathbf{k} の多項式となる。

証明・第4段階：同時刻交換・反交換関係の形

ここで, 交換子の計算

$$[\hat{\psi}_{ab}(x), \hat{\psi}_{a'b'}^\dagger(y)]_{\pm} = \int \frac{d^3 k}{k^0} \pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k}) \left(|\kappa|^2 e^{ik(y-x)} \pm |\lambda|^2 e^{ik(x-y)} \right) \quad (4.3.27)$$

に戻ろう。因果律は, この交換子が

$$(x^0 - y^0)^2 < (\mathbf{x} - \mathbf{y})^2 \quad (4.3.33)$$

を満たす x, y に対し 0 となることを要請する。

⁴⁾ 角運動量の合成において, スピンの大きさ S の取り得る値が $A + B, A + B - 1, \dots, |A - B|$ に限定されたことを思い出そう。

(4.3.33) を満たす 2 点に対しては, $z^\mu = x^\mu - y^\mu$ として,

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{z^0}{z^2} \mathbf{z} \quad (|\boldsymbol{\beta}| < 1) \quad (4.3.34)$$

を用いた Lorentz ブーストを行うことで, $x'^0 - y'^0 = z'^0 = \gamma(z^0 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{z}) = 0$ が成り立つ慣性系を選べる. よって, (4.3.27) の計算は $x^0 = y^0$ として行えば十分である. 積分変数の読み替え $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ と, (4.3.31), (4.3.32) による式変形を行うと, 同時刻の交換子は

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_{ab}(x), \hat{\psi}_{a'b'}^\dagger(y)]_{\pm} \Big|_{x^0=y^0} &= \int \frac{d^3k}{k^0} \pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k}) (|\kappa|^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \pm |\lambda|^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}}) \\ &= \int \frac{d^3k}{k^0} (|\kappa|^2 \pi_{ab;a'b'}(k^0, \mathbf{k}) \pm |\lambda|^2 \pi_{ab;a'b'}(k^0, -\mathbf{k})) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \\ &= \int \frac{d^3k}{k^0} (|\kappa|^2 P_{ab;a'b'}(\mathbf{k}) \pm |\lambda|^2 P_{ab;a'b'}(-\mathbf{k})) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \\ &\quad + \int d^3k (|\kappa|^2 Q_{ab;a'b'}(\mathbf{k}) \pm |\lambda|^2 Q_{ab;a'b'}(-\mathbf{k})) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \\ &= \int \frac{d^3k}{k^0} P_{ab;a'b'}(\mathbf{k}) (|\kappa|^2 \pm (-1)^{2S} |\lambda|^2) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \\ &\quad + \int d^3k Q_{ab;a'b'}(\mathbf{k}) (|\kappa|^2 \mp (-1)^{2S} |\lambda|^2) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \quad (4.3.35) \end{aligned}$$

と変形できる.

積分中の多項式 P, Q は, 微分演算子

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial z^1}, \frac{\partial}{\partial z^2}, \frac{\partial}{\partial z^3} \right)$$

が指数部に作用していると見なすことで積分の外に出すことができる.

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_{ab}(x), \hat{\psi}_{a'b'}^\dagger(y)]_{\pm} \Big|_{x^0=y^0} &= (|\kappa|^2 \pm (-1)^{2S} |\lambda|^2) P_{ab;a'b'}(-i\nabla) \int \frac{d^3k}{k^0} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \\ &\quad + (|\kappa|^2 \mp (-1)^{2S} |\lambda|^2) Q_{ab;a'b'}(-\nabla) \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \quad (4.3.36) \end{aligned}$$

証明・第 4 段階：統計性の決定

ここに至り, 統計性を議論する準備が整った. まず, (4.3.36) の 2 行目に注目してみよう. δ 関数の公式 $(2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{z}) = \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}}$ を思い出せば, 2 行目の項は δ 関数の微分となっていることがわかる. 従って, 2 行目の項は $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ ならば自動的に 0 となる.

1 行目の積分はどうであろうか. この積分は, 波数ベクトル \mathbf{k} を, \mathbf{z} の方向を z 軸とする極座標で $\mathbf{k} = (k \sin \theta \cos \phi, k \sin \theta \sin \phi, k \cos \theta)$ と表せば,

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3k}{k^0} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} &= \int_0^\infty dk \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{k^2 \sin \theta}{k^0} e^{ikz \cos \theta} \\ &= 2\pi \int_0^\infty dk \frac{k^2}{k^0} \left[\frac{-1}{ikz} e^{ikz \cos \theta} \right]_{\theta=0}^{\theta=\pi} = \frac{4\pi}{z} \int_0^\infty dk \frac{k}{\sqrt{k^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}}} \sin kz \quad (4.3.37) \end{aligned}$$

と書き直せる. 評価が難しい積分であるが, これは 0 ではないことが知られている.

従って, 場が因果律の条件を満たすためには,

$$|\kappa|^2 \pm (-1)^{2S} |\lambda|^2 = 0, \quad (4.3.38)$$

つまり, $|\kappa| = |\lambda|$ かつ

$$1 \pm (-1)^{2S} = 0 \quad (4.3.39)$$

が成り立たねばならない. この条件を成り立たせるためには, $2S$ が偶数ならば交換関係, 奇数ならば反交換関係をとらなければならない. 従って, 整数のスピンを持つ粒子の統計性は Bose 統計, 半整数のスピンを持つ粒子の統計性は Fermi 統計でなければならないことがわかる.

(証明終)

4.4 第4章のまとめ

スピン・統計定理の証明は以上である. この定理は量子力学と相対性理論という二大理論が共演する夢の舞台であったと言える. スピン・統計定理は応用上, 統計物理学とも相性が良いので, 現代物理学の3本柱である量子力学・相対性理論・統計物理学をまとめて学べるお得な定理であった(と言えるかもしれない).

本章で述べた証明は以下のテキストを参考に筆者がまとめたものである. 証明の大部分は有名な場の量子論の教科書の第1巻である,

[1] S. Weinberg(著) 青山秀明・有末宏明(訳)『ワインバーグ 場の量子論(1巻) 粒子と量子場』(吉岡書店 2013 第6刷発行)

を参考にした. スピン・統計定理の証明が解説してある本が少ない中, 証明の骨格がしっかりと描かれているこの本は大きな助けになった. ただ, 証明に他の文献の結果が必要となる部分があったので, 本章の証明ではスピノル算法の考えを用いてその点を補っている.

スピノル算法に関しては,

[2] 九後汰一郎『ゲージ場の量子論 I』(新物理学シリーズ23)(培風館 2011 初版第19刷発行)

に書かれた簡潔なまとめが助けになった.

スピンの整数か半整数かで交換子・反交換子の振る舞いが変わる点は

[3] 朝永振一郎『スピンはめぐる』(みすず書房 2011 第5刷発行)

の議論で知った. この本はスピンに関する興味深い話が色々と載っていて面白い.

第5章

〈散乱の量子論〉

自然科学である量子力学の正しさを裏付けるのは、その考察対象である極微の世界に関する、膨大な経験的事実である。極微の世界、すなわち、 $10^{-10} \sim 10^{-9}\text{m}$ のスケールにある原子や分子の世界、 $10^{-15} \sim 10^{-14}\text{m}$ またはそれより小さいスケールにある原子核、素粒子の世界の実験的探求は、放射線の研究に端を発する様々な実験技術の発展と共に進められてきた。量子力学の経験的基盤は実質、放射線研究の成果に支えられているといっても過言ではないだろう。

そんな放射線の研究とは、大雑把に言えば、「 α 線、 β 線、 γ 線といった微視的粒子が飛んできて物質に当たった時、どのような変化が起きるか」ということに関する知見を蓄積し、体系化する営為である。この過程の記述に用いられるのが、以下で学ぶ散乱の量子論である。

5.1 散乱実験の設定

遠方から飛来した粒子が何らかの物質とぶつかった（相互作用した）後、別の方向に飛び去って行く現象を散乱という。ここでは、この散乱現象を実験的に調べる際の状況設定について述べる。ただし、相対論を考慮すると話が難しくなるので、以下では非相対論的な状況に限定して議論を行う。

散乱現象の実験で必要となるのは、遠方から飛来する入射粒子、相互作用によって入射粒子の運動状態に変化を引き起こす標的粒子、入射粒子の運動状態を調べるための粒子検出器である。これらを、図 5.1、図 5.2 のように配置するのが、典型的な散乱実験の設定である。

詳細を説明しよう。図中、「粒子源」と書いた部分には、入射粒子を放出する放射性物質や装置（放電管や加速器など）が配置される。入射粒子はこの部分から放出され、検出器に包囲された右の空間内に誘導される。標的となる物質（図中では「的」で表される）が存在しない図 5.1 の状況では、量子力学的な運動量の不確かさはあるにせよ、入射粒子はほぼ直進し、進行方向上にない検出器によって捕捉されることはない。ここで図 5.2 のように、入射粒子の通り道に標的をおけば¹⁾、標的粒子との相互作用により入射粒子の運動

¹⁾ 入射粒子がどの辺りを通過するかということは実験によって調べることが出来るので、粒子同士の衝突が起きる位置は調整可能である。また、ここでは標的粒子が静止しているものとして話を進めるが、実際には加速器を用いた実験など、標的粒子が動いていることも多い。その場合も、衝突が起きる位置は調整可能である。

状態は変化し、様々な方向に配置された検出器によって捕捉されるようになる。

ここで、散乱実験に用いられる検出器の動作原理について説明しておこう。基本的に、粒子検出器には散乱された入射粒子（散乱粒子）と反応し、電子や光子を放出する物質が封入されており、放出された電子や光子を電気信号として取り出すことで、粒子の到来が感知されるようになっている。散乱粒子のエネルギーに応じて電気信号の強さが変化している検出器では、散乱粒子のエネルギーも測定可能である。

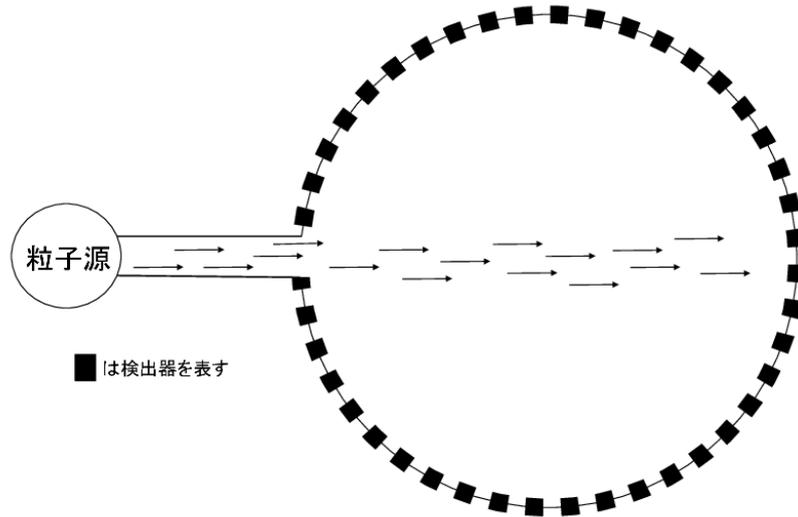


図 5.1 標的となる物質がない場合

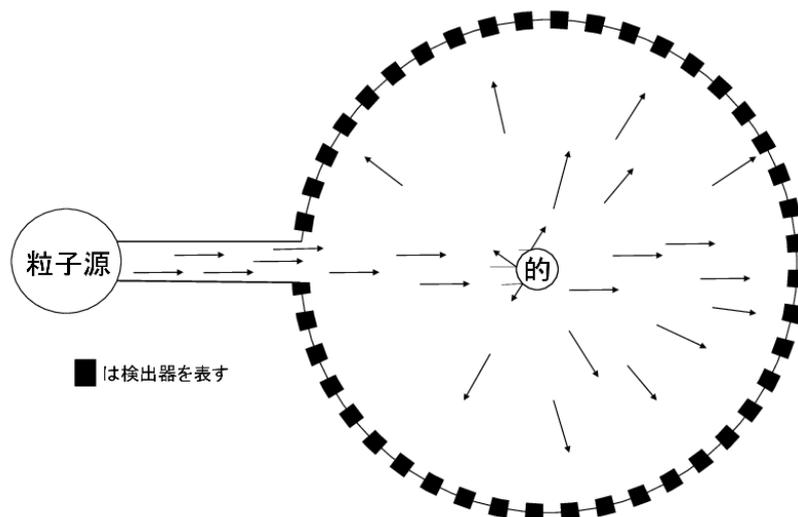


図 5.2 標的となる物質がある場合

5.1.1 散乱実験が成り立つ条件

散乱実験の状況が成り立つためには、いくつかの条件が満たされる必要がある。まず、入射粒子が(ほぼ)直進して標的に向かうという状況であるが、これが成り立つためには、入射粒子の初期状態において、運動量が精度良く定まっている必要がある。運動量の不確定性が大きいと、入射粒子が標的のほうに向かわず、直接検出器のほうに飛んで行ってしまいう可能性があるからだ。この条件は、 z 軸を粒子源から標的へ向かう方向とすれば、初期状態における運動量の期待値と不確定性の間に成り立つ不等式

$$\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z, |\langle \hat{p}_x \rangle|, |\langle \hat{p}_y \rangle| \ll |\langle \hat{p}_z \rangle| \quad (5.1.1)$$

で与えられる。実際に実験を行う際には、あらかじめ入射粒子の運動量を精度良く測定したり、あるいは(同じことかもしれないが)、入射粒子がこのような初期状態にあると言える状況を実験的に作り出す必要がある。

また、検出器を配置する空間は十分広く取る必要がある。というのも不確定性原理より、入射粒子の運動量が正確に定まる状態では、粒子の位置の確率分布はある程度の広がりを持つことになるからだ。極論だが、粒子の運動量が限りなく正確に定まっている状態において、粒子の位置は全くわからなくなってしまうため、散乱の有無に関わらず、粒子があらゆる方向の検出器に検出される可能性が出てきてしまう。このような事態が起きないように、粒子の確率分布の広がり r と検出器を配置する空間のスケール R は $r \ll R$ を満たす必要がある。

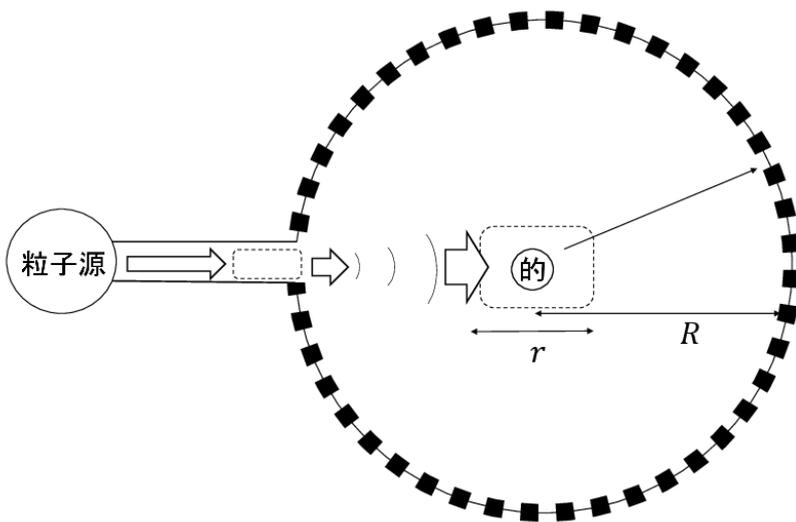


図 5.3 検出器のスケール

ところで、第 2 章の自由粒子の節で見たように、粒子の位置分布の広がり時間は共に増大する。従って、粒子がほぼ確実に(例えば、99%とか 99.9%)その中に存在すると言える領域は、図 5.3 の点線で囲まれた部分のように時間と共に広がっていくことになる。 R を大きくすれば、入射粒子が標的に到達するまでの時間も長くなるが、そのせいで $r \ll R$ という関係が崩れるということはないだろうか? 結論を言えば、この点について心配はい

らない。第2章の、Gauss関数を用いた解析によれば、ある時刻における位置および運動量の不確定性が $\Delta x \approx \hbar/b, \Delta p \approx b$ で与えられるならば、時刻 T が経過した時点での位置の不確定性 r はおよそ

$$r \approx \frac{\hbar}{b} \sqrt{1 + \frac{b^4 T^2}{m^2 \hbar^2}} \quad (5.1.2)$$

となるから、 $x > 0$ の場合に成り立つ不等式 $\sqrt{1+x^2} < 1+x$ より、 r の大きさは

$$r \lesssim \frac{\hbar}{b} + \frac{bT}{m} \quad (5.1.3)$$

という不等式で評価できる。この実験における典型的な時間スケール、すなわち、入射粒子が標的に到達するまでにかかる時間 T は $\langle \hat{p}_z \rangle T / m = R$ で見積もることができるので、 r の不等式は次のように書き換えられる。

$$r \lesssim \frac{\hbar}{b} + \frac{b}{\langle \hat{p}_z \rangle} R \quad (5.1.4)$$

右辺の第1項は初期状態における位置の不確定性である。実験装置のスケール R は $\hbar/b \ll R$ が成り立つよう、あらかじめ大きく取っておく必要があるのであった。一方、第2項は時間経過による位置の不確定性の増加を表すが、運動量が正確に定まっているという条件より $b \ll \langle \hat{p}_z \rangle$ が成り立つので、この項もまた R よりずっと小さいことが言える。よって、実験装置のスケールを大きく取っておくことで、 $r \ll R$ が問題なく成り立つことがわかった。

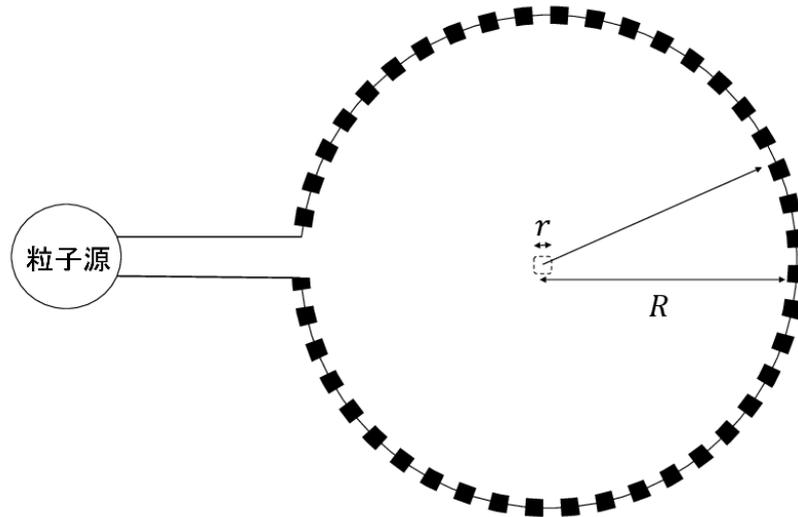


図5.4 十分大きな装置における散乱

$r \ll R$ が成り立つ場合の散乱の様式図は図5.4のようになる。この状況で、粒子が斜めの矢印の先にある検出器に捕捉されたとしよう。すると、粒子は半径およそ r の狭い領域から検出器の位置にやってきたものと見なせるので、粒子はこの矢印と同じ向きの運動量を持つと考えることができる。運動量の向きに含まれる誤差は、 R が大きいほど相対的に無視できるものとなる。従って、ある方向の検出器による捕捉は、粒子が持っていた運動量の方向の測定に相当すると考えられる。後に量子力学を用いて散乱を記述する際は、この考えに従って、運動量の変化に注目して議論を行うことになる。

5.1.2 散乱断面積の概念

十分正確に運動量が知られている粒子源と、十分大きな実験装置を用意し、入射粒子の通り道に標的となる粒子を設置すれば散乱実験の準備は完了である。この状態で、どの方向の検出器にどれだけの粒子が検出されるかを数えていけば、入射粒子と散乱粒子の衝突に関する詳細が得られる。とはいえ、実際の散乱実験は粒子源から入射粒子が絶え間なく供給される状況で行われることが多いため、いくつかの粒子が入射し、いくつかの粒子が散乱したか数えるよりも、一定の時間の間にいくつの粒子が入射するかあらかじめ調べておいて、それに対しどういった頻度で散乱が起きるのかに注目したほうが便利である。従って、散乱実験の結果をまとめる際には、入射粒子がやってくる頻度と散乱粒子が検出される頻度を関連付ける量に注目するのが望ましい。そのような量として便利に用いられているのが、以下で解説する散乱断面積である。

図 5.5 は散乱現象の古典的なモデルである。薄い色の円柱は入射粒子の通り道を表す。入射粒子が標的に当たると弾かれ、当たらなければそのまま真っすぐ進むものとする。黒い円柱の部分は入射粒子が通らない空間となる。散乱断面積とは、大雑把に言えば、この黒い円柱の底面積に相当する量のことである。この図では散乱断面積と“標的粒子の大きさ”が等しくなっているが、例えば標的粒子と同じ“大きさ”の入射粒子が飛んできた場合、黒い円柱の底面積はおよそ 4 倍になることがわかるだろう。つまり、散乱断面積が実際に表しているのは、入射粒子と標的粒子の間に相互作用が働く領域の広さということになる。

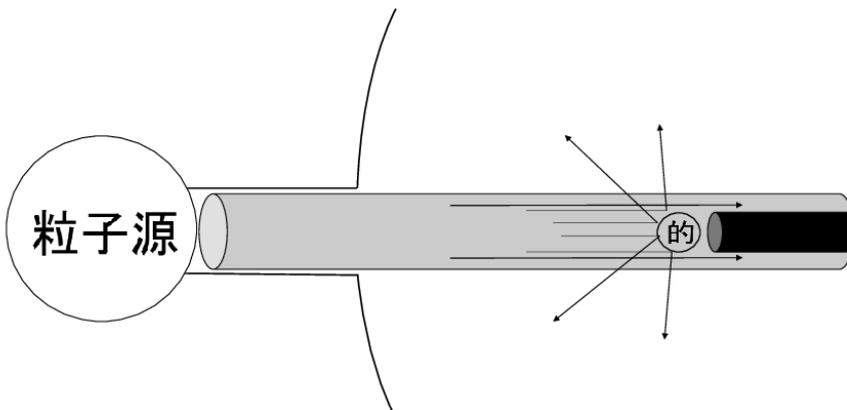


図 5.5 散乱断面積の模式図

散乱断面積を用いれば、入射粒子がやってくる頻度と散乱粒子が検出される頻度の関係を表すことができる。まず、図 5.5 における多数の入射粒子の数密度を ρ 、速さを v とすると、単位時間に散乱される粒子の数 N は散乱断面積 σ を用いて

$$N = \rho v \sigma \quad (5.1.5)$$

与えられる。簡単なモデルから導かれたこの関係式であるが、これは量子力学でも利用

できる形になっている。というのも、入射粒子の数密度および速度は、物理量の平均値を用いて $\rho \approx 1/\Delta x \Delta y \Delta z$, $v \approx \langle \hat{p}_z \rangle / m$ などと見積もることが可能だからだ。その詳細に関しては後に議論を行うことにする。

さらに、散乱断面積の概念は、散乱の角度依存性を取り込む形で拡張できる。単位時間に角度 (θ, ϕ) 方向に散乱される粒子の数密度を $N(\theta, \varphi)$ で表し、標的粒子から見た、 n 番目の検出器によって張られる立体角を Ω_n とおくと、単位時間に n 番目の検出器が粒子を検出する数は

$$\int_{\Omega_n} N(\theta, \varphi) d\Omega = \int_{\Omega_n} N(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (5.1.6)$$

と表すことができるだろう。このとき、

$$N(\theta, \varphi) = \rho v \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) \quad (5.1.7)$$

で定義される $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ を微分散乱断面積と呼ぶ。 N_D 個の検出器が隙間なく配置されているものとする、単位時間に検出される散乱粒子の総数について

$$N = \sum_{n=1}^{N_D} \int_{\Omega_n} N(\theta, \varphi) d\Omega = \rho v \sum_{n=1}^{N_D} \int_{\Omega_n} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) d\Omega = \rho v \sigma \quad (5.1.8)$$

という関係式が成り立つ。

量子力学では $N(\theta, \varphi)$ を計算することができるので、そこから微分散乱断面積を求めることができる。わざわざ $N(\theta, \varphi)$ を微分散乱断面積に換算する理由であるが、これは実験状況に応じて異なる ρv の値によらない結果を導くためである。つまり、散乱断面積は様々な実験の結果を比較する際に便利な概念なのである。

5.2 散乱問題の定式化

以上で述べた散乱実験の状況設定とその解釈に注意しつつ、散乱を量子力学的に記述する理論を見ていくことにしよう。

基本的に、散乱現象を記述する方法は2つある。その一つは、ハミルトニアン固有値方程式を利用して系の状態を求め、遠方の検出器の位置に散乱粒子が見出される確率を計算する方法である。この方法は、系の状態を一種の波動と見なす感覚的な議論と相性が良い。もう一つの方法は、時間発展方程式を用いて系の時間発展を計算し、そこから粒子が持つ運動量の確率を計算するという方法だ。こちらは形式的なところはあるが、時間発展を追うので散乱のプロセスが想像しやすい方法である。さらに、散乱の量子論では実験の設定（入射粒子の運動量が精度良く定まっており、標的粒子と検出器が遠く離れている）を用いた単純化が行われるのだが、2番目の方法にはその際に行うトリックが詳しく見える利点がある。形式重視の本書としてはまず、2番目の方法を用いて全体像を描き、その後で1番目の方法について解説を加えることとしたい。

5.2.1 S行列とT行列

標的粒子が非常に重く、さらにそれが静止していると見なせる場合は、標的粒子の運動は無視できる。この場合、系のハミルトニアンは入射粒子の運動エネルギーと、入射粒子が

感じるポテンシャルエネルギーの和

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V} \quad (5.2.1)$$

で書くことができる。この模型は最も単純なので、以下しばらくの間は、このハミルトニアンを念頭に議論を進めることとしたい。

時刻 t' から t までの時間発展を与える演算子を $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t')|\psi(t')\rangle$ で定義する。実験装置は十分大きいものと考えてよいから、散乱過程が完了するまでの時間、すなわち粒子が入射してから検出されるまでの時間は、粒子間が相互作用を及ぼし合う時間と比べ、ずっと長いと言える。そのため散乱の理論では、長時間の時間発展の効果を表す、**S** 行列と呼ばれる演算子

$$\hat{S} = \lim_{T \rightarrow \infty} \hat{U}(T, -T) \quad (5.2.2)$$

の振る舞いを調べることが基本的な関心となる。右辺の極限は、任意の状態に対し $\langle \psi | \hat{S} | \phi \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \langle \psi | \hat{U}(T, -T) | \phi \rangle$ を満たす演算子という意味であるが、実際には T が十分大きいものとして近似を行いつつ $\hat{S} = \hat{U}(T, -T)$ の振る舞いを計算することがほとんどである。

相互作用がない場合、**S** 行列は自由粒子の時間発展演算子 (これを \hat{U} と表そう) に等しい。散乱の効果が現れるのは、**S** 行列の \hat{U} からのずれ、すなわち、

$$\hat{S} = \hat{U}(T, -T) = \hat{U} + i\hat{T}, \quad \hat{U} = \exp \left[-\frac{2i\hat{H}_0 T}{\hbar} \right] \quad (5.2.3)$$

と表したときの演算子 \hat{T} (これを **T** 行列と呼ぶ) の部分である。

ある方向への散乱が起きる確率が **T** 行列によって定まることを見てみよう。初期状態 $|\psi_0\rangle = |\psi(-T)\rangle$ から出発した系において、長い時間発展の後に運動量 \mathbf{p} を持つ粒子が見出される確率は $|\langle \mathbf{p} | \hat{S} | \psi_0 \rangle|^2$ で与えられる。この量は、**T** 行列を用いた式

$$\langle \mathbf{p} | \hat{S} | \psi_0 \rangle = \exp \left[-\frac{2iET}{\hbar} \right] \langle \mathbf{p} | \psi_0 \rangle + i \langle \mathbf{p} | \hat{T} | \psi_0 \rangle, \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (5.2.4)$$

から計算すれば求まる。粒子が最初に持っていた運動量とは異なる方向の \mathbf{p} に対しては $\langle \mathbf{p} | \psi_0 \rangle \approx 0$ が成り立つので、散乱の結果を予測する問題は散乱振幅と呼ばれる量 $\langle \mathbf{p} | \hat{T} | \psi_0 \rangle$ の計算に帰着することになる。

5.2.2 相互作用描像

T 行列の計算を実際に追っていく際には、ユニタリー変換によって相互作用描像の量子論に移行して議論を進めると見通しが良くなる。

相互作用描像は、自由粒子系との差異に注目して系の振る舞いを記述する方法である。相互作用描像における状態および物理量 $|\psi_I(t)\rangle, \hat{A}_I(t)$ への移行は基本的に、ユニタリー変換

$$|\psi_I(t)\rangle = \exp \left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar} \right] |\psi(t)\rangle \quad (5.2.5)$$

$$\hat{A}_I(t) = \exp \left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar} \right] \hat{A} \exp \left[-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar} \right] \quad (5.2.6)$$

によって特徴付けられる。

基本的に、と言ったがこれには例外がある。それは、S 行列の定義にも用いられる時間発展演算子である。Schrödinger 描像での時間発展演算子の定義式 $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t')|\psi(t')\rangle$ に含まれる状態を相互作用描像に書き換えると

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] |\psi(t)\rangle = \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \hat{U}(t, t') |\psi(t')\rangle \\ &= \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \hat{U}(t, t') \exp\left[\frac{-i\hat{H}_0 t'}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t'}{\hbar}\right] |\psi(t')\rangle \\ &= \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \hat{U}(t, t') \exp\left[\frac{-i\hat{H}_0 t'}{\hbar}\right] |\psi_I(t')\rangle \end{aligned} \quad (5.2.7)$$

となるが、これは $|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_I(t, t')|\psi_I(t')\rangle$ で定義される、相互作用描像における時間発展演算子が

$$\hat{U}_I(t, t') = \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \hat{U}(t, t') \exp\left[\frac{-i\hat{H}_0 t'}{\hbar}\right] \quad (5.2.8)$$

で与えられることを示している。ということで、時間発展演算子について考えるときは、左右の指数部の時刻が異なることに注意してもらいたい。

続いて、相互作用描像での S 行列を振る舞いを見たい。まず、 $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t') = (\hat{H}_0 + \hat{V})\hat{U}(t, t')$ に注意すると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_I(t, -T) &= \left(-\hat{H}_0 \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] + \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] (\hat{H}_0 + \hat{V}) \right) \\ &\quad \times \hat{U}(t, -T) \exp\left[\frac{-i\hat{H}_0(-T)}{\hbar}\right] \\ &= \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \hat{V} \exp\left[\frac{-i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}\right] \hat{U}(t, -T) \exp\left[\frac{-i\hat{H}_0(-T)}{\hbar}\right] \\ &= \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t, -T), \end{aligned} \quad (5.2.9)$$

$$\hat{U}_I(t, -T) = \hat{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \hat{U}_I(t_1, -T) \quad (5.2.10)$$

が成り立つ。(5.2.10) の恒等演算子は $\hat{I} = \hat{U}_I(-T, -T)$ から現れる。積分中の時間発展演算子を、逐次代入法によって形式的に消去すると、S 行列は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \hat{S}_I &= \hat{U}_I(T, -T) = \hat{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^T dt_1 \hat{V}_I(t_1) \hat{U}_I(t_1, -T) \\ &= \hat{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^T dt_1 \hat{V}_I(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{-T}^T dt_1 \int_{-T}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) + \cdots \\ &\quad + \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{-T}^T dt_1 \int_{-T}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-T}^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_n) + \cdots \end{aligned} \quad (5.2.11)$$

(5.2.3) に注意すると、相互作用描像における S 行列の形は

$$\hat{S}_I = \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 T}{\hbar}\right] \hat{S} \exp\left[\frac{i\hat{H}_0 T}{\hbar}\right] = \hat{I} + i\hat{T}_I \quad (5.2.12)$$

と書けるので、相互作用描像における T 行列は (5.2.11) の逐次積分の部分で与えられることがわかる。

T 行列は原理的には逐次積分を実行すれば求まるのだが、その計算は実際には非常に煩雑なので、様々な近似を用いた問題の簡略化が行われる。以下では、実際の計算を意識しつつ近似を取り入れていき、T 行列（散乱振幅）の掘り下げを行う。その結果として、独自の理論形式を持つ散乱の量子論の姿が形成されていくことになる。

5.2.3 初期状態に対する近似

始めに取り入れる近似は、初期状態を運動量 \mathbf{p}_0 を持つ固有状態 $|\psi_0\rangle = \sqrt{\rho_0(2\pi\hbar)^3}|\mathbf{p}_0\rangle$ に置き換えるというものだ。 ρ_0 は密度を表す定数で、実験の設定に合わせて入射粒子の密度を求め、代入すればよい²⁾。これは、初期状態において運動量が精度良く定まっているという実験状況を取り入れるものである。

この近似に現れる因子について説明しておこう。系の状態が Gauss 関数

$$\langle \mathbf{x} | \psi_0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{8\pi^3 \Delta x \Delta y \Delta z}}} \exp \left[-\sum_{i=1}^3 \frac{x_i^2}{4\Delta x_i^2} + i \sum_{i=1}^3 p_{0i} x_i \right] \quad (5.2.13)$$

$$\langle \mathbf{p} | \psi_0 \rangle = \sqrt{\sqrt{\frac{8}{\pi^3}} \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\hbar^3}} \exp \left[-\sum_{i=1}^3 \frac{\Delta x_i^2}{\hbar^2} (p_i - p_{0i})^2 \right] \quad (5.2.14)$$

で与えられる場合について考える。今は運動量の不確定性が³小さいため、 Δx_i は非常に大きな値を持つと考えてよい。Gauss 関数を含む積分の極限

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \exp[-\lambda x^2] f(x) &= \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{\frac{1}{\pi}} \exp[-y^2] f(y/\sqrt{\lambda}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{\frac{1}{\pi}} \exp[-y^2] f(0) = f(0) \end{aligned} \quad (5.2.15)$$

に留意すると、 $\lambda \gg 1$ に対し

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \exp[-\lambda x^2] \approx \delta(x) \Rightarrow \exp[-\lambda x^2] \approx \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \delta(x) \quad (5.2.16)$$

という近似が成り立つことがわかる。この近似を行うと、状態の運動量表示は

$$\langle \mathbf{p} | \psi_0 \rangle \approx \sqrt{\sqrt{\frac{8}{\pi^3}} \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\hbar^3}} \cdot \frac{\sqrt{\pi^3 \hbar^3}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) = \sqrt{\frac{\sqrt{8\pi^3 \hbar^3}}{\Delta x \Delta y \Delta z}} \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) \quad (5.2.17)$$

という形で書ける。ここで、パラメータ ρ_0 を $\rho_0 = 1/\sqrt{8\pi^3 \Delta x \Delta y \Delta z}$ (これは、位置の確率密度の最大値に等しい) で定義すれば、初期状態の式は

$$\langle \mathbf{p} | \psi_0 \rangle \approx \sqrt{\rho_0(2\pi\hbar)^3} \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0) = \sqrt{\rho_0(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}_0 \rangle \quad (5.2.18)$$

と整理できる。

ところで、初期状態をこのように近似すると、計算上の位置の不確定性は無限になってしまう。すると、実験の初期段階で既に入射粒子が標的と相互作用していたり、あるいは本

²⁾ 実際の実験では多数の粒子を絶え間なく入射させることが多いので、1 粒子あたりの密度に換算して ρ_0 を求める。

来なら粒子がとっくに通り過ぎている時刻になっても粒子の入射が続いているなどといった、実験状況に合わない計算を行っていることになってしまう。

今は入射粒子が相互作用の働かない遠方から飛来し、再び遠方へ散乱される状態を考えたいのだから、実験の始めと終わりには標的との相互作用が働かないようになってもらいたい。そこで、以下の計算ではポテンシャルを次のように置き換える補正を行うことにする。

$$\hat{V}_I(t) \rightarrow \hat{V}_I(t) \exp \left[-\frac{\epsilon|t|}{\hbar} \right] \quad (5.2.19)$$

ここで導入した指数関数の因子は断熱因子と呼ばれる。正の定数 ϵ は計算に影響を与えないよう微小量とするが、実験にかかる時間が長いことから $\exp \left[-\frac{\epsilon T}{\hbar} \right] \approx 0$ が成り立つものと考えて計算を行う。

また、近似 (5.2.18) を行わない場合にも、断熱因子による計算は有効である。近似を行わない場合、遠方における相互作用は元々無視できるものであり、断熱因子を導入してもその振る舞いは変わらないからだ。断熱因子は計算の簡略化に大きな力を発揮するため、この点に留意してもらいたい。

5.2.4 S 行列の形式解

今の目的は相互作用描像における散乱振幅 $\langle \mathbf{p}_I | \hat{T}_I | \psi_{0I} \rangle$ を計算することである。形式的な T 行列の式は (5.2.11) で与えられているが、この式は断熱因子の効果を取り入れるには不便である。そこで、まずは S 行列の式を $\hat{S}_I = \hat{U}_I(T, -T) = \hat{U}_I(T, 0) \hat{U}_I(0, -T)$ と変形し、散乱の前半部と後半部に分けて時間発展演算子 $\hat{U}_I(0, -T), \hat{U}_I(T, 0)$ の計算を行うこととしよう。

$t < 0$ における時間発展演算子の振る舞いは

$$\hat{U}_I(t, -T) = \hat{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \hat{U}_I(t_1, -T) \exp \left[\frac{\epsilon t_1}{\hbar} \right] \quad (5.2.20)$$

で与えられる。逐次積分によって、散乱過程前半における時間発展演算子は

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(0, -T) &= \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}_n^-, \\ \hat{U}_n^- &= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{-T}^0 dt_1 \int_{-T}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-T}^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_n) \exp \left[\frac{\epsilon(t_1 + \cdots + t_n)}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (5.2.21)$$

という展開式で書くことができる。

ここで、T 行列に寄与する \hat{U}_n^- の行列要素 $\langle \mathbf{p}' | \hat{U}_n^- | \mathbf{p} \rangle$ の形を見ておこう。運動量固有状態の完全性 $\hat{I} = \int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|$ および $\hat{V}_I(t) = \exp \left[\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar} \right] \hat{V} \exp \left[-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar} \right]$ 、固有値の略記 $\hat{H}_0 |\mathbf{p}\rangle = E |\mathbf{p}\rangle$ に注意すれば、行列要素の式は

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}' | \hat{U}_n^- | \mathbf{p} \rangle &= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{-T}^0 dt_1 \int_{-T}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-T}^{t_{n-1}} dt_n \langle \mathbf{p}' | \hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_n) | \mathbf{p} \rangle \exp \left[\frac{\epsilon(t_1 + \cdots + t_n)}{\hbar} \right] \\ &= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{-T}^0 dt_1 \int_{-T}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-T}^{t_{n-1}} dt_n \times \int d^3p_1 \cdots d^3p_{n-1} \exp \left[\frac{\epsilon(t_1 + \cdots + t_n)}{\hbar} \right] \\ &\quad \times \langle \mathbf{p}' | \hat{V}_I(t_1) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \hat{V}_I(t_2) | \mathbf{p}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{p}_{n-2} | \hat{V}_I(t_{n-1}) | \mathbf{p}_{n-1} \rangle \langle \mathbf{p}_{n-1} | \hat{V}_I(t_n) | \mathbf{p} \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int d^3p_1 \cdots d^3p_{n-1} \langle \mathbf{p}' | \hat{V} | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \hat{V} | \mathbf{p}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{p}_{n-2} | \hat{V} | \mathbf{p}_{n-1} \rangle \langle \mathbf{p}_{n-1} | \hat{V} | \mathbf{p} \rangle \\
&\quad \times \int_{-T}^0 dt_1 \int_{-T}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-T}^{t_{n-1}} dt_n \exp \left[\frac{i(E' - E_1 - i\epsilon)t_1}{\hbar} \right] \exp \left[\frac{i(E_1 - E_2 - i\epsilon)t_2}{\hbar} \right] \\
&\quad \times \cdots \exp \left[\frac{i(E_{n-2} - E_{n-1} - i\epsilon)t_{n-1}}{\hbar} \right] \exp \left[\frac{i(E_{n-1} - E - i\epsilon)t_n}{\hbar} \right]
\end{aligned}$$

という形に整理でき、時間積分が行える。 $\exp[-\epsilon T/\hbar] \approx 0$ に注意して t_n から順に積分を実行していくと

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int d^3p_1 \cdots d^3p_{n-1} \langle \mathbf{p}' | \hat{V} | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \hat{V} | \mathbf{p}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{p}_{n-2} | \hat{V} | \mathbf{p}_{n-1} \rangle \langle \mathbf{p}_{n-1} | \hat{V} | \mathbf{p} \rangle \\
&\quad \times \frac{\hbar}{i(E' - E - n i\epsilon)} \frac{\hbar}{i(E_1 - E - (n-1)i\epsilon)} \cdots \frac{\hbar}{i(E_{n-2} - E - 2i\epsilon)} \frac{\hbar}{i(E_{n-1} - E - i\epsilon)}
\end{aligned}$$

となる。さらに、簡略化のため微量 ϵ について $\epsilon \approx 2\epsilon \approx \cdots \approx n\epsilon$ と近似を行うと、

$$= (-1)^n \langle \mathbf{p}' | \left(\frac{1}{\hat{H}_0 - E - i\epsilon} \hat{V} \right)^n | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p}' | \left(\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \right)^n | \mathbf{p} \rangle. \quad (5.2.22)$$

この式に左から $|\mathbf{p}'\rangle$ を掛けて積分すると、

$$\hat{U}_n^- | \mathbf{p} \rangle = \left(\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \right)^n | \mathbf{p} \rangle \quad (5.2.23)$$

という式が得られる。

$0 < t$ における時間発展演算子の振る舞いは

$$\hat{U}_I(t, 0) = \hat{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \hat{U}_I(t_1, 0) \exp \left[-\frac{\epsilon t_1}{\hbar} \right] \quad (5.2.24)$$

で与えられるので、散乱過程後半における時間発展演算子は

$$\begin{aligned}
\hat{U}_I(T, 0) &= \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}_n^+, \\
\hat{U}_n^+ &= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_n) \exp \left[-\frac{\epsilon(t_1 + \cdots + t_n)}{\hbar} \right]
\end{aligned} \quad (5.2.25)$$

という展開式で書くことができる。 \hat{U}_n^+ の行列要素 $\langle \mathbf{p} | \hat{U}_n^+ | \mathbf{p}' \rangle$ も \hat{U}_n^- と同様、運動量の完全系をはさんで t 依存性を取り出すところから計算を行う。

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{p} | \hat{U}_n^+ | \mathbf{p}' \rangle &= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \langle \mathbf{p} | \hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_n) | \mathbf{p}' \rangle \\
&= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \times \int d^3p_1 \cdots d^3p_{n-1} \\
&\quad \times \langle \mathbf{p} | \hat{V}_I(t_1) | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \hat{V}_I(t_2) | \mathbf{p}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{p}_{n-2} | \hat{V}_I(t_{n-1}) | \mathbf{p}_{n-1} \rangle \langle \mathbf{p}_{n-1} | \hat{V}_I(t_n) | \mathbf{p}' \rangle \\
&= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int d^3p_1 \cdots d^3p_{n-1} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \hat{V} | \mathbf{p}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{p}_{n-2} | \hat{V} | \mathbf{p}_{n-1} \rangle \langle \mathbf{p}_{n-1} | \hat{V} | \mathbf{p}' \rangle \\
&\quad \times \int_0^T dt_n \int_{t_n}^T dt_{n-1} \cdots \int_{t_2}^T dt_1 \exp \left[\frac{i(E - E_1 + i\epsilon)t_1}{\hbar} \right] \exp \left[\frac{i(E_1 - E_2 + i\epsilon)t_2}{\hbar} \right] \\
&\quad \times \cdots \exp \left[\frac{i(E_{n-2} - E_{n-1} + i\epsilon)t_{n-1}}{\hbar} \right] \exp \left[\frac{i(E_{n-1} - E' + i\epsilon)t_n}{\hbar} \right]
\end{aligned}$$

3 つ目の式では、積分の順序を整えておいた。今回は t_1 から順に積分を行う。近似 $\epsilon \approx 2\epsilon \approx \dots \approx n\epsilon$ に注意すれば、

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{(i\hbar)^n} \int d^3p_1 \cdots d^3p_{n-1} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | \hat{V} | \mathbf{p}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{p}_{n-2} | \hat{V} | \mathbf{p}_{n-1} \rangle \langle \mathbf{p}_{n-1} | \hat{V} | \mathbf{p}' \rangle \\ &\quad \times \frac{-\hbar}{i(E - E_1 + i\epsilon)} \frac{-\hbar}{i(E - E_2 + i\epsilon)} \cdots \frac{-\hbar}{i(E - E_{n-1} + i\epsilon)} \frac{-\hbar}{i(E - E' + i\epsilon)} \\ &= \langle \mathbf{p} | \left(\hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right)^n | \mathbf{p}' \rangle \end{aligned} \quad (5.2.26)$$

という結果が得られるので、後半の時間発展を特徴付ける式は

$$\langle \mathbf{p} | \hat{U}_n^+ = \langle \mathbf{p} | \left(\hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right)^n \quad (5.2.27)$$

となることがわかる。

以上の結果を統合すると、S 行列の行列要素は

$$\langle \mathbf{p} | \hat{S}_I | \mathbf{p}' \rangle = \sum_{n,m=0}^{\infty} \langle \mathbf{p} | \left(\hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right)^n \left(\frac{1}{E' - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \right)^m | \mathbf{p}' \rangle \quad (5.2.28)$$

という級数の形で与えられることになる。

5.2.5 Lippmann-Schwinger 方程式

前節では、ある程度見やすい形をした S 行列の式 (5.2.28) を求めることが出来た。この式でも具体的な計算は行えるのだが、少しの工夫で簡単な式も得られるので、計算を進めることにしたい。

S 行列に現れる量を簡潔に表すため、状態の略記

$$|\psi_p^\pm\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \hat{V} \right)^n |\mathbf{p}\rangle \quad (5.2.29)$$

を導入すれば、S 行列の行列要素は

$$\langle \mathbf{p} | \hat{S}_I | \mathbf{p}' \rangle = \langle \psi_p^- | \psi_{p'}^+ \rangle \quad (5.2.30)$$

と書くことができる。

また、この状態ベクトルが満たす方程式

$$|\psi_p^\pm\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \hat{V} |\psi_p^\pm\rangle \quad (5.2.31)$$

の両辺に $E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon$ を掛けて整理すると、

$$(E - \hat{H} \pm i\epsilon) |\psi_p^\pm\rangle = \pm i\epsilon |\mathbf{p}\rangle \quad (5.2.32)$$

という方程式が得られるが、これは、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限で $|\psi_p^\pm\rangle$ が \hat{H} の固有値 E に属す固有状態となることを表す。

さらに、 $(\hat{H}_0 - E)|\mathbf{p}\rangle = |\emptyset\rangle$ に注意すると、

$$\pm i\epsilon |\mathbf{p}\rangle = (E - \hat{H} \pm i\epsilon) |\mathbf{p}\rangle - (E - \hat{H}) |\mathbf{p}\rangle = (E - \hat{H} \pm i\epsilon) |\mathbf{p}\rangle + \hat{V} |\mathbf{p}\rangle \quad (5.2.33)$$

となることから, $|\psi_p^\pm\rangle$ の別の表式

$$|\psi_p^\pm\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H} \pm i\epsilon} \hat{V}|\mathbf{p}\rangle \quad (5.2.34)$$

が得られる. ここで, 積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x^2 + 1} = \pi \quad (5.2.35)$$

から得られる δ 関数の表現

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} f(x) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{\pi} \frac{1}{y^2 + 1} f(\epsilon y) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{\pi} \frac{1}{y^2 + 1} f(0) = f(0) \\ \Rightarrow \delta(x) &\approx \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \end{aligned} \quad (5.2.36)$$

に留意すれば, \hat{H} の固有状態の完全性 $\hat{I} = \int dE |E\rangle \langle E|$ を用いて

$$\begin{aligned} |\psi_p^-\rangle - |\psi_p^+\rangle &= \left(\frac{1}{E - \hat{H} - i\epsilon} - \frac{1}{E - \hat{H} + i\epsilon} \right) \hat{V}|\mathbf{p}\rangle = \int dE' |E'\rangle \langle E'| \frac{2i\epsilon}{(E - E')^2 + \epsilon^2} \hat{V}|\mathbf{p}\rangle \\ &\approx 2\pi i \int dE' |E'\rangle \langle E'| \delta(E - E') \hat{V}|\mathbf{p}\rangle = 2\pi i \delta(E - \hat{H}) \hat{V}|\mathbf{p}\rangle \end{aligned} \quad (5.2.37)$$

という式が成り立つことがわかる.

ここで S 行列の計算に戻りたい. $\epsilon \rightarrow 0$ の極限を取ることを明示すると,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \hat{S}_I | \mathbf{p}' \rangle &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \psi_p^- | \psi_{p'}^+ \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \psi_p^+ | \psi_{p'}^+ \rangle - 2\pi i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \mathbf{p} | \hat{V} \delta(E - \hat{H}) | \psi_{p'}^+ \rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle - 2\pi i \delta(E - E') \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p'}^+ \rangle = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') - 2\pi i \delta(E - E') \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p'}^+ \rangle \end{aligned} \quad (5.2.38)$$

が S 行列を与える式となる. 途中で用いた $\langle \psi_p^+ | \psi_{p'}^+ \rangle = \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle$ は, これらのベクトルがユニタリ変換 $|\psi_p^+\rangle = \hat{U}_I(0, -T)|\mathbf{p}\rangle$ で結び付いていることから成り立つ. ここから, T 行列の定義 $\hat{S}_I = \hat{I} + i\hat{T}_I$ に従って T 行列要素を取り出した式は

$$\langle \mathbf{p} | \hat{T}_I | \mathbf{p}' \rangle = -2\pi \delta(E - E') \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p'}^+ \rangle \quad (5.2.39)$$

である. 注目すべきは, T 行列がエネルギー保存則を満たす行列要素しか持っていないことだ.

散乱振幅を計算するには, $|\psi_p^+\rangle$ さえ求めてしまえばよい. これは, 逐次代入法を用いる方程式

$$|\psi_p^+\rangle = |\mathbf{p}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V}|\psi_p^+\rangle \quad (5.2.40)$$

を用いれば十分であり, これまでの議論を繰り返す必要もない. 散乱問題のエッセンスを簡潔に捉えた (5.2.40) は リップマン シュウィンガー **Lippmann-Schwinger** 方程式と呼ばれ, 散乱問題の基本方程式として活用されている.

5.2.6 散乱断面積の公式

T 行列を与える式が得られたので, ここから散乱振幅および散乱断面積の公式を導こう.

まず, 散乱振幅は, 初期状態の設定 $|\psi_0\rangle = \sqrt{\rho_0(2\pi\hbar)^3} |\mathbf{p}_0\rangle$ に注意すれば,

$$\langle \mathbf{p} | \hat{T}_I | \psi_{0I} \rangle = \langle \mathbf{p} | \exp \left[-\frac{i\hat{H}_0 T}{\hbar} \right] \hat{T}_I \exp \left[-\frac{i\hat{H}_0 T}{\hbar} \right] | \psi_0 \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\rho_0(2\pi\hbar)^3} \langle \mathbf{p} | \hat{T}_I | \mathbf{p}_0 \rangle \exp \left[-\frac{i(E + E_0)T}{\hbar} \right] \\
&= -2\pi \sqrt{\rho_0(2\pi\hbar)^3} \delta(E - E_0) \langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p_0}^+ \rangle \exp \left[-\frac{i(E + E_0)T}{\hbar} \right] \quad (5.2.41)
\end{aligned}$$

という公式で与えられる。ここから、散乱後に粒子が運動量 \mathbf{p} を持つ確率密度を計算すれば

$$|\langle \mathbf{p}_I | \hat{T}_I | \psi_{0I} \rangle|^2 = \rho_0(2\pi)^5 \hbar^3 (\delta(E - E_0))^2 |\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p_0}^+ \rangle|^2 \quad (5.2.42)$$

という結果が得られるが、 δ 関数の 2 乗は明らかに発散量なので不自然である。そこで、散乱実験の時間スケール T が十分長いことを利用して、 δ 関数を近似式

$$\begin{aligned}
\delta(E - E_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} \exp \left[-\frac{i(E - E_0)t}{\hbar} \right] \approx \int_{-T}^T \frac{dt}{2\pi\hbar} \exp \left[-\frac{i(E - E_0)t}{\hbar} \right] \\
&= -\frac{1}{2\pi i(E - E_0)} \left[\exp \left[-\frac{i(E - E_0)t}{\hbar} \right] \right]_{-T}^T = \frac{1}{\pi(E - E_0)} \sin \frac{(E - E_0)T}{\hbar} \quad (5.2.43)
\end{aligned}$$

で置き換えることにしたい。この修正を行った散乱確率の式は

$$|\langle \mathbf{p}_I | \hat{T}_I | \psi_{0I} \rangle|^2 = \frac{4\rho_0(2\pi\hbar)^3}{(E - E_0)^2} \sin^2 \frac{(E - E_0)T}{\hbar} |\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p_0}^+ \rangle|^2 \quad (5.2.44)$$

である。

続いて、(微分) 散乱断面積を求めよう。微分散乱断面積は、単位時間に角度 (θ, φ) 方向に散乱される粒子の数密度を $N(\theta, \varphi)$ で表したとき、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\rho v} N(\theta, \varphi) \quad (5.2.45)$$

という関係式で与えられる量のことであった。今の場合、実験条件を表すパラメータとしては $\rho = \rho_0$, $v = p_0/m$ (非相対論) を用いる。

実験開始から時刻 $2T$ が経過した後で粒子が運動量 $\mathbf{p} = (p \sin \theta \cos \varphi, p \sin \theta \sin \varphi, p \cos \theta)$ を持つ確率 $\Delta P(\theta, \varphi)$ は、運動量の微小体積要素 Δp^3 を用いて

$$\Delta P(\theta, \varphi) = \Delta p^3 |\langle \mathbf{p}_I | \hat{T}_I | \psi_{0I} \rangle|^2 = p^2 \sin \theta \Delta p \Delta \theta \Delta \varphi |\langle \mathbf{p}_I | \hat{T}_I | \psi_{0I} \rangle|^2 \quad (5.2.46)$$

で与えられる。 $\Delta P(\theta, \varphi)$ は運動量 \mathbf{p} を持つ粒子の数の期待値に等しいので、実験を繰り返せば、この運動量を持つ粒子は時間 $2T$ ごとにおよそ $\Delta P(\theta, \varphi)$ 個見出されるはずである。従って、単位時間の間に (θ, φ) 方向に散乱される粒子の数密度は $N(\theta, \varphi) \sin \theta \Delta \theta \Delta \varphi = \Delta P(\theta, \varphi)/2T$ で見積もることができる。

ここから微分散乱断面積を計算すると

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) &= \frac{m}{\rho_0 p_0} N(\theta, \varphi) = \frac{mp^2 \Delta p}{2T \rho_0 p_0} |\langle \mathbf{p}_I | \hat{T}_I | \psi_{0I} \rangle|^2 \\
&= \frac{mp^2 \Delta p}{2T \rho_0 p_0} \cdot \frac{4\rho_0(2\pi\hbar)^3}{(E - E_0)^2} \sin^2 \frac{(E - E_0)T}{\hbar} |\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p_0}^+ \rangle|^2 \\
&= \frac{mp^2 \Delta p}{p_0} \cdot \frac{2(2\pi\hbar)^3}{(E - E_0)^2 T} \sin^2 \frac{(E - E_0)T}{\hbar} |\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p_0}^+ \rangle|^2 \quad (5.2.47)
\end{aligned}$$

となるが、この式は積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \pi \quad (5.2.48)$$

から得られる δ 関数の表式

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\sin^2 \omega T}{\omega^2 T} f(\omega) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} d(\omega T) \frac{\sin^2 \omega T}{(\omega T)^2} f(\omega) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} f\left(\frac{x}{T}\right) = \pi f(0) \Rightarrow \delta(\omega) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \omega T}{\omega^2 T} \end{aligned} \quad (5.2.49)$$

を用いて次のように整理できる.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = \frac{mp^2 \Delta p}{p_0} \cdot (2\pi)^4 \hbar \delta\left(\frac{E - E_0}{\hbar}\right) |\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p_0}^+ \rangle|^2 \quad (5.2.50)$$

ここで, $p, p_0 > 0$ に注意して $\delta((E - E_0)/\hbar)$ を

$$\delta\left(\frac{E - E_0}{\hbar}\right) = \delta\left(\frac{p^2 - p_0^2}{2m\hbar}\right) = \delta\left(\frac{p + p_0}{2m\hbar}(p - p_0)\right) = \delta\left(\frac{p_0}{m\hbar}(p - p_0)\right) = \frac{m\hbar}{p_0} \delta(p - p_0) \quad (5.2.51)$$

と書き直し, 微小区間上の積分 $\Delta p \delta(p - p_0) = 1$ を実行すれば, 微分散乱断面積の最終的な表式

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = (2\pi)^4 m^2 \hbar^2 |\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \psi_{p_0}^+ \rangle|^2 \quad (5.2.52)$$

が得られる.

5.2.7 Born 近似

微分散乱断面積は, Lippmann-Schwinger 方程式の解

$$|\psi_{p_0}^+\rangle = |\mathbf{p}_0\rangle + \frac{1}{E_0 - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} |\psi_{p_0}^+\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \right)^n |\mathbf{p}_0\rangle$$

を (5.2.52) に代入して計算すれば求まる. とはいえ, 無限級数の形になっている $|\psi_{p_0}^+\rangle$ を厳密に求めることは難しいため, 実際にはこの級数を有限の項で打ち切る近似

$$|\psi_{p_0}^+\rangle \approx \sum_{n=0}^N \left(\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} \right)^n |\mathbf{p}_0\rangle \quad (5.2.53)$$

を行うことが多い. この近似を ^{ボルン}**Born** 近似と呼ぶ. 最も簡単な近似では,

$$|\psi_{p_0}^+\rangle \approx |\mathbf{p}_0\rangle \quad (5.2.54)$$

とにおいて計算を行うこととなる. 以下では, 単に Born 近似と言ったら, 最も単純なものを指すことにしたい.

Born 近似の発想は, 相互作用が十分に弱いと考えて \hat{V} の高次の項を打ち切るというものだ. 何をもって演算子 $\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V}$ の“大きさ”を見積もり, 相互作用が“弱い”とするかはなかなか難しい問題なのだが, Born 近似は散乱結果を簡単に見積もる際には便利な近似で, うまく使えば様々な系の解析に役立つ. 続く節では近似 (5.2.54) を利用して, いくつかの散乱現象を簡単に調べてみることにしよう.

5.3 Rutherford 散乱

最初に扱うのは、原子の構造に関する実験として最も有名な^{ラザフォード}Rutherfordの散乱実験だ。Rutherford は α 線を金箔に照射する実験を行い、原子の質量の大部分を担うと考えられる正電荷密度が非常に小さい領域に集中していることを示した。ここでは、散乱の量子論を用いてこの実験の結果を予測してみることにしよう。

実験の状況は、電荷 $2e$ を持つ α 粒子（ヘリウム原子核）が電荷 $79e$ を持つ金の原子核によって散乱されるというものである。 α 粒子は金の原子核よりずっと軽いので、金の原子核が原点で静止しているものと考え、 α 粒子の運動を記述する系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}, \quad \hat{V} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}}, \quad Z_1 = 2, Z_2 = 79 \quad (5.3.1)$$

で与えられる。この式には金原子に束縛された電子の影響が含まれていないが、これは、 α 粒子よりずっと軽い電子が、 α 粒子の運動状態に及ぼす影響は小さいと考えての近似である。ただし、Rutherford 散乱において電子が果たす重要な役割が1つある。それは、十分遠方にある入射 α 粒子に金原子核が及ぼす Coulomb 斥力を打ち消す役割だ。ここではその効果を、相互作用ポテンシャルに遠方で急速に減衰する因子を付け足す修正

$$\hat{V} \rightarrow \hat{V} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\kappa\hat{r}}}{\hat{r}} \quad (5.3.2)$$

を行うことで取り入れることにする。

距離の依存性が (5.3.2) で与えられるポテンシャルは湯川ポテンシャルと呼ばれる。ここでは湯川ポテンシャルを用いて計算を行った後 $\kappa \rightarrow 0$ の極限を取ることで Coulomb 相互作用による散乱の結果を考察する。³⁾

最も単純な Born 近似では、微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = (2\pi)^4 m^2 \hbar^2 |\langle \mathbf{p} | \hat{V} | \mathbf{p}_0 \rangle|^2 \quad (5.3.3)$$

で与えられる。ポテンシャルの演算子を数値に置き換えるために、位置固有状態の完全系をはさむと、

$$\langle \mathbf{p} | \frac{e^{-\kappa\hat{r}}}{\hat{r}} | \mathbf{p}_0 \rangle = \int d^3x \frac{e^{-\kappa r}}{r} \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}_0 \rangle = \int \frac{d^3x}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x} \right]$$

となるので、 $\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}$ 方向を z 軸とする極座標表示で、 $\hbar q = |\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}|$ とおけば

$$= \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \frac{r^2 \sin\theta'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{-\kappa r}}{r} e^{iqr \cos\theta'}$$

³⁾ この操作を行うのは計算の簡略化の他、Coulomb 相互作用特有の問題を避ける目的がある。この問題について定性的に述べておこう。第2章で見た、運動エネルギーの極座標表示の形を与える方程式

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = (\hat{\mathbf{x}}^2)^{-1} \left((\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 - i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{L}}^2 \right)$$

を思い出せば、遠心力のポテンシャルに相当する項 $(\hat{\mathbf{x}}^2)^{-1} \hat{\mathbf{L}}^2$ は遠方では $r^2 = \mathbf{x}^2$ に反比例して弱まることになる。一方、Coulomb 相互作用は r に反比例して弱まるため、遠方では遠心力ポテンシャルより Coulomb 相互作用の働きが支配的になる。ここでは初期状態を運動量固有状態に置き換える近似を行っているが、遠方での Coulomb 相互作用が無視できない場合は、これはあまり良い近似にはならない。この場合は Coulomb 相互作用の影響を取り入れた近似を行う必要がある。

$$\begin{aligned}
&= \int_0^\infty \frac{dr}{iq(2\pi)^2\hbar^3} e^{-\kappa r} (e^{iqr} - e^{-iqr}) \\
&= -\frac{1}{iq(2\pi)^2\hbar^3} \left(\frac{1}{iq - \kappa} + \frac{1}{iq + \kappa} \right) = \frac{-1}{(2\pi)^2\hbar^3} \frac{2}{q^2 + \kappa^2} \quad (5.3.4)
\end{aligned}$$

という計算結果が得られる。これを用いると $\kappa \rightarrow 0$ での微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{4m^2}{\hbar^4} \frac{1}{(q^2 + \kappa^2)^2} \rightarrow \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{4m^2}{\hbar^4} \frac{1}{q^4} \quad (5.3.5)$$

となる。ここで、散乱振幅に寄与する運動量が $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}_0|$ という関係を満たすことに注意して、 $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_0 = p_0^2 \cos \theta$ とおくと、

$$\hbar^2 q^2 = (\mathbf{p}_0 - \mathbf{p})^2 = 2p_0^2(1 - \cos \theta) = 4p_0^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (5.3.6)$$

という関係が成り立つので、微分散乱断面積の最終的な式として、

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \varphi) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m^2}{4p_0^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (5.3.7)$$

という結果が得られる。ここで、散乱方向を指定する角度 (θ, ϕ) は、 \mathbf{p}_0 を軸とする極座標における角度である。

5.4 原子の発光

実験的には、水素原子の束縛エネルギーが離散的な値を取ることは、水素から放出される光のスペクトルを調べることで明らかになった。

第2章では水素原子の固有値問題を解いて、束縛エネルギーが離散的な値に限られることを見たが、励起状態の水素原子がよりエネルギーの低い状態へ移るメカニズムについては扱わなかった。この問題は電磁場を記述する場の量子論と、状態が変化する過程を記述する散乱の量子論の方法を組み合わせるようになる。以下では、最も簡単な励起状態を用いて、光の放出のメカニズムの解説を行いたい。

5.4.1 ハミルトニアン

今考えるのは、陽子に束縛された電子と電磁場が相互作用する系である。簡略化のため、電子のスピンは無視し、陽子の運動状態は変化しないものとして扱うこととする。陽子を系の原点に固定すると、陽子は原点を中心とする Coulomb ポテンシャルを生み出す。ここに、電子と相互作用する電磁場の自由度を加えたものが考察対象の系のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) \right)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}} + \sum_{a=1}^2 \int d^3k \hbar\omega_k \hat{c}^{a\dagger}(\mathbf{k}) \hat{c}^a(\mathbf{k}) \quad (5.4.1)$$

である。電磁場の Lorenz ゲージ条件は横波成分でない \hat{c}^0, \hat{c}^3 の行列要素を無視する処方で行い入れており、ベクトルポテンシャル (Schrödinger 描象⁴⁾) は偏極ベクトル \mathbf{E}_a を用

⁴⁾ Heisenberg 描象の演算子はこの場合、相互作用を含むハミルトニアンを用いて、

$$\hat{\mathbf{A}}_H(\mathbf{x}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right]\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{x})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right]$$

と定義される。

いて

$$\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{a=1,2} \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k}} \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) (\hat{c}^a(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}} + \hat{c}^{a\dagger}(\mathbf{k})e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}}) \quad (5.4.2)$$

で与えられる。この場合、Coulomb ポテンシャルを除いた静電ポテンシャル $\hat{\phi}$ は 0 となり、ハミルトニアンには現れない。

このハミルトニアンは、互いに相互作用しない“自由な”水素原子および電磁場のハミルトニアンと、これらの間の相互作用

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}} + \sum_{a=1}^2 \int d^3k \hbar\omega_k \hat{c}^{a\dagger}(\mathbf{k}) \hat{c}^a(\mathbf{k}), \quad (5.4.3)$$

$$\hat{V} = \frac{e}{2m} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) + \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{e^2}{2m} \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}})^2 \quad (5.4.4)$$

の部分に分けることができる。

\hat{H}_0 の固有状態は、水素原子の束縛状態のラベル n, l, m および光子の波数（運動量）、偏極を表すラベル \mathbf{k}, a を持つ同時固有状態で与えられる。光子数は一般に変化し得るので、 \hat{H}_0 の固有状態の完全性条件は

$$\hat{I} = \sum_{n,l,m} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{a_i=1,2} \int d^3k_1 \cdots d^3k_N |n, l, m; \mathbf{k}_1 a_1, \dots, \mathbf{k}_N a_N\rangle \langle n, l, m; \mathbf{k}_1 a_1, \dots, \mathbf{k}_N a_N| \quad (5.4.5)$$

と書ける。

5.4.2 光の散乱理論とその注釈

散乱の量子論は基本的に時間発展を追う方法であり、場の量子論であろうと、 \hat{H}_0 の固有状態を用いた形式論は同様に行える。散乱の前後において観測される \hat{H}_0 の固有状態を $|i\rangle, |f\rangle$ と略記すれば、S 行列の式および Lippmann-Schwinger 方程式は

$$\langle f | \hat{S}_I | i \rangle = \delta_{fi} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle f | \hat{V} | \psi_i^+ \rangle \quad (5.4.6)$$

$$|\psi_i^+\rangle = |i\rangle + \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} |\psi_i^+\rangle \quad (5.4.7)$$

と書ける。以下ではこれらの公式を用いて解析を行っていくわけであるが、その前にこの公式の導出過程に関して注釈を述べておきたい。

Lippmann-Schwinger 方程式の導出の際には、散乱の始めと終わりの段階において粒子同士が相互作用しないことを保証するため、断熱因子を導入する操作を行う。光子の実験では、遠方にある入射・散乱光子と電子の間に相互作用は働かないのだから、この操作は一見妥当に思えるかもしれない。しかし、断熱因子によって場の量子論の相互作用ポテンシャルを弱めることは、光子と電子の相互作用のみならず、“電磁場そのもの”と電子の間の相互作用も弱めてしまう。例えば、励起状態にある水素原子が光子を放出するのは水素原子と電磁場の間に相互作用が働いているためである。従って、断熱因子を導入すると、散乱実験の初期における光子の放出も抑制されてしまうこととなる。

断熱因子の有無によって生じる違いを、多少極端な例を用いて説明してみよう。非常に遠方、例えば数光年の宇宙の彼方から、励起状態の水素原子に向けて光子が飛んでくる状

況を考えてみよう。断熱因子を用いない場合、水素原子は間違いなく、入射光子が数年の旅を終える前に光子を放出して基底状態に戻ってしまうだろう。一方、入射光子と水素原子の相互作用が働かない間、ポテンシャルを(およそ)0とする断熱因子を導入すると、水素原子は入射光子が到来するまでの間、光子の放出を待ってくれることになる。電磁場との相互作用が計算に効いてくるのは、入射光子との相互作用が始まった後のこととなる。

つまり、断熱因子を用いて光子と電子の振る舞いを計算する際には、電子と場の相互作用によって生まれる効果が過小評価されることになる。もちろん、光子が到達するまでの間に(すなわち、実験状況が定める時間スケールにおいて)水素原子が受ける変化が実際に十分小さいと言えるならば、断熱因子を用いた解析は妥当だと言える。

以下では、利便性の観点から Lippmann-Schwinger 方程式を用いて解析を行うが、その際、電子と場の相互作用の働きは十分弱いものであるという、暗黙の前提が入り込むことは認識しておくべきである。

5.4.3 放出過程の記述

色々注意すべき点はあるが、光子の吸収・放出が起きる確率が Lippmann-Schwinger 方程式を用いて予測可能であることは変わらない。予測が出せるならば、実験との比較によって用いた近似の妥当性を議論することもできる。

以下では第一励起状態、すなわち、 $n = 2$ の水素原子による光の放出を考える。この場合、始状態、終状態としては

$$|i\rangle = |2, l, m; 0\rangle, \quad |f\rangle = |1, 0, 0; \mathbf{k}, a\rangle = \hat{c}^{a\dagger}(\mathbf{k})|1, 0, 0; 0\rangle \quad (5.4.8)$$

を考える。相互作用のポテンシャルは

$$\hat{V} = \frac{e}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) + \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \hat{\mathbf{p}} \right) + \frac{e^2}{2m} \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}})^2 \quad (5.4.9)$$

であり、交換子の公式 $[\hat{C}, \hat{A}^2] = \hat{A}[\hat{C}, \hat{A}] + [\hat{C}, \hat{A}]\hat{A}$ に注意すると生成演算子との交換関係は

$$[\hat{c}^a(\mathbf{k}), \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}})] = \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3 \epsilon_0 \omega_k}} \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} \quad (5.4.10)$$

$$[\hat{c}^a(\mathbf{k}), \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}})^2] = 2\sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3 \epsilon_0 \omega_k}} \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} \quad (5.4.11)$$

で与えられる。ここで真空の性質 $\langle 0 | \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{x}) | 0 \rangle = 0$ に注意すれば \mathbf{A} の 2 次の項は、今考えたい放出過程には寄与しないことがわかる。

さて、Born 近似での散乱振幅⁵⁾は $-2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle f | \hat{V} | i \rangle$ で与えられる。 $\mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = 0$ から演算子の等式 $\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) + \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \hat{\mathbf{p}} = 2\hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \hat{\mathbf{p}}$ が成り立つので、行列要素の計算は

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{V} | i \rangle &= \frac{e}{m} \langle f | \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle = \frac{e}{m} \langle 1, 0, 0; 0 | \hat{c}^a(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{x}}) \cdot \hat{\mathbf{p}} | 2, l, m; 0 \rangle \\ &= \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3 \epsilon_0 \omega_k}} \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} | 2, l, m; 0 \rangle \end{aligned} \quad (5.4.12)$$

⁵⁾ 今は散乱過程ではないので、遷移が起きる確率を与える遷移振幅と呼ぶほうが正確かもしれない。

となる。

実験開始から時刻 $2T$ が経過した後で波数 \mathbf{k} を持つ光子が見出される確率は、波数の微小体積要素を用いて

$$\Delta P(\mathbf{k}) = k^2 \sin \theta \Delta k \Delta \theta \Delta \varphi \left| 2\pi \delta(E_f - E_i) \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \quad (5.4.13)$$

と書ける。これを $2T$ で割れば、単位時間あたりにこの波数を持つ光子が観測される確率が求まる。

δ 関数の 2 乗は、 δ 関数を実験の時間スケールを用いた表式

$$\delta(E_f - E_i) \approx \frac{1}{\pi(E_f - E_i)} \sin \left(\frac{E_f - E_i}{\hbar} T \right) \quad (5.4.14)$$

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \omega T}{\omega^2 T} \approx \delta(\omega) \quad (5.4.15)$$

を用いて単なる δ 関数に直せる。すると、この式は

$$\frac{\Delta P(\mathbf{k})}{2T} = k^2 \sin \theta \Delta k \Delta \theta \Delta \varphi \frac{2\pi}{\hbar^2} \delta \left(\frac{E_f - E_i}{\hbar} \right) \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \quad (5.4.16)$$

となる。変数変換 $\Delta k = \Delta \omega_k / c$ を行い、始状態と終状態のエネルギー差が、水素原子のエネルギー

$$\mathcal{E}_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (5.4.17)$$

を用いた関係式 $E_f - E_i = \mathcal{E}_1 + \hbar \omega_k - \mathcal{E}_2$ で与えられることに留意しつつ δ 関数の積分を行えば、単位時間当たりの遷移確率は

$$\frac{\Delta P(\mathbf{k})}{2T} = k^2 \sin \theta \Delta \theta \Delta \varphi \frac{2\pi}{\hbar^2 c} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \quad (5.4.18)$$

となる。ここで、 $\omega_k = kc$ は

$$\hbar \omega_k = \frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3me^4}{128\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = \frac{3me^4}{2^7 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \quad (5.4.19)$$

で与えられる。

この式に始状態と終状態で挟んだポテンシャルの行列要素

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2(2\pi)^3 \epsilon_0 \omega_k}} \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} | 2, l, m; 0 \rangle$$

を代入して計算を行えば遷移確率が求まる。次の節では、行列要素 $\langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} | 2, l, m; 0 \rangle$ の計算の詳細を追っていくことにしたい。

5.4.4 行列要素の計算

行列要素の計算には水素原子の状態に関する知識が必要となる。第2章での議論を振り返ると、水素原子の規格化された固有状態は極座標表示で

$$\langle r, \alpha, \beta | n, l, m \rangle = R_{n,l}(\rho) Y_{l,m}(\alpha, \beta) \quad (5.4.20)$$

という形に書けるのだった。ここで、 $\rho = r/a_B$ で、角度を表す記号 θ, φ は光子の進行方向の記述に使ったので、代わりに α, β を用いている。以下の計算で用いる固有状態の具体形は、次の公式で与えられる。

$$\begin{aligned} R_{1,0}(\rho) &= \frac{2}{\sqrt{a_B^3}} \exp[-\rho], & R_{2,0}(\rho) &= \frac{1}{\sqrt{2a_B^3}} (1 - \rho/2) \exp[-\rho/2], \\ R_{2,1}(\rho) &= \frac{1}{2\sqrt{6a_B^3}} \rho \exp[-\rho/2], & Y_{0,0}(\alpha, \beta) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\ Y_{1,\pm 1}(\alpha, \beta) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \alpha e^{\pm i\beta} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r}, & Y_{1,0}(\alpha, \beta) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \alpha = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \end{aligned} \quad (5.4.21)$$

行列要素 $\langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} | 2, l, m; 0 \rangle$ を計算するには、演算子 $\mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}}$ をこれら固有状態で挟んで積分すれば良い。そのまま計算しても答えは出るのが、計算の見通しを良くするため、ここでは双極子近似と呼ばれる近似を行うことにしたい。これは、積分中の $\exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}]$ の値を 1 とおく近似のことである。

この近似が成り立つ根拠についても述べておこう。放出される光子のエネルギーは $\hbar\omega_k = 13.6 \times 3/4 = 10.2\text{eV}$ であり、ここから波数ベクトルの大きさを求めると、 $k = \hbar\omega_k/\hbar c = 5.16 \times 10^7\text{m}^{-1}$ という値が得られる。水素原子の状態は Bohr 半径 $a_B = 0.53 \times 10^{-10}\text{m}$ ほどのスケールで指数的に減衰する因子を持つため、行列要素の計算に寄与する $\hat{\mathbf{x}}$ の値はおおよそ a_B 程度であると考えてよい。ここから、積分中での $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$ の大きさを見積もるとおおよそ 10^{-2} 程度となる。これは (求める精度にもよるのだが) 小さい値であるので、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \approx 0$ とおいた近似が考えられる。これが、双極子近似である。

双極子近似では、交換関係 $\hat{\mathbf{p}} = \frac{i\hbar m}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{\mathbf{r}}]$ から、求めるべき行列要素は

$$\langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{p}} | 2, l, m; 0 \rangle = -im\omega_k \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, l, m; 0 \rangle \quad (5.4.22)$$

と書けるので、(5.4.21) から $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ の行列要素を計算しておけば遷移確率が計算できる。始状態としては $(n, l, m) = (2, 0, 0), (2, 1, \pm 1), (2, 1, 0)$ の 4 通りが考えられるから、計算すべき行列要素は 12 個存在する。この計算結果を列挙したものが次の式である。

$$\begin{aligned} \langle 1, 0, 0; 0 | \hat{z} | 2, 1, 0; 0 \rangle &= \frac{a_B}{4\sqrt{2}\pi} \int_0^\infty d\rho \rho^4 e^{-\frac{3\rho}{2}} \int_0^\pi d\alpha \int_0^{2\pi} d\beta \sin \alpha \cos^2 \alpha = \frac{2^8 a_B}{3^5 \sqrt{2}} \\ \langle 1, 0, 0; 0 | \hat{x} \mp i\hat{y} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle &= \frac{a_B}{8\pi} \int_0^\infty d\rho \rho^4 e^{-\frac{3\rho}{2}} \int_0^\pi d\alpha \int_0^{2\pi} d\beta \sin^3 \alpha = \mp \frac{2^8 a_B}{3^5} \\ \langle 1, 0, 0; 0 | \hat{r} | 2, 0, 0; 0 \rangle &= \langle 1, 0, 0; 0 | \hat{x} | 2, 1, 0; 0 \rangle = \langle 1, 0, 0; 0 | \hat{y} | 2, 1, 0; 0 \rangle \\ &= \langle 1, 0, 0; 0 | \hat{z} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle = \langle 1, 0, 0; 0 | \hat{x} \pm i\hat{y} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle = 0 \end{aligned} \quad (5.4.23)$$

0 になる行列要素の計算は角度依存性に注目して行えばよい。ここから、計算に寄与する行列要素は

$$\langle 1, 0, 0; 0 | \hat{x} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle = \mp \frac{2^7 a_B}{3^5} \quad (5.4.24)$$

$$\langle 1, 0, 0; 0 | \hat{y} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle = -i \frac{2^7 a_B}{3^5} \quad (5.4.25)$$

$$\langle 1, 0, 0; 0 | \hat{z} | 2, 1, 0; 0 \rangle = \frac{2^8 a_B}{3^5 \sqrt{2}} \quad (5.4.26)$$

のみだとわかる。

5.4.5 励起状態の寿命

計算準備が整ったので、光子の放出の話に戻ろう。単位時間にある方向に光子が放出される確率は (5.4.18) を用いて計算されるが、これを全方向で積分した量

$$W = k^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{2\pi}{\hbar^2 c} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \quad (5.4.27)$$

は、単位時間に（その方向は問わず）光子が放出される確率を与える。ここではこの W を計算し、水素原子が基底状態に落ち込むまでの時間、すなわち励起状態の寿命の見積もりを出したい。

θ, φ 積分は、偏極ベクトルを

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k \sin \theta \cos \varphi \\ k \sin \theta \sin \varphi \\ k \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_1(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \varphi \\ \cos \theta \sin \varphi \\ -\sin \theta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_2(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.4.28)$$

と書いたとき成り立つ公式

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \alpha_i \alpha_j = \begin{cases} \frac{2\pi}{3} & (i = j = 1, 2) \\ \frac{8\pi}{3} & (i = j = 3) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (5.4.29)$$

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \beta_i \beta_j = \begin{cases} 2\pi & (i = j = 1, 2) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (5.4.30)$$

を用いて計算すればよい。

双極子近似での行列要素は

$$\langle f | \hat{V} | i \rangle = -ie \sqrt{\frac{\hbar \omega_k}{2(2\pi)^3 \epsilon_0}} \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_a(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, l, m; 0 \rangle \quad (5.4.31)$$

で、(5.4.24), (5.4.25), (5.4.26) を用いて計算を行えば、その具体形は

$$\begin{aligned} \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_1(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle &= \frac{2^7 a_B}{3^5} (\mp \alpha_1 - i \alpha_2) \\ \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_1(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, 0; 0 \rangle &= \frac{2^8 a_B}{3^5 \sqrt{2}} \alpha_3 \\ \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_2(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle &= \frac{2^7 a_B}{3^5} (\mp \beta_1 - i \beta_2) \\ \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_2(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, 0; 0 \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (5.4.32)$$

と書けることがわかる。

以上の点に注意すれば、角運動量 $m = \pm 1, 0$ の水素原子から偏極 $a = 1, 2$ を持つ光子が放出される遷移確率 $W(a, m)$ として、

$$W(1, \pm 1) = k^2 \frac{2\pi}{\hbar^2 c} \frac{e^2 \hbar \omega_k}{2(2\pi)^3 \epsilon_0} \cdot \frac{2^{14} a_B^2}{3^{10}} \cdot \frac{4\pi}{3} = \frac{e^2 \omega_k^3 a_B^2}{\hbar c^3 \epsilon_0} \cdot \frac{2^{13}}{3^{11} \pi} \quad (5.4.33)$$

$$W(1, 0) = k^2 \frac{2\pi}{\hbar^2 c} \frac{e^2 \hbar \omega_k}{2(2\pi)^3 \epsilon_0} \cdot \frac{2^{15} a_B^2}{3^{10}} \cdot \frac{8\pi}{3} = \frac{e^2 \omega_k^3 a_B^2}{\hbar c^3 \epsilon_0} \cdot \frac{2^{15}}{3^{11} \pi} \quad (5.4.34)$$

$$W(2, \pm 1) = k^2 \frac{2\pi}{\hbar^2 c} \frac{e^2 \hbar \omega_k}{2(2\pi)^3 \epsilon_0} \cdot \frac{2^{14} a_B^2}{3^{10}} \cdot 4\pi = \frac{e^2 \omega_k^3 a_B^2}{\hbar c^3 \epsilon_0} \cdot \frac{2^{13}}{3^{10} \pi} \quad (5.4.35)$$

$$W(2, 0) = 0 \quad (5.4.36)$$

という結果が得られる。

ここから数値を見積もるためにパラメータを整理する。既に計算した量 $a_B = 0.53 \times 10^{-10} \text{m}$, $k = \omega_k/c = 5.16 \times 10^7 \text{m}^{-1}$ を利用したいので、関係式

$$\begin{aligned} a_B &= \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \Rightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} = \frac{me^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \\ \Rightarrow \hbar \omega_k &= \frac{3me^4}{27\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} = \frac{3}{8} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} \Rightarrow \frac{e^2}{\epsilon_0} = \frac{2^5 \pi \hbar \omega_k a_B}{3} \end{aligned} \quad (5.4.37)$$

を用いると、遷移確率に現れる因子の値は

$$\begin{aligned} \frac{e^2 \omega_k^3 a_B^2}{\hbar c^3 \epsilon_0} &= \frac{\omega_k^3 a_B^2}{\hbar c^3} \frac{2^5 \pi \hbar \omega_k a_B}{3} = \frac{2^5 \pi \omega_k^4 a_B^3}{3c^3} \\ &= \frac{2^5 \pi}{3} \frac{\omega_k^4}{c^4} a_B^3 c = \frac{2^5 \pi}{3} \times 3.16 \times 10^8 \text{s}^{-1} \end{aligned} \quad (5.4.38)$$

となる。これを用いれば、単位時間当たりの遷移確率の数値として、

$$W(1, \pm 1) = \frac{2^{18}}{3^{12}} \times 3.16 \times 10^8 \text{s}^{-1} = 1.56 \times 10^8 \text{s}^{-1} \quad (5.4.39)$$

$$W(1, 0) = \frac{2^{20}}{3^{12}} \times 3.16 \times 10^8 \text{s}^{-1} = 6.23 \times 10^8 \text{s}^{-1} \quad (5.4.40)$$

$$W(2, \pm 1) = \frac{2^{18}}{3^{11}} \times 3.16 \times 10^8 \text{s}^{-1} = 4.68 \times 10^8 \text{s}^{-1} \quad (5.4.41)$$

$$W(2, 0) = 0 \quad (5.4.42)$$

という結果が得られる。

ある時間 τ の間に遷移が起きる確率は、単位時間当たりの遷移確率 W に τ を掛けることで見積もることができる。 W を用いた計算では待てば待つほど遷移が起きる確率は上昇するので、時間 $\tau = 1/W$ だけ待てばほぼ確実に遷移が起きると考えられる。もちろん、 τ が増して行って確率が 1 に達したならば、そこから先の確率は τ によらず 1 としなければならない。

$(n, l, m) = (2, 1, 0)$ の状態にある水素原子は偏極ベクトル \mathbf{E}_1 を持つ光子を放出し、単位時間に $W(1, 0)$ の確率で基底状態へ移る。基底状態へ移る確率が 1 になるまでにかかる時間を見積もれば、 $1/W(1, 0) = 1.6 \times 10^{-9} \text{s}$ という結果が得られる。

$(n, l, m) = (2, 1, \pm 1)$ の状態にある水素原子は偏極ベクトル \mathbf{E}_1 あるいは \mathbf{E}_2 を持つ光子を放出するので、単位時間に $W(1, \pm 1) + W(2, \pm 1)$ の確率で基底状態へ移る。基底状態へ移る確率が 1 になるまでにかかる時間は $W(1, \pm 1) + W(2, \pm 1)$ の逆数で与えられ、およそ $1.6 \times 10^{-9} \text{s}$ という値を持つ。

5.4.6 光子のスピン角運動量

水素原子の性質に関する計算は見たので、次は放出される光子に性質について解説を行う。光子が z 軸方向に放出される場合、 $\theta = 0, \varphi = 0$ として、波数および偏極ベクトルは

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_1(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_2(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.4.43)$$

で与えられる. これを放出を特徴付ける行列要素の式に代入すると

$$\begin{aligned}
 \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_1(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle &= \frac{2^7 a_B}{3^5} (\mp \alpha_1 - i \alpha_2) = \mp \frac{2^7 a_B}{3^5} \\
 \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_1(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, 0; 0 \rangle &= \frac{2^8 a_B}{3^5 \sqrt{2}} \alpha_3 = 0 \\
 \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_2(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle &= \frac{2^7 a_B}{3^5} (\mp \beta_1 - i \beta_2) = -i \frac{2^7 a_B}{3^5} \\
 \langle 1, 0, 0; 0 | \mathbf{E}_2(\mathbf{k}) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, 0; 0 \rangle &= 0
 \end{aligned} \tag{5.4.44}$$

という結果が得られる. まずここから, $m = 0$ の状態にある水素原子から放出される光子は, z 軸方向へは進まないことがわかる. さらに, z 軸方向への放射がある $m = \pm 1$ の状態について式の変形を行うと,

$$\begin{aligned}
 \langle 1, 0, 0; 0 | (\mathbf{E}_1(\mathbf{k}) \pm i \mathbf{E}_2(\mathbf{k})) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle &= 0 \\
 \langle 1, 0, 0; 0 | (\mathbf{E}_1(\mathbf{k}) \mp i \mathbf{E}_2(\mathbf{k})) \cdot \hat{\mathbf{r}} | 2, 1, \pm 1; 0 \rangle &= \mp \frac{2^8 a_B}{3^5}
 \end{aligned} \tag{5.4.45}$$

という式が得られる.

ここで, 偏極状態を重ね合わせた 1 光子状態

$$|f_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{c}^{\dagger}(\mathbf{k}) \pm i \hat{c}^{2\dagger}(\mathbf{k})) |1, 0, 0; 0\rangle \tag{5.4.46}$$

を考えてみよう. (5.4.45) は始状態 $|2, 1, \pm 1; 0\rangle$ から終状態 $|f_{\pm}\rangle$ への遷移は起こり得るが, $|f_{\mp}\rangle$ への遷移は起きないことを表している. ここで現れる演算子を

$$\hat{C}_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{c}^{\dagger}(\mathbf{k}) \pm i \hat{c}^2(\mathbf{k})) \tag{5.4.47}$$

とおけば, これらは交換関係

$$[\hat{C}_{\pm}(\mathbf{k}), \hat{C}_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{k}')] = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad [\hat{C}_{\pm}(\mathbf{k}), \hat{C}_{\mp}(\mathbf{k}')] = [\hat{C}_{\pm}(\mathbf{k}), \hat{C}_{\mp}^{\dagger}(\mathbf{k}')] = 0 \tag{5.4.48}$$

に従うため, 直交する状態にある光子の生成・消滅演算子と見なせる.

角運動量保存則が成り立つものとする. 始状態において水素原子が持っていた角運動量 $l = 1, m = \pm 1$ は終状態において光子に移行したものと考えられる. 従って z 方向に進む, 状態 $\hat{C}_{\pm}^{\dagger}|0\rangle$ にある光子は大きさ 1 で z 方向に ± 1 の値を持つ角運動量を持つと考えられる. この考えを一般化すると, $\hat{C}_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{k})$ が生成する光子の状態は, 光子が \mathbf{k} 方向に値 ± 1 の角運動量を持つ固有状態と見なせるだろう.

5.5 第5章のまとめ

この章では, 散乱実験の状況設定を解説し, ある程度一般性を持つ, Lippmann-Schwinger 方程式を基礎とする散乱理論を展開した. 簡単な例として Born 近似による計算もいくつか行った. 散乱の量子論は幅広い現象の記述に利用される手法であり, 扱う対象に応じた様々な方法が開発されている. 本書で述べた方法はその一例に過ぎないことを断っておく.

最後に, この章を書くにあたって参考となった文献を挙げておく. 散乱の一般論や状況設定の話は

- [1] 倉本義夫・江澤潤一 『量子力学』 (現代物理学 [基礎シリーズ]) (朝倉書店 2008)
- [2] 梅沢博臣 Giuseppe Vitiello (著) 保江邦夫・治部真里 (訳) 『量子力学—変換理論と散乱理論』 (日本評論社 2005 第1刷発行)
- [3] 後藤憲一・山本邦夫・神吉健・西山敏之・望月和子・興地斐男 『詳解理論応用量子力学演習』 (共立出版 1982 初版1刷発行)

を参考にまとめた. 特に, 理論の詳しい部分は [3] が助けになった. 光子の放出の計算は演習書である

- [4] 井上健 (監修) 三枝寿勝・瀬藤憲昭 (著) 『量子力学演習—シッフの問題解説—』 (吉岡書店 1971 第1刷発行)

の結果と比較して確認を行った. この演習書は計算が詳しく書いてあり, 読みやすかった.

多くの教科書に載っている散乱の量子論は色々と疑問点が出てくることも多い. 本書にもそのような個所は多く見受けられるものと思われる. ネット上で見れる次の文献

- [5] 島村 勲 『衝突論ノート』 <http://ribf.riken.jp/shimamura/CollNote-edited.pdf> 最終閲覧日 2019/01/05

は, 散乱の量子論についてわかったつもりにならないために大切なことが多く書かれており, 参考になった.

付録 A

量子力学の数学的基礎

Dirac が編み出したブラケット記法はその豊かな表現力によって、幅広い量子力学の話題に一貫した記述を与えてくれる。状態ベクトルの計算規則はまた、連続性や無限の扱いといった、数学的な問題の宝庫でもある。単なる計算手段としての扱いを超えて、数学の世界に一步踏み入れてみれば、ブラケット記法はまた別の側面を覗かせる。

ブラケット記法の数学的構成を真面目に考えると、本文中では形式的な表現として済ませていた様々な計算の是非が議題に上る。特に、状態ベクトルの無限和や積分など、極限の操作が絡む計算は相当慎重に議論されると思ってよい。例えば、本書ではパラメータ依存する状態ベクトルの積分

$$|\phi\rangle = \int da |\psi_a\rangle \quad (\text{A.0.1})$$

は、任意の状態ベクトル $|\varphi\rangle$ に対し

$$\langle\varphi|\phi\rangle = \int da \langle\varphi|\psi_a\rangle \quad (\text{A.0.2})$$

という関係式を満たす状態ベクトル $|\phi\rangle$ を求める操作だと述べた。この操作に対しては次のような疑問を挙げることができる。

- このような $|\phi\rangle$ は本当に存在するのか。仮に存在するとして、複数の異なる計算結果が出る恐れはないのか。
- どのような条件を満たす $|\psi_a\rangle$ に対しこのような操作が可能なのか。無条件に積分が実行できないならば、どのような点に注意しなければならないのか。
- 積分を用いて表現される状態ベクトルが多々あるが、これらは本当に状態ベクトルと呼んでよいものか。

このように、形式的なブラケット記法には数々の疑問の種が潜んでいる。こういった疑問について考え、答えを出すためには、無限や極限といった操作の詳細を見せてくれる、数学の仕事道具が必要になってくる。

ブラケット記法の数学的基礎は、^{ヒルベルト}Hilbert空間というベクトル空間で定義された線形演算子に関する理論によって与えられることが知られている。Hilbert 空間の概念を用いた量子力学の解説書としては、基礎的な部分から丁寧に解説を行っている教科書

新井朝雄・江沢洋『量子力学の数学的基礎 I・II』（朝倉書店 1999）

が参考になると思う。とはいえ、この本は分量のある数学書なので、その解説は骨が折れ

る。そこで、この付録では、本書で用いた計算規則の助けを借りて重要な数学的概念や定理の概説を行い、ブラケット記法の深奥に踏み込む読者への手引きとしたい。

A.1 Hilbert 空間

ブラケット記法の理論を数学的に組み立てるにあたり、まず行うべきことは最も基本的な構成要素である状態ベクトルの空間、すなわち状態空間を用意することだ。状態空間は、内積が定義された無限次元のベクトル空間で、さらには状態ベクトルの形式的積分のような演算を導く素地を備えていることが望まれる。このような状態空間として議論の土台に据えられるのが、Hilbert 空間と呼ばれるベクトル空間だ。その定義は、次の通りである。

定義 1 Hilbert 空間

Hilbert 空間とは、完備な内積空間のことである。

以下ではこの Hilbert 空間の概念と、本論における状態空間との関係や注意点について見ていくことにしよう。

A.1.1 内積空間の完備性

まず出てきた内積空間という言葉であるが、これは第 1 章で見た、3つの性質（線形性、双対性、正定値性）を持つ演算である内積が定義されたベクトル空間のことである。内積の扱いは本論の議論とほとんど同じであるが、 δ 関数を用いた形式的な内積 $\langle x|x' \rangle = \delta(x-x')$ はこれから正当化されるべき事柄なので、用いることはできない。

本論では離散固有値と連続固有値を持つ物理量を統一的に扱うため、離散固有状態も連続固有状態も状態ベクトルと見なしたが、内積が定義されない以上、連続固有状態 $|x\rangle$ は数学的な状態空間からは除外して考えねばならない。以下では、物理の流儀で用いる状態 $|\psi\rangle$ と、数学の流儀で用いられる状態を太字で $|\boldsymbol{\psi}\rangle$ と書いて区別することにしたい。数学の流儀での内積 $\langle \boldsymbol{\psi}|\boldsymbol{\phi}\rangle$ は必ず有限な複素数値を取るようになる。

内積が定義されるベクトル空間においては、ベクトルの大きさを表すノルムという量が定義されるのだった。これを記号

$$\|\boldsymbol{\psi}\| = \sqrt{\langle \boldsymbol{\psi}|\boldsymbol{\psi}\rangle} \quad (\text{A.1.1})$$

で表すことにしよう。ノルムはベクトルの大きさを表すほか、差のノルム $\|\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\phi}\|$ を測ることで2つのベクトルがどの程度異なるかを判別する役割を果たす。内積の正定値性から、 $\|\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\phi}\| = 0$ は取りも直さず $|\boldsymbol{\psi}\rangle = |\boldsymbol{\phi}\rangle$ であることを表す。

状態空間の候補となるベクトル空間を以下、記号 \mathcal{H} で表すことにしよう。 \mathcal{H} は少なくとも無限次元内積空間の性質を備える必要がある。そこで出発点として、無限個のベクトルの集合 $\{|\boldsymbol{\phi}_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ を用意し、内積の規則 $\langle \boldsymbol{\phi}_n|\boldsymbol{\phi}_m\rangle = \delta_{nm}$ を設定することで内積空間 \mathcal{H} を構成することを考えたい。正規直交系に属すベクトル $|\boldsymbol{\phi}_n\rangle$ を要素に含む集合 \mathcal{H} がベクトル空間となるように、これらの線形結合

$$|\boldsymbol{\psi}\rangle = \sum_{k=1}^N c_k |\boldsymbol{\phi}_k\rangle \quad (\text{A.1.2})$$

も要素に加えることにしたい。

さて、有限個のベクトルの線形結合で書けるベクトルが \mathcal{H} のメンバーであると考えるのは良いだろう。続いて、ベクトルの無限和

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_k |\phi_k\rangle, \quad \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty \quad (\text{A.1.3})$$

を \mathcal{H} に加える操作を考えたいのだが、これは可能だろうか？この疑問は下手に考え出すととなかなか面倒な問題でもある。

少し下手な考えというものをやってみよう。ベクトルを加える操作はいくらでも繰り返すことができるから、どんなに多数のベクトルであっても、和をとってベクトルの集合に加えていくことはできるはずだ。しかし、ベクトルの無限和を求めるには無限回の操作が必要になる。そんな、終わらない操作の果てに得られる（とされている）ものが考察対象 \mathcal{H} の中に存在していると考えて良いものだろうか？例えば、このような疑問が無限を扱う際には付きまとうわけだ。

この問いに数学者は、内積空間が完備ならこの種の無限和は存在すると答える。それでは、完備の概念とはどのようなものだろうか。まずは完備性と関連する、極限操作についての用語を準備しよう。

定義 2 収束列と Cauchy 列

- 状態ベクトルの列 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ と $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (\mathcal{H} の要素 $|\psi\rangle$ と読む) に対し

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi\| = 0 \quad (\text{A.1.4})$$

が成り立つとき、 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ は $|\psi\rangle$ に収束するといひ、この関係を記号

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n\rangle = |\psi\rangle \quad (\text{A.1.5})$$

で表す。 \mathcal{H} に属すベクトルに収束するベクトルの列を収束列という。

- 収束列はまた、 $\lim_{n,m \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi_m\| = 0$ という性質を持つことが知られている。これは内積の性質から導かれる、三角不等式と呼ばれる関係 $\|\psi - \phi\| \leq \|\psi\| + \|\phi\|$ を用いて

$$\|\psi_n - \psi_m\| \leq \|\psi_n - \psi\| + \|\psi - \psi_m\| \rightarrow 0 \quad (n, m \rightarrow \infty) \quad (\text{A.1.6})$$

が成り立つことから言える。

- 性質 $\lim_{n,m \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi_m\| = 0$ が成り立つか否かは純粋に $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ の持つ性質のみから判定される。この性質を満たすベクトルの列を **Cauchy 列** という。

ベクトルの無限和を有限和 $|\psi_n\rangle = \sum_{k=1}^n c_k |\phi_k\rangle$ の極限と見なしたとき、係数が $\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$ を満たすならば、有限和のベクトルの列 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ は Cauchy 列となる。 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ が Cauchy 列であるということは、 n を増していくと次第に $|\psi_n\rangle$ が変化しなくなるということだ。直観的には、Cauchy 列のベクトルが変化しなくなるならば、最終的には何らかのベクトルに収束するように思われるが、一方、先ほど述べたように、ベクトルの無限和はいくら計算しても計算し終わらないのだから存在が怪しいという考えもある。

Cauchy 列の収束に関して、収束する派としない派で意見が分かれてしまった。しかし、無限というのもあくまで概念であって、それに対する感覚、感触も人それぞれである以上、無限和の操作ができる、できないを言い争っても正しい一つの答えが出せるとは限らない。

そこで数学者はひとまず、無限に関する性質を明確に規定する用語を発明して議論の整理を行う。ここで導入されるのが、完備性の概念である。

定義 3 内積空間の完備性

内積空間 \mathcal{H} の Cauchy 列 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ に対し、 $\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n\rangle = |\psi\rangle$ を満たす $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ が必ず存在するならば、 \mathcal{H} は完備であるという。

この用語のおかげで、Cauchy 列の収束に関する感覚的な対立を、ベクトル空間がこの性質を満たすか否かという、答えが出せる議論に移すことができる。そこから完備なベクトル空間の例を探したり、完備な内積空間を構成する方法を考えたりすることで、無限和の存在などが正当化される。

Cauchy 列の極限が \mathcal{H} に存在するか懐疑的な人のために、Cauchy 列を用いて完備な内積空間を構成する方法に触れておこう。 \mathcal{H} の Cauchy 列を大文字を用いて $\Psi = \{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ と表し、Cauchy 列同士の和とスカラー倍を

$$\Psi + \Phi = \{|\psi_n\rangle + |\phi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}, \quad a\Psi = \{a|\psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty} \quad (\text{A.1.7})$$

で定義し、内積を

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \psi_n | \phi_n \rangle \quad (\text{A.1.8})$$

で定義すれば、Cauchy 列の集合を内積空間とすることができる。ただし、内積の正定値性を成り立たせるため、異なる Cauchy 列であっても $\|\Psi - \Phi\| = 0$ を満たすものは同一視し、 $\Psi = \Phi$ と見なさねばならないことに注意しよう。このようにして、Cauchy 列の集合を内積空間と考えた時、この集合は完備な内積空間となることが知られている。証明の詳細を追うにはいろいろと準備があるのでここでは述べないが、興味のある方は先に挙げた参考書などに当たってほしい。

完備な内積空間、つまり Hilbert 空間というものを考えれば、少なくとも無限和の計算は気軽に行うことができる。完備性の仮定にはさらなる利点がある。それは、直接計算して求めるのが難しいベクトルの存在を、Cauchy 列を用いて間接的に証明する論法が使えることだ。完備性は、ブラケット記法の様々な計算を正当化する際、難所となる定理の証明に欠かせない重要な性質なのである。

A.1.2 可分性と稠密な部分集合

無限和もその要素に含むベクトル空間を考えた場合、無限次元の正規直交系 $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ は完全正規直交系を成すと考えてよいだろう。完全正規直交系の有限和を全て含む集合

$$\mathcal{L} = \left\{ |\psi_n\rangle = \sum_{k=1}^n c_k |\phi_k\rangle \right\}, \quad c_k \in \mathbb{C}, n \in \mathbb{N} \quad (\text{A.1.9})$$

を考えると、任意のベクトル $|\psi\rangle$ は \mathcal{L} のベクトルの極限として書くことができる。つまり、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n\rangle = |\psi\rangle \quad (\text{A.1.10})$$

を満たすベクトルの列 $\{|\psi_n\rangle \in \mathcal{L}\}_{n=1}^{\infty}$ がいつでも取れる。このように、任意のベクトルに収束する列を作れるベクトルの集合を稠密な部分集合という。完全正規直交系が成すベクトル空間 \mathcal{L} は稠密な部分集合の代表例である。

ベクトル空間に離散的 (可算) な完全正規直交系 $\{|\phi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ (連続的な要素から成る, $|x\rangle$ の集合などは含まない) が存在すると言えるかどうか. これは数学者には自明ではないようで, このような完全正規直交系が存在する内積空間のことを可分な内積空間と言って分類するようだ. 完全正規直交系もまた非常に便利な概念であるので, 数学的に状態空間を構成する場合には, 可分な Hilbert 空間が用いられる.

A.1.3 関数空間

状態ベクトル $|\psi\rangle$ は特定の表示, 例えば座標表示における係数 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ によって指定されるのだった. このことから, 関数そのものを用いて状態ベクトルを表現しようと考えすることは自然な成り行きである.

微積分や Fourier 展開を始めとする関数の極限操作を扱う分野を関数解析という. Hilbert 空間論と関数解析は関連が深く, 関数を状態ベクトルとして見直すことが非常に有益なことも多い. このような理由で, 以下では状態ベクトルと関数の関係を簡単に解説することにしたい.

Hilbert 空間の要素となる状態ベクトルの“展開係数”となる関数 $\psi(x)$ は, ノルムの有限性のため,

$$\|\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 < \infty \quad (\text{A.1.11})$$

という性質を満たさねばならない. この性質を満たす関数は 2 乗積分可能であるという. 2 乗積分可能な関数を用いて線形結合を作ってもやはりノルムは有限となるので, 線形結合の操作は問題なく考えられる. よって, 2 乗積分可能な関数の空間 (L^2 と書くことにしよう) はベクトル空間となる.

さて, 2 乗積分可能な関数 ψ, ϕ の間の内積を

$$\langle \psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \phi(x) \quad (\text{A.1.12})$$

で定義すれば, L^2 は一見内積空間となるように思われるが, 実はここで正定値性が問題になる. そもそも関数 $\psi(x)$ とは, 実数 x に別の複素数値 $\psi(x)$ を対応させる働き $\psi: x \mapsto \psi(x)$ のことであった. この観点で見れば, $x=0$ での値をずらしただけの関数

$$\psi(x) = e^{-x^2}, \quad \psi'(x) = \begin{cases} e^{-x^2} & (x \neq 0) \\ \pi & (x = 0) \end{cases} \quad (\text{A.1.13})$$

は異なる関数と見なされる. しかし, 積分の中の振る舞いを考えれば (例えば, 広義積分の処方を用いて不連続点を処理する), これらの関数の振る舞いは全く変わらないとさえ言える. このことから, 異なる関数に対し

$$\|\psi - \psi'\| = 0 \quad (\text{A.1.14})$$

が成り立ってしまうことが正定値性の観点から問題になるということだ.

内積の正定値性を成り立たせるため, 不連続関数は L^2 から除くなどといった対策を考えたいところだが, この処方を行うと今度は完備性に不具合が出る. 連続関数を変形していった極限で不連続関数が得られることが往々にしてあるためだ. 結局この問題を解決するためには, 関数を実数と複素数の対応 $f: x \mapsto \psi(x)$ とする見方を緩めて, 積分中で同じ振る舞いをする関数を同一視する約束を設ける必要がある.

積分中の振る舞いの観点から関数を見直す仕事は数学では^{ルベグ}Lebesgue積分という積分の理論で行われるのが標準的なようである。Lebesgue 積分の利点としては不連続点が無限に存在しても積分可能性が簡単に判定できたり、積分が有限なら様々な極限操作が気軽に行える定式化になっているという点が挙げられるのだが、ここでは深入りしないでおこう。

ともあれ、 L^2 をベースに (Cauchy 列を用いるなどして) 完備な内積空間を作れば、様々な関数が織り成す Hilbert 空間というものが出来上がる。いったん Hilbert 空間として定式化が済んでしまえば、Hilbert 空間に関する様々な知見を用いて関数というものを調べることが可能となる。

A.2 線形演算子

数学的な状態空間としては、可分な Hilbert 空間を考えれば良いらしい。その正否は実際にブラケット記法の様々な計算規則が再現されることによって判断するしかないので、ひとまず、議論の土台として可分な Hilbert 空間を採用して話を進める。

状態空間が設定されたなら、次に議論すべきは様々な物理量の表現に関わる線形演算子の性質だ。演算子 \hat{A} とは、Hilbert 空間 \mathcal{H} の要素を、一般的には別の Hilbert 空間 \mathcal{K} の要素に変換する働きを表すものである。第 1 章で述べたように、ベクトルの線形結合に対し線形性を満たす演算子を線形演算子と呼ぶ。 \hat{A} が \mathcal{H} のベクトルを \mathcal{K} のベクトルに変える演算子であることを明示したいときは $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ と表せる。応用上、異なる Hilbert 空間 \mathcal{H}, \mathcal{K} の間の変換について成り立つ事項を考えておくことは有益であるが、量子力学の枠組みを作る際は状態空間は 1 つあればよいので、物理量などは $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ の形の演算子を考えれば十分表現できる。

極限を取る計算に神経質になる数学の議論では、線形演算子の細かい性質が色々と議論される。ここでは、特に重要ないくつかの性質を紹介しておきたい。

A.2.1 演算子の有界性

まずは、演算子の“大きさ”が有限にとどまるか否かを判定する概念である有界性というものについて説明したい。

定義 4 線形演算子の有界性

線形演算子 $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ と対し、次の性質

$$\frac{\|\hat{A}\psi\|}{\|\psi\|} \leq C \quad (\text{ただし、}\|\hat{A}\psi\| \text{ は } \hat{A}|\psi\rangle \text{ のノルムで、} |\psi\rangle \neq |\emptyset\rangle \text{ とする。}) \quad (\text{A.2.1})$$

を満たす有限な正の実数 C が $|\psi\rangle$ によらず定まるとき、 \hat{A} は有界であるという。また、有界でない線形演算子は非有界であるという。

Hilbert 空間を用いた議論ではノルム無限のベクトルが除外されるので、計算の結果ノルムが無限になるような操作は注意深く除いていく必要がある。有界な演算子については、変換後のベクトルのノルムが無限大にならないことが保証されているので、安心して議論が行える。

ここで、イメージを掴んでもらうために、形式的なブラケット記法の助けを借りて有界演算子と非有界演算子の例を見ておくことにしよう。まず、1次元の位置演算子

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |x\rangle\langle x| \quad (\text{A.2.2})$$

を考えてみよう。調和振動子の系の計算例から、位置の二乗の期待値はいくらでも大きな値を取り得るので、位置演算子 \hat{x} は非有界な演算子だとわかる。続いて、演算子

$$\hat{A} = \int_{-a}^{+a} dx x |x\rangle\langle x|, \quad \hat{B} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle\langle x|, \quad \hat{C} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x^2} |x\rangle\langle x| \quad (\text{A.2.3})$$

を定義すれば、 \hat{A}, \hat{B} は有界演算子、 \hat{C} は非有界演算子の例となる。つまり、大雑把に言えば、積分中で $|x\rangle\langle x|$ に掛かっている係数が発散する演算子は非有界だというわけである。

A.2.2 演算子の定義域

さて、Hilbert 空間のベクトルは有限なノルムを持つことになっているので、闇雲に非有界演算子をベクトルに作用させると、ノルム無限大のベクトルが理論に混入してしまう恐れがある。そこで、演算子を扱う際は定義域というものを設ける工夫が取られる。

定義 5 演算子の定義域と値域

- 演算子 $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ による演算が定義される \mathcal{H} の部分集合を \hat{A} の定義域といい、 $D(\hat{A})$ で表す。演算が定義されるとは、 $|\psi\rangle \in D(\hat{A})$ ならば $\hat{A}|\psi\rangle$ が \mathcal{K} に属す有限なノルムをベクトルであることが保証されているということである。
- 演算子 \hat{A} の定義域に属すベクトルを全て変換することで得られる \mathcal{K} の部分集合を \hat{A} の値域という。値域を $R(\hat{A})$ で表し、集合の記号でその定義を書けば

$$R(\hat{A}) = \{\hat{A}|\psi\rangle \in \mathcal{K} \mid |\psi\rangle \in D(\hat{A})\} \quad (\text{A.2.4})$$

となる。

定義域の設定は演算子の重要な性質の1つである。 \mathcal{H} 全体で定義される演算子は心配なく扱えるが、位置演算子を含む非有界演算子は \mathcal{H} 全体を定義域と考えると問題が起きるため、注意して扱わねばならない。

\mathcal{H} 全体で定義できない非有界演算子であっても、 \mathcal{H} の稠密な部分集合ではうまく定義される場合がある。このような演算子は稠密に定義されているという。この性質を持つ演算子に関しては、定義域が十分広いことから様々なことが言える。

非有界演算子であっても、定義域が稠密であるものは数多く考えられる。例えば、

$$\hat{P}_a = \int_{-a}^a dx |x\rangle\langle x| \quad (a \geq 0) \quad (\text{A.2.5})$$

という演算子を考えてみる。(有限のノルムを持つ) 任意の状態に対し $\lim_{a \rightarrow \infty} \hat{P}_a |\psi\rangle = |\psi\rangle$ が成り立つから、集合

$$\mathcal{P} = \{\hat{P}_a |\psi\rangle \mid a \geq 0, |\psi\rangle \in \mathcal{H}\} \quad (\text{A.2.6})$$

は \mathcal{H} の稠密な部分集合となる。 \mathcal{P} に含まれるベクトルに位置演算子 \hat{x} を作用させたものは有限のノルムを持つから、 \mathcal{P} は \hat{x} の定義域に問題なく含まれると考えてよい。したがって、位置演算子は稠密に定義されていると言える。

定義域が稠密な演算子が十分多く存在することを感じてもらうため、もう1つ極端な例を見ておこう。調和振動子の系は個数演算子の固有状態 $\{|n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$ が完全系を成し、任意の状態は $|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle$ という形で展開できる。個数演算子の固有状態は座標表示で

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (\text{A.2.7})$$

という形をしている。 H_n の部分は有限の次数の多項式である。完全系を成す状態の集合はそれ自体が状態空間の稠密な部分集合となっているため、全ての $|n\rangle$ に対する変換がきちんと定義される演算子、例えば \hat{x}, \hat{p} は稠密に定義されていると言える。ここで、極端な働きを持つ演算子

$$\hat{Z} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) |x\rangle\langle x| \quad (\text{A.2.8})$$

というものを考えてみる。任意の n に対し、 $\hat{Z}|n\rangle$ のノルムは明らかに発散してしまうことがわかるだろう。任意の状態は $|n\rangle$ の重ね合わせで書かれるというのに、 \hat{Z} は全ての $|n\rangle$ を Hilbert 空間に収まらないどこかへ飛ばしてしまう。これでは \hat{Z} をまともに定義することはできず、 $|\emptyset\rangle$ 以外定義域に入らないのでは、と思われるかもしれない。ところが、このような \hat{Z} の定義域も稠密な集合なのである。実際、先ほど定義した \hat{P}_a を用いた集合 $\{\hat{P}_a|n\rangle \mid n = 0, 1, 2, \dots, a \geq 0\}$ を考えれば、 $\hat{P}_a|n\rangle$ に対し \hat{Z} は問題なく定義される。 $\lim_{a \rightarrow \infty} \hat{P}_a|n\rangle = |n\rangle$ が成り立つことから、この集合は稠密である。

A.2.3 演算子の Hermite 共役

稠密に定義されている演算子 \hat{A} に対しては Hermite 共役 \hat{A}^\dagger を定義できることが知られている。Hermite 共役とは、

$$\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^* \quad (\text{A.2.9})$$

を満たす演算子のことであった。Hermite 共役の概念が定義できるなら、物理量の表現に必要な、 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ を満たす自己共役演算子というものを考えることができる。自己共役演算子は Hermite 性とは何かというところから出発して3段階で定義が行われる。その定義を述べておこう。

定義 6 Hermite 性・対称性・自己共役性

- まず、 \hat{A} が **Hermite 演算子**であるということは、任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in D(\hat{A})$ に対し

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^* \quad (\text{A.2.10})$$

が成り立つこととして定義される。この定義は Hermite 共役が必要ない形になっていることに注意しよう

- Hermite 演算子 \hat{A} の定義域が稠密なら、その Hermite 共役 \hat{A}^\dagger が定義できる。稠密に定義された Hermite 演算子を**対称演算子**という。対称演算子については、

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle \quad (\text{A.2.11})$$

という式が成り立つ。

- 一般に、対称演算子 $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ とその Hermite 共役 \hat{A}^\dagger の定義域の間には $D(\hat{A}) \subset D(\hat{A}^\dagger)$ という関係が成り立つことが知られている。一般に、 \hat{A} と \hat{A}^\dagger の定義域は異なることがあり、その場合、等号 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ が成り立つとは言えない。
- 定義域の等号 $D(\hat{A}) = D(\hat{A}^\dagger)$ が成り立つ場合に初めて、Hermite 演算子とその共役の間の等号 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ が成り立つ。この意味で $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ を満たす演算子を自己共役演算子という。

自己共役演算子は Hermite 共役が持つ、数学的に便利な性質を兼ね備えており、そこから議論に役立つ様々な性質が導かれる。ここでは例として、Hermite 共役が持つ重要な性質である閉性と呼ばれる性質を紹介しておこう。

定義 7 演算子の閉性

$\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ が閉演算子であるとは、 \mathcal{H} の収束列 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^\infty$ に対し $\{\hat{A}|\psi_n\rangle\}_{n=1}^\infty$ が \mathcal{K} の収束列となるとき、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{A}|\psi_n\rangle = \hat{A} \left(\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n\rangle \right) \quad (\text{A.2.12})$$

が成り立つということである。

閉性は演算子を作用させる操作と極限をとる操作、どちらを先に行っても結果が変わらないという性質である。非有界演算子に対しては一般に、 $\{|\psi_n\rangle\}_{n=1}^\infty$ が収束列であっても $\{\hat{A}|\psi_n\rangle\}_{n=1}^\infty$ が収束するとは限らないのだが、それでも閉性が成り立つか否かで、演算子の性質について言えることは大きく変わってくる。非有界演算子の様々な性質を導く際、閉性が果たす役割は大きい。

A.3 スペクトル定理

演算子の性質を議論する際、意識すべきいくつかの点について簡単に解説を行った。続いて、もう少し物理に関係が深い話題に入りたい。

本論では、物理量 A は次の性質

- (Hermite 性) $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$
- (固有ベクトルの完全性) $\int_{-\infty}^{\infty} da |a\rangle \langle a| = \hat{I}$.

を満たす演算子 \hat{A} で表現されるとし、この性質を満たすものを自己共役演算子と呼んだのだ。数学の用語法に合わせれば、ここで言う Hermite 性は自己共役性と呼んだほうが良いのだが、定義域の話もしない段階で用語だけうるさく言うのも無意味なので本論ではこのような言い方をしている。さて、本論において重要な役目を演じるのは自己共役演算子の 2 番目の性質として要請した固有ベクトルの完全性である。物理量の固有ベクトルによる表現

$$\hat{A} = \int da a |a\rangle \langle a|, \quad \hat{I} = \int da |a\rangle \langle a| \quad (\text{A.3.1})$$

の助けを借りなければ、確率を用いて現象を記述する量子力学の体系そのものが成り立たないから、この表現は何としてでも正当化すべき最重要課題だ。以下ではこの表現の数学的基礎付けに関して、概説を試みたい。

A.3.1 スペクトル族

Hilbert 空間を用いて状態空間を定式化する数学の議論では, $|a\rangle$ のような連続固有状態を考えることはできないのだった. その代わりに, 数学ではスペクトル族と呼ばれる演算子の集まり $\{\hat{E}_a | -\infty < a < \infty\}$ を用いて自己共役演算子の表現 (A.3.1) を考えることになる. ここで, ブラケット記法の表現を用いれば, スペクトル族に属す演算子 \hat{E}_a は

$$\hat{E}_a = \int_{-\infty}^a da |a\rangle\langle a| \quad (\text{A.3.2})$$

と書けると考えてよい. (A.3.1) はスペクトル族を用いて

$$\hat{A} = \int ad\hat{E}_a, \quad d\hat{E}_a = da |a\rangle\langle a| \quad (\text{A.3.3})$$

と書くこともある. これを, 演算子 \hat{A} のスペクトル分解という.

スペクトル族の性質をいくつか列挙しておこう.

- スペクトル族の要素は射影演算子である. つまり,

$$\hat{E}_a = \hat{E}_a^\dagger, \quad \hat{E}_a^2 = \hat{E}_a \quad (\text{A.3.4})$$

が成り立つ.

- $a < b$ ならば $\hat{E}_a \hat{E}_b = \hat{E}_b \hat{E}_a = \hat{E}_a$ が成り立つ.
- 任意の状態に対し $\lim_{a \rightarrow \infty} \hat{E}_a |\psi\rangle = |\psi\rangle$, $\lim_{a \rightarrow -\infty} \hat{E}_a |\psi\rangle = |\mathbf{0}\rangle$ が成り立つ.

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ を満たす自己共役演算子には, 任意の $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ と $|\psi\rangle \in D(\hat{A})$ に対し

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \int ad\langle \phi | \hat{E}_a | \psi \rangle \quad (\text{A.3.5})$$

を満たすスペクトル族 $\{\hat{E}_a | -\infty < a < \infty\}$ が存在することが知られている. このようなスペクトル族の存在を示す定理をスペクトル定理と呼ぶことにしよう.

量子力学の根底に関わるスペクトル定理だが, これはどのように証明されるのだろうか. 証明の詳細はなかなか複雑なのだが, 以下ではブラケット記法の助けを借りて証明の概要を試みたい.

A.3.2 有界演算子のスペクトル定理

スペクトル定理の証明は有界自己共役演算子, ユニタリー演算子, 非有界自己共役演算子と順を追って為される. 始めに行うべきは, 例えば

$$\hat{A} = \int_{-a}^a daa |a\rangle\langle a| \quad (\text{A.3.6})$$

与えられる有界自己共役演算子のスペクトル分解だ.

スペクトル定理の証明の肝となるのは, 自己共役演算子 $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ からどのようにして目当てのスペクトル族 $\{\hat{E}_a | -\infty < a < \infty\}$ を構成するかという点だ. 有界自己共役演算子の場合, 極分解と呼ばれる表現を介して目的のスペクトル族が構成される.

極分解とは要するに、複素数の極形式 $z = re^{i\theta}$ の演算子版である。一般に、有界演算子 \hat{A} は絶対値と呼ばれる演算子 $|\hat{A}|$ と、

$$\|\hat{U}\psi\| = \|\psi\|, \quad |\psi\rangle \in D(\hat{U}) \quad (\text{A.3.7})$$

を満たす部分等長演算子 \hat{U} を用いて、

$$\hat{A} = \hat{U}|\hat{A}| \quad (\text{A.3.8})$$

という形に書けることが知られている。この表現の可能性を示すのもなかなか面倒なのだが、ここでは証明に代えて、ブラケット記法を用いた簡単な例を見ておくことにしよう。(A.3.6) の極分解を与える演算子は、大雑把に言えば次のようなものだ。

$$|\hat{A}| = \int_{-a}^a da |a\rangle\langle a|, \quad \hat{U} = \int_{-a}^a da \frac{a}{|a|} |a\rangle\langle a| \quad (\text{A.3.9})$$

それでは、極分解を用いたスペクトル族の構成を見てみよう。演算子 $\hat{A}_\lambda = \hat{A} - \lambda$ (λ は実数) を考えればこれは有界であり、その極分解は

$$\hat{A}_\lambda = \hat{U}_\lambda |\hat{A}_\lambda|, \quad |\hat{A}_\lambda| = \int_{-a}^a da |a - \lambda\rangle\langle a|, \quad \hat{U}_\lambda = \int_{-a}^a da \frac{a - \lambda}{|a - \lambda|} |a\rangle\langle a| \quad (\text{A.3.10})$$

で与えられる。ここで、

$$\hat{E}_\lambda = \hat{I} - \frac{1}{2}\hat{U}_\lambda - \frac{1}{2}\hat{U}_\lambda^2 \quad (\text{A.3.11})$$

という演算子を考えれば、これが目当てのスペクトル族となる。実際、ブラケット記法の計算 $\hat{U}_\lambda^2 = \int_{-a}^a da |a\rangle\langle a| = \hat{I}$ と公式

$$|a - \lambda| - (a - \lambda) \begin{cases} 0 & (\lambda \leq a) \\ -2a + 2\lambda & (a < \lambda) \end{cases} \quad (\text{A.3.12})$$

に注意すれば、この演算子は

$$\begin{aligned} \hat{E}_\lambda &= \frac{1}{2}\hat{I} - \frac{1}{2}\hat{U}_\lambda \\ &= \frac{1}{2} \int_{-a}^a da \frac{|a - \lambda| - (a - \lambda)}{|a - \lambda|} |a\rangle\langle a| = \int_{-a}^\lambda da |a\rangle\langle a| \end{aligned} \quad (\text{A.3.13})$$

となり、スペクトル族のブラケット記法による表現 (A.3.2) のような形になっていることが確かめられる。

ブラケット記法ではスペクトル族の構成はほぼ自明に思えるが、数学的に (A.3.11) がスペクトル族となることを証明するのはなかなか面倒で、極分解の細かい性質を調べたり、スペクトル族が満たすべき条件が成り立つか確認していく必要がある。

A.3.3 ユニタリー演算子のスペクトル分解

有界自己共役演算子がスペクトル分解できることが分かれば、これを用いて表現される他の演算子のスペクトル分解を示すことができるようになる。有界自己共役演算子を用いて表現される演算子のクラスとして、正規演算子と呼ばれるものがある。

定義 8 正規演算子

稠密に定義された、 $\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^\dagger$ を満たす閉演算子 \hat{A} を正規演算子という。

有界な正規演算子は2つの有界自己共役演算子 \hat{B}, \hat{C} を用いて $\hat{A} = \hat{B} + i\hat{C}$ と書けることが知られており、そのスペクトル分解は

$$\hat{A} = \int dbdc(b+ic)|bc\rangle\langle bc| \quad (\text{A.3.14})$$

という形で書ける。ただし、どのような領域で b, c 積分を取るかということは自明ではないことに注意しよう。自己共役演算子 \hat{B}, \hat{C} はそれぞれ \hat{A} の実部、虚部と呼ばれる。

スペクトル定理の証明において重要になるユニタリー演算子も正規演算子の一種である。ここでユニタリー演算子の定義をきちんと述べておこう。

定義 9 ユニタリー演算子

次の3性質を満たす $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ をユニタリー演算子という。

- 定義域が Hilbert 空間全体である: $D(\hat{U}) = \mathcal{H}$.
- 値域が Hilbert 空間全体である: $R(\hat{U}) = \mathcal{K}$.
- $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I}$ が成り立つ。

ユニタリー演算子 \hat{U} に固有ベクトルが存在し $\hat{U}|\psi\rangle = c|\psi\rangle$ が成り立つならば、

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = |c|^2\langle\psi|\psi\rangle \quad (\text{A.3.15})$$

より、固有値 c は絶対値 1 の複素数 (これは $c = e^{i\theta}$ と書ける) に限られる。この性質との関連で、ユニタリー演算子のスペクトル分解は次のような、特殊な形になることが知られている。

$$\hat{U} = \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta} |\theta\rangle\langle\theta|, \quad \langle\theta|\theta'\rangle = \delta(\theta - \theta') \quad (\text{A.3.16})$$

詳細には踏み込まないが、このスペクトル分解に含まれる演算子

$$\hat{F}_\theta = \int_0^\theta d\theta' |\theta'\rangle\langle\theta'| \quad (\text{A.3.17})$$

はスペクトル族を成すことが数学的に証明される。

A.3.4 非有界演算子のスペクトル展開

自己共役演算子 \hat{A} に対し

$$\hat{U} = (\hat{A} - i)(\hat{A} + i)^{-1} \quad (\text{A.3.18})$$

で定義される演算子 \hat{U} を \hat{A} の **Cayley** 変換^{ケ-リー} という。Cayley 変換 \hat{U} はユニタリー演算子となっており (ブラケット記法を用いれば簡単なチェックができる)、自己共役演算子 (非有界であってもよい) とユニタリー演算子の橋渡しをする役目を果たす。

Cayley 変換の式を変形すると、

$$\hat{A}(\hat{I} - \hat{U}) = i(\hat{I} + \hat{U}) \quad (\text{A.3.19})$$

という式が得られる。演算子 $\hat{I} - \hat{U}$ が逆演算子を持つかは自明ではないが、演算子の性質を調べれば逆演算子が問題なく定義されることが示される。逆演算子を用いれば、Cayley 変換を用いた自己共役演算子の表式

$$\hat{A} = i(\hat{I} + \hat{U})(\hat{I} - \hat{U})^{-1} \quad (\text{A.3.20})$$

が得られる.

この式にユニタリー演算子のスペクトル分解を適用すると, 自己共役演算子 \hat{A} は

$$\begin{aligned}\hat{A} &= i \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1+e^{i\theta}}{1-e^{i\theta}} |\theta\rangle\langle\theta| = -i \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{i\theta/2} + e^{-i\theta/2}}{e^{i\theta/2} - e^{-i\theta/2}} |\theta\rangle\langle\theta| \\ &= - \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{\tan \frac{\theta}{2}} |\theta\rangle\langle\theta|\end{aligned}\quad (\text{A.3.21})$$

という形で書けることになる. ここで変数変換

$$a = -\frac{1}{\tan \frac{\theta}{2}} \quad (\text{A.3.22})$$

によってパラメータ a と θ の対応付けを行えば, θ が 0 から 2π に変化する際に, a は $-\infty$ から ∞ へ変化することがわかる. a と θ の対応を用いて演算子

$$\hat{E}_a = \hat{F}_\theta = \int_0^\theta d\theta |\theta\rangle\langle\theta| \quad (\text{A.3.23})$$

を定義すれば, これはスペクトル族を成す. この演算子を用いれば, \hat{A} が

$$\hat{A} = - \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{\tan \frac{\theta}{2}} |\theta\rangle\langle\theta| = \int_{-\infty}^{\infty} a d\hat{E}_a \quad (\text{A.3.24})$$

というスペクトル分解を持つことがわかる.

以上が自己共役演算子のスペクトル定理の証明の概要である. 実際に数学的な証明を行う際はもっと細かい部分まで議論するのだが, 全体像を見失わないために, ブラケット記法で証明の流れをpushしておくことも役立つかと思う.

索引

- 因果律, 139, 142
- 運動量表示, 18, 89
- S 行列, 153, 158
- Hermite 共役, 3, 4, 180
- Hermite 多項式, 30
- エレクトロンボルト, 42
- 演算子, 3
 - Hermite—, 4, 180
 - 逆—, 4
 - 恒等—, 4
 - 射影—, 10
 - 自己共役—, 12, 180
 - ユニタリー—, 4, 98, 184
- Euler-Lagrange 方程式, 47
- 回転 (Lorentz 変換), 63, 74
- 可換, 14
 - 非—, 14
- 角運動量, 30
 - 軌道—, 68
 - 合成—, 135
 - スピナー—, 54, 68
 - 代数, 121
 - の合成, 135
- 確率の保存則, 19, 65
- 重ね合わせ, 6, 12, 22
 - の原理, 1, 11, 97, 115
- 完全正規直交系, 4, 176
- 完全性条件, 12
- Gauss 関数, 26, 150, 155
- γ 行列, 65
- 期待値, 13
- 球面調和関数, 37
- 行列要素, 5
- Klein-Gordon 方程式, 64
- Clebsch-Gordan 係数, 137
- Gramm-Schmidt の直交化法, 3
- 検出器, 147, 148
- 弦の振動, 79
- ゲージ変換, 50, 112
- 交換子, 13
 - 反—, 92
- 光子の放出, 168
- 個数演算子, 29, 87, 94, 97
- 固有状態, 10, 22
 - 離散—, 35, 42, 174
 - 連続—, 10, 174, 182
- 固有値, 10
- 固有ベクトル, 10
- 最小作用の原理, 46, 80
- 作用積分, 47
- 散乱振幅, 153, 159, 165
- 散乱断面積, 151
 - 微分—, 152, 161
- 散乱の量子論, 147
- 座標表示, 18
- 射影公準, 2, 22, 97
- Schrödinger 描像, 99, 101, 154
- Schrödinger 方程式, 21, 90, 96
- 昇降演算子, 34, 124
- 消滅演算子, 28, 51, 86, 87, 92, 96
- 真空, 89
- 時間発展, 19, 153
 - 演算子, 20, 98, 153, 154
 - 方程式, 1, 19, 49, 97
- 状態, 2, 11
 - 基底—, 29, 165
 - 空間, 2, 115, 174
 - 定常—, 30
 - ベクトル, 2
 - 励起—, 29, 163, 168
- 水素原子, 38, 163
- スカラー, 63, 130
- スピノル, 71, 125
 - 点付き—, 129, 131
 - 点なし—, 129, 131
- スピン, 53, 68
 - A—, 123
 - B—, 123
- スピン・統計定理, 121
- 正準共役, 88
- 正準交換関係, 1, 16, 81, 84, 88, 94, 97
- 正準反交換関係, 93, 97
- 正準量子化, 46, 49, 81
- 生成演算子, 28, 51, 86, 87, 92, 96
- 遷移, 165
- Zeeman 効果, 54, 70
- 零点エネルギー, 29, 86
- 双極子近似, 167
- 相互作用描像, 153
- 相対論的量子力学, 60
- 双対空間, 3
- 双対ベクトル, 2
- 測定, 11, 22
 - 値, 11
- 断熱因子, 156, 164
- 直交, 3
- T 行列, 153, 159
- テンソル, 63
- Dirac, 2, 23
 - 場, 104
 - 方程式, 65
- δ 関数, 8
- 電磁波, 110
- 電磁場, 48, 109
- 統計性, 53, 55, 57, 92, 97, 121
- 特殊相対性理論, 60
- 同時確率分布, 15
- de Broglie 場, 87
- 内積, 3
- 内部自由度, 53
- 入射粒子, 147
- Heisenberg 描像, 99
- 波動関数, 87
- 波動方程式, 80, 110
- ハミルトニアン, 1, 19, 48
 - 密度, 81, 88
- Hamilton 形式, 48
- 汎関数, 9, 47

—微分, 83
反粒子, 108
場, 79
—の量子論, 79, 97
Pauli 行列, 66
Pauli の排他律, 58
光の粒子性, 77
標的粒子, 147
Hilbert 空間, 10, 173, 174
音子 (フォノン), 87
不確定性原理, 1, 14
負ノルムの問題, 118
Fourier 解析, 7
Fourier 積分表示, 7
Fourier 展開, 7
Fourier 変換, 7
物質波, 87
物理量, 1, 2, 11, 22
—の統計的性質, 1, 12, 97
Planck 定数, 16
Planck の輻射理論, 110
偏極ベクトル, 111, 117, 163
Bohr 半径, 40, 167
Born 近似, 161
Born の確率解釈, 87
Poisson 括弧式, 49, 82, 84
湯川ポテンシャル, 162
ユニタリー変換, 98, 153
横波, 110, 163
ラグランジアン, 47
Klein-Gordon 場の—密度, 100
Dirac 場の—密度, 104
電磁場の—密度, 111, 113
de Broglie 場の—密度, 88
—密度, 80
Lagrange 形式, 47
Laguerre 陪多項式, 43
Lippmann-Schwinger 方程式, 159
Levi-Civita の記号, 31
Lorentz ブースト, 62, 73
Lorentz 変換, 60
—の表現, 123
無限小—, 71