

Lie 代数から学ぶ量子力学と場の量子論

東京大学大学院 Kavli IPMU 立川研究室 Shin TOITA (戸板 真太郎) *

February 7, 2020

Contents

1	質点の解析力学の基礎	5
1.1	Newton 力学	5
1.1.1	空間 Vector の性質と Scalar, Tensor	5
1.2	Lagrange 力学	6
1.2.1	調和振動子の例	8
1.3	Vector Potential	8
1.3.1	電磁場中の荷電粒子	8
1.4	対称性	9
1.4.1	連続な対称性と Noether の定理、保存電荷	10
1.4.2	一般化された Noether の定理の証明	12
1.4.3	対称性の gauge 化	13
1.5	Hamilton 力学	13
1.5.1	調和振動子の例	15
1.5.2	Poisson 括弧	15
2	量子力学の基礎	17
2.1	正準量子化	17
2.1.1	Hilbert 空間と Operator	17
2.1.2	正準交換関係 (CCR: Canonical Commutation Relation)	18
2.1.3	Observables と Hermitian conjugate, Unitary operator	19
2.1.4	離散 spectrum の固有状態と Hermitian operator	19
2.1.5	連続 spectrum の「固有状態」	20
2.1.6	同時固有状態	20
2.1.7	観測値と Operator の関係、状態 vector の命名規則、物理的状态空間	20
2.1.8	Dirac の Bracket 記法と連続固有状態の規格化	22
2.1.9	Hermitian operator と完全性	22
2.1.10	生成消滅演算子、Hilbert 空間の無次元性	24
2.1.11	調和振動子の例、Fock space	24
2.1.12	Coherent state	27
2.1.13	Displacement operator	28
2.2	経路積分量子化	29
2.2.1	波動関数と operator の x -表示	29
2.2.2	調和振動子の例	31
2.2.3	Feynman Kernel	32

* e-mail: shintaro.toita_at_ipmu.jp

2.2.4	Hamiltonian Path Integral	33
2.2.5	Feynman Path Integral	34
2.2.6	Path Integral の実行	35
2.2.7	調和振動子の例	36
2.2.8	Euclidean 経路積分	39
2.2.9	Euclidean Feynman Kernel、時間発展、分配関数、統計力学系との関係	39
2.2.10	Generating Functional と Source Term	40
2.3	量子力学における対称性と保存量	42
2.3.1	角運動量の代数	42
2.3.2	角運動量の代数の表現	43
2.4	Operator の代数とその表現	45
2.4.1	環 (ring) と代数 (algebra)	45
3	自由場の量子論	46
3.1	自由場の古典論、場の解析力学	46
3.1.1	場の Lagrangian と Lagrange 形式	46
3.1.2	Hamilton 形式	47
3.1.3	Energy-Momentum Tensor	47
3.1.4	Free Scalar Field の例	47
3.2	場の量子化	48
3.2.1	非相対論的な Scalar 場	48
3.2.2	非相対論的な Spinor 場	48
3.2.3	相対論的に可能な場	48
4	摂動展開と繰り込み	48
4.1	一般の相互作用が満たすべき性質	48
AppendixA	物理数学	49
A.1	線形代数	49
A.1.1	体	49
A.1.2	Axioms of Vector Space	49
A.1.3	完全反対称 tensor と vector の外積、ベクトル解析の公式	50
A.1.4	外積と Axial Vector	50
A.1.5	行列式、余因子行列と逆行列	50
A.1.6	L^p -norm	52
A.2	複素関数論	53
A.2.1	Taylor series expansion (テイラー級数展開)	53
A.2.2	Laurent series expansion (ローラン級数展開)	53
A.2.3	極 (pole)、真性特異点 (essential singularity)、零点 (zero)	53
A.2.4	留数定理 (Residue theorem)	54
A.2.5	Morera's theorem (モレラの定理)	54
A.3	初等関数および特殊関数	55
A.3.1	指数関数	55
A.3.2	三角関数、双曲線関数	55
A.3.3	無限乗積展開	55
A.3.4	Γ 関数	56

A.3.5	Fresnel integral	57
A.3.6	超幾何関数 (confluent hyper-geometric function)	57
A.3.7	Sturm-Liouville equation	57
A.3.8	Hermite 多項式	58
A.4	Fourier 級数展開、Fourier 変換	59
A.4.1	Fourier 級数展開	59
A.4.2	Fourier 変換	59
AppendixB	量子力学の公式	61
B.1	Operator の基本的な性質	61
B.1.1	交換関係・反交換関係	61
B.1.2	Baker-Campbell-Hausdrff formula	61
B.2	Unitary Transformation	62
B.2.1	Taylor 展開を用いた証明	62
B.2.2	特殊な場合	63
B.3	保存電荷と対称性変換の生成子	64
B.3.1	Ehrenfest Theorem	64
References		65

以下の定義や記述は部分的に数学的厳密性を欠くが、大抵の場合厳密化には本書の範囲を超える大道具が必要であるし、厳密化が我々の目的ではない。現代物理学（少なくとも古典力学や有限自由度の量子論）の数学的基礎のほとんどが数学者ではなく Newton、Dirac を始めとする物理学者によって与えられて来たことを思い出そう。我々は誇り高き物理学者であり、我々が学ぼうとするのも数学ではなく物理である。

ToDo:

scalar の変換性と vector の変換性

磁場の axial 変換性

波動関数、微分形式

無限に深い井戸型ポテンシャル、波動関数の境界条件

電磁場の gauge 対称性と波動関数の位相、特異系の Lagrangian、 $m\ddot{\mathbf{x}} = a\dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{x}$ を導く Lagrangian は存在するか？、Dirac 括弧、第 1 種と第 2 種拘束系、scleronomic (scleronomous) または rheonomic (rhoonomous) 拘束系、non-holonomic system

Planck の光量子仮説

symplectic 幾何、正準変換

Hamiltonian 調和振動子の行列解法と生成消滅変数の軌跡

電磁場中の古典荷電粒子、電磁場中の一般化運動量、Galilean transformation

Poisson 括弧と正準括弧

観測とコペンハーゲン解釈

同種多粒子系（同一の内部状態を持つ多粒子の不可弁別性）、相関がない場合 (Slater determinant, Boson permanent)

超選択則、表現の既約分解、SO の二重被覆と spin

root 系、Casimir、同時固有状態

spin 自由度

束縛状態の基礎（連続性、境界条件、compact 性、規格化可能性、tunneling 効果、Ehrenfest の定理）

Noether の定理の逆と無限小変換の生成子、離散的対称性

非エルミートな演算子の固有状態 (Whittaker state)、位相演算子

Squeeze operator

簡単な散乱問題、ポテンシャル共鳴

経路積分量子化、Weyl 順序、演算子順序の問題

量子力学における簡単な摂動論の例と有限繰り込み

energy-momentum improvement

1 質点の解析力学の基礎

1.1 Newton 力学

皆さんが良く知っている Newton の運動方程式

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{x}} \quad (1.1.1)$$

は解析力学に比べて最も一般的な運動方程式の形で、例えば摩擦力が働くなど energy 散逸のある系や外部から力を受けている系などを何の困難もなく表すことが出来る。

例えば 1 次元調和振動子の場合を考えると

$$F = -kx \quad (1.1.2)$$

であるので、Newton 運動方程式は

$$m\ddot{x} = -kx \quad (1.1.3)$$

となる。

1.1.1 空間 Vector の性質と Scalar、Tensor

数学は vector とは vector space の元であり、vector space の定義は A.1.2 のように与えられていた。ところが物理における vector は多くの場合は空間 vector と呼ばれるべきものであり、抽象的には回転群の表現と定義される。以下では具体的な例を見ながら、その性質について考えよう。

D 次元空間 \mathbb{R}^D 上の点は D 次元 vector \mathbf{r} で表され、直交座標系 (orthogonal coordinate system、Cartesian coordinates、デカルト座標などとも) (x_1, x_2, \dots, x_D) 方向の単位ベクトル $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_D$ を使って

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^D r_i \mathbf{e}_i \quad (1.1.4)$$

のように一意に展開できるのであった。例として $D = 2$ の場合を考えると、 $(x, y) := (x_1, x_2)$ として

$$\mathbf{r} = r_x \mathbf{e}_x + r_y \mathbf{e}_y \quad (1.1.5)$$

となる。さて、物理では Coulomb 力のように、力が角度には依存せず物体の距離だけに依存するような場合がある。例えば、原点 $(0, 0)$ に点電荷が固定されていて位置 \mathbf{r} にある質点の受ける力や運動を計算したいときは、 (x, y) よりも極座標

$$\begin{cases} r(x, y) := \sqrt{x^2 + y^2} \\ \theta(x, y) = \text{sgn}(y) \text{Arccos} \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \arctan \frac{y}{x} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x(r, \theta) = r \cos \theta \\ y(r, \theta) = r \sin \theta \end{cases} \quad (1.1.6)$$

を使うのが便利であろう。

このような非直交座標系 (x_1, \dots, x_D) では座標軸の向きが空間上で一定ではない。 i 番目の座標軸とは他の座標を固定して x_i だけを変化させたときに点 (x_1, \dots, x_D) が描く軌跡のことであるので、空間 \mathbb{R}^D の各点 \mathbf{r} ごとに座標軸 i 方向の単位 vector を「 i 番目の座標値を変化させたときに位置 vector \mathbf{r} が動く方向」、つまり

$$\mathbf{e}_i(r, \theta) := \frac{\tilde{\mathbf{e}}_i}{\|\tilde{\mathbf{e}}_i\|} \quad (1.1.7a)$$

$$\tilde{\mathbf{e}}_i(r, \theta) := \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_i} \quad (1.1.7b)$$

と定義しよう。今や単位 vector $\mathbf{e}_i(r, \theta)$ は座標 (r, θ) の関数であり、座標が変わるごとに単位 vector の向きも変わってしまう。例えば、位置 $(x, y) = (a, 0), (0, b)$ すなわち $(r, \theta) = (a, 0), (b, \frac{\pi}{2})$ を表す vector は

$$a\mathbf{e}_x = a\mathbf{e}_r(r = a, \theta = 0) \quad (1.1.8a)$$

$$b\mathbf{e}_y = b\mathbf{e}_r(r = b, \theta = \frac{\pi}{2}) \quad (1.1.8b)$$

と書かれる。より一般の位置 \mathbf{r} も常に

$$\mathbf{r} = r\mathbf{e}_r = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y \quad \begin{cases} \mathbf{e}_r = \cos \theta \mathbf{e}_x + \sin \theta \mathbf{e}_y \\ \mathbf{e}_\theta = -\sin \theta \mathbf{e}_x + \cos \theta \mathbf{e}_y \end{cases} \quad (1.1.9)$$

と書ける事は明らかであろう。

Newton の運動方程式 (1.1.1) は位置 vector の時間微分を含んでいた。時刻 t での粒子の位置座標 $(r(t), \theta(t))$ を使って、これを書き下してみるとどうなるだろうか。単位 vector も位置依存性を通して t に陰に依存していることに注意すると

$$\dot{\mathbf{e}}_r = \dot{\theta}(-\sin \theta \mathbf{e}_x + \cos \theta \mathbf{e}_y) = \dot{\theta} \mathbf{e}_\theta \quad (1.1.10a)$$

$$\dot{\mathbf{e}}_\theta = \dot{\theta}(-\cos \theta \mathbf{e}_x - \sin \theta \mathbf{e}_y) = -\dot{\theta} \mathbf{e}_r \quad (1.1.10b)$$

が得られるから、

$$\dot{\mathbf{r}} = \dot{r}\mathbf{e}_r + r\dot{\mathbf{e}}_r = \dot{r}\mathbf{e}_r + r\dot{\theta}\mathbf{e}_\theta \quad (1.1.11a)$$

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{r}} &= (\ddot{r}\mathbf{e}_r + \dot{r}\dot{\mathbf{e}}_r) + (\dot{r}\dot{\mathbf{e}}_\theta + r\ddot{\theta}\mathbf{e}_\theta + r\dot{\theta}\dot{\mathbf{e}}_\theta) \\ &= (\ddot{r} - r\dot{\theta}^2)\mathbf{e}_r + (2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta})\mathbf{e}_\theta \end{aligned} \quad (1.1.11b)$$

だと分かる。従ってこの座標系での Newton 方程式は

$$\frac{F_r}{m} = \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 \quad (1.1.12)$$

$$\frac{F_\theta}{m} = 2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta} \quad (1.1.13)$$

であり、整然とした直交座標での表式とは似ても似つかない。

Newton 方程式は vector で記述されているため、例えば極座標のような直交座標系以外の座標を用いると形が著しく複雑になるという欠点も持っている。これに対し、例えば energy のような scalar 量は座標変換の下でより自然に変換するため、様々な力学法則を scalar を用いて表したいというのは自然な要求だろう。以下で議論する Lagrange 力学や Hamilton 力学はそのような記述を与える枠組みの例である。

1.2 Lagrange 力学

多くの力学系において、位置 \mathbf{x} にある粒子に働く力は位置の関数 $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ と書ける。この関数 \mathbf{F} のように空間の各点 \mathbf{x} に対しある vector $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ を与えるものを vector 値関数、あるいは vector 場という。

物体に働く力 \mathbf{F} が保存力である

$$\text{rot} \mathbf{F} := \nabla \times \mathbf{F} = 0 \quad (1.2.1)$$

場合には scalar potential $\phi(\mathbf{x})$ が存在して

$$\mathbf{F} = -\nabla \phi \quad (1.2.2)$$

と書けることは、力学で最初に習う事の一つだろう。

我々の主たる興味は空間が 3 次元である場合にあるが、この場合にはより一般的な結果が知られている： Helmholtz の分解定理 (Helmholtz decomposition theorem) は任意の 3 次元 vector 場 $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ に対し vector potential $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ と scalar potential $\phi(\mathbf{x})$ の組であって

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A} - \nabla \phi \quad (1.2.3)$$

なるものが存在する事を主張する。つまり、物体に働く力が場である（顕わに時間依存したりすることなく、位置のみの関数として書けている）限りにおいて、必ず vector potential 及び scalar potential を用いて書けるのである。

これを踏まえ、まずは物体に働く力が scalar potential を用いて書ける場合に話を限ろう。3次元空間に記述したい質点が n 個あるとすれば、これらの質点の状態は一般化座標 $q_i (i = 1, 2, \dots, 3n)$ を用いて記述できる。これらをまとめて $\{q\} := \{q_i | i = 1, 2, \dots, 3n\}$ と書き、これらの parameter で張られる $3n$ 次元空間を配位空間 (configuration space) という。ここで我々の世界が Newton の運動方程式のように決定論的な力学法則に支配されていると信じると、これらの力学変数 q_i は各時刻で完全に決定されているはず（この時間 parameter t を Galilean time と呼ぶ。わざわざ名前を付けるということは区別すべき概念が他にも存在するという事で、実際に Newton 力学のような観測者に依らない universal な時刻 t は電磁気学と矛盾するため特殊相対論が必要になる）なので、時間を parameter とする配位空間上の軌跡 $q_i(t)$ として与えられている。よって時間微分が定義でき、 $\dot{q}(t) := \frac{dq(t)}{dt}$ と書く。

Newton 以来の経験的事実として、我々の世界の力学法則はこれらの座標の 2 階までの時間微分で記述できるため、kinetic energy T と potential energy V が $\{q\}, \{\dot{q}\}$ の関数として表される事は事実として受け入れよう。^{*1} このとき、Lagrangian $L(\{q\}, \{\dot{q}\})$ を $6n$ 変数関数として

$$L := T - V \quad (1.2.4)$$

で定義する。個々の力学変数 $q_i(t)$ は時間の関数であるので、 $6n$ 変数関数 $L(\{q\}, \{\dot{q}\})$ との合成関数 $L(t) := L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\})$ は時間の 1 変数関数であり、時刻 t_i から時刻 t_f までの定積分が定義できる：

$$S[q] := \int_{t_i}^{t_f} dt L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \quad (1.2.5)$$

この S を action (作用) と言い、 I と書くこともある。また、作用 S は時間による定積分で与えられるのでそれ自身は時間の関数ではないが、時間の関数 $q(t)$ を与えると決まる量である、という意味で $S[q]$ と書いた。このように関数 $f(x)$ を引数に取って実数 $F[f]$ を与えるような写像 F を汎関数 (functional) と呼ぶ。

最小作用の原理は、個々の力学変数の時間依存性はこの action が停留するような関数形で与えられる事を主張する。つまり、 $q_i(t)$ を時間の関数と見做したときの関数形を

$$\begin{aligned} q_i(t) &\mapsto (q_i + \delta q_i)(t) := q_i(t) + \delta q_i(t) \\ |q_i(t)| &\gg |\delta q_i(t)| \quad (\forall t) \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

のように微小に変化させたとき、どんな関数 $\delta q_i(t)$ に対しても action の変分が微小量の 1 次まで

$$\begin{aligned} \delta S &:= S[q + \delta q] - S[q] \\ &= \int dt L(\{q_i(t) + \delta q_i(t)\}, \{\dot{q}_i(t) + \delta \dot{q}_i(t)\}) - S[q] \\ &\simeq \int dt \sum_i \left\{ \delta q_i(t) \frac{\partial}{\partial q_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) + \delta \dot{q}_i(t) \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right\} \\ &= \sum_i \left[\delta q_i(t) \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right]_{t=t_i}^{t_f} \\ &\quad + \int dt \sum_i \delta q_i(t) \left\{ \frac{\partial}{\partial q_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right\} \end{aligned} \quad (1.2.7)$$

^{*1} より高階、つまり 3 階以上の時間微分で記述される系については Ostrogradsky theorem とか Ostrogradsky instability と呼ばれているものが知られており、Hamiltonian が上下に非有界になって物理的に不安定な系になってしまうらしい [1]。ただし、一般に高階の微分は高 energy 領域での理論の振る舞いを変化するため、低エネルギー領域でよく理解された理論を高エネルギー領域に拡張したい重力理論などの文脈では、高階の微分を含む理論が大真面目に議論されている。また、例えば弦理論に現れる D-brane の低エネルギー有効作用である DBI 作用 (Dirac-Born-Infeld action) などは自然に高次の微分項を導く。

で消える（同時に、部分積分による表面項 $[\dots]_{t=t_i}^{t_f}$ も適当な境界条件を課すことにより消える）こと

$$\begin{aligned} \delta S &= 0 \quad (\forall \delta q_i(t), i) \\ \Leftrightarrow \quad 0 &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (\forall i) \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

を要求すると、得られた微分方程式の解が物理的に実現される物体の軌跡 $q(t)$ を与えるというのである。(1.2.8) を Euler-Lagrange 方程式と言い、scalar 量 L によって力学法則を与えたという点で確かに目標を達成している。実際、 $\{q\}$ から新しい変数 $\{q'\}$ への座標変換（一般座標変換、または点変換という） $q_i = q_i(\{q'\})$ のもとで

$$L'(\{q'\}, \{\dot{q}'\}) := L(\{q(\{q'\})\}, \{\dot{q}(\{q'\})\}) \quad (1.2.9)$$

と定めると、Euler-Lagrange 方程式が形を変えないこと

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \\ \Rightarrow 0 &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}'_i} - \frac{\partial L'}{\partial q'_i} \end{aligned} \quad (1.2.10)$$

が示される。

1.2.1 調和振動子の例

n 次元調和振動子の場合 Lagrangian は

$$L = \sum_{j=1}^n \left(\frac{m}{2} \dot{q}_j^2 - \frac{m\omega^2}{2} q_j^2 \right) \quad (1.2.11)$$

であるので、Euler-Lagrange 方程式は

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \\ &= \frac{d}{dt} (m\dot{q}_i) - (-m\omega^2 q_i) \\ &= m\ddot{q}_i + m\omega^2 q_i \end{aligned} \quad (1.2.12)$$

となり、確かに Newton の運動方程式 (1.1.3) を再現する。

1.3 Vector Potential

Helmholtz の定理 (1.2.3) によると、3次元空間上の vector 場 $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ は vector potential と scalar potential により書けるのであった。scalar potential $V(\mathbf{x})$ で書かれる保存力の下での運動は既に定式化したので、次は話を 3次元に限り、vector potential で書かれる力の例として磁場を解析力学の枠組みで扱うことにしよう。なお、以下では vector potential $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ を使って書かれる一般の力

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{C}(\mathbf{x}) \quad (1.3.1)$$

を扱っているわけではない事に注意されたい。

1.3.1 電磁場中の荷電粒子

電荷を持つ粒子を荷電粒子というが、電荷 $+q$ の荷電粒子を電場 $\mathbf{E}(t, \mathbf{x}) = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}(t, \mathbf{x}) - \nabla \phi(t, \mathbf{x})$ および磁場 $\mathbf{B}(t, \mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ の中に置くと Lorentz force（ローレンツ力）

$$\mathbf{F} = q \left[\mathbf{E} + \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B} \right]$$

$$= q \left[-\nabla\phi + \dot{\mathbf{x}} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right] \quad (1.3.2)$$

を受ける（うるさいことを言うと荷電粒子が存在するだけでその周りに Coulomb potential が生じるし、他にも制動放射（bremsstrahlung）という現象があり、荷電粒子が加速すると電磁波を出すので \mathbf{E} とか \mathbf{B} も変わってしまうのだが、以降の議論ではこのような電磁波が無視できるほど電磁場 \mathbf{E}, \mathbf{B} が大きいとする*2。このように系の時間発展により影響を受けない系外から系への影響を、総称して外場（external field）という）。この Lorentz 力を再現する Lagrangian L' は、電磁場がない場合の Lagrangian $L = T - V$ （ただし V に静電 potential ϕ は含めていない）を使って

$$L' = L - q(\phi - \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}) \quad (1.3.3)$$

で与えられる。

n 粒子系への拡張は容易である。これらの間の Coulomb potential は真空の誘電率 ϵ_0 を使って単に

$$U(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) := \sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \quad (1.3.4)$$

となる（我々の convention では ϕ はあくまで外場なので、その中に U に相当する項は入っていない）。また、各粒子が放射する電磁波は無視できるという仮定を置いていたので、ある粒子が他の粒子に電磁波を通じて影響を与えることはない。従って複数の粒子を扱うにも単に同様の項を足し上げればよく、各粒子の電荷を q_i 、位置を \mathbf{x}_i として

$$L' = L + U(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) - \sum_i q_i \left[\phi(\mathbf{x}_i) - \dot{\mathbf{x}}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_i) \right] \quad (1.3.5)$$

のようにすればよい。

1.4 対称性

Euler-Lagrange 方程式を導く際、我々は任意の変分 $\delta q(t)$ のもとで作用の変分 δS が消えることを要求し、作用を停留する特別な $q(t)$ を得た。逆に、力学変数の任意の関数形 $\forall q(t)$ に対し、変分に限らないある特別な変数変換（transformation） $q \mapsto q + \delta^{\text{sym}} q$ のもとで作用が変化しない場合、この特別な変数変換 $\delta^{\text{sym}} q$ は系の対称性（symmetry）である、という。多くの系に現れる対称性変換の代表的な例を見てみよう。

- Time Reversal Symmetry（時間反転）

$$\begin{cases} q_0 = t \mapsto -t \\ \delta^{\text{sym}} q = \delta^{\text{t.r.}} q[q](t) := -q(t) + q(-t) \\ \dot{q} \mapsto -\dot{q} \end{cases} \quad (1.4.1)$$

- Time-Translational Symmetry（時間並進対称性）

$$\begin{cases} q_0 = t \mapsto t - t_0 \\ \delta^{\text{sym}} q = \delta^{\text{t.t.}} q[q](t; t_0) := -q(t) + q(t - t_0) \end{cases} \quad (1.4.2)$$

- 座標 q_i についての Reflection Symmetry（鏡像対称性）

$$\delta^{\text{sym}} q_j = \delta^{\text{ref.}} q_j := \begin{cases} -2q_i & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (1.4.3)$$

*2 もっとうるさいことを言うと、この輻射（粒子自身が出す電磁波）の影響を取り入れて計算すると Abraham-Lorentz-Dirac 方程式とか言われる時間の3階微分を含むヤバそうな運動方程式が得られる。実際これは相対論的な共変性とか因果律を破り、外場がないのに増大する訳の分からない解（runaway solution）を持つ。特殊な状況下では Landau-Lifshitz 方程式というある程度振る舞いのいい運動方程式に帰着するものの、最も一般の場合については未だ未解決である [2]。

- Parity Symmetry (空間反転対称性)

$$\delta^{\text{sym}} q_i = \delta^{\text{parity}} q_i := -2q_i \quad (\forall i) \quad (1.4.4)$$

- Translational Symmetry (空間並進対称性)

$$\delta^{\text{sym}} q_i = \delta^{\text{trans}} q_i(\{a\}) := a_i, \quad a_i: \text{constant for } \forall i \quad (1.4.5)$$

- Rotational Symmetry (空間回転対称性)

$$\delta^{\text{sym}} q_i = \delta^{\text{rot}} q_i(O) := -q_i + O_i^j q_j, \quad (1.4.6)$$

O : orthogonal matrix (i.e. $O^T O = I$, or $O_k^i O_k^j =: (O^T)^i_k O_k^j = \delta^{ij}$)

ただし表記の簡単化のために $q_0 := t$ も正準変数のように見做し、Einstein の和の規約 (1 つの項に同じ添え字が 2 度出てきたときにはその添え字について和を取る) を採用した。このように、変換を記述するのに必要な parameter の個数は変換ごとに異なり、変換によっては $q(t)$ の関数形を知らなければ記述できないもの (すなわち変換が汎関数であるもの。[q] と示した) も存在する。

より一般に、一定の規則に従って変数変換や parameter の置き換えなど何らかの操作を行い、考えている力学系から新たな力学系を得ることを変換といい、ある変換 T の下で元と同じ系が得られる (系が変換前と全く同じ力学法則によって記述される) とし T は系の対称性 (symmetry)、あるいは不変性 (invariance) であるという。時に、3.2.3 節で扱う Lorentz 対称性のように見た目は異なるが全く同じ内容の方程式を与えるときは invariance、方程式が全く変わらない場合を symmetry と区別することもある。特に、potential や作用の形が異なる物理系の間で全ての観測量について予言が一致するような非自明な例は duality として知られており、時折 symmetry とほぼ区別しない用法で用いられる。

弦理論で near-horizon 極限のような特定の極限を取ると T-duality や D-brane を駆使して同じ理論を異なる複数の仕方で記述することが出来、複数の異なる理論の間に非自明な duality を与えられる場合がある。例えば AdS/CFT correspondence (より modern には gauge/gravity 対応とも呼ばれる) の代表的な例では GKP-Witten relation などの関係式により 5 次元 AdS₅($\times S^5$) 時空上の古典 type-IIB 超重力理論の物理量と 4 次元 CFT の例である $\mathcal{N} = 4$ Super Yang-Mills 理論の (Large- N 極限での) 物理量とを関係付けることが出来る。他にも 2 次元 CFT と 4 次元 gauge 理論との間に対応を与える AGT correspondence や、異なる gauge 群を持つ gauge 理論が低 energy 極限で同じ予言をする Seiberg duality など、様々な形の duality が具体的に調べられている。これらの duality によると、普通の摂動展開では調べることの難しい場の理論の強結合領域などを調べることが出来る場合があるため、現在でも (十分数学的に) 理解されていない quark の confinement (閉じ込め) の理解、black hole の量子論的な性質を介した量子重力の理論の解明などに向け精力的に研究されている。

1.4.1 連続な対称性と Noether の定理、保存電荷

Noether の定理は系に連続的な対称性が存在するとき、必ず対応する保存量 (時間に依らず一定であるような量) が存在する事を主張する。この保存量を electric charge が保存することの analogy により Noether charge と呼び、電荷と訳す (が、一般には electric charge とは全く関係ない)。以下では具体的に Noether charge を構成しよう。ただし、対称性変換が Galilean time t について local (この用語は場の理論からの流用、4.1 を見よ) であること、すなわち変換後の Lagrangian がある時刻 t の情報 $q(t), \dot{q}(t)$ のみを用いて書ける事を仮定する。例えば time-translation(1.4.2) 変換後の Lagrangian は同一時刻 $t - t_0$ の力学変数のみを使って書けるので許されるが、変換後の Lagrangian に $q(t)q(t - t_0)$ のような項が現れることは許さない。

連続で local な変換を、 m 個の実数 parameter $\theta_a (a = 1, \dots, m)$ を用いて

$$q_i(t) \mapsto q_i(t) + \delta^{\text{sym}} q_i[\{q\}](t, \{\theta\}) \quad (1.4.7)$$

のように書こう。^{*3} ただし今回は $\delta^{\text{sym}} q_i$ は変分ではないため、微小と仮定する必要はない。また、変換前の運動方程式に無かった 2 階以上の時間微分 $\ddot{q}, \ddot{\dot{q}}, \dots$ が運動方程式に現れるとき変換は明らかに対称性ではないので、対称性変換の右辺には q, \dot{q} しか現れないとして一般性を失わない。結局 parameter $\theta_a = \theta_a^0$ を固定しておく限り、対称性変換は locality の仮定から一般座標変換 (1.2.10) と time-translation (1.4.2) の組み合わせを与えるだけだと分かり、これらをまとめて

$$q'_i(\{q(t')\}, \{\dot{q}(t')\}) \Big|_{t'=t-t_0} := q_i(t) + \delta^{\text{sym}} q_i[\{q\}](t, \{\theta^0\}) \quad (1.4.8)$$

と書くことにする。

無限小 (infinitesimal) 量 ϵ を、 $\epsilon^2 = 0$ かつ任意の関数 $f(x)$ について $f(x + \epsilon) = f(x) + \epsilon \frac{df(x)}{dx}$ が厳密に成り立つような量と定義する (このような量は数学的には超準解析 (nonstandard analysis) により正当化されるが、ここではこれ以上触れない)。対称性変換が連続であることを仮定したので、 q' を与える parameter θ_a^0 に対して $\theta_a^0 + \epsilon_a$ も対称性変換を与える。この新たな変換

$$q_i(t) + \delta^{\text{sym}} q_i[\{q\}](t, \{\theta^0 + \epsilon\}) =: q'_i(\{q(t')\}, \{\dot{q}(t')\}) \Big|_{t'=t-t_0} + \epsilon_a \delta^a q'_i \quad (1.4.9)$$

によって δ^a を定義しよう (次の節で詳しく議論するが、右辺の量は全て時刻 $t' = t - t_0$ で評価している)。同じことだが、

$$\delta^a q'_i := \frac{\partial(\delta^{\text{sym}} q_i)}{\partial \theta_a} \Big|_{\{\theta\}=\{\theta^0\}} \quad (1.4.10)$$

と定義したと思っても良い。 $\delta^a q'_i = \partial^a \delta^{\text{sym}} q'_i$ (ただし $\partial^a := \frac{\partial}{\partial \theta_a}$) の定義が ϵ_a と独立であることに注意せよ。

さて、ここまで $q(t)$ は運動方程式の解に限らない任意の時間の関数であった。ここで初めて q' についての運動方程式 (1.2.10) を解き、その解を改めて $q'(t)$ と呼ぶ事にする。Lagrangian が対称性変換のもとで不変であるとき、解 $q'(t)$ に対し m 個の Noether charge $Q^a(t)$ を

$$Q^a(t) := \sum_i \delta^a q'_i(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i}(t) \quad (1.4.11)$$

で定義すると、その時間微分は

$$\begin{aligned} \frac{dQ^a(t)}{dt} &= \sum_i \left\{ \delta^a q'_i \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} + \delta^a \dot{q}'_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} \right\} \\ &= \sum_i \left\{ \delta^a q'_i \frac{\partial L}{\partial q'_i} + \delta^a \dot{q}'_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} \right\} \\ &\quad \because \text{Euler-Lagrange equation (1.2.8)} \\ &= \partial^a L(q'(t), \dot{q}'(t), t) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1.4.12)$$

と計算できる。ただし δ^{sym} が対称性であること、すなわち作用の不変性から Lagrangian が変換 parameter に依らない場合 $\partial^a L = 0$ に話を限った。仮に作用は変化しないが Lagrangian が変化を受ける場合、例えば Lagrangian の変化分が

$$\begin{aligned} \delta L &:= L(q' + \epsilon_a \delta^a q') - L(q') = \epsilon_a \frac{d\mathcal{K}^a}{dt}, \\ \delta S &= \int dt \delta L = \epsilon_a \int dt \frac{d\mathcal{K}^a}{dt} = (\text{surface term}) \end{aligned} \quad (1.4.13)$$

^{*3} 以下の議論は通常の教科書で見えるものより冗長だが、対称性変換が恒等変換 (identity、つまり何もしない変換) のまわりの無限小変換として実現されることを仮定せずに済む。例えば相対論で現れる Lorentz 変換は数学的には不定値直交群 $SO(3, 1)$ で表され、恒等変換と連続的に繋がらない 3 つの部分を含む 4 つの部分集合からなるので、このような場合にも 4 つの部分集合それぞれに独立な証明が出来ることは重要である。

のように時間の全微分で書ける場合も、対応する Noether charge を

$$Q^a(t) := \sum_i \delta^a q'_i(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i}(t) - \mathcal{K}^a \quad (1.4.14)$$

と再定義すればこれは保存量となる。対称性の定義は任意の関数 $q(t)$ に対して変換を施した際に作用が変化しないことを要求するので、Lagrangian に生じ得る変化は上の 2 例で尽きている（のか？最も一般の場合にどうかは知らない）。作用はその時間積分なので、あとは積分区間に生じ得る変化を次節で議論すれば作用の変化への寄与を全て考慮できている。

以上で Q が保存量であると示せたことになる。

1.4.2 一般化された Noether の定理の証明

上の議論では無限小の変換 $\epsilon_a \delta^a$ に伴って Galilean time parameter t が変化する場合を無視した。以下では

$$t \mapsto t + \delta t =: t + \epsilon_a \delta^a t \quad (1.4.15)$$

のような変化がある場合にも Noether charge に対応する量

$$F^a(t) := \delta^a q'_i(t) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i}(t) - \delta^a t L \quad (1.4.16)$$

が保存する事を確かめる。対称性が連続であったので、constant parameter θ_a^0 と $\theta_a^0 + \epsilon_a$ による変換は任意の時間の関数 $q(t)$ に対し同一の作用を与えるはずである：

$$\begin{aligned} 0 &= \delta_\epsilon S \\ &:= S \left[q + \delta^{\text{sym}} q \Big|_{\theta^0 + \epsilon} \right] - S \left[q + \delta^{\text{sym}} q \Big|_{\theta^0} \right] \\ &= S [q' + \epsilon_a \delta^a q'] - S [q'] \\ &= \int_{t_i + \delta t}^{t_f + \delta t} dt L(q' + \epsilon_a \delta^a q') - \int_{t_i}^{t_f} dt L(q') \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left[L(q' + \epsilon_a \delta^a q') - \delta t \frac{d}{dt} L(q' + \epsilon_a \delta^a q') - L(q') \right] \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\epsilon_a \delta^a q'_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} + \frac{d}{dt} (\epsilon_a \delta^a q'_i) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} - \epsilon_a \delta^a t \frac{d}{dt} L \right] \\ &= \epsilon_a \left(\int_{t_i}^{t_f} dt \left[\delta^a q'_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} + \frac{d}{dt} (\delta^a q'_i) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} - \delta^a t \frac{d}{dt} L \right] \right) \end{aligned} \quad (1.4.17)$$

繰り返し強調しているように、対称性変換は変分（粒子の位置自体を時間の関数として変化させる）ではなく、粒子の同じ時間発展を異なる変数によって記述する変数変換である。いま議論しているのはこの変数変換に時間 parameter t 自体の変化も含める場合で、それに伴って現れた δt に比例する項は数学的には Lie 微分（変数変換の前後で、同じ座標『値』における関数の値を比較する）を取っていることに相当する。変換前の t と変換後の $t + \delta t$ とは物理的には同じ時刻を表すが、変換前の t と変換後の t は物理的に異なる時刻を表すことに注意しよう。Lie 微分で比較するのは後者である。

さて、 ϵ_a の値は無限小であるという他は全く任意であるので、右辺は ϵ_a の多項式として恒等的に消えなければならない。また、ここまで $q'(t)$ が運動方程式の解であることを仮定していなかったが、ここで初めて Euler-Lagrange 方程式 (1.2.8) を用いると

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\delta^a q'_i \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} + \frac{d}{dt} (\delta^a q'_i) \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} - \delta^a t \frac{d}{dt} L \right] \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{dF^a(t)}{dt} \end{aligned} \quad (1.4.18)$$

が得られる。対称性の定義は任意の時間の関数 $q'(t)$ に対して上の量が消えることであるので、当然 $q'(t)$ が運動方程式の解である場合にも上の量は消えていなければならない。また、対称性の定義は t_i, t_f を特定の値に選んだ時のみならず、任意の t_i, t_f に対して上の量が消えることを要求する。以上から保存則

$$\frac{dF^a(t)}{dt} = 0 \quad (1.4.19)$$

が無事導かれたことになる。既に見たように、 $\delta t = 0$ の場合にはこれは Lagrangian が変換 parameter によらないという条件と同じであることが分かるだろう。

最後に δt を含めた対称性変換に対応する保存量の例を挙げておこう：以下で定義する Hamiltonian (1.5.4) は $m = 1, \theta_1 = t_0$ を変換 parameter とする時間並進対称性 $\delta q' = \dot{q}', \delta t \neq 0$ (const.) のもとでの保存量と見做すことが出来る。あるいは前節の表面項がある場合の Noether charge で $\mathcal{K} = L$ としたものと思ってよい。(が、その場合は t の変換ではなく $q(t)$ の変分

$$q(t) \rightarrow q(t - \delta t) = q(t) - \delta t \dot{q}(t) \quad (1.4.20)$$

のもとで作用の Lie 微分ではなく変分を計算していることになるので、作用の積分区間は変換後の時間座標でも (t_i, t_f) のままで変わらない。Lagrangian が全微分 $-\delta t \frac{dL}{dt}$ だけ変化するため、作用は不変である。最初からこの易しい解釈を導入しなかったのは単に、scalar 場の他に vector や tensor 量も含む場の理論における Noether の定理の証明には Lie 微分を使う方が簡単だからに過ぎない。)

1.4.3 対称性の gauge 化

無限小量に値を取る m 個の時間の関数 $\epsilon_a(t)$ を用意しよう。 $\delta^a q_i$ の定義は ϵ_a に依っていないかったので、 $\epsilon_a(t) \delta^a q_i$ は変数変換ではなく無限小の変分と見做せる。このように constant であった対称性変換の parameter を時空に依存する関数（つまり場）に置き換える操作を対称性の gauge 化 (gauging) とする。

さて、対称性変換の gauge 化によって定義される変分のもとで、作用がどう変化するか見てみよう。基本的には (1.4.17) と同様の計算をすれば良いが、今度は ϵ_a の微分は 0 ではないし、 ϵ_a を積分の外には出せないし、作用の変化分が 0 になるとも限らない：

$$\begin{aligned} \delta_{\epsilon(t)} S &:= \int_{t_i}^{t_f} dt \epsilon_a(t) \delta^a q_i \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] + \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{d}{dt} \left[\epsilon_a(t) \delta^a q_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \epsilon_a(t) \delta^a t L \right] \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \epsilon_a(t) \delta^a q_i \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] + \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{d}{dt} \left[\epsilon_a(t) F^a(t) \right] \end{aligned} \quad (1.4.21)$$

単に特別な類の変分を取っただけだから第 1,2 項が Euler-Lagrange 方程式に現れる形であるのは当然だが、全微分で書かれる新たな項が現れているのは興味深い。Euler-Lagrange 方程式が成り立つ場合であっても、これまで無視していた表面項が作用の変化に非自明な寄与をし得ることが分かる。対称性が gauge 化された後も対称性であり続ける場合、これを gauge 対称性と言う。素粒子理論においては全ての相互作用がある種の gauge 対称性により記述されることが知られており、逆に作用が gauge 対称性を持つことを要求すると作用に入り得る項の形も強く制限される。この要求を gauge 原理と呼ぶことがある。

1.5 Hamilton 力学

一般に Euler-Lagrange 方程式は各変数 q_i の高階の微分を含む、複雑な方程式系となる。変数を増やす代わりに、低次の微分で書ける方程式系を見付けたいと思うのも自然な発想である。Lagrangian $L(\{q\}, \{\dot{q}\})$ に新しい変数 $\{p\}$ を導入する代わりに \dot{q}_i を消去し、Euler-Lagrange 方程式と等価な微分方程式系を得ることを考えよう。

一般化運動量を

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (1.5.1)$$

で定義する。一般に $\det \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \neq 0$ であれば p の定義式を \dot{q}_i について

$$\dot{q}_i = \dot{q}_i(\{q\}, \{p\}, t) \quad (1.5.2)$$

のように解く事が出来、^{*4} 従って \dot{q}_i を方程式系から消去できる。Euler-Lagrange 方程式は

$$\begin{cases} \dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \\ p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \end{cases} \quad (1.5.3)$$

となるが、Lagrangian そのものから $\{\dot{q}\}$ を消去し $\{q\}, \{p\}$ の $6n$ 変数関数として書き直すと (1.5.1) の右辺を表現する方法がなくなってしまう。そこで別のアプローチを考えよう。

我々が欲しいのは新しい変数で表された Lagrangian そのものではなく、Lagrangian を古い変数で微分して得られる方程式系である。そこで、新しい変数 $\{q\}, \{p\}$ で微分すると Lagrangian を古い変数 $\{q\}, \{\dot{q}\}$ で微分したときと等価の式を与えるような、新しい関数 $H(\{q\}, \{p\})$ を構成することを考える。

Legendre 変換

$$H(\{q\}, \{p\}) := \left[\sum_i \dot{q}_i p_i - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right]_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \quad (1.5.4)$$

はそのような構成の例である。右辺には $9n$ 個の変数 $\{q\}, \{\dot{q}\}, \{p\}$ が表れているが、 \dot{q} が消去され $\{q\}, \{p\}$ の $6n$ 変数関数として表されていることに注意しよう。これら parameter で張られる $6n$ 次元空間を相空間 (phase space、位相空間と訳す場合もあるが topological space という幾何学の用語との混乱を招くので推奨しない) といい、以下で構成する新たな運動方程式の解は相空間上の軌跡 $\{q(t)\}, \{p(t)\}$ を与える。

関数 H を Hamiltonian というが、その著しい性質は \dot{q} を消去する直前の表式が \dot{q} に依っていないこと

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \left[\sum_j \dot{q}_j p_j - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right] &= \left[\sum_j \left(\delta_{ij} p_j \right) - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] \\ &= p_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \\ &\simeq 0 \end{aligned} \quad (1.5.5)$$

である。ただし、偏微分を $\{q\}, \{\dot{q}\}, \{p\}$ の全てを独立な変数と見做して行ったことに注意せよ。最後の等号 \simeq は、独立変数として導入した p_i を ($\{q\}, \{\dot{q}\}$ の関数である) 一般化運動量 $p_i(\{q\}, \{\dot{q}\})$ と同一視すると等号が成り立つ、という意味である。

Hamiltonian の $\{q\}, \{p\}$ による微分は、 $q(t)$ が Euler-Lagrange 方程式の解であるとする

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial q_i} &= \frac{\partial}{\partial q_i} \left[\sum_j p_j \dot{q}_j - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right]_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j(\{q\}, \{p\}, t)}{\partial q_i} - \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)\})}{\partial q_i} \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \left[\frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \right]_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} + \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial \dot{q}_j} \Big|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \left[\frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \right]_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} + \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} p_j \\ &= - \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \Big|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \end{aligned}$$

^{*4} このような逆解きが出来ない力学系を特異 Lagrange 系と呼ぶ。gauge 理論などは場の量子論における特異系の例である。

$$\begin{aligned}
&= -\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad \because \text{Euler-Lagrange 方程式} \\
&= -\dot{p}_i
\end{aligned} \tag{1.5.6a}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial p_i} &= \frac{\partial}{\partial p_i} \left[\sum_j \dot{q}_j p_j - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right]_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\
&= \sum_j \left[\frac{\partial \dot{q}_j(\{q\}, \{p\}, t)}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_j(\{q\}, \{p\}, t) \delta_{ij} \right] - \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)\})}{\partial p_i} \\
&= \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_i - \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial \dot{q}_j} \Big|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\
&= \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_i - \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j \\
&= \dot{q}_i
\end{aligned} \tag{1.5.6b}$$

のように Lagrangian を一切使わずに表せ、逆に Hamiltonian を再び Legendre 変換したものに (1.5.6a), (1.5.6b) の解 $\{q(t)\}, \{p(t)\}$ を代入すると $\{q\}, \{p\}$ で書いた Euler-Lagrange 方程式 (1.5.3) を再現する。すなわち両者は微分方程式系として等価であり、(1.5.6a), (1.5.6b) を Hamilton の正準方程式という。

Hamilton の方程式は scalar 関数 H から得られるため (1.2.10) のような点変換の下でも不変である上、より一般に正準運動量 $\{p\}$ をも座標と等価に扱った座標変換（正準変換、または接触変換という） $q = q(\{q'\}, \{p'\}, t), p = p(\{q'\}, \{p'\}, t)$ のもとでも不変である。また 1 階の時間微分のみを含むので、望む方程式系が得られたことになる。

1.5.1 調和振動子の例

n 次元調和振動子の Lagrangian は (1.2.11) であったので、一般化運動量は

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i \tag{1.5.7}$$

と通常の運動量の定義に一致する。Hamiltonian は

$$\begin{aligned}
H &= \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - L \right]_{\dot{q}_i = \frac{p_i}{m}} \\
&= \sum_i p_i \frac{p_i}{m} - \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{2} q_i^2 \right) \\
&= \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q_i^2 \right)
\end{aligned} \tag{1.5.8}$$

となる。正準方程式は

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -m\omega^2 q_i \end{cases} \Rightarrow \ddot{q}_i = \frac{\dot{p}_i}{m} = \frac{-m\omega^2 q_i}{m} = -\omega^2 q_i \tag{1.5.9}$$

となって、やはり Newton の方程式 (1.1.3) を再現する。

1.5.2 Poisson 括弧

Hamilton の正準方程式

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \tag{1.5.10}$$

は $\{q\}, \{p\}$ のいずれについても時間の 1 階微分しか含まない点で美しいが、 $\{q\}, \{p\}$ に対して右辺の符号が異なるという非対称性がある。より抽象的な演算を導入することで、この非対称性を取り除こう。

2 つの量 A, B の Poisson 括弧を

$$\{A, B\}_P := \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \quad (1.5.11)$$

で定義すると、正準変数同士の Poisson 括弧は

$$\{q_i, p_j\}_P = \delta_{ij}, \quad \{p_i, q_j\}_P = -\delta_{ij} \quad (1.5.12)$$

のようになり、正準方程式 (1.5.10) は

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \{q_i, H\}_P \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = \{p_i, H\}_P \end{cases} \quad \therefore \quad \dot{r} = \{r, H\}_P \quad (r = q_i, p_j \quad \forall i, j) \quad (1.5.13)$$

と $\{q\}, \{p\}$ の間で対称な形になる。より一般に、任意の関数 $F(\{q\}, \{p\}, t)$ の時間発展が

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{dq_i}{dt} \frac{\partial F}{\partial q_i} + \frac{dp_i}{dt} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right) \\ &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right) \\ &= \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}_P \end{aligned} \quad (1.5.14)$$

と一つの式にまとまってしまう。あらゆる量の時間発展を求める過程が、Poisson 括弧の計算という一つの操作に統一されたのである。

2 量子力学の基礎

量子力学に特徴的な事は、物理量が単なる数ではなく Hilbert 空間に作用する非可換な operator (演算子、作用素) となる事である。観測可能な量は Hermitian operator となるので、我々は operator として専ら linear な Hermitian ないし unitary operator を扱う。

2.1 正準量子化

2.1.1 Hilbert 空間と Operator

量子力学に現れる operator O とは、写像 $O: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ すなわちある複素 vector space \mathcal{H} の元 $|\psi\rangle$ に作用して再び vector space の元 $O|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ を与えるものである。例えば identity operator (恒等演算子、単位演算子) 1 は任意の vector $|\psi\rangle$ に対し

$$1|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (2.1.1)$$

を与える。

ある operator O が \mathcal{H} に linear に作用している、あるいは linear である、とは

$$\text{For } \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H} \text{ and } \forall a, b \in \mathbb{C}, \quad O(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) = aO|\psi_1\rangle + bO|\psi_2\rangle \quad (2.1.2)$$

であることを言い、代数学の言葉では $\hat{O} \in \text{End}(\mathcal{H}) = \text{Hom}(\mathcal{H}, \mathcal{H})$ あるいは $\hat{O} \in \text{Hom}(\mathcal{H}, \mathcal{H})$ などと書く (End, Hom はそれぞれ endomorphism (自己準同型) と homomorphism (準同型) の意)。例えば時間反転操作に対応する operator T は anti-unitary (anti-linear かつ unitary)

$$\text{For } \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H} \text{ and } \forall a, b \in \mathbb{C}, \quad T(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) = a^*T|\psi_1\rangle + b^*T|\psi_2\rangle \quad (2.1.3)$$

な operator の重要な例であるが、以下では専ら linear なものに話を限る。

量子力学では物理量は operator で表され、解析力学で基本的な力学自由度であった $\{q\}, \{p\}$ さえも operator となっている。我々は任意の観測量の時間発展が決定論的な物理法則によって記述されることを仮定するが、一方で直接観測される量はもちろん実数であるので、まずはこれらの観測量を $\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}$ のような operator と関係付ける方法を考えなければならない。以下ではこの方法を Hilbert 空間と呼ばれる vector space を用いて与えよう。

vector space \mathcal{H} が内積 η を持つとは、 $\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ に対し複素数 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle := \eta(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) \in \mathbb{C}$ を与える写像 $\eta: \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ であって、

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^* \quad (\text{共役対称性}) \quad (2.1.4a)$$

$$\langle\phi|(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) = a\langle\phi|\psi_1\rangle + b\langle\phi|\psi_2\rangle \quad \text{for } \forall a, b \in \mathbb{C} \quad (\text{線形性}) \quad (2.1.4b)$$

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \quad \text{and} \quad \langle\phi|\phi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\phi\rangle = 0 \quad (\text{正定値性}) \quad (2.1.4c)$$

を満たすものがあることを言う。 $\| |\psi\rangle \|^2 := \langle\psi|\psi\rangle$ を $|\psi\rangle$ の norm という。2つの vector $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ の間の内積が消える $\langle\psi|\phi\rangle = 0$ とき、 $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ は直交する (normal である) といい、 $|\psi\rangle \perp |\phi\rangle$ などと書く。例えば 0 は任意の vector と直交する。Hilbert 空間とは内積空間であって完備な (直感的には、極限が十分に存在する) ものを言う。物理学において時間発展は微分方程式で与えられるので、微分を定義するために極限が存在する必要があるのである。

量子力学において決定論的な時間発展方程式に従う力学自由度は Hilbert 空間の元である。この Hilbert 空間を状態空間と言い、その元を状態 vector と呼ぶ。個々の状態 vector の時間発展は Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (2.1.5)$$

によって与えられる。ここで \hbar は換算 Planck 定数または Dirac 定数と呼ばれ、Planck 定数 h により

$$\hbar := \frac{h}{2\pi} \quad (2.1.6)$$

と定義されるが、 \hbar も h も共に Planck 定数と呼ぶことも多い。また、 \hat{H} は以下で定義する Hamiltonian operator である。

Hamiltonian \hat{H} が時刻 t に顕わに依存 (explicitly dependent) しないとき、初期条件 $|\psi(t_0)\rangle$ のもとでの Schrödinger 方程式 (2.1.5) の一般解は時間発展 (time evolution) operator

$$\hat{U}(t; t') := \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt \hat{H}\right) = \exp\left(\frac{t-t'}{i\hbar} \hat{H}\right) \quad (2.1.7)$$

を使って

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t; t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2.1.8)$$

と書ける。

2.1.2 正準交換関係 (CCR: Canonical Commutation Relation)

二つの operator \hat{A}, \hat{B} の間の交換関係を

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.1.9)$$

で定義し、 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ であるとき \hat{A}, \hat{B} は交換する、または可換であるという。全く同様に反交換を

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (2.1.10)$$

で定義しておく。量子力学を考えるまで、あらゆる量は可換であった。このように全ての量が可換である力学系を古典力学系と言い、そこに現れる可換な数を c -数という。

任意の関数 $F(a)$ について、演算子 \hat{x} の関数 $F(\hat{x})$ を ($a = 0$ 周りの) Taylor 展開により

$$F(\hat{x}) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n F(a)}{da^n} \right|_{a=0} \hat{x}^n \quad (2.1.11)$$

と定義する。ある古典力学系の Hamiltonian $H(\{q\}, \{p\})$ が知られているとき、その正準力学変数 $\{q\}, \{p\}$ を正準交換関係：

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (2.1.12)$$

を満たす operator の組 $\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}$ で置き換える手続きを正準量子化と呼び、

$$\hat{H} := H(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}) \quad (2.1.13)$$

を得られた量子力学系の Hamiltonian operator という。

厳密にはこれだけでは古典的 Hamiltonian H が例えば qp のような項を持っていたとき、それを $\hat{p}\hat{q}$ で置き換えるのか $\hat{q}\hat{p} = \hat{p}\hat{q} + i\hbar$ で置き換えるのかといった問題は残る。これを演算子順序の問題といい、Hamiltonian operator の Hermiticity や量子系の持つべき大域的対称性などから一定の解答を与えることは出来るものの、異なる演算子順序は物理的に異なる量子系を与えるため一般に与えられた古典系に対して量子系を一意に定めることは出来ない。ただし特定の文脈で自然な演算子順序は存在し、このことは経路積分を扱う際により詳しく議論する。

2.1.3 Observables と Hermitian conjugate, Unitary operator

任意の vector $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ の Hermitian conjugate (エルミート共役) $|\psi\rangle^\dagger$ を内積を使って

$$|\psi\rangle^\dagger := \eta(|\psi\rangle, \cdot) \quad (2.1.14)$$

により定め、 $\langle\psi|$ とも書く。元の空間の任意の元 $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ との内積が

$$|\psi\rangle^\dagger |\phi\rangle := \langle\psi|\phi\rangle = \eta(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \in \mathbb{C} \quad (2.1.15)$$

のように複素数を与えるため、内積の線形性から $\langle\psi|$ は \mathcal{H} 上の線形汎関数と見做すことが出来、Riesz representation theorem から $\langle\psi|$ のなす集合 $\mathcal{H}^* = \text{Hom}(\mathcal{H}, \mathbb{C})$ は \mathcal{H} の (位相的あるいは線形) 双対空間となる。Hilbert 空間の元 $|\psi\rangle$ を ket vector、その双対空間の元 $\langle\psi|$ を bra vector という。

この定義の下で operator \hat{O} の Hermitian conjugate \hat{O}^\dagger も、任意の vector $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対して

$$\langle\psi|\hat{O}^\dagger|\phi\rangle = |\psi\rangle^\dagger \hat{O}^\dagger |\phi\rangle := \left(\hat{O}|\psi\rangle\right)^\dagger |\phi\rangle = \left[\langle\phi|(\hat{O}|\psi\rangle)\right]^* \quad (2.1.16)$$

となる operator と定めることが出来る。このような operator が一意に存在することも Riesz representation theorem から保証される。

ある operator \hat{O} が Hermitian (自己共役、自己随伴) であるとは、 \hat{O} が

$$\hat{O} = \hat{O}^\dagger \quad (2.1.17)$$

を満たすことを言う。量子力学における observable (可換測量) は、Hermitian operator で表される。

ある operator \hat{O} の inverse operator (逆演算子、逆作用素) \hat{O}^{-1} を

$$\hat{O}^{-1}\hat{O}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \text{for } \forall |\psi\rangle \quad (2.1.18)$$

で定義する。ある operator \hat{U} が unitary であるとは、 $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ すなわち

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \text{for } \forall |\psi\rangle \quad (2.1.19)$$

が成り立つことを言う。一般に Hermitian operator $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ に対し $\exp(ia\hat{O})$ (ただし $a \in \mathbb{R}$) は unitary であり、例えば、時間発展 operator (2.1.7) は unitary operator の代表的な例である。

2.1.4 離散 spectrum の固有状態と Hermitian operator

Operator は vector に作用して再び vector を与えるので、ある \hat{O} に対し $|\psi\rangle \neq 0$ が存在して

$$\hat{O}|\psi\rangle \propto |\psi\rangle, \quad \text{i.e. } \exists \lambda \in \mathbb{C} \text{ s.t. } \hat{O}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad (2.1.20)$$

となる特別な状況を考えることが出来る。このとき、定数 λ を $|\psi\rangle$ の固有値 (eigenvalue)、その集合を点 spectrum と呼び、状態 vector $|\psi\rangle$ は \hat{O} の固有値 λ に属する固有 vector または固有状態 (eigenstate) であると言う。また、上の等式を固有方程式 (特性方程式、永年方程式とも) という。例えば、Hamiltonian の固有値 E_n に属する固有 vector $|n\rangle$ の時間発展 (2.1.8) は

$$\hat{U}(t_i + t, t_i) |n\rangle = \exp\left(\frac{t}{i\hbar} E_n\right) |n\rangle \quad (2.1.21)$$

と与えられ、自分自身の位相倍となることが分かる。特に、あとで (2.1.44) で議論するように

$$1 = \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (2.1.22)$$

が成り立つので、任意の vector $|\psi\rangle$ を初期条件とする時間発展は

$$|\psi(t)\rangle := \hat{U}(t_i + t, t_i) |\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \exp\left(\frac{t}{i\hbar} E_n\right) \langle n|\psi\rangle \quad (2.1.23)$$

で与えられることが分かる。ただしもちろん、この公式を使うためには全ての energy 固有 vector を求める必要がある。

ある固有値 λ に属する線形独立な固有 vector が n 個あるとき n を λ の縮退度と呼び、 $n = 1$ ならば縮退がない、 $n \geq 2$ ならば n 重縮退があるという。固有値 λ に属する固有 vector の集合は vector space を為し、これを固有値 λ に対する固有空間という。

我々が特に興味があるのは observable を表す Hermitian operator であるが、 $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ のとき λ が実数となること

$$\begin{aligned}\lambda \langle \psi | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O}^\dagger | \psi \rangle = \left[\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \right]^* = \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle \\ \lambda &= \lambda^* \quad (\because \langle \psi | \psi \rangle \neq 0)\end{aligned}\tag{2.1.24}$$

および異なる固有値 $\lambda \neq \theta$ に属する固有 vector

$$\hat{O} | \psi \rangle = \lambda | \psi \rangle, \quad \hat{O} | \phi \rangle = \theta | \phi \rangle\tag{2.1.25}$$

が直交すること

$$\lambda \langle \psi | \phi \rangle = \lambda^* \langle \phi | \psi \rangle^* = \left[\langle \phi | \hat{O} | \psi \rangle \right]^* = \langle \psi | \hat{O}^\dagger | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \phi \rangle = \theta \langle \psi | \phi \rangle\tag{2.1.26}$$

$$\therefore \langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle = 0\tag{2.1.27}$$

が示される。例えば \hat{H} の固有状態を energy 固有状態、energy 固有状態を持つ固有値を energy というが、任意の energy は実数である。また、特に最低 energy に対応する固有 vector $|0\rangle \neq 0$ は真空 (vacuum) または基底状態、それ以外の energy 固有状態は励起状態 (excited state) というが、真空と励起状態とは直交する。

2.1.5 連続 spectrum の「固有状態」

与えられた operator が連続 spectrum (連続固有値) を持つ場合、数学的には上の意味での固有 vector を定義できない。Gelfand triple (Gelfand の 3 つ組) とか呼ばれるものを用いれば形式的に「連続固有値に対応する固有 vector」を正当化することも可能だが、この場合には Hilbert 空間とその双対空間に対応が付かなくなり、与えられた ket vector に対して (2.1.14) のように bra vector を与えることも一般には出来なくなる。以下では Gelfand triple など使わずにあたかも連続 spectrum の「固有状態」が存在するかのように扱うが、数学的には spectral decomposition (2.1.34) の意味で解釈する。

2.1.6 同時固有状態

互いに可換な n 個の operator $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_n$ と、固有値 λ_i に属する \hat{A}_i の固有 vector $|\psi\rangle \neq 0$ があるでしょう。可換性 $[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = 0$ から

$$\lambda_i \hat{A}_j | \psi \rangle = \hat{A}_j \lambda_i | \psi \rangle = \hat{A}_j \hat{A}_i | \psi \rangle = \hat{A}_i \hat{A}_j | \psi \rangle\tag{2.1.28}$$

となるが、この式は $\hat{A}_j | \psi \rangle$ が再び \hat{A}_i の固有値 λ_i に対する固有空間の元である事を意味する。特に、縮退がない場合はある固有値 λ_i に属する vector が定数倍を除いて一意に定まるため、 $\hat{A}_j | \psi \rangle$ も $|\psi\rangle$ に比例しているはずである。すなわち、 $|\psi\rangle$ は \hat{A}_i だけでなく \hat{A}_j の固有 vector にもなっている。 λ_i に m 重縮退がある場合でも、固有空間の基底 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_m\rangle$ を適切に取るによりやはり全ての $|\psi_k\rangle$ が \hat{A}_j の固有 vector にもなるよう出来る事が示される (ただし、 k ごとに \hat{A}_j の固有値は異なっていよう)。

このように互いに可換な operator のうち一方の固有 vector が同時に他方の固有 vector となるように出来、そのような vector を同時 (simultaneous) 固有 vector という。

2.1.7 観測値と Operator の関係、状態 vector の命名規則、物理的状态空間

ここまで抽象的な状態 vector と実際に観測される物理量との関係については一切説明していない。ここで初めてそれらの関係を与えよう。量子力学的な物理系の状態が vector $|\psi\rangle$ で表されているとき、物理量 \hat{A} の

期待値は

$$\langle A \rangle := \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.1.29)$$

と表される。 \hat{A} の spectral decomposition を連続 spectrum と点 spectrum に分け、対応する spectrum の固有空間への projection operator \hat{P} を用いて

$$\hat{A} = \sum_n \hat{P}_n a_n + \int d\hat{P}(a) a \quad (2.1.30)$$

のように書くと、identity operator との関係（これを完全性関係という）

$$1 = \sum_n \hat{P}_n + \int d\hat{P}(a) \quad (2.1.31)$$

を用いて

$$|\psi\rangle = \sum_n \hat{P}_n |\psi\rangle + \int d\hat{P}(a) |\psi\rangle \quad (2.1.32)$$

が成り立つ。実際に観測される結果は演算子 \hat{A} の固有値のいずれかであり、全く同一の状態 vector $|\psi\rangle$ で表される物理系を十分多く用意したときの観測値は

1. 点 spectrum a_n が確率 $\frac{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$
2. 連続 spectrum a が確率密度 $\frac{\langle \psi | d\hat{P}(a) | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$

で与えられるのである。

これらの規則を見ると、状態 vector $|\psi\rangle$ を定数（たとえば $a \in \mathbb{C}$ ）倍だけ再定義 $|\psi\rangle \mapsto a |\psi\rangle$ しても norm が伴って $\langle \psi | \psi \rangle \mapsto |a|^2 \langle \psi | \psi \rangle$ と変化するため、物理法則が予言する個々の観測量の期待値や確率は一切変化しない事に気付くであろう。実際 vector の norm は物理的情報を持っておらず、従って vector $|\psi\rangle$ と $a |\psi\rangle$ は物理的に区別されるべき異なる状態ではない。よって常に $a = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}}$ による再定義で $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ としておくのが便利である。このような vector の再定義を規格化（normalization）と言い、以下では状態 vector は規格化されているものとする。状態 vector を規格化してもなお、 $a = e^{i\theta}, \theta \in \mathbb{R}$ のような場合は $|\psi\rangle$ と $e^{i\theta} |\psi\rangle$ は独立な状態を表さない。このような overall の位相も物理的情報を持たない（もちろん複数の vector の相対的な位相は意味を持つが）ため、物理的状态は単に Hilbert 空間の元ではなく、それらを規格化し、更に位相だけの違いは同一視した射線（ray）と呼ばれる object により表される。

物理的に区別できない vector について上のように述べたが、更に我々は任意の operator について同じ固有値を持つ vector はどのような物理量ないし実験によっても区別できないため同じ状態と見做す。量子力学の黎明期には「実は我々が気付いていないだけで、これらの状態は物理的に異なりうるのだ」とする hidden variable theory に基づき Einstein-Podolsky-Rosen(EPR) paradox などが提案された事もあるが、Aspect（アラン・アスペ）の実験などで Bell inequality の破れが実証されたことにより hidden variable theory は今では明確に否定されている。

物理的に明確に区別できる（つまりある Hermitian operator について異なる固有値を持つ）状態を表す状態 vector は互いに直交する事を (2.1.27) で示した。一般にある量子系において、線形独立な Hermitian operator のうち可換に取れるものの maximal な個数が n であるとき、そのような operator $\hat{O}_1, \hat{O}_2, \dots, \hat{O}_n$ の同時固有 vector は（どの operator について議論しているのか明らかな場合には）対応する固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ を用いて $|\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\rangle$ と名付けるのが普通であり、この vector に対応する ray が（互いに独立な）物理的状态を表すのである。連続 spectrum に対しては前述の通り固有 vector は存在しないが、後述のように (2.1.34) にて類似の記法の正当化を与える。

改めて ray の集合を物理的状態空間あるいは単に状態空間 (state space) と呼ぶことにしよう。ある物理的状態とそれを表す ray または状態 vector も区別せず、これら全てを単に状態と呼ぶことにする。以下で規格化などによる同一視を行わない Hilbert 空間を直接扱うことはなく、そのため議論に vector の norm が関わることもないので、以前の用語との混乱は生じない。

2.1.8 Dirac の Bracket 記法と連続固有状態の規格化

これまでは $|\psi\rangle$ のような記号を単に状態 vector を表すものと扱っていたが、Dirac はこれを更に便利にする記法を導入した。 \hat{A} の固有値 a_n に対する固有 vector を $|a_n\rangle$ と略記し、固有空間に m 重縮退がある場合には適当な正規直交基底 $|a_n, i\rangle$ ($i = 1, \dots, m$) を取る。ここで、対応する固有空間への projection operator を

$$\hat{P}_n =: \sum_{i=1}^m |a_n, i\rangle \langle a_n, i| \quad (2.1.33)$$

$$d\hat{P}(a) =: da |a\rangle \langle a| \quad (2.1.34)$$

のように書くというのである。前述の通り数学的には連続 spectrum に対して固有 vector は存在しないが、上は単に spectral decomposition の略記法だと思えばよい。点 spectrum と連続 spectrum とを形式的に区別せずに書けるため、物理学者には非常に重宝がられている記法である。

この記法を用いると、ある点 spectrum a_n または連続 spectrum a が観測される確率または確率密度は

$$\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | a_n, i \rangle \langle a_n, i | \psi \rangle = \sum_i \left| \langle a_n, i | \psi \rangle \right|^2 \quad (2.1.35a)$$

$$\langle \psi | d\hat{P} | \psi \rangle = da \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle = da \left| \langle a | \psi \rangle \right|^2 \quad (2.1.35b)$$

と書ける。連続に分布する実数の中からある一つの値を選び出す確率は常に 0 であることに注意しよう。従って連続 spectrum の中からちょうど実数 a だけが観測される確率も 0 であり、(2.1.35b) における da は区間 $(a, a + da)$ に含まれるいずれかの実数が観測される確率、の意で解釈すべきである。

$\langle a_n | \psi \rangle, \langle a | \psi \rangle$ の様な量を確率振幅 (probability amplitude) と呼ぶ。一般にある operator \hat{A} の固有状態 $|a\rangle$ は対応する固有値 a を確率 1 で与えるが、例えば \hat{A} が Hamiltonian operator \hat{H} と交換しない場合や、交換する Hamiltonian に対してであっても摂動が加わった場合などは、対応する固有値 a が得られる確率は時間発展と共に 1 から変化していく。これは $|a\rangle$ を初期条件とする Schrödinger 方程式 (2.1.5) の解 $|\psi_a(t)\rangle$ が再び \hat{A} の固有値 a に属する固有状態になるとは限らないからで、この場合は時刻 t に固有値 a' が観測される確率は $\left| \langle a' | \psi_a(t) \rangle \right|^2$ で与えられる。これは物理的には a に属する固有状態 $|a\rangle$ が時間発展によって別の固有値 a' に属する固有状態 $|a'\rangle$ に遷移する確率 (遷移確率、transition probability) と解釈することが出来、従ってこの文脈では $\langle a' | \psi_a(t) \rangle$ を遷移振幅 (transition amplitude) と呼ぶ。

なお、連続 spectrum に属する固有状態は一般に norm が有限でないが、この場合は異なる固有値 x, y に属する固有状態 $|x\rangle, |y\rangle$ の内積が

$$\langle x | y \rangle = \delta(x - y) \quad (2.1.36)$$

である事を指して規格化されていると言うことにする。ただし、ここに現れた Dirac delta 関数はもちろん (2.1.34) に現れる spectral measure のもとで積分して 1 を与えるようなものである。

2.1.9 Hermitian operator と完全性

内積空間において、規格化された vector $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots$ が互いに直交する

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.1.37)$$

場合、その集合を正規直交系 (orthonormal system) という。vector が必ずしも規格化されていない場合は単に直交系 (normal system) という。ある Hilbert 空間 \mathcal{H} の互いに線形独立な元による正規直交系 $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots$

を取る。任意の vector $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ が

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |e_n\rangle \quad (2.1.38)$$

のように一意的に展開できる場合、 $|e_n\rangle$ の集合を \mathcal{H} の正規直交完全系 (CONS、orthonormal complete set) または正規直交基底という。正規直交性から

$$c_n = \sum_m c_m \delta_{nm} = \sum_m c_m \langle e_n | e_m \rangle = \langle e_n | \sum_m c_m |e_m\rangle = \langle e_n | \psi \rangle \quad (2.1.39)$$

が従うため、上の式は

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \psi \rangle \quad \text{for } \forall |\psi\rangle \\ \therefore 1 &= \sum_n |e_n\rangle \langle e_n| \end{aligned} \quad (2.1.40)$$

と書いても同じことである。ここで 1 は identity operator を意味する。等式は norm に関する収束

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| |\psi\rangle - |\psi_N\rangle \right\|^2 = 0 \quad (2.1.41a)$$

$$|\psi_N\rangle := \sum_{n=1}^N |e_n\rangle \langle e_n | \psi \rangle \quad (2.1.41b)$$

を意味している。完全系は vector space の基底の概念によく似ているが、基底には必要ない内積という付加的な構造を定義に用いており、特に vector space の基底は n について有限和しか許さないのに対し、完全系は n についての無限和も許している点で相違している。

ある operator \hat{O} の trace は、正規直交完全系 $|e_n\rangle$ を用い

$$\text{tr } \hat{O} := \sum_n \langle e_n | \hat{O} | e_n \rangle \quad (2.1.42)$$

で定義される。適当な条件の下で、この量は正規直交完全系の選び方によらない。また、同様の条件の下で trace の巡回性 (cyclicity)

$$\text{tr } (\hat{A}\hat{B}) = \text{tr } (\hat{B}\hat{A}) \quad (2.1.43)$$

が成り立つ。

適当な Hermitian operator $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ が与えられたとき、その全ての固有 vector $|\lambda_n\rangle$ の集合が完全系をなす事を仮定する。これは、適当な状態 $|\psi\rangle$ のもとで物理量 \hat{O} を観測した際には、必ず固有値 λ_n のいずれかが観測される必要があるためである。ただしここで言う完全系は \hat{O} の連続固有状態まで含めて

$$1 = \sum_{\forall n, i=1}^m |a_n, i\rangle \langle a_n, i| + \int da |a\rangle \langle a| \quad (2.1.44)$$

と書き、上で述べた identity の spectral decomposition (2.1.31) の意味で解釈する。

このような記法のもとでは、状態 $|\psi\rangle$ のもとである固有値 a_n または a が観測される確率は

1. 点 spectrum a_n 対し確率

$$\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = \sum_{1 \leq i \leq m} \langle \psi | a_n, i \rangle \langle a_n, i | \psi \rangle = \sum_{1 \leq i \leq m} \left| \langle a_n, i | \psi \rangle \right|^2 \quad (2.1.45)$$

2. 連続 spectrum a に関しては確率密度

$$\langle \psi | d\hat{P}(a) | \psi \rangle = da \langle \psi | a \rangle \langle a | \psi \rangle = da \left| \langle a | \psi \rangle \right|^2 \quad (2.1.46)$$

のように内積を使って自然に与えられることになる。

2.1.10 生成消滅演算子、Hilbert 空間の無次元性

さて、ここまで operator がどのような Hilbert 空間 \mathcal{H} に作用しているか意図的に考えてこなかった。 n 自由度系で正準交換関係

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.1.47)$$

が \mathcal{H} 上に実現されているとし、生成消滅演算子 (creation and annihilation operator、頼むから annihilation はアニヒレーションではなくアナイレーションと発音して欲しい。昇降演算子 (raising and lowering operator)、はしご演算子 (ladder operator) などとも言う) を

$$\hat{a}_i := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{q}_i + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}_i \right) \quad (2.1.48a)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{q}_i - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}_i \right) \quad (2.1.48b)$$

で定義しよう。これは単に $\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}$ から $\{\hat{a}\}, \{\hat{a}^\dagger\}$ への線形変換を与え、逆変換は

$$\hat{q}_i = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) \quad (2.1.49a)$$

$$\hat{p}_i = \frac{1}{2i} \sqrt{2\hbar m\omega} (\hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger) \quad (2.1.49b)$$

で与えられる。正準交換関係もちろん $\{\hat{a}\}, \{\hat{a}^\dagger\}$ で書き直すことが出来、

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (2.1.50)$$

が得られる。 \mathcal{H} が有限次元だとすると、(2.1.50) の両辺の trace を取ること

$$\delta_{ij} \dim \mathcal{H} = \delta_{ij} \text{tr}(1) = \text{tr}([\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]) = \text{tr}(\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger) - \text{tr}(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) = \text{tr}(\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger) - \text{tr}(\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger) = 0 \quad (2.1.51)$$

と矛盾が導かれるため、正準交換関係が成り立つ限り \mathcal{H} は無限次元でなければならない。実は複素数列 $a_n (n = 0, 1, \dots)$ であって $\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2$ が収束するようなものの集合を l^2 と書くと、可分な (つまり加算個の正規直交基底で張れる) 無限次元 Hilbert 空間は「1 つしかない」こと、すなわちそれらは全て l^2 に同型であることが知られている。

この他に、同種粒子を 2 つ以上含む多粒子系では統計性と呼ばれるものを気にする必要があるが、当面の間は同種粒子を含まない系のみを扱うことにする。例えば次節で扱う n 次元調和振動子も、 d 次元空間に n/d 個の (互いに種類の異なる) 粒子が存在する系、あるいは n 次元空間内に粒子が 1 つだけ存在する系と解釈されたい。また、考えている粒子が持つ spin 自由度を考える必要もあるが、これを理解するためには先に 2.3.1 節で角運動量の代数を学ぶ必要があるだろう。

2.1.11 調和振動子の例、Fock space

n 次元調和振動子を正準量子化してみよう。 $\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}$ は可換測な物理量なので Hermitian であることを仮定しており、

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^n \left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{q}_k^2 \right) \quad (2.1.52)$$

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.1.53)$$

から \hat{H} の Hermiticity も自然に従う。公式 (B.1.3) を使って

$$[\hat{q}_i, \hat{H}] = i\hbar \frac{\hat{p}_i}{m} \quad (2.1.54a)$$

$$[\hat{p}_j, \hat{H}] = -i\hbar m\omega^2 \hat{q}_j \quad (2.1.54b)$$

が得られる。これらが調和振動子の正準方程式 (1.5.9) に非常によく類似している事に注意しよう（より詳しくは (B.3.7) を参照）。

このままでは議論を進めるのが難しいが、必ずしも Hermitian ではない無次元量 $\{\hat{a}\}, \{\hat{a}^\dagger\}$ への変数変換を考えることで見通しが良くなる。元の変数 $\{q\}, \{p\}$ は容易に消去出来て

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \sum_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \right) = \hbar\omega \sum_k \left(\hat{N}_k + \frac{1}{2} \right) \quad (2.1.55a)$$

$$\hat{N}_k := \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (2.1.55b)$$

が得られる。ただし、 k 番目の自由度の number operator \hat{N}_k を定義した（3 章で扱う場の量子論の用語を流用して単に数演算子と呼ばれる事も多いが、今の場合は粒子数ではなく energy 励起数を表す事に注意。空間 3 次元の n 粒子系を記述するためには正準変数が $6n$ 個必要だったので、粒子数が増減するためには正準変数の個数が変化する必要があるが、この生成消滅演算子でそれは起こらない）。

生成消滅演算子の交換関係 (2.1.50) に気を付けると、変数変換後の operator が

$$[\hat{N}_k, \hat{a}_i] = -\hat{a}_i \delta_{ik} \quad (2.1.56a)$$

$$[\hat{N}_k, \hat{a}_j^\dagger] = +\hat{a}_j^\dagger \delta_{jk} \quad (2.1.56b)$$

なる交換関係を為すことが分かる。適当な energy 固有状態 $|\psi\rangle \neq 0$

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (2.1.57)$$

が存在するとき、状態 $\hat{a}_i |\psi\rangle$ に \hat{H} を作用させると

$$\begin{aligned} \hat{H} \left(\hat{a}_i |\psi\rangle \right) &= \left(\hat{a}_i \hat{H} + [\hat{H}, \hat{a}_i] \right) |\psi\rangle \\ &= (\hat{a}_i E - \hbar\omega \hat{a}_i) |\psi\rangle \\ &= (E - \hbar\omega) \hat{a}_i |\psi\rangle \end{aligned} \quad (2.1.58)$$

が得られ、状態 $\hat{a}_i |\psi\rangle$ は（もし 0 でないならば）energy $E - \hbar\omega$ に属する energy 固有 vector（ただし規格化されているとは限らない）であることが分かる。全く同様に

$$\hat{H} \left(\hat{a}_i^\dagger |\psi\rangle \right) = (E + \hbar\omega) \hat{a}_i^\dagger |\psi\rangle \quad (2.1.59)$$

であり、 $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ は i 番目の自由度の energy level を energy 量子 $\hbar\omega$ 分だけ上下することが分かる。これが生成消滅の名の所以である。

興味深いのは、 \hat{H} が正定値な Hilbert 空間に作用しているという仮定のみから、Hilbert 空間にどのような energy 固有状態が存在する（あるいはし得る）かの情報が得られるということである。 \hat{N}_i 同士は互いに可換なので、その同時固有状態 $|N_1, N_2, \dots, N_n\rangle$ を用意できる。これは明らかに $\hat{H} = \hbar\omega \sum_k \left(\hat{N}_k + \frac{1}{2} \right)$ の固有状態であり、 $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ が \hat{N}_i のみの固有値を 1 だけ上下する事も上の議論から明らかであろう。この状態 $|N_1, N_2, \dots, N_n\rangle$ によって \hat{N}_i の期待値を取ると

$$\begin{aligned} N_i &= \langle N_1, N_2, \dots, N_n | N_i | N_1, N_2, \dots, N_n \rangle \\ &= \langle N_1, N_2, \dots, N_n | \hat{N}_i | N_1, N_2, \dots, N_n \rangle \\ &= \langle N_1, N_2, \dots, N_n | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | N_1, N_2, \dots, N_n \rangle \\ &= \left\| \hat{a}_i | N_1, N_2, \dots, N_n \rangle \right\|^2 \geq 0 \end{aligned} \quad (2.1.60)$$

が導かれる。最後の不等式は単に内積の正定値性から要求されるのだが、もちろん $N_i < 0$ の固有値は不等式に矛盾するため存在できない。 $N_i = 0$ のときには内積の正定値性から真空条件：

$$\hat{a}_i | N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n \rangle = 0 \quad (2.1.61)$$

が成り立つことにもすぐに気付けるであろう。それ以外の固有値 $N_i > 0$ に属する状態に \hat{a}_i を掛けて得られる vector は norm が非 0 となるため、正定値性はこの vector が 0 vector にはなり得ない事 $\hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i > 0, \dots, N_n\rangle \neq 0$ も保証する。また、 $0 < N_i < 1$ が存在するとすると \hat{a}_i によって \hat{N}_i の固有値を下げたとき

$$\langle N_1, N_2, \dots, N_n | \hat{a}_i^\dagger \hat{N}_i \hat{a}_i | N_1, N_2, \dots, N_n \rangle \propto N_i - 1 < 0 \quad (2.1.62)$$

となり、(比例係数は単に vector $\hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_n\rangle$ の規格化から出る正の定数であるため) 正定値性から導かれる不等式に矛盾してしまう。同様に適当な $p \in \mathbb{N}_+$ に対し $p < N_i < p + 1$ が存在するときも \hat{a}_i を $p + 1$ 回以上作用させれば正定値性の不等式に矛盾する結果が得られるので、 \hat{N}_i の任意の固有値は (存在するならば) 非負整数であること、 $N_i = 0$ の状態に対しては真空条件からそれ以下の固有値と固有状態を作れないことが分かる。すなわち $\forall i$ について $N_i \in \mathbb{N}_{\geq 0}$ であり、energy 固有値はこれらを用い

$$E = \hbar\omega \left(\sum_{k=1}^n N_k + \frac{n}{2} \right) \quad (2.1.63)$$

と表されることが内積の正定値性のみから導かれたのである。なお $N = \sum_k N_k$ とおくと真空は $N = 0$ に対応し、下から $N + 1$ 番目の energy 準位 $E = \hbar\omega \left(N + \frac{n}{2} \right)$ の縮退度 $\deg(N)$ は上式を満たす非負整数 (N_1, N_2, \dots, N_n) の組の数、つまり

$$\deg(N) = {}_{N+n-1}C_N = \frac{(N+n-1)!}{N!(n-1)!} \quad (2.1.64)$$

である。^{*5}

さて、 \hat{N}_i の固有値は (存在するならば) 非負整数であり、これらの同時固有状態が Hamiltonian \hat{H} の固有状態を与える事は分かった。上の議論から得られるもう一つの非自明な条件である真空条件 (2.1.61) を用いて、今度はその固有状態を具体的に構成してみよう。既に説明したように物理的状态は線形独立で可換な Hermitian operator を maximal な個数だけ取ってきたとき、それらの同時固有状態として区別される。 n 次元調和振動子の例では n 個の number operator \hat{N}_i がその可換な組を与えるから、適当な同時固有状態 $|N_1, N_2, \dots, N_n\rangle$ が少なくとも 1 つ存在することは仮定する。これが存在すれば、昇降演算子によって任意の非負整数固有値 $N_i \pm n_i$ に属する固有状態

$$|N_1, N_2, \dots, N_i + n_i, \dots, N_n\rangle \propto \left(\hat{a}_i^\dagger \right)^{n_i} |N_1, N_2, \dots, N_n\rangle \quad (2.1.65a)$$

$$|N_1, N_2, \dots, N_i - n_i, \dots, N_n\rangle \propto \left(\hat{a}_i \right)^{n_i} |N_1, N_2, \dots, N_n\rangle \quad (2.1.65b)$$

が構成できる事は明らかであろう ($N_i - n_i > 0$ である限りこれらの vector が zero-vector 0 とならないことは既に説明した)。この規格化定数を、最低固有値 $N_i = 0$ に属する状態について

$$\hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n\rangle = 0 \quad (2.1.66)$$

$$\langle N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n | N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n \rangle = 1 \quad (2.1.67)$$

が成り立つという条件から計算してみよう。

一般の状態を規格化定数 A_{n_i} を用いて

$$|N_1, N_2, \dots, N_i = n_i, \dots, N_n\rangle = A_{n_i} \left(\hat{a}_i^\dagger \right)^{n_i} |N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n\rangle \quad (2.1.68)$$

と書くと、 $n_i = 1$ の場合には規格化条件

$$1 = \langle N_1, N_2, \dots, N_i = 1, \dots, N_n | N_1, N_2, \dots, N_i = 1, \dots, N_n \rangle$$

^{*5} 高校数学で習うように、非負整数 N を n 個の非負整数の組 $\{N_i\}$ に分割する方法の数は、 N 個の区別できないもの (例えば石) を $n - 1$ 個の区別できない仕切り (例えば棒) で区切る場合にありうる並べ方の数と同じである。

$$\begin{aligned}
&= |A_1|^2 \langle N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n | \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger | N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n \rangle \\
&= |A_1|^2 \langle N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n | \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + [\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] \right) | N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n \rangle \\
&= |A_1|^2 \langle N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n | \left(\hat{N}_i + 1 \right) | N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n \rangle \\
&= |A_1|^2 \left(N_i \Big|_{N_i=0} + 1 \right)
\end{aligned} \tag{2.1.69}$$

を課すことで $|A_1|^2 = 1$ が求まる。一般の n_i の場合も全く同じ議論を繰り返すことで

$$\begin{aligned}
1 &= \langle N_1, N_2, \dots, N_i = n_i + 1, \dots, N_n | N_1, N_2, \dots, N_i = n_i + 1, \dots, N_n \rangle \\
&= \frac{|A_{n_i+1}|^2}{|A_{n_i}|^2} \langle N_1, N_2, \dots, N_i = n_i, \dots, N_n | \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger | N_1, N_2, \dots, N_i = n_i, \dots, N_n \rangle \\
&= \frac{|A_{n_i+1}|^2}{|A_{n_i}|^2} \left(N_i \Big|_{N_i=n_i} + 1 \right) \\
\therefore |A_{n_i+1}|^2 &= \frac{1}{n_i + 1} |A_{n_i}|^2
\end{aligned} \tag{2.1.70}$$

なる漸化式が得られ、その解は $|A_{n_i}|^2 = \frac{1}{n_i!}$ と求まる。状態 vector の overall の位相は情報を持たないのであったから $A_{n_i} \in \mathbb{R}_{>0}$ と取っても一般性を失わず、一般の規格化された状態 vector がただ一つの真空 vector

$$|0\rangle := |N_1 = 0, N_2 = 0, \dots, N_i = 0, \dots, N_n = 0\rangle \tag{2.1.71}$$

を用いて

$$\begin{aligned}
|N_1, N_2, \dots, N_i = n_i, \dots, N_n\rangle &= \frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |N_1, N_2, \dots, N_i = 0, \dots, N_n\rangle \\
\therefore |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_n\rangle &= \prod_{i=1}^n \left(\frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{N_i}}{\sqrt{N_i!}} \right) |0\rangle
\end{aligned} \tag{2.1.72}$$

と求まるのである。なお、このような真空とそこからの励起で書かれる vector を Fock 基底と言い、Fock 基底が張る vector space を Fock space と呼ぶ。また、任意の Hermitian operator の固有状態は完全系を為すのであったから、 n 次元量子調和振動子を実現する無限次元複素 Hilbert 空間は確かに加算個の基底を持ち、可分であることが確かめられた。

なお、公式 (2.1.75) を使うと生成消滅演算子の Fock 基底に対する作用が規格化も含め

$$\hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i = n_i, \dots, N_n\rangle = \sqrt{n_i + 1} |N_1, N_2, \dots, N_i = n_i + 1, \dots, N_n\rangle \tag{2.1.73a}$$

$$\hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i = n_i, \dots, N_n\rangle = \sqrt{n_i} |N_1, N_2, \dots, N_i = n_i - 1, \dots, N_n\rangle \tag{2.1.73b}$$

のような漸化式を与えると分かる。

2.1.12 Coherent state

量子力学では全ての observable は Hermitian operator であったので、基本的にはその固有状態に興味があった。時には non-Hermitian operator の固有状態も興味深い性質を持つので、1 自由度の調和振動子系で \hat{a}^\dagger, \hat{a} の固有状態を例に取りその性質を調べてみよう。 n 自由度系への拡張は上の議論から容易である。

調和振動子の coherent 状態を

$$|\alpha\rangle := \frac{1}{A} \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) |0\rangle \tag{2.1.74}$$

で定義する。 A は規格化定数で、後で定める。 \hat{a}^\dagger, \hat{a} の交換関係 (2.1.50) から (B.3.3) を導くのと全く同じ議論を繰り返せて

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

$$\begin{aligned}
C_{n+1} &:= [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^{n+1}] \\
&= \hat{a}^\dagger [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] (\hat{a}^\dagger)^n \\
&= \hat{a}^\dagger C_n + (\hat{a}^\dagger)^n \\
\therefore [\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^{n+1}] &= C_{n+1} = (n+1) (\hat{a}^\dagger)^n
\end{aligned} \tag{2.1.75}$$

が成り立つので、 $\exp(\alpha \hat{a}^\dagger) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!}$ との間には

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \exp(\alpha \hat{a}^\dagger)] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} n (\hat{a}^\dagger)^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{(n-1)!} (\hat{a}^\dagger)^{n-1} \\
&= \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n = \alpha \exp(\alpha \hat{a}^\dagger)
\end{aligned} \tag{2.1.76}$$

なる交換関係が成り立つ。真空条件を用いると coherent state は

$$\begin{aligned}
\hat{a} |\alpha\rangle &= \frac{1}{A} \left(\exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \hat{a} + [\hat{a}, \exp(\alpha \hat{a}^\dagger)] \right) |0\rangle \\
&= \frac{1}{A} \alpha \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) |0\rangle \\
&= \alpha |\alpha\rangle
\end{aligned} \tag{2.1.77}$$

を満たし、 \hat{a} の固有値 α に属する固有状態であることが分かる。 \hat{a} が non-Hermitian であることに対応して、 α は実数ではなく任意の複素数でよい事に注意しよう。

規格化定数は

$$\begin{aligned}
1 = \langle \alpha | \alpha \rangle &= \frac{1}{A^*} \langle 0 | \exp(\alpha^* \hat{a}) | \alpha \rangle = \frac{1}{A^*} \langle 0 | \exp(\alpha^* \alpha) | \alpha \rangle \\
&= \frac{\exp(|\alpha|^2)}{|A|^2} \langle 0 | \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) | 0 \rangle \\
&= \frac{\exp(|\alpha|^2)}{|A|^2}
\end{aligned} \tag{2.1.78}$$

最後の等式では、真空条件 $\langle 0 | \hat{a}^\dagger = 0$ および真空が規格化されていること $\langle 0 | 0 \rangle = 1$ を用いた。規格化定数が正の実数 $A = \exp\left(\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)$ になるよう位相を選んで一般性を失わないので、規格化された coherent state は

$$\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) |0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n \geq 0} \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \sum_{n \geq 0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle
\end{aligned} \tag{2.1.79}$$

と書けることが分かる。

2.1.13 Displacement operator

上で定義した coherent state は、displacement operator $D(\alpha)$ を

$$D(\alpha) := \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}) \tag{2.1.80}$$

で定義するとより系統的に扱うことが出来る。 $[\hat{a}, \hat{a}] = 0$ であるので、交換関係 (2.1.76) を証明したのと全く同じ方法で

$$[\hat{a}, (\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})^{n+1}] = \alpha(n+1) (\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})^n$$

$$\therefore [\hat{a}, D(\alpha)] = \alpha D(\alpha) \quad (2.1.81)$$

が証明でき、状態 $D(\alpha)|0\rangle$ もまた \hat{a} の固有値 α に属する固有状態

$$\hat{a}D(\alpha)|0\rangle = \alpha D(\alpha)|0\rangle \quad (2.1.82)$$

であることが分かる。

この displacement operator は unitary である

$$\begin{aligned} D(\alpha)^\dagger D(\alpha) &= \exp(\alpha^* \hat{a} - \alpha \hat{a}^\dagger) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}) \\ &= \exp\left(-(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (2.1.83)$$

ため状態 $D(\alpha)|0\rangle$ は規格化されており、実際に $[\alpha \hat{a}^\dagger, -\alpha^* \hat{a}] = |\alpha|^2$ から BCH formula の特別な場合 (B.1.10) が使えて

$$\begin{aligned} D(\alpha) &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) \exp(-\alpha^* \hat{a}) \\ |\alpha\rangle &= D(\alpha)|0\rangle \end{aligned} \quad (2.1.84)$$

であることが証明できる。ただし最後の等式は真空条件 $\hat{a}|0\rangle = 0$ から従う。

2.2 経路積分量子化

2.2.1 波動関数と operator の \mathbf{x} -表示

ここまで状態 vector と operator だけで一切の議論を展開してきた。しかし、古典論で最も基本的な量であった粒子の位置 \mathbf{x} を中心的に扱って量子力学を展開したいという向きもあるだろう。そこで、ある状態 $|\psi\rangle$ が与えられたとき波動関数 (wave function) と呼ばれる量を

$$\psi(\mathbf{x}) := \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \quad (2.2.1)$$

で定義する。ここでももちろん $|\mathbf{x}\rangle$ は位置 operator \hat{q}_i (D を空間次元として、 $i = 1, \dots, D$) の固有値 x_i に属する同時固有状態である。 n 粒子系を考える場合も、異なる粒子の位置 operator は交換するためこれらの同時固有状態を取ることが出来、上の定義は

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) := \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n | \psi \rangle \quad (2.2.2)$$

と容易に拡張される。任意の \mathbf{x}_i について波動関数を求めることが出来れば、完全性関係 (2.1.31) を使うことにより

$$|\psi\rangle = \int \prod_{i=1}^n (d^D x_i) |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\rangle \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n | \psi \rangle = \int \prod_{i=1}^n (d^D x_i) |\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\rangle \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \quad (2.2.3)$$

と元の状態 vector が復元できるため、波動関数を位置 \mathbf{x}_i の関数として求めることは状態 vector を求めることと同じである。以下では状態 vector と対応する状態の波動関数を特に区別しない。

波動関数の物理的意味は、連続固有値を持つ operator \mathbf{q} の固有値 \mathbf{x} が観測される確率密度が (2.1.35b) で与えられていた事から明らかだろう。すなわち、粒子が位置 \mathbf{x} まわりの微小体積 $d^D x$ で観測される確率密度は

$$d^D x \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (2.2.4)$$

で与えられ、波動関数 $\psi(\mathbf{x})$ はその確率振幅である。

波動関数への operator の作用を考えよう。vector $\hat{q}_i |\psi\rangle$ の波動関数は、 \hat{q}_i の Hermiticity に気を付けると

$$\langle \mathbf{x} | \hat{q}_i | \psi \rangle = \langle \mathbf{x} | x_i | \psi \rangle = x_i \psi(\mathbf{x}) \quad (2.2.5)$$

と求まる。 $\hat{p}_i |\psi\rangle$ の波動関数を求めるには、連続 spectrum に対応する状態が (2.1.36) と規格化されていた事を思い出して

$$\begin{aligned}
(x_i - y_i) \langle \mathbf{x} | \hat{p}_i | \mathbf{y} \rangle &= \langle \mathbf{x} | x_i \hat{p}_i | \mathbf{y} \rangle - \langle \mathbf{x} | \hat{p}_i y_i | \mathbf{y} \rangle \quad (i \text{ について和は取らない}) \\
&= \langle \mathbf{x} | [\hat{q}_i, \hat{p}_i] | \mathbf{y} \rangle = i\hbar \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = i\hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\
&= i\hbar \int \frac{d^D k}{(2\pi\hbar)^D} e^{\frac{1}{i\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \quad (\cdot: \text{Dirac delta の Fourier 表示 (A.4.6)}) \\
&= -i\hbar \int \frac{d^D k}{(2\pi\hbar)^D} \frac{x_i - y_i}{i\hbar} e^{\frac{1}{i\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} k_i \quad (\cdot: \text{部分積分, } i \text{ について和は取らない}) \\
&= -(x_i - y_i) \int \frac{d^D k}{(2\pi\hbar)^D} e^{\frac{1}{i\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} k_i \tag{2.2.6}
\end{aligned}$$

に気付けばよい。従って

$$\langle \mathbf{x} | \hat{p}_i | \mathbf{y} \rangle = - \int \frac{d^D k}{(2\pi\hbar)^D} e^{\frac{1}{i\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} k_i \tag{2.2.7}$$

である。^{*6} 従って一般の状態への \hat{p}_j の作用は

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \psi \rangle &= \int d^D y \langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | \psi \rangle \\
&= - \int d^D y \int \frac{d^D k}{(2\pi\hbar)^D} e^{\frac{1}{i\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} k_j \psi(\mathbf{y}) \\
&= + \int d^D y \int \frac{d^D k}{(2\pi\hbar)^D} i\hbar \frac{\partial}{\partial y_j} e^{\frac{1}{i\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \psi(\mathbf{y}) \\
&= -i\hbar \int d^D y \frac{\partial}{\partial y_j} \psi(\mathbf{y}) \int \frac{d^D k}{(2\pi\hbar)^D} e^{\frac{1}{i\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \quad (\cdot: \text{部分積分}) \\
&= -i\hbar \int d^D y \frac{\partial}{\partial y_j} \psi(\mathbf{y}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\mathbf{x}) \tag{2.2.9}
\end{aligned}$$

と与えられる。上の証明は任意の vector $|\psi\rangle$ について成り立つので、例えば $|\psi\rangle = \hat{q}|\phi\rangle$ に \hat{p} を作用させた結果なども全く同じ式で与えられる。結局一般の operator も

$$\hat{q}_i \mapsto x_i \tag{2.2.10a}$$

$$\hat{p}_j \mapsto -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \tag{2.2.10b}$$

$$f(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{p}}) \mapsto f(\mathbf{x}, -i\hbar \nabla) \tag{2.2.10c}$$

のように置き換えればよいことが分かり、このような表式を operator の位置表示、または \mathbf{x} -表示という。

例として運動量の固有状態を \mathbf{x} -表示で求めると

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{x} | \hat{p}_i | \mathbf{p} \rangle = p_i \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$$

^{*6} $x_i - y_i$ による除算が定義されているのは最初と最後の表式だけで、途中の式変形についてはこれは定義されていない事に注意しよう。例えば、Dirac delta の性質 $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$ を使うと $\frac{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{x_i - y_i} = \infty$ となって等式が意味を持たなくなってしまう。

また、左辺で \hat{p}_i を \hat{p}_j に置き換えると

$$(x_i - y_i) \langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \mathbf{y} \rangle = -(x_i - y_i) \delta_{ij} \int \frac{d^D k}{(2\pi\hbar)^D} e^{\frac{1}{i\hbar} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} k_j \tag{2.2.8}$$

が得られ (Kronecker delta が掛かっているので右辺の i と j は勝手に入れ替えてよい)、両辺を $x_i - y_i$ で割ると右辺は δ_{ij} に比例するが左辺は i に依存しないという矛盾が生じる。これも上と本質的に同じ理由で、本文の式変形ではそもそも i によらず Dirac delta であった右辺を部分積分する際に k_i の i を恣意的に選ぶことによりこの矛盾を誤魔化している。

$$\therefore \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{\exp\left(-\frac{1}{i\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right)}{(2\pi\hbar)^{D/2}} \quad (2.2.11)$$

すなわち平面波となる。ただし規格化定数は規格化条件

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \int d^D x \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle \quad (2.2.12)$$

を満たすよう与えた。至る所に現れる \hbar を隠すため波数 (wave number) vector $\mathbf{k} := \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$ を定義すると便利なのが、波数積分 $\int d^D k$ のもとで規格化された固有関数は

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi)^{D/2}} \quad (2.2.13)$$

で与えられる。

また、適当な operator の固有状態 $|n\rangle$ に関する完全性関係 (2.1.31) の \mathbf{x} -表示は、 $|n\rangle$ の波動関数を $\psi_n(\mathbf{x})$ として

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x} | \sum_n |n\rangle \langle n| \mathbf{y} \rangle = \sum_n \psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{y}) \quad (2.2.14)$$

となる。

2.2.2 調和振動子の例

1 次元調和振動子の Hamiltonian の固有関数を求めてみよう。真空条件 (2.1.61) を annihilation operator の定義 (2.1.48a) を使って \mathbf{x} -表示で書き下してみると、

$$0 = a\psi_0(x) \quad (2.2.15a)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[\sqrt{m\omega} x + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right] \quad (2.2.15b)$$

という一階線形微分方程式が得られる。もちろんこれは簡単に解けて、規格化された解は

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (2.2.16a)$$

$$1 = \int dx \psi_0^*(x) \psi_0(x) \quad (2.2.16b)$$

と与えられる。 n 番目の励起状態の (規格化された) 波動関数も、Fock 基底の定義 (2.1.72) から

$$\psi_n(x) = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) \quad (2.2.17a)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left[\sqrt{m\omega} x - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right] \quad (2.2.17b)$$

と容易に求まる。A.3.8 で扱う Hermite 多項式との関係を具体的に求めることもでき、直交性 (A.3.23) から

$$h_n(y) := \frac{1}{\sqrt{n!}(2\pi)^{1/4}} H_n(y) \exp(-y^2/4) \quad (2.2.18)$$

が正規直交関数系となっている事に気付けばただちに

$$\phi_n(x) = \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{1/4} h_n \left(y = \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x \right) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} H_n(y) \exp(-y^2/4) \Big|_{y=\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x} \quad (2.2.19)$$

が得られる。ただし先頭の係数は置換積分から出る $dx = dy \frac{dx}{dy}$ を打ち消して正規直交性が保たれるように導入した。特に、生成消滅演算子

$$a = \frac{1}{2}y + \frac{d}{dy} \quad (2.2.20a)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{2}y - \frac{d}{dy} \quad (2.2.20b)$$

の作用は漸化式 (A.3.22) を使うと

$$ah_n = \sqrt{n} h_{n-1} \quad (2.2.21)$$

$$a^\dagger h_n = \sqrt{n+1} h_{n+1} \quad (2.2.22)$$

すなわち (2.1.73) に帰着することが分かる。

調和振動子の energy spectrum は (2.1.63) で、Schrödinger 方程式の一般解は (2.1.8) で与えられていたの
で、調和振動子の時間依存する energy 固有状態は

$$\exp\left(\frac{tE_n}{i\hbar}\right)\psi_n(x) = \exp\left[\frac{t}{i\hbar}\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\right]\psi_n(x) = \exp\left[-it\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\right]\psi_n(x) \quad (2.2.23)$$

と与えられる。特に、任意の初期条件の下での調和振動子の時間依存解はその線形結合 (2.1.23) で与えられる。

2.2.3 Feynman Kernel

時刻 t_i に位置 \mathbf{x}_i で観測され $|\psi(t_i)\rangle = |\mathbf{x}_i\rangle$ すなわち

$$\psi(t_i, \mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi(t_i) \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (2.2.24)$$

を満たす量子力学的粒子が、時刻 t_f に位置 \mathbf{x}_f で観測され $\phi_f(\mathbf{x}) := \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_f)$ となる遷移振幅を Feynman kernel (ファインマン核) といい、時間発展 operator (2.1.7) を使って

$$K(t_f, \mathbf{x}_f; t_i, \mathbf{x}_i) := \langle \phi_f | \psi(t_f) \rangle = \langle \mathbf{x}_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle \quad (2.2.25)$$

と書ける。一般の始状態 (initial state) $\psi_I(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi_I \rangle$ と終状態 (final state) $\psi_F(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi_F \rangle$ についても、遷移振幅は

$$\begin{aligned} A_{FI}(t) &= \langle \psi_F | \hat{U}(t_i + t; t_i) | \psi_I \rangle \\ &= \langle \psi_F | \int d^D y |\mathbf{y}\rangle \langle \mathbf{y} | \hat{U}(t_i + t; t_i) \int d^D z |\mathbf{z}\rangle \langle \mathbf{z} | \psi_I \rangle \\ &= \int d^D y \int d^D z \psi_F^*(\mathbf{y}) K(t_i + t, \mathbf{y}; t_i, \mathbf{z}) \psi_I(\mathbf{z}) \end{aligned} \quad (2.2.26)$$

と書ける。この意味で、Feynman kernel は積分変換の kernel になっている。

さて、Feynman kernel を具体的に求めれば任意の遷移振幅が積分変換で分かるとなれば、当然これを計算したくなるだろう。定義式から

$$\begin{aligned} K(t, \mathbf{x}; t_i, \mathbf{x}_i) &= \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} | \exp\left(\frac{t - t_i}{i\hbar} \hat{H}(\hat{q}, \hat{p})\right) | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= \exp\left(\frac{t - t_i}{i\hbar} H\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\right) \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= \exp\left(\frac{t - t_i}{i\hbar} H\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \end{aligned} \quad (2.2.27)$$

が分かるが、指数関数から出る $\frac{\partial}{\partial x}$ の無限乗が Dirac delta に掛かるような計算は極力したくない。例えば、もし Hamiltonian の全ての固有値と固有状態が分かっているなら、Hamiltonian の固有状態に関して完全性

関係 (2.2.14) を使って

$$\begin{aligned} K(t, \mathbf{x}; t_i, \mathbf{x}_i) &= \exp\left(\frac{t-t_i}{i\hbar} H\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\right) \sum_n \psi_n(\mathbf{x}) \psi_n^*(\mathbf{x}_i) \\ &= \sum_n \psi_n^*(\mathbf{x}_i) \exp\left(\frac{t-t_i}{i\hbar} E_n\right) \psi_n(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.2.28)$$

などと計算する事も出来る^{*7} であろうが、以下では別の方法を考える。

2.2.4 Hamiltonian Path Integral

粒子の位置観測の間隔を $T := t_f - t_i$ として、時間 $\delta t := \frac{T}{N}$ ごとに完全系 $1 = \int d^D x_i |\mathbf{x}_i\rangle \langle \mathbf{x}_i|$ を挟むこと

$$\begin{aligned} K(t_f, \mathbf{x}_f; t_i, \mathbf{x}_i) &= \langle \mathbf{x}_f | \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \hat{H}\right) | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}_f | \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i+(N-1)\delta t}^{t_f=t_i+N\delta t} dt \hat{H}\right) \int d^D x_{N-1} |\mathbf{x}_{N-1}\rangle \langle \mathbf{x}_{N-1}| \\ &\quad \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i+(N-2)\delta t}^{t_i+(N-1)\delta t} dt \hat{H}\right) \int d^D x_{N-2} |\mathbf{x}_{N-2}\rangle \langle \mathbf{x}_{N-2}| \\ &\quad \cdots \int d^D x_{n+1} |\mathbf{x}_{n+1}\rangle \langle \mathbf{x}_{n+1}| \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i+n\delta t}^{t_i+(n+1)\delta t} dt \hat{H}\right) \int d^D x_n |\mathbf{x}_n\rangle \langle \mathbf{x}_n| \\ &\quad \cdots \int d^D x_2 |\mathbf{x}_2\rangle \langle \mathbf{x}_2| \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i+\delta t}^{t_i+2\delta t} dt \hat{H}\right) \int d^D x_1 |\mathbf{x}_1\rangle \\ &\quad \langle \mathbf{x}_1 | \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i}^{t_i+\delta t} dt \hat{H}\right) | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= \left[\prod_{n=1}^{N-1} \int d^D x_n \right] \left[\prod_{m=0}^{N-1} \langle \mathbf{x}_{m+1} | \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i+m\delta t}^{t_i+(m+1)\delta t} dt \hat{H}\right) | \mathbf{x}_m \rangle \right] \end{aligned} \quad (2.2.30)$$

を考える。ただし $x_0 := x_i$, $x_N := x_f$ とした。ここで、被積分関数に現れる因子 $\langle \mathbf{x}_{m+1} | \exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i+m\delta t}^{t_i+(m+1)\delta t} dt \hat{H}\right) | \mathbf{x}_m \rangle$ は bra-ket で挟まれており、単なる複素数であるから、積の順番を気にする必要はない。

また、 \hat{H} が t に顕わに依存しない場合は

$$\exp\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_i+m\delta t}^{t_i+(m+1)\delta t} dt \hat{H}\right) = \exp\left(\frac{\delta t}{i\hbar} \hat{H}\right) \quad (2.2.31)$$

^{*7} 自由粒子 $H = \frac{p^2}{2m}$ の場合であれば平面波 (2.2.11) がそのまま Hamiltonian の固有状態にもなっているので、単に Fresnel 積分 (A.3.16) を実行すればよくて

$$\begin{aligned} K(t, \mathbf{x}; t_i, \mathbf{x}_i) &= \int d^D p \psi_p^*(\mathbf{x}_i) \exp\left(\frac{t-t_i}{i\hbar} E_p\right) \psi_p(\mathbf{x}) = \int d^D p \frac{\exp\left(+\frac{1}{i\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_i\right)}{(2\pi\hbar)^{D/2}} \exp\left(\frac{t-t_i}{i\hbar} \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\right) \frac{\exp\left(-\frac{1}{i\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right)}{(2\pi\hbar)^{D/2}} \\ &= \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \exp\left(-\frac{i(t-t_i)}{2m\hbar} \mathbf{p}^2 - \frac{1}{i\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\right) \\ &= \int \frac{d^D p}{(2\pi\hbar)^D} \exp\left(-\frac{i(t-t_i)}{2m\hbar} \left[\mathbf{p} - \frac{m}{(t-t_i)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\right]^2 - \frac{m}{2i\hbar(t-t_i)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^2\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \left(\frac{2\pi\hbar m}{i(t-t_i)}\right)^{\frac{D}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar(t-t_i)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^2\right) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_i)}\right)^{\frac{D}{2}} \exp\left(-\frac{m}{2i\hbar(t-t_i)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^2\right) \end{aligned} \quad (2.2.29)$$

と求まる。Schrödinger 方程式の形を考えると当然だが、これは拡散方程式の Green 関数と同じ形をしている。

が成り立つが、 t に顕わに依存する場合でも $N \rightarrow \infty$ の極限では δt は非常に小さいので、上式が成り立つとして問題ないだろう。このとき

$$K(t_f, \mathbf{x}_f; t_i, \mathbf{x}_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \int d^D x_n \right] \left[\prod_{m=0}^{N-1} \langle \mathbf{x}_{m+1} | \exp \left(\frac{\delta t}{i\hbar} \hat{H} \right) | \mathbf{x}_m \rangle \right] \quad (2.2.32)$$

を得る。さて、運動量についても同様に完全系を挟んで

$$K(t_f, \mathbf{x}_f; t_i, \mathbf{x}_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \int d^D x_n \right] \left[\prod_{m=0}^{N-1} \int d^D p_m \langle \mathbf{x}_{m+1} | \exp \left(\frac{\delta t}{i\hbar} \hat{H} \right) | \mathbf{p}_m \rangle \langle \mathbf{p}_m | \mathbf{x}_m \rangle \right] \quad (2.2.33)$$

となるが、(非相対論的で、電磁場と相互作用のない粒子の) Hamiltonian が $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ の形に書けていたことを思い出すと、固有 vector に掛かる operator を固有値で置き換えることが出来て

$$\begin{aligned} & \int d^D p_m \langle \mathbf{x}_{m+1} | \exp \left(\frac{\delta t}{i\hbar} \hat{H} \right) | \mathbf{p}_m \rangle \langle \mathbf{p}_m | \mathbf{x}_m \rangle \\ &= \int d^D p_m \langle \mathbf{x}_{m+1} | \mathbf{p}_m \rangle \exp \left[\frac{\delta t}{i\hbar} \left(\frac{\mathbf{p}_m^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{m+1}) \right) \right] \langle \mathbf{p}_m | \mathbf{x}_m \rangle \\ &= \int \frac{d^D p_m}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \left\{ \delta t \left(\frac{\mathbf{p}_m^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{m+1}) \right) + \mathbf{p}_m \cdot (\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_{m+1}) \right\} \right] \end{aligned} \quad (2.2.34)$$

と分かる。ここで $\hat{\mathbf{p}}$ の固有状態の \mathbf{x} -表示 (2.2.11) を使った。以上をまとめると

$$\begin{aligned} K(t_f, \mathbf{x}_f; t_i, \mathbf{x}_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{d^D p_0}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \left\{ \delta t \left(\frac{\mathbf{p}_0^2}{2m} + V(\mathbf{x}_1) \right) + \mathbf{p}_0 \cdot (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_1) \right\} \right] \\ &\quad \times \prod_{n=1}^{N-1} \int \frac{d^D x_n d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \left\{ \delta t \left(\frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{n+1}) \right) + \mathbf{p}_n \cdot (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n+1}) \right\} \right] \end{aligned} \quad (2.2.35)$$

を得る。

この方法で正準量子化で鬱陶しかった変数の非可換性は完全に除かれ、 c -数のみによる遷移振幅の表式を得たことになる。この p と x の積分を含む表式の経路積分を Hamiltonian 経路積分という。

2.2.5 Feynman Path Integral

さて、Fresnel 積分 (A.3.16) によりこの p 積分を実行することも出来て、

$$\begin{aligned} & \int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \left\{ \delta t \left(\frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{n+1}) \right) + \mathbf{p}_n \cdot (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n+1}) \right\} \right] \\ &= \int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left[\frac{\delta t}{i\hbar} \left(\frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} + V(\mathbf{x}_{n+1}) + \mathbf{p}_n \cdot \frac{1}{\delta t} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n+1}) \right) \right] \\ &= \int \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left[-i \frac{\delta t}{\hbar} \left(\frac{1}{2m} \left\{ \mathbf{p}_n + \frac{m}{\delta t} (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n+1}) \right\}^2 + V(\mathbf{x}_{n+1}) - \frac{m}{2\delta t^2} (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n)^2 \right) \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \left(\frac{2\pi\hbar m}{i\delta t} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left[\frac{\delta t}{i\hbar} \left(V(\mathbf{x}_{n+1}) - \frac{m}{2\delta t^2} (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n)^2 \right) \right] \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left[\frac{i\delta t}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n}{\delta t} \right]^2 - V(\mathbf{x}_{n+1}) \right) \right] \end{aligned} \quad (2.2.36)$$

から Feynman kernel の x 積分のみの表式

$$\begin{aligned} K(t_f, \mathbf{x}_f; t_i, \mathbf{x}_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \int d^D x_n \right] \\ &\quad \prod_{n=0}^{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\delta t} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left[\frac{i\delta t}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n}{\delta t} \right]^2 - V(\mathbf{x}_{n+1}) \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{D}{2}} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \int d^D x_n \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} \right] \\
&\quad \prod_{n=0}^{N-1} \exp \left[\frac{i \delta t}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n}{\delta t} \right]^2 - V(\mathbf{x}_{n+1}) \right) \right] \quad (2.2.37)
\end{aligned}$$

が得られる。測度 $d^D x_n \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}}$ は無次元であり、位置についての確率密度を与える Feynman kernel は、全体としては (長さ) $^{-D}$ の次元を持っている。 p についての積分を済ませてしまった場合のこの表示を Lagrangian 経路積分や Feynman 経路積分と呼ぶ。

2.2.6 Path Integral の実行

さて、さらに計算を進める上で、もし $\mathbf{x}_{m+1} - \mathbf{x}_m$ が有限の大きさを持っていたらどうなるだろうか。 N を無限大に飛ばす極限で δt は 0 になるから、 $\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_{m+1} - \mathbf{x}_m}{\delta t} \right]^2$ という項は非常に大きくなってしまう。これに係数 i が掛かって指数関数の肩に乗っているのだから、被積分関数は $N \rightarrow \infty$ の極限で非常に激しく振動してしまい、積分値は 0 となるだろう (Riemann-Lebesgue lemma を想像して欲しい)。

よって $\mathbf{x}_{m+1} - \mathbf{x}_m$ が有限の大きさを持つような場合は積分値に寄与せず、 $\mathbf{x}_{m+1} - \mathbf{x}_m$ が無限小、 $\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_{m+1} - \mathbf{x}_m}{\delta t} \right]^2$ が有限の場合のみを考えなければいけないことが分かる。 \mathbf{x}_m はただの完全系展開の parameter であったので、本来は時間変数 t とは全く関係がない筈なのだが、この観点に加えて \mathbf{x}_m の完全系が時刻 $t = t_i + m\delta t$ の位置に挿入されていたことを思い出すと、 \mathbf{x}_m を時間 $t = t_i + m\delta t$ の連続関数 $\mathbf{x}(t)$ と見做し、 $\frac{\mathbf{x}_{m+1} - \mathbf{x}_m}{\delta t}$ を $\mathbf{x}(t)$ の時間微分 $\dot{\mathbf{x}}$ と見做すこともやぶさかではない筈だ。古典的に作用を無限大にする (kinetic energy が無限大となる) ような経路は、量子論的にも禁じられるのである。

同様に、 $V(\mathbf{x}_m)$ も時間変数 t の滑らかな関数である $\mathbf{x}(t)$ に対して定義された関数 $V(\mathbf{x}(t))$ であると思うことが出来る。 V が \mathbf{x}_m と \mathbf{x}_{m+1} に対して非対称に定義されていることが気になる場合は、 \mathbf{p} の完全系を挟むより前に potential を $V = \frac{1}{2}V + \frac{1}{2}V$ のように半分に分け、一方の項だけ中の演算子を $\frac{1}{2}V(\mathbf{x}_m)$ と固有値に置き換えてしまえばよい。

あるいは、正準交換関係をうまく使って演算子の積の順番を変えることができる。特に、Weyl 順序と呼ばれる演算子順序を取ることで $V(\mathbf{x}) := V\left(\frac{\mathbf{x}_m + \mathbf{x}_{m+1}}{2}\right)$ となるように V を定義することが出来る。これを中点処方と言い、 $N \rightarrow \infty$ の連続極限を考える上では最も自然な定義だと言える。fermion の場合には正規順序や反正規順序を取っても良い。

\mathbf{x} が t の連続関数だと思うと

$$\begin{aligned}
&\prod_{n=0}^{N-1} \exp \left[\frac{i \delta t}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \left[\frac{\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n}{\delta t} \right]^2 - V(\mathbf{x}_{n+1}) \right) \right] \\
&= \exp \left[\sum_{n=0}^{N-1} \frac{i \delta t}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 - V(\mathbf{x}) \right) \right] \\
&= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt L \right] \\
&= \exp \left(\frac{i}{\hbar} S \right) \quad (2.2.38)
\end{aligned}$$

のように変形が出来るから、Feynman kernel は

$$\begin{aligned}
K(t_f, \mathbf{x}_f; t_i, \mathbf{x}_i) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{D}{2}} \left[\prod_{n=1}^{N-1} \int d^D x_n \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}} \right] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S \right) \\
&=: \int_{\mathbf{x}(t_i)=\mathbf{x}_i}^{\mathbf{x}(t_f)=\mathbf{x}_f} D\mathbf{x}(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} S \right) \quad (2.2.39)
\end{aligned}$$

のように書ける。ここでもちろん、 L, S はそれぞれ古典的 Lagrangian と作用である。

結局、経路積分では時間の連続関数 $\mathbf{x}(t)$ のうち、境界条件 $t = t_i, t_f$ で $\mathbf{x} = \mathbf{x}_f, \mathbf{x}_f$ を満たす全てに渡って因子 $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$ を足し上げればよいということが分かる。

2.2.7 調和振動子の例

source 項 qJ を持つ 1 次元調和振動子の Lagrangian

$$L_{cl} := \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 + qJ(t) \quad (2.2.40)$$

を考える (source 項を導入する御利益については 2.2.10 で説明する。普通の調和振動子に戻るには単に $J(t) = 0$ の場合を考えればよい)。対応する古典運動方程式は

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L_{cl}}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L_{cl}}{\partial q} \\ &= \frac{d}{dt} (m\dot{q}) - (-m\omega^2 q + J(t)) \\ &= m\ddot{q} + m\omega^2 q - J(t) \end{aligned} \quad (2.2.41)$$

なので、斉次方程式 $0 = m\ddot{q} + m\omega^2 q$ の一般解 $q(t) = A \sin \omega(t - \alpha)$ に特別解 $q(t) = \int_{t_i}^t d\tau \frac{\sin \omega(t - \tau)}{m\omega} J(\tau)$ *8 を足して、一般解は

$$q_{cl}(t) = A \sin \omega(t - \alpha) + \int_{t_i}^t d\tau \frac{\sin \omega(t - \tau)}{m\omega} J(\tau) \quad (2.2.44)$$

と与えられる。

振動子が $t = t_i$ で位置 $q = q_i$ 、 $t = t_f$ で位置 $q = q_f$ にあったならば、定数 A, α を求めて

$$\begin{aligned} q_{cl}(t) &= \frac{q_f \sin \omega(t - t_i) + q_i \sin \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} - \frac{\sin \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{\sin \omega(t_f - \tau)}{m\omega} J(\tau) \\ &\quad + \int_{t_i}^t d\tau \frac{\sin \omega(t - \tau)}{m\omega} J(\tau) \end{aligned} \quad (2.2.45)$$

と書けることが分かる。右辺の $\sin \omega(t_f - t)$ は角の合成の逆を使って $a \sin \omega(t - t_i) + b \cos \omega(t - t_i)$ の形に分解できるので、第 1, 2 項の和は角の合成により $A \sin \omega(t - \alpha)$ の形で書けるためである。

さて、この系を経路積分で量子化し、Feynman kernel を求めることを考える。新しい変数として古典解からのずれ $x := q - q_{cl}$ を導入すると話が簡単になる。 x は $t = t_i, t_f$ でそれぞれ $x = 0$ を満たし、 x で書き直した Lagrangian は

$$\begin{aligned} L &:= \frac{1}{2}m \left[\frac{d(q_{cl} + x)}{dt} \right]^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 (q_{cl} + x)^2 + (q_{cl} + x)J(t) \\ &= \frac{1}{2}m\dot{q}_{cl}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q_{cl}^2 + q_{cl}J(t) + \frac{1}{2}m(2\dot{q}_{cl}\dot{x} + \dot{x}^2) - \frac{1}{2}m\omega^2 (2q_{cl}x + x^2) + xJ(t) \end{aligned}$$

*8 これは

$$\dot{q} = \frac{\sin \omega(t - t_i)}{m\omega} J(t) + \int_{t_i}^t d\tau \frac{\cos \omega(t - \tau)}{m} J(\tau) = \int_{t_i}^t d\tau \frac{\cos \omega(t - \tau)}{m} J(\tau) \quad (2.2.42)$$

より

$$\begin{aligned} \ddot{q} &= \frac{\cos \omega(t - t_i)}{m} J(t) + \int_{t_i}^t d\tau \frac{-\omega \sin \omega(t - \tau)}{m} J(\tau) \\ &= \frac{J(t)}{m} - \omega^2 \int_{t_i}^t d\tau \frac{\sin \omega(t - \tau)}{m\omega} J(\tau) \\ &= \frac{J(t)}{m} - \omega^2 q \end{aligned} \quad (2.2.43)$$

を確かに満たす。

$$= L_{cl} + \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) + (m \dot{q}_{cl} \dot{x} - m \omega^2 q_{cl} x + x J(t)) \quad (2.2.46)$$

のようになる。ここで、作用

$$\begin{aligned} S &:= \int_{t_i}^{t_f} dt L \\ &= S_{cl}[J] + \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) + \int_{t_i}^{t_f} dt (m \dot{q}_{cl} \dot{x} - m \omega^2 q_{cl} x + x J(t)) \end{aligned} \quad (2.2.47)$$

は境界条件 (x は $t = t_i, t_f$ でそれぞれ $x = 0$) より部分積分

$$\int_{t_i}^{t_f} dt (m \dot{q}_{cl} \dot{x}) = \left[m \dot{q}_{cl} x \right]_{t=t_i}^{t=t_f} - \int_{t_i}^{t_f} dt (m \ddot{q}_{cl} x) = - \int_{t_i}^{t_f} dt (m \ddot{q}_{cl} x) \quad (2.2.48)$$

できて、 q_{cl} が運動方程式 $0 = m \ddot{q}_{cl} + m \omega^2 q_{cl} - J(t)$ を満たすことより

$$\begin{aligned} S &= S_{cl}[J] + \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) - \int_{t_i}^{t_f} dt (m \ddot{q}_{cl} + m \omega^2 q_{cl} - J(t)) x \\ &= S_{cl}[J] + \frac{1}{2} m \int_{t_i}^{t_f} dt (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) \end{aligned} \quad (2.2.49)$$

と書き直せ、さらに古典解 (2.2.45) の時間微分

$$\begin{aligned} \dot{q}_{cl}(t) &= \omega \frac{q_f \cos \omega(t - t_i) - q_i \cos \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} - \omega \frac{\cos \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{\sin \omega(t_f - \tau)}{m \omega} J(\tau) \\ &\quad + \omega \int_{t_i}^t d\tau \frac{\cos \omega(t - \tau)}{m \omega} J(\tau) \\ &= \frac{\omega}{\sin \omega(t_f - t_i)} \left[\left(q_f + \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{\sin \omega(t_f - \tau)}{m \omega} J(\tau) \right) \cos \omega(t - t_i) - q_i \cos \omega(t_f - t) \right] \\ &\quad + \int_{t_i}^t d\tau \frac{\cos \omega(t - \tau)}{m} J(\tau) \end{aligned} \quad (2.2.50)$$

すなわち

$$\dot{q}_{cl}(t_i) = \frac{\omega}{\sin \omega(t_f - t_i)} \left[\left(q_f + \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{\sin \omega(t_f - \tau)}{m \omega} J(\tau) \right) - q_i \cos \omega(t_f - t_i) \right] \quad (2.2.51a)$$

$$\begin{aligned} \dot{q}_{cl}(t_f) &= \frac{\omega}{\sin \omega(t_f - t_i)} \left[\left(q_f + \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{\sin \omega(t_f - \tau)}{m \omega} J(\tau) \right) \cos \omega(t_f - t_i) - q_i \right] \\ &\quad + \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{\cos \omega(t_f - \tau)}{m} J(\tau) \end{aligned} \quad (2.2.51b)$$

を使って $S_{cl}[J]$ の部分も

$$\begin{aligned} S_{cl}[J] &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{1}{2} m \dot{q}_{cl}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 q_{cl}^2 + q_{cl} J(t) \right] \\ &= \left[\frac{1}{2} m q_{cl} \dot{q}_{cl} \right]_{t_i}^{t_f} + \int_{t_i}^{t_f} dt q_{cl} \left[-\frac{1}{2} m \ddot{q}_{cl} - \frac{1}{2} m \omega^2 q_{cl} + J(t) \right] \\ &= \frac{1}{2} m \left(q_f \dot{q}_{cl}(t_f) - q_i \dot{q}_{cl}(t_i) \right) + \int_{t_i}^{t_f} dt q_{cl} \frac{1}{2} J(t) \end{aligned} \quad (2.2.52)$$

と計算できる。

求める Feynman kernel の経路積分表示は

$$K[J](t_f, q_f; t_i, q_i) = \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} Dq(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} S \right)$$

$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J]\right) \int_{x(t_i)=0}^{x(t_f)=0} Dx(t) \exp\left(-\frac{im}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt x \left[\left(\frac{d}{dt}\right)^2 + \omega^2\right] x\right) \quad (2.2.53)$$

となるが、operator $\left(\frac{d}{dt}\right)^2 + \omega^2$ の固有関数

$$\left[\left(\frac{d}{dt}\right)^2 + \omega^2\right] \phi_n(t) = \lambda_n \phi_n(t) \quad (2.2.54)$$

であって境界条件 $x(t_i) = 0, x(t_f) = 0$ を満たすものは

$$\phi_n(t) = \sqrt{\frac{2}{t_f - t_i}} \sin \omega_n(t - t_i), \quad \omega_n = \frac{n\pi}{t_f - t_i} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad \lambda_n = \omega^2 - \omega_n^2 \quad (2.2.55)$$

であるので、これで $x(t)$ を展開し

$$x(t) = a_n \phi_n(t) \quad (2.2.56)$$

と書こう。明らかに

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_f} dt x \left[\left(\frac{d}{dt}\right)^2 + \omega^2\right] x &= \sum_{n,m} \int_{t_i}^{t_f} dt a_n \phi_n \left[\lambda_m\right] a_m \phi_m \\ &= \sum_{n,m} a_n a_m \lambda_m \int_{t_i}^{t_f} dt \phi_n \phi_m \\ &= \sum_{n,m} a_n a_m \lambda_m \delta_{nm} = \sum_n a_n^2 \lambda_n \end{aligned} \quad (2.2.57)$$

より、任意の関数についての積分は、この係数 a_n についての積分

$$\begin{aligned} K[J](t_f, q_f; t_i, q_i) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J]\right) \frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)} \prod_{n=1}^{\infty} \left[\int da_n \right] \exp\left(-\frac{im}{2\hbar} \sum_n a_n^2 \lambda_n\right) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J]\right) \frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)} \prod_{n=1}^{\infty} \left[\int da_n \exp\left(-\frac{im}{2\hbar} a_n^2 \lambda_n\right) \right] \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J]\right) \frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)} \prod_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{im\lambda_n}} \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J]\right) \frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)} \sqrt{\prod_{n=1}^{\infty} \frac{2\pi i\hbar}{m\omega_n^2 \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_n^2}\right)}} \end{aligned} \quad (2.2.58)$$

として実現できるだろう。ここで $\frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)}$ は $x(t)$ から a_n への変数変換による Jacobian である。さて、公式 (A.3.4a) より

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_n^2}\right) = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\omega^2(t_f - t_i)^2}{\pi^2 n^2}\right) = \frac{\sin \omega(t_f - t_i)}{\omega(t_f - t_i)} \quad (2.2.59)$$

であるので、

$$K[J](t_f, q_f; t_i, q_i) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J]\right) \frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)} \sqrt{\frac{\omega(t_f - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{2\pi i\hbar}{m\omega_n^2}} \quad (2.2.60)$$

を得る。

最後に $\frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)}$ を求める。明らかに $\frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)}$ は $J(t)$ にも ω にもよらないので、 $J(t) = 0, \omega = 0$ の場合の $\frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)}$ を求めればよい。classical action (2.2.52) が $J(t) = 0$ で消えることに気を付けると、 $\omega = 0$ の

Feynman kernel は自由粒子のそれ (2.2.29) で境界条件を $x_i = x_f = 0$ と置いたもの ($\frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)}$ は q_i, q_f とは関係ない事に注意しよう。どのような q_i, q_f に対しても、 $x(t)$ の定義は必ず $x_i = x_f = 0$ を与える) に一致しなければならないので

$$\frac{\partial(x(t))}{\partial(a_n)} \sqrt{\prod_{n=1}^{\infty} \frac{2\pi i \hbar}{m\omega_n^2}} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{m}{2i\hbar(t_f - t_i)} (x_f - x_i)^2 \right) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.2.61)$$

と求まり、結局調和振動子の Feynman kernel は

$$\begin{aligned} K[J](t_f, q_f; t_i, q_i) &= \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J] \right) \sqrt{\frac{\omega(t_f - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_f - t_i)} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J] \right) \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t_f - t_i)} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2.2.62)$$

である。

2.2.8 Euclidean 経路積分

どのような経路が経路積分に寄与するかについて、上では Riemann-Lebesgue lemma など持ち出して怪しい議論をしたが、虚時間 $\tau := it$ を導入することでもう少し厳密な議論が可能となる。Euclid 化された Lagrangian と作用を

$$L_E := -L \Big|_{t=-i\tau} = \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \quad (2.2.63a)$$

$$S = \int dt L = i \int d\tau L_E =: i S_E \quad (2.2.63b)$$

としておくと、Feynman kernel の経路積分は

$$K(t_f, q_f; t_i, q_i) = \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} Dq(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} S \right) = \int_{q(t_i)=q_i}^{q(t_f)=q_f} Dq(t) \exp \left(-\frac{S_E}{\hbar} \right) \quad (2.2.64)$$

となり、potential が q の 2 次以上なら Gaussian 積分より早く収束するため、数学的に厳密に定義できる。

実時間 t から虚時間 $\tau = it$ へ移ることを指して Wick rotation (Wick 回転) という言うこともある。Feynman kernel が $t_f - t_i$ の解析関数ならば Wick 回転は一種の解析接続と考えることが出来るが、多くの場合には実時間 t での経路積分がそもそも実行可能でないため、虚時間における経路積分によって実時間での量子力学が定められていると考えたほうが良い。

2.2.9 Euclidean Feynman Kernel、時間発展、分配関数、統計力学系との関係

さて、operator formalism で Feynman kernel を見てみよう。(2.2.27) と同じことを波動関数ではなく状態 vector の完全系で行っても

$$\begin{aligned} K(t + t_i, \mathbf{x}; t_i, \mathbf{x}_i) &= \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t + t_i, t_i) | \mathbf{x}_i \rangle = \langle \mathbf{x} | \sum_n | n \rangle \langle n | \exp \left(\frac{t}{i\hbar} \hat{H} \right) | \mathbf{x}_i \rangle \\ &= \sum_n \psi_n(\mathbf{x}) \exp \left(\frac{t}{i\hbar} E_n \right) \psi_n^*(\mathbf{x}_i) \end{aligned} \quad (2.2.65)$$

と当然同じ結果を与えるが、ここで虚時間 $\tau = it$ に移ると何が起ころうか。

$$K(t + t_i, \mathbf{x}; t_i, \mathbf{x}_i) = \sum_n \psi_n(\mathbf{x}) \exp \left(-\frac{\tau}{\hbar} E_n \right) \psi_n^*(\mathbf{x}_i) =: K_E(\tau; \mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \quad (2.2.66)$$

となり、時間発展 $t \rightarrow \infty$ と共に基底状態 $E = E_0$ 以外 Feynman kernel への寄与は指数関数的に小さくなる事が分かる。

特に興味がある量の一つは分配関数 (canonical partition function) Z で、虚時間 τ と Boltzmann constant k_B を使って温度 $T := \frac{\hbar}{k_B \tau}$ 及び逆温度 $\beta := \frac{1}{k_B T} = \frac{\tau}{\hbar}$ を定義することにより

$$\begin{aligned} Z(\beta) &:= \text{tr } \hat{U}(t + t_i, t_i) = \int d^D x \langle \mathbf{x} | \hat{U}(t + t_i, t_i) | \mathbf{x} \rangle \\ &= \sum_n \int d^D x \langle \mathbf{x} | n \rangle \exp\left(-\frac{\tau}{\hbar} E_n\right) \langle n | \mathbf{x} \rangle \\ &= \int d^D x K_E(\tau; \mathbf{x}_f = \mathbf{x}, \mathbf{x}_i = \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.2.67)$$

と定義される。周期的境界条件 (periodic boundary condition, P.B.C.) $\mathbf{x}_f = \mathbf{x}(t_f) = \mathbf{x}(t_i) = \mathbf{x}_i$ を課して時間 τ だけ時間発展させた Feynman kernel の空間積分が逆温度 $\beta = \frac{\tau}{\hbar}$ での canonical ensemble (カノニカル分布) 分配関数と一致する事が見て取れる。もちろん他の表式では Feynman kernel との関係を見にくいというだけで、空間的に周期境界条件が課されていることを明示することに拘らなければ、最初から Hamiltonian の固有状態を使って trace を取ることで

$$Z(\beta) = \text{tr} \exp(-\beta \hat{H}) = \sum_n \langle n | \exp(-\beta E_n) | n \rangle = \sum_n \exp(-\beta E_n) \quad (2.2.68)$$

のように書くこともできる。この意味で、Hamiltonian \hat{H} と虚時間周期 τ を持つ量子力学系の時間発展を求めることと、同じ Hamiltonian \hat{H} を持ち逆温度 $\beta = \frac{\tau}{\hbar}$ の熱浴に接した有限温度統計力学系の canonical 分配関数を求めることは実は等価である。このため、量子力学系で無限に長い時間 $t \rightarrow \infty$ の時間発展を考えることをゼロ温度極限 (zero-temperature limit) と言ったり、逆に周期境界条件を課して有限時間だけ時間発展させた系を有限温度系 (finite-temperature system) と言ったりする。この文脈では、自由 energy (Helmholtz free energy)

$$F := -\frac{1}{\beta} \log Z \quad (2.2.69)$$

や内部 energy (internal energy)

$$\begin{aligned} U &:= \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \log Z \\ &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_n \exp(-\beta E_n) = -\frac{1}{Z} \sum_n E_n \exp(-\beta E_n) \end{aligned} \quad (2.2.70)$$

あるいは、およそ canonical ensemble 統計力学に対して定義できる全ての熱力学量

$$S := -\frac{\partial F}{\partial T} \Big|_V \quad \text{エントロピー (entropy)} \quad (2.2.71a)$$

$$P := -\frac{\partial F}{\partial V} \Big|_T \quad \text{圧力 (pressure)} \quad (2.2.71b)$$

$$\begin{aligned} C_V &:= \frac{\partial U}{\partial T} \Big|_V = \frac{\partial}{\partial T} \left[k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \log Z \right] \Big|_V \\ &= T \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_V \quad \text{定積比熱 (specific heat at constant volume)} \end{aligned} \quad (2.2.71c)$$

などを量子系に対して定義することができる。ここで V はもちろん、粒子が存在できる空間の体積である。特に、ゼロ温度極限 $\tau \rightarrow \infty$ で内部 energy U が基底 energy E_0 に近づく事は重要だろう。

2.2.10 Generating Functional と Source Term

与えられた始状態 $|\phi_I\rangle$ と終状態 $|\phi_F\rangle$ に対し、生成汎関数 (generating functional) $W_{FI}[J](t)$ を source 付きの Feynman kernel $K[J](t_i + t, \mathbf{x}; t_i, \mathbf{x}_i)$ を用いて

$$W_{FI}[J](t) := \int d^D x_f d^D x_i \phi_F^*(t_i + t, \mathbf{x}_f) \phi_I(t_i, \mathbf{x}_i) K[J](t_i + t, \mathbf{x}_f; t_i, \mathbf{x}_i) \quad (2.2.72)$$

と定義する。Feynman kernel を用いた遷移振幅の表式 (2.2.26) と見比べることで、特に $J(t) = 0$ と置いた場合には時間 t で始状態 ϕ_I から終状態 ϕ_F へ遷移する確率振幅 $W_{FI}[J=0](t) = A_{FI}(t)$ と解釈できることが分かるだろう。

調和振動子の場合には source 付きの Feynman kernel を (2.2.62) で求めている。これを使ってゼロ温度極限 $t \rightarrow \infty$ での真空から真空への遷移に関する生成汎関数

$$W[J] := \lim_{t \rightarrow \infty} W_{00}[J](t) \quad (2.2.73)$$

を求めよう。まず、古典解 (2.2.45)

$$\begin{aligned} q_{cl}(t) &= \frac{q_f \sin \omega(t - t_i) + q_i \sin \omega(t_f - t)}{\sin \omega(t_f - t_i)} - \frac{\sin \omega(t - t_i)}{\sin \omega(t_f - t_i)} \int_{t_i}^{t_f} d\tau \frac{\sin \omega(t_f - \tau)}{m\omega} J(\tau) \\ &\quad + \int_{t_i}^t d\tau \frac{\sin \omega(t - \tau)}{m\omega} J(\tau) \end{aligned} \quad (2.2.74)$$

およびその時間微分 (2.2.51)

$$\dot{q}_{cl}(t_i) = \frac{\omega}{\sin \omega t} \left[\left(q_f + \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \frac{\sin \omega(t_i + t - \tau)}{m\omega} J(\tau) \right) - q_i \cos \omega t \right] \quad (2.2.75a)$$

$$\begin{aligned} \dot{q}_{cl}(t_f = t_i + t) &= \frac{\omega}{\sin \omega t} \left[\left(q_f + \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \frac{\sin \omega(t_i + t - \tau)}{m\omega} J(\tau) \right) \cos \omega t - q_i \right] \\ &\quad + \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \frac{\cos \omega(t_i + t - \tau)}{m} J(\tau) \end{aligned} \quad (2.2.75b)$$

を古典的作用 (2.2.52) に代入すると、

$$\begin{aligned} S_{cl}[J] &= \frac{1}{2} m \left(q_f \dot{q}_{cl}(t_f) - q_i \dot{q}_{cl}(t_i) \right) + \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau q_{cl}(\tau) \frac{1}{2} J(\tau) \\ &= \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\sin \omega t} \left(q_f \left[\left(q_f + \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \frac{\sin \omega(t_i + t - \tau)}{m\omega} J(\tau) \right) \cos \omega t - q_i \right] \right. \\ &\quad \left. - q_i \left[\left(q_f + \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \frac{\sin \omega(t_i + t - \tau)}{m\omega} J(\tau) \right) - q_i \cos \omega t \right] \right) \\ &\quad + \frac{q_f}{2} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \cos \omega(t_i + t - \tau) J(\tau) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \left[\frac{q_f \sin \omega(\tau - t_i) + q_i \sin \omega(t_i + t - \tau)}{\sin \omega t} - \frac{\sin \omega(\tau - t_i)}{\sin \omega t} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau' \frac{\sin \omega(t_i + t - \tau')}{m\omega} J(\tau') \right. \\ &\quad \left. + \int_{t_i}^{\tau} d\tau' \frac{\sin \omega(\tau - \tau')}{m\omega} J(\tau') \right] J(\tau) \end{aligned} \quad (2.2.76)$$

が得られる。真空の波動関数 (2.2.16a) は

$$\phi_0(t, q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2 - \frac{it\omega}{2} \right) \quad (2.2.77)$$

であった^{*9} から、真空間の遷移振幅は

$$W_{00}[J](t) = \int dq_f dq_i \phi_0^*(t_i + t, q_f) \phi_0(t_i, q_i) K[J](t_i + t, q_f; t_i, q_i)$$

^{*9} ここでは Schrödinger 方程式を解くための波動関数の境界条件を指定しているだけであり、Feynman kernel が時間発展 operator の役割をするので本来ここに時間依存性を入れる必要はない。実際、以下では $t = t_i, t_f$ の2つの時刻での波動関数しか使わない。

そもそも、任意の時間での波動関数を知っていなければならないとすると source 項によって Hamiltonian に $-qJ$ の項が加わる事を考慮して解の形を

$$\phi_0(t, q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2 - \frac{it\omega}{2} - \frac{1}{i\hbar} \int_{t_i}^t d\tau q(\tau) J(\tau) \right) \quad (2.2.78)$$

と変えなければならないはずであるが、operator であるはずの q を時間の実数関数と扱っている $q(\tau)$ をどう解釈すれば良いかはよく分からない。

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \int dq_f dq_i \phi_0^*(t_i + t, q_f) \phi_0(t_i, q_i) \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J] \right) \\
&= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \int dq_f dq_i \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} [q_i^2 + q_f^2] + \frac{it\omega}{2} \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}[J] \right) \\
&= \frac{m\omega}{\pi \hbar (2i \sin \omega t)^{1/2}} \exp \left(\frac{it\omega}{2} \right) \int dq_f dq_i \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} [(q_i + A)^2 + (q_f + B)^2] + C \right) \\
&= \frac{m\omega}{\pi \hbar (2i \sin \omega t)^{1/2}} \exp \left(\frac{it\omega}{2} \right) \left(\frac{2\pi \hbar}{m\omega} \right) e^C \quad \because \text{Fresnel 積分 (A.3.16)} \\
&= \left(\frac{2}{i \sin \omega t} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{it\omega}{2} \right) e^C
\end{aligned} \tag{2.2.79}$$

と書ける。ただし A, B, C は

$$A(t) := -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \left[\frac{\sin \omega(t_i + t - \tau)}{\sin \omega t} \right] J(\tau) \tag{2.2.80a}$$

$$B(t) := -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \left[\cos \omega(t_i + t - \tau) + \frac{\sin \omega(\tau - t_i)}{\sin \omega t} \right] J(\tau) \tag{2.2.80b}$$

$$\begin{aligned}
C(t) &:= \frac{m\omega}{2\hbar} [A^2 + B^2] \\
&\quad + \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \left[\int_{t_i}^{\tau} d\tau' \frac{\sin \omega(\tau - \tau')}{m\omega} J(\tau') - \frac{\sin \omega(\tau - t_i)}{\sin \omega t} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau' \frac{\sin \omega(t_i + t - \tau')}{m\omega} J(\tau') \right] J(\tau) \\
&= -\frac{1}{8\hbar m\omega} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau' \left[\frac{\sin \omega(t_i + t - \tau)}{\sin \omega t} \frac{\sin \omega(t_i + t - \tau')}{\sin \omega t} \right. \\
&\quad \left. + \cos \omega(t_i + t - \tau) \cos \omega(t_i + t - \tau') + \frac{\sin \omega(\tau - t_i)}{\sin \omega t} \frac{\sin \omega(\tau' - t_i)}{\sin \omega t} \right. \\
&\quad \left. \cos \omega(t_i + t - \tau') \frac{\sin \omega(\tau - t_i)}{\sin \omega t} + \cos \omega(t_i + t - \tau) \frac{\sin \omega(\tau' - t_i)}{\sin \omega t} \right] J(\tau) J(\tau') \\
&\quad + \frac{i}{2\hbar m\omega} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau \left[\int_{t_i}^{\tau} d\tau' \sin \omega(\tau - \tau') - \frac{\sin \omega(\tau - t_i)}{\sin \omega t} \int_{t_i}^{t_i+t} d\tau' \sin \omega(t_i + t - \tau') \right] J(\tau) J(\tau')
\end{aligned} \tag{2.2.80c}$$

と定義した。

2.3 量子力学における対称性と保存量

以下では、量子力学においても対称性や保存則について古典系に類似する記述が可能である事を見よう。

2.3.1 角運動量の代数

Newton 力学で角運動量は

$$\mathbf{L} := \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{2.3.1a}$$

$$\therefore L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \tag{2.3.1b}$$

と定義され（ただし成分は直交座標系で示した。また簡単のため議論は 1 粒子系の場合に限る）、3 次元系の回転対称性に付随する保存量であった。量子力学で対応する演算子はどのような性質を持つか議論しよう。

角運動量演算子を

$$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{q}_j \hat{p}_k \tag{2.3.2}$$

と定義する。正準交換関係と公式 (A.1.6), (B.1.3) を使うと

$$\begin{aligned}
&[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \\
&\because [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = [\epsilon_{ikl} \hat{q}_k \hat{p}_l, \epsilon_{jnm} \hat{q}_n \hat{p}_m] = \epsilon_{ikl} \epsilon_{jnm} [\hat{q}_k \hat{p}_l, \hat{q}_n \hat{p}_m] \\
&= \epsilon_{ikl} \epsilon_{jnm} \left(\hat{q}_k [\hat{p}_l, \hat{q}_n \hat{p}_m] + [\hat{q}_k, \hat{q}_n \hat{p}_m] \hat{p}_l \right) = \epsilon_{ikl} \epsilon_{jnm} \left(\hat{q}_k [\hat{p}_l, \hat{q}_n] \hat{p}_m + \hat{q}_n [\hat{q}_k, \hat{p}_m] \hat{p}_l \right)
\end{aligned} \tag{2.3.3}$$

$$\begin{aligned}
&= i\hbar \epsilon_{ikl} \epsilon_{jnm} \left(-\hat{q}_k \hat{p}_m \delta_{ln} + \hat{q}_n \hat{p}_l \delta_{km} \right) = i\hbar \left(-\epsilon_{ikl} \epsilon_{jlm} \hat{q}_k \hat{p}_m + \epsilon_{ikl} \epsilon_{jnk} \hat{q}_n \hat{p}_l \right) \\
&= i\hbar \left(-\epsilon_{lki} \epsilon_{ljm} \hat{q}_k \hat{p}_m + \epsilon_{kil} \epsilon_{knj} \hat{q}_n \hat{p}_l \right) = i\hbar \left(-\left[\delta_{kj} \delta_{im} - \delta_{km} \delta_{ij} \right] \hat{q}_k \hat{p}_m + \left[\delta_{in} \delta_{lj} - \delta_{ij} \delta_{ln} \right] \hat{q}_n \hat{p}_l \right) \\
&= i\hbar \left(-\hat{q}_j \hat{p}_i + \hat{q}_m \hat{p}_m \delta_{ij} + \hat{q}_i \hat{p}_j - \hat{q}_l \hat{p}_l \delta_{ij} \right) = i\hbar \left(\hat{q}_i \hat{p}_j - \hat{q}_j \hat{p}_i \right) = i\hbar \left(\delta_{in} \delta_{jm} - \delta_{jn} \delta_{im} \right) \hat{q}_n \hat{p}_m \\
&= i\hbar \epsilon_{kij} \epsilon_{knm} \hat{q}_n \hat{p}_m = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k
\end{aligned}$$

が従う。(2.3.3) を角運動量の代数 (angular momentum algebra)、あるいは $\mathfrak{su}(2)$ 代数という。

2.3.2 角運動量の代数の表現

この代数が正定値な Hilbert 空間に作用しているということから再び非自明な条件が得られる事を見よう。そのためには non-Hermitian な operator

$$\hat{L}_{\pm} := \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (2.3.4)$$

$$\hat{L}_{\mp}^{\dagger} = \hat{L}_{\pm} \quad (2.3.5)$$

を定義しておく都合がよい。(2.3.3) を \hat{L}_{\pm}, \hat{L}_3 で書き直すと

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_3 \quad (2.3.6a)$$

$$[\hat{L}_3, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{L}_{\pm} \quad (2.3.6b)$$

となり、(2.1.56) に続く議論と全く同様に \hat{L}_{\pm} が \hat{L}_3 の固有値を $\pm\hbar$ だけ上下することが分かる。

角運動量の大きさ $\hat{\mathbf{L}}^2$ を

$$\hat{\mathbf{L}}^2 := \sum_i \hat{L}_i^2 = \frac{1}{2} \left(\hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+ \right) + \hat{L}_3^2 \quad (2.3.7)$$

$$\hat{L}_{\pm} \hat{L}_{\mp} = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_3^2 \pm \hbar \hat{L}_3 \quad (2.3.8)$$

で定義する。 $\hat{\mathbf{L}}^2$ は \hat{L}_{\pm}, \hat{L}_3 の全てと交換するので、 $\hat{\mathbf{L}}^2$ と \hat{L}_3 の同時固有状態が存在する。より一般に、代数の全ての元と交換するような元の集合を中心 (center) といい、Lie algebra が与えられたとき algebra の元を特定の方法で規格化し二乗和をすることによりカシミール演算子 (カシミア、Casimir operator、quadratic Casimir invariant) と呼ばれる (Lie algebra の universal enveloping algebra (普遍包絡代数) の) center の元を構成することが出来る。

$\hat{\mathbf{L}}^2$ の固有値を L^2 と書くと、対応する固有状態 $|\psi\rangle$ による期待値は

$$\begin{aligned}
L^2 &= \langle \psi | \hat{\mathbf{L}}^2 | \psi \rangle \\
&= \sum_i \left| \langle \hat{L}_i | \psi \rangle \right|^2 \geq 0
\end{aligned} \quad (2.3.9)$$

のように非負であるため、無次元の実数 parameter $j \geq 0$ (軌道角運動量量子数、orbital angular momentum、方位角量子数、azimuthal quantum number) を用いて $L^2 = \hbar^2 j(j+1)$ とおいて一般性を失わない。同様に無次元 parameter m (磁気量子数、magnetic quantum number) を用い、 $\hat{\mathbf{L}}^2$ と \hat{L}_3 の同時固有状態 $|j, m\rangle$ が

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad (j \geq 0) \quad (2.3.10a)$$

$$\hat{L}_3 |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \quad (2.3.10b)$$

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \quad (2.3.10c)$$

を満たしているとする、やはり内積の正定値性と公式 (2.3.8) から

$$\begin{aligned}
\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \pm \hbar^2 m &= \langle j, m | \left(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_3^2 \pm \hbar \hat{L}_3 \right) | j, m \rangle \\
&= \left| \langle \hat{L}_{\mp} | j, m \rangle \right|^2 \geq 0
\end{aligned} \quad (2.3.11)$$

なる不等式が導かれる。これが (2.3.6b) により $\hbar m$ を $\pm\hbar$ だけ上下できる事と矛盾しないため、調和振動子の場合 (2.1.61) 以下と同様の議論

1. $\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \pm \hbar^2 m < 0$ とする固有値 m は、vector $\hat{L}_{\mp} |j, m\rangle$ のいずれかの norm を負にするため存在してはいけない。ここで、

$$\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \pm \hbar^2 m = 0 \quad (2.3.12)$$

の解は

$$\begin{aligned} m &= \pm \sqrt{j(j+1) + \frac{1}{4}} \pm \frac{1}{2} \\ &= \pm \left| j + \frac{1}{2} \right| \pm \frac{1}{2} \\ &= \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \quad (\text{複号任意, } j \geq 0) \\ &= j+1, j, -j, -j-1 \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

なので、固有値 m が存在するならば

$$\begin{cases} -j \leq m \leq j+1 \\ -j-1 \leq m \leq j \end{cases} \Rightarrow -j \leq m \leq j \quad (2.3.14)$$

を満たさなければならないことが分かる。

2. $\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \pm \hbar^2 m = 0$ を満たす固有値 $m = -j, j$ が存在するならば、 $\hat{L}_{\mp} |j, m\rangle$ (複号同順) の norm が 0 なので真空条件の類似：

$$0 = \hat{L}_{-} |j, -j\rangle \quad (2.3.15a)$$

$$0 = \hat{L}_{+} |j, j\rangle \quad (2.3.15b)$$

が成り立たねばならない。表現論の言葉では前者を highest weight condition、後者を lowest weight condition という。 $|j, -j\rangle$ を angular momentum algebra の highest weight state ともいう。

3. $\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \pm \hbar^2 m > 0$ を与えるような固有値 m に対し、 $\hat{L}_{\mp} |j, m\rangle$ は norm が非 0 で 0 vector ではないので

$$\hat{L}_{\mp} |j, m\rangle \propto |j, m \mp 1\rangle \neq 0 \quad (2.3.16)$$

が分かる。もし $p, q \in \mathbb{N}_{\geq 0}$ を用い $-j+p < m < -j+p+1$ または $j-q-1 < m < j-q$ を満たす固有値 m が存在するとすると、

$$\hat{L}_{-}^{p+1} |j, m\rangle \propto |j, m-p-1\rangle \Rightarrow -j-1 < m-p-1 < -j \quad (2.3.17a)$$

$$\hat{L}_{+}^{q+1} |j, m\rangle \propto |j, m+q+1\rangle \Rightarrow j < m+q+1 < j+1 \quad (2.3.17b)$$

のいずれかが条件 (2.3.14) に矛盾する。結局、固有値 m は (存在するならば) 必ず $p, q \in \mathbb{N}_{\geq 0}$ を用い $m = -j+p$ かつ $m = j-q$ と書けなければならない、従って $2j$ は非負整数である必要がある。

が成り立つ。

Fock 基底を構成したのと同じ方法で \hat{L}_3 の全ての固有状態を規格化まで含めて highest weight state または lowest weight state から書き下すことが出来、

$$|j, m\rangle = \sqrt{\frac{(j \pm m)!}{(2j)!(j \mp m)!}} \left(\frac{\hat{L}_{\mp}}{\hbar} \right)^{j \mp m} |j, \pm j\rangle \quad (2.3.18a)$$

$$\hat{L}_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (2.3.18b)$$

$$2j \in \mathbb{N}_{\geq 0}, \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (2.3.18c)$$

が得られる。恐ろしいことに、整数または半整数 j を与えれば内積の正定値性のみから $2j+1$ 個の固有値 m と対応する固有状態が全て求まってしまうのである。

2.4 Operator の代数とその表現

調和振動子 (2.1.60) や角運動量 (2.3.11) の例からも分かることだが、

1. operator の集合があつて特定の交換関係を満たすこと
2. それらの operator の、正定置な vector space への作用が定まっていること

の 2 つは全く異なり、交換関係を満たしながら vector space に作用する為には vector space が様々な条件（非整数固有値に対応する固有 vector がないなど）を満たす必要がある。実際にそのような条件を満たす vector space を見付け、その vector space 上での operator の作用を定める事を、『operator algebra の表現を構成する』と言う。以下ではもう少し数学的な定義からこれを見てみよう。

2.4.1 環 (ring) と代数 (algebra)

集合

3 自由場の量子論

場の量子論と言うと Feynman diagram (古くは Feynman graph と呼ぶ文献もある) を使った計算に皆さん懂れているのだろうが、これは摂動計算に現れるものである。摂動論は問題を解ける部分とそこからのズレに分けて解析するというものであったので、とにかく解ける理論がないと話にならない。可解な場の量子論もそれ自身興味深い話題ではあるものの、以下では解ける模型として非相対論的な場合から始め、相対論的な場合まで含めた自由場の量子化を扱う。

3.1 自由場の古典論、場の解析力学

3.1.1 場の Lagrangian と Lagrange 形式

量子化するというからには量子化される対象となる古典論を用意する必要がある。空間 d 次元、時間 1 次元の $D := d + 1$ 次元時空 $\mathcal{M}^{1,d}$ を考え、その座標を (t, x^1, \dots, x^d) とする。時空 $\mathcal{M}^{1,d}$ 上で定義された適当な場 $\phi(t, \mathbf{x})$ とその空間微分または時間微分

$$\partial_\mu \phi(\mathbf{x}), \quad \partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad (\mu = 0, \dots, d), \quad x^0 := ct \quad (\text{c: the speed of light in vacuum}) \quad (3.1.1)$$

で書かれた Lagrangian L を用意しよう。力学自由度が空間の一点に局在している質点とは異なり、場は空間的に広がりを持った自由度であるのでその相互作用の仕方も質点の場合とは大きく異なる。物理学では経験的事実として

1. causality (因果律): 原因より先に結果が起こってはいけない
2. locality (局所性): 遠く離れた地点で起こった事象が、直ちに他の地点の事象に影響を与えてはいけない。つまり、情報が速度無限大で伝わってはいけない

を仮定するので、ある時刻 t の物理量と別の時刻 $t - t_0$ とが直接相互作用すること、つまり Lagrangian に $\phi(t)\psi(t - t_0)$ のような項が現れることを禁止する。Lagrangian に、例えば

$$\begin{aligned} \sqrt{\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 + A^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu} \phi(t, \mathbf{x}) &= \frac{mc}{\hbar} \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 A^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu} \phi(t, \mathbf{x}) \\ &= \frac{mc}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} c_n (A^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu)^n \phi(t, \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (A^{\mu\nu}: \text{a dimensionless matrix, } c_n: \text{constants}) \quad (3.1.2)$$

のような無限階の微分を含めることも locality を破るため禁止する。operator の関数が Taylor 展開で与えられていた事を思い出そう。

さて、上のような locality の制約により、Lagrangian は時空上 $\mathcal{M}^{1,d}$ の各点 (t, \mathbf{x}) の情報の和ないし積分で書ける筈である。この局所的な情報を Lagrangian 密度と言ひ、 \mathcal{L} と書く。当然 Lagrangian は $L := \int d^d x \mathcal{L}$ 、作用は $S = \int dt L = \int d^D x \mathcal{L}$ である。場の変分 $\phi \mapsto \phi + \delta\phi$ のもとで作用の変分は

$$\begin{aligned} \delta S &= \int d^D x [\mathcal{L}(\phi + \delta\phi, \partial\phi + \partial(\delta\phi)) - \mathcal{L}] \\ &= \int d^D x \left[\delta\phi \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\phi} + \partial_\mu(\delta\phi) \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial_\mu\phi)} \right] \\ &= \int d^D x \delta\phi \left[\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\phi} - \partial_\mu \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial_\mu\phi)} \right] + (\text{surface term}) \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

であり、作用の停留条件 $\delta S = 0$ から場の Euler-Lagrange 方程式は

$$0 = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\phi} - \partial_\mu \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial_\mu\phi)} \quad (3.1.4)$$

と導かれる。

3.1.2 Hamilton 形式

場の正準共役量（運動量と呼ばないのは、これ以外に場の理論の意味で momentum と呼ばれるべき適切な量、つまり energy-momentum tensor (3.1.7) があるからだ）は

$$\pi(t, x) := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \quad (3.1.5)$$

で定義される。Hamiltonian も解析力学の場合と全く同様に

$$H := \int d^D x \mathcal{H} \quad (3.1.6a)$$

$$\mathcal{H} := \pi(t, \mathbf{x}) \dot{\phi}(t, \mathbf{x}) - \mathcal{L}(t, \mathbf{x}) \quad (3.1.6b)$$

と定義される。

3.1.3 Energy-Momentum Tensor

Noether の定理は場の理論にも拡張できる。

時空並進に対応する保存量である energy-momentum tensor (stress-energy tensor, stress tensor, エネルギー運動量テンソル) は計量 tensor $g_{\mu\nu}$ を用いて

$$T^{\mu\nu} := -\frac{2}{\sqrt{|g|}} \frac{\partial L_{\text{matter}}}{\partial g_{\mu\nu}} \quad (3.1.7)$$

で定義される。ただし、一般相対論まで行くと重力場そのものの作用も気にしなければならないので、今は Lagrangian の中に重力を表す Einstein-Hilbert 項を含めていないと示すため L_{matter} と書いた。

3.1.4 Free Scalar Field の例

n 次元対角行列 A の (i, i) 成分が a_i であるとき

$$A = \text{diag}(a_1, a_2, \dots) = \begin{pmatrix} a_1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & a_i & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & a_n \end{pmatrix} \quad (3.1.8)$$

と書こう。 D 次元 Minkowski 空間の計量 (metric tensor) を

$$\eta_{\mu\nu} := \text{diag}(-1, +1, +1, \dots) \quad (3.1.9)$$

と定義しておく。他にも

$$\eta_{\mu\nu} := \text{diag}(+1, -1, -1, \dots) \quad (3.1.10)$$

とする流儀があるため、前者を East coast sign convention とか mostly plus signs と言い、後者の West coast convention または mostly minuses convention と区別することがある。複数の convention があるのは名前の通り太古の America で東海岸と西海岸の間に十分な交流がなかったせいで、 $(3+1)$ 次元時空に限って議論すればよい現象論屋の間では後者が未だに隆盛を誇っているようであるが、mostly minus では Euclid 空間への移行 $\eta_{\mu\nu} \rightarrow \delta_{\mu\nu}$ に不便であるし、 $\det g$ の符号が次元によって変わってしまうのも一般次元への拡張のためにかなり都合が悪いので、数理物理に手を出す人間は mostly plus の計量を用いることが多いようだ。物理的に表す内容は全く同じなので好きな方を使えばよいのだが、筆者個人としては mostly minus などという歴史上の遺物に慣れてしまう前に The West Coast Metric is the Wrong One など参照することを勧める。

3.2 場の量子化

古くは第 2 量子化と呼ばれる事もあったが、量子力学に何らかの操作を施して新たな量子論を得るのではなく、むしろ場の量子論の非相対論的極限で量子力学が現れるという理解の方が正しいため、この用語は廃れてしまった。同様に、かつては単純に量子力学を相対論的に拡張しようとした相対論的量子力学という試みもあったが、負の確率が現れてしまうなど様々な困難を孕んでおり、それらは場の量子論の視点からは自然に解決するため今更それを学ぶ価値はそう高くないだろう。

3.2.1 非相対論的な Scalar 場

3.2.2 非相対論的な Spinor 場

3.2.3 相対論的に可能な場

4 摂動展開と繰り込み

4.1 一般の相互作用が満たすべき性質

Wightman axioms、Haag's theorem、Coleman - Mandula theorem、Haag-Lopuszański-Sohnius theorem、locality、cluster decomposition principle

AppendixA 物理数学

A.1 線形代数

A.1.1 体

体 (field) とは実数 \mathbb{R} や複素数 \mathbb{C} など、その集合の中で四則演算が可能な集合である。このように集合の元に演算が定義されているとき、演算した結果も再び同じ集合の元となることを「集合が演算のもとで閉じている」という。つまり、体は加減乗除のもとで閉じている集合の事である。

例えば有理数 \mathbb{Q} は体だが、整数数 \mathbb{Z} は除算のもとで閉じていない（整数どうしの比は必ずしも整数にならない）ため体ではない。

A.1.2 Axioms of Vector Space

K を体として集合 V に

1. 和

$$\mathbf{u} + \mathbf{v} \in V \quad (\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V) \quad (\text{A.1.1})$$

2. scalar 倍

$$a\mathbf{u} \in V \quad (\forall \mathbf{u} \in V, \forall a \in K) \quad (\text{A.1.2})$$

の 2 つの演算が定義されていて、しかも $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in V$ および $\forall a, b \in K$ について vector space の公理と呼ばれる性質

1. 和の可換性

$$\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u} \quad (\text{A.1.3a})$$

2. 和の結合性

$$(\mathbf{u} + \mathbf{v}) + \mathbf{w} = \mathbf{u} + (\mathbf{v} + \mathbf{w}) \quad (\text{A.1.3b})$$

3. 加法零元 $\mathbf{0}$ の存在

$$\exists \mathbf{0} \text{ s.t. } \mathbf{u} + \mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{u} = \mathbf{u} \quad (\text{A.1.3c})$$

4. scalar 倍の結合性

$$a(b\mathbf{u}) = (ab)\mathbf{u} \quad (\text{A.1.3d})$$

5. scalar 倍の分配性

$$(a + b)\mathbf{u} = a\mathbf{u} + b\mathbf{u} \quad (\text{A.1.3e})$$

6. 加法の分配性

$$a(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = a\mathbf{u} + a\mathbf{v} \quad (\text{A.1.3f})$$

7. 乗法単位元 1 の存在

$$\exists 1 \text{ s.t. } 1\mathbf{u} = \mathbf{u} \quad (\text{A.1.3g})$$

8. 乗法零元 0 の存在

$$\exists 0 \text{ s.t. } 0\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (\text{A.1.3h})$$

が成り立つときに V を vector space と呼ぶ。

A.1.3 完全反対称 tensor と vector の外積、ベクトル解析の公式

n 階の完全反対称 tensor (completely anti-symmetric tensor、*¹⁰Levi-Civita symbol、エディントンの epsilon と呼ばれる事もあるが Edington's epsilon と洋書に書いてあることは少ない) を

$$\epsilon_{i_1, \dots, i_n} = \begin{cases} +1 & (i_1, \dots, i_n) \text{ が } (1, \dots, n) \text{ の偶置換} \\ -1 & (i_1, \dots, i_n) \text{ が } (1, \dots, n) \text{ の奇置換} \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (\text{A.1.4})$$

で定義する。特に (i_1, \dots, i_n) が $(1, \dots, n)$ の置換 σ であるとき、明らかにこれは置換の符号 $\text{sign}(\sigma)$ に一致する。

縮約されている添え字は和を取るためだけに使っているダミーの添え字 ($\sum_i a_i = \sum_j a_j$ のように、文字を変えても式の意味は変わらない) であることに気を付けると

$$\begin{aligned} \epsilon_{ijk} \partial_i \partial_j &= \epsilon_{jik} \partial_j \partial_i = -\epsilon_{ijk} \partial_i \partial_j \\ \therefore \epsilon_{ijk} \partial_i \partial_j &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.1.5})$$

のように ϵ と対称 tensor を潰すと必ず 0 になることが分かる。より一般に、 ϵ に限らない反対称 tensor と対称 tensor との足を 2 つ以上縮約すると必ず 0 になることも明らかだろう。

3 階の完全反対称 tensor については公式

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} \quad (\text{A.1.6})$$

が成り立つ。3 次元直交座標系で vector を成分表示すると、外積は

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k \quad (\text{A.1.7})$$

と書け、 ϵ の反対称性からベクトル解析の公式

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (\text{A.1.8a})$$

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c} \quad (\text{A.1.8b})$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{c}) = \text{rot}(\text{rot } \mathbf{c}) = \text{grad}(\text{div } \mathbf{c}) - \Delta \mathbf{c} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{c}) - (\nabla \cdot \nabla)\mathbf{c} \quad (\text{A.1.8c})$$

$$\nabla \times (\nabla \phi) = \text{rot}(\text{grad } \phi) = 0 \quad (\text{A.1.8d})$$

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = \text{div}(\text{rot } \mathbf{A}) = 0 \quad (\text{A.1.8e})$$

は簡単に示せる。

A.1.4 外積と Axial Vector

実は (A.1.7) は外積の性質ではなく、その定義である。ここで使われている ϵ_{ijk} は非相対論的な 3 次元空間 \mathbb{R} の回転群 $SO(3)$ の不変 tensor であり、得られた外積は vecctor のように見えるが実は空間反転の下で負号を出すという意味で真の vector ではない。

順を追って説明していこう。vector space に何らかの群 G が作用しているとする。

A.1.5 行列式、余因子行列と逆行列

D 次元正方行列 $g_{\mu\nu}$ の行列式 (determinant) は、抽象的には $g_{\mu\nu}$ を分解して出来る D 個の vector *¹¹

$$\mathbf{a}_1 := \begin{pmatrix} g_{11} \\ g_{21} \\ \vdots \\ g_{D1} \end{pmatrix}, \dots, \mathbf{a}_D := \begin{pmatrix} g_{1D} \\ g_{2D} \\ \vdots \\ g_{DD} \end{pmatrix}$$

*¹⁰ 反対称 (anti-symmetric) と歪対称 (skew-symmetric) は同じ意味。

*¹¹ うるさいことを言うと vector を太字にする流儀では行列は太字の大文字で書くのが普通であるが、物理では大文字小文字の使い分けにも意味がある場合が多いので、行列 (というか 2 階の tensor) は必ずしも大文字にも太字にもしない。

の関数

$$\det(g_{\mu\nu}) := \det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_D) \quad (\text{A.1.9})$$

であって、以下の 3 つの性質：

(i) 反対称性：

どの 2 つの vector の入れ替えのもとでも反対称

$$\det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_i, \dots, \mathbf{a}_j, \dots, \mathbf{a}_D) = -\det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_j, \dots, \mathbf{a}_i, \dots, \mathbf{a}_D) \quad (\text{A.1.10a})$$

(ii) 多重線形性：

どの vector についても線形

$$\det(\mathbf{a}_1, \dots, c\mathbf{a}_i + d\mathbf{b}_i, \dots, \mathbf{a}_D) = c\det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_i, \dots, \mathbf{a}_D) + d\det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{b}_i, \dots, \mathbf{a}_D) \quad (\text{A.1.10b})$$

(iii) 規格化条件：

単位行列 $\mathbb{1}$ に対して 1 を与える

$$\det(\mathbb{1}) = 1 \quad (\text{A.1.10c})$$

を満たすものと定義される。

等価であるが、より具体的には行列の成分を完全反対称テンソルで潰したもの

$$\det(g_{\mu\nu}) := \sum_{i_1, \dots, i_D} \epsilon_{i_1, \dots, i_D} g_{1, i_1} \cdots g_{D, i_D} \quad (\text{A.1.11})$$

とも定義され、 $\det(g) = |g|$ とも書く。 g の逆行列 g^{-1} の (μ, ν) 成分を $g^{\mu\nu}$ と書くことにすると

$$\frac{\partial \det(g)}{\partial g_{\mu\nu}} = g^{\mu\nu} \quad (\text{A.1.12})$$

が成り立つ。

行列 $g_{\mu\nu}$ の i 行と j 列を除いたものの行列式の $(-1)^{i+j}$ 倍

$$\Delta(i, j) := (-1)^{i+j} \begin{vmatrix} g_{1,1} & \cdots & g_{1,j-1} & g_{1,j+1} & \cdots & g_{1,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{i-1,1} & \cdots & g_{i-1,j-1} & g_{i-1,j+1} & \cdots & g_{i-1,D} \\ g_{i+1,1} & \cdots & g_{i+1,j-1} & g_{i+1,j+1} & \cdots & g_{i+1,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{D,1} & \cdots & g_{D,j-1} & g_{D,j+1} & \cdots & g_{D,D} \end{vmatrix} \quad (\text{A.1.13})$$

を余因子 (cofactor) と呼ぶ。余因子行列 (cofactor matrix) はその (i, j) 成分が (j, i) 余因子で与えられるような行列 Δ

$$(\Delta)_{i,j} := \det(\Delta(j, i)) \quad (\text{A.1.14})$$

と定義され、 $g_{\mu\nu}$ の逆行列は Cramer's rule

$$(g^{-1})_{i,j} = (g^{i,j}) = \frac{(\Delta)_{i,j}}{\det(g_{\mu\nu})} \quad (\text{A.1.15})$$

で書ける事が知られている。

A.1.6 L^p -norm

\mathbb{R}^n または \mathbb{C}^n 上の n 次元 vector v に対し、実数 $1 \leq p < \infty$ の範囲で L^p -norm を

$$\|v\|_p := \left(\sum_{i=1}^n |v_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (\text{A.1.16})$$

と定義する。 $p \rightarrow \infty$ の極限を L^∞ -norm ないし最大値 norm と言い、

$$\|v\|_\infty = \max_i |v_i| \quad (\text{A.1.17})$$

に一致する。特に $n \rightarrow \infty$ (つまり無限数列) の場合、上の p -norm を有限にするような vector の集合を l^p と呼ぶ。

測度空間についても和を積分に置き換えることにより同様の norm が定義でき、これを有限にする可測関数の集合を L^p 空間 (エルビー空間、あるいは Lebesgue space) と呼ぶ。

A.2 複素関数論

A.2.1 Taylor series expansion (テイラー級数展開)

実関数 $f(x)$ が点 a で無限回微分可能であるとする。

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^n(a)}{n!} (x-a)^n \quad (\text{A.2.1a})$$

$$f^n(a) := \left. \frac{d^n f}{dx^n} \right|_{x=a} \quad (\text{A.2.1b})$$

を $f(x)$ の a 周りでの Taylor 展開という。特に $a=0$ とした場合の Taylor 展開を Maclaurin series expansion (マクローリン展開) とも言う。Taylor 展開が収束し、かつ元の関数 $f(x)$ に一致するとき $f(x)$ は Taylor 展開可能であるという。例えば $\exp(-1/x^2)$ は $x=0$ で無限回微分可能でありその Taylor 展開も収束するが、恒等的に 0 になって $\exp(-1/x^2)$ に一致しない。従って $\exp(-1/x^2)$ は $x=0$ まわりで Taylor 展開可能ではない (このことは、 $\exp(-1/x^2)$ を複素関数と見たとき $x=0$ が真性特異点となっている事実を反映している)。

複素関数 $f(z)$ が領域 D で正則であるとする。点 a を中心とする領域 D 内の任意の円 C に対し、 $f(z)$ は C の内部で

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (z-a)^n \quad (\text{A.2.2a})$$

$$f^{(n)}(a) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C dz_0 \frac{f(z_0)}{(z_0-a)^{n+1}} \quad (\text{A.2.2b})$$

とべき級数展開できる。なお (A.2.2b) は $f(a)$ の n 階の導関数を与え、特に $n=0$ の場合を指して Cauchy's integral formula (コーシーの積分公式) と呼ぶことがある。

Taylor 展開可能な実関数または複素関数を解析関数 (analytic function) という。 $f(z)$ が複素関数の意味で z により微分できるとき正則関数 (holomorphic function) と言うのであったが、複素関数は領域 D で正則であれば無限階微分可能であり、しかもその導関数も D で正則なので、複素関数に対して解析関数と正則関数はほとんど区別しない。

A.2.2 Laurent series expansion (ローラン級数展開)

複素関数 $f(z)$ が点 a を孤立特異点を持つとする。また、点 a を中心とする円 C_1, C_2 (C_1 の中に a 以外の特異点があっても良く、 C_2 は C_1 の外側にあるとする) によって囲まれる領域を D とする。 C_1, C_2 上、領域 D のいずれにも特異点がないとき、領域 D 内の任意の z に対し、 D 内にあって C_1 を囲むような単純閉曲線 C を使って

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (z-a)^n \quad (\text{A.2.3a})$$

$$c_n := \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz_0 \frac{f(z_0)}{(z_0-a)^{n+1}} \quad (\text{A.2.3b})$$

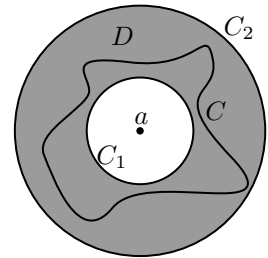


Figure1 単純閉曲線 C

が成り立つ。これを $f(z)$ の a 周りでの Laurent 級数展開という。特に (A.2.3a) の右辺のうち c_{-n} ($n > 0$) が現れる項を特異部 (singular part、主要部、principal part)、 c_n ($n \geq 0$) が現れる項を正則部 (regular part、analytic part) という。

A.2.3 極 (pole)、真性特異点 (essential singularity)、零点 (zero)

極とは、以下に定める孤立特異点の一種である。 $f(z)$ が a を m (> 0) 位の極 (m -th order pole) に持つとは、 $f(z)$ の Laurent 級数展開が $c_{-m} \neq 0$ かつ $n > m$ に対し $c_{-n} = 0$ を満たすことを言う。特に 1 位の極を単純極 (simple pole)、2 位の極を二重極 (double pole)、3 位なら triple pole、などともいう。

Laurent 展開の特異部が有限次で切れず負べきの項が無数に現れる場合、 a を真性特異点 (essential singularity) という。

$f(z)$ が a を m 位の零点 (m -th order zero) に持つとは、 $f(z)$ の Taylor 級数展開 (A.2.1a) が $c_m \neq 0$ かつ $0 \leq n < m$ に対し $c_n = 0$ を満たすことを言う。正則関数の零点は孤立し、この事実を零点孤立の原理という。

A.2.4 留数定理 (Residue theorem)

Laurent 級数展開

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n (z-a)^n \quad (\text{A.2.4})$$

において、 $\text{Res}\{f(z)dz, a\} := c_{-1}$ を $f(z)$ の点 $z = a$ における留数 (Residue) という。ただし本来これは Riemann 球面 \mathbb{CP}^1 上の微分形式に対し定義されるものだと示すため、単に $f(z)$ ではなく $f(z)dz$ と書いた。特に、 $f(z)$ が a を m 位の極に持つときは

$$\text{Res}\{f(z)dz, a\} = \lim_{z \rightarrow a} \frac{1}{(m-1)!} \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} \left[(z-a)^m f(z) \right] \quad (\text{A.2.5})$$

が成り立つ。 $f(z)$ が単純閉曲線 C 内で n 個の孤立特異点 a_1, \dots, a_n を除き正則であるとき

$$\oint_C dz f(z) = 2\pi i \sum_{k=1}^n \text{Res}\{f(z)dz, a_k\} \quad (\text{A.2.6})$$

が成り立つ。

A.2.5 Morera's theorem (モレラの定理)

以下の意味で、Cauchy の積分定理の逆が成り立つ：単連結領域 D で $f(z)$ が連続で、

$$\oint_C dz f(z) = 0 \quad (\text{A.2.7})$$

が D 内の任意の閉曲線 C に対し成り立つとする。このとき $f(z)$ は D 上で正則である。

A.3 初等関数および特殊関数

A.3.1 指数関数

指数関数 (exponential function) を

$$\exp(x) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \quad (\text{A.3.1})$$

により定める。この級数は複素平面全体で絶対収束するため、 $\exp(z)$ は整関数 (entire function、複素平面全体で正則な関数) を与える。

A.3.2 三角関数、双曲線関数

余弦 (cosine) 関数、正弦 (sine) 関数、正接 (tangent) 関数を指数関数を用いて

$$\cos \theta := \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2} \quad (\text{A.3.2a})$$

$$\sin \theta := \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i} \quad (\text{A.3.2b})$$

$$\tan \theta := \frac{\sin \theta}{\cos \theta} \quad (\text{A.3.2c})$$

と定義する。これらを総称して三角関数 (trigonometric function、circular function) という。

同様に双曲線関数 (hyperbolic function) を

$$\cosh \theta := \frac{e^{\theta} + e^{-\theta}}{2} = \cos(-i\theta) \quad (\text{A.3.3a})$$

$$\sinh \theta := \frac{e^{\theta} - e^{-\theta}}{2} = i \sin(-i\theta) \quad (\text{A.3.3b})$$

$$\tanh \theta := \frac{\sinh \theta}{\cosh \theta} \quad (\text{A.3.3c})$$

と定義する。それぞれ hyperbolic cosine、hyperbolic sine、hyperbolic tangent と言うが、 \cosh, \sinh, \tanh の記号は cosine hyperbolic (またはコッシュ)、sine hyperbolic (またはシンチ)、tangent hyperbolic (またはタンチ) などと発音される。native English speaker でもシンチとかタンチとか言う人は居るが、分かりづらだけでなくはっきり言ってクソダサいので cosine hyperbolic、sine hyperbolic などという方が良いと思う。

A.3.3 無限乗積展開

三角関数、双曲線関数について

$$\sin \pi x = \pi x \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{n^2}\right) \quad (\text{A.3.4a})$$

$$\sinh \pi x = \pi x \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x^2}{n^2}\right) \quad (\text{A.3.4b})$$

$$\cos \frac{\pi x}{2} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{(2n-1)^2}\right) \quad (\text{A.3.4c})$$

$$\cosh \frac{\pi x}{2} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x^2}{(2n-1)^2}\right) \quad (\text{A.3.4d})$$

が成り立つ。

A.3.4 Γ 関数

Γ 関数は $\operatorname{Re} z > 0$ の複素数 z に対し

$$\Gamma(z) := \int_0^\infty dt \, t^{z-1} e^{-t} \quad (\text{A.3.5})$$

により定義され、その性質 $\Gamma(1) = 1, \Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ から階乗 (factorial)

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (n \in \mathbb{N}_{\geq 0}) \quad (\text{A.3.6})$$

の複素数への一般化を与える。

重要な応用として、Gaussian integral (ガウス積分)

$$I := \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^\infty dt \, t^{-1/2} e^{-t} = 2 \int_0^\infty dx \, e^{-x^2} = \int_{-\infty}^\infty dx \, e^{-x^2} > 0 \quad (t = x^2) \quad (\text{A.3.7})$$

を求める事を考えよう。極座標に書き換えると

$$\begin{aligned} I^2 &= \int_{-\infty}^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \, e^{-(x^2+y^2)} = \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} r d\theta \, e^{-r^2} \\ &= 2\pi \int_0^\infty dr \, r e^{-r^2} = \pi \int_0^\infty dt \, e^{-t} \quad (t := r^2, \, dt = 2r dr) \\ &= \pi \Gamma(1) = \pi \end{aligned} \quad (\text{A.3.8})$$

すなわち $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = I = \sqrt{\pi}$ が求まる。初等的な置換積分により

$$\int_{-\infty}^\infty dx \, e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\text{A.3.9})$$

もすぐ分かり、より一般に $n \in \mathbb{N}_{\geq 0}$ に対して

$$\begin{aligned} \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) &= \int_0^\infty dt \, t^{n-1/2} e^{-t} \\ &= \left[\left(-\frac{d}{da}\right)^n \int_0^\infty dt \, t^{-1/2} e^{-at} \right]_{a=1} \\ &= \left[\left(-\frac{d}{da}\right)^n a^{-1/2} \int_0^\infty adt \, (at)^{-1/2} e^{-at} \right]_{a=1} \\ &= \left[\left(-\frac{d}{da}\right)^n \sqrt{\frac{\pi}{a}} \right]_{a=1} \\ &= \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi} \end{aligned} \quad (\text{A.3.10})$$

が得られる。ただし double factorial (二重階乗) を偶数、奇数それぞれについて

$$(2n)!! := \prod_{i=1}^n (2i) = 2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2n-2)(2n) \quad (\text{A.3.11a})$$

$$(2n-1)!! := \prod_{i=1}^n (2i-1) = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-3)(2n-1) \quad (\text{A.3.11b})$$

と定義した。

Γ 関数の $\operatorname{Re} z < 0$ への解析接続は Euler's reflection formula

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)} \quad (\text{A.3.12})$$

で与えられ、この公式からも $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$ が確かめられる。 Γ 関数は零点を持たないが (A.3.12) から分かるように $n \in \mathbb{N}_{\geq 0}$ に対して $x = -n$ を 1 位の極に持ち、その周りで

$$\Gamma(x) = \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{1}{x+n} - \gamma + \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} \right) + \mathcal{O}(x+n) \quad (\text{A.3.13})$$

$$\gamma := \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \log n \right) \simeq 0.5772 \quad (\text{A.3.14})$$

と展開できる。ただし γ は Euler-Mascheroni constant (オイラー定数) である。

なお、上で与えた Γ 関数の解析接続や極周りでの展開は Euler-Mascheroni constant を使って

$$\frac{e^{-\gamma x}}{\Gamma(x+1)} = \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{x}{n} \right) e^{-x/n} \quad (\text{A.3.15a})$$

$$\frac{\sin \pi x}{\pi x} = \prod_{n=-\infty}^{\infty} \left(1 + \frac{x}{n} \right) e^{-x/n} \quad (\text{A.3.15b})$$

なる無限乗積展開から正当化される。

A.3.5 Fresnel integral

Fresnel integral (フレネル積分) は Gauss 積分 (A.3.9) の $\alpha \in \mathbb{C}$ への拡張であり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{for } \operatorname{Re} \alpha \geq 0 \quad (\text{A.3.16})$$

と求まる。

A.3.6 超幾何関数 (confluent hyper-geometric function)

Pochhammer symbol を

$$(x)_n := \frac{\Gamma(x+n)}{\Gamma(x)} \quad (\text{A.3.17})$$

で定義する。一般化された超幾何関数 (generalized hyper-geometric function) は $|z| < 1$ で収束するべき級数

$${}_rF_s(a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_s; z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_1)_n \cdots (a_r)_n}{(b_1)_n \cdots (b_s)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (\text{A.3.18})$$

で定義される解析関数で、 a_1, \dots, a_r 同士、または b_1, \dots, b_s 同士を交換しても全く同じ関数を与える。

このうち、特に

$$F(a, bc; z) := {}_2F_1(a, b, c; z) \quad (\text{A.3.19})$$

を Gauss の超幾何関数、

$$F(a, b; z) := {}_1F_1(a, b; z) \quad (\text{A.3.20})$$

を合流型超幾何関数 (confluent hyper-geometric function)、あるいは Kummer の関数などという。

A.3.7 Sturm-Liouville equation

任意の 2 階線形微分方程式は Sturm-Liouville equation (スツルム・リウビル型微分方程式) に変形できる。その解についてはかなり一般論 (離散固有値を持つ、直交性を満たす、多くの場合 Rodrigues' formula (ロドリゲス表示、ロドリグ公式など) で書けるなど) が存在し、Sturm-Liouville 理論と呼ばれる。

A.3.8 Hermite 多項式

Hermite 多項式は Hermite 微分方程式

$$y'' + xy' + ny = 0 \quad (\text{A.3.21})$$

の解であり、 $H_0(x) = 1, H_1(x) = x$ として次の漸化式

$$0 = H_{n+1}(x) - xH_n(x) + nH_{n-1}(x) \quad (\text{A.3.22a})$$

$$H'_n(x) = nH_{n-1}(x) \quad (\text{A.3.22b})$$

および直交性

$$\int dx H_n(x) H_m(x) e^{-x^2/2} = n! \sqrt{2\pi} \delta_{nm} \quad (\text{A.3.23})$$

を満たす。

Rodrigues' formula は

$$H_n(x) = (-1)^n e^{+x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2} \quad (\text{A.3.24})$$

と与えられ、合流型超幾何関数 F を使って

$$H_{2n}(x) := (-1)^n (2n-1)!! F(-n, 1/2; x^2/2) \quad (\text{A.3.25a})$$

$$H_{2n+1}(x) := (-1)^n (2n+1)!! F(-n, 3/2; x^2/2) \quad (\text{A.3.25b})$$

とも書かれる。

A.4 Fourier 級数展開、Fourier 変換

A.4.1 Fourier 級数展開

周期 $2L$ の周期関数 $f(x)$ 、あるいは区間 $(a, a+2L)$ を定義域とする関数 $f(x)$ を周期関数に拡張したものについて

$$\tilde{f}(x) := \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{n\pi}{L} x} \quad (\text{A.4.1a})$$

$$c_n := \frac{1}{2L} \int_{-L}^L dx f(x) e^{-i \frac{n\pi}{L} x} \quad (\text{A.4.1b})$$

を複素 Fourier series (フーリエ級数)、

$$\tilde{f}(x) := \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi}{L} x + b_n \sin \frac{n\pi}{L} x \right) \quad (\text{A.4.2a})$$

$$a_n := \frac{1}{L} \int_{-L}^L dx f(x) \cos \frac{n\pi}{L} x \quad (\text{A.4.2b})$$

$$b_n := \frac{1}{L} \int_{-L}^L dx f(x) \sin \frac{n\pi}{L} x \quad (\text{A.4.2c})$$

を Fourier series などという。特に $\forall n$ に対して $a_n = 0$ のとき Fourier 正弦展開、 $b_n = 0$ のとき Fourier 余弦展開などということもある。

$f(x)$ が区分的になめらか、つまり $f(x), f'(x)$ がともに区分的に連続ならばその Fourier 級数は各点収束し、収束先は

$$\tilde{f}(x) = \frac{f(x+0) + f(x-0)}{2} \quad (\text{A.4.3})$$

で与えられる。 $f(x)$ が連続ならさらに強く Fourier 級数は関数列として一様収束するが、不連続関数の Fourier 級数は一様収束せず、広義一様収束、ないしコンパクト一様収束 (uniformly convergent on compact sets) しかない。不連続点 $x = a$ s.t. $\text{Disc}(f, a) := f(a+0) - f(a-0) \neq 0$ の付近では振幅 $\text{Disc}(f, a) \times 0.08949 \dots$ 程度の振動が起こり、ギブス現象 (Gibbs phenomenon) とか呼ばれる。激しく振動する成分は Riemann-Lebesgue lemma より積分に寄与しないので、 L^2 -norm で見る限り (2.1.41a) と全く同様に

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\| f(x) - \tilde{f}_N(x) \right\|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx \left| f(x) - \tilde{f}_N(x) \right|^2 = 0 \quad (\text{A.4.4a})$$

$$\tilde{f}_N(x) := \sum_{n=-N}^N c_n e^{i \frac{n\pi}{L} x} \quad (\text{A.4.4b})$$

のように収束している、ということである。

A.4.2 Fourier 変換

周期関数でないより一般の関数も Fourier 級数と同様に三角関数で展開したいというのは自然な要求だろう。特にこれは微分方程式を解くために役立つ。急減少関数 $f(x)$ の Fourier transform (フーリエ変換) $\tilde{f}(k)$ および inverse Fourier transform (逆フーリエ変換) を

$$\tilde{f}(k) := \int dx f(x) e^{-ikx} \quad (\text{A.4.5a})$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk \tilde{f}(k) e^{+ikx} \quad (\text{A.4.5b})$$

で定める。 $\frac{1}{2\pi}$ を Fourier 変換 (逆変換でなく) の定義に付けて $\tilde{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int dx f(x) e^{-ikx}$ としたり、 k の符号を逆にして $\tilde{f}(k) = \int dx f(x) e^{+ikx}$ としたり、(2.2.11) のように波動関数の規格化を気にする量子力学では

$\langle x|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \langle k|f\rangle e^{+ikx}$, $\langle k|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \langle x|f\rangle e^{-ikx}$ のように $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ が変換と逆変換の両方に現れたり、数値計算や結晶学では角周波数でなく周波数を用いて $\tilde{f}(k) = \int dx f(x)e^{+2\pi ikx}$ としたり、とにかく無数の流儀があるが、本質的な違いは何もない。

上の逆変換は Dirac delta 関数の Fourier 表示

$$\delta(x-y) = \int \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-y)} \quad (\text{A.4.6})$$

により正当化される。

Fourier 変換は不確定性関係という良くない性質を持つため、画像処理などの分野では wavelet 解析という拡張を考えることがある。

AppendixB 量子力学の公式

記号が煩雑になるのを避けるため、以下では誤解の恐れがない場合は適宜 operator を表す $\hat{\cdot}$ を省略する。

B.1 Operator の基本的な性質

B.1.1 交換関係・反交換関係

証明は読者の演習問題とする。

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (\text{B.1.1})$$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \{\hat{B}, \hat{A}\} \quad (\text{B.1.2})$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \quad (\text{B.1.3})$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\} - \{\hat{A}, \hat{C}\}\hat{B} \quad (\text{B.1.4})$$

$$\begin{aligned} \{\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\} &= \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\} - [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + \{\hat{A}, \hat{C}\}\hat{B} \end{aligned} \quad (\text{B.1.5})$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad (\text{B.1.6})$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] \quad (\text{B.1.7})$$

特に (B.1.3) は繰り返し使うことにより

$$[\hat{A}, \hat{B}_1 \hat{B}_2 \cdots \hat{B}_n] = \sum_{i=1}^n \hat{B}_1 \cdots \hat{B}_{i-1} [\hat{A}, \hat{B}_i] \hat{B}_{i+1} \cdots \hat{B}_n \quad (\text{B.1.8})$$

と拡張できる。

B.1.2 Baker-Campbell-Hausdrff formula

Baker-Campbell-Hausdrff formula は

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = \exp \left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12} [\hat{A} - \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \cdots \right) \quad (\text{B.1.9})$$

である（証明のためには $e^{\hat{C}(t)} = e^{t\hat{A}} e^{t\hat{B}}$ すなわち $\hat{C}(t) = \log(e^{t\hat{A}} e^{t\hat{B}})$ とおき、右辺の Taylor 展開を計算した後 $t = 1$ とおけばよい。B.2.1 も参照のこと）。特に交換関係が c -数 $[\hat{A}, \hat{B}] = c$ の場合は交換子を 2 回以上取ると必ず消えるため

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{A}} = \exp \left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} c \right) \quad (\text{B.1.10})$$

となる。

B.2 Unitary Transformation

(B.1.9) を示すのと全く同様の論法で、Hermitian とは限らない任意の operator A, B に対して

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \cdots \quad (\text{B.2.1})$$

が示せるが、ここでは一応証明を載せておこう。

B.2.1 Taylor 展開を用いた証明

記号 C_i を漸化式

$$C_0(A, B) := B, \quad C_{n+1}(A, B) := [A, C_n(A, B)] \quad (\text{B.2.2})$$

で定義すると、示すべき式 (B.2.1) は

$$e^A B e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} C_n(A, B) \quad (\text{B.2.3})$$

となる。これを示すために実 parameter s を導入し、左辺を $s = 0$ の周りで展開する：

$$e^{sA} B e^{-sA} = e^{sA} C_0(A, B) e^{-sA} \quad (\text{B.2.4a})$$

$$\frac{d}{ds} \left[e^{sA} B e^{-sA} \right] = A e^{sA} B e^{-sA} - e^{sA} B A e^{-sA} = e^{sA} [A, B] e^{-sA} = e^{sA} C_1(A, B) e^{-sA} \quad (\text{B.2.4b})$$

ここで $k \geq 0$ について

$$\frac{d^k}{ds^k} \left[e^{sA} B e^{-sA} \right] = e^{sA} C_k(A, B) e^{-sA} \quad (\text{B.2.5})$$

を仮定すると

$$\begin{aligned} \frac{d^{k+1}}{ds^{k+1}} \left[e^{sA} B e^{-sA} \right] &= \frac{d}{ds} \left[e^{sA} C_k(A, B) e^{-sA} \right] \\ &= A e^{sA} C_k(A, B) e^{-sA} - e^{sA} C_k(A, B) A e^{-sA} \\ &= e^{sA} [A, C_k(A, B)] e^{-sA} \\ &= e^{sA} C_{k+1}(A, B) e^{-sA} \end{aligned} \quad (\text{B.2.6})$$

を得るため、帰納法から任意の n について

$$\frac{d^n}{ds^n} \left[e^{sA} B e^{-sA} \right] = e^{sA} C_n(A, B) e^{-sA} \quad (\text{B.2.7})$$

が示された。これにより、左辺の $s = 0$ 周りの Taylor 級数を得る：

$$\begin{aligned} e^{sA} B e^{-sA} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n}{ds^n} \left(e^{s'A} B e^{-s'A} \right) \right]_{s'=0} s^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[C_n(A, B) \right] s^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} C_n(A, B) \end{aligned} \quad (\text{B.2.8})$$

最後に $s = 1$ と置けば^{*12}、左辺の展開が右辺に一致したことになり、望む公式 (B.2.3) を得る。

^{*12} 与えられた A, B に対し、この級数展開の収束半径が 1 より大きいことは仮定する。もともと operator の関数は Taylor 展開 (2.1.11) で定義されていたので、Taylor 展開出来ない場合を考える必要はない。

B.2.2 特殊な場合

特に交換関係が c -数の場合 $[\hat{A}, \hat{B}] = c$ には

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + c \quad (\text{B.2.9})$$

が得られ、operator の固有値の原点をずらす操作になっていることが分かる。また、(2.1.19) の直下で指摘したように Hermitian operator $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$ を使って $\hat{A} = i\hat{O}$ と取った場合は $e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}}$ は \hat{B} の unitary transformation となっている。

以上の2つの事実を合わせると、例えば正準変数 $[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ について $\hat{A} = -\frac{a}{i\hbar}\hat{p}_j, \hat{B} = \hat{q}_i$ として公式を使うことで

$$e^{-\frac{a}{i\hbar}\hat{p}_j} \hat{q}_i e^{\frac{a}{i\hbar}\hat{p}_j} = \hat{q}_i + a\delta_{ij} \quad (\text{B.2.10})$$

が言える。これは運動量が並進対称性に対応する保存量であることを反映しており、より一般の対称性変換に対応する保存量についても類似の結果が知られている。

B.3 保存電荷と対称性変換の生成子

$$|\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle = \exp\left(\frac{\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{i\hbar}\right) |\mathbf{x}\rangle \quad (\text{B.3.1})$$

B.3.1 Ehrenfest Theorem

正準変数 $[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ についてはさらに興味深い事実が成り立つ。 $C_n := \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i^n, \hat{p}_j]$ について

$$C_{n+1} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i^{n+1}, \hat{p}_j] = \hat{q}_i \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i^n, \hat{p}_j] + \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{p}_j]\hat{q}_i^n = \hat{q}_i C_n + \delta_{ij}\hat{q}_i^n \quad (\text{B.3.2})$$

なる漸化式が導けるが、これは初期条件 $C_0 = 0, C_1 = \delta_{ij}$ のもとで容易に

$$C_{n+1} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i^{n+1}, \hat{p}_j] = \delta_{ij}(n+1)\hat{q}_i^n \quad (\text{B.3.3})$$

と解け、多項式の微分と同じ振る舞いを与える。全く同様に $\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{p}_j^{n+1}] = \delta_{ij}(n+1)\hat{p}_j^n$ も示される。一般に operator の関数 F の定義 (2.1.11) は Taylor 展開で与えられていたので、

$$\frac{1}{i\hbar}[F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}), \hat{p}_i] = \frac{\partial F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\})}{\partial q_i} \quad (\text{B.3.4})$$

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_j, F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\})] = \frac{\partial F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\})}{\partial p_j} \quad (\text{B.3.5})$$

なる公式が得られる。

時刻 t_0 で定義された任意の operator \hat{O} に対し、その Heisenberg 表示 (Heisenberg 描像、Heisenberg picture) を時間発展 operator (2.1.7) を用いて

$$\hat{O}(t) := \hat{U}(t; t_0)^\dagger \hat{O} \hat{U}(t; t_0) = \exp\left(-\frac{(t-t_0)}{i\hbar}\hat{H}\right) \hat{O} \exp\left(+\frac{(t-t_0)}{i\hbar}\hat{H}\right) \quad (\text{B.3.6})$$

と定義する。 \hat{H} の Schrödinger 描像と Heisenberg 描像は一致する。また、もちろん Schrödinger 描像で \hat{O} 自身が顕わに t に依存している場合も Heisenberg 描像は同様に定義できる。Heisenberg 描像の operator $F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}, t)$ と \hat{H} との交換関係は

$$\frac{d}{dt}F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}, t) = \frac{1}{i\hbar}[F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}, t), \hat{H}] + \frac{\partial}{\partial t}F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}, t) \quad (\text{B.3.7})$$

となり、Heisenberg equation of motion と呼ばれる。これは Poisson 括弧で書かれた正準方程式 (1.5.13) ないし任意の関数 F の時間発展 (1.5.14) と同一の構造であり、量子化とは $\{A, B\}_P$ を $\frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}]$ で置き換える操作である、という Bohr の対応原理 (correspondence principle) をある意味で正当化する。もちろん 2.1.2 節で述べたように、一般にある古典力学系に対して対応する量子力学系は一意に定まらないので「古典系を量子化する」という操作は well-defined ではなく、現代的にはむしろ量子力学を十分低 energy で macroscopic な系に適用すると古典力学を再現する、という理解が正しい。

References

- [1] Motohashi et al. "Healthy degenerate theories with higher derivatives" arXiv:1603.09355 [hep-th]
- [2] Tomio Petrosky, "サイクロトロン放射と光渦の理論的課題" J. Plasma Fusion Res. Vol.94, No.3 (2018)131-135.