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*

December 10, 2019

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

$$\boldsymbol{F} = m\ddot{\boldsymbol{x}} \tag{1.1.1}$$

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

$$F = -kx \tag{1.1.2}$$

であるので、Newton 運動方程式は

$$m\ddot{x} = -kx \tag{1.1.3}$$

となる。

ただし、この方程式は 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である。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。

 $^{^*}$ e-mail: shintaro.toita@ipmu.jp

1.2 Lagrange 力学

多くの力学系において、位置 x にある粒子に働く力は位置の関数 F(x) と書ける。この関数 F のように空間の各点 x に対しある vector F(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 F が保存力である

$$rot \mathbf{F} := \nabla \times \mathbf{F} = 0 \tag{1.2.1}$$

場合には scalar potential $\phi(x)$ が存在して

$$\mathbf{F} = -\nabla\phi \tag{1.2.2}$$

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 の分解定理は任意の 3 次元 vector 場 F(x) に対し vector potential A(x) と scalar potential $\phi(x)$ の組であって

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

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 $q_i(i=1,2,\ldots,3n)$ を用いて記述できる。これらをまとめて $\{q\}:=\{q_i|i=1,2,\ldots,3n\}$ と書く。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なので、時間の関数 $q_i(t)$ として与えられている。よって時間微分が定義でき、 $\dot{q}(t):=\frac{dq(t)}{t}$ 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。このとき、Lagrangian $L(\{q\}, \{\dot{q}\})$ を 6n 変数関数として

$$L := T - V \tag{1.2.4}$$

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:

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

このS を action (作用) と言い、I と書くこともある。

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

$$q_i(t) \mapsto (q_i + \delta q_i)(t) := q_i(t) + \delta q_i(t) \tag{1.2.6}$$

$$|q_i(t)| \gg |\delta q_i(t)| \qquad (\forall t)$$
 (1.2.7)

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

$$\begin{split} \delta S &:= \int dt \ L(\{q_i(t) + \delta q_i(t)\}, \{\dot{q}_i(t) + \delta \dot{q}_i(t)\}) \\ &\simeq \int dt \ \sum_i \left\{ \delta q_i(t) \frac{\partial}{\partial q_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) + \delta \dot{q}_i(t) \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right\} \end{split}$$

$$\simeq \int dt \sum_{i} \delta q_{i}(t) \left\{ \frac{\partial}{\partial q_{i}} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_{i}} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right\}$$
(1.2.8)

(ここで、部分積分による表面項が現れない事 $[\cdots]_{t=t_i}^{t_f}=0$ を仮定した)が消えること

$$\delta S = 0 \qquad (\forall \ \delta q_i(t), i) \tag{1.2.9}$$

$$\Leftrightarrow \qquad 0 = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad (\forall i)$$
 (1.2.10)

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。 (1.2.10) 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 $q_i=q_i(\{q'\})$ のもとで Euler-Lagrange 方程式が形を変えないことが示される。

1.2.1 調和振動子の例

n 次元調和振動子の場合 Lagrangian は

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

であるので、Euler-Lagrange 方程式は

$$0 = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

$$= \frac{d}{dt} \left(m \dot{q}_i \right) - \left(-m\omega^2 q_i \right)$$

$$= m \ddot{q}_i + m\omega^2 q_i$$
(1.2.12)

となり、確かに Newton の運動方程式を再現する。

1.3 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

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{1.3.1}$$

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

$$\dot{q}_i = \dot{q}_i(\{q\}, \{p\}, t) \tag{1.3.2}$$

のように解く事が出来、 *1 従って $\dot{q_i}$ を方程式系から消去できる。Euler-Lagrange 方程式は

$$\begin{cases}
\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i} \\
p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}
\end{cases}$$
(1.3.3)

 $^{^{*1}}$ 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。

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 (1.3.1) 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

$$H(\lbrace q \rbrace, \lbrace p \rbrace) := \left[\sum_{i} \dot{q}_{i} p_{i} - L(\lbrace q \rbrace, \lbrace \dot{q} \rbrace) \right]_{\dot{q} = \dot{q}(\lbrace q \rbrace, \lbrace p \rbrace, t)}$$
(1.3.4)

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。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

$$\frac{\partial}{\partial \dot{q}_{i}} \left[\sum_{j} \dot{q}_{j} p_{j} - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right] = \left[\sum_{j} \left(\delta_{ij} p_{j} \right) - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{i}} \right]
= \left[p_{i} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{i}} \right]
= 0$$
(1.3.5)

である。ただし、偏微分は $\{q\}$, $\{\dot{q}\}$, $\{p\}$ の全てを独立な変数と見做して行っていることに注意せよ。 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と

$$\begin{split} &\frac{\partial H}{\partial q_i} = \frac{\partial}{\partial q_i} \left[\sum_j p_j \dot{q}_j - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right]_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j(\{q\}, \{p\}, t)}{\partial q_i} - \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\{q\}, \{p\}, t)\})}{\partial q_i} \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \left[\frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} + \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial \dot{q}_j} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \left[\frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} + \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} p_j \right] \\ &= -\frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= -\frac{\dot{d}}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad \because \text{ Euler-Lagrange } \vec{D} \stackrel{\text{He}}{=} \vec{x} \\ &= -\dot{p}_i \\ &= -\dot{p}_i \\ &= \sum_j \left[\frac{\partial \dot{q}_j(\{q\}, \{p\}, t)}{\partial p_i} p_j - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right]_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= \sum_j \left[\frac{\partial \dot{q}_j(\{q\}, \{p\}, t)}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_j(\{q\}, \{q\}, \{\dot{q}\})} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_i - \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial \dot{q}_j} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_i - \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j \\ &= \dot{q}_i \end{aligned} \tag{1.3.7}$$

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 (1.3.6),(1.3.7) の解 $\{q(t)\}$, $\{p(t)\}$ を代入すると $\{q\}$, $\{p\}$ で書いた Euler-Lagrange 方程式 (1.3.3) 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、(1.3.6), (1.3.7) 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、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。

1.4 調和振動子の例

n 次元調和振動子の一般化運動量は

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i \tag{1.4.1}$$

と通常の運動量の定義に一致するので、Hamiltonian は

$$H = \left[\sum_{i} p_{i} \dot{q}_{i} - L\right]_{\dot{q}_{i} = \frac{p_{i}}{m}}$$

$$= \sum_{i} p_{i} \frac{p_{i}}{m} - \sum_{i} \left(\frac{p_{i}^{2}}{2m} - \frac{m\omega^{2}}{2} q_{i}^{2}\right)$$

$$= \sum_{i} \left(\frac{p_{i}^{2}}{2m} + \frac{m\omega^{2}}{2} q_{i}^{2}\right)$$

$$(1.4.2)$$

となる。正準方程式は

$$\begin{cases} \dot{q}_{i} = \frac{\partial H}{\partial p_{i}} = \frac{p_{i}}{m} \\ \dot{p}_{i} = -\frac{\partial H}{\partial q_{i}} = -m\omega^{2}q_{i} \end{cases} \Leftrightarrow \ddot{q}_{i} = \frac{\dot{p}_{i}}{m} = \frac{-m\omega^{2}q_{i}}{m} = -\omega^{2}q_{i}$$

$$(1.4.3)$$

となって、やはり Newton の方程式を再現する。

2 量子力学の基礎