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）*

December 19, 2019

Contents

* e-mail: shintaro.toita@ipmu.jp

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:

grad, div, rot
scalar の変換性と vector の変換性
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
Planck の光量子仮説
簡単なベクトル解析、完全反対性テンソル
配位空間と相空間、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
Poisson 括弧と正準括弧
観測とコペンハーゲン解釈
昇降演算子（n 粒子系と 1 粒子系の第 n 励起の区別）
角運動量の代数、その unitary 表現
root 系、同時固有状態
spin 自由度
束縛状態の基礎（連続性、境界条件、規格化可能性、tunneling 効果、
Ehrenfest の定理）
無限小変換の生成子、Noether の定理と対称性（離散版）
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

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 $\boldsymbol{x}$ にある粒子に働く力は位置の関数 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ と書ける。この関数 $\boldsymbol{F}$ のように空間の各点 $\boldsymbol{x}$ に対しある vector $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ 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 $\boldsymbol{F}$ が保存力である

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

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

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

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 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ に対し vector potential $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ と scalar potential $\phi(\boldsymbol{x})$ の組であって

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

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、$\dot{q}(t) := \dfrac{dq(t)}{dt}$ 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。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：

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
\delta S &:= \int dt\ L(\{q_i(t) + \delta q_i(t)\}, \{\dot{q}_i(t) + \delta \dot{q}_i(t)\}) - S \\
&\simeq \int dt\ \sum_i \left\{ \delta q_i(t) \frac{\partial}{\partial q_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) + \delta \dot{q}_i(t) \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right\} \\
&= \sum_i \left[\delta q_i(t) \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right]_{t=t_i}^{t_f} \\
&\quad + \int dt\ \sum_i \delta q_i(t) \left\{ \frac{\partial}{\partial q_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right\}
\end{aligned} \tag{1.2.8}$$

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

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

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

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（一般座標変換、または点変換という）$q_i = q_i(\{q'\})$ のもとで

$$L'(\{q'\}, \{\dot{q'}\}) := L(\{q(\{q'\})\}, \{\dot{q}(\{q'\})\}) \tag{1.2.11}$$

と定めると、Euler-Lagrange 方程式が形を変えないこと

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \\
\Rightarrow 0 &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}'_i} - \frac{\partial L'}{\partial q'_i}
\end{aligned} \tag{1.2.12}$$

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

$$L = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{m}{2} \dot{q}_j{}^2 - \frac{m\omega^2}{2} q_j \right) \tag{1.2.13}$$

であるので、Euler-Lagrange 方程式は

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \\ &= \frac{d}{dt} \bigg(m\dot{q}_i \bigg) - \bigg(- m\omega^2 q_i \bigg) \\ &= m\ddot{q}_i + m\omega^2 q_i \end{aligned} \tag{1.2.14}$$

となり、確かに Newton の運動方程式を再現する。

1.2.2 Noether の定理と保存電荷

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た。作用の変分がある特別な $\delta q(t)$ のもとで消える場合、この特別な変分 $\delta q(t)$ は系の対称性である、という。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）とき T は系の対称性、あるいは不変性であるという。

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。無限小量 ϵ を、$\epsilon^2 = 0$ かつ任意の関数 $f(x)$ について $f(x+\epsilon) = f(x) + \epsilon \dfrac{df(x)}{dx}$ が厳密に成り立つような量と定義する。変換が連続なら、ある変換 $q(t) \mapsto q'(t)$ の十分近傍に ϵ を使って $q(t) \mapsto q'(t) + \epsilon\delta q'(t)$ と書ける変換も存在するはずだ。このような変換が系の対称性であるので、当然この変換の下で作用が変化してはおかしい。作用が変わらないためには、適当な関数 $F(t)$ が存在して作用の変化が

$$\begin{aligned} \delta S &:= S[q'(t) + \epsilon\delta q'(t)] - S[q'(t)] \\ &= \sum_i \left[\delta q_i(t) \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right]_{t=t_i}^{t_f} \\ &\quad + \int dt \ \sum_i \delta q_i(t) \left\{ \frac{\partial}{\partial q_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} L(\{q(t)\}, \{\dot{q}(t)\}) \right\} \\ &= \int dt \frac{dF(t)}{dt} \end{aligned} \tag{1.2.15}$$

のように全微分で書けていれば良いだろう。ここで、表面項はやはり適切な境界条件により消せると仮定している。

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 $\det \dfrac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \neq 0$ 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

$$\begin{cases} \dot{p}_i = \dfrac{\partial L}{\partial q_i} \\ \\ p_i = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \end{cases} \tag{1.3.3}$$

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 (1.3.1) 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

$$H(\{q\}, \{p\}) := \left[\sum_i \dot{q}_i p_i - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right]_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \tag{1.3.4}$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \left[\sum_j \dot{q}_j p_j - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right] &= \left[\sum_j \left(\delta_{ij} p_j \right) - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] \\ &= p_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \\ &\simeq 0 \end{aligned} \tag{1.3.5}$$

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と

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial q_i} &= \frac{\partial}{\partial q_i} \left[\sum_j p_j \dot{q}_j - L(\{q\}, \{\dot{q}\}) \right]_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j(\{q\}, \{p\}, t)}{\partial q_i} - \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)\})}{\partial q_i} \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \left[\left. \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} + \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \left. \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial \dot{q}_j} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \right] \\ &= \sum_j p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \left[\left. \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} + \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} p_j \right] \\ &= - \left. \frac{\partial L(\{q\}, \{\dot{q}\})}{\partial q_i} \right|_{\dot{q} = \dot{q}(\{q\}, \{p\}, t)} \\ &= - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad \because \text{Euler-Lagrange 方程式} \end{aligned}$$

[*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。

$$
\begin{aligned}
&= -\dot{p}_i && (1.3.6)\\
\frac{\partial H}{\partial p_i} &= \frac{\partial}{\partial p_i}\left[\sum_j \dot{q}_j p_j - L(\{q\},\{\dot{q}\})\right]_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)}\\
&= \sum_j \left[\frac{\partial \dot{q}_j(\{q\},\{p\},t)}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_j(\{q\},\{p\},t)\delta_{ij}\right] - \frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}(\{q\},\{p\},t)\})}{\partial p_i}\\
&= \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_i - \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i}\frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}\})}{\partial \dot{q}_j}\bigg|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)}\\
&= \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j + \dot{q}_i - \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} p_j\\
&= \dot{q}_i && (1.3.7)
\end{aligned}
$$

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 から得られるため (1.2.12) 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。

1.3.1 調和振動子の例

n 次元調和振動子の一般化運動量は

$$
p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i \tag{1.3.8}
$$

と通常の運動量の定義に一致するので、Hamiltonian は

$$
\begin{aligned}
H &= \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - L\right]_{\dot{q}_i = \frac{p_i}{m}}\\
&= \sum_i p_i \frac{p_i}{m} - \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{2} q_i^2\right)\\
&= \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q_i^2\right) && (1.3.9)
\end{aligned}
$$

となる。正準方程式は

$$
\begin{cases}
\dot{q}_i &= \dfrac{\partial H}{\partial p_i} = \dfrac{p_i}{m}\\[2ex]
\dot{p}_i &= -\dfrac{\partial H}{\partial q_i} = -m\omega^2 q_i
\end{cases}
\quad \Leftrightarrow \quad \ddot{q}_i = \frac{\dot{p}_i}{m} = \frac{-m\omega^2 q_i}{m} = -\omega^2 q_i \tag{1.3.10}
$$

となって、やはり Newton の方程式を再現する。

1.3.2 Poisson 括弧

Hamilton の正準方程式

$$
\begin{cases}
\dot{q}_i &= \dfrac{\partial H}{\partial p_i}\\[2ex]
\dot{p}_i &= -\dfrac{\partial H}{\partial q_i}
\end{cases} \tag{1.3.11}
$$

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

$$\{A, B\}_{\mathrm{P}} := \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial q_i} \right) \tag{1.3.12}$$

で定義すると、正準変数同士の Poisson 括弧は

$$\{q_i, p_j\}_{\mathrm{P}} = \delta_{ij}, \qquad \{p_i, q_j\}_{\mathrm{P}} = -\delta_{ij} \tag{1.3.13}$$

のようになり、正準方程式 (1.3.11) は

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \dfrac{\partial H}{\partial p_i} = \{q_i, H\}_{\mathrm{P}} \\ \\ \dot{p}_i = -\dfrac{\partial H}{\partial q_i} = \{p_i, H\}_{\mathrm{P}} \end{cases} \quad \therefore \quad \dot{r} = \{r, H\}_{\mathrm{P}} \qquad (r = q_i, p_j \quad \forall i, j) \tag{1.3.14}$$

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

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}_{\mathrm{P}} \tag{1.3.15}$$

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 $O:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ 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

$$1|\psi\rangle=|\psi\rangle \tag{2.1.1}$$

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

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

であることを言う。例えば時間反転操作に対応する operator T は anti-unitary (anti-linear かつ unitary)

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

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 $\eta:\mathcal{H}\times\mathcal{H}\to\mathbb{C}$ であって、

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

$$\langle\phi|\Big(a|\psi_1\rangle+b|\psi_2\rangle\Big)=a\langle\phi|\psi_1\rangle+b\langle\phi|\psi_2\rangle \qquad \text{for } \forall a,b\in\mathbb{C} \qquad \text{（線形性）} \tag{2.1.5}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle\geq 0,\quad \text{and}\quad \langle\phi|\phi\rangle=0\Leftrightarrow|\phi\rangle=0 \qquad \text{（正定値性）} \tag{2.1.6}$$

を満たすものがあることを言う。$\Big|\Big||\psi\rangle\Big|\Big|^2:=\langle\psi|\psi\rangle$ 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

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{2.1.7}$$

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

$$\hbar:=\frac{h}{2\pi} \tag{2.1.8}$$

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。

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

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{2.1.9}$$

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

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \tag{2.1.10}$$

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

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

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：

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

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、

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

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

$$|\psi\rangle^\dagger := \eta(|\psi\rangle\,,\ ) \tag{2.1.14}$$

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

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

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 $\mathcal{H}^*$ 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

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

となる operator と定めることが出来る。このような operator が一意的に存在することも 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

$$\hat{O} = \hat{O}^\dagger \tag{2.1.17}$$

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

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

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

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

が成り立つことを言う。例えば、時間発展 operator $\exp\left(\dfrac{\hat{H}t}{i\hbar}\right)$ は unitary operator の例である。

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

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

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。

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

$$\lambda\,\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\,\hat{O}\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,\hat{O}^\dagger\,|\psi\rangle = \Big[\langle\psi|\,\hat{O}\,|\psi\rangle\Big]^* = \lambda^*\,\langle\psi|\psi\rangle \tag{2.1.21}$$

$$\lambda = \lambda^* \quad \because \quad |\psi\rangle \neq 0 \tag{2.1.22}$$

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

$$\hat{O}\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle \tag{2.1.23}$$

$$\hat{O}\,|\phi\rangle = \theta\,|\phi\rangle \tag{2.1.24}$$

が直交すること

$$\lambda\,\langle\psi|\phi\rangle = \lambda^*\,\langle\phi|\psi\rangle^* = \Big[\langle\phi|\,\hat{O}\,|\psi\rangle\Big]^* = \langle\psi|\,\hat{O}^\dagger\,|\phi\rangle = \langle\psi|\,\hat{O}\,|\phi\rangle = \theta\,\langle\psi|\phi\rangle \tag{2.1.25}$$

$$\therefore \langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle = 0 \tag{2.1.26}$$

が示される。例えば $\hat{H}$ の固有状態を energy 固有状態、energy 固有状態が持つ固有値を 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）、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 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 (2.1.33) 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 $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \ldots, \hat{A}_n$ と、固有値 λ_i に属する $\hat{A}_i$ の固有 vector $|\psi\rangle \neq 0$ があるとしよう。可換性 $[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = 0$ から

$$\lambda_i \hat{A}_j |\psi\rangle = \hat{A}_j \lambda_i |\psi\rangle = \hat{A}_j \hat{A}_i |\psi\rangle = \hat{A}_i \hat{A}_j |\psi\rangle \tag{2.1.27}$$

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 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \ldots, |\psi_m\rangle$ を適切に取ること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よい)。

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、物理的状態空間

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

$$\langle A \rangle := \frac{\langle\psi| \hat{A} |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{2.1.28}$$

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

$$\hat{A} = \sum_n \hat{P}_n a_n + \int d\hat{P}(a) a \tag{2.1.29}$$

のように書くと、identity operator との関係

$$1 = \sum_n \hat{P}_n + \int d\hat{P}(a) \tag{2.1.30}$$

を用いて

$$|\psi\rangle = \sum_n \hat{P}_n |\psi\rangle + \int d\hat{P}(a) |\psi\rangle \tag{2.1.31}$$

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 に関しては確率 $\dfrac{\langle\psi| \hat{P}_n |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

2. 連続 spectrum a に関しては確率密度 $\dfrac{\langle\psi| d\hat{P}(a) |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

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 $a = \dfrac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}$ 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、物理的状態は単に 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、Bell inequality の破れにより今では実験的に否定されている。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 (2.1.26) 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 $\hat{O}_1, \hat{O}_2, \ldots, \hat{O}_n$ 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 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ を用いて $|\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\rangle$ 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）物理的状態を表すのである。

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 $|a_n, i\rangle\ (i = 1, \ldots, m)$ を取る。ここで、対応する固有空間への projection operator を

$$\hat{P}_n =: \sum_{i=1}^{m} |a_n, i\rangle \langle a_n, i| \tag{2.1.32}$$

$$d\hat{P}(a) =: da\, |a\rangle \langle a| \tag{2.1.33}$$

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 spetrum 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。

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、この場合は異なる状態 $|x\rangle, |y\rangle$ の内積が

$$\langle x|y\rangle = \delta(x - y) \tag{2.1.34}$$

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 (2.1.33) 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 $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \ldots$ が互いに直交する

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij} \tag{2.1.35}$$

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 $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \ldots$ を取る。任意の vector $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ が

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |e_n\rangle \tag{2.1.36}$$

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

$$c_n = \sum_m c_m \delta_{nm} = \sum_m c_m \langle e_n|e_m\rangle = \langle e_n| \sum_m c_m |e_m\rangle = \langle e_n|\psi\rangle \tag{2.1.37}$$

が従うため、上の式は

$$|\psi\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n|\psi\rangle \quad \text{for } \forall |\psi\rangle \tag{2.1.38}$$

$$\therefore 1 = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n| \tag{2.1.39}$$

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

$$\lim_{N\to\infty} \left\| |\psi\rangle - |\psi_N\rangle \right\|^2 = 0 \tag{2.1.40}$$

$$|\psi_N\rangle := \sum_{n=1}^{N} |e_n\rangle \langle e_n|\psi\rangle \tag{2.1.41}$$

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

$$\mathrm{tr}\,\hat{O} := \sum_n \langle e_n| \hat{O} |e_n\rangle \tag{2.1.42}$$

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（cyclicality）

$$\mathrm{tr}\left(\hat{A}\hat{B}\right) = \mathrm{tr}\left(\hat{B}\hat{A}\right) \tag{2.1.43}$$

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

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

と書き、上で述べた identity の spectral decomposition (2.1.30) 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

$$\langle\psi|\,\hat{P}_n\,|\psi\rangle = \sum_{1\le i\le m} \langle\psi|a_n, i\rangle \langle a_n, i|\psi\rangle = \sum_{1\le i\le m} \Big| \langle a_n, i|\psi\rangle \Big|^2 \tag{2.1.45}$$

2. 連続 spectrum a に関しては確率密度

$$\langle\psi|\,d\hat{P}(a)\,|\psi\rangle = da\,\langle\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle = da\Big|\langle a|\psi\rangle\Big|^2 \tag{2.1.46}$$

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

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

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。昇降 (raising and lowering) 演算子、はしご (ladder) 演算子などとも言う）を

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

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\;\hat{q}_i - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\;\hat{p}_i\right) \tag{2.1.49}$$

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

$$\hat{q}_i = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\left(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger\right) \tag{2.1.50}$$

$$\hat{p}_i = \frac{1}{2i}\sqrt{2\hbar m\omega}\left(\hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger\right) \tag{2.1.51}$$

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

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \tag{2.1.52}$$

が得られる。$\mathcal{H}$ が有限次元だとすると、(2.1.52) の両辺の trace を取ることで

$$\delta_{ij}\dim\mathcal{H} = \mathrm{tr}(\delta_{ij}) = \mathrm{tr}\left([\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]\right) = \mathrm{tr}\left(\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger\right) - \mathrm{tr}\left(\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_i\right) = \mathrm{tr}\left(\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger\right) - \mathrm{tr}\left(\hat{a}_i\hat{a}_j^\dagger\right) = 0 \tag{2.1.53}$$

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、つまりそれらは全て 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、

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}_k^2\right) \tag{2.1.54}$$

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{2.1.55}$$

から $\hat{H}$ の Hermiticity も自然に従う。公式 (A.1.2) を使って

$$[\hat{q}_i, \hat{H}] = i\hbar \frac{\hat{p}_i}{m} \tag{2.1.56}$$

$$[\hat{p}_j, \hat{H}] = -i\hbar\, m\omega^2 \hat{q}_j \tag{2.1.57}$$

が得られる。これらが調和振動子の正準方程式 (1.3.10) 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 (A.1.13) 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

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \sum_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \right) = \hbar\omega \sum_k \left(\hat{N}_k + \frac{1}{2} \right) \tag{2.1.58}$$

$$[\hat{N}_k, \hat{a}_i] = -\hbar\omega \hat{a}_i \delta_{ik} \tag{2.1.59}$$

$$[\hat{N}_k, \hat{a}_j^\dagger] = +\hbar\omega \hat{a}_j^\dagger \delta_{jk} \tag{2.1.60}$$

$$\hat{N}_k := \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \tag{2.1.61}$$

なる交換関係が得られる。ただし、k 番目の自由度の number operator $\hat{N}_k$ を定義した（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）。適当な energy 固有状態 $|\psi\rangle \neq 0$

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \tag{2.1.62}$$

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

$$\begin{aligned} \hat{H}\Big(\hat{a}_i |\psi\rangle \Big) &= \Big(\hat{a}_i \hat{H} + \Big[\hat{H}, \hat{a}_i \Big] \Big) |\psi\rangle \\ &= (\hat{a}_i E - \hbar\omega \hat{a}_i) |\psi\rangle \\ &= (E - \hbar\omega)\, \hat{a}_i |\psi\rangle \end{aligned} \tag{2.1.63}$$

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

$$\hat{H}\Big(\hat{a}_i^\dagger |\psi\rangle \Big) = (E + \hbar\omega)\, \hat{a}_i^\dagger |\psi\rangle \tag{2.1.64}$$

であり、$\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ は i 番目の自由度の energy level を enrgy 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 $|N_1, N_2, \ldots, N_n\rangle$ を用意できる。これは明らかに $\hat{H} = \hbar\omega \sum_k \left(\hat{N}_k + \frac{1}{2} \right)$ の固有状態でもあり、$\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ 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 $|N_1, N_2, \ldots, N_n\rangle$ によって $\hat{N}_i$ の期待値を取ると

$$\begin{aligned} N_i &= \langle N_1, N_2, \ldots, N_n| \, N_i \, |N_1, N_2, \ldots, N_n\rangle \\ &= \langle N_1, N_2, \ldots, N_n| \, \hat{N}_i \, |N_1, N_2, \ldots, N_n\rangle \\ &= \langle N_1, N_2, \ldots, N_n| \, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \, |N_1, N_2, \ldots, N_n\rangle \\ &= \Big|\Big| \hat{a}_i \, |N_1, N_2, \ldots, N_n\rangle \Big|\Big|^2 \geq 0 \end{aligned} \tag{2.1.65}$$

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：

$$\hat{a}_i \, |N_1, N_2, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n\rangle = 0 \tag{2.1.66}$$

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 $\hat{a}_i \left|N_1, N_2, \ldots, N_i > 0, \ldots, N_n\right\rangle \neq 0$ 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

$$\left\langle N_1, N_2, \ldots, N_n\right| \hat{a}_i^{\dagger} \hat{N}_i \hat{a}_i \left|N_1, N_2, \ldots, N_n\right\rangle \propto N_i - 1 < 0 \tag{2.1.67}$$

となり、(比例係数は単に vector $\hat{a}_i \left|N_1, N_2, \ldots, N_n\right\rangle$ 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

$$E = \hbar\omega \left(\sum_{k=1}^{n} N_k + \frac{n}{2} \right) \tag{2.1.68}$$

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 $E = \hbar\omega\left(N + \dfrac{n}{2}\right)$ の縮退度 $\deg(N)$ は上式を満たす非負整数 $(N_1, N_2, \ldots, N_n)$ の組の数、つまり

$$\deg(N) = {}_{N+n-1}C_N = \frac{(N+n-1)!}{N!\,(n-1)!} \tag{2.1.69}$$

である。

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 (2.1.66) 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態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 $\left|N_1, N_2, \ldots, N_n\right\rangle$ 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

$$\left|N_1, N_2, \ldots, N_i + n_i, \ldots, N_n\right\rangle \propto \left(\hat{a}_i^{\dagger}\right)^{n_i} \left|N_1, N_2, \ldots, N_n\right\rangle \tag{2.1.70}$$

$$\left|N_1, N_2, \ldots, N_i - n_i, \ldots, N_n\right\rangle \propto \left(\hat{a}_i\right)^{n_i} \left|N_1, N_2, \ldots, N_n\right\rangle \tag{2.1.71}$$

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 0 vector 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

$$\hat{a}_i \left|N_1, N_2, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n\right\rangle = 0 \tag{2.1.72}$$

$$\left\langle N_1, N_2, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n \middle| N_1, N_2, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n\right\rangle = 1 \tag{2.1.73}$$

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

$$\left|N_1, N_2, \ldots, N_i = n_i, \ldots, N_n\right\rangle = A_{n_i} \left(\hat{a}_i^{\dagger}\right)^{n_i} \left|N_1, N_2, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n\right\rangle \tag{2.1.74}$$

と書くと、$n_i = 1$ の場合には規格化条件

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

$$
\begin{aligned}
&= |A_1|^2 \langle N_1, N_2, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n| \left(\hat{N}_i + 1\right) |N_1, N_2, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n\rangle \\
&= |A_1|^2 \left(N_i \Big|_{N_i=0} + 1 \right) \qquad (2.1.75)
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
1 &= \langle N_1, N_2, \ldots, N_i = n_i + 1, \ldots, N_n | N_1, N_2, \ldots, N_i = n_i + 1, \ldots, N_n\rangle \\
&= \frac{|A_{n_i+1}|^2}{|A_{n_i}|^2} \langle N_1, N_2, \ldots, N_i = n_i, \ldots, N_n| \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \ldots, N_i = n_i, \ldots, N_n\rangle \\
&= \frac{|A_{n_i+1}|^2}{|A_{n_i}|^2} \left(N_i \Big|_{N_i=n_i} + 1 \right) \qquad (2.1.76)
\end{aligned}
$$

$$
\therefore \qquad |A_{n_i+1}|^2 = \frac{1}{n_i + 1} |A_{n_i}|^2 \qquad (2.1.77)
$$

なる漸化式が得られ、その解は $|A_{n_i}|^2 = \dfrac{1}{n_i!}$ 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

$$
|0\rangle := |N_1 = 0, N_2 = 0, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n = 0\rangle \qquad (2.1.78)
$$

を用いて

$$
\begin{aligned}
|N_1, N_2, \ldots, N_i = n_i, \ldots, N_n\rangle &= \frac{\left(\hat{a}_i^\dagger\right)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |N_1, N_2, \ldots, N_i = 0, \ldots, N_n\rangle \\
\therefore |N_1, N_2, \ldots, N_i, \ldots, N_n\rangle &= \prod_{i=1}^{n} \left(\frac{\left(\hat{a}_i^\dagger\right)^{N_i}}{\sqrt{N_i!}} \right) |0\rangle \qquad (2.1.79)
\end{aligned}
$$

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。

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

$$
|\alpha\rangle := \frac{1}{A} \exp(\alpha \hat{a}^\dagger) |0\rangle \qquad (2.1.80)
$$

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 (2.1.52) から (A.1.9) を導くのと全く同じ議論を繰り返せて

$$
\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1 \\
C_{n+1} &:= [\hat{a}, \left(\hat{a}^\dagger\right)^{n+1}] \\
&= \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \left(\hat{a}^\dagger\right)^n] + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \left(\hat{a}^\dagger\right)^n \\
&= \hat{a}^\dagger C_n + \left(\hat{a}^\dagger\right)^n \\
\therefore \quad [\hat{a}, \left(\hat{a}^\dagger\right)^{n+1}] &= C_{n+1} = (n+1) \left(\hat{a}^\dagger\right)^n \qquad (2.1.81)
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
[\hat{a}, \exp(\alpha\hat{a}^\dagger)] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} n \left(\hat{a}^\dagger\right)^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{(n-1)!} \left(\hat{a}^\dagger\right)^{n-1} \\
&= \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n = \alpha \exp(\alpha\hat{a}^\dagger)
\end{aligned}
\tag{2.1.82}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\hat{a} \left|\alpha\right\rangle &= \frac{1}{A}\Big(\exp(\alpha\hat{a}^\dagger)\cancel{\hat{a}} + [\hat{a}, \exp(\alpha\hat{a}^\dagger)] \Big) \left|0\right\rangle \\
&= \frac{1}{A} \alpha \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \left|0\right\rangle \\
&= \alpha \left|\alpha\right\rangle
\end{aligned}
\tag{2.1.83}
$$

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

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

最後の等式では、真空条件 $\left\langle 0\right| \hat{a}^\dagger = 0$ および真空が規格化されていること $\left\langle 0|0\right\rangle = 1$ 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

$$
\left|\alpha\right\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right) \exp(\alpha\hat{a}^\dagger) \left|0\right\rangle \tag{2.1.85}
$$

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

$$
D(\alpha) := \exp(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}) \tag{2.1.86}
$$

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 (2.1.82) を証明したのと全く同じ方法で

$$
[\hat{a}, \left(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}\right)^{n+1}] = \alpha(n+1) \left(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}\right)^n \tag{2.1.87}
$$

$$
\therefore \quad [\hat{a}, D(\alpha)] = \alpha D(\alpha) \tag{2.1.88}
$$

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

$$
\hat{a} D(\alpha) \left|0\right\rangle = \alpha D(\alpha) \left|0\right\rangle \tag{2.1.89}
$$

であることが分かる。

この displacement operator は unitary である

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

$$= 1 \tag{2.1.90}$$

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 (A.1.7) が使えて

$$D(\alpha) = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\exp(\alpha\hat{a}^\dagger)\exp(-\alpha^*\hat{a}) \tag{2.1.91}$$

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)\,|0\rangle \tag{2.1.92}$$

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。

3 自由場の量子論

場の量子論と言うと Feynman diagram を使った計算に皆さん憧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。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

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。適当な場 $\phi(\boldsymbol{x})$ とその空間微分 $\partial_i\phi(\boldsymbol{x})$ で書かれた Lagrangian L を用意しよう。空間 d 次元、時間 1 次元の $D := d+1$ 次元時空を考え、Lagrangian 密度を $\mathcal{L}$ と書く。当然 Lagrangian は $L := \int d^dx\mathcal{L}$ である。場の変分 $\phi \mapsto \phi + \delta\phi$ のもとで作用の変分は

$$\begin{aligned}\delta S &= \int d^{d+1}x \left[\mathcal{L}(\phi+\delta\phi, \partial\phi + \partial(\delta\phi)) - \mathcal{L}\right] \\ &= \int d^{d+1}x \left[\delta\phi\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\phi} + \partial(\delta\phi)\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial\phi)}\right] \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

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

AppendixA　量子力学の公式

A.1　交換関係・反交換関係の基本的な性質

証明は読者の演習問題とする。

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \tag{A.1.1}$$
$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \tag{A.1.2}$$
$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\} - \{\hat{A}, \hat{C}\}\hat{B} \tag{A.1.3}$$
$$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \tag{A.1.4}$$
$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] \tag{A.1.5}$$

Baker-Campbell-Hausdrff formula は

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = \exp\left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12}[\hat{A} - \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \cdots\right) \tag{A.1.6}$$

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。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

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{A}} = \exp\left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}c\right) \tag{A.1.7}$$

となる。

正準変数 $[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ については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

$$C_{n+1} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i^{n+1}, \hat{p}_j] = \hat{q}_i \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i^n, \hat{p}_j] + \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{p}_j]\hat{q}_i^n = \hat{q}_i C_n + \delta_{ij}\hat{q}_i^n \tag{A.1.8}$$

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

$$C_{n+1} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i^{n+1}, \hat{p}_j] = \delta_{ij}(n+1)\hat{q}^n \tag{A.1.9}$$

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 $\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{p}_j^{n+1}] = \delta_{ij}(n+1)\hat{p}^n$ 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、

$$\frac{1}{i\hbar}[F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}), \hat{p}_i] = \frac{\partial F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\})}{\partial q_i} \tag{A.1.10}$$
$$\frac{1}{i\hbar}[F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}), \hat{p}_j] = \frac{\partial F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\})}{\partial p_j} \tag{A.1.11}$$

なる公式が得られる。

任意の operator $\hat{O}$ に対し、その Heisenberg 表示（Heisenberg 描像、Heisenberg picture）を

$$\hat{O}(t) := \exp\left(-\frac{\hat{H}t}{i\hbar}\right)\hat{O}\exp\left(+\frac{\hat{H}t}{i\hbar}\right) \tag{A.1.12}$$

のように定義する。$\hat{H}$ 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

$$\frac{d}{dt}F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}, t) = \frac{1}{i\hbar}[F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}, t), \hat{H}] + \frac{\partial}{\partial t}F(\{\hat{q}\}, \{\hat{p}\}, t) \tag{A.1.13}$$

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 (1.3.14) ないし任意の関数 F の時間発展 (1.3.15) と同一の構造であり、量子化とは $\{A,B\}_{\mathrm{P}}$ を $\dfrac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{B}]$ 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、既に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。