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 11, 2019

Contents

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

電磁場中の古典荷電粒子、電磁場中の一般化運動量

昇降演算子（n 粒子系と 1 粒子系の第 n 励起の区別）

root 系、同時固有状態

固有関数の完全性（離散変数、連続変数）

束縛状態の基礎（連続性、境界条件、規格化可能性、tunneling 効果、

Heisenberg の運動方程式、Ehrenfest の定理)、

規格化（離散変数、連続変数）

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

簡単な散乱問題、ポテンシャル共鳴

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

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

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

（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

$$\delta S = 0 \qquad (\forall\ \delta q_i(t), i) \tag{1.2.9}$$
$$\Leftrightarrow \qquad 0 = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} \qquad (\ \forall i\ ) \tag{1.2.10}$$

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

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

となり、確かに Newton の運動方程式を再現する。

1.3 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

$$
\begin{cases}
\dot{p}_i = \dfrac{\partial L}{\partial q_i} \\[2ex]
p_i = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}
\end{cases}
\tag{1.3.3}
$$

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

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

[*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。

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

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial q_i} &= \frac{\partial}{\partial q_i}\left[\sum_j p_j\dot{q}_j - L(\{q\},\{\dot{q}\})\right]_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)} \\
&= \sum_j p_j\frac{\partial \dot{q}_j(\{q\},\{p\},t)}{\partial q_i} - \frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}(\{q\},\{p\},t)\})}{\partial q_i} \\
&= \sum_j p_j\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \left[\left.\frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}\})}{\partial q_i}\right|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)} + \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i}\left.\frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}\})}{\partial \dot{q}_j}\right|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)}\right] \\
&= \sum_j p_j\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} - \left[\left.\frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}\})}{\partial q_i}\right|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)} + \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i}p_j\right] \\
&= -\left.\frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}\})}{\partial q_i}\right|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)} \\
&= -\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \qquad \because \text{Euler-Lagrange 方程式} \\
&= -\dot{p}_i \qquad (1.3.6) \\
\frac{\partial H}{\partial p_i} &= \frac{\partial}{\partial p_i}\left[\sum_j \dot{q}_j p_j - L(\{q\},\{\dot{q}\})\right]_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)} \\
&= \sum_j \left[\frac{\partial \dot{q}_j(\{q\},\{p\},t)}{\partial p_i}p_j + \dot{q}_j(\{q\},\{p\},t)\delta_{ij}\right] - \left.\frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}\})}{\partial p_i}\right|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)} \\
&= \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i}p_j + \dot{q}_i - \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i}\left.\frac{\partial L(\{q\},\{\dot{q}\})}{\partial \dot{q}_j}\right|_{\dot{q}=\dot{q}(\{q\},\{p\},t)} \\
&= \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i}p_j + \dot{q}_i - \sum_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i}p_j \\
&= \dot{q}_i \qquad (1.3.7)
\end{aligned}
$$

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

$$
p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i \qquad (1.3.8)
$$

と通常の運動量の定義に一致するので、Hamiltonian は

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

となる。正準方程式は

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

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

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

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

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

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 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 状態空間と 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。

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

$$\text{For } \forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H} \text{ and } \forall a, b \in \mathbb{C}, \qquad O\Big(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle\Big) = aO|\psi_1\rangle + bO|\psi_2\rangle \tag{2.1.1}$$

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)

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

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 $\cdot\,(\;,\;)$ を持つとは、$\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ に対し複素数 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle := \cdot\,(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) \in \mathbb{C}$ を与える写像 $\cdot\,(\;,\;) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ であって、

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^* \qquad \text{（共役対称性）} \tag{2.1.3}$$

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

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \quad \text{and} \quad \langle\phi|\phi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\phi\rangle = 0 \qquad \text{（正定値性）} \tag{2.1.5}$$

を満たすものがあることを言う。Hilbert 空間とは内積空間であって完備な（直感的には、極限が定義されている）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定義されてい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

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{2.1.6}$$

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

$$\hbar := \frac{h}{2\pi} \tag{2.1.7}$$

と定義される。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

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{2.1.8}$$

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

$$\{\hat{A},\hat{B}\}:=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A} \tag{2.1.9}$$

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。

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：

$$[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij} \tag{2.1.10}$$

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、

$$\hat{H}:=H(\{\hat{q}\},\{\hat{p}\}) \tag{2.1.11}$$

を得られた量子力学系の Hamiltonian operator という。

2.2 Observables と hermitian conjugate

任意の vector $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ の hermitian conjugate $|\psi\rangle^\dagger$ を内積を使って

$$|\psi\rangle^\dagger:=\cdot\,(|\psi\rangle\,,\ ) \tag{2.2.1}$$

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

$$|\psi\rangle^\dagger\,|\phi\rangle:=\langle\psi|\phi\rangle=\cdot\,(|\psi\rangle\,,|\phi\rangle)\in\mathbb{C} \tag{2.2.2}$$

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、$\langle\psi|$ のなす集合 $\mathcal{H}^*$ は $\mathcal{H}$ の（位相的）双対空間となる。

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

$$\langle\psi|\,O^\dagger\,|\phi\rangle=|\psi\rangle^\dagger\,O^\dagger\,|\phi\rangle:=\Big(O\,|\psi\rangle\Big)^\dagger\,|\phi\rangle=\Big[\,\langle\phi|\,\Big(O\,|\psi\rangle\Big)\Big]^* \tag{2.2.3}$$

となる operator と定めることが出来る。

2.2.1 調和振動子の例

調和振動子を正準量子化してみよう。

$$\hat{H}=\sum_k\left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{q}_k^2\right) \tag{2.2.4}$$

$$[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{ij} \tag{2.2.5}$$

より、公式 (A.1.2) を使って

$$[q_i,H]=i\hbar\frac{\hat{p}_i}{m} \tag{2.2.6}$$

$$[p_j,H]=-i\hbar\;m\omega^2\hat{q}_j \tag{2.2.7}$$

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

$$[\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\hat{A}] \tag{A.1.1}$$

$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} \tag{A.1.2}$$

$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}\{\hat{B},\hat{C}\} - \{\hat{A},\hat{C}\}\hat{B} \tag{A.1.3}$$

$$[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger] \tag{A.1.4}$$