

紀要

数理科学グループ 山下大樹

はじめに

私は、研究部活動を通して、研究というより学修をメインに活動していました。この約 1 年で学んだことは理論物理学全体で、物理数学(解析学、複素関数論、線形代数、ベクトル解析, 群論など)、ニュートン力学、解析力学、電磁気学、光学、場の古典論、統計力学、特殊相対性理論、量子力学を学修しました。また、一般相対性理論と場の量子論を現在学修しています。今回、この一年特に学修した、電磁気学と量子力学を中心に紀要にまとめる。コンセプトは「量子論の再解釈」で量子論を考察や実験事実から作るというものだ。

また、第 0 章は特別発表会審査会で発表した内容を詳しく説明したものである。ほかの章は自身が勉強したときのまとめ考察ノートに対し、加筆修正を加えたものである。

目次

はじめに

○量子論の再解釈～光を通じた量子力学の理解～

0. 光を通じた量子力学の理解

1. 電磁場と電磁ポテンシャル

2. 電磁場のエネルギーと全慣性

3. 電磁場のフーリエ変換

4. 無次元振幅変数

5. 粒子の波

6. 粒子の波の重ね合わせ

7. 経路積分とシュレーディンガー方程式

8. 摂動論

9. フーリエ変換から見る演算子

10. 場の方程式

11. 電子場

12. 相対論的場の方程式

13. ディラック方程式とゲージ原理と 3 つの力 $SU(3) \times SU(2) \times U(1)_Y$

○まとめ・考察

○今後の目標

○参考文献

量子論の再解釈～光を通じた量子力学の理解～

0. 光を通じた量子力学の理解

通常、量子力学を初めて学ぶのは非常に難しい。なぜなら、粒子だと思っていたものが波と粒子の両方の性質を持つ「量子」を扱うため、量子力学の主張が受け入れ難いということが原因だと感じる。実際、私も粒子と波の性質を持つということも聞いてもよくわからなかった。粒子と波は、ある意味では真逆の性質を持つからである。粒子は形が定まっている粒である。それに対し、波は一般に決まった形はなく、様々な方向に広がっていく。私がそれを克服したきっかけは「光とは何か？なぜ直進しているように見えるのか？」を考えたことだ。

なぜこれを考えたのかは力学と光学には次のような関係があるからである。古典力学は粒子の軌跡を扱う学問に対し、幾何光学は光の軌跡、光線を扱う学問である。また、古典力学は最小作用の原理という、粒子は作用が最小となる経路をとるというものである。これに対し、幾何光学はフェルマーの原理、「与えられた2点間を通る光線の所要時間が最小となる経路をとる」というもので、これらはとても似ている。また、量子力学は波動関数と呼ばれるもので、主に運動の確率を扱う学問である。波動関数は波のような性質を持っている。また、波動光学は光を波として扱う学問のため、量子力学と波動光学はとても似ている。

では、ここで光とは何だろうか？ということについて考えてみる。光は電磁波という波であることを我々は知っている。しかし、それは経験的に知っているのではなく、学校等での学習、テレビなど様々なメディアで、光が波であるということを説明されていることで教えてもらったことで知っているのではないであろうか。私たちの日常生活で光(可視光)が波のように振舞っていると気づけるだろうか？よほど特殊な環境にいない限り私たち自身の力で気づくことは難しいだろう。実際、波の性質を示す現象として回折があるが、可視光領域の波長の光はほとんど身の回りの隙間では回折しない。実際、計算してみると、1mmの隙間を緑色の光を垂直にあてた際、広がる領域は約1.1mmで、0.1mmほど広がっている。0.1mmは人間の分解能の限界である。つまり、日常生活で、光が回り込んでいるとは気づけない。でも、暗い廊下から、部屋の明かりが漏れ出ている。つまり回り込んで見えるではないかといわれるかもしれない。しかし、これは、光が回り込んでいるというより、様々な方向から光が外に出て行っているから、広がって見えるだけである。

そのため、幾何光学というものが作られた。幾何光学はフェルマーの原理を原理として作られた学問である。フェルマーの原理は「与えられた2点間を通る光線の所要時間が最小となる経路をとる」というものである。

これを用いて説明できる現象として屈折の法則があげられる。光の速度が速い媒質から遅い媒質へ光が進んでいくとき、フェルマーの原理から、光線は直進するのではなく、速く進める媒質の方を多く進んでから目的地にたどり着く。これはちょうど、浜辺で溺れている人を助ける際にできるだけ陸地を走ってから助けようとするのと同じである。

フェルマーの原理を数学的にあつかいやすくするため、次のように条件を緩め、次からこれをフェルマーの原理と呼ぶことにする。「光線は所要時間が停留値となる経路をとって進む」というものである。ここで、媒質中の光速を v 、真空中の光速を c と表すことにする。媒質に固有の定数 $\mu = \frac{c}{v}$ を屈折率と呼ばれる量を定義できる。

次に、媒質が不均質で等方的な場合を考える。このとき、屈折率は座標の関数であり、 $\mu = \mu(x, y, z) = \mu(\mathbf{r})$ と表せる。点Aから出た光線がある経路を通って点Bに達したとする。このとき、媒質中の光速は $v(\mathbf{r}) = \frac{c}{\mu(\mathbf{r})}$ 。

したがって、光が媒質中の微小距離 $ds = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}$ を伝わるのに要する時間 $dt = \frac{ds}{v(\mathbf{r})} = \frac{\mu(\mathbf{r})}{c} ds$ 、2点AB間を伝わるのに要する時間はこれを経路にそって足し合わせた(積分した)

$$T = \int_A^B \frac{\mu(\mathbf{r})}{c} ds = \frac{1}{c} \int_a^b \mu(\mathbf{r}(s)) |\dot{\mathbf{r}}(s)|^2 ds \quad (1)$$

である。ただし、

$$\dot{\mathbf{r}}(s) = \frac{d\mathbf{r}(s)}{ds} \quad \mathbf{r}(a) = A \quad \mathbf{r}(b) = B \quad a \leq s \leq b \quad (2)$$

である。ここで、所要時間ではなく、光路長 $J = cT$ を考えると、(1) は次のようになる。

$$J[\mathbf{r}(s)] = \int_a^b \mu(\mathbf{r}(s)) |\dot{\mathbf{r}}(s)|^2 ds \quad (3)$$

これが極値をとるような経路を求めるには、オイラー-ラグランジュ方程式を解けばよく、この場合、ラグランジアンは、

$$L(\mathbf{r}(s), \dot{\mathbf{r}}(s)) = \mu(\mathbf{r}(s)) |\dot{\mathbf{r}}(s)|^2 \quad (4)$$

であるから、このラグランジアンに対するオイラー-ラグランジュ方程式は、

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = 0 \quad (5)$$

より、

$$\frac{d}{ds} \left(\mu(\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{r}}{ds} \right) = \nabla \mu(\mathbf{r}) \quad (6)$$

となり、これは光線方程式と呼ばれている。ここで光線ベクトル

$$\mathbf{p}_L = \mu(\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{r}}{ds} \quad (7)$$

を定義すると、(6) は次のようになる。

$$\frac{d\mathbf{p}_L}{ds} = \nabla \mu(\mathbf{r}) \quad (8)$$

この式はどこかで見たことがないだろうか？ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ にいる粒子のニュートンの運動方程式は、

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (9)$$

である。やはり、古典力学と幾何光学は似ている。この式を見る限り、粒子での運動量に対応する量が光学でいう、光線ベクトルである。また、ポテンシャルに対応する量が(符号が反対だが)屈折率である。つまり、運動量を変化させるものがポテンシャルの勾配(力)であるならば、光線ベクトルが屈折率の勾配によって変化させられているといえる。また式の類似性から、ここで光線方程式を解くことしない。

ここで、光線方程式を見る限り、独立な変数が3つあるように見える。しかし、実際には、

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (10)$$

つまり、

$$\left(\frac{dx}{ds} \right)^2 + \left(\frac{dy}{ds} \right)^2 + \left(\frac{dz}{ds} \right)^2 = |\dot{\mathbf{r}}(s)|^2 = 1 \quad (11)$$

であるから、独立な変数は2つしかない。ここで、(6)の光線方程式を解くことはある意味では無駄である。

実際の光学系では、多くの場合、3次元の実空間における「光軸」と呼ばれる軸に沿ってレンズなどの光学素子が配置されている。そこで、この光軸を z 軸に、そして曲線のパラメータを z にとり、曲線を $x = x(z)$ 、 $y = y(z)$ で記すことにする。つまり、 z 軸に垂直で x, y 軸を座標軸に持つ2次元平面としての仮想的可動スクリーン $\Sigma(z)$ があり、このスクリーンが z 軸方向に動いてゆくときに、光線がこのスクリーンを通過する点がこのスクリーン上、つまり、平面 $\Sigma(z)$ 上を動いてゆくときに見える。あるいは、三次元の曲線としての光線を例えば $z = 0$ に固定された標準スクリーン $\Sigma(0)$ 上に射影したと考えてもよい。その時光線は z をパラメータとしてこの $\Sigma(z)$ ないし

$\Sigma(0)$ 平面上を動く点で表される。 (x, y) 座標軸を持つこの2次元平面 Σ を配位空間という。そして、この配位空間の点を2次元ベクトル $\mathbf{q} = (x, y)$ で表す。また、 z による導関数をプライムで記して、

$$\mathbf{q}' = \frac{d\mathbf{q}}{dz} = \left(\frac{dx(z)}{dz}, \frac{dy(z)}{dz} \right) = (x', y') \quad (12)$$

と表す。より、微小距離 $ds = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}$ は次のように表される。

$$ds = \sqrt{\mathbf{q}'^2 + 1} dz \quad (13)$$

であるから、点A($q(a), a$)と点B($q(b), b$)を結ぶ曲線の光路長 J は、

$$J[\mathbf{q}(z)] = \int_a^b \mu(\mathbf{q}, z) \sqrt{\mathbf{q}'^2 + 1} dz \quad (14)$$

で、これに対するラグランジアンは、

$$L = \mu(\mathbf{q}, z) \sqrt{\mathbf{q}'^2 + 1} \quad (15)$$

である。このラグランジアンに対するオイラー-ラグランジュ方程式は、

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{\mu(\mathbf{q}, z) \mathbf{q}'}{\sqrt{\mathbf{q}'^2 + 1}} \right) = \sqrt{\mathbf{q}'^2 + 1} \frac{\partial \mu(\mathbf{q}, z)}{\partial \mathbf{q}} \quad (16)$$

である。これは配位空間上の光線方程式である。また、配位空間上での光線ベクトルは

$$\mathbf{p}_L = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}'} \quad (17)$$

である。よって、このラグランジアンに対するハミルトニアンは

$$H_L = \mathbf{q}' \cdot \mathbf{p}_L - L = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}'} \cdot \mathbf{p}_L - L \quad (18)$$

である。このハミルトニアンを全微分すると、

$$dH_L = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}'} \cdot d\mathbf{q}' + \mathbf{q}' \cdot d\mathbf{p}_L - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}'} \cdot d\mathbf{q}' - \frac{\partial L}{\partial z} dz = \mathbf{q}' \cdot d\mathbf{p}_L - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} - \frac{\partial L}{\partial z} dz \quad (19)$$

ここで、微分を

$$\mathbf{q}' = \boldsymbol{\phi}(z, \mathbf{q}, \mathbf{p}) \quad (20)$$

このように書くことにすれば、(18)と(19)は次のように表現される。(添え字のLは省略する。)

$$H_L = \boldsymbol{\phi}(z, \mathbf{q}, \mathbf{p}) \cdot \mathbf{p}_L - L \quad (21)$$

$$dH = \boldsymbol{\phi}(z, \mathbf{q}, \mathbf{p}) \cdot d\mathbf{p} - \left[\frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} + \frac{\partial L}{\partial z} dz \right]_{\mathbf{q}' = \boldsymbol{\phi}(z, \mathbf{q}, \mathbf{p})} \quad (22)$$

であるから、これに対応するハミルトン方程式は、

$$\frac{d\mathbf{q}}{dz} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dz} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \quad (23)$$

である。

次に、ハミルトンの点特性関数(アイコナル)について述べる。

いま、曲線 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s)$ を現実の経路とする光線に着目し、その光路長

$$J[\text{real path}] = \int_{s_0}^s \mu(\mathbf{r}) |\dot{\mathbf{r}}| ds = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \quad (24)$$

とし、これを、積分の始点 $\mathbf{r}(s_0)$ と終点 $\mathbf{r}(s)$ の関数と見なしたものを、ハミルトンの点特性関数(幾何学的位相) $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$ という。より、光線ベクトルは次のように表される。

$$\mathbf{p}_L(\mathbf{r}) = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}}, \quad \mathbf{p}_L(\mathbf{r}_0) = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_0} \quad (25)$$

この結果を配位空間で書けば、

$$\mathbf{p} = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}, \quad \mathbf{p}_0 = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_0} \quad (26)$$

である。ここで、アイコナールの満たすべき方程式について考える。 $\mathbf{p}_L^2 = \mu^2$ であるから(引数は \mathbf{r} と \mathbf{r}_0)、

$$\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial z}\right)^2 = \mu^2 \Leftrightarrow |\nabla V|^2 = \mu^2 \quad (27)$$

これはアイコナール方程式呼ばれている。これは非線形方程式であるため、一般に解くのは難しい。しかし、このアイコナールを求めるうまい手段があり、そればかりでなくハミルトン方程式の解を直接求める方法が、ヤコビにより提唱された。それがハミルトン=ヤコビ方程式を用いた解法である。ここから、ハミルトン=ヤコビ方程式について話す。

屈折率の不連続な変化はないとする。ラグランジアン $L(\mathbf{z}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$ に対して、ある関数 $S(\mathbf{z}, \mathbf{q}(\mathbf{z}))$ の全微分だけ異なるラグランジアン $L^* = L - \frac{dS}{dz}$ を作り、これに対する変分問題を考える。

$$J^* = \int_A^B L^* dz = \int_A^B \left(L - \frac{dS}{dz} \right) dz = J - [S(B) - S(A)] \quad (28)$$

であり、固定端変分問題では $\Delta S(B) = \Delta S(A) = 0$ ゆえ L^* と L は等価になり、 L^* に対する停留曲線が得られたならば、それは自動的に L に対する停留曲線になる。

そこで

$$\frac{d\mathbf{q}}{dz} = \mathbf{u}(\mathbf{z}, \mathbf{q}) \quad \text{に対して} \quad L^* = L - \frac{dS}{dz} = 0 \quad (29)$$

$$\frac{d\mathbf{q}}{dz} = \mathbf{u}(\mathbf{z}, \mathbf{q}) \quad \text{の近くでは} \quad L^* = L - \frac{dS}{dz} > 0 \quad (30)$$

となる配位空間上のベクトル場 $\mathbf{u}(\mathbf{z}, \mathbf{q})$ が求まったとする。そのとき、方程式

$$\frac{d\mathbf{q}}{dz} = \mathbf{u}(\mathbf{z}, \mathbf{q}) \quad (31)$$

を解いて得られる曲線群に属する曲線 $\mathbf{q}(\mathbf{z})$ に対して、 $J^* = 0$ であり、しかもその近くの曲線に対しては $J^* > 0$ ゆえ、この $\mathbf{q}(\mathbf{z})$ が停留曲線、つまり、実際の光線経路を与える。配位空間上のこのベクトル場 \mathbf{u} を測地場、極値曲線の場合という。そこで、このような測地場 \mathbf{u} が満たすべき条件を考える。

$$L^* = L - \frac{dS}{dz} = L - \frac{\partial S}{\partial z} - \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{q}' \quad (32)$$

ゆえ、 L^* が $\mathbf{q}' = \mathbf{u}$ で極値をとるためには

$$\frac{\partial L^*}{\partial \mathbf{q}'} \Big|_{\mathbf{q}'=\mathbf{u}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}'} \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{u}} - \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} = 0 \quad (33)$$

これを逆に解けば、(20)を用いて、

$$\mathbf{u} = \boldsymbol{\phi} \left(\mathbf{z}, \mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \right) \quad (34)$$

が得られる。これより、

$$[L^*(\mathbf{z}, \mathbf{q}, \mathbf{q}')] \Big|_{\mathbf{q}'=\boldsymbol{\phi}(\mathbf{z}, \mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}})} = \left[L - \frac{\partial S}{\partial z} - \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{q}' \right] \Big|_{\mathbf{q}'=\boldsymbol{\phi}(\mathbf{z}, \mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}})} = - \left[-L + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}'} \cdot \mathbf{q}' \right] \Big|_{\mathbf{q}'=\boldsymbol{\phi}(\mathbf{z}, \mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}})} - \frac{\partial S}{\partial z} = 0 \quad (35)$$

すなわち、(21)で定義したハミルトニアンを用いて、

$$H \left(\mathbf{z}, \mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \right) + \frac{\partial S}{\partial z} = 0 \quad (36)$$

この偏微分方程式をハミルトン=ヤコビ方程式という。光学ラグランジアン $L(\mathbf{z}, \mathbf{q}, \mathbf{q}') = \mu \sqrt{\mathbf{q}'^2 + 1}$ のとき、これに

対する光学ハミルトニアンは $H(z, \mathbf{q}, \mathbf{p}) = -\sqrt{\mu^2 - \mathbf{p}^2}$ の場合に(36)を書けば、

$$\frac{\partial S}{\partial z} = \sqrt{\mu^2 - \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}\right)^2} \quad \text{ないし} \quad \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2 = \mu^2 \Leftrightarrow |\nabla S|^2 = \mu^2 \quad (37)$$

これは、アイコナル方程式(27)と同じである。

偏微分方程式としてのハミルトン=ヤコビ方程式には S の導関数しか含まれていないので、 S がその解であれば、付加定数 C を加えた $S + C$ も解である。そこで、付加定数を除いて二つの積分定数 α_1, α_2 を含み、さらに条件

$$\det \left| \frac{\partial^2 S}{\partial q^i \partial \alpha_j} \right| \neq 0 \quad (38)$$

を満たす解をハミルトン=ヤコビ方程式の完全解または完全積分という。以下、 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2)$ とまとめて記す。いまは、ハミルトン=ヤコビ方程式の一つの完全解 $S = S(z, \mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha})$ が決まり、方程式

$$\frac{d\mathbf{q}}{dz} = \mathbf{u} = \boldsymbol{\phi} \left(z, \mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \right) \quad (39)$$

が立てられ、その積分曲線すなわち、極値曲線 Λ_S を求めることができる。

得られたその曲線に沿って確かにオイラー=ラグランジュ方程式が満たされていることは次のように示せる。(33)の両辺を z で微分して、

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} \right) - \frac{\partial^2 S}{\partial z \partial \mathbf{q}} - \mathbf{u} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \right) = 0 \quad (40)$$

他方で、ハミルトン=ヤコビ方程式(36)を曲線 Λ_S に沿って微分したものは、

$$\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \right) \right]^* + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right) = 0 \quad (41)$$

ただし、[]*内では、微分演算後、 \mathbf{p} に $\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}}$ を代入する。この2式から

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} \right) + \left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right]^* = \left(\mathbf{u} - \left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right]^* \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \right) \quad (42)$$

ここで、(23)から

$$\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right]^* = -\frac{\partial L(z, \mathbf{q}, \mathbf{u})}{\partial \mathbf{q}} \quad (43)$$

$$\left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right]^* = \mathbf{u} \quad (44)$$

したがって、(42)は

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{\partial L(z, \mathbf{q}, \mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \right) - \frac{\partial L(z, \mathbf{q}, \mathbf{u})}{\partial \mathbf{q}} = 0 \quad (45)$$

確かに測地場の積分曲線に沿ってオイラー=ラグランジュ方程式が満たされてる。しかし、実際には、微分方程式(39)を解く必要はなく、 S の完全解が一つ求まれば、単なる微分演算だけで光線経路を決定することができる。そのことをみるために、初めにハミルトン=ヤコビ方程式の完全解 $S(z, \mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha})$ を二つの積分定数 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2)$ の関数と見なしたとき、偏導関数 $\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\alpha}}$ の曲線 $\mathbf{q}(z)$ に沿った微分は、

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right) + \frac{d\mathbf{q}}{dz} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right) \quad (46)$$

他方で、ハミルトン=ヤコビ方程式(36)の S にこの完全解を代入したものを $\boldsymbol{\alpha}$ で微分することにより、

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\alpha}} H \left(z, \mathbf{q}, \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \right) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right) + \left[\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right]^* \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right) = 0 \quad (47)$$

この2式より、 $\mathbf{q}(z)$ が方程式(39)の解、つまり測地場の積分曲線であれば(44)より、

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right) = \left(\frac{d\mathbf{q}}{dz} - \left[\frac{\partial H^*}{\partial \mathbf{p}} \right] \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right) = 0 \quad (48)$$

これより、

$$\frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = \text{const.} \quad (49)$$

より、

$$\frac{\partial S(z, \mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = \boldsymbol{\beta} = (\beta^1, \beta^2) \quad (50)$$

と置くことができる。さらに、(38)より、これを \mathbf{q} についてとき、 $\mathbf{q} = \boldsymbol{\chi}(z, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ の形に表すことができる。

そうして得られた $\mathbf{q} = \boldsymbol{\chi}(z, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$ 、および

$$\mathbf{p}(z, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \left. \frac{\partial S(z, \mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}=\boldsymbol{\chi}(z, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})} \quad (51)$$

がハミルトン方程式の一般解である。これがヤコビの定理と呼ばれるものである。

これまで見てきた幾何光学の知識を使って古典力学を考えてみる。先に述べた通り、古典力学と幾何光学は同様の原理を基礎に持ち、そして、同一の数学的構造を有している。

簡単な場合として、粒子を質点と見なし、保存力 $\mathbf{F} = -\nabla V$ の下では、その粒子の運動方程式は

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla V \quad (52)$$

であり、エネルギー積分は

$$\frac{mv^2}{2} + V = E = \text{const.} \quad (53)$$

である(ここでは、非相対論的な運動を考える)。このとき、粒子の走行距離を $s = \int \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}$ とす

れば、その粒子の速さ $v = \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right|$ は

$$v = \frac{ds}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V(\mathbf{r}))} \quad (54)$$

より、

$$\frac{d}{dt} = \frac{ds}{dt} \frac{d}{ds} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V(\mathbf{r}))} \frac{d}{ds} \quad (55)$$

ゆえ、運動方程式(52)の左辺は

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m \sqrt{\frac{2}{m}(E - V(\mathbf{r}))} \frac{d}{ds} \left\{ \sqrt{\frac{2}{m}(E - V(\mathbf{r}))} \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right\} \quad (56)$$

したがって、軌道形を決定する方程式は

$$\frac{d}{ds} \left\{ \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))} \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right\} = \nabla \left\{ \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))} \right\} \quad (57)$$

これを光線方程式(6)と見比べると、保存力 $\mathbf{F} = -\nabla V$ の下の中での粒子の軌道は、屈折率が、

$$\mu(\mathbf{r}) = \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))} \quad (58)$$

の媒質中での光線の経路とまったく同じように決定れることが分かる。

したがって、フェルマーの原理に対応して、保存系の力学では力学的エネルギーの値が E (const.) の粒子の、空間の点 A から B までに至る軌道が積分

$$A = \int_A^B \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))} \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2} = \int_A^B mv ds \quad (59)$$

を停留値にする曲線で与えられると主張できる。

また粒子の運動方程式を得るためのラグランジアン L は次である。

$$L = \frac{mv^2}{2} - V(\mathbf{r}) \quad (60)$$

このとき運動量(正準運動量)は

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = \mathbf{p} \quad (61)$$

である。

では保存系の力学のアイコナルは何かについて考える。実際の粒子がとる経路 $\Lambda_{\text{real path}}$ に沿った(59)の積分は

$$A[\Lambda_{\text{real path}}] = \int_A^B \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \cdot \dot{\mathbf{r}} dt = \int_A^B \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \int_A^B mv ds = S_H(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0) \quad (62)$$

を考える。この積分経路 Λ を端点 AB を固定せずに変化させると次のようになる。

$$\delta \int_a^b \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \cdot \dot{\mathbf{r}} dt = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \cdot \Delta \mathbf{r} \right]_{t=a}^{t=b} - \int_a^b \left\{ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} \right\} \cdot \delta \mathbf{r}(t) dt \quad (63)$$

元の経路は実際の経路なのでオイラー-ラグランジュ方程式が満たされているので、寄与は積分の端からのものだけとなる。つまり、 $W_H(E, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) \equiv A[\Lambda_{\text{real path}}]$ として、

$$\delta W_H = \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}|_B - \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}|_A \quad (64)$$

すなわち、 W_H は \mathbf{r}_A と \mathbf{r}_B の関数で、これが力学におけるハミルトンの特性関数(アイコナル)である。これより、

$$\mathbf{p} = \nabla W_H(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}_0), \quad \mathbf{p}_0 = -\nabla_0 W_H(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \quad (65)$$

このことは、粒子が $W_H = \text{const.}$ の面に直交する方向に進んでゆくことを示している。ここで、 $\frac{p^2}{2m} + V = E$ であることを用いれば、

$$\frac{(\nabla W_H)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = E \quad (66)$$

これが幾何光学のアイコナル方程式に対応する、力学での特性関数に対する連立偏微分方程式である。

また、光路長を表す関数は

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}) ds \quad (67)$$

を光線束の位相(幾何学的位相)を与えるものとして導入した。この関数はアイコナル方程式を満たし、直接微分することにより、

$$\nabla V(\mathbf{r}) = \mu(\mathbf{r}) \mathbf{e}_t \Leftrightarrow |\nabla V(\mathbf{r})| = \mu(\mathbf{r}) \quad (68)$$

ただし、 \mathbf{e}_t は、 $V = \text{const.}$ の面に直交する光線経路の接線方向の単位ベクトルである。

私たちは光が波であるということを知っている。では、光を波としてとらえたらどのようなようになるかを議論する。

はじめに簡単のため、スカラー波(単色光の波)は次のように書ける。

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = a(\mathbf{r}) \exp\{i(\phi(\mathbf{r}) - \omega t)\} = a(\mathbf{r}) \exp\{i\Phi(\mathbf{r}, t)\} \quad (69)$$

ここに $a(\mathbf{r})$ は、空間的にゆっくり変わってゆく振幅。同位相面は $\Phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) - \omega t = \text{const.}$ 。微小時間 Δt の間にこの面が Δs 進んだとすると、この面の法線ベクトル \mathbf{e}_n として、

$$\phi(\mathbf{r} + \mathbf{e}_n \Delta s) - \omega(t + \Delta t) = \phi(\mathbf{r}) - \omega t \Leftrightarrow \phi(\mathbf{r} + \mathbf{e}_n \Delta s) - \phi(\mathbf{r}) = \omega \Delta t \Leftrightarrow |\nabla \phi(\mathbf{r})| \Delta s = \omega \Delta t \quad (70)$$

ところで波の位相速度は $v = \frac{\Delta s}{\Delta t}$ で与えられる。また、 $\frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda_0} = k_0$ として、

$$|\nabla \phi(\mathbf{r})| = k_0 v \quad (71)$$

である。(71)と(68)を見比べることによって、

$$|\nabla \phi(\mathbf{r})| = k_0 |\nabla V(\mathbf{r})| \quad (72)$$

かつ、同位相面が一致しているとして、 $\mathbf{e}_n = \mathbf{e}_t$ とすると、幾何学的位相と波動的位相の関係は、

$$\phi(\mathbf{r}) = k_0 V(\mathbf{r}) \quad (73)$$

が得られる。ここに、真空中の波長を λ_0 として、 $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$ は真空中の波動ベクトルの大きさ(波長)である。このとき、局所的波動ベクトルを

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{e}_t = k_0 \mu(\mathbf{r}) \mathbf{e}_t \quad (74)$$

として、曲線 $\mathbf{r}(s)$ に沿った位相変化は、

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} = k_0 \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mu(\mathbf{r}) ds \quad (75)$$

である。また、(69)は波動を表す関数であるから、波動方程式を満たす。つまり、

$$\frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = v^2 \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (76)$$

これに(69)に代入して整理すると、

$$v^2 \{(\nabla \phi)^2 - k_0^2 \mu^2\} + \frac{1}{a} \left(\frac{\partial^2 a}{\partial t^2} - v^2 \nabla^2 a \right) = \frac{i}{a^2} \left\{ v^2 \nabla \cdot (a^2 \nabla \phi) + \frac{\partial}{\partial t} (\omega a^2) \right\} = 0 \quad (77)$$

である。この実数部分は、 $k_0 v = \frac{2\pi v}{\lambda_0} = \frac{2\pi}{\mu T}$ 、 $\lambda = \frac{\lambda_0}{\mu}$ を用いて、幾何学的位相で表すと、

$$(\nabla V)^2 - \mu^2 + \frac{\mu^2}{4\pi} \left(\frac{T^2}{a} \frac{\partial^2 a}{\partial t^2} - \frac{\lambda^2}{a} \nabla^2 a \right) = 0 \quad (78)$$

つまり、位相の変化と振幅の時間的および空間的变化は一般に独立でない。しかし、 $\frac{\lambda^2 |\nabla^2 a|}{|a|} \ll 1$ 、 $\frac{T^2}{|a|} \left| \frac{\partial^2 a}{\partial t^2} \right| \ll 1$ という条件。つまり、振幅 a の、波長 λ の範囲での空間的变化や、周期 T の範囲での時間的变化が十分小さいとき、幾何学的位相 V の変化は振幅の変化とは無関係になり、それらの満たす方程式はアイコナル方程式に他ならない。つまり、幾何光学は波動光学に対する近似であり、その近似は、振幅や屈折率が空間的に変化する距離に比べて波長が十分小さく、また振幅が時間的に変化する時間が周期に比べて十分小さい範囲で有効であるといえる。

また、この波が表す光のエネルギー密度を

$$\rho = \omega a^2 = \omega |\Psi|^2 \quad (79)$$

と定義すれば、この時間変化は、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -v^2 \nabla \cdot (a^2 \nabla \phi) \quad (80)$$

であり、 μ の時間変化が無視できるとき、

$$\mathbf{j} = (va)^2 \nabla \phi \quad (81)$$

を定義する。これは光のエネルギー密度流(光波のエネルギー・フロー)である。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (82)$$

を満たす。また、式(80)は(77)の虚数部である。

次に波の伝播を記述するための“道具”であるプロパゲーターというものがある。屈折率が一定の媒質中で、近軸近似を用いるとする。このとき、プロパゲーターは次のようになる。

$$U(\mathbf{q}, z; \mathbf{q}_0, z_0) = \frac{\mu k_0}{2\pi i(z - z_0)} \exp \left\{ i\mu k_0 \left[(z - z_0) + \frac{1}{2} \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)^2}{z - z_0} \right] \right\} \quad (83)$$

である。これを用いると光の波動関数は次のようになる。(ただし、 $z > z_0$ のとき)

$$\psi(\mathbf{q}, z) = \int_S U(\mathbf{q}, z; \mathbf{q}_0, z_0) \psi(\mathbf{q}_0, z_0) d\mathbf{q}_0 = \frac{\mu k_0 \exp\{i\mu k_0(z - z_0)\}}{2\pi i(z - z_0)} \int_S \exp \left\{ \frac{i}{2} \mu k_0 \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0)^2}{z - z_0} \right\} \psi(\mathbf{q}_0, z_0) d\mathbf{q}_0 \quad (84)$$

ではこれを用いて回折について考える。状況として、光軸に対し直交するように、衝立がおりてあり、光軸を中心とする一辺の長さ $2R$ の正方形 S のスリットがあるとする。幾何光学で考えるとただ直進するだけである。また、 $\mathbf{q}_0 = (x_0, y_0)$ である。自由な光の波動関数が $\psi(\mathbf{q}_0, z_0) = a \exp(ik_0 z_0)$ であるとする。このとき、

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{q}, z) &= \frac{a\mu k_0 \exp\{i\mu k_0 z\}}{2\pi i(z - z_0)} \int_{-R}^R \int_{-R}^R \exp \left\{ \frac{i}{2} \mu k_0 \frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{z - z_0} \right\} dx_0 dy_0 \\ &= \frac{a\mu k_0 \exp\{i\mu k_0 z\}}{2\pi i(z - z_0)} \left(\int_{-R}^R \exp \left\{ \frac{i}{2} \mu k_0 \frac{(x - x_0)^2}{z - z_0} \right\} dx_0 \right) \left(\int_{-R}^R \exp \left\{ \frac{i}{2} \mu k_0 \frac{(y - y_0)^2}{z - z_0} \right\} dy_0 \right) \end{aligned} \quad (85)$$

である。積分の部分は

$$I = \int_{-R}^R \exp \left\{ \frac{i}{2} \mu k_0 \frac{(x - x_0)^2}{z - z_0} \right\} dx_0 = \int_{-\infty}^{\infty} G(x_0) \exp \left\{ \frac{i}{2} \mu k_0 \frac{(x - x_0)^2}{z - z_0} \right\} dx_0 \quad (86)$$

$$G(x_0) = \begin{cases} 1 & (-R \leq x_0 \leq R) \\ 0 & (x_0 < -R, R < x_0) \end{cases} \quad (87)$$

とすることができる。積分因子(87)は次のように近似できる。

$$G(x_0) \approx g(x_0) = \exp \left\{ -\frac{x_0^2}{2R^2} \right\} \quad (88)$$

これを用いれば積分 I は次のようになる。

$$I \approx \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{2} \mu k_0 \frac{x_0^2 - 2xx_0 + x^2}{z - z_0} - \frac{x_0^2}{2R^2} \right\} dx_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)}{2R^2(z - z_0)} x_0^2 - \frac{i\mu k_0 x}{z - z_0} x_0 + \frac{i\mu k_0}{2(z - z_0)} x^2 \right\} dx_0 \quad (89)$$

ここで、指数の肩を平方完成する。

$$\begin{aligned} \frac{i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)}{2R^2(z - z_0)} x_0^2 - \frac{i\mu k_0 x}{z - z_0} x_0 + \frac{i\mu k_0}{2(z - z_0)} x^2 &= \frac{i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)}{2R^2(z - z_0)} \left(x_0^2 - \frac{2R^2 i\mu k_0 x}{i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)} x_0 \right) + \frac{i\mu k_0}{2(z - z_0)} x^2 \\ &= \frac{i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)}{2R^2(z - z_0)} \left(x_0 - \frac{R^2 i\mu k_0 x}{i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)} \right)^2 + \frac{i\mu k_0 R^2 (i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)) + R^4 \mu^2 k_0^2}{2R^2(z - z_0)(i2R^2\mu k_0 - (z - z_0))} x^2 \\ &= \frac{i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)}{2R^2(z - z_0)} \left(x_0 - \frac{R^2 i\mu k_0 x}{i2R^2\mu k_0 - (z - z_0)} \right)^2 + \frac{-\mu^2 k_0^2 R^4 - i\mu k_0 R^2 (z - z_0)}{2R^2(z - z_0)(i2R^2\mu k_0 - (z - z_0))} x^2 \end{aligned} \quad (90)$$

より、(89)は次のようになる。

$$I \approx \sqrt{\frac{\pi 2R^2(z - z_0)}{(z - z_0) - i2R^2\mu k_0}} \exp \left\{ \frac{-\mu^2 k_0^2 R^4 - i\mu k_0 R^2 (z - z_0)}{2R^2(z - z_0)(i2R^2\mu k_0 - (z - z_0))} x^2 \right\} \quad (91)$$

である。よって、(85)は次のようになる。ただし、 $x^2 + y^2 = q^2$ とする。

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{q}, z) &= \frac{a\mu k_0 \exp\{i\mu k_0 z\}}{2\pi i(z-z_0)} \frac{\pi 2R^2(z-z_0)}{(z-z_0) - i2R^2\mu k_0} \exp\left\{\frac{-\mu^2 k_0^2 R^4 - i\mu k_0 R^2(z-z_0)}{2R^2(z-z_0)(i2R^2\mu k_0 - (z-z_0))} q^2\right\} \\
&= \frac{a\mu k_0 R^2}{2R^2\mu k_0 + i(z-z_0)} \exp\left\{\frac{(\mu^2 k_0^2 R^4 + i\mu k_0 R^2(z-z_0))((z-z_0) + i2R^2\mu k_0)}{2R^2(z-z_0)(4R^4\mu^2 k_0^2 + (z-z_0)^2)} q^2 + i\mu k_0 z\right\} \\
&= \frac{a\mu k_0 R^2}{2R^2\mu k_0 + i(z-z_0)} \exp\left\{\frac{-\mu^2 k_0^2 R^4(z-z_0) + i\{\mu k_0 R^2(z-z_0)^2 + 2R^6\mu^3 k_0^3\}}{2R^2(z-z_0)(4R^4\mu^2 k_0^2 + (z-z_0)^2)} q^2 + i\mu k_0 z\right\} \quad (92)
\end{aligned}$$

であり、この絶対値の2乗がその光の強度であるから、

$$\begin{aligned}
I(\mathbf{q}, z) = |\psi(\mathbf{q}, z)|^2 &= \frac{a^2 \mu^2 k_0^2 R^4}{4R^4 \mu^2 k_0^2 + (z-z_0)^2} \exp\left\{\frac{-2\mu^2 k_0^2 R^4(z-z_0)}{2R^2(z-z_0)(4R^4 \mu^2 k_0^2 + (z-z_0)^2)} q^2\right\} \\
&= \frac{a^2 R^2}{4R^2 + \left(\frac{z-z_0}{\mu k_0 R}\right)^2} \exp\left\{-\frac{q^2}{4R^2 + \left(\frac{z-z_0}{\mu k_0 R}\right)^2}\right\} \quad (93)
\end{aligned}$$

ここで、

$$(\Delta z)^2 = \left(\frac{z-z_0}{\mu k_0 R}\right)^2, \quad (\Delta q)^2 = 4R^2 + (\Delta z)^2, \quad I_0(z) = \frac{a^2 R^2}{4R^2 + \left(\frac{z-z_0}{\mu k_0 R}\right)^2} \quad (94)$$

とすると、

$$I(\mathbf{q}, z) = I_0(z) \exp\left\{-\frac{q^2}{(\Delta q)^2}\right\} \quad (95)$$

である。これによると強度分布は正規分布型である。そのため、 $q \leq \sqrt{2}\Delta q$ の範囲に全体の $\frac{2}{3}$ が含まれている。また、 Δz を波長で書くと

$$\Delta z = \frac{\lambda_0(z-z_0)}{2\pi\mu R} = \frac{\lambda_0}{R} \left(\frac{z-z_0}{2\pi\mu}\right) \quad (96)$$

である。つまり、スリットの大きさ R に対し、波長が十分小さいとき、つまり、 $\frac{\lambda_0}{R} \ll 1$ のとき、 Δq の値は小さくなる。つまり、幾何光学を使った場合と結果はほとんど一致する。逆に、スリットの大きさ R に対し、波長が同程度もしくは大きいとき、 Δq の値は大きくなり、これは光が様々な方向に広がってしまっていることを意味し、これは明らかに幾何光学を使った場合と結果は全然一致しない。

よって、幾何光学と波動光学には次のように言うことができる。

幾何光学は“隙間”に対し、波長が十分小さいときに使える近似の理論であるといえる。そして、光の経路の“ゆるみ”は0である。

波動光学は光全般(量子論的現象以外)に使える理論であるといえる。そして、光の経路の“ゆるみ”は Δq 程度である。

では、波動光学から幾何光学を見ると次のことが言える。幾何光学で再現される経路は波動光学では一番明るいところである。つまり、フェルマーの原理を守らない経路は守る経路に比べ、非常に弱く、他の経路と弱め合っているといえる。逆に守る経路付近では強め合っているといえる。

「光とは何か?なぜ直進しているように見えるのか?」という問いに対しては次のように言える。光は知っているわけではなく光が波動関数として重ね合わされ「最短時間で伝わる経路が強め合って光線として見えている」からであるといえる。

ではこの考え方をういて量子力学を作ってみる。粒子力学(古典力学)は想定される波動力学(量子力学)のある極限であると推測される。その際粒子力学にとっての波は、ド・ブロイによって提唱された「粒子に結び付けられた波」とは何だろうか?その問題をあくまで光学とのアナロジーに基づいて考えれば、幾何光学に「お

ける位相としてのアイコナル V に粒子力学におけるハミルトンの特性関数 W_H が(比例定数を除いて)対応する。それゆえ、波動光学における単色光の位相 $\Phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) - \omega t = k_0 V(\mathbf{r}) - \omega t$ にはエネルギー一定状態のハミルトンの主関数 $S_H(\mathbf{r}, t) = W_H(E, \mathbf{r}) - Et$ が対応するだろう。ただし関数 S_H の次元は(運動量) \times (長さ)もしくは(エネルギー) \times (時間)、(作用)を持つのにに対し、位相 Φ は無次元量であるから、 S_H に対しても作用の次元を持つある定数 \hbar で割り、力学において粒子に伴うと考えられる波動(ド・ブロイ波)の位相を $\Phi = \frac{S_H}{\hbar} = \frac{W_H}{\hbar} - \frac{E}{\hbar}t$ とする。こうすれば幾何光学における ϕ に対応するのが $\frac{W_H}{\hbar}$ 、角振動数に対応するが、 $\frac{E}{\hbar}$ となる。

ところで、幾何光学では、波動ベクトルは $\mathbf{k} = \nabla\phi$ すなわち、波長は $\lambda = \frac{2\pi}{|\nabla\phi|}$ であった。また古典力学では運動量は $\mathbf{p} = \nabla W_H$ ゆえ、先の対応から $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ であり、その波動の波長を

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (97)$$

と定めるのが合理的であろう。これがド・ブロイの関係であり、 λ はド・ブロイ波長と呼ばれる。同様にして $E = \hbar\omega$ の関係より、力学の波動の振動数は

$$\nu = \frac{E}{2\pi\hbar} \quad (98)$$

である。これがアインシュタインの関係である。この \hbar はプランク定数などと呼ばれている。したがって、粒子の波は

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a(\mathbf{r}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(W_H(E, \mathbf{r}) - Et)\right\} \quad (99)$$

ないし、より一般的には、

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a(\mathbf{r}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S_H(\mathbf{r}, t)\right\} \quad (100)$$

の形で書けると推測された。

これはほとんど正しく、これがさらに定式化されたのが経路積分である(のちの章でしっかり導く。)。その式は次のようになる。

$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S[b, a]\right\} \quad (101)$$

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K(x_b, t_b; x_c, t_c) \psi(x_c, t_c) \quad (102)$$

この自由粒子に対するプロパゲーターは次のようになる。

$$K_0(x, t; 0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{imx^2}{2\hbar t}\right\}$$

これを用いて次のような状況を考える。 $t = 0$ で自由粒子が原点 $x = 0$ から出発する。時間 T 秒後に粒子が X から距離 $\pm R$ 以内に存在することが分かっているとす。次の時間 t' の後に X から x' だけ離れたところに自由粒子を見つけ出す確率はどのようになるかを考える。詳しい計算規則はのちの章で説明するが、次のようになる

$$\psi(x') = \int_{-R}^R dy K(X + x', T + t; X + y, T) K(X + y, T; 0, 0) \quad (103)$$

これを光とほとんど同じ手順で計算すると見つけ出す確率は

$$P(x') = |\psi(x)|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar} \frac{R}{T\Delta x} \exp\left\{-\frac{(x' - Vt')^2}{(\Delta x)^2}\right\} \quad (104)$$

$$V = \frac{X}{T}, \quad (\Delta x)^2 = R^2 \left(1 + \frac{t'}{T}\right)^2 + (\Delta y)^2, \quad (\Delta y)^2 = \left(\frac{\hbar t'}{mR}\right)^2 \quad (105)$$

である。これは光学の場合とほとんど同じになった。そのため、次のように言える。(ただし、質量は電子ほどとし、特別な場合でないとする。)

古典力学はプランク定数 \hbar に対し、“隙間”が十分大きいときに使える近似の理論である。また、経路の“ゆるみ”は0である。

量子力学はプランク定数 \hbar に対し、“隙間”が同程度のときでも使える理論である。また、経路の“ゆるみ”は Δx 程度である。

では、量子力学から古典力学を見ると次が言える。古典力学では作用が最小となる経路が再現されていた。つまり、最小作用の原理を守らない経路は守る経路に比べ、確率が非常に弱く、他の経路と確率が弱め合ってしまうといえる。逆に守る経路付近では確率は強め合っているといえる。

このようなことは経路積分の考案者であるファインマンも似たようなことを言っている。これでこの章を締めようと思う。

「全ての経路に対して S が \hbar に比べて極めて大きいとしよう。すぐ近くの経路に対してその位相は大きく異なる。というのも、 \hbar がそんなに小さいので、大きな S にとっては S のわずかな変化でも全く異なる位相を意味するからである。それゆえ近接した経路は、和をとることによって通常は打ち消し合う。唯一の例外は、ある経路と近接したいくつかの経路が第一近似の範囲で全て同位相の場合である。このような経路のみが重要である。それゆえ、プランク定数 \hbar を0とする極限の場合には、正しい量子力学の法則は、単純に以下のように要約される。

「確率振幅についての全てのことを忘れよ。その粒子は特別な経路、すなわち第一近似では S が変化しないような経路を辿る。」これが最小作用の原理と量子力学の関係である。」

1. 電磁場と電磁ポテンシャル

マクスウェル電磁気学はマクスウェル方程式を基礎方程式とする理論である。これによって電気、磁気、光学が古典論の世界で説明することができる。今回は真空に対する電磁場の理論について考える。ただし、電場を $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ 、磁場を $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$ 、電荷密度を $\rho(\mathbf{x}, t)$ 、電流密度を $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ 、真空の誘電率を ϵ_0 、真空の透磁率を μ_0 とする。次の式がマクスウェル方程式である。

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\epsilon_0} \quad (1.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.4)$$

また、(1.1)と(1.2)から電荷保存則が導ける。

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = 0 \quad (1.5)$$

(1.5)は次の式を使うことによって、積分形にすることができる。

$$\nabla \cdot \left(\nabla \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.6)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{j}_T(\mathbf{x}, t) + \mathbf{j}_L(\mathbf{x}, t) = \mathbf{j}_T(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \mathbf{x}' \nabla \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \frac{\partial \rho(\mathbf{x}', t)}{\partial t} \quad (1.7)$$

ここで、 $\mathbf{j}_T(\mathbf{x}, t)$ は横成分であり、恒等的に次の式が成り立つ。

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_T(\mathbf{x}, t) \equiv 0 \quad (1.8)$$

また、 $\mathbf{j}_L(\mathbf{x}, t)$ は縦成分であり、次のように定義し、その次の式も恒等的に成り立つ。

$$\mathbf{j}_L(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \mathbf{x}' \nabla \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \frac{\partial \rho(\mathbf{x}', t)}{\partial t} \quad (1.9)$$

$$\nabla \times \mathbf{j}_L(\mathbf{x}, t) \equiv 0 \quad (1.10)$$

電磁場においても横成分と縦成分で考えるとマクスウェル方程式は次のように書ける。

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_L(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\epsilon_0} \quad (1.11)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \mu_0 \mathbf{j}_T(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}_T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (1.12)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}_T(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (1.13)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.14)$$

このようにはじめ複雑だったマクスウェル方程式を”ほぐす”ことができた。これでより一層マクスウェル方程式を見やすくなった。

ここで、 $\mathbf{E}_L(\mathbf{x}, t)$ については、(1.11)のみであるため、直ちに積分を実行できる。

$$\mathbf{E}_L(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \mathbf{x}' \nabla \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \rho(\mathbf{x}', t) \quad (1.15)$$

これはクーロンの法則であり、縦波の電場はクーロン電場と呼ばれる。

また(1.12), (1.13)については変形することができる。

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \mathbf{E}_T(\mathbf{x}, t) = \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j}_T(\mathbf{x}, t) \quad (1.16)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{j}_T(\mathbf{x}, t) \quad (1.17)$$

これは非斉次の波動方程式である。この式はグリーン関数などを用いて解くことができる。もしくはフーリエ変換することによっても解くことが可能であろう。

また、マクスウェル方程式は(1.15)と(1.16)、(1.17)に分けることができる。(1.15)は粒子間の瞬間的なクーロン相互作用による電磁場を示している。(1.16)、(1.17)はそのような瞬間場の補正を表している。例えば、全体の効果は遅れを伴うものであり、光速を超えて作用しないからである。

次からはこのような略記を用いる。(必要に応じて使い分ける。)

$$\mathbf{x} \equiv (\mathbf{x}, t) \quad (1.18)$$

また、電磁場はベクトル解析の公式を用いると次のように次のように書ける。

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) \equiv \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad (1.19)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) \equiv -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{x}) - \nabla A_0(\mathbf{x}) \quad (1.20)$$

$$\chi(\mathbf{x}) \equiv \nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} A_0(\mathbf{x}) \quad (1.21)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) A_0(\mathbf{x}) + \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{x}) = -\mu_0 c^2 \rho(\mathbf{x}) \quad (1.22)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \mathbf{A}(\mathbf{x}) - \nabla \chi(\mathbf{x}) = -\mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{x}) \quad (1.23)$$

この、 $\mathbf{A}(\mathbf{x}), A_0(\mathbf{x})$ に対し、次のような変換に対し(1.18), (1.19)は不変である。

$$\mathbf{A}'(\mathbf{x}) = \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \nabla \lambda(\mathbf{x}) \quad (1.24)$$

$$A'_0(\mathbf{x}) = A_0(\mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial t} \lambda(\mathbf{x}) \quad (1.25)$$

これは代入してすぐ確かめることができる。またこの変換をゲージ変換という。ゲージ変換に対し、 $\chi(\mathbf{x})$ は次のような変換を受ける。

$$\chi'(\mathbf{x}) = \chi(\mathbf{x}) + \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \lambda(\mathbf{x}) \quad (1.26)$$

そのため、このように、電磁場を変えずに $\lambda(\mathbf{x})$ を、うまく選び、用途によって使い分けることができる。その一例として、 $\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \lambda_L(\mathbf{x}) = 0$ とするとポテンシャルの式は次のように書くことができる。これはローレンツゲージとよばれる。

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) A_0(\mathbf{x}) = -\mu_0 c^2 \rho(\mathbf{x}) \quad (1.27)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{x}) \quad (1.28)$$

他にもクーロンゲージもあるが、それはここでは議論しない。

2. 電磁場のエネルギーと全慣性

この章はほとんど天下りの議論しかしないが許してほしい。ここの議論はマクスウェル方程式を適当に式変形していけば出てくる。

突然だが次の微分を考える。

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathbf{E}^2(x) + \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2(x) \right) = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{\mu_0} \mathbf{E}(x) \times \mathbf{B}(x) \right) - \mathbf{j}(x) \cdot \mathbf{E}(x) \quad (2.1)$$

より、次の量を定義する。

$$\mathcal{E}^{(ele)}(x) = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathbf{E}^2(x) + \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2(x) \quad (2.2)$$

$$\mathbf{S}(x) = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E}(x) \times \mathbf{B}(x) \quad (2.3)$$

また、次の量を定義する。

$$\mathcal{E}^{(pe)}(x) \equiv \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) \delta(\mathbf{x} - \xi(t)) \quad (2.4)$$

$$\mathbf{J}^{(pe)}(x) \equiv \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2(t) \dot{\xi}(t) \delta(\mathbf{x} - \xi(t)) \quad (2.5)$$

これと、ローレンツの力の密度の式とニュートンの運動方程式から、

$$m \ddot{\xi}(t) \delta(\mathbf{x} - \xi(t)) = \rho(x) \mathbf{E}(x) + \mathbf{j}(x) \times \mathbf{B}(x) \quad (2.6)$$

(2.4), (2.5), (2.6)から、

$$\mathcal{E}^{(pe)}(x) + \nabla \cdot \mathbf{J}^{(pe)}(x) = \mathbf{j}(x) \cdot \mathbf{E}(x) \quad (2.7)$$

(2.7)と(2.1), (2.2), (2.3)から、

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\mathcal{E}^{(ele)}(x) + \mathcal{E}^{(pe)}(x) \right) + \nabla \cdot \left(\mathbf{S}(x) + \mathbf{J}^{(pe)}(x) \right) = 0 \quad (2.8)$$

(2.8)から、 $\mathcal{E}^{(pe)}(x)$ は明らかに粒子の運動エネルギーであるから、 $\mathcal{E}^{(ele)}(x)$ は電磁場のエネルギーであると考えるのが妥当であろう。また、 $\mathbf{J}^{(pe)}(x)$ は粒子の運動エネルギーの流れとみることができると、 $\mathbf{S}(x)$ は電磁場のエネルギーの流れといえるだろう。

またまた、当然だが次のような式を考える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \{ \varepsilon_0 \mathbf{S}(x) \}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \delta_{ij} \left(\frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathbf{E}^2(x) + \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2(x) \right) - \varepsilon_0 E_i(x) E_j(x) - \frac{1}{\mu_0} B_i(x) B_j(x) \right\} &= -\rho(x) E_i(x) - \{ \mathbf{j}(x) \times \mathbf{B}(x) \}_i \\ &= f_i(x) \end{aligned} \quad (2.9)$$

また、先ほどと同様に次の量を定義する。

$$\rho^{(p)}(x) \equiv m \delta(\mathbf{x} - \xi(t)) \quad (2.10)$$

$$\mathbf{J}^{(p)}(x) \equiv m \dot{\xi}(t) \delta(\mathbf{x} - \xi(t)) \quad (2.11)$$

$$t_{ij}^{(p)}(x) \equiv m \dot{\xi}_i(t) \dot{\xi}_j(t) \quad (2.12)$$

これらの式は次のバランス方程式を満たす。

$$j^{(p)}_i(x) + \partial_j t_{ij}^{(p)}(x) = f_i(x) \quad (2.13)$$

また、(2.9)について次の量を定義する。

$$J_i^{(elm)}(x) \equiv \{ \varepsilon_0 \mathbf{E}(x) \times \mathbf{B}(x) \}_i \quad (2.14)$$

$$t_{ij}^{(elm)}(x) \equiv \delta_{ij} \left(\frac{1}{2} \varepsilon_0 \mathbf{E}^2(x) + \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2(x) \right) - \varepsilon_0 E_i(x) E_j(x) - \frac{1}{\mu_0} B_i(x) B_j(x) \quad (2.15)$$

これを導入すれば(2.9)は次のようにまとめることができる。

$$j^{(elm)}_i(x) + \partial_j t_{ij}^{(elm)}(x) = -f_i(x) \quad (2.16)$$

(2.16)と(2.13)をまとめると次の連続の方程式を満たす。

$$\frac{\partial}{\partial t} \{J_i^{(p)}(x) + J_i^{(elm)}(x)\} + \frac{\partial}{\partial x_j} \{t_{ij}^{(p)}(x) + t_{ij}^{(elm)}(x)\} = 0 \quad (2.17)$$

明らかに、 $J^{(p)}(x)$ は粒子の慣性の流れ(運動量とは区別している)であり、このことから、 $J_i^{(elm)}(x)$ は電磁場の慣性の流れと解釈できる。また、 $t_{ij}^{(p)}(x)$ は慣性の流れの流れと解釈できるため、 $t_{ij}^{(elm)}(x)$ は電磁場の慣性の流れの流れと解釈できるだろう。

また、 $J^{(elm)}(x)$ と、 $S(x)$ について比べてみると、

$$S(x) = c^2 J^{(elm)}(x) \quad (2.18)$$

であり、これを日本語で書くと次の関係を示唆している。

$$(\text{電磁場のエネルギーの流れ}) = (\text{電磁場の慣性の流れの流れ}) \times c^2 \quad (2.19)$$

つまり、有名な相対論的關係を示唆している。

$$E = mc^2 \quad (2.20)$$

また、 $S(x)$ はポインティングベクトルと呼ばれ、 $t_{ij}^{(elm)}(x)$ はマクスウェルの応力テンソルと呼ばれている。

3. 電磁場のフーリエ変換

電磁場の空間変数についてフーリエ変換してみる。電磁場の全体系を一辺が L の大きな立方体の中にあるとする。

このとき、電磁場は次のように書ける。

$$\mathbf{E}(x) = \mathbf{E}_L(x) + \mathbf{E}_T(x) \quad (3.1)$$

$$\mathbf{E}_L(x) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{e}^{(3)}(\mathbf{k}) p_{\mathbf{k}}^{(3)}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{E}_T(x) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) p_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{B}(x) = -\frac{i}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \mathbf{k} \times \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) q_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.4)$$

使った文字は次のように定義される。

$$\mathbf{k} \equiv \frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \quad \mathbf{n} = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (3.5)$$

$$V \equiv L^3 \quad (3.6)$$

また、基底について直交条件と完全性条件を満たすとする。

$$\mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}^{(s)}(\mathbf{k}) = \delta_{rs} \quad (3.7)$$

$$\sum_{r=1,2,3} e_i^{(r)}(\mathbf{k}) e_j^{(r)}(\mathbf{k}) = \delta_{ij} \quad (3.8)$$

また、(3.4)については磁場が横成分しか持たないことを考慮した。また、場は実数であるため、(3.2)、(3.3)、(3.4)の係数について次が満たしていなければならない。

$$p_{\mathbf{k}}^{(r)*}(t) = p_{-\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (r = 1, 2) \quad (3.9)$$

$$p_{\mathbf{k}}^{(3)*}(t) = -p_{-\mathbf{k}}^{(3)}(t) \quad (3.10)$$

$$q_{\mathbf{k}}^{(r)*}(t) = q_{-\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (r = 1, 2) \quad (3.11)$$

またこの振幅の次元について考える。

$$[p_{\mathbf{k}}^{(r)}] = M^{\frac{1}{2}} L T^{-1} \quad (3.12)$$

$$[q_{\mathbf{k}}^{(r)}] = M^{\frac{1}{2}} L \quad (3.13)$$

また、このフーリエ係数に対してのマクスウェル方程式は次のようである。

$$|\mathbf{k}| p_{\mathbf{k}}^{(3)}(t) = -\frac{i}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \int_V d^3 x \rho(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (3.14)$$

$$p_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) = \dot{q}_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (r = 1, 2) \quad (3.15)$$

$$\dot{p}_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) + c^2 \mathbf{k}^2 q_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \int_V d^3 x \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{j}_T(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (r = 1, 2) \quad (3.16)$$

(3.15)と(3.16)からすぐ気づくと思うが、横型電流によって強制振動を受けている、角振動数 $\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|$ を持った調和振動子である。そのため、電磁場は強制された調和振動子が無数に集まっているものであると解釈できる。また、フーリエ係数を一般化座標として解析力学の手法を使うことができる。

また、これらを用いて、電磁場のエネルギーと慣性について考える。

(2.2)を全空間にわたって積分したものが全空間に含まれる電磁場のエネルギーと解釈できる。

$$H^{(em)}(t) \equiv H_{rad}(t) + H_{Coul}(t) \quad (3.17)$$

$$H_{rad}(t) \equiv \frac{1}{2} \int_V d^3x \left\{ \epsilon_0 \mathbf{E}_T^2(x) + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2(x) \right\} = \frac{1}{2} \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ p_{\mathbf{k}}^{(r)*}(t) p_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) + \omega_{\mathbf{k}}^2 q_{\mathbf{k}}^{(r)*}(t) q_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \right\} \quad (3.18)$$

$$H_{Coul}(t) = \frac{1}{2} \epsilon_0 \int_V d^3x \mathbf{E}_L^2(x) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} p_{\mathbf{k}}^{(3)*}(t) p_{\mathbf{k}}^{(3)}(t) = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \int_V d^3x \int_V d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (3.19)$$

$H_{Coul}(t)$ はクーロンのエネルギーである。また、 $H_{rad}(t)$ は調和振動子のハミルトニアンであるが、相互作用は無視している。

また、(2.14)についても同様に考えることができる。(2.14)を全区間でわたって積分したのも一般座標系で書くと次のようになる。

$$\mathbf{G}(t) = i \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \left\{ p_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) q_{\mathbf{k}}^{(r)*}(t) \right\} \quad (3.20)$$

4. 無次元振幅変数

先ほどの一般化座標の次元は(3.12), (3.13)のとおりである。ここで、次のような次元を持つ定数、

$$[\hbar] = ML^2T^{-1} \quad (4.1)$$

$$[\omega] = T^{-1} \quad (4.2)$$

を用いて調和振動子の振幅を表す無次元の複素変数 a と、 a^\dagger を次のように定義する。

$$q_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} \{a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t)e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + a_{-\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t)e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}\} \quad (4.3)$$

$$p_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \{a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t)e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} - a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t)e^{i\omega_{\mathbf{k}}t}\} \quad (4.4)$$

である。では(4.3)、(4.4)を(3.2)、(3.3)に代入すると次のようになる。

$$\mathbf{E}_T(x) = \frac{i}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}} \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \{a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_{\mathbf{k}}t} - a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+i\omega_{\mathbf{k}}t}\} \quad (4.5)$$

$$\mathbf{B}(x) = \frac{i}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}} \mathbf{k} \times \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \{a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_{\mathbf{k}}t} - a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+i\omega_{\mathbf{k}}t}\} \quad (4.6)$$

である。これに対しフーリエ逆変換し、無次元振幅変数を求めると次のようになる。

$$a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}V}} \int_V d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}+i\omega_{\mathbf{k}}t} \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \cdot \left\{ \frac{c^2}{\omega_{\mathbf{k}}} \nabla \times \mathbf{B}(x) - i\mathbf{E}_T(x) \right\} \quad (4.7)$$

$$a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}V}} \int_V d^3x e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_{\mathbf{k}}t} \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \cdot \left\{ \frac{c^2}{\omega_{\mathbf{k}}} \nabla \times \mathbf{B}(x) + i\mathbf{E}_T(x) \right\} \quad (4.7)$$

また次の量を定義する。

$$f_{\mathbf{k}}(x) \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}\varepsilon_0 V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-i\omega_{\mathbf{k}}t} \quad (4.8)$$

これを用いて無次元振幅変数の時間変化を見る。

$$\dot{a}_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t) = \frac{i}{\hbar} \int_V d^3x f_{\mathbf{k}}^*(x) \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{j}(x) \quad (4.9)$$

$$\dot{a}_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_V d^3x f_{\mathbf{k}}(x) \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{j}(x) \quad (4.10)$$

振幅の初期値が時刻 t_0 で与えられているとき積分でき、次のようになる。

$$a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) = a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t_0) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int_V d^3x' f_{\mathbf{k}}^*(x') \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{j}(x') \quad (4.11)$$

$$a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t) = a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int_V d^3x' f_{\mathbf{k}}(x') \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{j}(x') \quad (4.12)$$

では、この無次元振幅変数を用いて、(3.18), (3.20)は次のように表現される。

$$H_{rad}(t) = \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t) a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (4.13)$$

$$\mathbf{G}(t) = \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\mathbf{k} a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t) a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (4.14)$$

ここでは議論しないが、 a と、 a^\dagger をそれぞれ消滅、生成演算子とみなすことで、このとき、

$$a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t) a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \equiv N_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (4.15)$$

で定義される $N_{\mathbf{k}}^{(r)}(t)$ は整数値 $0,1,2,3\dots$ をとることになる。これを用いて(4.13), (4.14)は次のように書かれる。

$$H_{rad}(t) = \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (4.16)$$

$$\mathbf{G}(t) = \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar\mathbf{k} N_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (4.17)$$

では、この、 $N_{\mathbf{k}}^{(r)}(t)$ は何を表しているかを考える。

$$[\hbar\omega_{\mathbf{k}}] = \text{energy} \quad (4.18)$$

$$[\hbar\mathbf{k}] = \text{momentum} \quad (4.19)$$

であるため、 $N_{\mathbf{k}}^{(r)}(t)$ はエネルギー $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ 、運動量 $\hbar\mathbf{k}$ の”電磁場”の個数を表しているといえる。この”電磁場”を光量子(光子)と呼ぶ。

また、この光量子を理論に組み込んでも場の横成分に関する限りは十分にマクスウェル方程式を再現することが可能である。

また、(4.18), (4.19)の関係はアインシュタイン-ド・ブロイの関係と呼ばれている。

アインシュタインの関係

$$E = \hbar\omega \quad (4.20)$$

ド・ブロイの関係

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (4.21)$$

これらの関係を全ての粒子についても当てはまると考え、発展させた理論が量子力学である。またこの関係が正当化されるのは統計力学の事象などが背景にあり、プランクの黒体放射のスペクトルの式などから議論される。

5. 粒子の波

ここでいったん光学を考える。

波面 $\phi(\mathbf{x}) = \text{const.}$ を有する光線束に対応する光の波動は一般的に次のように書くことができる。

$$\psi(\mathbf{x}) = a(\mathbf{x})e^{i\{\phi(\mathbf{x})-\omega t\}} \quad (5.1)$$

このように表されたとき、波数ベクトル \mathbf{k} は次のように表される。

$$\mathbf{k} = \nabla\phi(\mathbf{x}) \quad (5.2)$$

次は解析力学を考える。

ハミルトニアンが陽に時間を含まないとき、主作用(粒子が古典経路を辿ったときの作用の値)は次のように書ける。

$$S_{cl}(\mathbf{x}) = W_{cl}(\mathbf{x}) - Et \quad (5.3)$$

このとき、粒子の運動量は次のように書ける。

$$\mathbf{p} = \nabla W_{cl}(\mathbf{x}) \quad (5.4)$$

よって、ド・ブロイの関係(4.21)から、

$$\mathbf{k} = \frac{\nabla W_{cl}(\mathbf{x})}{\hbar} \quad (5.5)$$

(5.5)と(5.2)から、

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{W_{cl}(\mathbf{x})}{\hbar} \quad (5.6)$$

またアインシュタインの関係から、

$$\omega t = \frac{Et}{\hbar} \quad (5.7)$$

よって、(5.1)に対し、(5.6)と(5.7)を用いて代入し、(5.3)でまとめると次のように粒子の波はかける。

$$\psi(\mathbf{x}) = a(\mathbf{x}) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{cl}(\mathbf{x})\right\} \quad (5.8)$$

考え方をさらに押し進めたのがファインマンやディラックらである。この点については後の章で触れる。

6. 粒子の波の重ね合わせ

ここで量子力学の法則を与える。量子力学ではそれぞれの軌道が a から b に到る全振幅にどれだけ寄与するか考えなければならない。作用の極値を与える特別な経路のみが寄与するのではなく、全ての経路が寄与する。時刻 t_a において点 x_a から出発し時刻 t_b において点 x_b に達する確率は、 a から b に到る振幅 $K(b, a)$ の絶対値の 2 乗 $P(b, a) = |K(b, a)|^2$ である。この振幅 $K(b, a)$ はそれぞれの経路からの寄与 $\phi[x(t)]$ を足し合わせたものである。

$$K(b, a) = \sum_{\substack{a \text{ から } b \text{ に到る} \\ \text{全ての経路}}} \phi[x(t)] \quad (6.1)$$

$\phi[x(t)]$ の正体を (5.8) を足掛かりに考えると次のようになる。

$$\phi[x(t)] = (\text{定数}) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right\}$$

(6.1) の日本語で書いたところを数学的に定式化してみる。手続きとしてはリーマン和と同じようなものである。

はじめに、全ての経路の部分集合を選ぶ。そのために、独立変数である時間を、幅 ε の小区間に分ける。これにより、 t_a と t_b の間に間隔 ε で存在する時刻 t_i が得られる。それぞれの時刻 t_i で特定の点 x_i を選ぶ。このようにして選んだ点を直線で結ぶと一つの経路が構成される。このようにして構成された全ての経路について定義するには $x_i (i = 1, \dots, N-1)$ について多重積分を行えばよい。ここで、

$$\begin{aligned} N\varepsilon &= t_b - t_a \\ \varepsilon &= t_{i+1} - t_i \end{aligned} \quad (6.2)$$

$$t_0 = t_a, t_N = t_b, x_0 = x_a, x_N = x_b$$

とおき、適当な規格化因子 A を用いて次のように書ける。

$$K(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \dots \int \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[b, a]\right\}$$

ここで、

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\dot{x}, x, t)$$

で、ラグランジアンが、

$$L(\dot{x}, x, t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \quad (6.3)$$

と書かれているとき、規格化因子 A は次のように書ける。

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$

ここで、

$$\int_a^b \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \dots \int \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A}$$

と書くことにすると経路の積分、経路積分は次のようになる。

$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[b, a]\right\} \quad (6.4)$$

では、次に経路積分における重要な規則を導出していく。

t_a と t_b の間のある時刻を t_c とする。 a と b の間の任意の経路に沿って作用を

$$S[b, a] = S[b, c] + S[c, a] \quad (6.5)$$

と書くことができる。このとき経路積分は次のように計算される。

$$K(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[b, c] + \frac{i}{\hbar} S[c, a]\right\} \quad (6.6)$$

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c \int_c^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[b, c]\right\} K(c, a) \quad (6.7)$$

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K(b, c) K(c, a) \quad (6.8)$$

この式を見ると次ように言える。

「時間的に続いて起こる事象全体の振幅はそれぞれの事象の振幅の積である。」

ということである。

これを多数の事象に拡張して時間を N 個の区間に分割すると次のような式になる。

$$K(b, a) = \int_{x_{N-1}} \cdots \int_{x_2} \int_{x_1} dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1} K(b, N-1) K(N-1, N-2) \cdots K(i+1, i) \cdots K(1, a) \quad (6.9)$$

ここで、無限小の時間間隔に対する粒子の振幅は次のようである。

$$K(i+1, i) = \frac{1}{A} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \varepsilon L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\varepsilon}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{t_{i+1} + t_i}{3}\right)\right\} \quad (6.10)$$

この表式を用いて、自由粒子の場合の振幅を求める。

ラグランジアンは

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 \quad (6.11)$$

このようになり経路積分は次のようになる。

$$K_0(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_{N-1}} \cdots \int_{x_2} \int_{x_1} dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1} \exp\left\{\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{i-1})^2\right\} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \quad (6.12)$$

$$K_0(b, a) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)}\right\} \quad (6.13)$$

よって、

$$K_0(x, t; 0, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{imx^2}{2\hbar t}\right\} \quad (6.14)$$

また、波動関数は次のようなものである。

$\psi(x, t)$ は過去にある(おそらく不特定の)状況から (x, t) に到達する全振幅である。この概念を用いて(6.8)を変形して考えると波動関数が次の積分方程式を満たすことが分かる。

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K(x_b, t_b; x_c, t_c) \psi(x_c, t_c) \quad (6.15)$$

次に特殊な場合について考える。

ラグランジアンが、

$$L = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}x + c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t) \quad (6.16)$$

と書かれているとする。このとき、

$$S[x(t)] = S_{cl}[b, a] + \int_{t_a}^{t_b} dt [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2] \quad (6.17)$$

と書くことができる。これより、振幅は次のようになる。

$$K(b, a) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{cl}[b, a]\right\} \int_0^1 \mathcal{D}[y(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2]\right\} \quad (6.18)$$

また、

$$F(t_b - t_a) = \int_0^0 \mathcal{D}[y(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2]\right\} \quad (6.19)$$

と置けば、ラグランジアンが2次式で書かれているとき次のようになる。

$$K(b, a) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_{cl}[b, a]\right\} F(t_b - t_a) \quad (6.20)$$

この結果を用いて調和振動子に対する振幅を計算してみる。

調和振動子のラグランジアンは次のように書ける。

$$L = \frac{m}{2} [\dot{x}^2 - \omega^2 x^2] \quad (6.21)$$

(6.20)に代入すると、

$$K(b, a) = \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_b x_a]\right\} F(T) \quad (6.22)$$

ただし、 $t_b - t_a = T$ とし、 $F(T)$ については、(6.19)から

$$F(T) = \int_0^0 \mathcal{D}[y(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \frac{m}{2} [\dot{y}^2 - \omega^2 y^2]\right\} \quad (6.23)$$

全ての経路 $y(t)$ は、 $y(0) = 0$ で、 $y(T) = 0$ であるから、フーリエ正弦級数として表すことができる。

$$y(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{n\pi t}{T} \quad (6.24)$$

より、経路を係数 a_n の関数とみる。

$$\frac{m}{2} \int_0^T dt \dot{y}^2 = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T dt \cos \frac{n\pi t}{T} \cos \frac{m\pi t}{T} = \frac{mT}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 a_n^2 \quad (6.25)$$

$$\frac{m\omega^2}{2} \int_0^T dt y^2 = \frac{m\omega^2 T}{2} \sum_n a_n^2 \quad (6.26)$$

このように計算できる。より、(6.23)については次のように書ける。ただし、 J はヤコビアンである。

$$\begin{aligned} F(T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} J \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_2}{A} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{da_N}{A} \exp\left\{\frac{imT}{2\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - \omega^2\right] a_n^2\right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{J}{A^{N+1}} \prod_{n=1}^N \left(\frac{n\pi}{T}\right)^{-1} \prod_{n=1}^N \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (6.26)$$

で、 ω を含まない前半の項は一つの定数となり、後半の項は有名な無限積の結果を用いれば、

$$F(T) = C \sqrt{\frac{\omega T}{\sin \omega T}} \quad (6.27)$$

ここで、定数 C が何かを考えるため、 $\omega = 0$ の場合を考えるとこれに対応する経路積分の式は自由粒子で、(6.13)であるから、

$$C = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.28)$$

よって、

$$F(T) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (6.28)$$

より、調和振動子に対する経路積分は次である。

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_b x_a] \right\} \quad (6.29)$$

また、強制調和振動子の場合、つまり、ラグランジアンが $L = \frac{m}{2}[\dot{x}^2 - \omega^2 x^2] + f(t)x$ であるとき、振幅は次のようになる。

$$K(b, a) = \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} \left\{ (x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_b x_a + \frac{2x_b}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} dt f(t) \sin \omega(t - t_a) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2x_a}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} dt f(t) \sin \omega(t_b - t) - \frac{2}{m^2 \omega^2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^t dt' f(t) f(t') \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(t' - t_a) \right\} \right] \quad (6.30)$$

ではこの導出過程を示す。このラグランジアンに対するオイラーラグランジュ方程式(運動方程式)は次である。

$$\ddot{x} + \omega^2 x = \frac{f(t)}{m} \quad (6.31)$$

ここで、 $x(0) = A$ 、 $\dot{x}(0) = B$ と置く。また、ラプラス変換、 $L[x(t)] = X(s)$ 、 $L[f(t)] = F(s)$ と置く。

$$s^2 X(s) - sA - B + \omega^2 X(s) = \frac{F(s)}{m} \Leftrightarrow (s^2 + \omega^2)X(s) = sA + B + \frac{F(s)}{m} \\ \Leftrightarrow X(s) = A \frac{s}{s^2 + \omega^2} + \frac{B}{\omega} \frac{\omega}{s^2 + \omega^2} + \frac{F(s)}{m\omega} \frac{\omega}{s^2 + \omega^2} \quad (6.32)$$

であるので、

$$x(t) = A \cos \omega t + \frac{B}{\omega} \sin \omega t + \frac{1}{m\omega} \int_0^t f(s) \sin \omega(t - s) ds \quad (6.33)$$

である。ここで、 $x(t_a) = x_a$ 、 $x(t_b) = x_b$ であることから、

$$A \begin{pmatrix} \cos \omega t_a \\ \cos \omega t_b \end{pmatrix} + \frac{B}{\omega} \begin{pmatrix} \sin \omega t_a \\ \sin \omega t_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_a + \frac{1}{m\omega} \int_0^{t_a} f(s) \sin \omega(t_a - s) ds \\ x_b + \frac{1}{m\omega} \int_0^{t_b} f(s) \sin \omega(t_b - s) ds \end{pmatrix} \quad (6.34)$$

より、ただし、 $T = t_b - t_a$ とすれば、

$$A = \frac{1}{\sin \omega T} \left[x_b \sin \omega t_a - x_a \sin \omega t_b + \frac{\sin \omega t_a}{m\omega} \int_0^{t_b} f(s) \sin \omega(t_b - s) ds - \frac{\sin \omega t_b}{m\omega} \int_0^{t_a} f(s) \sin \omega(t_a - s) ds \right] \quad (6.35)$$

$$B = \frac{\omega}{\sin \omega T} \left[x_a \cos \omega t_b - x_b \cos \omega t_a + \frac{\cos \omega t_b}{m\omega} \int_0^{t_a} f(s) \sin \omega(t_a - s) ds - \frac{\cos \omega t_a}{m\omega} \int_0^{t_b} f(s) \sin \omega(t_b - s) ds \right] \quad (6.36)$$

が得られる。また、

$$\dot{x}(t) = B \cos \omega t - \omega A \sin \omega t + \frac{1}{m} \int_0^t f(s) \cos \omega(t - s) ds \quad (6.37)$$

これより、

$$\dot{x}(t_a) = B \cos \omega t_a - \omega A \sin \omega t_a + \frac{1}{m} \int_0^{t_a} f(s) \cos \omega(t_a - s) ds \\ = \frac{\omega}{\sin \omega T} \left[x_a \cos \omega T - x_b - \frac{2 \cos^2 \frac{\omega T}{2}}{m\omega} \int_0^{t_a} f(s) \sin \omega(t_a - s) ds \right] + \frac{1}{m} \int_0^{t_a} f(s) \cos \omega(t_a - s) ds \quad (6.38)$$

$$\dot{x}(t_b) = B \cos \omega t_b - \omega A \sin \omega t_b + \frac{1}{m} \int_0^{t_b} f(s) \cos \omega(t_b - s) ds \\ = \frac{\omega}{\sin \omega T} \left[-x_b \cos \omega T + x_a + \frac{2 \sin^2 \frac{\omega T}{2}}{m\omega} \int_0^{t_b} f(s) \sin \omega(t_b - s) ds \right] + \frac{1}{m} \int_0^{t_b} f(s) \cos \omega(t_b - s) ds \quad (6.39)$$

である。また、

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} m x \dot{x} \right] = L - \frac{f(t)}{2} x \Leftrightarrow L = \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} m x \dot{x} \right] + \frac{1}{2} f(t) x \quad (6.40)$$

である。よって、極値作用は、

$$\begin{aligned} S_{cl} &= \int_{t_a}^{t_b} L dt = \int_{t_a}^{t_b} \left(\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} m x \dot{x} \right] + \frac{1}{2} f(t) x \right) dt = \frac{m}{2} [x(t_b) \dot{x}(t_b) - x(t_a) \dot{x}(t_a)] + \frac{1}{2} \int_{t_a}^{t_b} f(t) x(t) dt \\ &= \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \left[(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_b x_a + \frac{2x_b}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} dt f(t) \sin \omega(t - t_a) + \frac{2x_a}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} dt f(t) \sin \omega(t_b - t) \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{m^2 \omega^2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^t dt' f(t) f(t') \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(t' - t_a) \right] \quad (6.41) \end{aligned}$$

である。これと、(6.22)の式を用いれば、先ほどの式、

$$\begin{aligned} K(b, a) &= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} \left\{ (x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_b x_a + \frac{2x_b}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} dt f(t) \sin \omega(t - t_a) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{2x_a}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} dt f(t) \sin \omega(t_b - t) - \frac{2}{m^2 \omega^2} \int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^t dt' f(t) f(t') \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(t' - t_a) \right\} \right] \quad (6.42) \end{aligned}$$

この式は大変重要である。なぜなら、3章から、電磁場は強制調和振動子の集団として表現されるため、量子電気力学では大変重要になってくる。

また、 K はここでは振幅と読んでいたが、積分核と呼ばれたり、グリーン関数、プロパゲーター、伝播関数と呼ばれたりする。

7. 経路積分とシュレーディンガー方程式

プロパゲーターを用いれば、波動関数は(6.15)から次のように書ける。

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' K(x, t; x', t') \psi(x', t') \quad (7.1)$$

ここで、(6.10)と同様の近似を用いて微小時間 ε 後の波動関数は次のように書ける。

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \varepsilon L\left(\frac{\eta}{\varepsilon}, x + \frac{\eta}{2}, t\right)\right\} \psi(x + \eta, t) \quad (7.2)$$

ラグランジアンが(6.3)のように書けると、(7.2)は次のようになる。

$$\psi(x, t + \varepsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left\{\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V\left(x + \frac{\eta}{2}, t\right)\right\} \psi(x + \eta, t) \quad (7.2)$$

より、

$$\begin{aligned} \psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + O(\varepsilon^2) &= \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \exp\left\{\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right\} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(x, t)\right] \\ &\times \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}\right] + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (7.3)$$

これを計算すると、

$$\psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{A} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(x, t)\right] \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\psi(x, t) + \frac{i\hbar \varepsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}\right] + O(\varepsilon^2) \quad (7.4)$$

ここで、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限で右辺と両辺が一致するために、

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.5)$$

と置くと、(7.4)は次のようになる。

$$\psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \psi(x, t) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon V(x, t) \psi(x, t) + \frac{i\hbar \varepsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + O(\varepsilon^2) \quad (7.6)$$

より、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)\right] \psi(x, t) + O(\varepsilon) \quad (7.7)$$

最後に、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限をとって、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)\right] \psi(x, t) \quad (7.8)$$

これは簡単に3次元の場合にも拡張でき、次のようになる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}, t)\right] \psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.9)$$

これはまさしくシュレーディンガー方程式である。これとほとんど同じ手続きでプロパゲーターに対する微分方程式を得ることができる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(x, t; x', t') = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)\right] K(x, t; x', t') \quad (7.10)$$

ここでシュレーディンガー方程式の性質について考えてみる。シュレーディンガー方程式の解である波動関数が次のように書かれていた場合を考える。

$$\psi(\mathbf{x}, t) = a(\mathbf{x}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{x}, t)\right\} \quad (7.11)$$

ただし、 a や、 ϕ は、実数であるとする。(7.11)を(7.9)に代入する。

$$\begin{aligned}
 & i\hbar \frac{\partial a(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right\} - \frac{\partial S(\mathbf{x}, t)}{\partial t} a(\mathbf{x}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right\} \\
 = & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 a(\mathbf{x}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right\} - \frac{i\hbar}{m} \nabla a(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla S(\mathbf{x}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right\} + \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S(\mathbf{x}, t) a(\mathbf{x}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right\} \\
 & + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 a(\mathbf{x}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right\} + V(\mathbf{x}, t) a(\mathbf{x}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right\}
 \end{aligned} \tag{7.12}$$

指数関数の部分を取り除くと次のようになる。

$$\begin{aligned}
 & i\hbar \frac{\partial a(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \frac{\partial S(\mathbf{x}, t)}{\partial t} a(\mathbf{x}, t) = \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 a(\mathbf{x}, t) - \frac{i\hbar}{m} \nabla a(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla S(\mathbf{x}, t) + \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S(\mathbf{x}, t) a(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2m} (\nabla S(\mathbf{x}, t))^2 a(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t) a(\mathbf{x}, t)
 \end{aligned} \tag{7.13}$$

これの実部と虚部を分けると次のようになる。

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{2m} (a \nabla^2 S + 2 \nabla a \cdot \nabla S) = 0 \tag{7.14}$$

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2ma} \nabla^2 a - \frac{\partial S}{\partial t} \tag{7.15}$$

また、さらに、(7.14)は変形することができる。

$$\frac{\partial}{\partial t} (a^2) + \nabla \cdot \left(a^2 \frac{\nabla S}{m} \right) = 0 \tag{7.16}$$

またこれを波動関数で書くと次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot \{ \psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi \} = 0 \tag{7.17}$$

これは確率密度に対する連続の式で、確率の保存を表している。

また、ここでは深く話さないが、シュレーディンガー形式やハイゼンベルク形式では物理量に対し演算子を対応させることにより量子化する。

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla \tag{7.18}$$

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{7.19}$$

等が物理量演算子である。

8. 摂動論

ここプロパゲーターが次のように書ける場合を考える。

$$K_V(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \right) \right\} \quad (8.1)$$

経路に沿ったポテンシャルの時間積分が \hbar と比較して十分小さい場合を考える。

$$\exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t) \right\} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t) + \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt V(x, t) \right)^2 + \dots \quad (8.2)$$

これは任意の経路に沿って定義される。これを(8.1)に代入すると、

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) + K^{(1)}(b, a) + K^{(2)}(b, a) + \dots \quad (8.3)$$

ここで、

$$K_0(b, a) = \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right\} \quad (8.4)$$

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right\} \int_{t_a}^{t_b} ds V(x(s), s) \quad (8.5)$$

$$K^{(2)}(b, a) = -\frac{1}{2\hbar} \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right\} \int_{t_a}^{t_b} ds V(x(s), s) \int_{t_a}^{t_b} ds' V(x(s'), s') \quad (8.6)$$

まず、(8.5)について、積分の順序を入れ替えたい。つまり、

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} ds F(s) \quad (8.7)$$

と書く。ここで、

$$F(s) = \int_a^b \mathcal{D}[x(t)] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \dot{x}^2 \right\} V(x(s), s) \quad (8.8)$$

この式は次のように解釈できる。時刻 t_a から、 s まで粒子が自由粒子として振る舞い、 $t = s$ でポテンシャルにより”散乱”される。そして、時刻 t_b まで再び自由粒子として振る舞う。つまり(8.8)は次のように書ける。ただし、 $s = t_c$ とする。また、 $V(x_c, t_c) = V(c)$ と書くことにする。

$$F(t_c) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) \quad (8.9)$$

つまり、(8.7)は次のように書ける。

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_c K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) \quad (8.10)$$

同様にして、

$$K^{(2)}(b, a) = \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int dt_c \int dt_d K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) K_0(d, a) \quad (8.11)$$

ただし、 $t_b < t_a$ のときは、

$$K(b, a) = 0 \quad (8.12)$$

としている。

これらの式を解釈すると次のようになる。また、ポテンシャルと粒子の相互作用を散乱という。すなわちポテンシャルが粒子を散乱し、ポテンシャルによって散乱される振幅は単位体積当たり単位時間に $-\frac{i}{\hbar}V$ である。これによれば、 $K^{(n)}(b, a)$ は n 回散乱されている項であるといえる。この解釈によれば、 K_V は次の積分方程式を満たす。

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) - \frac{i}{\hbar} \int dt_c K_0(b, c) V(c) K_V(c, a) \quad (8.13)$$

またこれに対応する微分方程式は次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t_b} K_V(b, a) + \frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_b^2} + V(b) \right] K_V(b, a) = \delta(t_b - t_a) \delta(x_b - x_a) \quad (8.14)$$

これを見れば明らかにプロパゲーターは一種のグリーン関数であるといえる。

これらを用いて波動関数を展開すると次のようになる。

$$\psi(b) = \int dx_a K_V(b, a) f(a) \quad (8.15)$$

ここで、 $f(a)$ は時刻 $t = t_a$ における波動関数の値である。また、

$$\phi(b) = \int dx_a K_0(b, a) f(a) \quad (8.16)$$

とする。(8.15)は次のように書ける。

$$\psi(b) = \phi(b) - \frac{i}{\hbar} \int dt_c K_0(b, c) V(c) \phi(c) + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int dt_c \int dt_d K_0(b, c) V(c) K_0(c, d) V(d) \phi(d) + \dots \quad (8.17)$$

またこれは次の積分方程式を満たす。

$$\psi(b) = \phi(b) - \frac{i}{\hbar} \int dt_c K_0(b, c) V(c) \psi(c) \quad (8.18)$$

またこれは次の微分方程式と等価である。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \psi(x, t) \quad (8.19)$$

これはまさしくシュレーディンガー方程式である。

では次に非摂動核を含む場合を考える。

ポテンシャルが $U + V$ と書かれ、 V は小さく U は大きいものとする。また、ポテンシャル U だけの場合のプロパゲーターは求まっているとする。

ここでは非摂動核が固有関数 $\phi_n(x)$ と固有値 E_n で展開できているとする。

$$K_U(b, a) = \sum_n \phi_n(x_b) \phi_n^*(x_a) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t_b - t_a)} \quad (t_b > t_a) \quad (8.20)$$

これを用いて、 K_V の級数展開の式に代入してみる。

$$K_V(b, a) = \sum_n \phi_n(x_b) \phi_n^*(x_a) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t_b - t_a)} - \frac{i}{\hbar} \sum_m \sum_n \int_{t_a}^{t_b} dt_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_c \phi_m(x_b) \phi_m^*(x_c) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m (t_b - t_c)} V(c) \phi_n(x_c) \phi_n^*(x_a) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t_c - t_a)} + \dots \quad (8.21)$$

これより、 K_V は常に次の形で書くことができる。

$$K_V(b, a) = \sum_m \sum_n \lambda_{mn}(t_b, t_a) \phi_m(x_b) \phi_n^*(x_a) \quad (8.22)$$

ただし、

$$\lambda_{mn}(t_b, t_a) = \delta_{mn} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t_b - t_a)} + \lambda_{mn}^{(1)} + \lambda_{mn}^{(2)} + \dots \quad (8.23)$$

$$V_{mn}(t_c) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_c \phi_m^*(x_c) V(c) \phi_n(x_c) \quad (8.24)$$

$$\lambda_{mn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m t_b - E_n t_a)} \int_{t_a}^{t_b} dt_c V_{mn}(t_c) e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t_c} \quad (8.25)$$

$$\lambda_{mn}^{(2)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_a}^{t_b} dt_c \left[\int_{t_a}^{t_c} dt_d \sum_j e^{-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b - t_c)} V_{mj}(t_c) e^{-\frac{i}{\hbar}E_j(t_c - t_d)} V_{jn}(t_d) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t_d - t_c)} \right] \quad (8.26)$$

ここで、 λ_{mn} は遷移振幅と呼ばれる。解釈としては、系が時刻 t_a において状態 n にあったときに、時刻 t_b において状態 m に見いだされる振幅である。また、 V_{mn} は行列要素と呼ばれる。

では時刻 t_b における波動関数とは何かを考える。(6.15)を用いると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_a K_V(b, a) \phi_n(x_a) = \sum_j \sum_k \lambda_{jk} \phi_j(x_b) \int_{-\infty}^{\infty} dx_a \phi_k^*(x_a) \phi_n(x_a) = \sum_j \lambda_{jn} \phi_j(x_b) \quad (8.27)$$

また意味を考えると明らかだが、次の積分方程式を遷移振幅は満たす。

$$\lambda_{mn}(t_b, t_a) = \delta_{mn} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t_b - t_a)} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt_c e^{-\frac{i}{\hbar}E_m(t_b - t_c)} \sum_j V_{mj}(t_c) \lambda_{jn}(t_c, t_a) \quad (8.28)$$

また、遷移振幅が終時刻 t_b の関数とみると次の微分方程式を満たす。

$$i\hbar \frac{d}{dt_b} \lambda_{mn}(t_b) = \left[E_m \lambda_{mn}(t_b) + \sum_j V_{mj}(t_b) \lambda_{jn}(t_b) \right] \quad (8.29)$$

摂動論とはかなり物理らしい近似と個人的に思う。

9. フーリエ変換から見る演算子

ここでは初めにフーリエ級数展開の場合について話す。

スカラー関数と

$$f(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \omega} \tilde{f}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \quad (9.1)$$

ベクトル関数が

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \omega} \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \quad (9.2)$$

このように、フーリエ変換されているとする。これに対し演算子 ∇ を作用させる。

$$\nabla f(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \omega} i\mathbf{k} \tilde{f}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \quad (9.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \omega} i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \quad (9.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \omega} i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \quad (9.5)$$

つまり、元の関数に演算子 ∇ を作用させることはフーリエ係数に対しては $i\mathbf{k}$ を“かける”ことと同じであると解釈できる。

$$\nabla \rightarrow i\mathbf{k} \quad (9.6)$$

同様にして、

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\omega \quad (9.7)$$

また、

$$f(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{k} \int d\omega \tilde{f}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \quad (9.8)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{k} \int d\omega \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \quad (9.9)$$

に対しても同様のことが言えることはほぼ自明である。

ここで、(7.18)と(7.19)を思い出すと

$$\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla = \hat{\mathbf{p}} \quad (9.10)$$

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{H} \quad (9.11)$$

運動量とエネルギーが演算子に対応している。

このことから、波動関数を次のように展開するのが自然のように思える。

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{p}, E} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, E) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right\} \quad (9.12)$$

運動量とエネルギーが離散的な場合は(9.12)である。

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{p} \int dE \tilde{\psi}(\mathbf{p}, E) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right\} \quad (9.13)$$

また、運動量とエネルギーが連続な場合は(9.13)である。

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n \int d\mathbf{p} \tilde{\psi}_n(\mathbf{p}, E_n) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E_n t)\right\} \quad (9.14)$$

多くの場合エネルギーが離散的で運動量が連続である。このようなときは(9.14)で表される。またこのときフーリエ逆変換をしてあげて、 $\tilde{\psi}$ を求めてあげると次のようになる。

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}, E) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3\mathbf{x} \int dt \psi(\mathbf{x}, t) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right\} \quad (9.15)$$

ただし、積分範囲は連続の場合は実数全体で、離散的な場合は境界条件により決まる。ここで、

$$\nabla_{\mathbf{p}} = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right) \quad (9.16)$$

と置くと、先ほどと同様の議論より

$$\nabla_{\mathbf{p}} \rightarrow -\frac{i}{\hbar} \mathbf{x} \quad (9.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial E} \rightarrow \frac{i}{\hbar} t \quad (9.18)$$

より、位置演算子と時間演算子は次のようになるといえる。

$$\hat{\mathbf{x}} = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \quad (9.19)$$

$$\hat{t} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial E} \quad (9.20)$$

ここで、フーリエ変換する前の波動関数を“位置時間空間”での表示と呼ぶことにし、フーリエ変換後の波動関数を“運動量エネルギー空間”での表示と呼ぶことにする。また、位置に関してのみフーリエ変換することも可能で、その場合時間空間は変わらない為、“位置空間”での表示から“運動量空間”での表示になる。

また、位置時間空間での位置演算子は位置そのものであり、時間演算子も時間そのものであるとする。運動量エネルギー空間においても同様で運動量演算子は運動量そのものであり、エネルギー演算子はエネルギーそのものである。

この議論をまとめると次のようになる。

位置時間空間では、演算子は次のようになる。

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (9.21)$$

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (= \hat{H}) \quad (9.22)$$

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} \quad (9.23)$$

$$\hat{t} = t \quad (9.24)$$

また、運動量エネルギー空間では、

$$\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p} \quad (9.25)$$

$$\hat{E} = E \quad (9.26)$$

$$\hat{\mathbf{x}} = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \quad (9.27)$$

$$\hat{t} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial E} \quad (9.28)$$

このようになる。

これらから次のことが考察できる。

位置について波動関数を展開(フーリエ変換)した場合、運動量で展開できる。そのため、位置を確定しても

運動量は確定できない。また、時間についてした場合、エネルギーで展開できる。そのため時刻を確定したら、エネルギーは確定できない。確定するにはその系を観測するしかない。

また、正しくはロバートソンの不等式

$$\sigma(\hat{A})\sigma(\hat{B}) \geq \frac{1}{2} |([\hat{A}, \hat{B}])| \quad (9.29)$$

から、

$$\sigma(\hat{x}_i)\sigma(\hat{p}_j) \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij} \quad (9.30)$$

$$\sigma(\hat{t})\sigma(\hat{E}) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (9.31)$$

$$\sigma(\hat{x}_i)\sigma(\hat{E}) \geq 0 \quad (9.32)$$

$$\sigma(\hat{t})\sigma(\hat{p}_i) \geq 0 \quad (9.33)$$

であることが言える。

位置をほぼ確定できるような系を作る。つまり、位置の標準偏差がほぼ0の状態を作った場合。運動量の標準偏差はとて大きくなってしまふ。

時間とエネルギーの関係は理解しにくい。時間とエネルギーの関係はある時刻でのエネルギーを確定することができないということである。要するに、あるエネルギー状態である時刻を確定することができないということである。

他の物理量として角運動量がある。角運動量は

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \quad (9.34)$$

このように書けるので、角運動量演算子は位置時間空間では次のように書ける。

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{x} \times \nabla = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z) = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}, z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}, x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (9.35)$$

このとき、各成分の交換関係は次のようになる。

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad (9.36)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad (9.37)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad (9.38)$$

また、

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (9.39)$$

との交換関係は

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (9.40)$$

で、角運動量の大きさの2乗の演算子と角運動量は可換である。

このことを”角運動量空間”で考えてみる。各成分が角運動量になっている。例えば、角運動量の大きさとz方向の角運動量が確定できているとき、他の角運動量を確定することができないのは(9.36)を見れば明らかである。このときどのようなことが言えるかということ、角運動量がある円周上のどれかをとっているということが言える。

また角運動量演算子に対する波動関数は次のようになる。

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (9.41)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \quad (9.42)$$

で、この波動関数は球面調和関数と呼ばれる。

$\hat{\mathbf{L}}^2$ に対する固有値は見れば明らかだが次である。

$$\hbar^2 l(l+1) = 0, 2\hbar^2, 6\hbar^2, 12\hbar^2, 20\hbar^2, \dots \quad (9.43)$$

l が、非負整数である条件がなぜ付いているのかということ、それは便利だからである。しかし実験事実として次のような場合がある。銀原子の最外殻電子は一つで、量子は低い状態からとっていくので、したがってその電子は $m = l = 0$ であるので、磁場と相互作用はしないはずである。しかし、シュテルン・ゲルラッハの実験をしてもビームの分裂は起きてしまった。これを説明するために次の仮定をする。

「磁場中においては軌道角運動量に関するなんらかの対称性が破れることで、 $l = 0$ の状態と $l = -1$ の状態が区別できるようになった。」

この仮定を頼りにもう一つの物理量スピンについて考えたい。

l の正負を区別したい。区別できない理由として、 \hat{L}^2 が \hat{L} の、2乗に対する演算子であるからであるといえるだろう。

そこでもし、 \hat{L} の1乗に対する演算子の固有値 λ が次のようになる。

$$\lambda = \hbar l, -\hbar(l+1) \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (9.44)$$

しかし、 \hat{L} の1乗に対する演算子が存在したのなら、それはベクトル演算子であるため、固有値もベクトル固有値になるはずである。そこで次のベクトル演算子 $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ を用いて \hat{L} との内積で角運動量の一乗の演算子を定義する。

$$\hat{L} \cdot \hat{\sigma} = \hat{L}_x \hat{\sigma}_x + \hat{L}_y \hat{\sigma}_y + \hat{L}_z \hat{\sigma}_z \quad (9.45)$$

またこの固有値が実数であるため、 $\hat{L} \cdot \hat{\sigma}$ はエルミート演算子である。つまり、

$$(\hat{L} \cdot \hat{\sigma})^\dagger = \hat{L} \cdot \hat{\sigma} \quad (9.46)$$

また、 \hat{L} 自身もエルミート演算子である。また内積の対称性を持たなければならない。

$$\hat{L} \cdot \hat{\sigma} = \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \quad (9.47)$$

そのため、(9.46)は次のように変形される。

$$(\hat{L} \cdot \hat{\sigma})^\dagger = (\hat{\sigma} \cdot \hat{L})^\dagger = \hat{L}^\dagger \cdot \hat{\sigma}^\dagger = \hat{L} \cdot \hat{\sigma}^\dagger = \hat{L} \cdot \hat{\sigma} \quad (9.48)$$

より、 $\hat{\sigma}$ もエルミート演算子であるといえる。 $\hat{L} \cdot \hat{\sigma}$ の固有状態は \hat{L}^2 の固有状態でもあるはずである。つまり、 $\hat{L} \cdot \hat{\sigma}$ と \hat{L}^2 は可換である。よって、

$$[\hat{L} \cdot \hat{\sigma}, \hat{L}^2] = \sum_{i=x,y,z} [\hat{L}_i \hat{\sigma}_i, \hat{L}^2] = \sum_{i=x,y,z} (\hat{L}_i [\hat{\sigma}_i, \hat{L}^2] + [\hat{L}_i, \hat{L}^2] \hat{\sigma}_i) = \sum_{i=x,y,z} \hat{L}_i [\hat{\sigma}_i, \hat{L}^2] = 0 \quad (9.49)$$

これが成り立つためには、

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{L}^2] = 0 \quad (9.50)$$

となればよい。また、(9.47)から、

$$\hat{L}_x \hat{\sigma}_x + \hat{L}_y \hat{\sigma}_y + \hat{L}_z \hat{\sigma}_z = \hat{\sigma}_x \hat{L}_x + \hat{\sigma}_y \hat{L}_y + \hat{\sigma}_z \hat{L}_z \quad (9.51)$$

次を仮定するとこれらを満たす。

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{L}_j] = 0 \quad (9.52)$$

また、(9.43)をみたすので、

$$\hat{L} \cdot \hat{\sigma} (\hat{L} \cdot \hat{\sigma} + \hbar) = \hat{L}^2 \quad (9.53)$$

が成り立つだろう。

$$\begin{aligned} \hat{L} \cdot \hat{\sigma} (\hat{L} \cdot \hat{\sigma} + \hbar) &= \hat{L}_x^2 \hat{\sigma}_x^2 + \hat{L}_y^2 \hat{\sigma}_y^2 + \hat{L}_z^2 \hat{\sigma}_z^2 + \hat{L}_x \hat{L}_y (\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y) + \hat{L}_x \hat{L}_z (\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z) + \hat{L}_y \hat{L}_x (\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x) \\ &+ i\hbar \hat{L}_x (\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - i\hat{\sigma}_x) + i\hbar \hat{L}_y (\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y) + i\hbar \hat{L}_z (\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - i\hat{\sigma}_z) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \end{aligned} \quad (9.54)$$

より、

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1 \quad (9.55)$$

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = 0 \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = 0 \quad \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 0 \quad (9.56)$$

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x \quad \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y \quad \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z \quad (9.57)$$

をみたすことを要請している。また、(9.56)と(9.57)より、

$$[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y \quad [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z \quad (9.58)$$

である。ここで、

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (9.59)$$

これより、

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = 2i\hat{S}_x \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = 2i\hat{S}_y \quad [\hat{S}_x, \hat{S}_y] = 2i\hat{S}_z \quad (9.60)$$

これは角運動量と同じ交換関係を満たす。またこれをスピンと呼ぶ。

10. 場の方程式

空間にある物理量が分布しているとする。その分布を $\Gamma(x)$ と書く。空間に固定された体積 V を考え、その内部と表面について考える。体積 V 内の $\Gamma(x)$ の総量は $\Gamma(x)$ を体積 V にわたって積分すればよいがここではその時間変化について考える。それは、体積の外から全表面を通して単位時間に入ってくる量と、体積中に湧き出す $\Gamma(x)$ の量との和である。そこで、 V の表面の単位面積を単位時間に流れ出る量を $\Sigma(x)$ とする。面要素 dS から直角に出ていく分は $\Sigma(x) \cdot \mathbf{n}$ だから、全表面から入ってくる量はこれを全表面で積分したものに符号を変えたものである。また、体積 V 中の点 x から単位時間に湧き出る量を $q(x)$ とする。するとこれらは次のように表現される。

$$\frac{d}{dt} \int_V d^3x \Gamma(x) = \int_V d^3x \frac{\partial \Gamma(x)}{\partial t} = - \int_S dS \Sigma(x) \cdot \mathbf{n} + \int_V d^3x q(x) = - \int_V d^3x \nabla \cdot \Sigma(x) + \int_V d^3x q(x) \quad (10.1)$$

より、

$$\int_V d^3x \left[\frac{\partial \Gamma(x)}{\partial t} + \nabla \cdot \Sigma(x) - q(x) \right] = 0 \quad (10.2)$$

ここで、 V が任意であったから、

$$\frac{\partial \Gamma(x)}{\partial t} + \nabla \cdot \Sigma(x) = q(x) \quad (10.3)$$

が全量がバランスするための条件である。これをバランス方程式と呼ぶ。もし、湧き出しがなかったら、

$$\frac{\partial \Gamma(x)}{\partial t} + \nabla \cdot \Sigma(x) = 0 \quad (10.4)$$

これが成り立ち、これを特に連続の方程式という。

これらについて二つ補足がある。

これはあまりに一般的すぎるため物理法則にはならないが、 $\Gamma(x)$ と $\Sigma(x)$ の間に何か別の3個の物理関係が存在すれば、未知量の量4つに対し4つの関係式が成り立つことになり、 $\Gamma(x)$ と $\Sigma(x)$ を決定することができる。このような関係を構成方程式という。

また、 $q(x)$ が一般に0でなくても、

$$-q(x) = \frac{\partial r(x)}{\partial t} + \nabla \cdot \sigma(x) \quad (10.5)$$

と書けるとき、連続の方程式、

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ \Gamma(x) + r(x) \} + \nabla \cdot \{ \Sigma(x) + \sigma(x) \} = 0 \quad (10.6)$$

が成り立つ。このような例は多くある。

また、ここで4章の議論を深める。

$$a_k^{(r)\dagger}(t) a_k^{(r)}(t) \equiv 0, 1, 2, \dots \quad (10.7)$$

これを用いて次のエネルギー

$$H_{rad}(t) = \sum_{r=1,2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{(r)\dagger}(t) a_{\mathbf{k}}^{(r)}(t) \quad (10.8)$$

の温度 T における平均値を調べる。古典統計力学によるとエネルギーは

$$(\text{自由度}) \times \frac{1}{2} k_B T \quad (10.9)$$

で、これを電磁場の調和振動子系の場合に適用すると自由度は無限大なので、エネルギーが無限大になってしまう。これは正しい結果を与えない。

なぜなら、 $\beta = \frac{1}{k_B T}$ とすると、温度 T における平均値は、ボルツマン因子 $\exp(-\beta \epsilon)$ をかけて、

$$\langle E \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \frac{\int_0^{\infty} d\varepsilon \varepsilon \exp(-\beta\varepsilon)}{\int_0^{\infty} d\varepsilon \exp(-\beta\varepsilon)} = - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\log \int_0^{\infty} d\varepsilon \exp(-\beta\varepsilon) \right) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \frac{1}{\beta} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} k_B T \quad (10.10)$$

となってしまい、やはり、エネルギーが無限大になってしまう。そのため、(10.7)を採用すると、

$$\int_0^{\infty} d\varepsilon \exp(-\beta\varepsilon) \rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \quad (10.11)$$

となるので、

$$\langle E \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \frac{\partial}{\partial \beta} (\log\{1 - e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}}\}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}} e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}} e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}}} \quad (10.12)$$

でこれは空洞輻射に関するプランクの式である。これは実験結果とよく合う。

最後に、連続体の角運動量について考える。

物質の連続の式と運動量のバランス方程式は次のようになる。

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{x})) = 0 \quad (10.13)$$

$$\frac{\partial (\rho(\mathbf{x}) v_k(\mathbf{x}))}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho(\mathbf{x}) v_k(\mathbf{x}) v_j(\mathbf{x})) = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} T_{kj}(\mathbf{x}) + K_k(\mathbf{x}) \quad (10.14)$$

また、連続体の角運動量は次のように定義するのが自然であろう。

$$l_i(\mathbf{x}) \equiv \rho(\mathbf{x}) (\mathbf{x} \times \mathbf{v}(\mathbf{x}))_i = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} \rho(\mathbf{x}) x_j v_k(\mathbf{x}) \quad (10.15)$$

より、この時間変化は(10.14)を使うと、

$$\frac{\partial l_i(\mathbf{x})}{\partial t} + \sum_l \frac{\partial}{\partial x_l} (l_i(\mathbf{x}) v_l(\mathbf{x})) = \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} x_j \left\{ \sum_l \frac{\partial}{\partial x_l} T_{kl}(\mathbf{x}) + K_l(\mathbf{x}) \right\} \quad (10.16)$$

である。

これを整理すると、

$$\frac{\partial l_i(\mathbf{x})}{\partial t} + \sum_l \frac{\partial}{\partial x_l} \left\{ l_i(\mathbf{x}) v_l(\mathbf{x}) - \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} x_j T_{kl}(\mathbf{x}) \right\} = \frac{1}{2} \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} \{ T_{jk}(\mathbf{x}) - T_{kj}(\mathbf{x}) \} + \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} x_j K_k(\mathbf{x}) \quad (10.17)$$

これが角運動量のバランス方程式である。右辺第二項は力のモーメントで、外力がなければ0になる。右辺第一項は角運動量の湧き出しにあたる。もし、 $T_{ij}(\mathbf{x})$ が対象ならば湧き出しは0で、角運動量は保存する。また、 $T_{ij}(\mathbf{x})$ が非対称ならばそれは保存しない。逆に言うならば角運動量が保存するためには $T_{ij}(\mathbf{x})$ が対象でなければならない。

11. 電子場

電子場について考える。 $\varphi(x)$ を電子場と呼ぶことにする。電子場を素直に実験事実などから、(7.9)に代入する

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t) \right] \varphi(x) \quad (11.1)$$

電子場とはとりあえずこの段階では電子に対する波動関数とする。では、 $\varphi(x)$ によって見いだされる電子そのもとは何かと考えるとそれは(11.1)の式には含まれていない。

次に電子場の自由度はどのようになるかを考える。古典論では電子は粒子なので自由度は3しかない。しかし電子場 $\varphi(x)$ は場であるから自由度は無限である。その件を詳しくここで話してもしょうがないので極めて楽観的な立場をとってみる。それは、電子はもともと無限の自由度を持っており、古典論での自由度3は近似でしかなかったと受け入れる。

ここで、電子一つを立方体の中に閉じ込めたとき、立方体の中に電子が見いだされる確率はもちろん1である。よって、

$$\int_V d^3x \varphi^\dagger(x) \varphi(x) = 1 \quad (11.2)$$

また、電子場が次のようにフーリエ変換されているとする。

$$\varphi(x) = \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}(x) \quad (11.3)$$

またこれは直交完全性条件を満たしているとする。すると、(11.2)は次のようになる。

$$\int_V d^3x \varphi^\dagger(x) \varphi(x) = \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}, t) C^\dagger(\mathbf{k}, t) = 1 \quad (11.4)$$

電子が一個だとしたら、(11.4)の式でよいが、電子が複数個ある場合、これは正しくない。(11.1)と(11.4)の式からは電子が粒子であることを考慮して、

$$C(\mathbf{k}, t) C^\dagger(\mathbf{k}, t) = n \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (11.5)$$

とし、電子場の波動関数の絶対値の二乗が確率密度であるという解釈をやめ、電子場は電子そのものの場であるとし、その自由電子に対しては、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(x) \quad (11.6)$$

という立場をとる。電子の数はいくつでもよく、互いに相互作用していなければよい。

これにより、量 $C(\mathbf{k}, t)$ は次を満たす。

$$i\hbar \dot{C}(\mathbf{k}, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 C(\mathbf{k}, t) \quad (11.7)$$

$$i\hbar \dot{C}^\dagger(\mathbf{k}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 C^\dagger(\mathbf{k}, t) \quad (11.8)$$

である。ここで、今、

$$q(\mathbf{k}, t) \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(k)}} \{C(\mathbf{k}, t) + C^\dagger(\mathbf{k}, t)\} \quad (11.8)$$

$$p(\mathbf{k}, t) \equiv i \sqrt{\frac{\hbar\omega(k)}{2}} \{C^\dagger(\mathbf{k}, t) - C(\mathbf{k}, t)\} \quad (11.9)$$

を定義する。すると、

$$\dot{q}(\mathbf{k}, t) = p(\mathbf{k}, t) \quad (11.10)$$

$$\dot{p}(\mathbf{k}, t) = -\omega^2(k)q(\mathbf{k}, t) \quad (11.11)$$

となる。ただし、

$$\hbar\omega(k) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 \quad (11.12)$$

である。(11.10), (11.11)は座標 $q(\mathbf{k}, t)$ と正準共役運動量 $p(\mathbf{k}, t)$ の間に成り立つ調和振動子の正準方程式に他ならない。この時のハミルトニアンは、

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \{p(\mathbf{k}, t)p(\mathbf{k}, t) + \omega^2(k)q(\mathbf{k}, t)q(\mathbf{k}, t)\} \quad (11.13)$$

である。また、 $C(\mathbf{k}, t)$ を用いてかくと次のようになる。

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(k)C^\dagger(\mathbf{k}, t)C(\mathbf{k}, t) \quad (11.14)$$

また、電子場の持つ運動量も電磁場のとくと同じように、

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\mathbf{k}C^\dagger(\mathbf{k}, t)C(\mathbf{k}, t) \quad (11.15)$$

と予想される。

つぎに、 $C(\mathbf{k}, t)$ のフーリエの逆変換

$$C(\mathbf{k}, t) = \int_V d^3x f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}) \quad (11.16)$$

$$C^\dagger(\mathbf{k}, t) = \int_V d^3x \varphi^\dagger(\mathbf{x})f_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (11.17)$$

を、(11.14)に代入する。

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(k) \int_V d^3x \int_V d^3x' \varphi^\dagger(\mathbf{x})f_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}')\varphi(\mathbf{x}') \quad (11.18)$$

ここで完全性の条件から、

$$\sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(k)f_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}} \nabla f_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \cdot \nabla' f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \nabla' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (11.19)$$

より、

$$H = \int_V d^3x \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\varphi^\dagger(\mathbf{x}) \cdot \nabla\varphi(\mathbf{x}) \quad (11.20)$$

ここで、

$$\mathcal{E}(\mathbf{x}) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\varphi^\dagger(\mathbf{x}) \cdot \nabla\varphi(\mathbf{x}) \quad (11.21)$$

とすると、この時間微分はシュレーディンガー方程式などから、

$$\frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{x})}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \{ \nabla\varphi^\dagger(\mathbf{x}) \cdot \dot{\varphi}(\mathbf{x}) + \dot{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \cdot \nabla\varphi(\mathbf{x}) \} \quad (11.22)$$

であるから、エネルギーの流れを

$$\mathbf{T}_0(\mathbf{x}) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \{ \nabla\varphi^\dagger(\mathbf{x}) \cdot \dot{\varphi}(\mathbf{x}) + \dot{\varphi}^\dagger(\mathbf{x}) \cdot \nabla\varphi(\mathbf{x}) \} \quad (11.23)$$

とすると、連続の方程式

$$\frac{\partial \mathcal{E}(\mathbf{x})}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{T}_0(\mathbf{x}) = 0 \quad (11.24)$$

が満たされる。

同様に運動量の方も、

$$\mathbf{P} = \int_V d^3x \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \{ \varphi^\dagger(x) \nabla \varphi(x) - \nabla \varphi^\dagger(x) \varphi(x) \} \quad (11.25)$$

となるから、運動量密度を

$$\mathbf{p}(x) = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \{ \varphi^\dagger(x) \nabla \varphi(x) - \nabla \varphi^\dagger(x) \varphi(x) \} \quad (11.26)$$

と定義する。これに対して*i*方向の運動量の*j*方向の流れを

$$T_{ij}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \{ \partial_i \varphi^\dagger(x) \partial_j \varphi(x) + \partial_j \varphi^\dagger(x) \partial_i \varphi(x) \} + \delta_{ij} \frac{i\hbar}{2} \{ \varphi^\dagger(x) \dot{\varphi}(x) - \dot{\varphi}^\dagger(x) \varphi(x) \} - \delta_{ij} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \varphi^\dagger(x) \cdot \nabla \varphi(x) \quad (11.27)$$

としたとき、

$$\dot{p}_i(x) - \sum_j \partial_j T_{ij}(x) = 0 \quad (11.28)$$

である。これを見つけるには場の解析力学の知識が必要である。

ここで、事実として、電子は1つの量子状態に2個は入りえない。これがいわゆるフェルミ-ディラック統計に従う粒子である。そのため、(11.5)のままではいけない。つまり、

$$C(\mathbf{k}, t) C^\dagger(\mathbf{k}, t) = n \quad (n = 0, 1) \quad (11.29)$$

と制限するような理論でないといけない。そうすると、立方体の中に閉じ込められた電子場は、温度*T*における熱平衡状態でのエネルギー分布

$$\langle E \rangle = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \beta} \log \left(\sum_{n=0,1} e^{-\beta n (\hbar \omega(\mathbf{k}) - \zeta)} \right) = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \beta} \log(1 + e^{-\beta n (\hbar \omega(\mathbf{k}) - \zeta)}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar \omega(\mathbf{k})}{1 + e^{-\beta n (\hbar \omega(\mathbf{k}) - \zeta)}} \quad (11.30)$$

を持つことになる。電子の数は保存されるので、それを平均的に考慮するためにグランド正準集団について平均をとったので、定数*ζ*が入り、それを、全電子の数(*N*)が

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 + e^{-\beta n (\hbar \omega(\mathbf{k}) - \zeta)}} \quad (11.31)$$

となるように決めた。

次に、電子は電荷*e*を持っているので、それは電磁場と相互作用する。したがって電子場も電磁場と相互作用する。古典解析力学による処方

$$H_0 \rightarrow H - e A_0(x) \quad (11.32)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(x) \quad (11.33)$$

より、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e A_0(x) \quad (11.34)$$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(x) \quad (11.35)$$

と置き換えればよい。よって相互作用する電子場の方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla^2 - i \frac{e}{\hbar c} \nabla \cdot \mathbf{A}(x) - i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(x) \nabla \cdot - \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 \mathbf{A}(x) \cdot \mathbf{A}(x) \right\} \varphi(x) + e A_0(x) \varphi(x) \quad (11.36)$$

もしくは、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla - i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(x) \right\}^2 \varphi(x) + e A_0(x) \varphi(x) \quad (11.37)$$

であり、これは minimal な電磁相互作用として電磁場が考慮された結果で、この電子場にはローレンツ力に相当する力が働いている。

量子力学によると角運動量 $\hbar s$ を持った状態は $(2s + 1)$ 個の値をとり得るので、電子の場合、

$$2s + 1 = 2 \Leftrightarrow s = \frac{1}{2} \quad (11.38)$$

すなわち、電子は固有の角運動量 $\frac{\hbar}{2}$ を持つことになる。これを電子のスピンと呼ぶ。2 成分の量なのでスピノール (*spinor*) と呼ばれるものを扱う。

つまり、

$$\varphi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix} \quad (11.39)$$

を考える。また、パウリのスピン行列

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (11.40)$$

を考え、変換 a_{ij} が与えられたとき

$$\sum_j a_{ij} \sigma_j = S(a) \sigma_i S^{-1}(a) \quad (11.41)$$

で定義される 2 行 2 列のユニタリ行列 $S(a)$ を考える。

ここで回転 a_{ij} が与えられたとき、

$$\varphi'(x') = S(a) \varphi(x) \quad (11.42)$$

が成り立つとき、 $\varphi(x)$ をスピノールと呼ぶ。直感的に言うとスピノールはスカラーの平方根に当たる。事実、 $S(a)$ はユニタリ行列なので、

$$\varphi'^{\dagger}(x') = \varphi^{\dagger}(x) S^{\dagger}(a) = \varphi^{\dagger}(x) S^{-1}(a) \quad (11.43)$$

したがって、

$$\varphi'^{\dagger}(x') \varphi'(x') = \varphi^{\dagger}(x) \varphi(x) \quad (11.44)$$

より、スピノールの積 $\varphi^{\dagger}(x) \varphi(x)$ はスカラーになる。また、

$$\varphi'^{\dagger}(x') \sigma_i \varphi'(x') = \sum_j a_{ij} \varphi^{\dagger}(x) \sigma_j \varphi(x) \quad (11.45)$$

$\varphi^{\dagger}(x) \sigma_i \varphi(x)$ はベクトルになる。

ここで、先ほど議論した minimal な相互作用ではスピンをもつ電子場には十分ではなく余分な相互作用の項を加えなければならない。それは、スピンに伴って電子は磁気能率

$$\boldsymbol{\mu}_e = 2 \left(\frac{e\hbar}{2mc} \right) \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \right) \quad (11.46)$$

を持つ。これが電磁場との余分な相互作用する。これを考慮すると次のように書き換えられる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla - i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(x) \right\}^2 \varphi(x) + eA_0(x) \varphi(x) + \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \varphi(x) \cdot \mathbf{H}(x) \quad (11.47)$$

である。

電子にスピンの連続の式について考える。(11.47) の式は複雑で、電磁場の角運動量についての議論しなければならない為、かなり扱いづらい。今回は次の方程式の下での全角運動量が保存することを示す。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{l}(x) \right] \varphi(x) \quad (11.48)$$

また、 $\mathbf{l}(x)$ は(軌道)角運動量演算子である。(11.48) を満たす電子場に対して、

$$T_{ok}(x) \equiv -\frac{\hbar}{i} \varphi^\dagger(x) \partial_k \varphi(x) \quad (11.49)$$

$$T_{ik}(x) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \{ \partial_i \varphi^\dagger(x) \partial_k \varphi(x) + \partial_k \varphi^\dagger(x) \partial_i \varphi(x) \} - \frac{\hbar}{i} V(r) \varphi^\dagger(x) \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{x} \partial_k \varphi(x) \quad (11.50)$$

を定義すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{ok}(x) + \sum_i \partial_i T_{ik}(x) = 0 \quad (11.51)$$

が満たされる。

$T_{ok}(x)$ は電子場の運動量密度(の符号を変えたもの)であるから、この式は流体の場合の式(10.14)に対応する。したがってこの場合、電子場の応力テンソルは、(11.50)である。ところが、(11.50)の右辺の最後の項が、 i, k について対称になっていない。つまり、対称でない応力テンソルが働いているときは角運動量が保存しない。では、(11.48)を満たす電子場の場合、角運動量は保存しないのかというと、そうではない。確かに軌道角運動量だけでは保存しないが、(10.17)の右辺第一項に対応する項

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} \{ T_{jk}(x) - T_{kj}(x) \} &= -\frac{1}{2} \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} \frac{\hbar}{i} V(r) \{ \varphi^\dagger(x) (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{x})_j \partial_k \varphi(x) - \varphi^\dagger(x) (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{x})_k \partial_j \varphi(x) \} \\ &= -\frac{\hbar}{i} V(r) \varphi^\dagger(x) \{ x_i \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla - \sigma_i \mathbf{x} \cdot \nabla \} \varphi(x) \end{aligned} \quad (11.52)$$

を用いて運動方程式を書き直すと、これがちょうどスピン角運動量に対するバランス方程式になり、初めに考えた軌道角運動量とスピン角運動量の和が全体として連続の方程式を満たすようになる。

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \varphi^\dagger(x) \left(\mathbf{l}(x) + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \right) \varphi(x) \right\} + \\ &\sum_i \left[V(r) \varphi^\dagger(x) (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{x})_i \left(\mathbf{l}(x) + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \right) \varphi(x) \right] \\ &\left[+ \frac{\hbar}{2im} \left\{ \varphi^\dagger(x) \partial_i \left(\left(\mathbf{l}(x) + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \right) \varphi(x) \right) - \partial_i \varphi^\dagger(x) \cdot \left(\mathbf{l}(x) + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \right) \varphi(x) \right\} \right] = 0 \end{aligned} \quad (11.53)$$

第1項は、全角運動量密度の時間変化、第2項は、全角運動量の流れの湧き出しである。したがって、軌道とスピンを一緒にした全角運動量が保存する。

12. 相対論的場の方程式

アインシュタイン-ド・ブロイの関係を基礎にしてシュレーディンガー方程式を導くときの処方は、

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (12.1)$$

という関係に対して、

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (12.2)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (12.3)$$

という置き換えを行い、それを場 $\varphi(x)$ に演算してやればよかった。もし、ある粒子のエネルギーと運動量の関係が複雑な関数関係

$$E = F(\mathbf{p}) \quad (12.4)$$

で与えられていても、(12.2), (12.3)によると、

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - F\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right) \right] \varphi(x) = 0 \quad (12.5)$$

とすればよい。これを足掛かりに相対論的場の方程式を作る。相対論的粒子のエネルギーと運動量は、

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (12.6)$$

を満たすので、これを先ほどの処方を用いると、この粒子の場の方程式は、

$$\left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \right] \phi(x) = 0 \quad (12.7)$$

これが、相対論的場の理論における基本的な方程式で、クライン-ゴールドン方程式と呼ばれる。

この場を座標についてフーリエ変換すれば、クライン-ゴールドン場も調和振動子の集まりと同等であることがすぐわかる。

ここで相対論的記号について定義する。

時間と空間座標を一緒にして、

$$x_\mu = (x_1, x_2, x_3, x_4 = ict = ix_0) \quad (12.8)$$

と書くことにする。またアインシュタインの縮約記法

$$A_\mu B_\mu = A_1 B_1 + A_2 B_2 + A_3 B_3 + A_4 B_4 \quad (12.9)$$

を用いる。これを用いると、クライン-ゴールドン方程式に出てきた微分演算子は、

$$\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \square \quad (12.10)$$

と表され、ダランベール演算子と呼ばれる。また、 \square という記号であらわされることが多い。また、

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (12.11)$$

と書くことがある。また、

$$\frac{mc}{\hbar} = \kappa \quad (12.12)$$

とすると、クライン-ゴールドン方程式は

$$(\square - \kappa^2)\phi(x) = 0 \quad (12.13)$$

と書かれる。

次に、相対論的記号を用いてマクスウェル方程式を書く。

ガウス単位系でマクスウェル方程式を書くと次のようになる。

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(x) = 4\pi\rho(x) \quad (12.14)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(x) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}(x)}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(x) \quad (12.15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(x) = 0 \quad (12.16)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(x) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}(x)}{\partial t} = 0 \quad (12.17)$$

ここで、また電磁場のポテンシャルを相対論的記号で

$$A_\mu(x) = (A_1(x), A_2(x), A_3(x), iA_0(x)) \quad (12.18)$$

と置くと、電磁場は

$$F_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) = -F_{\nu\mu}(x) \quad (12.19)$$

であり、中身は、

$$F_{\mu\nu}(x) = \begin{pmatrix} 0 & H_3(x) & -H_2(x) & -iE_1(x) \\ -H_3(x) & 0 & H_1(x) & -iE_2(x) \\ H_2(x) & -H_1(x) & 0 & -iE_3(x) \\ iE_1(x) & iE_2(x) & iE_3(x) & 0 \end{pmatrix} \quad (12.20)$$

である。(μが行、νが列を表す。)

また電荷と電流も同じにして、

$$J_\mu(x) = \left(\frac{1}{c} \mathbf{j}(x), i\rho(x) \right) \quad (12.21)$$

とすると、マクスウェル方程式は簡単に

$$\partial_\mu F_{\mu\nu}(x) = -4\pi J_\nu(x) \quad (12.22)$$

となる。また、 $F_{\mu\nu}(x)$ の反対称テンソル

$$\tilde{F}_{\mu\nu}(x) = \frac{i}{2} \varepsilon_{\mu\nu\sigma\rho} F_{\sigma\rho}(x) \quad (12.23)$$

とすると、

$$\tilde{F}_{\mu\nu}(x) = \begin{pmatrix} 0 & E_3(x) & -E_2(x) & iH_1(x) \\ -E_3(x) & 0 & E_1(x) & iH_2(x) \\ E_2(x) & -E_1(x) & 0 & iH_3(x) \\ -iH_1(x) & -iH_2(x) & -iH_3(x) & 0 \end{pmatrix} \quad (12.24)$$

となる。したがって、

$$\partial_\mu \tilde{F}_{\mu\nu}(x) = 0 \quad (12.25)$$

となる。(12.22)と(12.25)の式でマクスウェル方程式と同等である。また、

$$\tilde{F}_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = 4\mathbf{E} \cdot \mathbf{H} \quad (12.26)$$

$$F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = 2(\mathbf{H}^2 - \mathbf{E}^2) \quad (12.27)$$

である。

ここで、クライン-ゴールドン方程式のベクトル版がプロカ方程式であり、

$$(\square - \kappa^2)U_\mu(x) = 0 \quad (12.28)$$

であり、電磁場は質量が 0 の場合の相対論的場の方程式であった。そのため、マクスウェル方程式にはプランク定数が現れてこなかった。

では、クライン-ゴールドン方程式に電磁相互作用を導入する。minimal な電磁相互作用を導入するにはいつも通り、

$$\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) \quad (12.29)$$

という処方を行う。したがってクライン-ゴールドン場が電磁相互作用しているときの方程式は、

$$\left[\left\{ \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) \right\} \left\{ \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) \right\} - \kappa^2 \right] \phi(x) = 0 \quad (12.30)$$

である。もし、 $\phi(x)$ が実数の場であると仮定すると、

$$\left[\left\{ \partial_\mu + i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) \right\} \left\{ \partial_\mu + i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) \right\} - \kappa^2 \right] \phi(x) = 0 \quad (12.31)$$

となる。(12.30)と(12.31)を引き算すると、

$$\left[i \frac{e}{\hbar c} \partial_\mu A_\mu(x) + i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) \partial_\mu \right] \phi(x) = 0 \quad (12.32)$$

これは、 $A_\mu(x) = 0$ でない限り、 $\phi(x) = 0$ を意味する。したがって、実数の場は電磁場と minimal な相互作用ができない。電磁場と minimal な相互作用ができるのは常に複素数の場である。

この(12.30)の式に現れるポテンシャルはユニークではなく、任意のスカラー $\chi(x)$ で、

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + \partial_\mu \chi(x) = A'_\mu(x) \quad (12.33)$$

と置き換えても $F_{\mu\nu}$ は変わらない。この変換はゲージ変換と呼ばれる。では、(12.30)の式に対し、ゲージ変換した $A'_\mu(x)$ を代入し、解を $\phi'(x)$ であるとする。

$$\begin{aligned} & \left[\left\{ \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A'_\mu(x) \right\} \left\{ \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A'_\mu(x) \right\} - \kappa^2 \right] \phi'(x) \\ &= \left[\left\{ \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) - i \frac{e}{\hbar c} \partial_\mu \chi(x) \right\} \left\{ \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) - i \frac{e}{\hbar c} \partial_\mu \chi(x) \right\} - \kappa^2 \right] \phi'(x) \end{aligned} \quad (12.34)$$

であり、

$$\phi'(x) = e^{i \frac{e}{\hbar c} \chi(x)} \phi(x) \quad (12.35)$$

とすれば、(12.30)の式に戻る。したがって、(12.33)のゲージ変換と(12.35)を同時におこなえば方程式は不変である。また、(12.35)を第1種のゲージ変換、(12.33)を第2種のゲージ変換と呼ばれる。

第2種ゲージ変換によって、運動量密度

$$\frac{\hbar}{i} \phi^\dagger(x) \partial_i \phi(x) \rightarrow \frac{\hbar}{i} \phi'^\dagger(x) i \frac{e}{\hbar c} (\partial_i \chi(x)) \phi'(x) \quad (12.36)$$

はゲージ不変でない。しかし、速度の密度

$$\frac{\hbar}{i} \phi^\dagger(x) \left[\partial_i - i \frac{e}{\hbar c} A_i(x) \right] \phi(x) \quad (12.37)$$

はゲージによらない。観測量はゲージによらないはずだから、それらはいつでもゲージ不変なように定義しておかなければならない。例えば、クライン-ゴールドン場の持つ電荷と電流は

$$J_\mu(x) = -i \frac{e}{\hbar c} \left[\phi^\dagger(x) \left\{ \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) \right\} \phi(x) \right] - \left\{ \partial_\mu - i \frac{e}{\hbar c} A_\mu(x) \right\} \phi^\dagger(x) \cdot \phi(x) \quad (12.38)$$

と定義すると、これが次の連続の方程式

$$\partial_\mu J_\mu(x) = 0 \quad (12.39)$$

を満たす。また、

$$\partial_\mu F_{\mu\nu}(x) = -4\pi J_\nu(x) \quad (12.40)$$

$$\partial_\mu \tilde{F}_{\mu\nu}(x) = 0 \quad (12.41)$$

を見れば、4次元回転(ローレンツ変換)に対して不変であることが一目瞭然であることが分かる。そのため、電磁場は特殊相対性理論でもそのまま使うことができる。

つぎに、クライン-ゴールドン方程式の基本的な解について考える。クライン-ゴールドン方程式は2階の線型方程式なので、一般に2個の独立な解がある。線形方程式であるから解の規格化を自由に行うことができる。そ

の2個のうち特に重要な基本的な解は次の性質を

$$(\square - \kappa^2)\Delta(x) = 0 \quad (12.42)$$

$$\Delta(x) = 0 \quad x^2 > 0 \quad (12.43)$$

$$\frac{1}{c}\dot{\Delta}(x)|_{t=0} = -\delta(x) \quad (12.44)$$

満たすものとして考える。

これらを4次元フーリエ変換する。ここで、

$$kx = \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - ck_0t \quad (12.45)$$

として、

$$\Delta(x) \equiv \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{ikx} \Delta[k] \quad (12.46)$$

と置く。すると、(12.42)を満たすので、

$$(k^2 + \kappa^2)\Delta[k] = 0 \quad (12.47)$$

である。つまり、

$$x\delta(x) = 0 \quad (12.48)$$

であるから、

$$\Delta[k] = f(k)\delta(k^2 + \kappa^2) \quad (12.49)$$

である。ただし、 $f(k)$ は k の任意の関数である。(12.43)と(12.44)から、 $f(k)$ を決める。

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|} \quad (12.50)$$

より、

$$\delta(k^2 + \kappa^2) = \frac{\delta(k_0 - \sqrt{\mathbf{k}^2 + \kappa^2}) + \delta(k_0 + \sqrt{\mathbf{k}^2 + \kappa^2})}{2\sqrt{\mathbf{k}^2 + \kappa^2}} \quad (12.51)$$

ここで、

$$\omega(k) = c\sqrt{\mathbf{k}^2 + \kappa^2} \quad (12.52)$$

と置き、

$$\Delta[k] = cf(k) \frac{\delta\left(k_0 - \frac{\omega(k)}{c}\right) + \delta\left(k_0 + \frac{\omega(k)}{c}\right)}{2\omega(k)} \quad (12.53)$$

と置けるので、これを(12.46)に代入すると、

$$\Delta(x) = \frac{c}{2(2\pi)^4} \int d^4k e^{ikx} \frac{f(k)}{\omega(k)} \left\{ \delta\left(k_0 - \frac{\omega(k)}{c}\right) + \delta\left(k_0 + \frac{\omega(k)}{c}\right) \right\} \quad (12.54)$$

である。また、 $t = 0$ を考えると、

$$\Delta(x)|_{t=0} = \frac{c}{2(2\pi)^4} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{\omega(k)} \left\{ f\left(\mathbf{k}, \frac{\omega(k)}{c}\right) + f\left(\mathbf{k}, -\frac{\omega(k)}{c}\right) \right\} \quad (12.55)$$

である。これが、(12.43)を満たすので、

$$f\left(\mathbf{k}, \frac{\omega(k)}{c}\right) + f\left(\mathbf{k}, -\frac{\omega(k)}{c}\right) = 0 \quad (12.56)$$

でなければならない。(12.43)を満たすためには正負両方の振動数を持った部分が必要であり、それらがちょうど(12.56)を満たすように打ち消し合っていないなければならない。次に(12.44)について調べるため、(12.54)を時間微分して $t = 0$ と置くと、

$$\begin{aligned}\frac{1}{c}\dot{\Delta}(x)|_{t=0} &= -i\frac{c}{2(2\pi)^4}\int d^4k e^{ikx}k_0\frac{f(k)}{\omega(k)}\left\{\delta\left(k_0-\frac{\omega(k)}{c}\right)+\delta\left(k_0+\frac{\omega(k)}{c}\right)\right\} \\ &= -i\frac{1}{2(2\pi)^4}\int d^3k e^{ikx}\left\{f\left(\mathbf{k},\frac{\omega(k)}{c}\right)-f\left(\mathbf{k},-\frac{\omega(k)}{c}\right)\right\}\end{aligned}\quad (12.57)$$

これが常に、(12.44)を満たすので、

$$\frac{i}{4\pi}\left\{f\left(\mathbf{k},\frac{\omega(k)}{c}\right)-f\left(\mathbf{k},-\frac{\omega(k)}{c}\right)\right\}=1\quad (12.58)$$

したがって、(12.56)と(12.58)から、

$$f\left(\mathbf{k},\frac{\omega(k)}{c}\right)=-f\left(\mathbf{k},-\frac{\omega(k)}{c}\right)=-2\pi i\quad (12.59)$$

となる。したがって、

$$\varepsilon(k_0)=\begin{cases} 1 & k_0 > 0 \\ -1 & k_0 < 0 \end{cases}\quad (12.60)$$

となる関数を導入すると、

$$f(k)=-2\pi i\varepsilon(k_0)\quad (12.61)$$

したがって、

$$\Delta(x)=-\frac{i}{(2\pi)^3}\int d^4k e^{ikx}\varepsilon(k_0)\delta(k^2+\kappa^2)\quad (12.62)$$

であり、これが求めたかった解である。

では、これを用いてクライン-ゴルドン方程式のグリーン関数は、

$$(\square-\kappa^2)\Delta_G(x)=\delta^{(4)}(x)\quad (12.63)$$

を満たすものである。ここで、過去から伝わってくる場を議論するために、

$$\Delta^{(r)}(x)=\theta(t)\Delta(x)\quad (12.64)$$

という関数を考え、

$$\theta(t)=\begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}\quad (12.65)$$

$$\frac{d\theta(t)}{dt}=\delta(t)\quad (12.66)$$

$\theta(t)$ は上のような関数である。また、 $\Delta^{(r)}(x)$ は、(12.63)を満たしている。 $\Delta^{(r)}(x)$ は、過去の影響を取り出しているので、遅延関数と呼ばれている。質量がないときは、

$$D^{(r)}(x)=-\frac{1}{2\pi}\delta(x^2)\theta(t)=-\frac{1}{4\pi}\frac{\delta(ct-|\mathbf{x}|)}{|\mathbf{x}|}\quad (12.67)$$

このように表される。

では次にクライン-ゴルドン場 $\phi(x)$ が、ある与えられた場 $\eta(x)$ と、次のような関係が

$$(\square-\kappa^2)\phi(x)=\eta(x)\quad (12.68)$$

与えられているとき、(12.64)を用いて、

$$\phi(x)=\phi^{in}(x)+\int d^4x'\Delta^{(r)}(x-x')\eta(x')\quad (12.69)$$

と書くことができ、

$$(\square-\kappa^2)\phi^{in}(x)=0\quad (12.70)$$

である。(12.69)はヤング-フェルドマンの式と呼ばれ、これは場の量子論で重要な式で物理的意味は次である。

(12.69)の右辺第1項は、源に関係なく初めからあった場、第2項は過去の点 x' にあった源の影響が点 x まで伝

播する様子を示したもので、 $\Delta^{(r)}(x)$ の性質から、点 x を頂点とする過去の光円錐の中に分布していた源だけが点 x における場 $\phi(x)$ に寄与している。この意味でヤング-フェルドマンの方程式は因果律ともよく適合した表現であり、場 $\phi(x)$ は過去の全てを集約したものであるとよい。

また、階段関数 $\theta(t)$ のフーリエ積分表示は次のようになる。

$$\theta(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha - i\varepsilon} \quad (12.71)$$

これで、最後に $\varepsilon \rightarrow 0$ をとる。

被積分関数は複素平面上の $\alpha = i\varepsilon$ に単極がある。 $t > 0$ のとき、積分路を実軸とその上側を通る経路を C_+ とすれば、

$$\theta(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha - i\varepsilon} = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_+} d\alpha \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha - i\varepsilon} = 1 \quad (12.72)$$

また、 $t < 0$ のとき、極を含まない経路を C_- とすれば、

$$\theta(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha - i\varepsilon} = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_-} d\alpha \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha - i\varepsilon} = 0 \quad (12.73)$$

よって、 $\Delta^{(r)}(x)$ は次のように表される。

$$\begin{aligned} \Delta^{(r)}(x) &= \theta(t)\Delta(x) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k \int d\alpha \frac{e^{i\alpha t}}{\alpha - i\varepsilon} \varepsilon(k_0) \delta(k^2 + \kappa^2) e^{ikx} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k \int d\alpha \frac{1}{\alpha - i\varepsilon} \frac{1}{2\omega(k)} \left\{ \delta\left(k_0 - \frac{\omega(k)}{c}\right) - \delta\left(k_0 + \frac{\omega(k)}{c}\right) \right\} e^{ikx} e^{-i\alpha t} e^{i\alpha t} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{ikx} \frac{c}{2\omega(k)} \left\{ \frac{1}{ck_0 + \omega(k) + i\varepsilon} - \frac{1}{-ck_0 + \omega(k) + i\varepsilon} \right\} \end{aligned} \quad (12.74)$$

より、遅延プロパゲーターのフーリエ積分表示において、 ck_0 の複素平面において、極は $ck_0 = \pm\omega(k) - i\varepsilon$ である。極の位置を表す量

$$\omega(k) = c\sqrt{\mathbf{k}^2 + \kappa^2} \quad (12.75)$$

を(12.6)の関係

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (12.76)$$

と比べると、波数と運動量は

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (12.77)$$

となるので、

$$E^2 = (\hbar\omega(k))^2 \quad (12.78)$$

である。すなわち、遅延プロパゲーターのフーリエ積分表示において、 ck_0 の複素平面において、極の位置が伝播する粒子のエネルギーを表している。ほかの種類のプロパゲーターについても同じで極が下半面に出るのが遅延プロパゲーターで、上半面に出るのが先進プロパゲーター、上下に分かれているのがファインマンのプロパゲーターであり、これらも、極の虚軸からの距離が伝播する粒子のエネルギーを表している。

では、(12.78)の平方根は

$$E = \pm \hbar\omega(k) \quad (12.79)$$

で、正負両方のエネルギーが出てくる。では、負のエネルギーを持った粒子に対応するのか。もし、負のエネルギーを持った粒子が存在したとすると、(負のエネルギーを持った)粒子を放出すると、元のエネルギーが増える。また、負のエネルギーがあると、正のエネルギーを放出することで、負のエネルギー状態へ落ち込むことができる。限りなくより低いエネルギーをとることができ、このプロセスに終わりが無いので、全ての状態が不安定となる。しかし、現実には起こり得るのは、粒子を吸収すればエネルギーは増え、粒子を放出すればエネルギーは減るという単純な事実だけである。だからといって、負のエネルギーを捨て去ってしまうと、相対

論的因果律が成り立たなくなってしまう。ここで解釈を変え、負のエネルギーを持った粒子を吸収するという代わりに、正のエネルギーをもった何らかの粒子を放出するとすれば、単純な事実と矛盾しなくて済む。もちろん、負のエネルギーを持った粒子を放出するというを、正のエネルギーを持った何らかの粒子を吸収すると解釈しなせばよい。そこで、実際に観測する負のエネルギーを持った何らかの粒子を反粒子と呼ぶ。したがって、反粒子もつねに正のエネルギーを持ったものである。

このようにクライン-ゴールドン方程式に従う場の中には粒子とその反粒子がいるということである。また、実数場するとき、粒子と反粒子は同じものであるということが分かっている。複素数場の場合には、粒子と反粒子は別物になる。したがって、複素場に属する粒子と反粒子が衝突すると、エネルギーと運動量の保存に矛盾しないように光子が放出される。電磁場は実数場であるから、光子と反光子は同一のもので、反光子などと特別ななどと特別に観測されることはない。複素場は実場より 2 倍多くの自由度を持っているため、粒子と反粒子という余計な自由度が出てきたのである。粒子が電荷をもっていれば、反粒子は反対の符号を持っている。陽子の電荷は+だから、反陽子は-の電荷をもつ。電子は-の電荷をもち反電子は+の電荷をもつ。

また、シュレーディンガー方程式の遅延プロパゲータには極が一つしかない。つまり、シュレーディンガー場には反粒子は含まれていない。また、相対論的因果も満たしていない。

この議論は言葉のみであるためまだ数式で定式化していない。そのため、次はこれを数式で定式化する。重要なことは、場は調和振動子の集まりと理解できることである。

量子化するにあたって、クライン-ゴールドン場もオペレーターであると考え。すると方程式は、

$$(\square - \kappa^2)\hat{\phi}(x) = \left(-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2 - \kappa^2\right)\hat{\phi}(x) = 0 \quad (12.80)$$

これは、空間座標に対しフーリエ変換すると、それを座標とする調和振動子になる。波数 \mathbf{k} を持ったフーリエ変換の満たす調和振動子の角振動数は

$$\omega(k) = c\sqrt{\mathbf{k}^2 + \kappa^2} \quad (12.81)$$

である。

調和振動子とクライン-ゴールドン場の対応する式を並べて書き出してみると次のようになる。

$$\ddot{q}(t) = -\omega^2 q(t) \quad (12.82)$$

$$\ddot{\hat{\phi}}(x) = -c^2(\nabla^2 + \kappa^2)\hat{\phi}(x) \quad (12.83)$$

これらを分解するために、

$$\dot{q}(t) \equiv p(t) \quad (12.84)$$

$$\hat{\pi}(x) \equiv c^2\hat{\pi}(x) \quad (12.85)$$

を導入すると、

$$\dot{p}(t) = -\omega^2 q(t) \quad (12.86)$$

$$\hat{\pi}(x) = -c^2(\nabla^2 + \kappa^2)\hat{\phi}(x) \quad (12.87)$$

と書かれる。次にハミルトニアン

$$H_0 = \frac{1}{2}\{p^2(t) + \omega^2 q^2(t)\} \quad (12.88)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2}\int d^3x\{c^2\hat{\pi}(x)\hat{\pi}(x) + \nabla\hat{\phi}(x) \cdot \nabla\hat{\phi}(x) + \kappa^2\hat{\phi}(x)\hat{\phi}(x)\} \quad (12.89)$$

及び、交換関係

$$[p(t), q(t)] = -i\hbar \quad (12.90)$$

$$[p(t), p(t)] = [q(t), q(t)] = 0 \quad (12.91)$$

$$[\hat{\pi}(x, t), \hat{\phi}(x', t)] = -i\hbar\delta(x - x') \quad (12.92)$$

$$[\hat{\pi}(x, t), \hat{\pi}(x', t)] = [\hat{\phi}(x, t), \hat{\phi}(x', t)] = 0 \quad (12.93)$$

をとると、ハイゼンベルクの運動方程式

$$i\hbar\dot{p}(t) = [p(t), H_0] \quad (12.94)$$

$$i\hbar\dot{q}(t) = [q(t), H_0] \quad (12.95)$$

$$i\hbar\dot{\hat{\pi}}(x) = [\hat{\pi}(x), \hat{H}_0] \quad (12.96)$$

$$i\hbar\dot{\hat{\phi}}(x) = [\hat{\phi}(x), \hat{H}_0] \quad (12.97)$$

とすれば、(12.82), (12.83)は再現される。消滅生成演算子 a と a^\dagger を、

$$q(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \{a(t) + a^\dagger(t)\} \quad (12.98)$$

$$p(t) = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \{a(t) - a^\dagger(t)\} \quad (12.99)$$

$$\hat{\phi}(x) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega(k)}} \{\hat{a}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}(x) + \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}^*(x)\} \quad (12.100)$$

$$\hat{\pi}(x) = -i \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega(k)}{2c^2}} \{\hat{a}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}(x) - \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}^*(x)\} \quad (12.101)$$

で導入すると、ハミルトニアンは（零点エネルギー落とした）、

$$H_0 = \hbar\omega a^\dagger(t) a(t) \quad (12.102)$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(k) \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}(\mathbf{k}, t) \quad (12.103)$$

となり、状態

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad (12.104)$$

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n_j!}} \{\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_j)\}^{n_j} |0\rangle \quad (12.105)$$

に対して固有値

$$H_0 |n\rangle = \hbar\omega n |n\rangle \quad (12.106)$$

$$\hat{H}_0 |n_1, n_2, \dots\rangle = \{\hbar\omega(k_1)n_1 + \hbar\omega(k_2)n_2 + \dots\} |n_1, n_2, \dots\rangle \quad (12.107)$$

をとる。ただし、

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad (12.108)$$

$$n_j = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{各}j\text{について}) \quad (12.109)$$

であり、また、

$$a(t) = e^{-i\omega t} a \quad (12.110)$$

$$a^\dagger(t) = e^{i\omega t} a^\dagger \quad (12.111)$$

$$\hat{a}(\mathbf{k}, t) = e^{-i\omega(k)t} \hat{a}(\mathbf{k}) \quad (12.112)$$

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, t) = e^{i\omega(k)t} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \quad (12.113)$$

である。

ハミルトニアン(12.89)からエネルギー密度を取り出すと、

$$\hat{\mathcal{E}}(x) = \frac{1}{2} \{c^2 \hat{\pi}(x) \hat{\pi}(x) + \nabla \hat{\phi}(x) \cdot \nabla \hat{\phi}(x) + \kappa^2 \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(x)\} \quad (12.114)$$

エネルギーの流れをみるために、これを時間微分して整理すると次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{E}}(x) = \frac{c^2}{2} \nabla \cdot \{ \nabla \hat{\phi}(x) \cdot \hat{\pi}(x) + \hat{\pi}(x) \nabla \hat{\phi}(x) \} \quad (12.115)$$

これは連続の方程式で、右辺がエネルギーの流れの湧き出しの符号を変えたものである。したがって、運動量密度は

$$\hat{\mathbf{p}}(x) = -\frac{1}{2} \{ \nabla \hat{\phi}(x) \cdot \hat{\pi}(x) + \hat{\pi}(x) \nabla \hat{\phi}(x) \} \quad (12.116)$$

となり、事実これに(12.100), (12.101)を代入し、全空間について積分すると全運動量のオペレーター

$$\hat{\mathbf{P}} = \int d^3x \hat{\mathbf{p}}(x) = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}(\mathbf{k}, t) \quad (12.117)$$

が得られる。また、

$$\hat{\mathbf{P}}|n_1, n_2, \dots\rangle = \{ \hbar \mathbf{k}_1 n_1 + \hbar \mathbf{k}_2 n_2 + \dots \} |n_1, n_2, \dots\rangle \quad (12.118)$$

が得られる。結局 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ とは、エネルギー $\hbar\omega(k_1)$ 、運動量 $\hbar\mathbf{k}_1$ をもった粒子が n_1 個、エネルギー $\hbar\omega(k_2)$ 、運動量 $\hbar\mathbf{k}_2$ をもった粒子が n_2 個、…ある状態である。これらの粒子はボース-アインシュタイン統計に従う。

また、 $\hat{a}(\mathbf{k})$ と $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ の役割は、

$$\hat{a}(\mathbf{k}_i)|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i}|n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (12.119)$$

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_i)|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1}|n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (12.120)$$

である。すなわち、 $\hat{a}(\mathbf{k}_i)$ は運動量 $\hbar\mathbf{k}_i$ を持った粒子を1個減らし、 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_i)$ は運動量 $\hbar\mathbf{k}_i$ を持った粒子を1個増やす。 \hat{a} を消滅演算子、 \hat{a}^\dagger を発生演算子と呼ぶ。ボース粒子の発生消滅演算子は、交換関係

$$[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (12.121)$$

$$[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}(\mathbf{k})] = [\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})] = 0 \quad (12.122)$$

である。

展開(12.100)に戻ってみると、この式のエルミート共役をとったとき、元に戻ることがすぐわかる。すなわち今まで考えてきたクライン-ゴールドン場はエルミートな場で(12.32)の注意より、minimalな電磁相互作用ができない。今までの場 $\hat{\phi}(x)$ は中性のスピンのない(スカラー)粒子を表していることになる。

電磁場と minimalな相互作用ができるような粒子を得るにはエルミートでない場を考える。その場には自由度が2倍に増えるので発生消滅演算子も $\hat{a}(\mathbf{k})$ と $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ では足りなくて、もう1種類の発生消滅演算子 $\hat{b}(\mathbf{k})$ と $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k})$ を導入し、

$$\hat{\phi}(x) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega(\mathbf{k})}} \{ \hat{a}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}(x) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}^*(x) \} \quad (12.123)$$

$$\hat{\pi}(x) = \frac{1}{c^2} \dot{\hat{\phi}}(x) = -i \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar\omega(\mathbf{k})}{2c^2}} \{ \hat{b}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}(x) - \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}^*(x) \} \quad (12.124)$$

と展開する。ここで、 $\hat{b}(\mathbf{k})$ と $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k})$ は、 $\hat{a}(\mathbf{k})$ と $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ とまったく同じ交換関係(12.121)、(12.122)を満たし、かつ、 $\hat{a}(\mathbf{k})$ と $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})$ とは完全に交換するようなオペレーターである。エルミートな場のとまったく同様にして、ハミルトニアン

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{1}{2} \int d^3x \{ c^2 \hat{\pi}^\dagger(x) \hat{\pi}(x) + \nabla \hat{\phi}^\dagger(x) \cdot \nabla \hat{\phi}(x) + \kappa^2 \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x) \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega(\mathbf{k}) \{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}(\mathbf{k}, t) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{b}(\mathbf{k}, t) \} + (\text{零点エネルギー}) \end{aligned} \quad (12.125)$$

と運動量のオペレーターも、

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}} &= - \int d^3x \{ \nabla \hat{\phi}(x) \cdot \hat{\pi}(x) + \hat{\pi}^\dagger(x) \nabla \hat{\phi}^\dagger(x) \} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} \{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{a}(\mathbf{k}, t) + \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{b}(\mathbf{k}, t) \}\end{aligned}\quad (12.126)$$

である。これはエルミートな場のとくと比べると、 $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k}, t) \hat{b}(\mathbf{k}, t)$ が出てきただけである。 $\hat{a}(\mathbf{k}, t)$ によって消される粒子と $\hat{b}(\mathbf{k}, t)$ によって消される粒子は、物理的にどのような差があるだろうか。

クライン-ゴルドン場の電磁相互作用は(12.21)と(12.38)の式から電荷密度は、

$$\hat{\rho}(x) = i \frac{e}{\hbar c^2} \{ \hat{\phi}^\dagger(x) \dot{\hat{\phi}}(x) - \dot{\hat{\phi}}^\dagger(x) \hat{\phi}(x) \} + 0(e^2) = i \frac{e}{\hbar} \{ \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\pi}^\dagger(x) - \hat{\pi}(x) \hat{\phi}(x) \} + 0(e^2) \quad (12.127)$$

でしたがって全電荷は、

$$\hat{Q} = i \frac{e}{\hbar} \int d^3x \{ \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\pi}^\dagger(x) - \hat{\pi}(x) \hat{\phi}(x) \} + 0(e^2) = e \sum_{\mathbf{k}} \{ \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}) - \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{b}(\mathbf{k}) \} + 0(e^2) \quad (12.128)$$

である。ただし、これは保存量であるから、 $t=0$ とおいた。これから、明らかに、

$$\hat{Q} \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) |0\rangle = e \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) |0\rangle \quad (12.129)$$

$$\hat{Q} \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) |0\rangle = -e \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) |0\rangle \quad (12.130)$$

で、 $\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) |0\rangle$ は電荷 e を持つ状態、 $\hat{b}^\dagger(\mathbf{k}) |0\rangle$ は電荷 $-e$ を持つ状態である。後者を前者の反粒子と呼ぶ。これは単なる名前の付け方で、「反」が付いているからといって、元の粒子とは電荷が違っただけであり、粒子であることにはいっこうに変わりがない。なので、前者を後者の反粒子と呼んでも構わない。

エルミートでない場を考える。場 $\hat{\phi}(x)$ は、粒子を消すオペレーターと反粒子を発生するオペレーターとの線形結合である。そこで、次の量を考える。

$$\begin{aligned}\langle 0 | \hat{\phi}(x') \hat{\phi}^\dagger(x) | 0 \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega(k')}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega(k)}} \langle 0 | \hat{a}(\mathbf{k}') \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) | 0 \rangle f_{\mathbf{k}'}(x') f_{\mathbf{k}}^*(x) e^{-i\omega(k')t'} e^{i\omega(k)t} \\ &= \hbar c \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}(x') f_{\mathbf{k}}^*(x) \frac{c}{2\omega(k)} e^{-i\omega(k)(t'-t)}\end{aligned}\quad (12.131)$$

$$\begin{aligned}\langle 0 | \hat{\phi}^\dagger(x) \hat{\phi}(x') | 0 \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega(k')}} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega(k)}} \langle 0 | \hat{b}(\mathbf{k}) \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}') | 0 \rangle f_{\mathbf{k}}(x) f_{\mathbf{k}'}^*(x') e^{-i\omega(k)t} e^{i\omega(k')t'} \\ &= \hbar c \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}(x) f_{\mathbf{k}}^*(x') \frac{c}{2\omega(k)} e^{-i\omega(k)(t-t')}\end{aligned}\quad (12.132)$$

いま、

$$\Delta^{(+)}(x' - x) \equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{c}{2\omega(k)} e^{i\mathbf{k}(x'-x)} e^{-i\omega(k)(t'-t)} \quad (12.133)$$

と置いて、次の極限の関係

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} (\dots) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k (\dots) \quad (12.134)$$

を考えると、

$$\Delta^{(+)}(x' - x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{c}{2\omega(k)} e^{i\mathbf{k}(x'-x)} e^{-i\omega(k)(t'-t)} \quad (12.135)$$

次にこれらの式の相対論的因果律について考える。相対論的因果律とは光より速く情報が伝わらないということを中心として、情報を運ばないならば、どんなに速く走っても構わないということである。(12.133)について、 $\Delta^{(+)}$ は平面波を重ね合わせたものになっており、各平面波の位相速度は

$$v_{phase} = \frac{\omega(k)}{|\mathbf{k}|} = c \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}} \quad (12.136)$$

であり、明らかに光速度より大きい。一方群速度の方は、

$$v_{group} = \left| \frac{\partial \omega(k)}{\partial \mathbf{k}} \right| = \frac{c^2 |\mathbf{k}|}{\omega(k)} = c \sqrt{1 - \frac{\kappa^2}{k^2 + \kappa^2}} \quad (12.137)$$

となり、光速度よりは小さい。したがって、コンプトン波長くらいの幅を持った波束(粒子存在確率の山)は、時間的な方向にしか進まない。実際、 $\hat{\phi}(x)$ と $\hat{\phi}^\dagger(x')$ の交換関係をとってみると、

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\phi}^\dagger(x')] = i\hbar c \Delta(x - x') \quad (12.138)$$

となる。ここで、 Δ は(12.131)から(12.132)を引いたものであり、 x と x' が互いに空間的であるときは完全に0になっている。ロバートソンの不等式から、

$$\sigma(\hat{\phi}(x))\sigma(\hat{\phi}^\dagger(x')) \geq 0 \quad (12.139)$$

が成り立ち、点 x において場 $\hat{\phi}(x)$ を測定したときの不確定が空間的に離れた点 x' における場の不確定さに全然影響を与えないことが分かる。交換関係(12.138)は、(12.131)、(12.132)の2式の差であって、ちょうど粒子の影響と反粒子の影響が空間的領域で消し合っている。

では次にクーロンゲージの場合での電磁場を量子化してみる。しかし、相対論的共変性は失ってしまうがここではしょうがない。

まずクーロンゲージのとき

$$\hat{\mathbf{A}}(x) = \sqrt{4\pi\hbar c^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \frac{1}{2\omega(k)} \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \{ \hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}(x) + \hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}^*(x) \} \quad (12.140)$$

$$\hat{\mathbf{E}}^v(x) = -\frac{1}{c} \dot{\hat{\mathbf{A}}}(x) = i\sqrt{4\pi\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \sqrt{\frac{\omega(k)}{2}} \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \{ \hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}(x) - \hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}^*(x) \} \quad (12.141)$$

ただし、

$$\omega(k) = c|\mathbf{k}| \quad (12.142)$$

ここで、 $\hat{a}^{(r)}$ と $\hat{a}^{(r)\dagger}$ に対し、交換関係

$$[\hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}, t), \hat{a}^{(r')\dagger}(\mathbf{k}', t')] = \delta_{rr'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (12.143)$$

$$[\hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}, t), \hat{a}^{(r')\dagger}(\mathbf{k}', t)] = [\hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}, t), \hat{a}^{(r')}(\mathbf{k}', t)] = 0 \quad (12.144)$$

を課すと、

$$[\hat{E}_i^v(x, t), \hat{A}_j(x', t)] = i4\pi\hbar \left(\delta_{ij} - \partial_i \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \right) \delta(x - x') \quad (12.145)$$

$$[\hat{E}_i^v(x, t), \hat{E}_j^v(x', t)] = [\hat{A}_i(x, t), \hat{A}_j(x', t)] = 0 \quad (12.146)$$

が成り立つ。これらを得るために、ベクトルの完全性条件

$$\sum_{r=1,2} \mathbf{e}_i^{(r)}(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^{(r)}(\mathbf{k}) + \frac{1}{k^2} k_i k_j = \delta_{ij} \quad (12.147)$$

を用いた。また、

$$\left(\delta_{ij} - \partial_i \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \right) \delta(x - x') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) e^{i\mathbf{k}(x-x')} \quad (12.148)$$

という意味である。(12.145)で $(\delta_{ij} - \partial_i \frac{1}{\nabla^2} \partial_j)$ が出たのはクーロンゲージ

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}(x) = 0 \quad (12.149)$$

をとったためである。

次にハイゼンベルクの運動方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_i(x) = [\hat{A}_i(x), \hat{H}] \quad (12.150)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{E}_i^v(x) = [\hat{E}_i^v(x), \hat{H}] \quad (12.150)$$

を得るためにハミルトニアンを作る。ここではまず電流と電荷がない場合を考える。自由な電磁ポテンシャルの式

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \hat{A}_i(x) = 0 \quad (12.152)$$

とそれに対応するハミルトニアン

$$\hat{H}_{e.m.0} = \frac{1}{8\pi} \int d^3x \{ \hat{\mathbf{E}}^v(x) \hat{\mathbf{E}}^v(x) + \hat{\mathbf{H}}(x) \hat{\mathbf{H}}(x) \} \quad (12.153)$$

を考え、

$$[\hat{E}_i^v(x, t), \hat{H}_j(x', t)] = \varepsilon_{jkl} \partial'_k [\hat{E}_i^v(x, t), \hat{A}_l(x', t)] = 4\pi\hbar c i \varepsilon_{ikl} \partial'_k \left(\delta_{il} - \partial_i \frac{1}{\nabla^2} \partial_l \right) \delta(x - x') \quad (12.154)$$

である。これを用いると、

$$i\hbar \hat{E}_i^v(x) = [\hat{E}_i^v(x), \hat{H}] = i\hbar c \varepsilon_{ijk} \hat{H}_k(x) \quad (12.155)$$

$$i\hbar \hat{A}_i(x) = [\hat{A}_i(x), \hat{H}] = -4\pi i \hbar c \hat{E}_i^v(x) \quad (12.156)$$

が得られる。(12.156)は $\hat{E}_i^v(x)$ の定義式で、(12.155)は変位電流に関するマクスウェル方程式である。(12.140)と(12.141)の表現をハミルトニアン(12.153)に代入して整理すると次のようになる。

$$\hat{H}_{e.m.0} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \hbar\omega(\mathbf{k}) \left\{ \hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}) \hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right\} \quad (12.157)$$

が得られる。ただし、相互作用のない電磁場を考えているので、

$$\hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}, t) = \hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}) e^{-i\omega(\mathbf{k})t} \quad (12.158)$$

$$\hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}, t) = \hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}) e^{i\omega(\mathbf{k})t} \quad (12.159)$$

と書けることを利用した。

(12.158)には、古典電磁場のときに比べ、最後の項 $\frac{1}{2}\hbar\omega(\mathbf{k})$ だけ余計に入っている。この項 $\sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \frac{1}{2}\hbar\omega(\mathbf{k})$ を零点エネルギーと呼ぶ。つぎからはこの項を除外して話を進める。

$$\hat{H}_0 \equiv \hat{H}_{e.m.0} - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \frac{1}{2}\hbar\omega(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \hbar\omega(\mathbf{k}) \hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}) \hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}) \quad (12.160)$$

次に、真空状態 $|0\rangle$ を考えると、

$$\hat{H}_0 |0\rangle = 0 \quad (12.161)$$

次に、状態

$$\Phi(\mathbf{k}_1, r_1) \equiv \hat{a}^{(r_1)\dagger}(\mathbf{k}_1) |0\rangle \quad (12.162)$$

を考える。すると、

$$\hat{H}_0 \Phi(\mathbf{k}_1, r_1) = \hbar\omega(\mathbf{k}_1) \Phi(\mathbf{k}_1, r_1) \quad (12.163)$$

が得ら、この状態は光子がエネルギー $\hbar\omega(\mathbf{k}_1)$ を持ったものである。また一般に、

$$\Phi_{n_1}(\mathbf{k}_1, r_1) \equiv \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \{ \hat{a}^{(r_1)\dagger}(\mathbf{k}_1) \}^{n_1} |0\rangle \quad (12.164)$$

を考えると、

$$\hat{H}_0 \Phi_{n_1}(\mathbf{k}_1, r_1) = \hbar\omega(k_1) n_1 \Phi_{n_1}(\mathbf{k}_1, r_1) \quad (12.165)$$

これは任意の個数 n_1 個の光子がエネルギー $\hbar\omega(k)$ を持ちうることを示しており、これは粒子がボース統計に従うことを示している。もっと一般的に

$$\Phi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{k}_1, r_1, \mathbf{k}_2, r_2, \dots) = \prod_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n_i!}} \{\hat{a}^{(r_i)\dagger}(\mathbf{k}_i)\}^{n_i} |0\rangle \quad (12.166)$$

を考えると、

$$\hat{H}_0 \Phi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{k}_1, r_1, \mathbf{k}_2, r_2, \dots) = \sum_i \hbar\omega(k_i) n_i \Phi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{k}_1, r_1, \mathbf{k}_2, r_2, \dots) \quad (12.167)$$

となる。

光子の運動量にもまったく同じことが考えられ、

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \hbar \mathbf{k} \hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}) \hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}) \quad (12.168)$$

に対して、

$$\hat{\mathbf{P}} \Phi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{k}_1, r_1, \mathbf{k}_2, r_2, \dots) = \sum_i \hbar \mathbf{k}_i n_i \Phi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{k}_1, r_1, \mathbf{k}_2, r_2, \dots) \quad (12.169)$$

が得られる。したがって、(12.167)と(12.169)を一緒にすると、状態 $\Phi_{n_1, n_2, \dots}(\mathbf{k}_1, r_1, \mathbf{k}_2, r_2, \dots)$ はエネルギー $\hbar\omega(k_1)$ 、偏り r_1 、運動量 $\hbar \mathbf{k}_1$ を持った光子が n_1 個、エネルギー $\hbar\omega(k_2)$ 、偏り r_2 、運動量 $\hbar \mathbf{k}_2$ を持った光子が n_2 個、…ある状態であるということが出来る。

オペレーター $\hat{a}^{(r)}$ は、 n 個の光子のある状態を $n-1$ 個の状態に変える。また、 $\hat{a}^{(r)\dagger}$ は n 個の光子のある状態を $n+1$ 個の状態に変える。したがって、 $\hat{a}^{(r)}$ を消滅演算子、 $\hat{a}^{(r)\dagger}$ を発生演算子と呼ぶ。

最後に電磁場のハミルトニアンは固有値

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \hbar\omega(k) n^{(r)}(\mathbf{k}), \quad n^{(r)}(\mathbf{k}) = 0, 1, 2, \dots \quad (12.170)$$

を持っている。これにより、プランクの輻射公式が正しく得られる。

量子化された電磁場は、古典場のように勝手に交換しないから、何らかの不確定性関係が成り立つはずである。

$$[\hat{E}_i^y(\mathbf{x}, t), \hat{H}_k(\mathbf{x}', t)] = i4\pi\hbar c \varepsilon_{jkl} \partial'_l \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (12.171)$$

が得られる。したがって、例えば \hat{E}_1^y と \hat{H}_2 (または \hat{H}_3)とは、同時に同一の点で正確に測定することができない。空間的に離れた点の $\hat{\mathbf{E}}$ と $\hat{\mathbf{H}}$ なら、そのとき、(12.172)の右辺は0であるから、一方の観測が他方に影響しない。

次に、光子の数のオペレーター

$$\hat{N}(t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}, t) \hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}, t) \quad (12.172)$$

及び電場を二つに分けて、

$$\hat{E}^{(+)}(\mathbf{x}) = i\sqrt{4\pi\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \sqrt{\frac{\omega(k)}{2}} \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \hat{a}^{(r)}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (12.173)$$

$$\hat{E}^{(-)}(\mathbf{x}) = -i\sqrt{4\pi\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} \sqrt{\frac{\omega(k)}{2}} \mathbf{e}^{(r)}(\mathbf{k}) \hat{a}^{(r)\dagger}(\mathbf{k}, t) f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \quad (12.174)$$

を定義すると、次のような交換関係が得られる。

$$[\hat{E}^{(+)}(\mathbf{x}, t), \hat{N}(t)] = \hat{E}^{(+)}(\mathbf{x}, t) \quad (12.175)$$

$$[\hat{E}^{(-)}(\mathbf{x}, t), \hat{N}(t)] = -\hat{E}^{(-)}(\mathbf{x}, t) \quad (12.175)$$

また、交換関係と不確定性原理には次のような関係が成り立つ。

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \quad (12.176)$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq |C| \quad (12.177)$$

この Δ は単にその物理量の不確定さ。これを当てはめると次のようになる。

$$\Delta N \cdot \Delta E \geq |E| \quad (12.178)$$

より、

$$\frac{\Delta N}{\langle N \rangle} \Delta E \geq \frac{|E|}{\langle N \rangle} \quad (12.179)$$

光子の数がとても多い場合は、右辺は事実上 0 と考えられ、古典像に戻る。与えられた有限のエネルギーの中には波長の長い光子が沢山入っているから、その領域では古典像がよい近似で成り立っていることになる。

13. ディラック方程式とゲージ原理と 3 つの力 $SU(3) \times SU(2) \times U(1)_Y$

次からは、自然単位系、プランク定数 $\hbar = 1$ 、光速 $c = 1$ とするよう単位系で議論する。私たちがここで、考えている系は(特殊)相対性理論と量子論によって支配されている素粒子の世界である。したがって、素粒子の速さや角運動量を相対論と量子論の基本定数である c と \hbar を単位として測るのが最も自然である。このような単位系では次のような対応がある。

$$\left[\frac{1}{\text{長さ}} \right] = \left[\frac{1}{\text{時間}} \right] = [\text{運動量}] = [\text{エネルギー}] = [\text{質量}] \quad (13.1)$$

$$[\text{速さ}] = [\text{角運動量}] \quad (13.2)$$

であるから、

$$[\text{短距離}] \Leftrightarrow [\text{短時間}] \Leftrightarrow [\text{大運動量}] \Leftrightarrow [\text{高エネルギー}] \quad (13.3)$$

$$[\text{長距離}] \Leftrightarrow [\text{長時間}] \Leftrightarrow [\text{小運動量}] \Leftrightarrow [\text{低エネルギー}] \quad (13.4)$$

ということが言える。

ではこの単位系で、クライン-ゴールドン方程式を書くと次のようになる。

$$\left[\nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2} - m^2 \right] \phi(x) = 0 \quad (13.5)$$

第 12 章の議論を思い出すと、クライン-ゴールドン方程式から電子場は構成しなかった。その理由として、クライン-ゴールドン方程式にはスピンの含まれていない為、スピンをもつ電子には不都合であったからである。また、クライン-ゴールドン方程式の確率密度は正負両方の値をとることがあるため、従来の確率密度の解釈ができないからである。なぜ正負両方とることがあるのかというとそれは時間に関する微分が 2 階であるからである。そこで、1 階の微分方程式を探すことから始める。

クライン-ゴールドン方程式を導出する際に次のようなアインシュタインの関係を用いた。

$$E^2 - \mathbf{p}^2 - m^2 = 0 \quad (13.6)$$

これに対し次のような相対論的表示、

$$p_\mu = (p_0, p_1, p_2, p_3) = (E, p_x, p_y, p_z) \quad (13.7)$$

$$p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) = (E, -p_x, -p_y, -p_z) \quad (13.8)$$

を用いると(13.6)の右辺は次のように変形される。

$$E^2 - \mathbf{p}^2 - m^2 = p_\mu p^\mu - m^2 \quad (13.9)$$

このように書くと次のように“因数分解”できることが想像つく。

$$p_\mu p^\mu - m^2 = (\gamma^\nu p_\nu + m)(\gamma^\mu p_\mu - m) \quad (13.10)$$

次に、

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right) \quad (13.11)$$

$$\partial^\mu = \left(\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) \quad (13.12)$$

とすると、物理量と演算子を対応させると次の式が得られる。

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0 \quad (13.13)$$

これがディラック方程式である。実は、 $(\gamma^\nu p_\nu + m)$ の方を採用してもよかったのだが、ここでは述べないが、物理的には等価である。

ここで、ディラック方程式の γ^μ は当然だが単なる数ではない。ここで、 γ^μ の満たすべき性質について考える。まず、 γ^μ を $N \times N$ 行列で表されるとする。このとき、波動関数は N 成分を持つ。

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi^1(x) \\ \psi^2(x) \\ \vdots \\ \psi^N(x) \end{pmatrix} \quad (13.14)$$

そのため、(13.10)の式は正しくは次のように書ける。

$$(p_\mu p^\mu - m^2)I_N = (\gamma^\nu p_\nu + mI_N)(\gamma^\mu p_\mu - mI_N) \quad (13.15)$$

そのため、 γ^μ は次を満たす。

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}I_N \quad (13.16)$$

また、 p_ν と γ^μ 、及び p_μ と p_ν は可換であるから、

$$(\gamma^\nu p_\mu)(\gamma^\mu p_\nu) = \gamma^\nu \gamma^\mu p_\nu p_\mu = \eta^{\mu\nu} p_\nu p_\mu I_N = p_\mu p^\mu I_N \quad (13.17)$$

であるから、ディラック方程式を満たす場合は

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2)\psi(x) = 0 \quad (13.18)$$

クライン-ゴールドン方程式を満たす。次に、 N はどのような数かについて考える。(13.16)のから、

$$\gamma^0 \gamma^1 = -\gamma^1 \gamma^0 \quad (13.19)$$

両辺の行列式をとると次のようになる。

$$\det \gamma^0 \det \gamma^1 = (-1)^N \det \gamma^1 \det \gamma^0 \quad (13.20)$$

となるから、

$$1 = (-1)^N \quad (13.21)$$

よって、 N は偶数である。最小の $N = 2$ の場合について考える。そのために、次のパウリ行列を思い出す。

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (13.22)$$

またパウリ行列はエルミート

$$(\sigma^j)^\dagger = \sigma^j \quad (j = 1, 2, 3) \quad (13.23)$$

で、次の性質を満たす行列である。

$$(\sigma^1)^2 = (\sigma^2)^2 = (\sigma^3)^2 = I_2 \quad (13.24)$$

$$\sigma^1 \sigma^2 = -\sigma^2 \sigma^1 = i\sigma^3 \quad \sigma^2 \sigma^3 = -\sigma^3 \sigma^2 = i\sigma^1 \quad \sigma^3 \sigma^1 = -\sigma^1 \sigma^3 = i\sigma^2 \quad (13.25)$$

また、これは次のようにまとめることができる。

$$[\sigma^j, \sigma^k] = 2i \sum_{l=1}^3 \varepsilon^{jkl} \sigma^l \quad (13.26)$$

$$\{\sigma^j, \sigma^k\} = 2\delta^{jk} I_2 \quad (13.27)$$

(13.16)と(13.27)から、 $i\sigma^j$ と γ^j ($j = 1, 2, 3$)は同じ反交換関係を満たすので、 $\gamma^j = i\sigma^j$ とすればよい。残るは(13.16)で $\mu = \nu = 0$ 及び $\nu = j$ と置いた、 $(\gamma^0)^2 = I_2$ 、 $\gamma^0 \gamma^j + \gamma^j \gamma^0 = 0$ を満たす 2×2 行列 γ^0 が存在するかどうかを考える。そこで、

$$\gamma^0 = b_0 I_0 + \sum_{k=1}^3 b_k \sigma^k \quad (13.28)$$

と表すとする。これを、 $\gamma^0 \gamma^j + \gamma^j \gamma^0 = 0$ に代入して整理すると次のようになる。

$$b_0 \sigma^j + b_j I_2 = 0 \quad (13.29)$$

となり、これが全ての $j = 1, 2, 3$ に対して成り立つためには $b_0 = b_j = 0$ とならなければならず、これは

$$\gamma^0 = 1 \quad (13.30)$$

を意味し、これは $(\gamma^0)^2 = I_2$ と矛盾する。したがって $N = 2$ のとき、解はない。では次の可能性として $N = 4$ の場合を考える。これは正しく実際に次のように書けることが知られている。

$$\gamma_D^0 = \begin{pmatrix} I_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -I_2 \end{pmatrix} \quad \gamma_D^j = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^j \\ -\sigma^j & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (13.31)$$

この γ 行列はディラック表示と呼ばれている。ほかにも(13.16)を満たす行列は無限個存在している。電磁場と相互作用するディラック場の方程式は今までの処方と同じように、

$$[i\gamma^\mu(\partial_\mu + iqA_\mu(x)) - m]\psi(x) = 0 \quad (13.32)$$

このように書ける。ただし、

$$A^\mu(x) = (A^0(x), \mathbf{A}(x)) \quad (13.33)$$

であり、ここからはこれをゲージ場と呼ぶことにする。このゲージ場はゲージ変換

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) + \partial_\mu\Lambda(x) \quad (13.34)$$

と変換してもマクスウェル方程式は不変であった。そのため、マクスウェル方程式はゲージ不変性を持つといえる。

ここでは詳しく話さないが、このゲージ不変性を課すことで、ゲージ場が質量をもつことを禁止し、縦波の自由度を光子から取り除くための非常に重要な役割を果たした。またこのゲージ不変性から、マクスウェル方程式の形は係数を覗いて一意的に決まる。このようにマクスウェル方程式が成り立つためにゲージ不変性は必要不可欠な不変性である。したがって、マクスウェル方程式だけでなく相互作用する全ての荷電粒子も方程式でゲージ不変性は成り立っているべきであろう。すると、(13.32)が(13.34)のゲージ変換に対し、不変性を課すなら、ディラック場は次のように変換される。

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{-iq\Lambda(x)}\psi(x) \quad (13.35)$$

とすればよく第12章でもう出たが、(13.34)、(13.35)をまとめてゲージ変換と呼ぶ。実際、

$$e^{iq\Lambda(x)}\partial_\mu e^{-iq\Lambda(x)} = \partial_\mu - iq(\partial_\mu\Lambda(x)) \quad (13.36)$$

という等式が成り立つ。ここまで、述べてきたとおり、マクスウェル方程式や電磁場中のディラック方程式、クライン-ゴルドン方程式はゲージ不変性を持つ。そこで、ゲージ不変性を原理として理論に要求したものがゲージ原理である。

ここで、次の問題について考える。

「自由ディラック方程式から、電磁場中の荷電粒子のディラック方程式を得るための“原理”は存在するか」まず初めに、自由ディラック方程式は

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) = 0 \quad (13.37)$$

と書け、ディラック方程式はつぎのような大域的変換の下で不変である。

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{-i\theta}\psi(x) \quad (13.38)$$

次に、この大域的変換のパラメータ θ を時空座標 $x^\mu = (t, \mathbf{x})$ に依存した任意の実関数 $\Lambda(x)$ に拡張する。

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{-iq\Lambda(x)}\psi(x) \quad (13.39)$$

このように、時空座標に依存した変換を局所的変換(ゲージ変換)と呼ぶ。ゲージ変換のパラメータ $\Lambda(x)$ は時空座標に依存しているので、ゲージ変換によって $\Lambda(x)$ に微分 ∂_μ がかかった余分な項が次のように現れる。

$$\partial_\mu\psi(x) \rightarrow \partial_\mu\psi'(x) = e^{-iq\Lambda(x)}\left\{\partial_\mu - iq(\partial_\mu\Lambda(x))\right\}\psi(x) \quad (13.40)$$

この余分な項 $iq(\partial_\mu\Lambda(x))$ を取り除くために、新しい自由度としてゲージ場 $A_\mu(x)$ を導入することにより、次のように微分 ∂_μ を共変微分 D_μ に置き換える。

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu \equiv \partial_\mu + iqA_\mu(x) \quad (13.41)$$

この共変微分に対し、 $D_\mu\psi(x)$ が $\psi(x)$ と同じゲージ変換を持つことを要請する。つまり、

$$D_\mu\psi(x) \rightarrow D'_\mu\psi'(x) = e^{-iq\Lambda(x)}D_\mu\psi(x) \quad (13.42)$$

ここで、

$$D'_\mu \equiv \partial_\mu + iqA'_\mu(x) \quad (13.43)$$

である。 $D_\mu\psi(x)$ が $\psi(x)$ と同じ変換性を持つということは、さらに共変微分をかけた $D_{\mu_1}D_{\mu_2}\psi(x)$ 、 $D_{\mu_1}D_{\mu_2}D_{\mu_3}\psi(x)$ 、 \dots も $\psi(x)$ と同じ変換性を持つ。すなわち、

$$D_{\mu_1}\dots D_{\mu_n}\psi(x) \rightarrow D'_{\mu_1}\dots D'_{\mu_n}\psi'(x) = e^{-iq\Lambda(x)}D_{\mu_1}\dots D_{\mu_n}\psi(x) \quad (13.44)$$

が成り立つ。

(13.42)の要請から、ゲージ場の変換性が次のように決まる。

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) + \partial_\mu\Lambda(x) \quad (13.45)$$

これはもともとのゲージ変換である。

自由ディラック方程式に現れる微分 ∂_μ を共変微分 D_μ で置き換える。このようにして得られた相互作用を最小結合と呼ぶ。この最小結合によって、ゲージ不変な電磁相互作用を持つディラック方程式が導かれる。

$$[i\gamma^\mu\partial_\mu - m]\psi(x) = 0 \rightarrow [i\gamma^\mu(\partial_\mu + iqA_\mu(x)) - m]\psi(x) = 0 \quad (13.46)$$

大域的位相変換(13.38)の不変性は、ある地点で波動関数の位相を変えたならば、宇宙の果てであろうと全ての場所で一斉に同じ位相 $e^{-i\theta}$ だけ変換しなければ、方程式の不変性が保てないことを意味する。しかしながら、自然界の相互作用は局所的で光の速さを超えてその影響が伝わることはないので、この大域的な不変性の要求は“気持ちが悪い”。それよりも局所的に、各点各点自由に位相を選べる方が自然な気がする。これが、(局所的)ゲージ不変性である。

幾何学的な視点からいうと次のようになる。 $\psi(x)$ は各時空点 x^μ 上に複素数、あるいは、複素平面を対応させる量とみなすことができる。このとき、複素平面上に実軸 $\text{Re}\psi(x)$ と虚軸 $\text{Im}\psi(x)$ が与えられ、位相変換(13.38)は実軸と虚軸を複素平面内で時計回りに角度 θ だけ回転させることに対応する。大域的位相変換の場合は全ての時空点で同じ角度だけ回転させることになる。一方、ゲージ変換(13.39)の場合は、回転角が $q\Lambda(x)$ で与えられているので、時空の各点各点で実軸 $\text{Re}\psi(x)$ と虚軸 $\text{Im}\psi(x)$ の方向を自由に選べることになる。

この観点から、アインシュタインの相対性原理「座標系の取り方によらず自然法則は不変である」と対比して捉えると面白く次のようになっている。

『複素平面 $\psi(x)$ の座標軸の取り方によらず自然法則は不変である。』

このとき、各時空点に実軸 $\text{Re}\psi(x)$ と虚軸 $\text{Im}\psi(x)$ の取り方が違うので、その違いを吸収して、自然法則を不変な形に保つために必要なものがある。その役割を担うものがゲージ場なのである。つまり、「ゲージ原理を実現するためにゲージ場が存在している」ということである。あるいはゲージ場は力の源でもあるので「ゲージ不変性を保つために物質間 ni 力が働く」と解釈することができる。

ここで、話をまとめると次のようになる。

(1)ゲージ不変性を満たすために、必然的に新しい量、すなわちゲージ場の導入が必要になる。

(2)ゲージ不変性の要求に伴って現れたゲージ場は、荷電粒子間の力の源となる。別の見方をすれば、ゲージ不変性を保つために、荷電粒子間に力が働くと解釈できる。

(3)微分を共変微分に置き換える(最小結合)ことによって、ゲージ不変性が保障される。したがって、最小結合の処方箋によって、ゲージ場と荷電粒子間の相互作用が一意的に決まることになる。

このゲージ不変性を拡張するために、群を考える。なぜ物理で群を考えるのかというと、ある変換の下で不変であったとき、「不変性にともなう変換全体の集合は群をなす」からである。

集合 G とその任意の二つの元 U_1 、 U_2 に対して積 U_1U_2 が定義されているとする。このとき、次の性質(0)～(3)を満たす集合 G は積の演算の下で群をなすという。

(0) G の任意の2つの元 U_1 、 U_2 に対して、積 U_1U_2 も G の元である。

(1)任意の3つの元の積に対して、結合則 $(U_1U_2)U_3 = U_1(U_2U_3)$ が成り立つ。

(2)単位元と呼ばれる G の元 I が存在し、任意の元 U に対して $UI = IU = U$ が成り立つ。

(3) 任意の元 U に対して、 $UU^{-1} = U^{-1}U = I$ となる逆元 $U^{-1} \in G$ が存在する。

$N \times N$ 複素行列 U で行列式 $\det U = 1$ 、かつ、ユニタリー条件 $U^\dagger U = UU^\dagger = I_N$ を満たす行列の集合

$$G_{SU(N)} = \{U = N \times N \text{ 複素行列} | U^\dagger U = UU^\dagger = I_N, \det U = 1\} \quad (13.47)$$

は群をなし、 N 次特殊ユニタリー群 $SU(N)$ と呼ばれる。次に、群ではないが、群 $SU(N)$ と密接な関係にある、エルミート $X = X^\dagger$ とトレースレス $\text{tr} X = 0$ の条件を満たす $N \times N$ 複素行列の集合である

$$\mathcal{A}_{su(N)} = \{X = N \times N \text{ 複素行列} | X = X^\dagger, \text{tr} X = 0\} \quad (13.48)$$

を考える。このとき、 $G_{SU(N)}$ の任意の元 $U \in G_{SU(N)}$ は、 $\mathcal{A}_{su(N)}$ の元 $X \in \mathcal{A}_{su(N)}$ を用いて、

$$U = e^{iX} \in G_{SU(N)} \quad X \in \mathcal{A}_{su(N)} \quad (13.49)$$

と表すことができる。 e^{iX} は指数関数型行列なので、テイラー展開で定義されているものとする。このとき、 $G_{SU(N)}$ はリー群、 $\mathcal{A}_{su(N)}$ はリー代数と呼ばれる。またリー群は $SU(N)$ 、リー代数は $su(N)$ と書かれることが多い。

(13.49) はとても重要なので深く見る。まず、(13.49) 左側の式における右辺の指数関数型行列 e^{iX} は群 $SU(N)$ の元であることを確かめる。示すことは、 $U = e^{iX}$ がユニタリー $U^\dagger = U^{-1}$ および $\det U = 1$ を満たすことである。

$$(e^{iX})^\dagger = e^{-iX^\dagger} = e^{-iX} \quad (13.50)$$

$$\det(e^{iX}) = e^{i \text{tr} X} = 1 \quad (13.51)$$

実際に計算してみると上のようになる。以上の結果から、指数関数行列 e^{iX} は、 $X \in \mathcal{A}_{su(N)}$ ならば、 $G_{SU(N)}$ の元であることが分かる。実はこの逆も成り立ち、任意の $U \in G_{SU(N)}$ の行列は、 $X \in \mathcal{A}_{su(N)}$ の行列を用いて表すことができる。今後必要となってくる $SU(N)$ の性質をここでまとめておく。

まず、 $\mathcal{A}_{su(N)}$ の任意の元を X 、 $G_{SU(N)}$ の任意の元を U としたとき、

$$UXU^{-1} \in \mathcal{A}_{su(N)} \quad (13.52)$$

である。これを示すためには、 $(UXU^{-1})^\dagger = UXU^{-1}$ 、および、 $\text{tr} UXU^{-1} = 0$ を確かめればよい。

次に、連続パラメータ s に対して、 $U(s) \in G_{SU(N)}$ を満たす $SU(N)$ 行列 $U(s)$ があるとき、次式が成り立つ。

$$i \frac{dU(s)}{ds} U^{-1}(s) \in \mathcal{A}_{su(N)} \quad (13.53)$$

ここで、この証明はしない。リー代数 $\mathcal{A}_{su(N)}$ の元 X は、エルミート・トレースレスの $N \times N$ 複素行列で与えられる。 $N \times N$ 複素行列は実数で数えて $2N^2$ 個のパラメータを持つが、エルミート条件 $X = X^\dagger$ は N^2 個の条件式、トレースレスの条件 $\text{tr} X = 0$ は 1 個の条件式を与えるので、独立な実数の変数の数は $N^2 - 1$ となる。したがって、リー代数 $\mathcal{A}_{su(N)}$ の元の中から独立な $N^2 - 1$ 個の元 $T^a \in \{\mathcal{A}_{su(N)}, a = 1, 2, \dots, N^2 - 1\}$ を用意すれば、 $\{T^a\}$ をリー代数の基底行列とみなすことができる。すなわち、

$$X = \sum_{a=1}^{N^2-1} \theta^a T^a \quad X \in \mathcal{A}_{su(N)} \quad (13.54)$$

と展開可能である。ここで、 θ^a は $N^2 - 1$ 個の実パラメータである。また、基底行列 T^a は、

$$T^a = (T^a)^\dagger \quad \text{tr} T^a = 0 \quad (13.55)$$

を満たす。 T^a の独立な数 d_G は群 G の次元と呼ばれ、群を特徴づける指標の一つである。群 $SU(N)$ の場合は $d_G = N^2 - 1$ である。

X_1, X_2 を $\mathcal{A}_{su(N)}$ の任意の元としたとき、

$$i[X_1, X_2] \in \mathcal{A}_{su(N)} \quad (13.56)$$

である。(13.53) と (13.55) の結果から、

$$[T^a, T^b] = i \sum_{c=1}^{N^2-1} f^{abc} T^c \quad (13.57)$$

である。ここで、 $f^{abc} = -f^{bac}$ は群の構造定数と呼ばれ、群構造を決める重要な量である。また、 T^a を群の生成子と呼ぶ。構造定数 f^{abc} が群構造を決めるとは、群構造とは積の規則であるから、積の規則を構造定数が決めていることになる。

群 G の二つの元 $\exp i \sum_a \theta_1^a T^a$ と $\exp i \sum_b \theta_2^b T^b$ の積を考える。群の定義から、その積を再び群 G の元として表すことができる。すなわち、

$$\exp \left\{ i \sum_a \theta_1^a T^a \right\} \exp \left\{ i \sum_a \theta_2^a T^a \right\} = \exp \left\{ i \sum_a \theta_3^a T^a \right\} \quad (13.58)$$

である。このとき、 θ_3^a を $\{\theta_1^a, \theta_2^a\}$ の関数として見たとき、関数 $\theta_3^a = \theta_3^a(\theta_1, \theta_2)$ が群の構造(積の規則)を与えることになる。関数 $\theta_3^a = \theta_3^a(\theta_1, \theta_2)$ が群 G のどのような性質によって決まるかを知るには、次のベーカー-キャンベル-ハウスドルフの公式を用いればよい。

$$\exp\{X\} \exp\{Y\} = \exp \left\{ X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) + (X \text{ と } Y \text{ の多重交換関係}) \right\} \quad (13.59)$$

つまり、異なる生成子の組 $\{T^a\}$ と $\{T'^a\}$ が与えられたとして、それらが同じ交換関係(13.56)、すなわち同じ代数を満たすならば、同じ軍の生成子と見なすことができるのである。このとき、 $\{T^a\}$ と $\{T'^a\}$ が本質的に異なるとき、 $\{T^a\}$ と $\{T'^a\}$ は異なる表現を与えることになる。

ここまで一般の $SU(N)$ で考察してきた。ここでは、最も基本的な $SU(2)$ のリー代数について具体的に議論していくことにする。

2×2 複素行列 X に対してエルミートかつトレースレス条件を課すと、行列成分に次の関係が付く。

$$X = X^\dagger \Leftrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* \\ a_{21}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} a_{11} = a_{11}^* \\ a_{22} = a_{22}^* \\ a_{12} = a_{21}^* \end{cases} \quad (13.60)$$

$$\text{tr} X = 0 \Leftrightarrow \text{tr} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = 0 \Leftrightarrow a_{11} + a_{22} = 0 \quad (13.61)$$

したがって、任意の $X \in \mathcal{A}_{su(2)}$ は一般に3つの実パラメータ θ^a ($a = 1, 2, 3$)を用いて次のように表すことができる。

$$X = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \theta^3 & \theta^1 - i\theta^2 \\ \theta^1 + i\theta^2 & -\theta^3 \end{pmatrix} = \sum_{a=1}^3 \theta^a \frac{\sigma^a}{2} \equiv \sum_{a=1}^3 \theta^a T^a \quad (13.62)$$

ここで、 $\{\sigma^a, a = 1, 2, 3\}$ はパウリ行列である。つまり、パウリ行列を、エルミート・トレースレス行列の基底として特徴づけることができる。

$T^a = \frac{\sigma^a}{2}$ の交換関係はパウリ行列の交換関係を用いて、

$$[T^a, T^b] = i \sum_{c=1}^3 \varepsilon^{abc} T^c \quad (13.63)$$

となる。この結果から、群 $SU(2)$ の構造定数 f^{abc} は、3階完全反対称テンソル ε^{abc} で与えられることが分かる。 $SU(3)$ の次元は $d_{SU(3)} = 8$ である。このとき、基底行列 T^a として、パウリ行列を 3×3 行列に拡張した以下のゲルマン行列 λ^a を使って、 $T^a = \frac{\lambda^a}{2}$ と選ぶことができる。

$$\lambda^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda^5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^8 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad (13.64)$$

ここまで調べてきたゲージ不変性は、群の言葉で言えば、 $U(1)$ ゲージ不変性に対応する。これは、波動関数のゲージ変換 $\psi' = e^{-iq\Lambda}\psi$ の位相 $e^{-iq\Lambda}$ が、群 $U(1)$ の元に属するからである。次に、これを群 $SU(N)$ へ拡張する。

$SU(N)$ の二つの元 U_1 、 U_2 は一般に非可換なので、得られた理論を非可換ゲージ場理論、あるいは、ヤン-ミルズ理論と呼ぶ。では、(13.37)付近の議論に従って、 $SU(N)$ ゲージ不変性を持つ方程式を構築していくことになる。

まず、 N 成分自由ディラック方程式から出発する。

$$[i\gamma^\mu\partial_\mu - m]\Psi(x) = 0 \quad \Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi^1(x) \\ \psi^2(x) \\ \vdots \\ \psi^N(x) \end{pmatrix} \quad (13.65)$$

このディラック方程式は、次の大域的 $SU(N)$ 変換の下で不変である。

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = U\Psi(x) \quad U \in G_{SU(N)} \quad (13.66)$$

そこで、 U に時空座標依存性を持たせ、(13.65)の変換を次のようにゲージ変換に拡張する。

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = U(x)\Psi(x) \quad (13.67)$$

$$U(x) = e^{-ig\Lambda(x)} \quad \Lambda(x) = \sum_{a=1}^{N^2-1} \theta^a(x)T^a \quad (13.68)$$

g は結合定数と呼ばれ、相互作用の強さを表すパラメータである。

変換(13.65)を(13.66)のように局所化(ゲージ化)したので、 $SU(N)$ ゲージ変換の下で、 $U(x)$ に微分 ∂_μ がかかった余分な項が生じる。

$$\partial_\mu\Psi(x) \rightarrow \partial_\mu\Psi'(x) = \partial_\mu\{U(x)\Psi(x)\} = U(x)[\partial_\mu + \{U^{-1}(x)\partial_\mu U(x)\}]\Psi(x) \quad (13.69)$$

この余分な項を吸収して消し去るために、ゲージ場 $A_\mu(x)$ を導入し、微分を共変微分に置き換える。

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu(x) \quad (13.70)$$

$SU(N)$ ゲージ場 $A_\mu(x)$ のゲージ変換性は、「 $D_\mu\Psi(x)$ が $\Psi(x)$ と同じ変換性を持つ」という要請、すなわち、

$$D_\mu\Psi(x) \rightarrow D'_\mu\Psi'(x) = U(x)D_\mu\Psi(x) \quad (13.71)$$

から次のように決まる。

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = U(x)A_\mu(x)U^{-1}(x) + \frac{i}{g}\{\partial_\mu U(x)U^{-1}(x)\} \quad (13.72)$$

この関係から $A_\mu(x)$ がどのような量でなければならないかが決まる。(13.53)から、(13.72)の第2項はリー代数 $\mathcal{A}_{su(N)}$ に値を持つので、 $A_\mu(x) \in \mathcal{A}_{su(N)}$ なければならないことが分かる。したがって、 $A_\mu(x)$ は $SU(N)$ のリー代数 $\mathcal{A}_{su(N)}$ 属し、エルミート・トレースレス条件を満たす $N \times N$ 複素行列で与えられる。

$$A_\mu(x) = (A_\mu(x))^\dagger \quad \text{tr}A_\mu(x) = 0 \quad (13.73)$$

$\mathcal{A}_{su(N)}$ の基底行列 $\{T^a\}$ を用いれば、 $A_\mu(x)$ を次のように表すこともできる。

$$A_\mu(x) = \sum_{a=1}^{N^2-1} A_\mu^a(x)T^a \quad (13.74)$$

最後に、 N 成分自由ディラック方程式の微分 ∂_μ を共変微分 D_μ で置き換えること(最小結合)によって達成される。この最小結合の処方箋によって、ディラック方程式は、 $SU(N)$ 大域不変性から、 $SU(N)$ ゲージ不変性を持つ方程式に拡張されたことになる。すなわち、

$$\left[i\gamma^\mu (\partial_\mu + igA_\mu(x)) - m \right] \Psi(x) = 0 \quad (13.75)$$

である。一見すると(13.75)は(13.46)と同じように見える。しかし、大きな違いがいくつかある。一つ目は $\Psi(x)$ が N 成分ベクトルであること。二つ目は $A_\mu(x)$ が $N \times N$ 行列で表されるリー代数 $\mathcal{A}_{su(N)}$ の元であること。三つ目はゲージ場 $A_\mu(x)$ の変換が $U(x)$ の非可換性から(13.72)で与えられることである。

物質を構成するクォークやレプトンには(重力を除けば)強い力、弱い力、電磁気力の3つの力が働くことが分かっている。これらの力は標準模型、すなわち、 $SU(3) \times SU(2) \times U(1)_Y$ ゲージ理論によって記述される。 $(U(1)_Y$ の添え字の Y は、電磁相互作用に対するゲージ不変性 $U(1)_{em}$ と区別するためにつけた)

自然界には、クォーク3体からなるバリオン(陽子や中性子など)、それから、クォークと反クォークからなるメソン(π 中間子など)が存在し、これらのクォーク間にはたらく強い力である。一方、電子やニュートリノなどのレプトンには強い力は働かない。

これまで6種類のクォーク($q = u, d, s, c, b, t$)が発見されており、それぞれのクォークは“色”(color)と呼ばれる3つの自由度 q^a ($a = 1, 2, 3$)を持っている。 $a = R, G, B$ を光の三原色になぞらえて番号付けされる。

$q^a(x)$ をクォークの(スピノル4成分)波動関数としておくと、 $SU(3)$ ゲージ不変性

$$q^a(x) \xrightarrow{SU(3)} q'^a(x) = \sum_{b=1}^3 U(x)^a_b q^b(x) \quad (13.76)$$

$U(x)$ は $G_{SU(3)}$ の元である。この $SU(3)$ ゲージ不変性に伴って、グルーオンと呼ばれる $SU(3)$ ゲージ場

$$G_\mu(x) = \sum_{\alpha=1}^8 G_\mu^\alpha(x) T^\alpha \quad \left(T^\alpha = \frac{\lambda^\alpha}{2} : \lambda^\alpha \text{ゲルマン行列} \right) \quad (13.77)$$

が存在し、微分 ∂_μ は共変微分 $D_\mu = \partial_\mu + ig_3 G_\mu$ に置き換わる。ここで、 g_3 は $SU(3)$ ゲージ相互作用の強さを示す結合定数である。光子を媒介することによって荷電粒子間に電磁気力が働いたように、クォーク間をグルーオンが媒介することによって強い力が働く。グルーオンとの相互作用により、“色”を持つクォークがいくつか集まって“白色”の複合粒子を構成する。これをクォークの閉じ込め、あるいはカラーの閉じ込めと呼ぶ。これは、“色”を持った状態はエネルギー的に非常に高いため、大きいエネルギーを与えない限り“色”を持った状態をつくり出せないからである。これが、クォークが単体では現れずに、バリオンやメソンなどの“白色”に複合粒子としては自然界に現れる理由なのである。このカラーの閉じ込めを解析的に示すことは、非常に難しい。ここで“白色”という言葉は、 $SU(3)$ 変換の不変量の意味で使われている。例えば、 π^+ 中間子は反 d クォーク

(\bar{d})と u クォーク(u)の対 $\bar{d}u$ から構成されるが、 $SU(3)$ ゲージ変換の下で、 u と \bar{d} はそれぞれ、 $u \xrightarrow{SU(3)} u' = Uu$ 、 \bar{d}

$\xrightarrow{SU(3)} \bar{d}' = \bar{d}U^{-1}$ と変換する。したがって、 $\bar{d}u$ は $\bar{d}u \xrightarrow{SU(3)} \bar{d}'u' = \bar{d}u$ と不変であることが分かる。また、クォーク3体 $qq'q''$ からなるバリオンは、

$$B = \sum_{a,b,c} \varepsilon_{abc} q^a q'^b q''^c \quad (13.78)$$

で与えられており、 $SU(3)$ ゲージ変換 $q^a \xrightarrow{SU(3)} \sum_{a'=1}^3 U^a_{a'} q'^{a'}$ の下で不変である。

$$B \xrightarrow{SU(3)} B' = B \quad (13.79)$$

このように、強い力は $SU(3)$ ゲージ理論によって記述され、量子色力学と呼ばれている。

レプトンには、強い力が働かないことが実験的にわかっている。理論的には、その理由を次のように説明することができる。レプトンは“色”の自由度を持っていないと仮定しよう。そのとき、レプトンの波動関数 $l(x)$ とすると、 $SU(3)$ ゲージ変換の下で(“色”の自由度を持っていないので)自明な変換

$$l(x) \xrightarrow{SU(3)} l'(x) = l(x) \quad (13.80)$$

しかしなことになる。レプトンは(13.80)のように $SU(3)$ ゲージ変換の下で不変なので、レプトンのディラック方程式にグルーオン G_μ が現れることはない。なぜなら、 ∂_μ のままで、レプトンの $SU(3)$ ゲージ不変性が保たれているからである。そのため、レプトンとグルーオン G_μ と相互作用は存在しない。つまり、強い力はレプトンには働かないことになる。

電磁相互作用と弱い相互作用は統一されて、電弱理論、あるいはワインバーク-サラム理論と呼ばれる $SU(2) \times U(1)_Y$ ゲージ理論で記述されることが分かっている。 $SU(2)$ ゲージ場 W_μ はパウリ行列を用いて、

$$W_\mu = \sum_{a=1}^3 W_\mu^a \frac{\sigma^a}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} W_\mu^3 & W_\mu^1 - iW_\mu^2 \\ W_\mu^1 + iW_\mu^2 & -W_\mu^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}W_\mu^3 & \frac{1}{\sqrt{2}}W_\mu^+ \\ \frac{1}{\sqrt{2}}W_\mu^- & -\frac{1}{2}W_\mu^3 \end{pmatrix} \quad (13.81)$$

と表される。ここで、 W_μ^\pm の添え字 \pm は W_μ^\pm の持つ電荷に対応する。左巻きのクォークとレプトンは2つで組をなして、次のように $SU(2)$ 2重項を構成する。

$$\begin{pmatrix} u_L \\ d_L \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_L \\ s_L \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} t_L \\ b_L \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \nu_{eL} \\ e_L^- \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \nu_{\mu L} \\ \mu_L^- \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \nu_{\tau L} \\ \tau_L^- \end{pmatrix} \quad (13.82)$$

一方、クォーク・レプトンの右巻き成分は $SU(2)$ 一重項をなす。

$$u_R, d_R, c_R, s_R, t_R, b_R, e_R^-, \mu_R^-, \tau_R^- \quad (13.83)$$

$SU(2)$ ゲージ変換によって、(13.82)の左巻きクォークとレプトンはそれぞれ、(13.67)と(13.68)で $N=2$ の場合のゲージ変換性を持つ。したがって、微分 ∂_μ を共変微分(13.70)、すなわち

$$D_\mu = \partial_\mu + ig_2 W_\mu = \partial_\mu + ig_2 \sum_{a=1}^3 W_\mu^a \frac{\sigma^a}{2} \quad (13.84)$$

で置き換えられることになる。ここで、 g_2 は $SU(2)$ ゲージ相互作用の強さを表す結合定数である。

一方、(13.83)の右巻きクォークとレプトンは $SU(2)$ ゲージ変換の下で不変なので、微分はそのままでよく共変微分に置き換える必要はない。

このように、左巻きクォークとレプトンは共変微分 $D_\mu = \partial_\mu + ig_2 W_\mu$ を通して $SU(2)$ ゲージ場 W_μ との相互作用項を持つ。一方、右巻きクォークとレプトンは、 W_μ に関する共変微分を持たないので、 W_μ との相互作用項がそん座視しない。したがって、クォークとレプトンの左巻き成分(13.82)は $SU(2)$ ゲージ場 W_μ との相互作用し、右巻き成分(13.83)は相互作用しないことになる。左巻きと右巻きのクォークとレプトンで相互作用の形が違うのは、ここでは述べないが、ワインバーク-サラム理論では空間反転不変性は破れていることになる。

ワインバーク-サラム理論に含まれる $U(1)_Y$ ゲージ不変性は、マクスウェル方程式や電磁場中のディラック方程式が持つ電磁場の $U(1)_{em}$ ゲージ不変性その間ままでないので注意しておく。電磁相互作用と同じタイプの $U(1)$ ゲージ不変性なので、電磁相互作用に置ける電荷と同様に、クォークとレプトンそれぞれに対して、 $U(1)_Y$ 電荷 Y (ハイパーチャージ)を与えれば、 $U(1)_Y$ ゲージ相互作用は共変微分

$$D_\mu = \partial_\mu + ig_1 \frac{Y}{2} B_\mu \quad (13.85)$$

として決まることになる。 g_1 は $U(1)_Y$ ゲージ結合定数、 Y は g_1 を単位として測った $U(1)_Y$ 電荷である。 B_μ は $U(1)_Y$ ゲージ不変性に付随するゲージ場である。クォークとレプトンの $U(1)_Y$ 電荷 Y は実験から次のように与えられていることが分かっている。

$$\begin{pmatrix} u_L \\ d_L \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_L \\ s_L \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} t_L \\ b_L \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{3} \quad u_R, c_R, t_R \rightarrow \frac{4}{3} \quad d_R, s_R, b_R \rightarrow -\frac{2}{3} \quad (13.86)$$

$$\begin{pmatrix} \nu_{eL} \\ e_L^- \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \nu_{\mu L} \\ \mu_L^- \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \nu_{\tau L} \\ \tau_L^- \end{pmatrix} \rightarrow -1 \quad e_R^-, \mu_R^-, \tau_R^- \rightarrow -2 \quad (13.87)$$

ここまでで、クォークとレプトンの変換を求めることができたので、クォークとレプトンがどのような方程式に従うかは完全に決まったことになる。

$$i\gamma^\mu \left\{ \partial_\mu + ig_3 G_\mu + ig_2 W_\mu + i\frac{g_1}{2} \left(\frac{1}{3} \right) B_\mu \right\} \begin{pmatrix} u_L \\ d_L \end{pmatrix} = 0 \quad (13.88)$$

$$i\gamma^\mu \left\{ \partial_\mu + ig_3 G_\mu + i\frac{g_1}{2} \left(\frac{4}{3} \right) B_\mu \right\} u_R = 0 \quad (13.89)$$

$$i\gamma^\mu \left\{ \partial_\mu + ig_3 G_\mu + i\frac{g_1}{2} \left(-\frac{2}{3} \right) B_\mu \right\} d_R = 0 \quad (13.90)$$

$$i\gamma^\mu \left\{ \partial_\mu + ig_2 W_\mu + i\frac{g_1}{2} (-1) B_\mu \right\} \begin{pmatrix} \nu_{eL} \\ e_L^- \end{pmatrix} = 0 \quad (13.91)$$

$$i\gamma^\mu \left\{ \partial_\mu + i\frac{g_1}{2} (-2) B_\mu \right\} e_R^- = 0 \quad (13.92)$$

で、他の世代に対しても全く同様の式が成り立つ。(13.88)～(13.92)から見て取れるが、グルーオン G_μ はクォークのみと相互作用し、左巻きと右巻きを区別しない。つまり、グルーオンによる強い相互作用は空間反転不変であることが分かる。 $SU(2)$ のゲージ場 W_μ は、2重線の左巻きクォークと左巻きレプトンにのみ結合し、一重線の右巻きクォークと右巻きレプトンとは相互作用しない。 $U(1)_Y$ ゲージ場 B_μ は、 $U(1)_Y$ 電荷 Y の大きさに比例して、各々のクォークとレプトンとは結合の仕方が異なるので、空間反転不変性を破っていることが分かる。

さらに、(13.88)～(13.92)すべてをよく見ると、重要な事実に気づく。どの方程式にも質量項がない。ところが、質量項は方程式の持つ $SU(3) \times SU(2) \times U(1)_Y$ ゲージ不変性を壊してしまう。つまり、クォークとレプトンがたまたま質量を持っていないということではなく、 $SU(3) \times SU(2) \times U(1)_Y$ ゲージ不変性の要請からクォーク・レプトンは質量項は禁止されている。

しかしながら、実際には電子もクォークも質量を持っていることを私たちはしている。これが素粒子物理における質量起源の問題である。質量の起源は単純ではなく、実際にはクォーク・レプトンの方程式にヒッグス場との相互作用項を付け加える必要がある。これについては、自発的対称性の破れの議論をする必要がある。(まだ未履修)

$SU(2)$ のゲージ不変性が厳密に成り立っているならば、 $SU(2)$ ゲージ変換で、

$$\begin{pmatrix} \nu_{eL} \\ e_L^- \end{pmatrix} \xrightarrow{SU(2)} \begin{pmatrix} \nu'_{eL} \\ e'_L \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \nu_{eL} \\ e_L^- \end{pmatrix} \quad (U \in SU(2)) \quad (13.93)$$

と変換するので、 ν_{eL} と e_L^- は $SU(2)$ 行列 U を通して互いに混ざり合うことになる。この $SU(2)$ 変換の下で不変なのであるから、このことは $\begin{pmatrix} \nu_{eL} \\ e_L^- \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} \nu'_{eL} \\ e'_L \end{pmatrix}$ 、すなわち ν_{eL} と e_L^- の区別がつかないことを意味する。しかし、実際には、 ν_{eL} は電荷を持たず、電子は $-e$ の電荷を持つので容易に識別可能である。

この問題を解決するメカニズムが自発的対称性の破れである。 $SU(2) \times U(1)_Y$ ゲージ不変性は、自発的対称性の破れの機構を通じて、 $U(1)_{em}$ ゲージ不変性にまで小さくなる。

$$SU(2) \times U(1)_Y \xrightarrow{\text{対称性の破れ}} U(1)_{em} \quad (13.94)$$

ゲージ不変性が破れると、ゲージ場は一般に質量を持つ。よって、(13.94)の場合も、破れたゲージ不変性に応じてゲージ場は質量を持つことになる。

(13.81)で与えられる3つの $SU(2)$ ゲージ場 W_μ^\pm 、 W_μ^3 と一つの $U(1)_Y$ ゲージ場 B_μ のうち、 W_μ^3 と B_μ を組み直して、

$$A_\mu \equiv W_\mu^3 \sin \theta_W + B_\mu \cos \theta_W \quad Z_\mu^0 \equiv W_\mu^3 \cos \theta_W - B_\mu \sin \theta_W$$

$$\sin \theta_W \equiv \frac{g_1}{\sqrt{(g_2)^2 + (g_1)^2}} \quad (13.95)$$

と定義すると、 A_μ は電磁相互作用における $U(1)_{em}$ ゲージ場に対応し、この $U(1)_{em}$ ゲージ不変性は破れていない。したがって、 A_μ の質量は0のままである。また、 θ_W はワインバーク角と呼ばれる。

一方、 W_μ^\pm と Z_μ^0 は(添え字の \pm と0は電荷を表す)、 $SU(2) \times U(1)_Y$ ゲージ不変性のうち破れた不変性に対応するゲージ場で、それぞれ、

$$m_W \cong 80.4\text{GeV} \quad m_Z \cong 91.2\text{GeV} \quad (13.96)$$

の質量(陽子の質量のおよそ100倍)を持つ。どのようにしてゲージ不変性が破れ、 W_μ^\pm と Z_μ^0 (およびクォークとレプトン)が質量を獲得するののかの具体的機構については自発的対称性の破れ(まだ未履修)によって説明できる。

電磁相互作用における電荷 e は

$$e = g_2 \sin \theta_W = g_1 \cos \theta_W \quad (13.97)$$

で与えられ、クォーク・レプトンの電荷は $U(1)_{em}$ ゲージ場 A_μ との結合定数から読み取ることができる。例えば、(13.89)の u_R クォークに対する方程式を(13.95)で定義される A_μ および Z_μ^0 で書きなおすと、

$$(13.97) \Rightarrow i\gamma^\mu \left(\partial_\mu + i\frac{2e}{3}A_\mu + \dots \right) u_R = 0 \quad (13.98)$$

となるので、 u クォークの電荷は $\frac{2e}{3}$ であることが分かる。ほかのクォークとレプトンの電荷も同様にして求めることができる。 d クォークの電荷は $-\frac{1}{3}e$ である。

これまで見てきたように、ゲージ不変性の要求は、クォーク・レプトンのしたがう方程式に強い制限を与える。このことは、ゲージ原理が自然法則のあるべき姿を決める指導原理として役割を担っていることを意味している。つまり、自然法則全体がゲージ原理を満たすように、互いに調和のとれた形で成立していなければならないということである。

一方、ゲージ原理が語らないことは何か。ゲージ原理はゲージ群に関しては何も答えてくれない。理論的には $SU(3)$ や $SU(2)$ ではなく、もっと大きな群、例えば $SU(100000)$ でもよかったはずなのだが、自然は小さなゲージ群 $SU(3) \times SU(2) \times U(1)_Y$ を採用した。また、クォーク・レプトン以外の粒子を好きなだけ持ち込んでもゲージ原理には抵触しないのだが、自然はほんの一握りのクォーク・レプトンで満足した。

まとめ・考察

第 0 章は以前発表した内容を詳しく書いたものである。そのため、この章だけ他の章とは独立している。また、量子力学の内容に少し踏み込むのだが、この章ではあまりそのことについて深く述べなかった。なので、この章を読むのは最後にするのが望ましいと思う。

第 1, 2 章ではマクスウェル方程式を標準的な見方ではなく、縦成分と横成分に分けることでマクスウェル方程式をほぐすことによって、ある程度マクスウェル方程式が見やすくなった。実際、私が学習していく中で、様々な電磁気学の教科書を読んだが、このような縦成分、横成分の分解をする教科書は私が読んだ中では 1 つしかなかった。また、ポテンシャルという概念を導入し、今後かなり重要になってくるゲージ変換の例を示した。次に電磁場のエネルギーと全慣性(運動量のようなもの)について議論した。このようなマクスウェル方程式の式変形をするだけで、相対論的エネルギーの関係を示唆することができるのは、私が学習していた中ですごく感動したポイントであった。

第 3, 4 章は電磁場をフーリエ変換することで、フーリエ係数が強制調和振動子の運動方程式を満たしているので、電磁場は強制された調和振動子の集まりであると解釈できる。次にその係数を無次元化することで、アインシュタインの関係とド・ブロイの関係の関係を示唆した。私が学習したとき、よく「電磁場は調和振動子の集合体だ！」聞いたことがあったため、とても気になっていたが、それはフーリエ変換をすることで見えてくるのはとても感動した。また、アインシュタイン-ド・ブロイの関係が、フーリエ係数を少し変形して無次元振幅変数を用いて書くことによって、出てくるのはとてもびっくりした。アインシュタイン-ド・ブロイの関係は高校の授業で勉強したときは突拍子のないアイデアだと感じたが、実際はごく自然なアイデアであったことを知り、量子論に対し、親近感が湧いた。

第 5, 6 章はアインシュタイン-ド・ブロイの関係と光学と解析力学の手法を用いて粒子の波がどのように書けるか考察した。もちろん波であるため、その重ね合わせを考え、しっかりと定式化した。これを経路積分という。この経路積分の具体的な計算を自由粒子と調和振動子の場合を計算した。私が学習した際には、アインシュタイン-ド・ブロイの関係を認めることで、粒子の波がどのように書けるか考察することができ、それをあらゆる経路について足し合わせることで、経路積分を定義することができた。演算子を波動関数に作用させることで…という量子力学ももちろん大事であるのだが、経路積分の方が個人的には“物理っぽい”と感じた。

第 7 章は経路積分から、シュレーディンガー方程式を導出することで所謂普通の量子力学との関係を示した。ほかの作用素云々の量子力学と理論展開は似ていないと感じたが、実は対等なものであるということを示せたので、感動した。

第 8 章は摂動論というものについて考えた。これは所謂プロパゲーターをテイラー展開することによる近似のようなものである。摂動論によると、摂動論可能な場合は、ポテンシャルが粒子をある点で散乱されるまで、粒子は自由粒子としてふるまい、散乱された後も自由粒子と振舞っているという。パチンコ玉が棒にぶつかるまで自由に落ちて、ぶつかったらどっかに飛ばされ(散乱され)、飛ばされた後も、次に棒にぶつかるまで、パチンコ玉は落ちる、…と似ているように感じ直感的にも理解しやすく、今までの作用素の量子力学に比べると、突拍子のないものであると感じた。

第 9 章は私が学習していく中で演算子とは何かというものを考えた際にフーリエ変換での微分が ik をかけることであることを思い出して、演算子を固有関数に作用させると固有値を出すというものとは実は同じではないか。そのような目線で固有関数での展開と演算子の関係を見るという内容は個人的にも挑戦した章だと思っています。また、スピンを導出した。

第 10, 11 章ははじめにバランス方程式と連続の方程式を導出した。第 10 章を読んでから、第 2 章の内容を読むとより内容を理解しやすいと思う。また、次の第 11 章は書きながら楽しかった。この章は、今までの章の知識を用いて電子場を考えた。

第 12 章はとても長くなってしまったが、個人的に一番好きな内容を詰め込んだ。物理量と演算子の関係から、相対論的場の方程式であるクライン-ゴルドン方程式の導出をした。また、クラインゴルドン場が非常にうまくできており、相対論的因果律にも反していない。しかも、あんなに簡単に作った方程式が、こんなに上手く出来ているのはとても興味深いものだと感じました。

第 13 章は私が現在勉強中の場の量子論についてまとめた。そのため、おかしなところがあるかもしれないが、教科書をたくさん読みながら書いたので勘違いがなければ間違いはないはずだ。特にゲージ原理を原理として採用する場の量子論は非常に興味深く感じている。なぜなら、第 1 章から出てきているものであるからだ。たとえて言うならば、微分方程式でいう任意定数のようなものかとはじめは思っていた。しかし、ゲージ変換が実際はとても大事なものだとして学習していく中で知りとても驚いたのを今でも驚いていたのを覚えている。内容としてはディラック方程式から始まり、リー群やリー代数を経て、ゲージ原理を使い、3 つの力について述べた。

研究部内での学習以外にプチ研究として低次元マクスウェル方程式について考え、いくつか具体例を考えたがあまり面白くなかったため、ここに書かなかった。方法としては、マクスウェル方程式の相対論的表示を用いて、例えば1+1次元の場合、添え字を0~1まで動かして考えてみたのですが、電荷の作る電場が3次元でいう無限に広い面電荷の場合に相当するなどあまり面白くなかった。そのため、今後は、それを量子化して、どのようになるか気になる。実際、原子一個の幅のひものような物質に電流を流すと、電流が普通の太さのときに比べて、電流が流れにくくなるという現象があるそうなので、気になっています。また、逆にこの方法を用いて、高次元マクスウェル方程式についても考えてみたいと思う。また、マクスウェル理論のある種の一般化された理論であるヤン-ミルズ理論(非可換ゲージ場理論)についてもより勉強したいと思っています。

経路積分というものは、他の量子力学の手法に比べ新しい定式化の方法である。量子力学の式、例えば交換関係などをじっくり眺めてみても、そこに書いてある以上の情報をそれから得ることははじめ難しく、量子力学は何とも数学的だなと思っていた。その理由は、物理というより量子力学が線形空間のようなもの(ヒルベルト空間というらしい。)で、その固有値、固有ベクトル(固有関数)を求めて、と演算子を作用させることでその系が変換される。これがあまりよくわからなかった。確かにそれを考えれば、実験結果とも一致するような結果を理論的に計算できることはわかっていた。でも、それはあまり物理らしいとは少なくとも量子力学を学び始めた当初は思えなかった。なぜ物理量を演算子化(量子化)することを考えるのかが一番わからなかった。そうした中で、経路積分に出会った。経路積分というものは、光学からのアナロジーで、光を粒子として扱う際に、その伝搬関数(プロパゲータ)を考え、それを用いて記述するというものであった。それはよくわからない演算子の話はなく、粒子を波として扱うならば、このようになるはずだという、いかにも物理的でかつ、自然な流れだと感じた。もちろん作用素云々の量子力学はとても大事で偉大で、特に場の理論を考える際にとっても重要である。その経路積分の式を一次近似で展開してみると、なんとそこからシュレディンガー方程式が出てきたではないか。これにはとても感動した。これを通してみると作用素云々の量子力学に対しても違った見方ができるようになった。ある種のフーリエ展開(変換)してあげることが、固有関数で展開することに対応し、物理量を演算子化させるとは、フーリエ変換することにより、微分が波数空間では波数をかけることに対応する考え方だとわかった。つまり、経路積分を通して、量子力学を見ると、もやもやしていた世界がぱっと明るくなり、量子力学のいわんとしていることが理解できるようになってきた。また、経路積分は四の五の言わず、まず初めにその系のラグランジアンを書いて、それを直接計算するなり、摂動論を使って近似するなりをしろ。というスタイルが、高校物理の問題を解くによく予備校の講師から言われた、「まず力を見つけ、運動方程式を立てろ。」という考え方に似ていて自分の性にあっていたから、経路積分による量子力学の定式化がすんなり受け入れられたのかもしれない。

また、もちろんシュレディンガー表示とハイゼンベルク表示(演算子形式)にも長所と短所があり、経路積分表示(経路積分形式)の長所と短所があります。演算子形式では、ハミルトニアンを基礎として定式化されている。そのため、エネルギースペクトルや時間発展を調べるのに適している。ここはあまり触れなかったが、散乱問

題の定式化はブラ・ケットを用いた演算子形式の方が分かりやすい。特に、スペクトル表示を用いた解析は演算子形式が得意とするところである。

一方、経路積分表示では、ハミルトニアンではなく、作用積分を基礎として定式化されている。そのため、理論の不変性、特に、相対論的不変性が明白に保たれていることは経路積分形式の大きな利点の一つである。また、ゲージ理論のように局所的不変性を持つ理論では、非物理的自由度が含まれるため、演算子形式で正準量子化を行うと技術的な議論が必要になる。一方、経路積分形式では、より直感的な方法で正しい表式にたどりつける。また、経路積分形式では演算子のように非可換な量を取り扱わないので(可換な c 数と反可換な Grassmann 数)、古典論との対応が見やすく直感的な描像をつかみやすい。また、テイラー展開がそのまま摂動論になることなど、演算子形式に比べて、様々な計算が楽に行え見通しがよい。また、今回は表立って書かなかったが、時間順序積, T 積のグリーン関数は経路積分形式と相性がとてもよい。なぜなら、経路積分表示は、演算子形式での T 積を自然に取り込んだ量子化法であるからである。逆に言うと、 T 積以外の量を経路積分を用いて計算することは難しいことになる。しかし、場の量子論において物理的に重要な情報は T 積で与えられるグリーン関数の中に含まれているからである。

今後の目標

つい先日私は次のような式を本屋さんで見つけた。

$$S = \int d^4x \sqrt{-\det G_{\mu\nu}(x)} \left[\frac{1}{16\pi G_N} (R[G_{\mu\nu}(x)] - \Lambda) - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 \text{tr} (F_{\mu\nu}^{(i)}(x))^2 + \sum_f \bar{\psi}^{(f)}(x) iD\psi^{(f)}(x) \right. \\ \left. + \sum_{g,h} (y_{gh} \Phi(x) \bar{\psi}^{(g)}(x) \psi^{(h)}(x) + h.c) + |D_\mu \Phi(x)|^2 - V[\Phi(x)] \right]$$

この式は通称宇宙を支配する方程式といわれており、この式は標準理論の作用にアインシュタイン=ヒルベルト作用を加えたものであるらしい。つい先日私は村山斉先生の NHK オンライン講義に参加したのだが、この式が最強の数式として登場した。今、現在の大きな目標はこの式の全ての項について理解することだ。そのため、今後の学習の方向性としては、場の量子論の学習をこのまま進めていくとともに、量子電磁気学の学習をしていきたいと思っている。また、余裕があればだが、物性物理についても学習したい。

将来的にははまだ決めかねているのだが、量子重力理論の超弦理論の研究をしたいと思っている。また、現在、物性理論にも興味があり、特に量子物性の表面物理学に興味がある。

私の現在の量子重力理論のアプローチとしてはカルツァークライン機構の応用である。カルツァークライン機構はもともと 5 次元を仮定することによって重力と電磁気力の統一理論を作ろうとしたものである。私はこれを応用して、全ての力の統一だけでなく空間とは何かという問いに対する一つの見解を述べられればと思っている。

謝辞

研究部の事務局の方、アドバイザーの方、特に、前アドバイザーの森脇さんと現アドバイザーの中澤さんには大変お世話になりました。また、東京工業大学の山崎詩朗助教授には私の紀要を読んで頂きました。皆様、ありがとうございます。また、数学デーに参加している方、数理空間トポスのチューターの皆様には、数学的な技巧や諸知識を教えてくださいありがとうございます。

参考文献

本紀要を書く際に参考にしたものと、自身が研究部で学習していく中で使った教科書や参考書をまとめた。そのため、高校生で物理学を学びたい人は参考にしてもらいたい。

1. ファインマン物理学Ⅰ 力学 著：ファインマン レイトン サンズ 訳：坪井忠二
2. ファインマン物理学Ⅱ 光 熱 波動 著：ファインマン レイトン サンズ 訳：富山小太郎
3. ファインマン物理学Ⅲ 電磁気学 著：ファインマン レイトン サンズ 訳：宮島龍興
4. ファインマン物理学Ⅳ 電磁波と物性 著：ファインマン レイトン サンズ 訳：戸田盛和
5. ファインマン物理学Ⅴ 量子力学 著：ファインマン レイトン サンズ 訳：砂川重信
6. 場の古典論=電気力学、特殊および一般相対性理論= 著：ランダウ リフシッツ 訳：恒藤敏彦、広重徹
7. 一般相対性理論を一步一步数式で理解する 著：石井俊全
8. マクスウェル方程式から始める電磁気学 共著：小宮山進 竹川敦
9. 理論電磁気学 著：砂川重信
10. 量子電磁力学を学ぶための電磁気学入門 著：高橋康 解説：柏太郎
11. 幾何光学の正準理論 著：山本義隆
12. 原子物理学Ⅰ 著：E. シュポルスキー 訳：玉木英彦 細谷資明 井田幸次郎 松平弁
13. 量子力学を学ぶための解析力学入門 著：高橋康
14. 現代の量子力学(上) 著：桜井純 編：Jim Napolitano 訳：桜井明夫
15. 量子力学と経路積分 著：R.P. ファインマン A.R. ヒップス 訳：北原和夫
16. 古典場から量子場への道 著：高橋康 表實
17. 量子場を学ぶための場の解析力学入門 著：高橋康 柏太郎
18. 場の量子論ⅠⅡ 著：坂本真人
19. 統計力学Ⅰ 著：田崎晴明
20. 明解量子重力理論入門 著：吉田伸夫
21. 一歩進んだ理解を目指す 物性物理学講義 著：加藤岳生
22. 線形代数学 著：川久保勝夫
23. 物理学のための数学 著：一石賢
24. やさしくわかる物理学のための数学 著：ノマド・ワークス
25. 解析力学入門Ⅰ・Ⅱ 著：杉浦光彦
26. テンソル解析 著：田代嘉宏
27. 応用解析学入門 著：白井宏
28. 複素解析と流体力学 著：今井功
29. 大栗先生の超弦理論入門 著：大栗博司
31. 光と物質のふしぎな理論 著：R.P. ファインマン 訳：釜江常好 大貫昌子
31. 宇宙になぜ我々が存在するのか 著：村山 斉
32. 独楽の科学 著：山崎詩朗
33. トポロジカル物質とは何か 著：長谷川修司