スカラー場の展開係数

量子力学と場の量子論での正準交換関係の対応を見ます。

クライン・ゴルドン方程式に従う実スカラー場 ϕ は正規直交基底 $u_n(\boldsymbol{x})$ $(n=-\infty,\ldots,\infty)$ で展開できるとして

$$\phi(x)=\sum_n q_n(t)u_n(\boldsymbol{x})$$

$u_n(\boldsymbol{x})$ の直交性は

$$\int d^3x\ u_m(\boldsymbol{x})u_n(\boldsymbol{x})=\delta_{mn}\ ,\ \sum_n u_n(\boldsymbol{x})u_n(\boldsymbol{y})=\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$$

とします。逆に変換すれば

$$\begin{aligned}
\sum_n q_n(t)u_n(\boldsymbol{x})&=\phi(x)\\
\sum_n q_n(t)\int d^3x\ u_m(\boldsymbol{x})u_n(\boldsymbol{x})&=\int d^3x\ u_m(\boldsymbol{x})\phi(x)\\
\sum_n q_n(t)\delta_{mn}&=\int d^3x\ u_m(\boldsymbol{x})\phi(x)\\
q_m(t)&=\int d^3x\ u_m(\boldsymbol{x})\phi(x)
\end{aligned}$$

時間微分は

$$\dot{q}_n=\frac{dq_n(t)}{dt}=\int d^3x\ u_m(\boldsymbol{x})\dot{\phi}(x)$$

q_n と $\dot{q}_n$ を独立変数とします。そうすると、$\dot{\phi}$ の q 微分、ϕ の $\dot{q}$ 微分は出てこないので、ラグランジアン L を偏微分したとき

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial q_n(t)}&=\int d^3x\frac{\partial\mathcal{L}(\phi,\partial_\mu\phi)}{\partial q_n(t)}=\int d^3x(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi}\frac{\partial\phi}{\partial q_n}+\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_j\phi)}\frac{\partial(\partial_j\phi)}{\partial q_n})\\
\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_n}&=\int d^3x\frac{\partial\mathcal{L}(\phi,\partial_\mu\phi)}{\partial\dot{q}_n(t)}=\int d^3x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}\frac{\partial\dot{\phi}}{\partial\dot{q}_n}
\end{aligned}$$

そして

$$\frac{\partial\phi}{\partial q_n}=\frac{\partial}{\partial q_n}\sum_m q_m(t)u_m(\boldsymbol{x})=u_n(\boldsymbol{x})$$

$$\frac{\partial(\partial_i\phi)}{\partial q_n}=\partial_i\frac{\partial\phi}{\partial q_n}=\partial_i\frac{\partial}{\partial q_n}\sum_m q_m(t)u_m(\boldsymbol{x})=\partial_i u_n(\boldsymbol{x})$$

$$\frac{\partial\dot{\phi}}{\partial\dot{q}_n}=\frac{\partial}{\partial\dot{q}_n}\sum_m \dot{q}_m(t)u_m(\boldsymbol{x})=u_n(\boldsymbol{x})$$

なので

$$\frac{\partial L}{\partial q_n(t)}=\int d^3x\big(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi}u_n(\boldsymbol{x})-(\sum_{j=1}^{3}\partial_j\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_j\phi)})u_n(\boldsymbol{x})\big)$$

$$\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_n}=\int d^3x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}u_n(\boldsymbol{x})$$

表面積分は落としています。2 つを合わせると

$$\frac{\partial L}{\partial q_n(t)}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_n}=\int d^3x\big(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi}-\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}-(\sum_{j=1}^{3}\partial_j\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_j\phi)})\big)u_n(\boldsymbol{x})=\int d^3x\big(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi}-\partial^\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial^\mu\phi)}\big)u_n(\boldsymbol{x})$$

ϕ はオイラー・ラグランジュ方程式に従うので

$$\frac{\partial L}{\partial q_n(t)}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_n}=0$$

から、q_n はラグランジアン L での一般化座標と見れます。共役な運動量は

$$p_n=\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_n}=\int d^3x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}\frac{\partial\dot{\phi}}{\partial\dot{q}_n}=\int d^3x\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}u_n(\boldsymbol{x})$$

場 ϕ の共役量は

$$\pi(x)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}=\dot{\phi}$$

となっています。

q_n,p_n を演算子化し、正準交換関係

$$[q_n(t),p_m(t)]=i\delta_{nm}\ ,\ [q_n(t),q_n(t)]=[p_n(t),p_n(t)]=0$$

を要求します。u_n は基底なので、ϕ,π を演算子とすることで

$$
\begin{aligned}
i\delta_{nm} &= [q_n(t), p_m(t)] \\
&= [\int d^3x\ \phi(t, \boldsymbol{x}) u_n(\boldsymbol{x}), \int d^3y\ \pi(t, \boldsymbol{y}) u_m(\boldsymbol{y})] \\
&= \int d^3x d^3y\ u_n(\boldsymbol{x}) u_m(\boldsymbol{y}) [\phi(t, \boldsymbol{x}),\ \pi(t, \boldsymbol{y})]
\end{aligned}
$$

右辺は

$$
\begin{aligned}
&\sum_{m,n} u_n(\boldsymbol{x}') u_m(\boldsymbol{y}') \int d^3x d^3y\ u_n(\boldsymbol{x}) u_m(\boldsymbol{y}) [\phi(t, \boldsymbol{x}),\ \pi(t, \boldsymbol{y})] \\
&= \int d^3x d^3y \sum_n u_n(\boldsymbol{x}') u_n(\boldsymbol{x}) \sum_m u_m(\boldsymbol{y}') u_m(\boldsymbol{y}) [\phi(t, \boldsymbol{x}),\ \pi(t, \boldsymbol{y})] \\
&= \int d^3x d^3y \delta^3(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}) \delta^3(\boldsymbol{y}' - \boldsymbol{y}) [\phi(t, \boldsymbol{x}),\ \pi(t, \boldsymbol{y})] \\
&= [\phi(t, \boldsymbol{x}'),\ \pi(t, \boldsymbol{y}')]
\end{aligned}
$$

左辺は

$$
i\sum_{m,n} \delta_{nm} u_n(\boldsymbol{x}') u_m(\boldsymbol{y}') = i\sum_n u_n(\boldsymbol{x}') u_n(\boldsymbol{y}') = i\delta^3(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{y}')
$$

よって

$$
[\phi(t, \boldsymbol{x}),\ \pi(t, \boldsymbol{y})] = i\delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})
$$

これで量子力学の正準交換関係から場の正準交換関係が出てきます。

$q_n(t)$ が古典的に何を表すのかを求めます。$\dot{\phi}$ を使うより π のほうが簡単なので、スカラー場のハミルトニアン密度を変形していくと

$$
\begin{aligned}
\int d^3x \mathcal{H} &= \frac{1}{2} \int d^3x (\pi^2 + (\nabla\phi)^2 + m^2\phi^2) \\
&= \frac{1}{2} \int d^3x (\sum_{m,n} p_m(t) p_n(t) u_m(\boldsymbol{x}) u_n(\boldsymbol{x}) \\
&\quad + \sum_{m,n} q_m(t) q_n(t) \nabla u_m(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla u_n(\boldsymbol{x}) + m^2 \sum_{m,n} q_m(t) q_n(t) u_m(\boldsymbol{x}) u_n(\boldsymbol{x})) \\
&= \frac{1}{2} (\sum_{m,n} p_m p_n + m^2 \sum_{m,n} q_m q_n) \delta_{mn} + \frac{1}{2} \sum_{m,n} q_m q_n \int d^3x \nabla u_m(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla u_n(\boldsymbol{x}) \\
&= \frac{1}{2} (p_n^2 + m^2 q_n^2) + \frac{1}{2} \sum_{m,n} q_m q_n \int d^3x \nabla u_m(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla u_n(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

第一項は調和振動子のエネルギーですが、第二項で q_m, q_n の間に別のポテンシャル (相互作用)

$$V_{mn}(\boldsymbol{x}) = \nabla u_m(\boldsymbol{x}) \cdot \nabla u_n(\boldsymbol{x})$$

が出てきています。このため、$\phi(x)$ の展開係数 $q_n(t)$ は調和振動子の解ではないです。その上、u_n は任意の正規直交基底なので何を表すのかはっきりしません。

しかし、演算子として

$$q_n(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_n^\dagger(t) + a_n(t)) \ , \ p_n(t) = \frac{i}{\sqrt{2}}(a_n^\dagger(t) - a_n(t))$$

とすれば、$a_n^\dagger, a_n$ の交換関係は

$$\begin{aligned}
[a_m, a_n^\dagger] &= [\frac{1}{\sqrt{2}}(q_m + ip_m), \frac{1}{\sqrt{2}}(q_n - ip_n)] \\
&= \frac{1}{2}[q_m, q_n] + \frac{1}{2}[p_m, p_n] + \frac{i}{2}[p_m, q_n] - \frac{i}{2}[q_m, p_n] \\
&= \frac{1}{2}\delta_{mn} + \frac{1}{2}\delta_{mn} \\
&= \delta_{mn}
\end{aligned}$$

なので、生成、消滅演算子となり ($[a_m, a_n] = [a_m^\dagger, a_n^\dagger] = 0$)、真空を $a_n|0\rangle = 0$ と定義でき、粒子の生成、消滅が可能になります。このようにして、生成、消滅演算子を場から作れます。