クライン・ゴルドン場〜実スカラー場〜

ここでは量子力学での調和振動子とクライン・ゴルドン方程式の類似点から、場の量子化を見ていきます。
場の量子化の話はすぐに終わって、後はいくつかの関係を求めています。
クライン・ゴルドン方程式の意味については「クライン・ゴルドン場〜複素スカラー場〜」で見ます。
演算子にハットをつけて区別していないので注意してください。

「シュレーディンガー場」での話を簡単にまとめておきます。量子力学では、位置 q と運動量 p を演算子として、正準交換関係を

$$[q_i, p_j] = i\delta_{ij}\ ,\ [q_i, q_j] = [p_i, p_l] = 0$$

と与えます (正準量子化)。これから、q を場 $\phi(\boldsymbol{x}, t)$、p を正準共役な場 $\pi(\boldsymbol{x}, t)$ に置き換えて、ϕ, π を演算子として、同時刻交換関係を

$$[\phi(\boldsymbol{x}, t), \pi(\boldsymbol{y}, t)] = i\delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})\ ,\ [\phi(\boldsymbol{x}, t), \phi(\boldsymbol{y}, t)] = [\pi(\boldsymbol{x}, t), \pi(\boldsymbol{y}, t)] = 0 \tag{1}$$

とするのが、場の量子化です。

ちなみに、数学を気にする人は気づくかもしれませんが、場の演算子 $\phi(\boldsymbol{x}, t), \pi(\boldsymbol{y}, t)$ による交換関係の結果がディラックのデルタ関数という特殊な関数となっているために、数学的に場の演算子を正確に定義するのが難しくなっています。こういったことから分かるように場の量子論は出発点の段階で数学的な問題を抱えながら先に進んでいっています。

まずは、量子力学の範囲内で見ていきます。クライン・ゴルドン方程式は

$$(\Box + m^2)\phi(\boldsymbol{x}, t) = 0 \qquad (\Box = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2)$$

という偏微分方程式です。ϕ は実数とし ($\phi = \phi^*$)、m は質量です。実数のスカラーの場は実数スカラー場や実スカラー場と呼ばれます。これはただの微分方程式なので、$\phi(\boldsymbol{x}, t)$ は古典的な場です。平面波 $e^{\pm ipx}$ ($px = p_\mu x^\mu = p_0 x_0 - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}$) を使えば

$$0 = (\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2)e^{\pm ipx} = (-p_0^2 + |\boldsymbol{p}|^2 + m^2)e^{\pm ipx}$$

となり、$p_0^2 - |\boldsymbol{p}|^2 = m^2$ なら解となります。これは特殊相対論でのエネルギーと運動量の関係です。

クライン・ゴルドン方程式は $E^2 = |\boldsymbol{p}|^2 + m^2$ を演算子化することで作られているために、1 粒子のハミルトニアン演算子は $\sqrt{-\nabla^2 + m^2}$ となって、扱いづらいので状況を少し変更します (これのせいで、クライン・ゴルドン方程式での場の量子化の手続きの見通しが悪い)。

平面波の重ね合わせとして、$\phi(\boldsymbol{x}, t)$ を 3 次元運動量のフーリエ変換によって

$$\phi(\boldsymbol{x}, t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\phi(\boldsymbol{p}, t)e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}$$

とします。これをクライン・ゴルドン方程式に入れて

$$(\frac{\partial^2}{\partial t^2}+|\boldsymbol{p}|^2+m^2)\phi(\boldsymbol{p},t)=0$$

としたのを使います。この形は調和振動子 (単振動) の運動方程式

$$(m\frac{d^2}{dt^2}+m\omega^2)x(t)=0$$

と同じです。というわけで、固定された $\boldsymbol{p}$ に対して、フーリエ変換したクライン・ゴルドン方程式のハミルトニアンは、$\phi(\boldsymbol{p},t)$ と $x(t)$ を置き換えれば、調和振動子のハミルトニアンと同じです。なので、調和振動子のハミルトニアン

$$\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}x^2$$

から

$$H=\frac{1}{2}|\boldsymbol{k}|^2+\frac{1}{2}\omega^2\phi^2\qquad(\omega=\sqrt{|\boldsymbol{p}|^2+m^2})$$

$x(t)$ が $\phi(\boldsymbol{p},t)$ になるだけなので、量子力学での「調和振動子」と同じように、生成、消滅演算子を導入します。
　ハミルトニアンは

$$H=\omega(a^\dagger a+\frac{1}{2})$$

このように書けて、$a,a^\dagger$ は

$$\phi(p,t)=\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a+a^\dagger)\ ,\ k=-i\sqrt{\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{2}}(a-a^\dagger)\tag{2}$$

$\boldsymbol{p},\boldsymbol{k}$ は 1 次元にしています。$a^\dagger,a$ を演算子に変更します。このとき、演算子にハットをつけて区別すれば、$\phi(\hat{p},t)$ でなく $\hat{\phi}(p,t)$ とします。そして、正準量子化から ϕ と k は正準交換関係 $[\phi,k]=i$ を満たすとして

$$\begin{aligned}
[\phi,k]&=\frac{-i}{\sqrt{2\omega}}(a+a^\dagger)\sqrt{\frac{\omega}{2}}(a-a^\dagger)+i\sqrt{\frac{\omega}{2}}(a-a^\dagger)\frac{1}{\sqrt{2\omega}}(a+a^\dagger)\\
&=\frac{-i}{2}(a+a^\dagger)(a-a^\dagger)+i\frac{1}{2}(a-a^\dagger)(a+a^\dagger)\\
&=\frac{-i}{2}(aa-aa^\dagger+a^\dagger a-a^\dagger a^\dagger-aa-aa^\dagger+a^\dagger a+a^\dagger a^\dagger)\\
&=\frac{-i}{2}(-aa^\dagger+a^\dagger a-aa^\dagger+a^\dagger a)\\
&=i[a,a^\dagger]=i\\
&\Rightarrow [a,a^\dagger]=1
\end{aligned}$$

よって、生成、消滅演算子 $a,a^\dagger$ の交換関係は $[a,a^\dagger]=1$ となるのが要求されます。というわけで、$a,a^\dagger$ は生成、消滅演算子です。そして、$\phi(p,t)$ からの p 依存性を持つように見えます。

量子力学では、消滅演算子 a によって $a|E_0\rangle=0$ となる状態 $|E_0\rangle$ が存在すれば

$$H|E_0\rangle=\frac{1}{2}\omega$$

この状態 $|E_0\rangle$ は零点エネルギー $\omega/2$ を持つハミルトニアン演算子の固有状態です。状態 $|E_0\rangle$ に生成演算子を n 回作用させた $|E_n\rangle=(a^\dagger)^n|E_0\rangle$ は固有値 $(n+1/2)\omega$ を持ちます。例えば

$$Ha^\dagger|E_0\rangle=(\omega a^\dagger+a^\dagger H)|E_0\rangle=(\omega a^\dagger+a^\dagger\frac{1}{2}\omega)|E_0\rangle=(1+\frac{1}{2})\omega a^\dagger|E_0\rangle$$

となります。ハミルトニアン演算子の固有値なので、状態 $|E_n\rangle$ は励起状態です。また、$N=a^\dagger a$ は個数演算子で $N|E_n\rangle=n|E_n\rangle$ で、n は $a^\dagger$ が E_0 に作用した回数です (H の固有値での $n\omega$ の n)。

この話で注目するのは、ハミルトニアン演算子

$$H=\omega(a^\dagger a+\frac{1}{2})=\omega(N+\frac{1}{2})$$

において整数で増えていく励起状態 $|E_n\rangle$ の $n\omega$ がいて、その励起状態の上げ下げは $a^\dagger,a$ で行える点です。そして、今は $a^\dagger,a$ に運動量依存性があります。このため、$a^\dagger,a$ がある運動量に対応するなら、その運動量の状態を作るか消すかの演算子と考えられます。つまり、粒子の励起状態の上げ下げでなく、新しい粒子の生成、消滅を行っていると見えます。これと「シュレーディンガー場」での話をくっつけます。

シュレーディンガー方程式では、場によるハミルトニアンは 1 粒子のハミルトニアン演算子の期待値で、それを演算子化することで多数の粒子のエネルギーの和に変更されました。なので、ここでの場によるハミルトニアンを演算子化すれば、励起状態のエネルギーの和が、多数の粒子の和に変更されると予想できます。言い換えれば、調和振動子型の方程式での生成、消滅演算子は可能な励起状態を作り出すという性質が、今の話のようにある状態の粒子を生成、消滅させる演算子に変更されるはずということです。

というわけで、場を量子化するために古典場に戻ります。クライン・ゴルドン方程式に対するラグランジアン密度 $\mathcal{L}$ は、$\hbar$ と c も消さずに書くと (ラグランジアンは $\phi,\partial_\mu\phi$ に依存している)

$$\mathcal{L}=\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial\phi}{\partial x_\mu}\frac{\partial\phi}{\partial x^\mu}-\frac{1}{2}m^2c^2\phi^2=\frac{\hbar^2}{2}(\partial_\mu\phi)^2-\frac{1}{2}m^2c^2\phi^2$$

これをオイラー・ラグランジュ方程式

$$\partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi}=0$$

に入れれば (ϕ と $\partial_\mu\phi$ は独立)

$$\hbar^2\Box\phi+m^2c^2\phi=0$$

となって、クライン・ゴルドン方程式が導かれます。

正準共役な π は ($\partial_0\phi=\dot{\phi}$)

$$
\begin{aligned}
\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} &= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \dot{\phi}}(\frac{\partial \phi}{\partial x_0}\frac{\partial \phi}{\partial x^0} + \cdots + \frac{\partial \phi}{\partial x_3}\frac{\partial \phi}{\partial x^3}) \\
&= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \dot{\phi}}(\dot{\phi})^2 \\
&= \dot{\phi}
\end{aligned}
$$

と求められます。場のハミルトニアンは

$$
H = \int d^3x\mathcal{H} = \int d^3x(\pi\dot{\phi} - \mathcal{L})
$$

なので

$$
\begin{aligned}
H = &\int d^3x(\pi\dot{\phi} - \frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2 + \frac{1}{2}m^2\phi^2) \\
= &\int d^3x(\pi\dot{\phi} - \frac{1}{2}(\dot{\phi}^2 - (\nabla\phi)^2) + \frac{1}{2}m^2\phi^2) \\
= &\int d^3x(\pi^2 - \frac{1}{2}(\pi^2 - (\nabla\phi)^2) + \frac{1}{2}m^2\phi^2) \\
= &\int d^3x(\frac{1}{2}\pi^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2}m^2\phi^2)
\end{aligned}
$$

後は場を演算子化すればいいです。

「シュレーディンガー場」と同じ手続きをします。状況を簡単にするために場の演算子は時間依存してないとします。これはシュレーディンガー描像です。なので、クライン・ゴルドン方程式の $\phi(x)$ を時間依存性を持たない $\phi(\boldsymbol{x})$ とします。これを上での話と同じようにフーリエ変換して

$$
\phi(\boldsymbol{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_p}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + b_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_p}}(a_pe^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + b_{-\boldsymbol{p}}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}})
$$

係数を a_p と $b_{\boldsymbol{p}}$ に分けて書いています。$\omega_{\boldsymbol{p}} = \sqrt{|\boldsymbol{p}|^2 + m^2} = \omega_{-\boldsymbol{p}}$ として、最右辺へは運動量 $\boldsymbol{p}$ の 3 次元の全空間積分なので $\boldsymbol{p}$ の符号は変えても影響はないです。添え字の $\boldsymbol{p}$ は $\boldsymbol{p}$ に依存していることを表します。場は実数としているので

$$
\phi^*(\boldsymbol{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_p}}(a_p^*e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + b_{-\boldsymbol{p}}^*e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}) = \phi(\boldsymbol{x})
$$

これから、$a_p^* = b_{-\boldsymbol{p}}$ となり

$$
\phi(\boldsymbol{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_p}}(a_pe^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + a_p^*e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}})
$$

今は時間依存性がないので時間微分から π が作れないです。なので、a_p^*, a_p が生成、消滅演算子になるように π を与えることにして、(2) から

$$\pi(\boldsymbol{x}) = -i\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{2}}(a_p e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} - a_p^* e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}})$$

これで問題ないことは後で確かめます。exp の記号をあわせて

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + a_{-\boldsymbol{p}}^* e^{+i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}) \tag{3a}$$

$$\pi(\boldsymbol{x}) = -i\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\sqrt{\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{2}}(a_{\boldsymbol{p}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} - a_{-\boldsymbol{p}}^* e^{+i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}) \tag{3b}$$

と書き直します ($\omega_{\boldsymbol{p}} = \omega_{-\boldsymbol{p}}$)。これらを演算子化し、同時刻交換関係 (1) が成立しているとします。そうすると

$$\begin{aligned}
[\phi(\boldsymbol{x}), \pi(\boldsymbol{x}')] =& \int\frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{-i}{2}\sqrt{\frac{\omega_{\boldsymbol{p}'}}{\omega_{\boldsymbol{p}}}}((a_{\boldsymbol{p}} + a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger)(a_{\boldsymbol{p}'} - a_{-\boldsymbol{p}'}^\dagger) - (a_{\boldsymbol{p}'} - a_{-\boldsymbol{p}'}^\dagger)(a_{\boldsymbol{p}} + a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger))e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}+\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}')} \\
=& \int\frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{-i}{2}\sqrt{\frac{\omega_{\boldsymbol{p}'}}{\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}'} - a_{\boldsymbol{p}}a_{-p'}^\dagger + a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}'} - a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger a_{-p'}^\dagger \\
&\qquad - (a_{\boldsymbol{p}'}a_{\boldsymbol{p}} + a_{\boldsymbol{p}'}a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger - a_{-\boldsymbol{p}'}^\dagger a_{\boldsymbol{p}} - a_{-\boldsymbol{p}'}^\dagger a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger))e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}+\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}')} \\
=& \int\frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{-i}{2}\sqrt{\frac{\omega_{p'}}{\omega_p}}(-a_{\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}'}^\dagger + a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}'} - a_{\boldsymbol{p}'}a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger + a_{-\boldsymbol{p}'}^\dagger a_{\boldsymbol{p}})e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}+\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}')} \\
=& \int\frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{-i}{2}\sqrt{\frac{\omega_{p'}}{\omega_p}}([a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger, a_{\boldsymbol{p}'}] - [a_{\boldsymbol{p}}, a_{-\boldsymbol{p}'}^\dagger])e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}+\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}')}
\end{aligned}$$

ここで

$$[a_{\boldsymbol{p}}, a_{\boldsymbol{p}'}^\dagger] = (2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')$$

を要求すれば

$$\begin{aligned}
[\phi(\boldsymbol{x}), \pi(\boldsymbol{x}')] =& \int\frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{-i}{2}\sqrt{\frac{\omega_{p'}}{\omega_p}}(2\pi)^3(-\delta^3(\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{p}) - \delta^3(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}'))e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}+\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}')} \\
&= i\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}e^{i(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\cdot\boldsymbol{p}} \\
&= i\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')
\end{aligned}$$

として、同時刻交換関係が成立します (元から時間依存性はない)。この結果から、同時刻交換関係を満たすために a と $a^\dagger$ の交換関係は

$$[a_{\boldsymbol{p}}, a_{\boldsymbol{p}'}^\dagger] = (2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\ ,\ [a_{\boldsymbol{p}}, a_{\boldsymbol{p}'}] = [a_{\boldsymbol{p}}^\dagger, a_{\boldsymbol{p}'}^\dagger] = 0$$

となることが要求されます。というわけで、場の量子化が行われたことになります。

実際に、粒子数が出てくることを見ます。ハミルトニアンを演算子化します。演算子化したハミルトニアン演算子の各項は

$$\pi^2 = -\int \frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{\sqrt{\omega_{\boldsymbol{p}}\omega_{\boldsymbol{p}'}}}{2}(a_{\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{\boldsymbol{p}'} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}'})e^{i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$(\nabla\phi)^2 = \int \frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}'}{2\sqrt{\omega_{\boldsymbol{p}}\omega_{\boldsymbol{p}'}}}(a_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{\boldsymbol{p}'} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}'})e^{i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$\phi^2 = \int \frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{1}{2\sqrt{\omega_{\boldsymbol{p}}\omega_{\boldsymbol{p}'}}}(a_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{\boldsymbol{p}'} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}'})e^{i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}}$$

演算子化しているので、$a^*_{-\boldsymbol{p}}$ はエルミート共役 $a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}$ にしています。これらから、$a_{\boldsymbol{p}}, a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}$ は演算子であることに注意して計算していくと

$$\begin{aligned}
H &= \int d^3x\int \frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}e^{i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}}\big(-\frac{\sqrt{\omega_{\boldsymbol{p}}\omega_{\boldsymbol{p}'}}}{4}(a_{\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{\boldsymbol{p}'} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}'}) \\
&\quad hspace9.2em + \frac{-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}' + m^2}{4\sqrt{\omega_{\boldsymbol{p}}\omega_{\boldsymbol{p}'}}}(a_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{\boldsymbol{p}'} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}'})\big) \\
&= \int \frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^3}\delta^3(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\big(-\frac{\sqrt{\omega_{\boldsymbol{p}}\omega_{\boldsymbol{p}'}}}{4}(a_{\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{\boldsymbol{p}'} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}'}) \\
&\quad hspace9.2em + \frac{-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}' + m^2}{4\sqrt{\omega_{\boldsymbol{p}}\omega_{\boldsymbol{p}'}}}(a_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{\boldsymbol{p}'} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}'})\big) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\big(-\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{4}(a_{\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{-\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{p}) + \frac{\boldsymbol{p}^2 + m^2}{4\omega_{\boldsymbol{p}}}(a_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{-\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}})\big) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{4}\big(-(a_{\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{-\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{\boldsymbol{p}}) + (a_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}})(a_{-\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}})\big) \qquad (\boldsymbol{p}^2 + m^2 = \omega_{\boldsymbol{p}}^2) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{4}\big(-(a_{\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}} - a_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}}) + (a_{\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}} + a_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}})\big) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{4}(a_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}} + a_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}}) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{2}(a_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}}) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{2}(a_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{2}(a_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\omega_{\boldsymbol{p}}(a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{2}[a_{\boldsymbol{p}}, a^\dagger_{\boldsymbol{p}}]) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\omega_{\boldsymbol{p}}(a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{2}(2\pi)^3\delta^3(0))
\end{aligned}$$

第一項の $a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}$ は運動量 $\boldsymbol{p}$ によって区別される生成、消滅演算子で、その運動量は積分されているので、あらゆる運動量の状態に対応した生成、消滅演算子が含まれています ($\boldsymbol{p}$ 積分を離散的にすれば、運動量 $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_n$ の

運動量の和になって分かりやすい)。よって、$a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}$ を運動量 $\boldsymbol{p}$ を持った粒子の数とすれば、$\omega_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}$ の積分は系の全粒子によるのエネルギーを与えることになり、「シュレーディンガー場」と同じ結論になります。しかし、今は第二項の $\delta^3(0)$ の項が明らかに無限大の発散を持っています。

調和振動子でのエネルギーを全励起状態の和の形で書いたとすれば

$$H = \sum_n \omega_n(n + \frac{1}{2})$$

この第二項の $\omega_n/2$ 部分に対応してるように見えます。なので、$\delta^3(0)$ は無限大の零点エネルギーです。しかし、観測としてひっかかる量はハミルトニアンの固有値の差のみなので、この無限大の零点エネルギーは無視して問題ないとされます。

というわけで、量子力学の段階では励起状態に対応していたものが、場の量子化によって多数の粒子を含む状態に変更されました。

$a^\dagger_{\boldsymbol{p}}, a_{\boldsymbol{p}}$ を生成、消滅演算子とし、粒子数演算子 $a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}$ で与えることで、電荷の保存が自然と出てきます。しかし、これは実数場だと電荷の区別がないので、「クライン・ゴルドン場〜複素スカラー場〜」で見ます (場の量子化が面倒になりますが、最初に電荷のある複素スカラー場を扱った方が生成、消滅演算子の解釈を納得しやすいかもしれません)。

ちなみに、クライン・ゴルドン方程式の場のハミルトニアン演算子は無限個の調和振動子の和の形になっています。しかし、調和振動子の和と言っても、それは式上のことです（もしくは、イメージとして古典的な調和振動子を量子化した量子論的な調和振動子の集まりととらえる)。実際の調和振動子は位置とそれに共役な運動量によって作られますが、今の場合は場という全く関係ない量によって構成されています。加えて、繋がった調和振動子 (連成振動) の連続極限は質点の変位に対する波動方程式になりますが、ここでの古典的な場 $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ は波動関数です (単振動している物体が観測されるわけではない)。また、便宜上、波動関数と言っていますが、「クライン・ゴルドン場〜複素スカラー場〜」ではっきり示すように、クライン・ゴルドン方程式の $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ は確率として解釈されません。

$a^\dagger_{\boldsymbol{p}}, a_{\boldsymbol{p}}$ が実際に生成、消滅演算子になっていることを見ていきます。ハミルトニアンとの交換関係は、無限大の定数を無視して

$$\begin{aligned}
[H, a^\dagger_{\boldsymbol{p}}] &= \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\omega_{\boldsymbol{p}'}(a^\dagger_{\boldsymbol{p}'}a_{\boldsymbol{p}'}a^\dagger_{\boldsymbol{p}} - a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}'}a_{\boldsymbol{p}'})\\
&= \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\omega_{\boldsymbol{p}'}(a^\dagger_{\boldsymbol{p}'}((2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}) + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}'}) - a^\dagger_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}'}a_{\boldsymbol{p}'})\\
&= \omega_{\boldsymbol{p}}a^\dagger_{\boldsymbol{p}}
\end{aligned}$$

同様にして

$$[H, a_{\boldsymbol{p}}] = -\omega_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}$$

となります。

真空 $|0\rangle$ を与えます。$a|0\rangle = 0$ となる状態 $|0\rangle$ が存在し、固有値として無視できる無限大の発散を持つとします (この無限大を無視すればエネルギーは 0)。この状態 $|0\rangle$ を真空と定義します。真空 $|0\rangle$ に生成演算子 $a^\dagger$ を作用させた状態 $a^\dagger|0\rangle$ は、エネルギー $\omega_{\boldsymbol{p}}$、運動量 $\boldsymbol{p}$ を持った粒子が存在する状態になります。これは

$$
\begin{aligned}
Ha_{\boldsymbol{q}}^\dagger|0\rangle &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\omega_p a_p^\dagger a_p a_q^\dagger|0\rangle \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\omega_p a_p^\dagger((2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})+a_q^\dagger a_p)|0\rangle \\
&= \omega_{\boldsymbol{q}} a_{\boldsymbol{q}}^\dagger|0\rangle
\end{aligned}
$$

から確かめられます。これを繰り返して $a_p^\dagger a_q^\dagger\cdots|0>$ と作用させていけば、全体としてエネルギー $\omega_{\boldsymbol{p}}+\omega_{\boldsymbol{q}}\cdots$、運動量 $\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\cdots$ といった状態になります。

このようにして場の量子論では、相対論的量子力学での問題だった多粒子状態を記述します。しかも単純に多粒子状態が作れたというだけでなく、粒子の数が変わる生成、消滅という現象を扱える形で与えられています (多粒子状態の記述は量子力学でも作れるが、粒子数の変化も含める一貫した構造を作れていない)。

また、$\phi(\boldsymbol{x})$ を $|0\rangle$ に作用させると

$$
\phi(\boldsymbol{x})|0\rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{p}\rangle
$$

となります。これは右辺の $|\boldsymbol{p}\rangle$ を運動量表示と考えると、量子力学の座標表示と運動量表示の関係と同じになっています。なので、演算子 $\phi(\boldsymbol{x})$ を真空に作用させれば位置 $\boldsymbol{x}$ に粒子を作ります。このことから、場 $\phi(x),\phi(y)$ を真空で挟むことで始点 x から終点 y への遷移振幅を表現するものが作れます。そして、この場の演算子の性質が場の量子論の特徴を作っています。

全運動量演算子も求めてみます。場の運動量はネーターの定理での保存量として出てくる 3 次元運動量 $\boldsymbol{P}$ です。なので、「ネーターの定理」で求めたものを演算子化して

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{P} &= -\int d^3x\ \pi(x)\nabla\phi(x) \\
&= \int d^3x\int \frac{d^3pd^3p'}{(2\pi)^6}\frac{-\boldsymbol{p}'}{2}(a_{\boldsymbol{p}}-a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger)(a_{\boldsymbol{p}'}+a_{-\boldsymbol{p}'}^\dagger)e^{i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}} \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\boldsymbol{p}}{2}(a_{\boldsymbol{p}}-a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger)(a_{-\boldsymbol{p}}+a_{\boldsymbol{p}}^\dagger) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\boldsymbol{p}}{2}(a_{\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}}+a_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}^\dagger-a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger a_{-\boldsymbol{p}}-a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}^\dagger) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\boldsymbol{p}}{2}(a_{\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}}+a_{\boldsymbol{p}}a_{\boldsymbol{p}}^\dagger+a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}-a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}^\dagger) \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\boldsymbol{p}}{2}(2a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}+(2\pi)^3\delta^3(0)+a_{\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}}-a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}^\dagger) \\
&\Rightarrow \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\boldsymbol{p}a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}
\end{aligned}
$$

$\boldsymbol{p}a_{\boldsymbol{p}}a_{-\boldsymbol{p}},\boldsymbol{p}a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}^\dagger$ は奇関数なので積分すれば 0 です。ハミルトニアン演算子と並べてみれば

$$
H = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\omega_p a_p^\dagger a_p\ ,\ \boldsymbol{P} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\boldsymbol{p}a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}
$$

ハミルトニアンと同じように、$a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}$ を状態 $\boldsymbol{p}$ の粒子に対する粒子数演算子とすれば、$\boldsymbol{p}_i \times$ (各状態の粒子数) になるので、全運動量演算子と言えます。また、ネーターの定理から求められる保存量としてのハミルトニアンは同じものなので、同じように全エネルギーです。

場として $\phi(\boldsymbol{x})$ を使いましたが、今度は $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ の場合を求めていきます。これによって、$\pi(\boldsymbol{x})$ を上での形で与えられるのが確かめられます。時間依存させるには時間発展をさせればよく、$\phi(\boldsymbol{x})$ は演算子なので (ハイゼンベルク方程式の形に従う)

$$\phi(x) = \phi(\boldsymbol{x}, t) = e^{iHt}\phi(\boldsymbol{x})e^{-iHt}$$

として時間に依存する形 (ハイゼンベルグ描像) に書き換えます。

$\phi(\boldsymbol{x}, t)$ をシュレーディンガー描像の場 $\phi(\boldsymbol{x})$ から求めます。$e^{\pm iHt}$ は H と交換することから

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{x}, t) &= [\phi(\boldsymbol{x}, t), H] \\
&= [e^{iHt}\phi(\boldsymbol{x})e^{-iHt}, H] \\
&= e^{iHt}[\phi(\boldsymbol{x}), H]e^{-iHt}
\end{aligned}$$

そうすると、交換関係部分は

$$\begin{aligned}
[\phi(\boldsymbol{x}), H] &= \Big[\phi(\boldsymbol{x}), \int d^3x'(\frac{1}{2}\pi^2(\boldsymbol{x}') + \frac{1}{2}(\nabla'\phi(\boldsymbol{x}'))^2 + \frac{1}{2}m^2\phi^2(\boldsymbol{x}')\Big] \\
&= \Big[\phi(\boldsymbol{x}), \int d^3x'\frac{1}{2}\pi^2(\boldsymbol{x}')\Big] + \Big[\phi(\boldsymbol{x}, t), \int d^3x'\frac{1}{2}(\nabla'\phi(\boldsymbol{x}'))^2\Big] + \Big[\phi(\boldsymbol{x}, t), \int d^3x'\frac{1}{2}m^2\phi^2(\boldsymbol{x}')\Big] \\
&= \int d^3x'\frac{1}{2}[\phi(\boldsymbol{x}), \pi^2(\boldsymbol{x}')] \\
&\quad + \int d^3x'\frac{1}{2}[\phi(\boldsymbol{x}), (\nabla'\phi(\boldsymbol{x}'))^2] + \int d^3x'\frac{1}{2}m^2[\phi(\boldsymbol{x}), \phi^2(\boldsymbol{x}')] \\
&= \int d^3x'\frac{1}{2}\pi(\boldsymbol{x}')[\phi(\boldsymbol{x}), \pi(\boldsymbol{x}')] + \int d^3x'\frac{1}{2}[\phi(\boldsymbol{x}), \pi(\boldsymbol{x}')]\pi(\boldsymbol{x}') \\
&\quad + \int d^3x'\frac{1}{2}\nabla'\phi(\boldsymbol{x}')[\phi(\boldsymbol{x}), \nabla'\phi(\boldsymbol{x}')] + \int d^3x'\frac{1}{2}[\phi(\boldsymbol{x}), \nabla'\phi(\boldsymbol{x}')]\nabla'\phi(\boldsymbol{x}') \\
&\quad + \int d^3x'\frac{1}{2}m^2\phi(\boldsymbol{x}')[\phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}')] + \int d^3x'\frac{1}{2}m^2[\phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}')]\phi(\boldsymbol{x}') \\
&= \int d^3x'\frac{1}{2}\pi(\boldsymbol{x}')[\phi(\boldsymbol{x}), \pi(\boldsymbol{x}')] + \int d^3x'\frac{1}{2}[\phi(\boldsymbol{x}), \pi(\boldsymbol{x}')]\pi(\boldsymbol{x}') \\
&\quad + \int d^3x'\frac{1}{2}\nabla'\phi(\boldsymbol{x}')\nabla'[\phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}')] + \int d^3x'\frac{1}{2}\nabla'([\phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}')])\nabla'\phi(\boldsymbol{x}') \\
&\quad + \int d^3x'\frac{1}{2}m^2\phi(\boldsymbol{x}')[\phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}')] + \int d^3x'\frac{1}{2}m^2[\phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}')]\phi(\boldsymbol{x}')
\end{aligned}$$

交換関係から第一項と第二項だけが残って

$$
\begin{aligned}
[\phi(\boldsymbol{x}), H] =& \int d^3x' \frac{1}{2}\pi(\boldsymbol{x}')[\phi(\boldsymbol{x}), \pi(\boldsymbol{x}')] + \int d^3x' \frac{1}{2}[\phi(\boldsymbol{x}), \pi(\boldsymbol{x}')]\pi(\boldsymbol{x}') \\
&= i\int d^3x' \frac{1}{2}\pi(\boldsymbol{x}')\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') + i\int d^3x' \frac{1}{2}\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'))\pi(\boldsymbol{x}') \\
&= i\pi(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

なので

$$
i\frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{x}, t) = e^{iHt}\pi(\boldsymbol{x})e^{-iHt} = i\pi(\boldsymbol{x}, t) \tag{4}
$$

$\pi(\boldsymbol{x})$ の場合でも同様で

$$
\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}\pi(\boldsymbol{x}, t) &= [\pi(\boldsymbol{x}, t), H] \\
&= e^{iHt}[\pi(\boldsymbol{x}), H]e^{-iHt}
\end{aligned}
$$

から

$$
\begin{aligned}
[\pi(\boldsymbol{x}), H] &= \Big[\pi(\boldsymbol{x}), \int d^3x' (\frac{1}{2}\pi^2(\boldsymbol{x}') + \frac{1}{2}(\nabla'\phi(\boldsymbol{x}'))^2 + \frac{1}{2}m^2\phi^2(\boldsymbol{x}'))\Big] \\
&= \Big[\pi(\boldsymbol{x}), \int d^3x' \frac{1}{2}(\nabla'\phi(\boldsymbol{x}'))^2\Big] + \Big[\pi(\boldsymbol{x}), \int d^3x' \frac{1}{2}m^2\phi^2(\boldsymbol{x}'))\Big] \\
&= \int d^3x' \frac{1}{2}\nabla'\phi(\boldsymbol{x}')\nabla'[\pi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}')] + \int d^3x' \frac{1}{2}\nabla'[\pi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}')]\nabla'\phi(\boldsymbol{x}', t) \\
&\quad + \int d^3x' \frac{1}{2}m^2\phi(\boldsymbol{x}')[\pi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}'))] + \int d^3x' \frac{1}{2}m^2[\pi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{x}'))\phi(\boldsymbol{x}') \\
&= -i\int d^3x' \frac{1}{2}\nabla'\phi(\boldsymbol{x}')\nabla'\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') - i\int d^3x' \frac{1}{2}\nabla'\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\nabla'\phi(\boldsymbol{x}') \\
&\quad -i\int d^3x' \frac{1}{2}m^2\phi(\boldsymbol{x}')\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') - i\int d^3x' \frac{1}{2}m^2\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\phi(\boldsymbol{x}') \\
&= -i\int d^3x' \nabla'(\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\nabla'\phi(\boldsymbol{x}', t)) + i\int d^3x' \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\nabla'^2\phi(\boldsymbol{x}', t) \\
&\quad -i\int d^3x' m^2\phi(\boldsymbol{x}')\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\
&= i\int d^3x' \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')(\nabla'^2 - m^2)\phi(\boldsymbol{x}') \\
&= i(\nabla^2 - m^2)\phi(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

下から 2 行目に行くときに、グリーンの定理を使い無限遠での表面項は 0 という条件を使っています。なので

$$i\frac{\partial}{\partial t}\pi(\boldsymbol{x},t) = ie^{iHt}(\nabla^2 - m^2)\phi(\boldsymbol{x})e^{-iHt} = i(\nabla^2 - m^2)\phi(\boldsymbol{x},t) \tag{5}$$

(4) と (5) からハイゼンベルグ描像での場の演算子 $\phi(x)$ が従う方程式は

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(\boldsymbol{x},t) &= \frac{\partial}{\partial t}\pi(\boldsymbol{x},t)\\ &= (\nabla^2 - m^2)\phi(\boldsymbol{x},t)\\ 0 &= (\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2)\phi(\boldsymbol{x},t)\end{aligned}$$

となり、クライン・ゴルドン方程式と同じ形になります。
　場の演算子のフーリエ変換を

$$\phi(\boldsymbol{x},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} a_{\boldsymbol{p}}(t)e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}$$

とします (定数は今は関係ないので無視します)。時間依存性があるので、(3a) と違い演算子 $a_{\boldsymbol{p}}$ は時間依存性を持ちます。これを (4) に入れれば

$$\frac{\partial^2 a_{\boldsymbol{p}}(t)}{\partial t^2} = -(\boldsymbol{p}^2 + m^2)a_{\boldsymbol{p}}(t)$$

2 階微分方程式の性質から定数は 2 個あるので、それに対応する演算子を $a^{(1)}_{\boldsymbol{p}}, a^{(2)}_{\boldsymbol{p}}$ とすれば $a_{\boldsymbol{p}}(t)$ は

$$a_{\boldsymbol{p}}(t) = a^{(1)}_{\boldsymbol{p}}e^{-i\omega_{\boldsymbol{p}}t} + a^{(2)}_{\boldsymbol{p}}e^{i\omega_{\boldsymbol{p}}t} \quad (\omega_{\boldsymbol{p}} = \sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2})$$

なので

$$\phi(\boldsymbol{x},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}(a^{(1)}_{\boldsymbol{p}}e^{-i\omega_{\boldsymbol{p}}t} + a^{(2)}_{\boldsymbol{p}}e^{i\omega_{\boldsymbol{p}}t})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}(a^{(1)}_{\boldsymbol{p}}e^{-i\omega_{\boldsymbol{p}}t}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + a^{(2)}_{-\boldsymbol{p}}e^{i\omega_{\boldsymbol{p}}t}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}})$$

後で表記をそろえるために第二項で $\boldsymbol{p}$ の符号を反転させています。これに $\phi(\boldsymbol{x},t)$ が実数という条件 (演算子なのでエルミート共役「†」)

$$\phi^\dagger(\boldsymbol{x},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} a^\dagger_{\boldsymbol{p}}(t)e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\big((a^{(1)}_{\boldsymbol{p}})^\dagger e^{i\omega_{\boldsymbol{p}}t}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + (a^{(2)}_{-\boldsymbol{p}})^\dagger e^{-i\omega_{\boldsymbol{p}}t}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}\big) = \phi(\boldsymbol{x},t)$$

を使うと

$$(a^{(1)}_{\boldsymbol{p}})^\dagger = a^{(2)}_{-\boldsymbol{p}}$$

という関係になっています。なので、$\phi(\boldsymbol{x},t)$ は

$$a^{(1)}_{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}a_{\boldsymbol{p}}$$

として

$$\phi(\boldsymbol{x},t)=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{-ipx}+a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{ipx}) \tag{6}$$

これが時間を含めた場の演算子になります。ここで exp 内は $px=\omega_p t-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}$ と表記しています。π は

$$\pi(\boldsymbol{x},t)=\frac{\partial\phi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{-i\omega_{\boldsymbol{p}}}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{-ipx}-a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{ipx}) \tag{7}$$

となっています。これは $t=0$ で (3b) になります。

最初から時間依存させて、4 次元のフーリエ変換による形を作り、それを演算子化することでも同じ結果になります。「クライン・ゴルドン場〜複素スカラー場〜」ではそうしています。

今はシュレーディンガー描像を時間発展させて求めましたが、最初からハイゼンベルグ描像として始めればもっと単純です。ハミルトニアンの場の演算子を適当な時間 t によって

$$H=\int d^3x(\frac{1}{2}\pi^2(\boldsymbol{x},t)+\frac{1}{2}(\nabla\phi(\boldsymbol{x},t))^2+\frac{1}{2}m^2\phi^2(\boldsymbol{x},t))$$

とし、同時刻交換関係

$$[\phi(\boldsymbol{x},t),\pi(\boldsymbol{y},t)]=i\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\ ,\ [\phi(\boldsymbol{x},t),\phi(\boldsymbol{y},t)]=[\pi(\boldsymbol{x},t),\pi(\boldsymbol{y},t)]=0$$

を使って、H と $\phi(\boldsymbol{x},t),\pi(\boldsymbol{x},t)$ との交換関係を計算すれば同じ結果が出てきます。これは

$$[\phi(\boldsymbol{x},t),H]=\Big[\phi(\boldsymbol{x},t),\int d^3x'(\frac{1}{2}\pi^2(\boldsymbol{x}',t)+\frac{1}{2}(\nabla'\phi(\boldsymbol{x}',t))^2+\frac{1}{2}m^2\phi^2(\boldsymbol{x}',t)\Big]$$

となるので、同じ計算をすることになるからです ($[\phi(\boldsymbol{x}),H]$ を $[\phi(\boldsymbol{x},t),H]$ で計算するだけなので結果が変わらない)。また、同時刻交換関係 $[\phi(\boldsymbol{x},t),\pi(\boldsymbol{y},t)]$ に (6),(7) を入れれば $a_{\boldsymbol{p}},a^\dagger_{\boldsymbol{p}}$ の交換関係は上でのものと同じなのが確かめられます。

別の導き方として演算子の時間発展の式

$$\phi(\boldsymbol{x},t)=e^{iHt}\phi(\boldsymbol{x})e^{-iHt}$$

から、生成、消滅演算子も

$$e^{iHt}a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{-iHt}\ ,\ e^{iHt}a_{\boldsymbol{p}}e^{-iHt}$$

のように書けることから、生成演算子 $a^\dagger(t)$ は $a^\dagger_{\boldsymbol{p}}$ と H の交換関係を使うことで

$$
\begin{aligned}
a^\dagger(t) = e^{iHt}a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{-iHt} &= (1+iHt-\cdots)a^\dagger_{\boldsymbol{p}}(1-iHt+\cdots) \\
&= a^\dagger_{\boldsymbol{p}} + iHa^\dagger_{\boldsymbol{p}}t - ia^\dagger_{\boldsymbol{p}}Ht + \cdots \\
&= a^\dagger_{\boldsymbol{p}} + i[H, a^\dagger_{\boldsymbol{p}}]t\cdots \\
&= a^\dagger_{\boldsymbol{p}}(1+i\omega_{\boldsymbol{p}}t+\cdots) \\
&= a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{i\omega_{\boldsymbol{p}}t}
\end{aligned}
$$

同様に消滅演算子では

$$
a_{\boldsymbol{p}}(t) = e^{iHt}a_{\boldsymbol{p}}e^{-iHt} = a_{\boldsymbol{p}}e^{-i\omega_p t}
$$

となります。また、ハウスドルフの公式

$$
e^{-A}Be^{A} = B - [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] - \frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \cdots
$$

を使えばそのまま出てきます。というわけで、(3a),(3b) を時間発展させることで

$$
\phi(\boldsymbol{x},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{-ipx} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{ipx})
$$

がすぐに出てきます。

ついでに、$a, a^\dagger$ を $\phi(x)$ でどう書けるかを求めます。$\phi(x), \pi(x)$ に対して $t=0$ として

$$
\begin{aligned}
\phi(\boldsymbol{x}) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}) \\
\pi(\boldsymbol{x}) &= -i\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} - a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}})
\end{aligned}
$$

$\phi(\boldsymbol{x})$ の積分を消すために

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\phi(\boldsymbol{x}) &= \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}) \\
&= \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}) \\
&= \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}} + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{-i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}) \\
&= \int d^3p\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k}) + a^\dagger_{\boldsymbol{p}}\delta^3(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k})) \\
&= \frac{1}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}(a_{\boldsymbol{k}} + a^\dagger_{-\boldsymbol{k}})
\end{aligned}
$$

という計算を行います。$\pi(\boldsymbol{x})$ でも同様に

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}i\pi(\boldsymbol{x}) =&\ \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\int d^3x\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}-a^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{-i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}})\\
=&\ \int d^3p\frac{\omega_{\boldsymbol{p}}}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{p}}}}(a_{\boldsymbol{p}}\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})-a^\dagger_{\boldsymbol{p}}\delta^3(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}))\\
=&\ \frac{1}{2}(a_{\boldsymbol{k}}-a^\dagger_{-\boldsymbol{k}})
\end{aligned}
$$

これらから

$$
a_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}(\omega_{\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{x})+i\pi(\boldsymbol{x}))
$$

また

$$
\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\phi(\boldsymbol{x})\ ,\ \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}i\pi(\boldsymbol{x})
$$

とすることで、$a^\dagger_k$ は

$$
a^\dagger_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}(\omega_{\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{x})-i\pi(\boldsymbol{x}))
$$

と求まります (今は実数なので単純にエルミート共役 (複素共役) を取ったもの)。ϕ と π は

$$
\pi(x)=\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)
$$

なので

$$
\begin{aligned}
e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}(\omega_{\boldsymbol{k}}\phi(\boldsymbol{x})+i\pi(\boldsymbol{x})) =&\ -i\big(\phi(x)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\frac{\partial}{\partial t}e^{i\omega_{\boldsymbol{k}}t}-e^{i\omega_{\boldsymbol{k}}t}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)\big|_{t=0}\\
=&\ -i\big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{ikx}-e^{ikx}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)\big|_{t=0}
\end{aligned}
$$

と書き換えることで

$$
a_{\boldsymbol{k}}=-\frac{i}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ \big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{ikx}-e^{ikx}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)\big|_{t=0} \tag{8}
$$

$t=0$ としていますが、$a_{\boldsymbol{k}}$ は時間独立なので右辺も時間独立と予想できて、実際にそうなっています。右辺を t で微分すると

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\int d^3x(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{ikx}-e^{ikx}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x))\\
&=\int d^3x(\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{ikx}+\phi(x)\frac{\partial^2}{\partial t^2}e^{ikx}-\frac{\partial e^{ikx}}{\partial t}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)-e^{ikx}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x))\\
&=\int d^3x\big(i\omega_{\boldsymbol{k}}e^{ikx}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)-\omega_{\boldsymbol{k}}^2e^{ikx}\phi(x)-i\omega_{\boldsymbol{k}}e^{ikx}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)-e^{ikx}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x)\big)\\
&=\int d^3x\ e^{ikx}(\frac{\partial^2}{\partial t^2}+\omega_{\boldsymbol{k}}^2)\phi(x)\\
&=\int d^3x\ e^{ikx}(\frac{\partial^2}{\partial t^2}+|\boldsymbol{k}|^2+m^2)\phi(x)\\
&=\int d^3x\ e^{i\omega_{\boldsymbol{k}}t}\big(\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x)-\phi(x)\nabla^2+m^2\phi(x)\big)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}
\end{aligned}
$$

これの ∇^2 の項は表面積分を落としていくと

$$
\begin{aligned}
\int d^3x\ \phi(x)\nabla^2e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}&=\int d^3x\ \big(\nabla(\phi(x)\nabla e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}})-\nabla\phi(x)\nabla e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\big)\\
&=-\int d^3x\ \big(\nabla(\nabla\phi(x)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}})-e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\nabla^2\phi(x)\big)\\
&=\int d^3x\nabla^2\phi(x)
\end{aligned}
$$

となるので、クライン・ゴルドン方程式から

$$
\begin{aligned}
\int d^3xe^{i\omega_{\boldsymbol{k}}t}(\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x)-\phi(x)\nabla^2+m^2\phi(x))e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}&=\int d^3xe^{i\omega_{\boldsymbol{k}}t}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}(\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2+m^2)\phi(x)\\
&=0
\end{aligned}
$$

このように (8) の右辺の時間微分は 0 になるので時間独立となっていて、$t=0$ でなく任意の時間で成立しています。

よって、$a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ でも同様にして

$$
\begin{aligned}
a_{\boldsymbol{k}}&=-\frac{i}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ \big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{ikx}-e^{ikx}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)\\
a_{\boldsymbol{k}}^\dagger&=\frac{i}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\int d^3x\ \big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ikx}-e^{-ikx}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)
\end{aligned}
$$

また、「規格化について」で示すように規格化を

$$
\phi(x)=\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2\omega_{\boldsymbol{p}}}(a_{\boldsymbol{p}}e^{ipx}+a_{\boldsymbol{p}}^\dagger e^{-ipx})
$$

とすれば、$1/\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}$ は消えます。

・補足

数理物理に興味がない限りそうそう目にすることのない話をしておきます。シュレーディンガー描像のとき、交換関係を

$$[\phi(\boldsymbol{x}),\pi(\boldsymbol{y})]=i\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\ ,\ [\phi(\boldsymbol{x}),\phi(\boldsymbol{y})]=[\pi(\boldsymbol{x}),\pi(\boldsymbol{y})]=0 \tag{9}$$

として与えて、これに対応するように生成、消滅演算子を導入しましたが、この交換関係から他の表現を作ることが出来ます。このような交換関係を見たす別の表現がないのかとか、あるならそれらの関係はどうなっているのかといったことが、場の量子論では数学的な問題となります (量子力学で問題にならないのは量子力学の「正準交換関係の表現」参照)。

量子力学での位置演算子と運動量演算子の交換関係 $[q,p]=i$ からの演算子化

$$\hat{q}=q\ ,\ p=-i\frac{\partial}{\partial q}$$

をそのまま場に対して適用します。つまり、微分を汎関数微分にして

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{x})=\phi(\boldsymbol{x})\ ,\ \hat{\pi}(\boldsymbol{x})=-i\frac{\delta}{\delta\phi(\boldsymbol{x})} \tag{10}$$

とします (演算子であることをはっきりさせるためにハットを付けています)。実際にこれで交換関係を再現できることは汎関数 $\phi[f],\pi[f]$ を

$$\phi[f]=\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\ ,\ \pi[f]=\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\pi(\boldsymbol{x})$$

としてみればいいです ($f(\boldsymbol{x})$ は無限大で消えるような関数)。この 2 つの交換関係は (9) を使うと

$$\begin{aligned}
[\phi[f],\pi[g]]=&\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\int d^3y\ g(\boldsymbol{y})\pi(\boldsymbol{y})-\int d^3y\ g(\boldsymbol{y})\pi(\boldsymbol{y})\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\\
=&\int d^3xd^3y\ f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{y})\phi(\boldsymbol{x})\pi(\boldsymbol{y})-\int d^3xd^3y\ f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{y})\pi(\boldsymbol{y})\phi(\boldsymbol{x})\\
=&\int d^3xd^3yf(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{y})[\phi(\boldsymbol{x}),\pi(\boldsymbol{y})]\\
=&\,i\int d^3xd^3yf(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{y})\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\\
=&\,i\int d^3xf(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

このとき、$[\phi[f],\pi[g]]$ を (10) を使って計算してみると

$$
\begin{aligned}
[\phi[f],\pi[g]] = & -i\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\int d^3y\ g(\boldsymbol{y})\frac{\delta}{\delta\phi(\boldsymbol{y})} + i\int d^3y\ g(\boldsymbol{y})\frac{\delta}{\delta\phi(\boldsymbol{y})}\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x}) \\
& + i\int d^3y\ g(\boldsymbol{y})\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\frac{\delta}{\delta\phi(\boldsymbol{y})} \\
= & -i\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\int d^3y\ g(\boldsymbol{y})\frac{\delta}{\delta\phi(\boldsymbol{y})} + i\int d^3y\ g(\boldsymbol{y})f(\boldsymbol{y}) \\
& + i\int d^3y\ g(\boldsymbol{y})\int d^3x\ f(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x})\frac{\delta}{\delta\phi(\boldsymbol{y})} \\
= & \, i\int d^3x\ g(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

$[\phi[f],\pi[g]]F[\phi]$ として汎関数微分を動かしています。このように同じ結果になるので、交換関係 (9) を満たす表現 (10) を得られたことになります。これをシュレーディンガー表現と呼びます (量子力学で使っている交換関係 $[q,p]=i$ による表現がシュレーディンガー表現で、それを場の量子論に持ってきた)。シュレーディンガー描像を英語で Schrödinger representation と書くことがあるので名称で混乱するかもしれませんが、今見たようにシュレーディンガー表現は演算子と状態の時間依存性に対応する言葉とは違うものです。後は (10) をハミルトニアンに適用して構造を見ていくことになります。