

クライン・ゴールドン場～複素スカラー場～

ここでは複素数のスカラー場を使います。前半にクライン・ゴールドン方程式の解釈の問題に触れて、後半で場の量子化を行っています。

複素スカラー場にすることで粒子に対して自由度が新しく1つ出てくることになり、クライン・ゴールドン方程式の負の確率解釈の問題がはっきりし、場の量子化でその解釈を与えます。

最後に正規積の定義を与えます。

最初にクライン・ゴールドン方程式での負エネルギー解について見ていきます。すでに知っている人は後半の場の量子化を行っている部分に飛んでいいです。

クライン・ゴールドン方程式は

$$(\square + m^2)\phi(x) = 0$$

今は特殊相対論の中で考えているので、ローレンツ変換の前後の座標系から見た物理法則 (運動方程式の形) は同じことが要求されています。つまり、波動関数とすれば、変換後の座標系から見た $\phi'(x')$ と変換前の座標系から見た $\phi(x)$ は、同じ位置 (変換後から見れば x'^μ 、前では x^μ) での情報を与えます。なので、特殊相対論の要求を満たしているなら、ローレンツ変換に対して $\phi'(x') = \phi(x)$ としたとき、クライン・ゴールドン方程式の形は変わらないはずで

実際に確かめます。ローレンツ変換は

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu, \quad x'_\mu = \Lambda_\mu^\nu x_\nu \quad (\Lambda^\mu_\nu \Lambda_\mu^\rho = \delta_\nu^\rho)$$

と与え (相対論的量子力学の「ローレンツ変換」参照)、これによるスカラー場 $\phi(x)$ の変換は

$$\phi'(x') = S(\Lambda)\phi(x)$$

とします。微分演算子の変換は

$$\begin{aligned} \partial_\mu &= \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Lambda^\nu_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu \\ \partial^\mu &= \frac{\partial x'_\nu}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x'_\nu} = \Lambda_\nu^\mu \partial'^\nu \end{aligned}$$

なので

$$g_{\alpha\beta} = g_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta$$

から

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = g_{\mu\nu} \partial^\mu \partial^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta \partial'^\alpha \partial'^\beta = g_{\alpha\beta} \partial'^\alpha \partial'^\beta = \square'$$

となるのが分かります。そうすると、クライン・ゴールドン方程式は

$$0 = (\square' + m^2)\phi'(x') = (\square + m^2)S(\Lambda)\phi(x)$$

このため、 $S = \pm 1$ です。よって、クライン・ゴールドン方程式の形が変換の前後で変わらないためには、 $S = +1$ によって $\phi'(x') = \phi(x)$ であればよく、これは最初に言った要求と一致します。 $\phi'(x') = -\phi(x)$ となるのは擬スカ

ラーのときです。また、平行移動でもすぐに分かるように $\square = \square'$ なので、同様になります。まとめて言えば、ポアンカレ変換に対して $\phi'(x') = \phi(x)$ となります。

クライン・ゴールドン方程式の解として平面波がありますが、平面波として

$$f_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \exp[i(\pm E_{\mathbf{p}}t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})] \quad (E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2})$$

という、 $E_{\mathbf{p}}t$ の符号が異なるものが使えます。このため、クライン・ゴールドン方程式は正負のエネルギーの解を持つことが言えます。これは、量子力学ではハミルトニアン演算子 $i\partial_0$ がエネルギー演算子と仮定されているために

$$i\partial_0 e^{i(\pm E_{\mathbf{p}}t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} = \mp E_{\mathbf{p}} e^{i(\pm E_{\mathbf{p}}t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}$$

から、エネルギー固有値になるからです。表記上の注意ですが、 $f_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$ の $\pm$ は正負のエネルギーという意味ではなく、 $f_{\mathbf{p}}^{(+)}$ では負エネルギー、 $f_{\mathbf{p}}^{(-)}$ では正エネルギーです。

平面波の重ね合わせによるものも解で、今は2つの平面波があるので、

$$\phi(x) = \phi^{(+)}(x) + \phi^{(-)}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (\phi^{(+)}(\mathbf{p})e^{ipx} + \phi^{(-)}(\mathbf{p})e^{-ipx}) \quad (p_0 = E_{\mathbf{p}}) \quad (1)$$

としたものは、より一般的な解です。導出は下の補足で行っています。 $1/2E_{\mathbf{p}}$ は「規格化について」も見てください。 $\phi^{(\pm)}(x)$ はそれぞれがクライン・ゴールドン方程式の解で、 $\phi^{(+)}(x)$ が負エネルギー、 $\phi^{(-)}(x)$ が正エネルギーの平面波による項です。ちなみに、 $\phi^{(\pm)}$ を positive-frequency, negative-frequency と言ったりしますが、 $\phi^{(\pm)}$ のどちらを positive, negative と呼ぶのかは、はっきり決まっていないようです。

負エネルギーを持った粒子は現実には存在しないので、クライン・ゴールドン方程式の解釈に問題が起こります。さらに問題を見ていくために、保存カレントを求めます。クライン・ゴールドン方程式から求められますが、ネーターの定理を使うことにします。

複素共役に対して $\phi \neq \phi^*$ となっているときのクライン・ゴールドン方程式のラグランジアン密度は

$$\mathcal{L} = \frac{\partial \phi^*}{\partial x_\mu} \frac{\partial \phi}{\partial x^\mu} - m^2 \phi^* \phi = \partial^\mu \phi^* \partial_\mu \phi - m^2 \phi^* \phi$$

で与えられます。オイラー・ラグランジュ方程式に入れれば、 ϕ, ϕ^* に対するクライン・ゴールドン方程式が求められるのはすぐに分かります (ϕ, ϕ^* のクライン・ゴールドン方程式は複素共役になっているだけ)。ちなみに、このラグランジアンは、 ϕ_1, ϕ_2 を実数とし ϕ を

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2)$$

として、実スカラー場 ϕ_1, ϕ_2 のラグランジアン密度を足すことで

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \partial^\mu \phi_1 \partial_\mu \phi_1 - \frac{1}{2} m^2 \phi_1^2 + \frac{1}{2} \partial^\mu \phi_2 \partial_\mu \phi_2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_2^2 \\ &= \frac{1}{2} \partial^\mu \phi_1 \partial_\mu \phi_1 + \frac{1}{2} \partial^\mu \phi_2 \partial_\mu \phi_2 - \frac{1}{2} m^2 (\phi_1^2 + \phi_2^2) \\ &= \frac{1}{2} (\partial^\mu \phi_1 - i \partial^\mu \phi_2) (\partial_\mu \phi_1 + i \partial_\mu \phi_2) - \frac{1}{2} m^2 (\phi_1 - i \phi_2) (\phi_1 + i \phi_2) \\ &= \partial^\mu \phi^* \partial_\mu \phi - m^2 \phi^* \phi \end{aligned}$$

と出てきます。これは複素数は2つの実数の自由度をもっているからです。

変換として古典場 ϕ の位相変換を行います。位相変換は α を任意定数として

$$\phi' = e^{i\alpha}\phi, \quad \phi'^* = e^{-i\alpha}\phi^*$$

と実行されます。この呼び方は複素数 ϕ の極形式 $\phi = e^{i\theta}|\phi|$ での偏角 θ を位相と呼び、この θ を変える変換だからです。位相変換は明らかにラグランジアン密度を変化させません。そうすると、ネーターの定理によって、対応するネーターカレント $J^\mu(x)$ があります。この変換は場に対してのみなので

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi(x))} \delta\phi(x) \right) = \partial_\mu J^\mu(x) = 0$$

を使えばいいです。ただし、今の場合では ϕ^* もいるので

$$\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi(x))} \delta\phi(x) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi^*(x))} \delta\phi^*(x) \right) = 0$$

場の変化 $\delta\phi(x)$ は上の位相変換が無限小変換 ($\alpha \ll 1$) とすれば、 α の2次以上を無視して

$$e^{i\alpha}\phi \simeq \phi + i\alpha\phi, \quad e^{-i\alpha}\phi^* \simeq \phi^* - i\alpha\phi^*$$

これらから、 $\delta\phi(x) = i\alpha\phi(x)$ となります。ラグランジアンを微分すれば

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi(x))} \delta\phi(x) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi^*(x))} \delta\phi^*(x) = \frac{\partial \phi^*(x)}{\partial x_\mu} i\alpha\phi(x) - \frac{\partial \phi(x)}{\partial x_\mu} i\alpha\phi^*(x)$$

よって、ネーターカレント $j^\mu(x)$ は

$$j^\mu(x) = i\alpha(\phi^*(x)\partial^\mu\phi(x) - \phi(x)\partial^\mu\phi^*(x))$$

と与えられます。 j^μ の符号は α に依存するようにします。また、符号を決めてしまえば、 j^μ の定義で α を外に出して、消すことも出来ます。連続の方程式 $\partial_\mu j^\mu = 0$ を満たしていることは、クライン・ゴールドン方程式を使うことで

$$\begin{aligned} \partial_\mu j^\mu &= i\alpha\partial_\mu(\phi^*(x)\partial^\mu\phi(x) - \phi(x)\partial^\mu\phi^*(x)) \\ &= i\alpha(\partial_0(\phi^*\partial^0\phi - \phi\partial^0\phi^*) + \partial_i(\phi^*\partial^i\phi - \phi\partial^i\phi^*)) \\ &= i\alpha(\phi^*(\partial^0)^2\phi - \phi(\partial^0)^2\phi^* + \phi^*\partial_i\partial^i\phi - \phi\partial_i\partial^i\phi^*) \\ &= i\alpha(\phi^*\square\phi - \phi\square\phi^*) \quad (\square = \partial_0\partial^0 + \partial_i\partial^i = (\partial^0)^2 + \partial_i\partial^i) \\ &= -i\alpha m^2(\phi^*\phi - \phi\phi^*) \\ &= 0 \end{aligned}$$

と確かめられます。 j^μ の0成分を三次元積分すれば保存量 Q として

$$Q = \int d^3x j^0(x) = i\alpha \int d^3x (\phi^*(x)\partial^0\phi(x) - \phi(x)\partial^0\phi^*(x))$$

というのが導かれます。

ここで量子力学の解釈を持ちこみます。 $\alpha > 0$ として α を無視します。量子力学では連続の方程式に従うカレントの j^0 は確率密度と解釈されます (量子力学では波動関数 ψ による $|\psi|^2$)。このため、 $j^0 > 0$ となる必要があります。しかし、クライン・ゴールドン方程式の負エネルギーを持つ平面波の解 (N は規格化定数)

$$f_{\mathbf{p}}^{(+)} = N e^{i(E_{\mathbf{p}}t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}$$

を j^0 に入れてみると

$$\begin{aligned} j^0(x) &= i(f_{\mathbf{p}}^{(+)*} \partial^0 f_{\mathbf{p}}^{(+)} - f_{\mathbf{p}}^{(+)} \partial^0 f_{\mathbf{p}}^{(+)*}) \\ &= iN^2(iE_{\mathbf{p}} + iE_{\mathbf{p}}) \\ &= -2E_{\mathbf{p}}N^2 < 0 \end{aligned}$$

となり、 $j^0 < 0$ から確率解釈ができなくなっています。 $\alpha < 0$ (もしくは j^μ の符号を反転) としても平面波の解を $e^{-iE_{\mathbf{p}}t - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$ とすれば、同じように $j^0 < 0$ となります (今は $\alpha > 0$ で正エネルギー解のみでは確率密度の解釈が可能になるように符号を選んでいる)。

微分方程式の性質から言えば、クライン・ゴールドン方程式は2階微分方程式なので、初期条件として $\phi, \partial_0 \phi$ を任意に設定できるために、それらを含む j^0 にその任意性によって負になる解も選べてしまうということです。シュレーディンガー方程式での確率密度は $|\psi|^2$ なので、このようなことは起きません。

$\phi^{(+)}(x), \phi^{(-)}(x)$ を使った場合も見ておきます。そのために、内積 $\langle, \rangle$ を定義します。内積の定義はたまに必要になるだけなので、飛ばしてもいいです。

量子力学でのノルムは

$$\langle \psi, \psi \rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) = \int d^3x |\psi(\mathbf{x})|^2$$

で与えられていて、 $|\psi|^2$ は確率密度です (正確にはノルムの2乗ですがノルムと言っていきます)。なので、確率密度 j^0 を利用し、 ϕ, ϕ_1, ϕ_2 をクライン・ゴールドン方程式の解として、内積とノルムを

$$\begin{aligned} \langle \phi_1, \phi_2 \rangle &= i \int d^3x (\phi_1^*(x) \partial_0 \phi_2(x) - \phi_2(x) \partial_0 \phi_1^*(x)) \\ \langle \phi, \phi \rangle &= i \int d^3x (\phi^*(x) \partial_0 \phi(x) - \phi(x) \partial_0 \phi^*(x)) \end{aligned}$$

と定義します。ただし、すでに $f_{\mathbf{p}}^{(+)}$ で見たように、この内積は必ず正の値とはなりません。

この内積の括弧内をクライン・ゴールドン方程式を使って変形すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x^0} (\phi_1^* \partial_0 \phi_2 - \phi_2 \partial_0 \phi_1^*) &= \partial_0 \phi_1^* \partial_0 \phi_2 + \phi_1^* \partial_0^2 \phi_2 - (\partial_0 \phi_2 \partial_0 \phi_1^* + \phi_2 \partial_0^2 \phi_1^*) \\ &= \phi_1^* \partial_0^2 \phi_2 - \phi_2 \partial_0^2 \phi_1^* \\ &= \phi_1^* (\nabla^2 - m^2) \phi_2 - \phi_2 (\nabla^2 - m^2) \phi_1^* \\ &= \phi_1^* \nabla^2 \phi_2 - \phi_2 \nabla^2 \phi_1^* \end{aligned}$$

これを3次元積分し、表面積分は消えるとすれば

$$\begin{aligned}
& \int d^3x \phi_1^* \nabla^2 \phi_2 - \int d^3x \phi_2 \nabla^2 \phi_1^* \\
&= \int d^3x \nabla(\phi_1^* \nabla \phi_2) - \int d^3x \nabla \phi_1^* \nabla \phi_2 - \left(\int d^3x \nabla(\phi_2 \nabla \phi_1^*) - \int d^3x \nabla \phi_2 \nabla \phi_1^* \right) \\
&= - \int d^3x \nabla \phi_1^* \nabla \phi_2 + \int d^3x \nabla \phi_2 \nabla \phi_1^* \\
&= 0
\end{aligned}$$

よって、 $\langle \phi_1, \phi_2 \rangle$ を x^0 で微分すれば 0 になるので、内積は時間独立です。

典型的な計算例になるので $f_{\mathbf{p}}^{(-)}, f_{\mathbf{q}}^{(-)}$ の内積を求めてみると、デルタ関数の性質から

$$\begin{aligned}
\langle f_{\mathbf{p}}^{(-)}, f_{\mathbf{q}}^{(-)} \rangle &= i \int d^3x (f_{\mathbf{p}}^{(-)*} \partial^0 f_{\mathbf{q}}^{(-)} - f_{\mathbf{q}}^{(-)} \partial^0 f_{\mathbf{p}}^{(-)*}) \\
&= i \int d^3x (e^{-i(-E_{\mathbf{p}}x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} \partial^0 e^{i(-E_{\mathbf{q}}x_0 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})} - e^{i(-E_{\mathbf{q}}x_0 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})} \partial^0 e^{-i(-E_{\mathbf{p}}x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}) \\
&= i \int d^3x (-iE_{\mathbf{q}} e^{-i(-E_{\mathbf{p}}x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} e^{i(-E_{\mathbf{q}}x_0 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})} - iE_{\mathbf{p}} e^{i(-E_{\mathbf{q}}x_0 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})} e^{-i(-E_{\mathbf{p}}x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}) \\
&= \int d^3x (E_{\mathbf{q}} e^{i(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}})x_0} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}} + E_{\mathbf{p}} e^{i(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}})x_0} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}}) \\
&= (E_{\mathbf{q}} + E_{\mathbf{p}}) e^{i(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}})x_0} (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{q})
\end{aligned}$$

デルタ関数は $\mathbf{p} = \mathbf{q}$ のときに値を持つために

$$\langle f_{\mathbf{p}}^{(-)}, f_{\mathbf{q}}^{(-)} \rangle = 2E_{\mathbf{p}} (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{q})$$

同様に、 $f_{\mathbf{p}}^{(+)}$ では $E_{\mathbf{p}}$ の符号が反転するために

$$\langle f_{\mathbf{p}}^{(+)}, f_{\mathbf{q}}^{(+)} \rangle = -2E_{\mathbf{p}} (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{q})$$

となり、符号が反転します。

$\phi_1^{(-)}$ と $\phi_2^{(-)}$ の内積

$$\langle \phi_1^{(-)}, \phi_2^{(-)} \rangle = i \int d^3x (\phi_1^{(-)*} \partial_0 \phi_2^{(-)} - \phi_2^{(-)} \partial_0 \phi_1^{(-)*})$$

も同様に計算すると、第一項は

$$\begin{aligned}
\int d^3x \phi_1^{(-)*} \partial_0 \phi_2^{(-)} &= \int d^3x \int \frac{d^3p d^3q}{(2\pi)^6} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \frac{1}{2E_{\mathbf{q}}} (-iE_{\mathbf{q}}) \phi_1^{(-)*}(\mathbf{p}) \phi_2^{(-)}(\mathbf{q}) e^{ipx} e^{-iqx} \\
&= -\frac{i}{2} \int d^3x \int \frac{d^3p d^3q}{(2\pi)^6} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \phi_1^{(-)*}(\mathbf{p}) \phi_2^{(-)}(\mathbf{q}) e^{-i(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}})x_0} e^{-i(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}} \\
&= -\frac{i}{2} \int \frac{d^3p d^3q}{(2\pi)^6} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \phi_1^{(-)*}(\mathbf{p}) \phi_2^{(-)}(\mathbf{q}) e^{-i(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}})x_0} (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \\
&= -\frac{i}{2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \phi_1^{(-)*}(\mathbf{p}) \phi_2^{(-)}(\mathbf{p})
\end{aligned}$$

第二項は $\phi_1^{(-)*}$ に微分が作用するようになるだけなので

$$\begin{aligned} \langle \phi_1^{(-)}, \phi_2^{(-)} \rangle &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} \phi_1^{(-)*}(\mathbf{p}) \phi_2^{(-)}(\mathbf{p}) + \frac{1}{2} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} \phi_1^{(-)*}(\mathbf{p}) \phi_2^{(-)}(\mathbf{p}) \\ &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} \phi_1^{(-)*}(\mathbf{p}) \phi_2^{(-)}(\mathbf{p}) \end{aligned}$$

よって、 $\phi^{(-)}$ のノルムは $|\phi^{(-)}(\mathbf{p})|^2$ の積分になるので、量子力学と同じように確率密度と解釈できます (解として $\phi^{(-)}(x)$ だけを使うなら内積は正の値)。

一方で、 $\phi^{(+)}$ のノルムは明らかにこれらの符号が反転したものになり ($e^{iE_p t}$ から $+iE_p$ が出てくるから)、問題を起こします。そして、このため ϕ のノルムは

$$\langle \phi, \phi \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} (|\phi^{(-)}(\mathbf{p})|^2 - |\phi^{(+)}(\mathbf{p})|^2)$$

となり、もし第二項の方が大きければ負なので、 ϕ を波動関数としたとき確率解釈ができません。しかし、特徴的なのは複素共役を取った $\phi^{(+)*}(x)$ では

$$\langle \phi^{(+)*}(x), \phi^{(+)*}(x) \rangle = i \int d^3 x (\phi^{(+)} \partial_0 \phi^{(+)*} - \phi^{(+)*} \partial_0 \phi^{(+)})$$

において、

$$\int d^3 x \phi^{(+)} \partial_0 \phi^{(+)*} = \int \frac{d^3 p d^3 q}{(2\pi)^6} \frac{1}{2E_p} \frac{-iE_q}{2E_q} \phi^{(+)*}(\mathbf{p}) \phi^{(+)}(\mathbf{q}) e^{i(E_p x_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})} e^{-i(E_q x_0 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})}$$

なので、 $\phi^{(-)}(x)$ と同じように

$$\langle \phi^{(+)*}(x), \phi^{(+)*}(x) \rangle = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} |\phi^{(+)}(\mathbf{p})|^2$$

となり、確率密度として使えることです。これと複素共役を取った ϕ^* もクライン・ゴールドン方程式に従うことが負エネルギー解の解釈の手掛かりです。

また、ここでの話の範囲では負エネルギー解 $\phi^{(+)}$ を採用する理由が分からないので、正エネルギー解 $\phi^{(-)}$ だけを見ることにすれば、問題が起きていないように思えます。しかし、負エネルギー解は相互作用があるときに無視できなくなるので、捨てられません。

というわけで、場の量子化によって確率密度の解釈に変更を与えます。そのために、正準共役な場 π とハミルトニアンを出します。 π はラグランジアンから

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \partial_0 \phi^* = \dot{\phi}^*, \quad \pi^* = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^*} = \dot{\phi}$$

ハミルトニアンは、 $\pi \partial_0 \phi$ の複素共役の項も含めて

$$\begin{aligned} H &= \int d^3 x (\pi \partial_0 \phi + \pi^* \partial_0 \phi^* - \mathcal{L}) \\ &= \int d^3 x (\pi \partial_0 \phi + \pi^* \partial_0 \phi^* - \partial^\mu \phi^* \partial_\mu \phi + m^2 \phi^* \phi) \\ &= \int d^3 x (\pi \pi^* + \pi^* \pi - \pi \pi^* + \nabla \phi^* \cdot \nabla \phi + m^2 \phi^* \phi) \\ &= \int d^3 x (\pi^* \pi + \nabla \phi^* \cdot \nabla \phi + m^2 \phi^* \phi) \end{aligned}$$

となります。

場の量子化を行います。(1) と同じように、場 $\phi(x)$ を $p_0 = E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ として

$$\phi(x) = \phi^{(-)}(x) + \phi^{(+)}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} (a_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + b_{\mathbf{p}}^{\dagger} e^{ipx}) \quad (2a)$$

$$\phi^{\dagger}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} (a_{\mathbf{p}}^{\dagger} e^{ipx} + b_{\mathbf{p}} e^{-ipx}) \quad (2b)$$

これはすでに古典場でなく、演算子化させています。 $\phi(x) \neq \phi^{\dagger}(x)$ なので、実数のときと違い、 $a_{\mathbf{p}}$ と $a_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ のみで表すことができず、 $a_{\mathbf{p}}$ と $b_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ が独立な演算子となります。

場の演算子の同時刻交換関係を

$$[\phi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}', t)] = [\phi^{\dagger}(\mathbf{x}, t), \pi^{\dagger}(\mathbf{x}', t)] = i\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

と与えたとき (他は 0)、これを満たす $a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}}^{\dagger}, b_{\mathbf{p}}, b_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ の交換関係が実数と同じように

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

$$[a_{\mathbf{p}}, b_{\mathbf{p}'}] = [a_{\mathbf{p}}^{\dagger}, b_{\mathbf{p}'}^{\dagger}] = 0$$

となるのかを確かめます。表記を簡単にするために ipx と $ip'x'$ での x_0, x'_0 はどちらも t とすることにして、同時刻交換関係を計算すれば

$$\begin{aligned}
& [\phi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}', t)] \\
&= [\phi(\mathbf{x}, t), \phi^\dagger(\mathbf{x}', t)] \\
&= \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \frac{1}{2E_p 2E_{p'}} [(a_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + b_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx})(ip_0 a_{\mathbf{p}'}^\dagger e^{ip'x'} - ip_0 b_{\mathbf{p}'} e^{-ip'x'}) \\
&\quad - (ip_0 a_{\mathbf{p}'}^\dagger e^{ip'x'} - ip_0 b_{\mathbf{p}'} e^{-ip'x'})(a_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + b_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx})] \\
&= \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \frac{ip_0}{2E_p 2E_{p'}} \\
&\quad \times [a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'}^\dagger e^{-i(px-p'x')} - a_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}'} e^{-i(px+p'x')} + b_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}'}^\dagger e^{i(px+p'x')} - b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}'} e^{i(px-p'x')} \\
&\quad - (a_{\mathbf{p}'}^\dagger a_{\mathbf{p}} e^{-i(px-p'x')} + a_{\mathbf{p}'}^\dagger b_{\mathbf{p}}^\dagger e^{i(px+p'x')} - b_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}} e^{-i(px+p'x')} - b_{\mathbf{p}'} b_{\mathbf{p}}^\dagger e^{i(px-p'x')})] \\
&= \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \frac{iE_{\mathbf{p}'}}{2E_p 2E_{p'}} ([a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}^\dagger] e^{-i(px-p'x')} + [a_{\mathbf{p}}, b_{\mathbf{p}'}] e^{-i(px+p'x')} \\
&\quad + [b_{\mathbf{p}}^\dagger, a_{\mathbf{p}'}^\dagger] e^{i(px+p'x')} + [b_{\mathbf{p}'}^\dagger, b_{\mathbf{p}}] e^{i(px-p'x')}) \\
&= \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \frac{i}{4E_p} ([a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}^\dagger] e^{-i(px-p'x')} + [b_{\mathbf{p}'}^\dagger, b_{\mathbf{p}}] e^{i(px-p'x')}) \\
&= \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \frac{i}{4E_p} (2E_{\mathbf{p}} (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') e^{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}')} + 2E_{\mathbf{p}'} (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}')}) \\
&= i \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \\
&= i \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')
\end{aligned}$$

となるので、この交換関係でいいことになります。最後から三行目で、デルタ関数のために $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$ から $p_0 = p'_0$ となり、同時刻 $x_0 = x'_0 = t$ なので $e^{i(p_0 x_0 - p'_0 x_0)} = 1$ となることを使っています。0 になる同時刻交換関係からは (例えば $[\phi(\mathbf{x}, t), \phi(\mathbf{x}', t)] = 0$)

$$[a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}] = [b_{\mathbf{p}}, b_{\mathbf{p}'}] = [a_{\mathbf{p}}^\dagger, a_{\mathbf{p}'}^\dagger] = [b_{\mathbf{p}}^\dagger, b_{\mathbf{p}'}^\dagger] = 0$$

$$[a_{\mathbf{p}}, b_{\mathbf{p}'}^\dagger] = [a_{\mathbf{p}}^\dagger, b_{\mathbf{p}'}] = 0$$

となります。これで場の量子化に伴う必要な道具は導出できました。
次にハミルトニアンですが、今のハミルトニアンは

$$H = \int d^3x (\pi^* \pi + \nabla \phi^* \cdot \nabla \phi + m^2 \phi^* \phi)$$

と与えられます。これは実スカラー場でのハミルトニアンとほぼ一緒なので、「クライン・ゴールドン場～実スカラー場～」での $\phi(x)$ の片方の a を b に置き換えて同じ計算をしていけばいいです。このため、実スカラー場での計算結果がそのまま使えて

$$H = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 2E_p} E_{\mathbf{p}} (a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}} + b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{p}})$$

このように $a_p^\dagger a_p + b_p^\dagger b_p$ と二つの粒子数演算子がでできます ($1/2E_p$ は規格化によるもの)。同様に全運動量演算子も

$$\mathbf{P} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 2E_p} \mathbf{p} (a_p^\dagger a_p + b_p^\dagger b_p)$$

となります。ここまでは、実数のときに新しい粒子数演算子がくっついてるだけで、問題は起きていません。しかし、 a_p, b_p として区別されて出てきているので、それぞれが何に対応しているのか知る必要があります。

そのために、上で求めた保存量 Q を持ち出します。 Q は π を使えば

$$Q = i\alpha \int d^3x \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \pi} \phi^* - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \pi^*} \phi \right) = -i\alpha \int d^3x (\phi(x) \pi(x) - \phi^*(x) \pi^*(x))$$

これを演算子化して

$$Q = -i\alpha \int d^3x (\pi \phi - \pi^\dagger \phi^\dagger)$$

場が演算子になるので、エルミート共役になります。場の演算子のフーリエ変換をいれて計算していくと

$$\begin{aligned} Q &= -i\alpha \int d^3x \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \frac{1}{2E_p 2E_{p'}} [(ip_0 a_p^\dagger e^{ipx} - ip_0 b_p e^{-ipx})(a_{p'} e^{-ip'x} + b_{p'}^\dagger e^{ip'x}) \\ &\quad - (-ip_0 a_p e^{-ipx} + ip_0 b_p^\dagger e^{ipx})(a_{p'}^\dagger e^{ip'x} + b_{p'} e^{-ip'x})] \\ &= -i\alpha \int d^3x \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \frac{iE_p}{2E_p 2E_{p'}} [(a_p^\dagger a_{p'} e^{i(p-p')x} + a_p^\dagger b_{p'}^\dagger e^{i(p+p')x} - b_{p'} a_p e^{-i(p+p')x} - b_{p'} b_p^\dagger e^{-i(p-p')x}) \\ &\quad - (-a_p a_{p'}^\dagger e^{-i(p-p')x} - a_p b_{p'} e^{-i(p+p')x} + b_p^\dagger a_{p'}^\dagger e^{i(p+p')x} + b_p^\dagger b_{p'} e^{i(p-p')x})] \\ &= \alpha \int d^3x \int \frac{d^3p d^3p'}{(2\pi)^6} \frac{1}{4E_{p'}} [a_p^\dagger a_{p'} e^{i(p-p')x} - b_{p'} b_p^\dagger e^{-i(p-p')x} + a_p a_{p'}^\dagger e^{-i(p-p')x} - b_p^\dagger b_{p'} e^{i(p-p')x}] \\ &= \alpha \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{4E_p} (a_p^\dagger a_p - b_p b_p^\dagger + a_p a_p^\dagger - b_p^\dagger b_p) \\ &= \alpha \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} (a_p^\dagger a_p - b_p^\dagger b_p) \end{aligned}$$

最後では無限大の定数を無視しています。規格化定数である $1/2E_p$ を省くと見やすくなって

$$\alpha \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} (a_p^\dagger a_p - b_p^\dagger b_p)$$

これはハミルトニアンや全運動量演算子と違い E_p や $\mathbf{p}$ が前に出ていなく、しかも、粒子数演算子 $a_p^\dagger a_p, b_p^\dagger b_p$ の符号が反対になっています。

この結果から解釈を与えます。 Q は粒子数演算子によって構成されているので、もし粒子が電荷をもっているなら、例えば $a_p^\dagger$ によって正の電荷、 $b_p^\dagger$ によって負の電荷を持った粒子が生成されると解釈できます (どちらの質量も同じ m)。言い換えれば、 $a_p^\dagger$ によって普通の粒子、 $b_p^\dagger$ によって反粒子が作られることになります (定義次第なので $b_p^\dagger$ のほうを粒子としてもいい)。つまり、 Q をある状態の電荷の総和とし、粒子と反粒子の数の差と解釈します。そうすれば、状態の全電荷なのでハミルトニアンと違い正の値である必要がなく、電荷がマイナスとなる粒子が多ければマイナスになっても問題はないです。

また、負エネルギー解の複素共役は確率密度として使えるようになるのも、複素共役によって電荷が反転した反粒子となるからと言えます。

このようにして、負エネルギー解を反粒子として解釈します。相対論的量子力学で出てきたディラックの海の解釈ではパウリの排他律が利用されているのでボソンには使えませんでした、それが場の量子論において再解釈されたことになります。

実スカラー場で反粒子が出てこなかった理由は簡単で、粒子、反粒子を見分けるのに必要な電荷の $\pm$ に対応するものがないからです。こういった意味で、実スカラー場は中性的な場であるとも言え、無理やりな表現を使えば粒子それ自身が反粒子と同一になっているとも言えます。

演算子としての Q は保存量なのでハイゼンベルグ方程式から

$$\dot{Q} = i[Q, H] = 0$$

となって、ハミルトニアンと交換します。なので、 Q は時間に依存しない定数のために、同時刻になるように時間を選べます。そうすると、場との交換関係において

$$\begin{aligned} [Q, \phi(\mathbf{y}, t)] &= -i \int d^3x [\pi(x)\phi(x) - \pi^\dagger(x)\phi^\dagger(x), \phi(\mathbf{y}, t)] \\ &= -i \int d^3x [\pi(x)\phi(x), \phi(\mathbf{y}, t)] \\ &= -i \int d^3x \pi(x) [\phi(x), \phi(\mathbf{y}, t)] + i \int d^3x [\pi(x), \phi(\mathbf{y}, t)] \phi(x) \\ &= i \int d^3x i\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \phi(x) \\ &= -\phi(\mathbf{y}) \end{aligned}$$

もしくは

$$\begin{aligned} [Q, \phi^\dagger(\mathbf{y}, t)] &= -i \int d^3x [\pi(x)\phi(x) - \pi^\dagger(x)\phi^\dagger(x), \phi^\dagger(\mathbf{y}, t)] \\ &= i \int d^3x [\pi^\dagger(x)\phi^\dagger(x), \phi^\dagger(\mathbf{y}, t)] \\ &= i \int d^3x \pi^\dagger(x) [\phi^\dagger(x), \phi^\dagger(\mathbf{y}, t)] - i \int d^3x [\pi^\dagger(x), \phi^\dagger(\mathbf{y}, t)] \phi^\dagger(x) \\ &= -i \int d^3x i\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \phi^\dagger(x) \\ &= \phi^\dagger(\mathbf{y}) \end{aligned}$$

として同時刻交換関係によって計算できます (α は無視しています)。

最後に、上では無限大を無視しましたが、このことを数式上の表記として与えます。そのために、 Q の式

$$Q = i\alpha \int d^3x (\pi\phi - \pi^*\phi^*)$$

を、(2a) での

$$\phi(x) = \phi^{(+)}(x) + \phi^{(-)}(x)$$

によって書き換えます。

$\phi(x)\phi(y)$ の積は

$$\phi(x)\phi(y) = \phi^{(+)}(x)\phi^{(+)}(y) + \phi^{(-)}(x)\phi^{(+)}(y) + \phi^{(+)}(x)\phi^{(-)}(y) + \phi^{(-)}(x)\phi^{(-)}(y)$$

今まで $\phi(x)$ の交換関係を計算してきたとき、最後に生成演算子がそれぞれの項で一番左側に来るように交換し、それによって無限大の定数が出てきました。この無限大の定数が出ないようにする表記を導入します。

それは正規積 (normal ordering) と呼ばれます。正規積は、最初っから生成演算子が一番左側にいるとする記号です。例えば、 $\phi(x)\phi(y)$ を

$$:\phi(x)\phi(y): = \phi^{(+)}(x)\phi^{(+)}(y) + \phi^{(-)}(x)\phi^{(+)}(y) + \phi^{(-)}(y)\phi^{(+)}(x) + \phi^{(-)}(x)\phi^{(-)}(y)$$

として、 $\phi^{(-)}$ が左にくるように操作したものです。正規積は、 $:\phi(x)\phi(y):$ や $N[\phi(x)\phi(y)]$ のように表記されます。生成・消滅演算子を直接使えば、 $:a_1a_2^\dagger a_3 := a_2^\dagger a_1a_3$ となります。具体的な計算を行う前にこのような処理をしておけば、計算の最後に無限大の定数が表われることが防げ、この操作自体は理論に何の問題も発生させません。

・補足

クライン・ゴールドン方程式は解として平面波を持ち、平面波の重ね合わせも解です。つまり、 $f^{(+)}$ と $f^{(-)}$ を使ったフーリエ変換の和によって

$$\phi(x) = \phi^{(+)}(x) + \phi^{(-)}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \phi^{(+)}(\mathbf{p}) e^{i(Et - \mathbf{p}\mathbf{x})} + \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \phi^{(-)}(\mathbf{p}) e^{i(-Et - \mathbf{p}\mathbf{x})}$$

としたものも解です。これは、4次元のフーリエ変換

$$\phi(x) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \phi(p) e^{ipx}$$

から求められます。クライン・ゴールドン方程式に入れて、クライン・ゴールドン方程式を満たすように変形すればいいです。

クライン・ゴールドン方程式に入れると

$$(p^2 - m^2)\phi(p) = 0$$

これは $p^2 = m^2$ のとき 0 になることから、デルタ関数を使って解は

$$\phi(p) = \delta(p^2 - m^2)F(p)$$

と書けます。 $p^2 \neq m^2$ ではデルタ関数によって任意の $F(p)$ で $\phi(p) = 0$ なので、解として成立しています。

これにデルタ関数の関係

$$\delta(p^2 - m^2) = \delta(p_0^2 - \mathbf{p}^2 - m^2) = \delta(p_0^2 - E_{\mathbf{p}}^2) = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (\delta(p_0 - E_{\mathbf{p}}) + \delta(p_0 + E_{\mathbf{p}}))$$

を使って、フーリエ変換に入れ直すと

$$\begin{aligned}
\phi(x) &= \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \phi(p) e^{ipx} \\
&= \int \frac{dp_0 d^3 p}{(2\pi)^4} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (\delta(p_0 - E_{\mathbf{p}}) + \delta(p_0 + E_{\mathbf{p}})) F(p) e^{ipx} \\
&= \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (F(E_{\mathbf{p}}, p) e^{iE_{\mathbf{p}}t - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} + F(-E_{\mathbf{p}}, p) e^{-iE_{\mathbf{p}}t - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}) \\
&= \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (F(E_{\mathbf{p}}, p) e^{iE_{\mathbf{p}}t - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} + F(-E_{\mathbf{p}}, -\mathbf{p}) e^{-iE_{\mathbf{p}}t + i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}) \\
&= \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (F(E_{\mathbf{p}}, p) e^{ipx} + F(-E_{\mathbf{p}}, -\mathbf{p}) e^{-ipx}) \quad (p_0 = E_{\mathbf{p}}) \\
&= \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (\phi^{(+)}(\mathbf{p}) e^{ipx} + \phi^{(-)}(\mathbf{p}) e^{-ipx}) \quad (\phi^{(\pm)}(p) = F(\pm E_{\mathbf{p}}, \pm \mathbf{p})) \\
&= \phi^{(+)}(x) + \phi^{(-)}(x)
\end{aligned}$$

となります。 $\phi^{(-)}(\mathbf{p})$ が $a_{\mathbf{p}}$ 、 $\phi^{(+)}(\mathbf{p})$ が $b_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ に対応します。