

## 多体系と生成、消滅演算子

場の量子化の違う触れ方をしておきます。ここでは雰囲気を見るだけなので、厳密なことや導出は大分省いています (お話と思って見てください)。

出てくる数学用語は下の補足で簡単に説明しています。

相互作用のことは無視しています。

最初に量子力学で粒子が複数いる場合をどうしているのかを雰囲気だけで見ていきます。同種粒子での面倒さをなくすために、質量  $m_1, m_2$  の粒子がいるとします。それぞれのハミルトニアンは  $H_1, H_2$  で与え、全体のハミルトニアンは  $H = H_1 + H_2$  と書けるとします。そして、時間依存性がなく、 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  にそれぞれの粒子がいるとし、2粒子の波動関数を  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  とします。  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  はそれぞれの粒子が  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  にいる確率  $|\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2$  となります。このときの、時間独立なシュレーディンガー方程式は、エネルギーを  $E = E_1 + E_2$  として

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 + V_1(\mathbf{x}_1) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V_2(\mathbf{x}_2)\right)\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$$

$\nabla_1, \nabla_2$  は  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  のナブラ、 $V_1, V_2$  はポテンシャルです。これは  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  の依存性が分離しているので、 $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_1(\mathbf{x}_1)\psi_2(\mathbf{x}_2)$  とすることで

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 + V_1(\mathbf{x}_1)\right)\psi_1(\mathbf{x}_1) = E_1\psi_1(\mathbf{x}_1)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V_2(\mathbf{x}_2)\right)\psi_2(\mathbf{x}_2) = E_2\psi_2(\mathbf{x}_2)$$

このように波動関数が  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_1(\mathbf{x}_1)\psi_2(\mathbf{x}_2)$  と出来るとします。

量子力学での粒子の状態 (波動関数) はヒルベルト空間のベクトルとされるので、2粒子の状態を2つのヒルベルト空間から作ります。2粒子のヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  はヒルベルト空間  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$  のテンソル積から

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

として与えられます。つまり、1粒子のヒルベルト空間 ( $L^2$  空間)  $\mathcal{H}_1$  の  $\psi_1, \mathcal{H}_2$  の  $\psi_2$  から、2粒子のヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  にいる波動関数  $\psi_1 \otimes \psi_2$  を作り

$$(\psi_1 \otimes \psi_2)(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_1(\mathbf{x}_1)\psi_2(\mathbf{x}_2)$$

とします。ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  のハミルトニアン演算子は

$$H = H_1 \otimes H_2$$

となり、演算子の作用の仕方は

$$H(\psi_1 \otimes \psi_2) = (H_1 \otimes H_2)(\psi_1 \otimes \psi_2) = (H_1\psi_1 \otimes H_2\psi_2)$$

と定義されます。それぞれのヒルベルト空間の恒等演算子  $I$  によって

$$H = H_1 \otimes I + I \otimes H_2$$

と与えるなら

$$\begin{aligned} H(\psi_1 \otimes \psi_2) &= (H_1 \otimes I + I \otimes H_2)(\psi_1 \otimes \psi_2) = (H_1 \otimes I)(\psi_1 \otimes \psi_2) + (I \otimes H_2)(\psi_1 \otimes \psi_2) \\ &= H_1\psi_1 \otimes \psi_2 + \psi_1 \otimes H_2\psi_2 \end{aligned}$$

となります。大雑把にですが、このようにして多粒子のヒルベルト空間を作ります。  $n$  個あれば

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \cdots \otimes \mathcal{H}_n$$

となるだけです。

今の話を踏まえて量子力学で出てくる話を見ます。話を極端に省いていきます。  $n$  粒子の波動関数は 1 粒子の波動関数の積で書けるので、1 粒子の波動関数を離散的な状態  $p_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) による直交基底  $\phi_{p_i}(x_i)$  によって展開し、  $n$  粒子の波動関数  $\Psi(x_1, \dots, x_n, t)$  を

$$\Psi(x_1, \dots, x_n, t) = \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n} C(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n, t) \phi_{\mathbf{p}_1}(x_1) \cdots \phi_{\mathbf{p}_n}(x_n)$$

とします。  $C$  は展開係数です。和はそれぞれの状態  $p_i$  で可能な範囲に対してです。時間依存性は展開係数に持たせています。多体系での問題はこの展開係数  $C$  を求められるかどうかということになります。今は時間依存するシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t)$$

に従うとして、波動関数  $\Psi(x_1, \dots, x_n, t)$  を入れてやります。そして、  $\phi_{\mathbf{k}_1}^*(x_1) \cdots \phi_{\mathbf{k}_n}^*(x_n)$  (「\*」は複素共役) をかけて全空間積分を実行します。そうすると時間依存しているのが  $C$  なので、  $\phi_{p_i}(x_i)$  は規格化されているとして

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n, t) \int dx_1 \cdots dx_n \phi_{\mathbf{k}_1}^*(x_1) \phi_{\mathbf{p}_1}(x_1) \cdots \phi_{\mathbf{k}_n}^*(x_n) \phi_{\mathbf{p}_n}(x_n) \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n, t) \end{aligned}$$

シュレーディンガー方程式の右辺は

$$\sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n} C(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n, t) \int dx_1 \cdots dx_n (\phi_{\mathbf{k}_1}(x_1) \cdots \phi_{\mathbf{k}_n}(x_n))^* H \phi_{\mathbf{p}_1}(x_1) \cdots \phi_{\mathbf{p}_n}(x_n)$$

ハミルトニアンは  $H = H_1 + \cdots + H_n$  で、それぞれのハミルトニアンは対応する粒子にしか作用しないので、例えば  $H_1$  のとき

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n} \int dx_1 \cdots dx_n (\phi_{\mathbf{k}_1}(x_1) \cdots \phi_{\mathbf{k}_n}(x_n))^* H_1 \phi_{\mathbf{p}_1}(x_1) \cdots \phi_{\mathbf{p}_n}(x_n) \\
&= \sum_{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n} \int dx_1 \cdots dx_n (\phi_{\mathbf{k}_2}^*(x_1) \phi_{\mathbf{p}_2}(x_1) \cdots \phi_{\mathbf{k}_n}^*(x_n) \phi_{\mathbf{p}_n}(x_n)) \phi_{\mathbf{k}_1}^*(x_1) H_1 \phi_{\mathbf{p}_1}(x_1) \\
&= \sum_{\mathbf{p}_1} \int dx_1 \phi_{\mathbf{k}_1}^*(x_1) H_1 \phi_{\mathbf{p}_1}(x_1)
\end{aligned}$$

このように、 $H_i$  が作用する  $\phi_{\mathbf{p}_i}(x_i)$  が残ります。このため、 $C$  でも  $\mathbf{p}_i$  だけ  $\mathbf{k}_i$  に変わらずに残ります。よって

$$\sum_{i=1}^n \sum_{\mathbf{p}_i} \int dx_i \phi_{\mathbf{k}_i}^*(x_i) H_i \phi_{\mathbf{p}_i}(x_i) C(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{i-1}, \mathbf{p}_i, \mathbf{k}_{i+1}, \dots, \mathbf{k}_n, t)$$

となります。というわけで、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n, t) = \sum_{i=1}^n \sum_{\mathbf{p}_i} \int dx_i \phi_{\mathbf{k}_i}^*(x_i) H_i \phi_{\mathbf{p}_i}(x_i) C(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{i-1}, \mathbf{p}_i, \mathbf{k}_{i+1}, \dots, \mathbf{k}_n, t)$$

という方程式になります。

このように多粒子 (多体系) は 1 粒子の波動関数の拡張で記述できます。しかし、この記述方法で多体系の話を続けていくのはあからさまに面倒そうなので、違う発想に切り替えます。

すでに触れたように多粒子のヒルベルト空間は  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n$  として作れます。これは  $n$  粒子のヒルベルト空間なので、 $n$  粒子の状態しか記述できません。これを変更します。粒子数は無限個まで取れるとします。 $k$  個の粒子があるヒルベルト空間を  $\mathcal{H}^{(k)}$ 、対応する  $k$  粒子の波動関数を  $\Psi_k$  ( $k = 0, 1, \dots$ ) とします。これらの波動関数をひとまとめにして

$$(\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2, \dots)$$

という組にします。これは数学ではデカルト積によって

$$\mathcal{H}^{(0)} \times \mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(2)} \cdots \quad (\mathcal{H}^{(k)} = \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_k)$$

として作れます。表記が紛らわしいですが、 $\mathcal{H}_i$  は 1 粒子のヒルベルト空間です。また、 $\Psi_0$  に対応する  $\mathcal{H}^{(0)}$  は複素数の空間とします。しかし、デカルト積では  $\Psi_0, \Psi_1, \dots, \Psi_n$  を並べた組でしかないので、これにベクトルの計算規則と内積を与えます。これらが与えられた空間  $\mathcal{F}$  は数学で言うところの直和によって

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}^{(2)} \oplus \cdots$$

と書かれます。これがフォック空間です。つまり、 $(\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2, \dots)$  という異なった粒子数の波動関数の組が元になっているヒルベルト空間です。例えば、粒子がない真空は  $(1, 0, 0, \dots)$  として表現します。

これをよくあるブラケットの形にすると、状態  $p_k$  を持つ粒子数を  $n_k$  とすれば

$$|n_1, n_2, \dots\rangle$$

となり、粒子がない真空は  $|0\rangle$  として表記されます。直交性と完全性は

$$\langle m_1, m_2, \dots | n_1, n_2, \dots \rangle = \delta_{m_1 n_1} \delta_{m_2 n_2} \dots, \quad \sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots| = 1$$

と書かれます。

これで複数の粒子数を持った空間を作ることができました。次は粒子数を変化させる演算子を作ります。この演算子を作れば、粒子の生成・消滅なんかによる粒子数の変化を統一的に扱えるようになります。

粒子のいない真空と、状態  $p$  の粒子がいる状態との関係を演算子  $a^\dagger(p)$  によって

$$a^\dagger(p)|0\rangle = |p\rangle$$

とすれば、 $a^\dagger(p)$  は真空に状態  $p$  の粒子を 1 つ作る演算子となります。状態  $p$  を作るものなので、演算子  $a^\dagger$  には  $p$  の依存性を持たせています。1 粒子状態に別の状態をもう一度作用させれば、2 粒子状態となり

$$a^\dagger(p_1)a^\dagger(p_2)|0\rangle = |p_1, p_2\rangle$$

$n$  回同じことをすれば

$$a^\dagger(p_1)a^\dagger(p_2)\dots a^\dagger(p_n)|0\rangle = |p_1, p_2, \dots, p_n\rangle$$

となります。また、運動量でなく数表示を使えば

$$a_1^\dagger|n_1, n_2, \dots\rangle = |n_1 + 1, n_2, \dots\rangle$$

ここまで設定すれば、通常の生成、消滅演算子の話と同じになるので、消滅演算子を  $a(p)$  として、状態  $p$  での粒子数に対する粒子数演算子  $a^\dagger(p)a(p)$  を作ることが出来ます。ただし、今は連続値  $p$  を持たせているので交換関係は

$$[a(p), a^\dagger(p')] = \delta^3(p - p')$$

のように作る必要があります。

ここではボソンやフェルミオンであることを無視してきましたが、対象となる粒子がボソンなのかフェルミオンなのかによってフォック空間への作用が変わります (交換関係に従うか反交換関係に従うのか)。ここで、生成・消滅演算子から

$$\phi(x) = \int d^3p e^{ip \cdot x} a(p), \quad \phi^\dagger(x) = \int d^3p e^{-ip \cdot x} a^\dagger(p)$$

というのを新しく作ってみます。このとき、新しく作った演算子  $\phi(x), \phi^\dagger(x)$  は演算子ということを忘れて、シュレーディンガー方程式に従うとすれば、電磁場なんかと同じように場としての性質を持たせられます。そのために、この演算子を場の演算子と呼び、量子場と呼ばれる対象となります。

$\phi(x)\phi^\dagger(x)$  の 3 次元全空間積分は

$$\begin{aligned}
\int d^3x |\phi(\mathbf{x})|^2 &= \int d^3x \int d^3p d^3p' e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}} a^\dagger(\mathbf{p}') a(\mathbf{p}) \\
&= \int d^3p d^3p' \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') a^\dagger(\mathbf{p}') a(\mathbf{p}) \\
&= \int d^3p a^\dagger(\mathbf{p}) a(\mathbf{p})
\end{aligned}$$

というわけで、 $\phi^\dagger(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})$  の全空間積分は全粒子数を与えてくれるので、 $\phi^\dagger(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})$  は粒子数密度演算子と見ることが出来ます。そして、相互作用のない非相対論的な自由粒子を考えて、その1粒子でのハミルトニアン演算子を  $\phi^\dagger(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x})$  で挟み全空間積分することで作られる演算子を考えてみると

$$\begin{aligned}
\int d^3x \phi^\dagger(\mathbf{x}) \left( \frac{-1}{2m} \nabla^2 \right) \phi(\mathbf{x}) &= \int d^3x \int d^3p d^3p' e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}} a^\dagger(\mathbf{p}') \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} a(\mathbf{p}) \\
&= \int d^3p \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a^\dagger(\mathbf{p}) a(\mathbf{p})
\end{aligned}$$

$a^\dagger(\mathbf{p})a(\mathbf{p})$  は状態  $\mathbf{p}$  の粒子数演算子に対応するので、もし適当な状態にこの演算子がかかっているとすれば、この演算子は  $n$  粒子系でのハミルトニアン演算子を与えていると考えられます。なので、 $\phi^\dagger(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{x})$  で挟むことによって  $n$  粒子系でのハミルトニアン演算子

$$H = \int d^3x \phi^\dagger(\mathbf{x}) \hat{H} \phi(\mathbf{x})$$

を作ることが出来ます (ハットが付いているのが1粒子系でのハミルトニアン演算子)。

そもそも最初に触れたように多体系における演算子  $O$  は、位置で区別される1粒子の演算子  $\hat{O}(x_i)$  を用いて

$$O = \sum_i \hat{O}(x_i)$$

として、全体の演算子を作れると考えます。そして、今求められた  $\phi^\dagger, \phi$  で挟むことで作られる演算子はこの関係を再現することができます。このことはそのまま一般化され、 $n$  粒子状態に対する演算子は

$$O = \int d^3x \phi^\dagger(\mathbf{x}) \hat{O}(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x})$$

として作れます。このように、生成・消滅演算子を組み込んで作られた多体系の扱いは、最初に触れた方法よりも格段にすっきりしています。

ここで、さらに気づくことは、この表記が量子力学での演算子の期待値を求める式そのままの形をしていることです。しかし、今の場合  $\phi(\mathbf{x}), \phi^\dagger(\mathbf{x})$  は通常の波動関数ではなく、演算子です。この状況を言い換えれば、波動関数  $\phi(\mathbf{x})$  を生成・消滅の作用を持つ演算子と見ること、 $n$  粒子系での演算子を求められると言えます。そして、演算子化された  $\phi$  が従うのは波動関数の方程式 (シュレーディンガー方程式やクライン・ゴルドン方程式の形) と同じ形です。この置き換えにさらに正準交換関係を用いたものが場の量子化や第二量子化と呼ばれる方法です。

今の方法で見えていくことは、多体系をどう扱えばいいのかわからないの出発点としているために、なんで場の量子論で多体系が表現できるようになるのかわかるのに向いています (非相対論な場合ではこの流れで場の量子化を説明することが多い)。ただ、いきなりフォック空間が必要となるために、古典場からの話の方が簡単といえば簡単です。加えて、場の量子論は古典場での構造を元にした話が多いので、古典場から始めた方が余計な手間が少なくなります。

・補足

使った数学の定義を少し詳しく並べます。並べるだけなので証明はないです。ノルムは  $|\psi|$ 、内積は  $\langle \psi, \phi \rangle$  と書くことにします

ベクトル空間  $\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2$  があり、それぞれの元  $v_1 \in \mathcal{V}_1, v_2 \in \mathcal{V}_2$  から、組が  $(v_1, v_2)$  と作れます。この組を元とする空間は  $\mathcal{V}_1 \times \mathcal{V}_2$  と表記されデカルト積 (直積) と呼ばれます。デカルト積  $\mathcal{V}_1 \times \mathcal{V}_2$  にベクトルの規則を与えたもの  $((v_1, v_2)$  と  $(w_1, w_2)$  に和  $(v_1, v_2) + (w_1, w_2) = (v_1 + w_1, v_2 + w_2)$  とかを定義する) を直和と言い、 $\mathcal{V}_1 \oplus \mathcal{V}_2$  と表記されます。デカルト積、直和は  $n$  個や無限個の場合にそのまま一般化されます。直和には

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 \oplus \mathcal{V}_2 \oplus \cdots \oplus \mathcal{V}_n = \bigoplus_{i=1}^n \mathcal{V}_i, \quad \mathcal{V} = \mathcal{V}_1 \oplus \mathcal{V}_2 \oplus \cdots = \bigoplus_{i=1}^{\infty} \mathcal{V}_i$$

という記号が使われます。

ヒルベルト空間でも同様にデカルト積、直和は定義されます。ヒルベルト空間では内積の定義が必要で、内積は  $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$  のとき

$$\langle (\psi_1, \psi_2), (\phi_1, \phi_2) \rangle = \langle \psi_1, \phi_1 \rangle_1 + \langle \psi_2, \phi_2 \rangle_2 \quad (\psi_1, \phi_1 \in \mathcal{H}_1, \psi_2, \phi_2 \in \mathcal{H}_2)$$

と定義されます。 $\langle \cdot \rangle_i$  での  $i$  はヒルベルト空間  $\mathcal{H}_i$  での内積であることを表しています。これは完備だと示せるので、 $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$  はヒルベルト空間となります。

ヒルベルト空間が無限個あり、それらのデカルト積  $\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots)$  ( $\psi_i \in \mathcal{H}_i$ ) を元にする  $\mathcal{H}$  があるとします。このとき

$$|\psi|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |\psi_i|_i^2 < \infty$$

となっているとします。 $|\cdot|_i$  での  $i$  はヒルベルト空間  $\mathcal{H}_i$  でのノルムを表しています。ベクトルの計算を与え、内積を

$$\langle \psi, \phi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle \psi_i, \phi_i \rangle_i \quad (\psi, \phi \in \mathcal{H})$$

としたとき、 $\mathcal{H}$  は完備になるので、 $\mathcal{H}$  はヒルベルト空間となります。よって、ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  は  $\mathcal{H}_i$  の直和によって

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{i=1}^{\infty} \mathcal{H}_i$$

と与えられます。

ヒルベルト空間  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$  のベクトル  $u, v$ 、デカルト積  $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$  での  $(w_1, w_2)$  があり、 $(w_1, w_2)$  に作用することで複素数とする写像を  $u \otimes v$  と表記します。これを

$$(u \otimes v)(w_1, w_2) = \langle w_1, u \rangle_1 \langle w_2, v \rangle_2$$

と定義します。そして、 $u \otimes v$  によるベクトル空間を  $\mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \mathcal{H}_2$  と書きます。ここで内積を  $u_i, u'_i \in \mathcal{H}_1, v_i, v'_i \in \mathcal{H}_2$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) による線形結合から ( $\alpha_{ij}, \beta_{kl}$  は複素数)

$$\left\langle \sum_{i,j=1}^n \alpha_{ij} u_i \otimes v_j, \sum_{k,l=1}^n \beta_{kl} u'_k \otimes v'_l \right\rangle = \sum_{i,j,k,l=1}^n \alpha_{ij}^* \beta_{kl} \langle u_i, u'_k \rangle_1 \langle v_j, v'_l \rangle_2$$

と定義します。しかし、このときの  $\mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \mathcal{H}_2$  は完備ではないので (代数的テンソル積)、完備にしたときのヒルベルト空間を  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  と書き、これをヒルベルト空間のテンソル積  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  と定義します。