

# 場の量子論(第二量子化)入門

- § 1 場の量子論(第二量子化)とは何か?なぜ必要か
- § 2 同種多粒子系における演算子の座標表示
- § 3 場の量子論(第二量子化):ボース粒子系
  - § 3.1 調和振動子系の生成・消滅演算子による記述
  - § 3.2 ボーズ場の生成消滅演算子と交換関係
  - § 3.3 場の演算子の物理的意味
  - § 3.4 量子力学的な多体問題全体が1つの量子化された場で表されること
  - § 3.5 量子場の理論が量子力学的な多体問題の全体に等しいこと
- § 4 場の量子論(第二量子化):フェルミ粒子系
  - § 4.1 フェルミ粒子の生成・消滅演算子と反交換関係
  - § 4.2 フェルミ場の生成・消滅演算子
- § 5 3次元系、スピン自由度を含む場合への拡張

# § 1. 場の量子論(第二量子化)とは何か？

## § 1.1 場の量子論の背景(1)

### ニュートン力学(17世紀) — 一粒子の見方 —

1) 遠隔作用で相互作用する質点(粒子)系についての理論。

2) 因果的で決定論的な理論。

3) 対象とする系の力学的状態の指定:

与えられた時刻の粒子の位置  $r$  と運動量  $p$

4) 離散的な記述法: 有限個の粒子数と物理量(位置、運動量)がのみが必要

ニュートン力学は、物理学の歴史の中に埋もれた過去の遺物ではない！

宇宙計画の成功のニュース

ニュートン力学は、その対象としている適用領域においては完全に有効な理論である。

力が瞬時伝わると考えてよいほど光速度に比べて十分ゆっくり動き、原子、分子に比べて十分大きい物体の運動など。最初の応用は天体であった。

[シュウィンガー2003]

## § 1.2 場の量子論の背景(2)

場の(古典的)理論;電磁場の理論(マックスウェル理論)(19世紀-)など、

1) 近接作用で相互作用する質点(粒子)系についての理論。

2) **因果的で決定論的な理論。**

3) 対象とする系の電磁的状态(電場 $E$ や磁場 $B$ )の指定:

任意の時刻 $t$ と位置 $r$ における電場 $E$ や磁場 $B$ ベクトルの大きさと向きを少なくとも原理的には確定する必要がある。

4) **連続的な記述法**:連続的に広がる場の記述には**無限個の物理量**(電場 $E$ や磁場 $B$ )が必要

マックスウェル理論は物理学の発展における過去の歴史ではなく、その正しさや成功は今日でも日々実証されている:

レーダー、TV、携帯電話などの無線通信の限りない発展

しかし、その正しさや成功がある限定された領域に適用され、

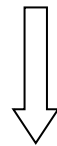
その領域は物理学の対象のすべてではない点が重要

**粒子の見方と場の見方という根本的な二元論が古典物理学の到達点**

[シュウィンガー2003]

## § 1.3 なぜ必要か

量子現象A(電子など物質粒子の波動性)



物理量の演算子化(量子化): **第一量子化**

エネルギー、角運動量の量子化

水素原子のエネルギースペクトルの定量的理解

しかし、第一量子化では量子現象B(光の粒子性)は理解できない!

(1)波動性をもつ光(電磁場)の量子化が必要!

**場の量子化(第二量子化)**

振動の量子化→フォノン(phonon, “音量子“)

電磁場の量子化(第二量子化)→光子(フォトン、photon)

(2) 反対称性を考慮した多粒子系の計算を系統的、効率的に行うため。

(3) 電子と光子の相互作用など、生成・消滅を伴う反応を微視的に記述するためには場の量子論(第二量子化)が必要

量子化された場の一元論(粒子の見方、場の見方の高次の統一<sup>4</sup>)

## § 1.4 場の量子論の適用領域

場の量子論は、従来は、素粒子理論(相対論的場の理論)、原子核理論、物性理論など基礎物理学の諸分野に限定されていた[高橋1984][江澤2009]。また量子多体問題の分野のひとつとしての量子化学分野でもほとんど応用されていなかった。

しかし、最近、場の量子論は、光との相互作用が重要な役割をはたす原子光学、物性量子化学、ナノ領域の光学など、物理学と工学の境界領域においても必要不可欠な方法となってきた [Ferry1996] [メスター2003] [山口2004] [堀2008]。

# 量子場理論の主な特徴

量子力学を含む、その上位理論

- 1) 量子場は本来、非局所的で、「波動性」をもち、その量子化された励起(振動)は離散的で「粒子性」に対応。
- 2) 同種の量子的粒子の画一性、不可識別性を理論的枠組みの中に自然な形で含む。
- 3) 同種の量子的粒子の分類  
物質構成要素としてフェルミ粒子(ファルミオン);クォーク・レプトン  
相互作用を媒介するボーズ粒子(ボゾン);光子、グルオン(膠着子)、弱ボゾン
- 4) フェルミ粒子間の相互作用はボーズ粒子の交換により媒介される。
- 5) 真空は多体系の基底状態(エネルギー最低状態)である。
- 6) 粒子には(電荷が逆で、他の性質は同じ)反粒子が伴う。  
粒子と反粒子が結合する場合には、その質量エネルギーの2倍のエネルギーが放出される。また、その質量エネルギーの2倍のエネルギーが投入されれば、粒子・反粒子の対が創成される。
- 7) 極短時間内では、粒子・反粒子の生成・消滅により、真空は揺らいでいる。

上述の粒子とは量子場理論における粒子(=量子的粒子)であり、  
古典的粒子とは異なる意味内容をもつ。

上述の真空とは量子場理論における真空(=量子的真空)であり、  
古典的真空とは異なる意味内容をもつ。

# 量子場理論の小史

1928年。P.A.M. Diracの電子論(特殊相対論と量子力学の結合)

真空=負エネルギーの「海」,

陽電子(positron)の予言

1928年、W. Heisenberg, H. Pauli、量子場理論の建設

1935年:H. Yukawa,核力の問題へ量子場理論を適用し、中間子を予言

1948年:J. Schwinger, S. Tomonaga, R.P. Feynman, 量子電磁力学と繰り込み理論

量子電磁力学の繰り込み可能性

実験値と理論値の合致は9桁の超高精度に及ぶ

→人類のもつもっとも精密な理論体系の1つ

1954年、Yang-Mills理論;電磁力と強い相互作用の統一理論の試み(ゲージ理論)

1964年、Glashow, Weingberg, Salam;電弱統一理論

1973年、ウィルチェック、グロス、ポリツァー;強い相互作用の漸近自由性の証明

→クォーク閉じ込めの理由!

# 量子場理論の世界(1)場と「粒子」

量子場による統一的な記述の完成は、(物質)世界の見方を静かに変革した。  
現代物理学は、多くの人知らない間に、従来とは全く異なる世界像を作り上げて  
いたのである。([吉田2008] p.222)

素粒子論は、現代の原子論ではなく、場の量子論である！

量子場理論は量子力学の上位理論であり、量子力学は、量子場の理論における  
粒子的な振る舞いを粒子そのもので近似した理論にすぎない。[吉田2008] p.175。

20世紀物理学の基調は「場の量子論」である。それは素粒子の種類を定め、  
高エネルギーにおける素粒子の衝突から生成・消滅までを支配し、  
低エネルギーではいわゆる量子力学に帰着して、原子の種類と反応(化学)を支配する。

量子化された場の概念が今日における最も一般的な物質像である。

場は時空間に広がった連続的な概念であるにもかかわらず、粒子描像も可能になるのは、量子場の励起の強度を1, 2, 3, ...と離散的にかぞえることができるからである。(=励起子描像)

(古典的な場は、多数個の(量子的)粒子の励起の極限として理解される。)



# すべてのミクロな物質の基本的存在様式が 量子場であると考えられる根拠

## 1) 近接作用の原理:

物理的な作用はある物質から、その近傍の空間に伝わり、さらに、またその近傍へ・・・というふうに、光速を越えない速さで伝わる。

## 2) すべてのミクロの粒子には反粒子があること:

反粒子のアイデアは量子場理論の構築直前、1928年のディラックにより相対論的電子論で提唱され、その翌年に陽電子が実験的に発見された。

([町田1994]、p.244)

場の揺らぎ(ねじれ)が粒子とすれば、反粒子の場は逆向きの揺らぎ(ねじれ)に対応する。

## Q. なぜ量子場理論が必要か？

A1.(粒子の)量子力学は、電子など「粒子」の「波動」性を理解することはできたが、光(電磁場)など場の「粒子」的性質は理解できない。

A2. 通常は“天下りの的に”認められているが、電子などミクロの世界において、同種の量子的粒子は、画一的、**全く個性をもたない、お互いに区別できない**ことが量子場理論では明確に導かれる。

あらゆる電子はコピーである！

電子の質量 =  $0.91093897 \times 10^{-30}$  Kg、

電荷 =  $1.60217733 \times 10^{-19}$  C

空間のどの点にも広がっている場の振動が、  
空間を粒子状に伝わっていくとき、  
それらを個別の振動として区別ができないのである。

参考:「ミクロの粒子は自己同一性(identity)をもたない。」

([町田1994]、p.248)

この表現は誤解を生む可能性がある。(\*)

- 1) 確かに、英語のidentity に、第一に、同一物であること、第二に、同一性、第三に、個性、独自性という意味などがある。
- 2) 自己という形容詞をつける必要性は必ずしもないように思われる。
- 3) すべての電子は同一であるという、同一性はidentityと対応する。

事実、関連した話題についての[パージェル1984]のある章の題名は同一性(identity)と差異(difference)である。

(\*)thanks for the comment by Prof. R. Nishitani, May,2009.

A3.

ミクロな粒子のスピン・量子統計の法則が、  
量子場理論では  
「理論が相対性理論と矛盾しないという条件」から、  
きれいに導かれる。

[ディラック定数 $\hbar$ を単位として]スピンが半整数の「粒子」(電子、陽子、中性子、クォークなど)は1つの量子状態を1個しか占有できないが、スピンが整数の「粒子」(光子、中間子など)は何個でも占有できる。この性質により、原子中の電子はエネルギー最低の状態に落ち込まず、次々により高いエネルギーの状態を占有することができ、それにより原子のいろいろな性質や元素の周期律が導ける。

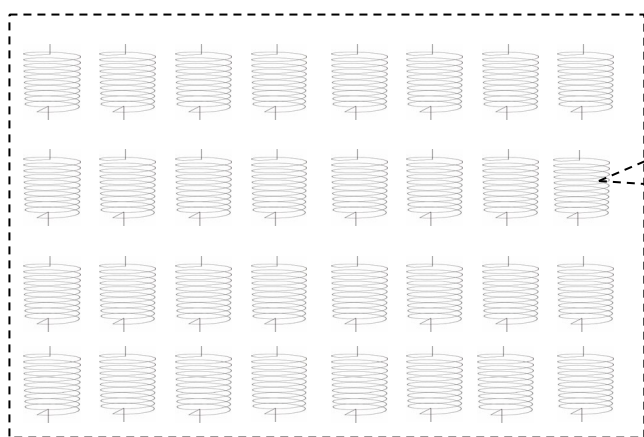
([町田1994]pp.247-250)

# 電子場のイメージ

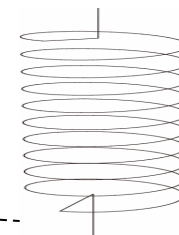
電子が波であること→、電磁場や重力場と同じように、「電子場」があること

電子の移動→電子場の「揺らぎ」が波として伝播すること

物理的空間の各点が(量子的に)振動している！



バネ



3次元の  
超マットレス！

## 広がった「粒子」描像

古典的な粒子描像: エネルギーや運動量が空間的に局在しているという観念ある。  
しかし、量子場理論の励起子描像では、エネルギーも運動量も空間的に局在していない。

([佐藤1988]の9章)

電磁波は光子という「粒子」(量子的粒子)が飛行している状態とみることができる。

- 1) 光の2重スリット実験で、光の強度をどこまでも弱めていくと、スクリーン上では干渉縞が薄くなって消えていく代わりに、光子の点がポツポツと記録されるようになる
- 2) この点を多数集めた結果として、光の強度が大きい場合の干渉縞が再現される。

「光子は決して小さく局在するひとかたまりのものではありえない。

エネルギーの面でひとかたまりであっても、空間的にもひとかたまりである

ということにはならない。光子は単純な粒子とはいえない。光子は単純な波ともいえない」

(『アドバンス物理』、イギリス高校物理の教科書[オグボーン2004])

## 原子以下の「粒子」の「大きさ」について(1)

その命名からして、「粒子」であるから「大きさ」をもつはずの電子は、ド・ブローイの物質波説の提唱以来、二重スリット実験において、干渉縞を示すなど波動的性質をもっていることが実証され、その後も種々のハイテク実験でも再確認されている。波動は「粒子」と同じ意味の「大きさ」は持たないことは自明であろう。

ところが、電子の「大きさ」は原子よりはるかに小さいとか、内部構造をもたないから点状粒子であるといわれることも少なくない。

しかし、点であれば、電磁気的な自己エネルギーが無限大となるなど、従来からよく知られた矛盾・問題を持っている。

「粒子の大きさ」というと、「パチンコ玉を非常に小さくした球形の粒子」という風に、イメージしがちであるが、話はそう簡単ではない。

## 原子以下の「粒子」の「大きさ」について(2)

電子を含め、ミクロな「粒子」の「大きさ」という概念は自明ではない！  
量子力学では「粒子」の存在確率を通じて、「粒子」の空間的分布が与えられるが、決して、巨視的物体の端のように、密度分布の大きな不連続性はない！

位置と運動量の不確定性関係、エネルギー幅と寿命の間の不確定性関係を考慮しなければならない。

場の量子論においては、同じ種類の「粒子」には共通した単一の量子場があり、それは空間に広がっている！ 電子には単一の電子場が対応しているので、すべての電子の属性はまったく同じで、個性がまったくないことになる。

ミクロな「粒子」の「大きさ」を議論する場合、それが複合粒子の場合と内部構造をもたない素粒子の場合で少し異なる議論が必要である。



## 電子の「大きさ」の種々の推定

(1) 電子の古典半径:

ある半径内に、その電気量を収容するエネルギーと相対論の質量エネルギーが等しいと考えたときの半径

$$mc^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \rightarrow r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{mc^2} \approx 2.8 \times 10^{-15} \text{ m}$$

(2) 電子のコンプトン波長

$$\lambda_{\text{compton}} \equiv \frac{h}{mc}; \text{コンプトン波長}$$

$$= 0.024 \text{ \AA} = 0.024 \times 10^{-10} \text{ m (電子)}$$

(3) 電磁的半径の上限: 弱ボソンの交換による弱い相互作用による到達範囲

$$\text{約} 10^{-18} \text{ m}$$

## 水素原子の「大きさ」の推定

基底状態の電子の波動関数から計算される半径方向の存在確率密度が最大値をとる半径 = 約  $0.5 \times 10^{-10} \text{m}$

陽子の「大きさ」の推定

- (1) 中間子の交換による核力の到達範囲 = 約  $10^{-15} \text{m}$
- (2) 陽子のコンプトン波長 =  $1.32 \times 10^{-15} \text{m}$

「粒子」の「大きさ」についての説明には対して、  
「イージス艦」の大きさは、不審船や国籍不明の航空機を迎撃できる距離という回答  
に遭遇したような不満があるかもしれない。

しかし、このような不満には次のような暗黙の前提があると思われる。

すなわち、

「マクロの世界の物体、粒子がミクロの世界でも  
そのまま縮小したようになっているはずだ！」

「ミクロの世界、超ミクロの世界は直接見ることも触ることもできない。  
知力によってのみ認識しうる、機器で検出される実在（量的実在）  
への頭の切り替えが必要である。」

[パージェル1984]

人間の体は約60兆個の細胞から成り立っているといわれるが、  
細胞には莫大な原子分子が含まれていて、そのことが遺伝情報の伝達の超高度  
の安定を物理的に保証している！！ 突然変異は約100万回に1回程度しか発生しない。

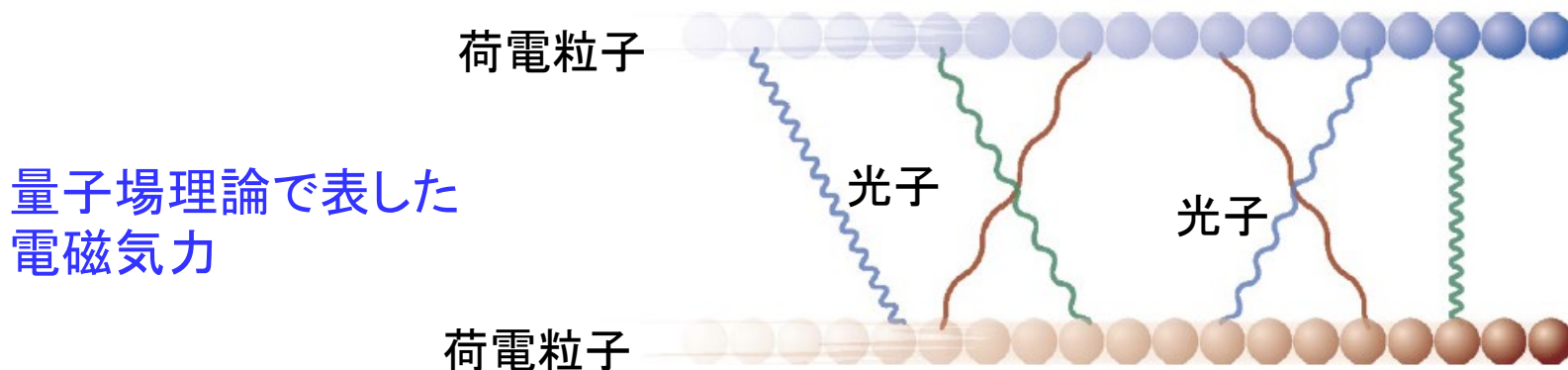
## 量子場理論の世界(2) 相互作用

Q. 物体間の力(相互作用)はミクロの世界ではどのように表されるか？

A. 量子場理論では、相互作用を場の揺らぎの「粒子」が物体粒子間で交換された結果として表す。

電気力の場合: 電子が光子(電磁波)を放出し、その光子を別の電子が吸収する過程がある。これを場の振る舞いとして表すと、

電子場の揺らぎ→電磁場の揺らぎを引き起す(光子の放出)→その電磁場の揺らぎが伝わり、電子場の揺らぎを引き起す(光子の吸収)。こうした光子の放出・吸収という光子の「キャッチボール」を2つの荷電粒子の間で絶え間なく繰り返すことにより、荷電粒子間に電気力が引き起される。



## 量子場理論の世界(3)－量子論的真空

日常用語としての真空はマクロの世界における真空で、物質の存在していない空間  
空っぽの空間(vacuum, empty space)=**古典的な真空**

**古典的な真空**:トリチェリの真空計、通常の真空ポンプにより、物質が存在しないと判定された状態である。もし何か充満しているとしても、それが物理的に観測されないとすれば、やはりそこを真空状態とみなすことになる。

真空であるための条件: ([広瀬2003]、5章)

- 1) 真空は、その状態が他の状態よりもエネルギーが低いこと、
- 2) 真空は、自分自身が観測されないために、特別な物理量(例、電荷)をもってはいけない。

**量子論的な真空**とは、あくまでも或る「粒子」(=或る励起子)が励起されていない「状態」のこと。

**量子的真空は差額主義で考える!**

場の量子論的な真空 = 多体系の最低エネルギー状態

負エネルギー状態に量子的粒子が充満している状態。

「何」もない真空ではなく、「何」がある真空 ([佐藤1988]の9章)

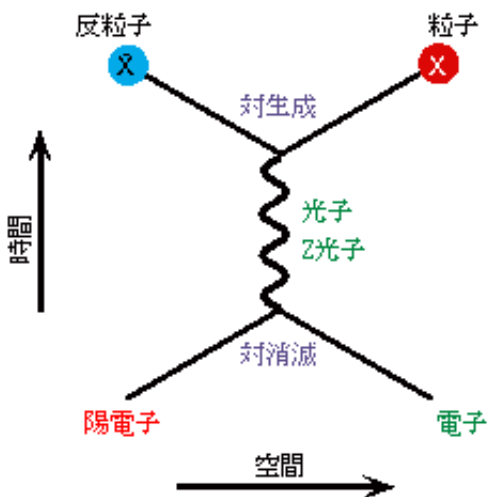
# 量子場理論の世界(4)「粒子」と「反粒子」の共存

量子的粒子に対して、電荷が逆であることを別にして同じ性質をもつ、反粒子が存在する。量子論ではエネルギーが振動数に比例しているが、sin波 cos波には、正振動数と負振動数の波が混ざっている。

たとえば、量子的粒子は場のねじれに対応しているが、その反粒子は逆向きのねじれをもっている。

([吉田2008]、pp.146-156,168-174)

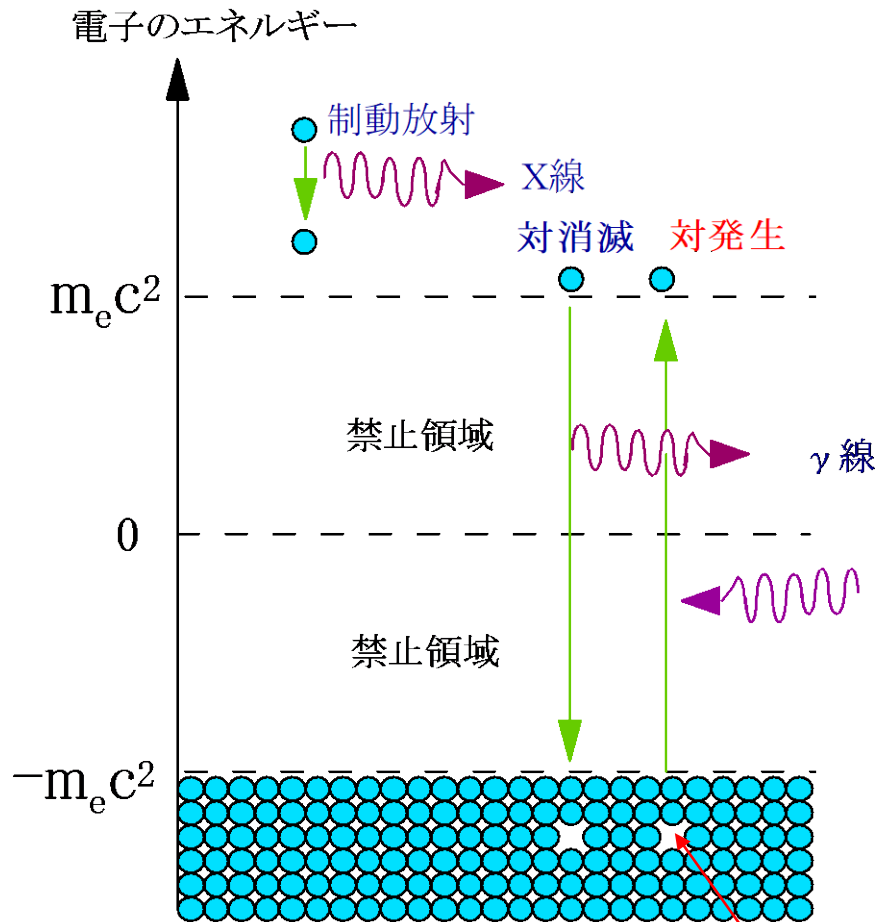
「粒子」とその「反粒子」が合体すると、それらの質量エネルギーの2倍に相当するエネルギーが放出される。



([矢吹1984]、pp.207-215)

# 電子・陽電子対の発生、消滅—ディラックの過渡的解釈—

## 量子場理論の前夜の原子論的解釈



真空＝負エネルギー電子の”海”

陽電子(正孔)＝負エネルギー電子の”海”の孔

$$m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV} = 511 \text{ KeV}$$

$$E = \pm [(m_e c^2)^2 + (pc)^2]^{1/2}$$

ディラックの相対論的電子論(1928年)

＝量子力学＋特殊相対論

反電子(＝陽電子、positron, ポジトロン)<sup>23</sup>

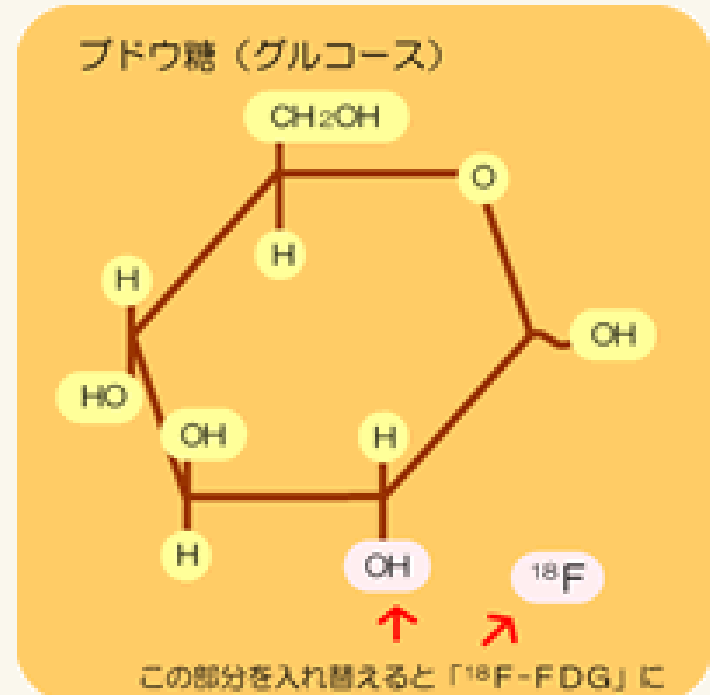
# 陽電子の応用: 陽電子放射断層撮影

## PET=positron-emission tomography

PET検査とは、正常細胞より3~8倍も多くブドウ糖を摂取するがん細胞の特性を利用した画期的な検査法です。FDGというブドウ糖に似せた薬剤を体内に注射し、薬剤ががん細胞に集まるところを画像化することで、がんの有無や位置を調べます。PETとはポジトロン・エミッション・トモグラフィの略称で、日本語では「陽電子放射断層撮影」を意味します。

検査の始めに投与するFDGとは、グルコース(ブドウ糖)に目印となる「ポジトロン核種(=陽電子放出核種)」を合成した薬剤です。正式名称は $^{18}\text{F}$ -FDG(フルオロデオキシグルコース)といい、性質はブドウ糖とほぼ同じです。**ポジトロン**核種はまわりの電子と反応して放射線( **$\gamma$ 線=ガンマ線**)に変わる特徴があり、この $\gamma$ 線の出る場所と量が、ブドウ糖を消費する細胞の目印となります。

またFDGは半減期(寿命)がとても短いので、検査当日に検査施設内の専用設備で合成し、作りたてのものを検査に使用します。





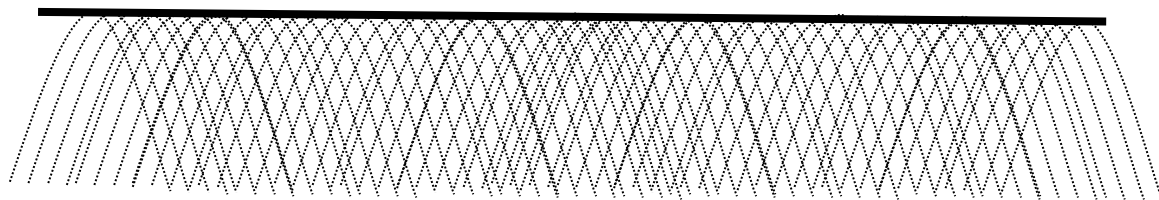
# 量子力学・量子場理論とマクロな世界の現象

われわれの身近にあるマクロの物体にも、実は、量子力学・量子場理論の法則は貫徹している。

Q. しかし、われわれの身近にある現象にはニュートン力学など古典物理学が十分に精度よく成立している。量子効果は現れていないように見えるのはなぜだろうか？

A. ミクロな「粒子」のもつ「波動性」が莫大な粒子数のために、多数の波の間で、波動性がほとんど打ち消しあってしまい、量子効果が現れにくくなるのである。

現在では、1個の中性子に働く重力の影響の量子論的効果も測定できる。



# 量子場理論の困難とその克服

量子場の理論の内在的な困難「自己エネルギー無限大」に**繰り込みの処方箋**に基づいて摂動論の計算を行う」という量子電磁力学(Q.E.D.)—シュウィンガー、朝永、ファインマン—で通用した方法が弱い相互作用、強い相互作用には使えない！

1950—60年代「新粒子」(共鳴状態)

の発見、相次ぐ

素粒子反応の前後の規則性  
(中野・西島・ゲルマンの規則)

現象論的研究  
の横行

量子場理論への強い不信感

坂田昌一  
量子場理論に不信

ゲージ不変性に基づく  
電気力・核力の統一理論

「量子場理論の根本的変革」

W. Heisenberg, 湯川秀樹

1954年、Yang-Mills理論、

素粒子の複合模型

結局、解かれることなく袋小路に入る？

ゲージ原理へ

クォーク模型へ

## 2. 同種多粒子系における演算子の座標表示

一体演算子：同種多粒子系中の一粒子状態を変化させる演算子。

実例；一粒子の運動エネルギー演算子の和、ポテンシャル演算子の和

まず最も簡単な、スピんに依存しないN粒子系(1次元系)の場合

$$H_{1N} \equiv \sum_{j=1}^N h(x_j) = h(x_1) + h(x_2) + \cdots + h(x_N) \cdots (1),$$

$$h(x_j) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_j^2} + U(x_j), U(x_j): \text{外部ポテンシャル} \cdots (2)$$

二体演算子：同種多粒子系の中の二粒子状態だけを変化させる演算子。

実例；クーロン相互作用など、2体相互作用(の和)

N = 3の場合：

$$V_{N=3} \equiv v(x_1, x_2) + v(x_1, x_3) + v(x_2, x_3), \quad v(x_1, x_2) = v(x_2, x_1), \text{ etc.}$$

$$= \frac{1}{2} [v(x_1, x_2) + v(x_2, x_1) + v(x_1, x_3) + v(x_3, x_1) + v(x_2, x_3) + v(x_3, x_2)],$$

一般のNの場合：

$$V_N \equiv \sum_{j < k}^N v(x_j, x_k) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq k}^N v(x_j, x_k), \cdots (3)$$

$$v(x_j, x_k) = v(x_k, x_j) \cdots \cdots (4)$$

相互作用性と同種粒子の同等性を明示的に表すために、粒子の交換について対称化する。

2体演算子の対称的な組み合わせは2通りしかない

添え字は粒子を区別する有限個の

離散的な情報を意味する！

# 3.場の量子論(第二量子化):ボース粒子系

## 3.1調和振動子系の生成・消滅演算子による記述

ハミルトニアン、シュレーディンガー方程式、固有値、固有関数

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2, \quad \hat{x} = x, \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \dots (1)$$

$$\hat{H}\psi_n(x) = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\psi_n(x), \quad n = 0, 1, 2, \dots (2)$$

生成演算子、消滅演算子の導入

$$\hat{b} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right), \quad \hat{b}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \dots (3)$$

生成・消滅演算子の間の交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, [\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0: \text{正準交換関係} \dots (4)$$

$$\Leftrightarrow [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1, [\hat{b}, \hat{b}] = [\hat{b}^\dagger, \hat{b}^\dagger] = 0 \dots (5)$$

# ボース粒子の生成・消滅演算子の性質

固有状態とその数表示

$$\psi_n(x) \equiv \langle x | n \rangle; \psi_n(x) \leftrightarrow |n\rangle, n=0,1,2,\dots$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x)\psi_0(x)dx = 1 \leftrightarrow \langle 0|0\rangle = 1 \dots (6)$$

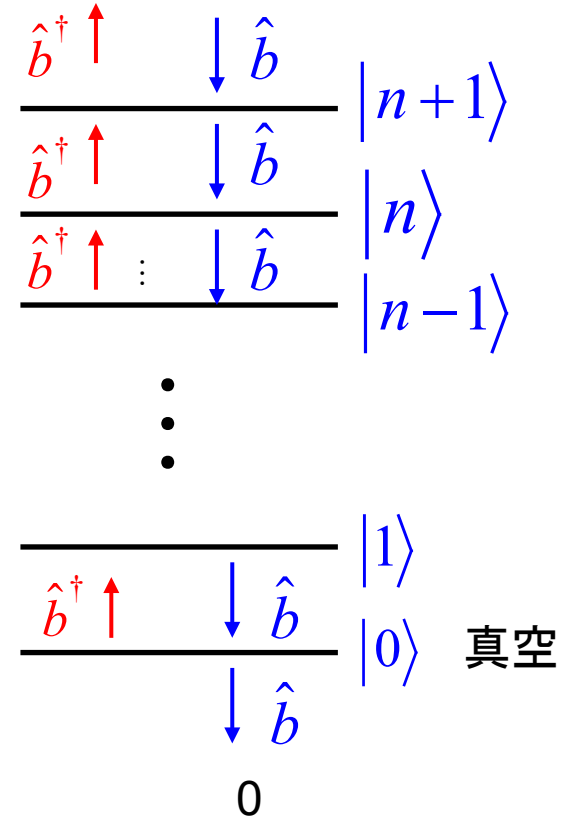
$$\hat{b} \psi_0(x) = 0 \leftrightarrow \hat{b}|0\rangle = 0: \text{真空} \dots (7)$$

$$\rightarrow \hat{b}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \dots (8)$$

$$\hat{b}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \dots (9)$$

$$\rightarrow \hat{b}^\dagger \hat{b}|n\rangle = n|n\rangle \dots (10) \quad \text{規格直交状態}$$

$$\rightarrow |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^\dagger)^n |0\rangle, \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \dots (11)$$



多数の調和振動子の集団がある場合に一般化

$$\Rightarrow [\hat{b}_\alpha, \hat{b}_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}, [\hat{b}_\alpha^\dagger, \hat{b}_\beta^\dagger] = [\hat{b}_\alpha, \hat{b}_\beta] = 0 \dots (12)$$

$\alpha, \beta$ : 量子数の組。

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (\hat{b}_{\alpha_1}^\dagger)^{n_1} (\hat{b}_{\alpha_2}^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle \dots (13)$$

離散的な変数。

# 3.2 ボーズ場の生成消滅演算子と交換関係

位置xにおいて、ボーズ場を生成する演算子

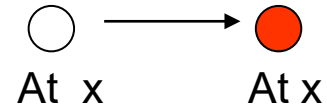
$$\hat{\psi}^\dagger(x) \equiv \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(x) \hat{b}_{\alpha}^{\dagger}, \dots (1)$$

$$\hat{\psi}(x) \equiv \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(x) \hat{b}_{\alpha} \dots (2)$$

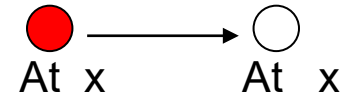
連続的なラベルx  
をもつ生成演算子

連続的なラベルx  
をもつ消滅演算子

位置xに場を生成する演算子



位置xに場を消滅する演算子



ボース粒子の生成・消滅演算子 状態  $\alpha, \beta, \dots \equiv$  量子数の組 ;  $\{n_{\alpha}, \ell_{\alpha}, m_{\alpha}\}$  or  $\{\mathbf{k}, \sigma\}$

$$[\hat{b}_{\alpha}, \hat{b}_{\beta}^{\dagger}] = \delta_{\alpha\beta}, [\hat{b}_{\alpha}, \hat{b}_{\beta}] = [\hat{b}_{\alpha}^{\dagger}, \hat{b}_{\beta}^{\dagger}] = 0. \dots (3)$$

波動性を持つ実在〔電磁場〕の粒子性  
(量子性、光子)を保障する!

ボース場の量子化

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^{\dagger}(x')] = \delta(x - x'), [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')] = [\hat{\psi}^{\dagger}(x), \hat{\psi}^{\dagger}(x')] = 0 \dots (4)$$

直交規格化された完全系 (例: シュレーディンガー方程式の固有関数)

$$f(x) = \sum_k c_k \phi_k(x). \quad c_k: \text{展開係数}$$

式(1)と(5)より  $\int \phi_{\alpha}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) dx = \hat{b}_{\alpha}^{\dagger} \dots (1a),$

$$\int \phi_{\alpha}^*(x) \hat{\psi}(x) dx = \hat{b}_{\alpha} \dots (2a)$$

# 関数系などの完全性について

任意の関数 $f(x)$ を直交規格化された関数系によって展開することを考える。

$$f(x) = \sum_k c_k \phi_k(x). \quad c_k: \text{展開係数}$$

両辺に関数 $\phi$ の複素共役をかけて積分し、直交規格性をもちいると

$$c_k = \int \phi_k^*(x') f(x') dx.$$

元の展開式に代入し、整理すると

$$f(x) = \int \sum_k \phi_k^*(x) \phi_k(x') f(x') dx'$$

$$\rightarrow \sum_k \phi_k^*(x) \phi_k(x') = \delta(x - x').$$

ディラック記号と $\delta$ 関数の性質を用いると、関数系 $\{\phi\}$ の完全性は次のようにも表される！

$$\sum_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| = \hat{1}$$

### 3.3 場の演算子の物理的意味

一般の1ボース粒子の波動関数を考える。(固有関数の重ね合わせ)

$$|1\rangle \equiv \sum_{\alpha} w_{\alpha} \hat{b}_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \int \phi_{\alpha}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) dx |0\rangle \cdots (1)$$

$$= \int f(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) dx |0\rangle, \cdots (2) \quad W_{\alpha}: \text{重ね合わせ係数}$$

$$f(x) \equiv \sum_{\alpha} w_{\alpha} \cdot \phi_{\alpha}(x) \cdots (3) \quad \text{空間的に変化する重み関数}$$

$$\text{波動関数 } \psi(x) = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \cdot \phi_{\alpha}(x) \quad \text{と同じ!}$$

$\hat{\psi}^{\dagger}(x)$ : 位置  $x$  において場を生成する演算子

粒子密度演算子  $\hat{\psi}^{\dagger}(x') \hat{\psi}(x')$  とその固有値

$$\hat{\psi}^{\dagger}(x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) |0\rangle = \delta(x - x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) |0\rangle \cdots (4)$$

生成されている粒子の位置  $x$  と粒子密度演算子の位置  $x'$  が  
同じでないかぎり、粒子密度演算子の固有値はゼロ



一般の2ボース粒子の状態=2ボース粒子の固有状態の重ね合わせ

$$|2\rangle = \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} \hat{b}_{\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{\beta}^{\dagger} |0\rangle \cdots (5)$$

$$= \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} \int \phi_{\alpha}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) dx \int \phi_{\beta}(x') \hat{\psi}^{\dagger}(x') dx' |0\rangle$$

$$= \int f(x, x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x') dx dx' |0\rangle$$

$$= \int f(x', x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x') dx dx' |0\rangle, \cdots (6)$$

$$(x \rightleftharpoons x', \hat{\psi}^{\dagger}(x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) = \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x'))$$

$$f(x, x') \equiv \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} \cdot \phi_{\alpha}(x) \phi_{\beta}(x') \cdots (7)$$

$$\rightarrow f(x', x) = f(x, x') \cdots (8)$$

:2ボース粒子状態の対称性が満たされている!

### 3.4 量子力学的な多体問題全体が1つの量子化された場で表されること

(1) 一体演算子の場の量子化(第二量子化)における表現

$$H_{1N} \equiv \sum_{j=1}^N h(x_j) = \sum_{j=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_j^2} + U(x_j) \right\} \cdots (1)$$

$$\Rightarrow \boxed{\widehat{H}_1 \equiv \int \widehat{\psi}^\dagger(x) h(x) \widehat{\psi}(x) dx = \int \widehat{\psi}^\dagger(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right\} \widehat{\psi}(x) dx \cdots (2)}$$

妥当性の吟味  $\widehat{H}_1 |1\rangle = \widehat{H}_1 \int f(x) \widehat{\psi}^\dagger(x) dx |0\rangle$

$$= \int \widehat{\psi}^\dagger(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] f(x) dx |0\rangle \cdots (3)$$

一粒子エネルギーを $\varepsilon$ とすると

$$\widehat{H}_1 |1\rangle = \varepsilon |1\rangle \cdots (4)$$

状態  $\widehat{\psi}^\dagger(x) |0\rangle$  はお互いに一次独立であるから、式(5)において、係数は辺々等しい

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] f(x) = \varepsilon f(x) \cdots (5) \quad \text{1粒子系のシュレーディンガー方程式}$$

量子力学では、波動関数はヒルベルト空間の基底

場の量子論では、波動関数は、一粒子状態を場の演算子で表したときの重み関数

ゆえに、生成・消滅演算子を用いる方法(場の量子論)は、  
少なくとも1粒子系では量子力学と等価である。



1粒子系だけでは場の量子論を使う価値はない。

しかし、多数の粒子を問題にしたり、電子と光の相互作用を  
微視的に理解したい場合、場の量子論の威力は明らかになる。

同種の多粒子系において、対称性を考慮した量子力学の複雑な計算を、  
ボース粒子に対する演算子間の交換関係にもとづいて、  
代数的に行うことができる！！

2粒子状態

$$\begin{aligned} |2\rangle &= \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} \hat{b}_{\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{\beta}^{\dagger} |0\rangle \\ &= \int f(x, x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x') dx dx' |0\rangle \cdots (6) \end{aligned}$$

に一体演算子を作用させると

$$\hat{H}_1 |2\rangle = \int \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x') \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx'^2} + U(x') \right] f(x, x') dx dx' |0\rangle \cdots (7)$$

(相互作用しない)2粒子系のシュレーディンガー方程式が得られる。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx'^2} + U(x') \right] f(x, x') = \varepsilon f(x, x'), \cdots (8)$$

$$f(x, x') = f(x', x) \cdots (9)$$

対称性は自動的に保障される！

(2) 二体演算子の場の量子化(第二量子化)における表現

$$V_N \equiv \sum_{j < k}^N v(x_j, x_k) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq k}^N v(x_j, x_k) \cdots (10)$$

$$\Rightarrow \hat{V} \equiv \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \frac{1}{2} v(x, x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx dx' \cdots (11)$$

この二体演算子を2粒子状態に作用させると

$$\hat{V} |2\rangle = \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') [v(x, x')] f(x, x') dx dx' |0\rangle \cdots (12)$$

が得られる。次に、相互作用する2粒子系のハミルトニアンの中の量子化表示に対して

$$\begin{aligned} (\hat{H}_1 + \hat{V}) |2\rangle &= \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx'^2} + U(x') + v(x, x') \right] \\ &\quad \times f(x, x') dx dx' |0\rangle \cdots (13) \end{aligned}$$

が得られる。結局、相互作用する2粒子系のシュレーディンガー方程式が得られる。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx'^2} + U(x') + v(x, x') \right] f(x, x') = \varepsilon f(x, x'), (14)$$

対称性は自動的に保障される  $f(x, x') = f(x', x) \cdots (15)$

以上の議論は粒子がN個ある場合にも容易に拡張できる。

2粒子の場合と同様にN粒子系に対しても、場の量子論では同じハミルトニアン演算子で表される。

2体力で相互作用する多粒子系(の一般)のハミルトニアン演算子の場の量子化(第二量子化)表現

$$\begin{aligned}\hat{H} &\equiv \hat{H}_1 + \hat{V} \\ &= \int \hat{\psi}^\dagger(x) h(x) \hat{\psi}(x) dx + \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \frac{1}{2} v(x, x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx dx' \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | h | \beta \rangle \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta^\dagger \hat{b}_\delta \hat{b}_\gamma, \dots (16)\end{aligned}$$

$$\langle \alpha | h | \beta \rangle \equiv \int \phi_\alpha^*(x) h(x) \phi_\beta(x) dx, \dots (17)$$

$$\langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle \equiv \int \phi_\alpha^*(x) \phi_\beta^*(x') v(x, x') \phi_\gamma(x) \phi_\delta(x') dx dx', \dots (17)$$

2体行列要素を次のように対称化された行列要素で表すと

$$\langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle \equiv \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle + \langle \alpha\beta | v | \delta\gamma \rangle \cdots (19)$$

二体相互作用するボース粒子の多体系のハミルトニアンの場合の量子論(第二量子化)表現は、**粒子数Nによらず**、次のように書かれる。

$$\begin{aligned} \hat{H} &\equiv \hat{H}_1 + \hat{V} \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | h | \beta \rangle \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta + \left(\frac{1}{2!}\right)^2 \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta^\dagger \hat{b}_\delta \hat{b}_\gamma \cdots (20) \end{aligned}$$

### 3.5 量子場の理論が量子力学的な多体問題の全体に等しいこと

#### 完全規格直交ベクトル系

$$|x_1, x_2, \dots, x_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) \cdots \hat{\psi}^\dagger(x_N) |0\rangle, \dots (1)$$

$$\rightarrow \langle x_1 | x'_1 \rangle = \delta(x_1 - x'_1), \dots (2)$$

$$\langle x_1 x_2 | x'_1 x'_2 \rangle = \frac{1}{2!} \left[ \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) + \delta(x_1 - x'_2) \delta(x_2 - x'_1) \right] \cdots (3)$$

一般のN粒子系の場合

直交規格性

$$\langle x_1 x_2 \cdots x_N | x'_1 x'_2 \cdots x'_N \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{(P)} \left[ \delta(x_1 - x'_{P_1}) \delta(x_2 - x'_{P_2}) \cdots \delta(x_N - x'_{P_N}) \right], \dots (4) \text{ 直交規格性}$$

(和において(P)は $x_1, x_2, \dots, x_N$ を固定し,  $\{x'_1, x'_2, \dots, x'_N\}$ の順列可能な

単位ベクトル(完全性)

$N!$ 個の組み合わせについて和をとることを意味する。)

$$\begin{aligned} \hat{1} &\equiv |0\rangle\langle 0| + \int |x_1\rangle dx_1 \langle x_1| + \iint |x_1 x_2\rangle dx_1 dx_2 \langle x_1 x_2| + \cdots \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \iint \cdots \int |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle dx_1 dx_2 \cdots dx_N \langle x_1 x_2 \cdots x_N| \cdots (5) \end{aligned}$$



量子状態ベクトル  $|\Psi(t)\rangle$  を単位ベクトル(完全性)を用いてそれぞれの「成分」に展開する。

$$\begin{aligned}
 |\Psi(t)\rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} \iint \cdots \int |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle dx_1 dx_2 \cdots dx_N \langle x_1 x_2 \cdots x_N | \Psi(t)\rangle, \\
 &= \sum_{N=0}^{\infty} \iint \cdots \int \psi(x_1, x_2, \cdots, x_N; t) |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle dx_1 dx_2 \cdots dx_N, \cdots (6)
 \end{aligned}$$

$\psi(x_1, x_2, \cdots, x_N; t) \equiv \langle x_1 x_2 \cdots x_N | \Psi(t)\rangle$ ; 実は量子N多体系の波動関数!

量子力学状態はシュレーディンガー方程式に従う。まず一体ハミルトニアンのみを考える。

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}_1 |\Psi(t)\rangle \cdots (7)$$

ここで、場の演算子間の交換関係を用いると次の関係式が成立することがわかる。

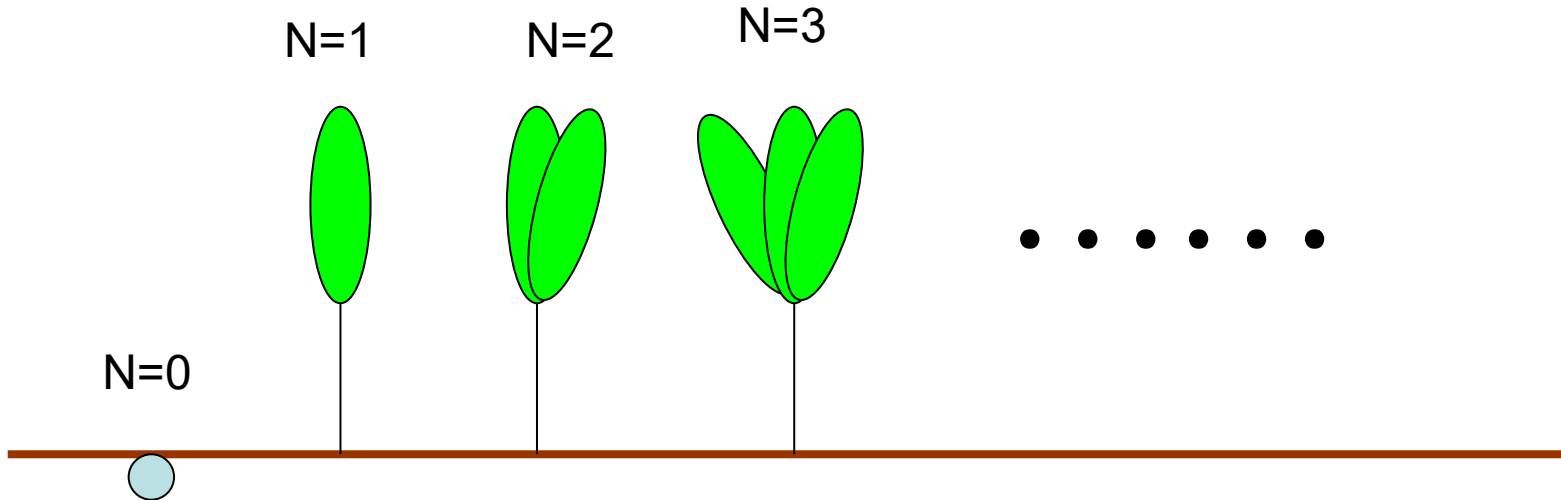
$$\left[ \hat{H}_1, \hat{\psi}^\dagger(x_j) \right] = h(x_j) \hat{\psi}^\dagger(x_j) \cdots (8)$$

一体ハミルトニアンを完全直交規格ベクトルに作用させ、真空の性質を用いると、

$$\hat{H}_1 |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle = H_{1N} |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \cdots (9)$$

$$\rightarrow \hat{H}_1 |x_1\rangle = H_{1N=1} |x_1\rangle, \hat{H}_1 |x_1 x_2\rangle = H_{1N=2} |x_1 x_2\rangle, \cdots (10)$$

量子力学的多体問題のすべて！(N=0,1,2,...∞)



単一の量子化された場(ボース場、フェルミ場)

$$\hat{1} \equiv |0\rangle\langle 0| + \int |x_1\rangle dx_1 \langle x_1| + \iint |x_1 x_2\rangle dx_1 dx_2 \langle x_1 x_2| + \dots$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \iint \dots \int |x_1 x_2 \dots x_N\rangle dx_1 dx_2 \dots dx_N \langle x_1 x_2 \dots x_N|$$

$$\hat{H}_1 |x_1 x_2 \dots x_N\rangle = H_{1N} |x_1 x_2 \dots x_N\rangle$$

## 3次元系、スピン自由度への拡張

$$x \rightarrow (x, y, z) = \mathbf{r}$$

$$\rightarrow (\mathbf{r}, \sigma) \equiv \xi, \sigma \equiv \uparrow (+1/2), \downarrow (-1/2)$$

$$\delta(x - x')$$

$$\rightarrow \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z') \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$\rightarrow \delta(\xi - \xi') \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\int \cdots dx \rightarrow \iiint \cdots dx dy dz \equiv \int \cdots d^3\mathbf{r} \quad (\text{or } \int \cdots d\mathbf{r})$$

$$\rightarrow \int \cdots d\xi \equiv \sum_{\sigma=\pm 1/2} \int \cdots d^3\mathbf{r},$$

## 4.場の量子論(第二量子化):フェルミ粒子系

### 4.1フェルミ粒子の生成・消滅演算子と反交換関係

状態 $\alpha, \beta, \dots \equiv$  量子数の組 ;  $\{n_\alpha, l_\alpha, m_\alpha\}$  or  $\{\mathbf{k}, \sigma\}$

$\hat{C}_\alpha^\dagger$  : 状態 $\alpha$ のフェルミ粒子を生成する演算子

$\hat{C}_\alpha$  : 状態 $\alpha$ のフェルミ粒子を消滅する演算子

$|0\rangle \equiv$  フェルミ粒子が存在しない状態 (真空、基底状態)

$$\hat{C}_\alpha |0\rangle = 0 \dots (1)$$

**パウリ原理: ひとつの状態を2つのフェルミ粒子は占有できない**

$$(\hat{C}_\alpha^\dagger)^2 |0\rangle = 0 \rightarrow (\hat{C}_\alpha^\dagger)^2 |\dots\rangle = 0 \dots (2),$$

$$(\hat{C}_\alpha)^2 |\dots\rangle = 0 \dots (3)$$

$\hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\alpha \neq \hat{C}_\alpha \hat{C}_\alpha^\dagger \rightarrow (\hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\alpha + \hat{C}_\alpha \hat{C}_\alpha^\dagger) |\alpha\rangle = 1 \cdot |\alpha\rangle$  for 占有、非占有状態 $\alpha$ に対して

$$\hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\alpha + \hat{C}_\alpha \hat{C}_\alpha^\dagger = 1 \dots (4)$$

## フェルミ粒子の生成消滅演算子に対する反交換関係

互いに異なる状態 $\alpha, \beta$ 間に対して一般化

演算子の反交換関係

$$\hat{C}_\beta^\dagger \hat{C}_\alpha + \hat{C}_\alpha \hat{C}_\beta^\dagger = \delta_{\alpha\beta} \rightarrow \{\hat{C}_\alpha, \hat{C}_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta} \cdots (5)$$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

$$\hat{C}_\beta \hat{C}_\alpha + \hat{C}_\alpha \hat{C}_\beta = 0,$$

必ずしもパウリ原理に関連していない! ?

$$\hat{C}_\beta^\dagger \hat{C}_\alpha^\dagger + \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta^\dagger = 0 \rightarrow \{\hat{C}_\alpha, \hat{C}_\beta\} = \{\hat{C}_\alpha^\dagger, \hat{C}_\beta^\dagger\} = 0 \cdots (6)$$

状態 $\alpha$ を占有する粒子数演算子

$$\hat{n}_\alpha \equiv \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\alpha \cdots (7)$$

$$\rightarrow (\hat{n}_\alpha)^2 = \hat{n}_\alpha \rightarrow \text{固有値 } n_\alpha = 0, \dots, 1$$

全粒子数演算子

$$\hat{n} \equiv \sum_{\alpha} \hat{n}_\alpha \cdots (8)$$

# 粒子数表示 : ハミルトニアンと粒子数演算子が同時に対角化される表示

## 2電子状態

$$\begin{aligned} |\alpha\beta\rangle &\equiv \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta^\dagger |0\rangle \\ \rightarrow |\beta\alpha\rangle &= \hat{C}_\beta^\dagger \hat{C}_\alpha^\dagger |0\rangle = -\hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta^\dagger |0\rangle \\ &= -|\alpha\beta\rangle \quad \text{反対称状態} \end{aligned}$$

## 3電子状態はどうか

$$|\alpha\beta\gamma\rangle \equiv \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta^\dagger \hat{C}_\gamma^\dagger |0\rangle$$

## N電子状態

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \equiv (\hat{C}_{\alpha_1}^\dagger)^{n_1} (\hat{C}_{\alpha_2}^\dagger)^{n_2} \cdots (\hat{C}_{\alpha_N}^\dagger)^{n_N} |0\rangle$$

## 4.2 フェルミ場の生成・消滅演算子

### ハミルトニアンとその固有状態の一次結合

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\phi_\alpha(x) = E_\alpha\phi_\alpha(x)\cdots\cdots(1)$$

$$\int \phi_\alpha^*(x)\phi_\beta(x)dx = \delta_{\alpha\beta} \cdots(2) \text{固有関数系の直交規格性}$$

$$\sum_\alpha \phi_\alpha^*(x)\phi_\alpha(x') = \delta(x-x')\cdots(3) \text{固有関数系の完全性}$$

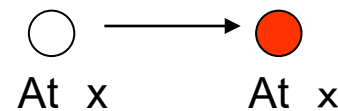
$$\begin{aligned} \psi(x) &= w_{\alpha_1} \cdot \phi_{\alpha_1}(x) + w_{\alpha_2} \cdot \phi_{\alpha_2}(x) + \cdots \\ &= \sum_\alpha w_\alpha \cdot \phi_\alpha(x)\cdots\cdots(4) \end{aligned} \quad w_\alpha : \text{重ね合わせの係数}$$

場の生成・消滅演算子

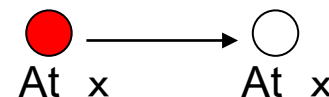
$$\hat{\psi}^\dagger(x) \equiv \sum_\alpha \hat{C}_\alpha^\dagger \cdot \phi_\alpha^*(x)\cdots(5)$$

$$\hat{\psi}(x) \equiv \sum_\alpha \hat{C}_\alpha \cdot \phi_\alpha(x)\cdots(6)$$

位置xに場を生成する演算子



位置xに場を消滅する演算子



### 4.3 場の演算子間の反交換関係(フェルミ粒子)

$$\left\{ \hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}(x') \right\} = \delta(x - x') \cdots (1)$$

$$\left\{ \hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x') \right\} = \left\{ \hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(x') \right\} = 0 \cdots (2)$$

$$\Leftrightarrow \left\{ \hat{C}_\alpha, \hat{C}_\beta^\dagger \right\} = \delta_{\alpha\beta}, \left\{ \hat{C}_\alpha^\dagger, \hat{C}_\beta^\dagger \right\} = \left\{ \hat{C}_\alpha, \hat{C}_\beta \right\} = 0 \cdots (3)$$



## 4.4 場の演算子の物理的意味

一般の一電子波動関数を考える。(固有関数の重ね合わせ)

$$|1\rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \hat{C}_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle \cdots (1)$$

$$= \sum_{\alpha} w_{\alpha} \int \phi_{\alpha}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) dx |0\rangle$$

$$= \int f(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) dx |0\rangle \cdots (2),$$

空間的に変化する重み関数

$$f(x) \equiv \sum_{\alpha} w_{\alpha} \cdot \phi_{\alpha}(x) \cdots (3)$$

波動関数  $\psi(x) = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \cdot \phi_{\alpha}(x)$  と同じ!

$\hat{\psi}^{\dagger}(x)$ : 位置  $x$  において場を生成する演算子

粒子密度演算子  $\hat{\psi}^{\dagger}(x') \hat{\psi}(x')$  とその固有値

$$\hat{\psi}^{\dagger}(x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) |0\rangle = \delta(x - x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) |0\rangle \cdots (4)$$

生成されている粒子の位置  $\xi$  と粒子密度演算子の位置  $\xi'$  が  
同じでないかぎり、粒子密度演算子の固有値はゼロ

## 4.5 .場の量子論が量子力学を含み、より優れていること

まず、1電子系のハミルトニアンを考える

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \cdots (1)$$

1電子ハミルトニアンの第二量子化

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^\dagger(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \hat{\psi}(x) dx \cdots (2)$$

(2)式の妥当性  $\hat{H}|1\rangle = \hat{H} \int f(x) \hat{\psi}^\dagger(x) dx |0\rangle \cdots (3)$  式(3)は4.3項の式(10)を用いた。

の検討

$$= \int \hat{\psi}^\dagger(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] f(x) dx |0\rangle \cdots (4)$$

一電子エネルギーを $\varepsilon$ とすると

$$\hat{H}|1\rangle = \varepsilon|1\rangle \cdots (5)$$

式(4)には、4.2項の式(6),(7)と真空状態の性質を用いた。

状態  $\hat{\psi}^\dagger(\varepsilon)|0\rangle$  はお互いに一次独立であるから、式(5)において、係数は辺々等しい

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] f(x) = \varepsilon f(x) \cdots (6) \quad \text{1電子系のシュレーディンガー方程式}$$

量子力学では、波動関数はヒルベルト空間の基底

場の量子論では、波動関数は、一電子状態を場の演算子で表したときの重み関数

ゆえに、生成・消滅演算子を用いる方法(場の量子論)は、  
少なくとも1電子系では量子力学と等価である。



1電子系だけでは場の量子論を使う価値はない。

しかし、多数の電子を問題にしたり、電子と光の相互作用を  
微視的に理解したい場合、場の量子論の威力は明らかになる。

同種の多粒子系において、反対称性を考慮した量子力学の複雑な計算は、  
フェルミ粒子に対する演算子間の反交換関係にもとづいて、  
代数的に行うことができる！！

## 4.6. 第二量子化における2電子問題

反対称性をもつ2電子状態の構成

一般の2電子状態=2電子の固有状態の重ね合わせ

$$|2\rangle = \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} \hat{C}_{\alpha}^{\dagger} \hat{C}_{\beta}^{\dagger} |0\rangle \cdots (1)$$

$$= \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} \int \phi_{\alpha}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) dx \int \phi_{\beta}(x') \hat{\psi}^{\dagger}(x') d\xi' |0\rangle$$

$$= \int f(x, x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x') dx dx' |0\rangle \cdots (2),$$

$$f(x, x') \equiv \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} \cdot \phi_{\alpha}(x) \phi_{\beta}(x') \cdots (3)$$

$$\rightarrow f(x', x) = -f(x, x') \cdots (4) \quad : \text{反対称性}$$

2体力で相互作用する多電子系(の一般)のハミルトニアン演算子の場の量子化(第二量子化)表現

$$\begin{aligned}\widehat{H} &\equiv \widehat{H}_1 + \widehat{V} \\ &= \int \widehat{\psi}^\dagger(x) h(x) \widehat{\psi}(x) dx + \int \widehat{\psi}^\dagger(x) \widehat{\psi}^\dagger(x') \frac{1}{2} v(x, x') \widehat{\psi}(x') \widehat{\psi}(x) dx dx' \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | h | \beta \rangle \widehat{C}_\alpha^\dagger \widehat{C}_\beta + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle \widehat{C}_\alpha^\dagger \widehat{C}_\beta^\dagger \widehat{C}_\delta \widehat{C}_\gamma, \\ \langle \alpha | h | \beta \rangle &\equiv \int \phi_\alpha^*(x) h(x) \phi_\beta(x) dx, \\ \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle &\equiv \int \phi_\alpha^*(x) \phi_\beta^*(x') v(x, x') \phi_\gamma(x) \phi_\delta(x') dx dx'.\end{aligned}$$

2体行列要素を次のように反対称化された行列要素で表すと

$$\langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle \equiv \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle - \langle \alpha\beta | v | \delta\gamma \rangle$$

二体相互作用する多電子系のハミルトニアンの場合の量子論(第二量子化)表現は、粒子数 $N$ によらず、次のように書かれる。

$$\begin{aligned} \hat{H} &\equiv \hat{H}_1 + \hat{V} \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | h | \beta \rangle \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta + \left(\frac{1}{2!}\right)^2 \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | \tilde{v} | \gamma\delta \rangle \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta^\dagger \hat{C}_\delta \hat{C}_\gamma \end{aligned}$$

## 5. 3次元系、スピン自由度を含む場合への拡張

### 5.1 変数、指標の拡張

$$x \rightarrow (x, y, z) = \mathbf{r}$$

$$\rightarrow (\mathbf{r}, \sigma) \equiv \xi, m_s \equiv \uparrow (+1/2), \downarrow (-1/2)$$

$$\delta(x - x') \rightarrow \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z') \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$\rightarrow \delta(\xi - \xi') \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\int \cdots dx \rightarrow \iiint \cdots dx dy dz \equiv \int \cdots d^3 \mathbf{r} \quad (\text{or } \int \cdots d\mathbf{r})$$

$$\rightarrow \int \cdots d\xi \equiv \sum_{\sigma=\pm 1/2} \int \cdots d^3 \mathbf{r},$$

## 5.2 場の演算子の拡張

空間固有関数 $\phi_\alpha$ 、スピン固有関数 $\chi$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma) \equiv \sum_{\alpha, m_s} \hat{C}_\alpha^\dagger \cdot \phi_\alpha^*(\mathbf{r}) \langle \chi_{m_s}(\sigma) | \dots (1)$$

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, \sigma) \equiv \sum_{\alpha} \hat{C}_\alpha \cdot \phi_\alpha(\mathbf{r}) | \chi_{m_s}(\sigma) \rangle, \dots (2)$$

$$\int \phi_\alpha^*(\mathbf{r}) \phi_\beta(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{\alpha\beta} \dots (3) \text{ 直交規格性}$$

$$\sum_{\alpha} \phi_\alpha^*(\mathbf{r}) \phi_\alpha(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \dots (4) \text{ 完全性}$$

$$\langle \chi_{m_s}(\sigma) | \chi_{m_s'}(\sigma') \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{m_s, m_s'} \dots (5) \text{ 直交規格性}$$

$$\sum_{m_s = \pm 1/2} | \chi_{m_s}(\sigma) \rangle \langle \chi_{m_s}(\sigma) | = \hat{1} \dots (6) \text{ 完全性}$$

スピン自由度だけを含む場合:

$$\hat{\psi}^\dagger(\sigma) \equiv \sum_{\alpha, m_s} \hat{C}_\alpha^\dagger \langle \chi_{m_s}(\sigma) | \dots (7)$$

$$\hat{\psi}(\sigma) \equiv \sum_{\alpha, m_s} \hat{C}_\alpha \cdot | \chi_{m_s}(\sigma) \rangle, \dots (8)$$



## 5.3 応用例

(1) スピン演算子の場の量子化(第二量子化)表示

$$\hat{S}_x = \sum_{m_s, m_s' = \pm 1/2} \langle m_s | s_x | m_s' \rangle \hat{C}_{m_s}^\dagger \hat{C}_{m_s'}$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\hat{C}_{+1/2}^\dagger \hat{C}_{-1/2} + \hat{C}_{-1/2}^\dagger \hat{C}_{+1/2}),$$

$$\hat{S}_y = \sum_{m_s, m_s' = \pm 1/2} \langle m_s | s_y | m_s' \rangle \hat{C}_{m_s}^\dagger \hat{C}_{m_s'}$$

$$= \frac{\hbar}{2i} (\hat{C}_{+1/2}^\dagger \hat{C}_{-1/2} - \hat{C}_{-1/2}^\dagger \hat{C}_{+1/2}),$$

$$\hat{S}_z = \sum_{m_s, m_s' = \pm 1/2} \langle m_s | s_z | m_s' \rangle \hat{C}_{m_s}^\dagger \hat{C}_{m_s'}$$

$$= \frac{\hbar}{2} (\hat{C}_{+1/2}^\dagger \hat{C}_{+1/2} - \hat{C}_{-1/2}^\dagger \hat{C}_{-1/2}),$$

## (2)2電子間クーロン相互作用

$$\begin{aligned}\hat{V}_{\text{coulomb}} &= \int \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \frac{1}{2} \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx dx' \\ &= \frac{1}{2!} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta^\dagger \hat{C}_\delta \hat{C}_\gamma, \\ \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle &\equiv \int \int \phi_\alpha^*(\mathbf{r}) \phi_\beta^*(\mathbf{r}') \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_\gamma(\mathbf{r}) \phi_\delta(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.\end{aligned}$$

# 参考文献

- [オグボーン2004] J.オグボーン、M.ホワイトハウス「アドバンシング物理」シュプリングー・フェアラー東京社、2004年。
- [江澤2009] 江澤潤一「量子場の理論—素粒子物理から凝縮系物理まで—」朝倉書店、2009年。
- [小出1990] 小出昭一郎「量子力学(II) —改訂版—」,裳華房、1990年。11章。
- [佐藤1988] 佐藤文隆「宇宙論への招待—プリンキピアとビッグバン—」岩波新書、1988年。
- [シュウインガー2003] J.シュウインガー「量子力学」シュプリングー・フェアラー東京、2003年。特に、序文。
- [高橋1984] 高橋 康「物性研究者のための場の量子論 I」、培風館。1984年。1, 2章。
- [広瀬2003] 広瀬立成「真空とはなんだろう 無限に豊かなその素顔」講談社ブルーバックス、2003年。
- [堀2008] 堀裕和他「ナノ領域の光と電子系の相互作用：ナノ光科学の量子光学的基礎」、オーム社、2008年。
- [町田1994] 町田 茂「量子力学の反乱」学習研究社、1994年。
- [マスター2003] R.マスター「原子光学」、シュプリングー・フェアラー東京、2003年。8章、量子原子光学。
- [パージェル1984] H.R.パージェル「物質の究極」地人書館、1984年。特に、9章 同等性と差異、pp.164-165。
- [矢吹1983] 矢吹治一「真空・物質・エネルギー -場の量子論への系譜-」サイエンス社、1984年。
- [山口2004] 山口 兆他「物性量子化学入門」、講談社サイエンティフィック、2004年。
- [吉田2008] 吉田伸夫「光の場、電子の海」新潮社、2008年。
- [Ferry1996] D. K. Ferry「デバイス物理のための量子力学」、丸善。1996年。9章。