

場の量子論(第二量子化)

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、「量子力学」

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、

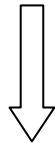
その領域は物理学の対象のすべてではない点が重要

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

シュウイングー、「量子力学」

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)

1. 4 場の量子論の応用領域

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。
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ている。

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、スピンに依存しない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：

$$\begin{aligned} V_{N=3} &\equiv v(x_1, x_2) + v(x_1, x_3) + v(x_2, x_3), \quad v(x_1, x_2) = v(x_2, x_1), \text{ etc.} \\ &= \frac{1}{2} [v(x_1, x_2) + v(x_2, x_1) + v(x_1, x_3) + v(x_3, x_1) + v(x_2, x_3) + v(x_3, x_2)], \end{aligned}$$

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

(二乗型指数関数)×(エルミート多項式)

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

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

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

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

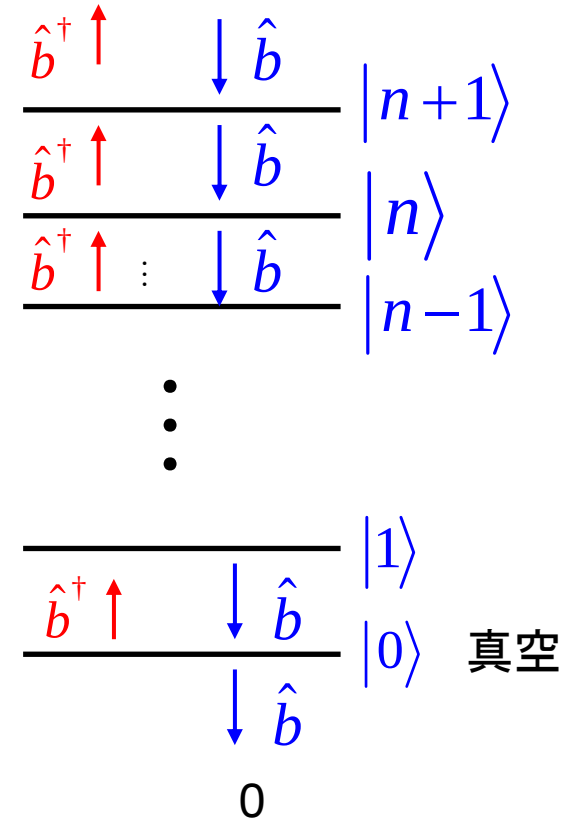
$$\hat{b} \psi_0(x) = 0 \leftrightarrow \hat{b} |0\rangle = 0: \text{真空} \dots (7)$$

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

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

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

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



多数の調和振動子の集団がある場合に一般化

$$\Rightarrow [\hat{b}_\alpha, \hat{b}_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}, [\hat{b}_\alpha^\dagger, \hat{b}_\beta^\dagger] = [\hat{b}_\alpha, \hat{b}_\beta] = 0 \dots (12) \quad \alpha, \beta: \text{量子数の組。}$$

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

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

位置xに場を生成する演算子

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

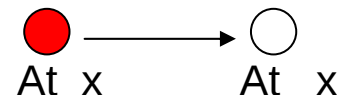
$$\hat{\psi}(x) \equiv \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(x) \hat{b}_{\alpha} \cdots (2)$$

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に場を消滅する演算子



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

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

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

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

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 $\int \phi_{\alpha}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) dx = \hat{b}_{\alpha}^{\dagger} \cdots (1a),$

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

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 ϕ 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 δ 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

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

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

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

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

一粒子エネルギーを ε とすると

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

状態 $\hat{\psi}^\dagger(x) |0\rangle$ 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場合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

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_1 + \hat{V}$$

$$= \int \hat{\psi}^\dagger(x) h(x) \hat{\psi}(x) dx + \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \frac{1}{2} v(x, x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx dx'$$

$$= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | h | \beta \rangle \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta^\dagger \hat{b}_\delta \hat{b}_\gamma, \dots (16)$$

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

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

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

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

(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。

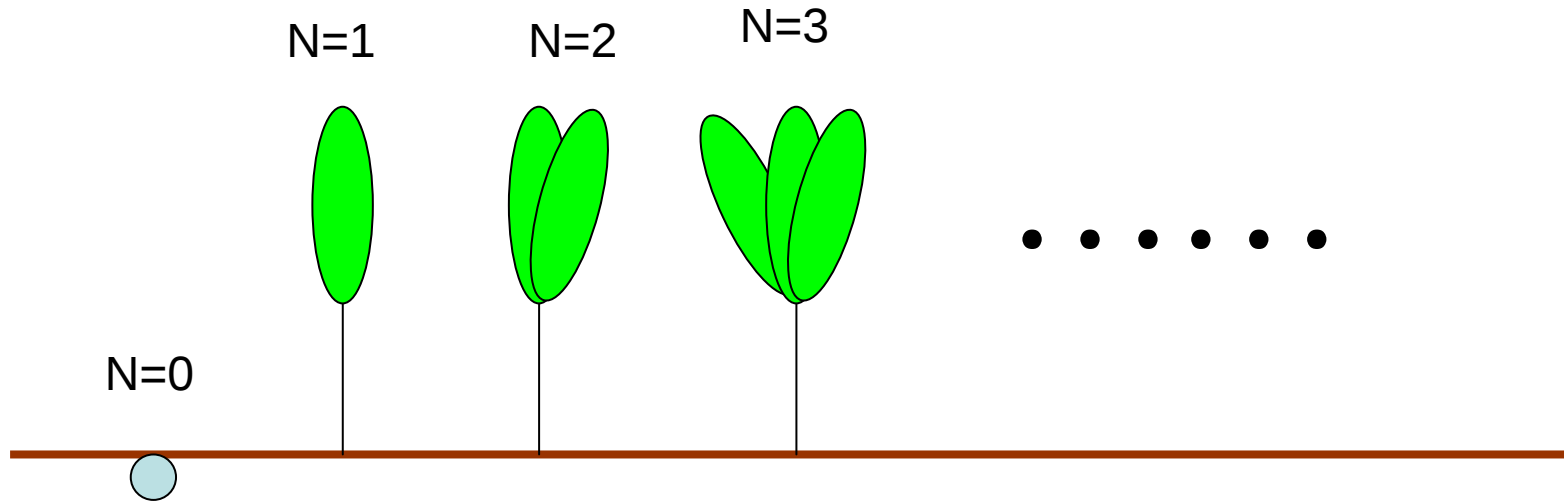
$$\left[\hat{H}_1, \hat{\psi}^\dagger(x_j) \right] = \hbar(x_j) \hat{\psi}^\dagger(x_j) \cdots (8)$$

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)

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

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

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

3次元系、スピン自由度への拡張

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

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

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

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

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

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

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

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 ; $\{n_\alpha, \ell_\alpha, m_\alpha\}$ or $\{\mathbf{k}, \sigma\}$

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

$\hat{C}_\alpha$: 状態 α 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)

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

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

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

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

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

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

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 α, β 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 α を占有する粒子数演算子

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

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

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

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

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

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

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

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

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

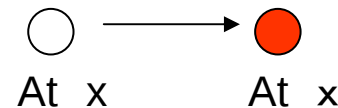
$$\psi(x) = w_{\alpha_1} \cdot \phi_{\alpha_1}(x) + w_{\alpha_2} \cdot \phi_{\alpha_2}(x) + \cdots$$

$$= \sum_\alpha w_\alpha \cdot \phi_\alpha(x) \cdots\cdots(4) \quad w_\alpha : \text{重ね合わせの係数}$$

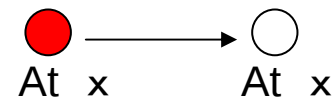
場の生成・消滅演算子

$$\hat{\psi}^\dagger(x) \equiv \sum_\alpha \hat{C}_\alpha^\dagger \cdot \phi_\alpha^*(x) \cdots(5)$$
$$\hat{\psi}(x) \equiv \sum_\alpha \hat{C}_\alpha \cdot \phi_\alpha(x) \cdots(6)$$

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 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

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 ε 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 $\hat{\psi}^\dagger(x)|0\rangle$ 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

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

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

$$\hat{H} \equiv \hat{H}_1 + \hat{V}$$

$$= \int \hat{\psi}^\dagger(x) h(x) \hat{\psi}(x) dx + \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \frac{1}{2} v(x, x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) dx dx'$$

$$= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | h | \beta \rangle \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle \hat{C}_\alpha^\dagger \hat{C}_\beta^\dagger \hat{C}_\delta \hat{C}_\gamma,$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5. 2 場の演算子の拡張

空間固有関数 ϕ_α 、スピン固有関数 χ

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

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

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

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

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

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

スピン自由度だけを含む場合：

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

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

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

J.シュウインガー、「量子力学」、シュプリンガー・フェアラーク
東京、2003年。特に、序文。

D. K. Ferry「デバイス物理のための量子力学」、丸善。1996年。9章。

小出昭一郎「量子力学(II)一改訂版一」、裳華房、1990年。11章。

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。

R.メスター「原子光学」、シュプリンガー・フェアラーク東京、2003年。
8章、量子原子光学。

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。

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。