相対論的量子力学 (Part I Section 1)

氏名：大澤 一仁

この章ではまず量子力学と相対論の考えを見た後
ディラック方程式を見ることで場の量子論がt, xを共に外部
パラメーターとすることを確認する。
その後、空間の各点における演算子の集合である量子場
$a(x)$, $a^\dagger(x)$に交換関係や反交換関係を課すことで
ハミルトニアンHや粒子数を表す演算子Nを導入し、
ボソンとフェルミオンの理論を得る。

量子力学と相対論を結ぶにあたって我々は「量子力学」と
「相対論」とはそもそも何かということを考える必要がある。
まずは「量子力学」のことを考えると、注目すべき原理は
系の時間発展を記述するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi,t\rangle = H|\psi,t\rangle \quad (1.1)$$

H：ハミルトニアン演算子

スピンが無く力も作用しない非相対論的粒子の場合

$$H = \frac{1}{2m}\mathbb{P}^2 \quad (1.2)$$

m：粒子の質量，$\mathbb{P}$：運動量演算子

このとき、位置空間で(1.1)式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,t) \quad (1.3)$$

$\psi(x,t) = \langle x|\psi,t\rangle$：位置空間における波動関数

(1.3)式を相対論的な式にすることを考える。

$$H = +\sqrt{\mathbb{P}^2c^2 + m^2c^4} \quad (1.4)$$

とおくと

$$H = mc^2\sqrt{1+\frac{p^2}{m^2c^2}} \doteq \underbrace{mc^2}_{静止エネルギー} + \underbrace{\frac{1}{2m}p^2}_{運動エネルギー} + \underbrace{\cdots}_{補正項} \quad (1.5)$$

と表されるが、これを(1.3)式に適用すると、以下のようになる。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = +\sqrt{-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4}\ \psi(x,t) \quad (1.6)$$

これは、時間と空間の微分記号がそれぞれルートの外部と内部に有り、相対論から期待される対称性がない。
また、右辺のルートを(1.5)式のように展開すると ∇^n が出て来て良くない。

そこで(1.4)式の両辺を2乗したものを考えると、以下のクライン－ゴルドン方程式が得られる。

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x,t) = (-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)\psi(x,t) \quad (1.7)$$

これは時間と空間の微分が共に二階であり、対称的に見える。
(1.7)式のことをより良く理解するために、次に「相対論」について考える。
ここで以下のようにいくつかの記号を定義する。

$x^\mu = (ct, x) \quad (\mu = 0,1,2,3)$ （すなわち $x^0 = ct,\ x^1 = x,\ x^2 = y,\ x^3 = z$）

(ct, x)：時空座標

$x_0 = -x^0,\ x_i = x^i \quad (i = 1,2,3)$

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & & & 0 \\ & +1 & & \\ & & +1 & \\ 0 & & & +1 \end{pmatrix} \quad (1.8) \qquad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & & & 0 \\ & +1 & & \\ & & +1 & \\ 0 & & & +1 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

これらから以下の等式も成り立つ。

$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu,\quad g^{\mu\nu}g_{\nu\rho} = \delta^\mu{}_\rho,\quad x^\mu = g^{\mu\nu}x_\nu$ $\qquad \delta^\mu{}_\rho$：クロネッカーのデルタ

ただし、繰り返される添え字は和をとる必要があり、これを縮約という。
繰り返される添え字は上下に1つずつで、それ以外の添え字は方程式の左右で記号と上下が一致する必要がある。

特殊相対論によると、座標 $x^\mu, \tilde{x}^\mu$ が共に慣性系を~~表~~表している場合

$$\tilde{x}^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu \quad (1.10)$$

$\Lambda^\mu{}_\nu$：ローレンツ変換行列　，a^μ：並進ベクトル

$(\Lambda^\mu{}_\nu,\ a^\mu$ は定数$)$

という式に従い、$\Lambda^\mu{}_\nu$は以下の式にも従う。

$$g_{\mu\nu}\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\sigma = g_{\rho\sigma} \qquad (1.11)$$

ここで、2時空点間の距離を以下で定義する。

$$(x-x')^2 \equiv g_{\mu\nu}(x-x')^\mu(x-x')^\nu$$
$$= (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')^2 - c^2(t-t')^2 \qquad (1.12)$$

すると、(1.11)式は異なる慣性系の間で2時空点間の距離が不変であることを保障する。

すなわち、ある慣性系上の時空点x^μ, x'^μを別の慣性系上の$\bar{x}^\mu, \bar{x}'^\mu$に移すことを考えると

$$\bar{x}^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu, \quad \bar{x}'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x'^\nu + a^\mu$$

と(1.11)式から以下の等式が成り立つということである。

$$(\bar{x}-\bar{x}')^2 = g_{\mu\nu}(\bar{x}-\bar{x}')^\mu(\bar{x}-\bar{x}')^\nu$$
$$= g_{\mu\nu}\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\sigma(x-x')^\rho(x-x')^\sigma$$
$$= g_{\rho\sigma}(x-x')^\rho(x-x')^\sigma \qquad (1.13)$$
$$= (x-x')^2$$

異なる慣性系上でも同じ物理現象が起きていると考えられるというのはある慣性系上の波動関数ψと異なる慣性系上の波動関数$\bar{\psi}$が任意の同一時空点$x, \bar{x}$において$\psi(x) = \bar{\psi}(\bar{x})$が成り立っているていうことであり、これは任意の慣性系における波動関数は全て同じ形の波動方程式に従っているということである。

以下、クライン－ゴルドン方程式が任意の慣性系で同じ形かを見ていく。
ここでまた記号を定義する。

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right) \qquad (1.14)$$

$$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \nabla\right) \qquad (1.15)$$

これより、次の式も成立

$$\partial^\mu x^\nu = g^{\mu\nu} \qquad (1.16)$$

xと$\bar{x}$の変換が(1.10)式に従っていれば、以下が成立する。

$$\bar{\partial}^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\partial^{\nu} \quad (1.17)$$

これを用いると、確かに以下のようになる。

$$\bar{\partial}^{\rho}\bar{x}^{\sigma} = (\Lambda^{\rho}{}_{\mu}\partial^{\mu})(\Lambda^{\sigma}{}_{\nu}x^{\nu}+a^{\sigma}) = \Lambda^{\rho}{}_{\mu}\Lambda^{\sigma}{}_{\nu}\partial^{\mu}x^{\nu} = \Lambda^{\rho}{}_{\mu}\Lambda^{\sigma}{}_{\nu}g^{\mu\nu}$$
$$= g^{\rho\sigma} \quad (1.18)$$

これらの記号を使うと、(1.7)式は

$$-\hbar^2c^2\partial_0^2\psi(x) = (-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)\psi(x) \quad (1.19)$$

と書け、$\partial^2 \equiv \partial^{\mu}\partial_{\mu} = -\partial_0^2+\nabla^2$ と定義すると、(1.19)式は

$$(-\partial^2+m^2c^4)\psi(x) = 0 \quad (1.20)$$

となる。(1.20)式における慣性系とは別の慣性系では、方程式は以下のようになる。

$$(-\bar{\partial}^2+m^2c^4)\bar{\psi}(\bar{x}) = 0 \quad (1.21)$$

$$\bar{\partial}^2 = g_{\mu\nu}\bar{\partial}^{\mu}\bar{\partial}^{\nu} = g_{\mu\nu}\Lambda^{\mu}{}_{\rho}\Lambda^{\nu}{}_{\sigma}\partial^{\rho}\partial^{\sigma} = g_{\rho\sigma}\partial^{\rho}\partial^{\sigma} = \partial^2 \quad (1.22)$$

が成り立つため、方程式の形は異なる慣性系間において確かに変わらないことが分かった。

これより、クライン－ゴルドン方程式は相対論と矛盾しないことが分かる。

一方、純粋なシュレディンガー方程式は時間に関して一階微分しか含まないが、クライン－ゴルドン方程式は二階微分を含んでいるため、量子力学の原理とした方程式(1.1)には反している。

これは重要でないように見えて、以下のノルム

$$\langle\psi,t|\psi,t\rangle = \int d^3x\langle\psi,t|x\rangle\langle x|\psi,t\rangle = \int d^3x\,\psi^*(x)\psi(x) \quad (1.23)$$

が一般に時間に独立でなくなるなどの大きな影響を及ぼす。

故に、この時は確率が保存されない。

つまり、クライン－ゴルドン方程式は相対論には従うが、量子力学には従わない。

ディラックは波動方程式にスピンを説明するための追加の離散的なラベルを導入することでこの問題を解決しようとした。

$\psi_a(x)$ $(a=1,2)$ として、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_a(x) = \left(-i\hbar c(\alpha^j)_{ab}\partial_j + mc^2(\beta)_{ab}\right)\psi_b(x) \qquad (1.24)$$

α^j, β：スピン空間の行列

シュレディンガー方程式を(1.24)式のように書くことを試みた。

この(1.24)式はディラック方程式と呼ばれ、純粋なシュレディンガー方程式と矛盾しない。

スピンに対するラベルaは状態$|\psi, a, t\rangle$に依り、

またハミルトニアンは以下のように表される。

$$H_{ab} = cP_j(\alpha^j)_{ab} + mc^2(\beta)_{ab} \qquad (1.25) \qquad (j=1,2,3)$$

P_j：運動量演算子の構成要素

ここで、ハミルトニアンを2乗してみると

$$(H^2)_{ab} = c^2P_jP_k(\alpha^j\alpha^k)_{ab} + mc^3P_j(\alpha^j\beta + \beta\alpha^j)_{ab} + (mc^2)^2(\beta^2)_{ab} \qquad (1.26)$$

P_j, P_kは交換可能であるから、(1.26)式と、それにjとkを入れ換えた式を足して2で割ることを考えると、

$\alpha^j\alpha^k$を$\frac{1}{2}\{\alpha^j, \alpha^k\}$で置き換えることができる。

ただし、$\{A, B\} = AB + BA$で、これは反交換子である。

ここで、以下の関係が成立していれば

$$\{\alpha^j, \alpha^k\} = 2\delta^{jk}\delta_{ab}, \quad \{\alpha^j, \beta\}_{ab} = 0, \quad (\beta^2)_{ab} = \delta_{ab} \qquad (1.27)$$

ハミルトニアンの2乗H^2は以下のようになる。

$$(H^2)_{ab} = (\mathbb{P}^2c^2 + m^2c^4)\delta_{ab} \qquad (1.28)$$

よって、H^2の固有状態は$\mathbb{P}$の固有状態で固有値は$\mathbb{P}^2c^2+m^2c^4$としてよい。

これは、相対論におけるエネルギーと運動量の関係である。

(1.27)式を満たす2×2行列は存在せず、α^j, βは偶数次元であるから、
(1.27)式を満たす最小の行列の大きさは4×4であるため、
余分な2つのスピン状態の解釈が残る。(スピン$\frac{1}{2}$の場合)

Problem 1.1 α^i, β が偶数次元であること、
$\beta^2 = I$ であるから (I: 単位行列)、固有値の2乗は1 ∴ βの固有値は±1
また、$T_r(\beta) = T_r(\alpha^{i2}\beta) = T_r(-\alpha^i\beta\alpha^i) = -T_r(\beta\alpha^{i2}) = -T_r(\beta)$
$\alpha^{i2} = I$ 　 $\{\alpha^i, \beta\} = 0$ 　 $T_r(AB) = T_r(BA)$

によって、$T_r(\beta) = 0$
同様に、α^i の固有値は±1, $T_r(\alpha^i) = 0$
これらより、β, α^i は偶数次元でなくてはならない。

このことから、$T_r(H) = 0$ となることが分かり、固有値として
$(E(p) = +(p^2c^2 + m^2c^4)^{\frac{1}{2}})$
$+E(p), +E(p), -E(p), -E(p)$
という4つの固有値があり、負のエネルギー~~角~~が出てくる。
負のエネルギー~~状態~~状態が存在すると、エネルギーを放出していくらでも
エネルギーが低い状態へ移行できてしまうため、問題である。

ディラックはこの解決策としてパウリの排他律に基づき負エネルギー
状態は全て占められているというディラックの~~海~~電子の海と呼ばれる
概念を考え、電子と同等の質量を持ち、電荷が逆の陽電子の
存在を~~予~~予言した。
陽電子は実験で発見されたが、パウリの排他律に従わない
光子などの説明には問題が残っていた。

このことは量子力学においての時間を外部パラメーター, 空間を
位置演算子で考えるという時間と空間の非対称的な
取り扱いが招いたと考えられる。

時間と空間を対称に扱うには時間と空間を共に演算子
にするか、共に外部パラメーターにするかという2つの方法がある。

共に演算子にする場合外部パラメーターとして固有時などを用い、
座標時間や位置座標は演算子となる。
この方法は弦理論の出発点なように実現性はあるが複雑である。

そこで量子場理論では時間と空間を共に外部パラメーターとして扱う方法を採用し、空間の各点xに演算子$\varphi(x)$を割り当てることにする。
このような演算子の集合は量子場と呼ばれる。
ハイゼンベルグ描像では以下のような時間依存性を持つ。

$$\varphi(x,t)=e^{iHt/\hbar}\varphi(x,0)e^{-iHt/\hbar} \qquad (1.29)$$

このように、時間と空間は共に外部パラメーターとなっている。

粒子数を固定したような一般の非相対論的量子力学は量子場理論によって、書き改められる。
n粒子で全て同じ質量、外部ポテンシャル$U(x)$、相互作用ポテンシャル$V(x_1-x_2)$の場合に位置を基底とするシュレディンガー方程式を考えると、以下のようになる

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[\sum_{j=1}^{n}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2+U(x_j)\right)+\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{j-1}V(x_j-x_k)\right]\psi \qquad (1.30)$$

ただし、$\psi=\psi(x_1,\cdots,x_n;t)$は位置空間における波動関数

ここで、量子場$a(x)$, $a^\dagger(x)$を以下のように交換関係を課して導入すると、方程式(1.1)の形式で(1.30)式を書き改められる。

$$[a(x),a(x')]=0$$
$$[a^\dagger(x),a^\dagger(x')]=0 \qquad (1.31) \qquad \delta^3(x-x')：3次元のディラックデルタ$$
$$[a(x),a^\dagger(x')]=\delta^3(x-x')$$

ハミルトニアンHを以下のように導入する

$$H=\int d^3x\, a^\dagger(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x)\right)a(x)+\frac{1}{2}\int d^3x\, d^3y\, V(x-y)a^\dagger(x)a^\dagger(y)a(y)a(x) \qquad (1.32)$$

状態の時間依存性は以下のように考える。

$$|\psi,t\rangle=\int d^3x_1\cdots d^3x_n\,\psi(x_1,\cdots,x_n;t)a^\dagger(x_1)\cdots a^\dagger(x_n)|0\rangle \qquad (1.33)$$

ただし、$\psi(x_1,\cdots,x_n;t)$はn粒子の位置と時間の関数で
$|0\rangle$は真空状態と呼ばれ、任意のxに対し、以下を満たす。

$$a(x)|0\rangle=0 \qquad (1.34)$$

これは粒子がない状態を表し、$a^\dagger(x_1)|0\rangle$は位置x_1に粒子が一つある状態を表す。

また、以下の演算子 N は粒子の総数を数える。

$$N=\int d^3x\, a^\dagger(x)a(x) \qquad (1.35)$$

これはハミルトニアン H と交換するため、粒子数は保存される。

Problem 1.3 $[N,H]=0$

$N=\int d^3x'\, a^\dagger(x')a(x')$ とおくと

$$[N,a(x)]=\int d^3x'(a^\dagger(x')[a(x'),a(x)]+[a^\dagger(x'),a(x)]a(x'))$$

$$=-\int d^3x'\, a(x')\delta(x-x')=-a(x)$$

同様に $[N,a^\dagger(x)]=\int d^3x'\, a^\dagger(x')\delta(x'-x)=a^\dagger(x)$ であるから

$$[N,a^\dagger(x)A(x)a(x)]=a^\dagger(x)A(x)[N,a(x)]+a^\dagger(x)[N,A(x)]a(x)+[N,a^\dagger(x)]A(x)a(x)$$

$$=0$$

ただし、$A(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(x)$ で、$[N,A(x)]=0$

よって、N と H の前半部分との可換性は示せた。

これと、$[N,a^\dagger(x)a^\dagger(y)a(y)a(x)]=a^\dagger(x)[N,a^\dagger(y)]a(y)a(x)+a^\dagger(x)a^\dagger(y)[N,a(y)]a(x)$

$+a^\dagger(x)a^\dagger(y)a(y)[N,a(x)]+[N,a^\dagger(x)]a^\dagger(y)a(y)a(x)$

$$=0$$

によって、N と H の後半部分との可換性も示せることから、

$[N,H]=0$

一方、H に以下のような ΔH を加えると

$$\Delta H\propto\int d^3x[a^\dagger(x)a^2(x)+h.c.] \qquad (1.36)$$

N と H は交換しなくなり、粒子は保たれず、増減する場合も表せる。

生成演算子 $a^\dagger(x)$ は交換関係を満たすから、(1.33)式の積分においては

$$\psi(\cdots x_i\cdots x_j\cdots;t)=+\psi(\cdots x_j\cdots x_i\cdots;t) \qquad (1.37)$$

となる ψ のみを考えればよいことが分かり、これはボーズ－アインシュタイン統計に従うボソンの理論を得たことになる。

一方、(1.31)式を以下の式と置き換えると、

$$\{a(x), a(x')\}=0$$
$$\{a^{\dagger}(x), a^{\dagger}(x')\}=0$$
$$\{a(x), a^{\dagger}(x')\}=\delta^3(x-x') \qquad (1.38)$$

その反交換性から、(1.33)式の積分においては

$$\psi(\cdots x_i \cdots x_j \cdots ; t) = -\psi(\cdots x_j \cdots x_i \cdots ; t) \qquad (1.39)$$

となるψのみを考えればよいことが分かり、これはフェルミ－ディラック統計に従うフェルミオンの理論を得たことになる。

相対論的量子場理論によると、整数スピンを持つ相互作用する粒子はボソン、半整数スピンを持つ相互作用する粒子はフェルミオンである必要がある。

これで、量子場理論で多数のボソンやフェルミオンの非相対論的量子力学を書き改めることができた。