正準量子化

目次

1 場の理論

相対性理論と量子力学は現代物理学の基礎を成す。前者は光速不変の法則や光速に近い運動を記述するため、後者は原子内の電子などミクロなスケールでの運動を記述するために発展した。この両者を統一したものが相対論的場の量子論である。この節では場の理論の基礎を解説する。

1.1 連成バネ振動の量子力学

連成バネ振動系の量子力学は基準座標を用いて独立な調和振動子の集まりとみなせば、量子化を行い、エネルギー固有状態を求めることができる。例えば N 個の質点からなり、周期境界条件 $q_{N+1} = q_1$ を満たす一次元の連成バネ振動系として

$$L = \sum_{n=1}^{N} \frac{m}{2} \left[\left(\frac{dq_n}{dt} \right)^2 - \omega_0^2 q_n^2 - \omega_1^2 \left(q_n - q_{n+1} \right)^2 \right] \tag{1}$$

というラグランジアンを持つ系を考える。この理論はこのまま量子化すると共役運動量は

$$p_n = m\frac{dq_n}{dt} \tag{2}$$

と定まり、正準交換関係が

$$[q_m, p_n] = i\hbar\delta_{mn} \tag{3}$$

で与えられる。

$q_n(n = 1, \cdots, N)$ は数列として周期的なので、

$$\begin{aligned} q_n &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=0}^{N-1}\alpha_k \exp(2\pi ikn/N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=-[(N-1)/2]}^{[(N-1)/2]}\alpha_k \exp(2\pi ikn/N) \end{aligned} \tag{4}$$

とフーリエ分解できる。ここで $k \to k + N$ と置き換えても結果は変わらないので、和の範囲をシフトして、$k = -[(N-1)/2], \cdots, [(N-1)/2]$ と取った。ここで $[\cdots]$ はガウス記号である。以降は特に断らない限り和を $\sum_k$ と略記する。q_n は実数なので $\alpha(-k) = \alpha^\dagger(k)$ が成り立つ。この表式をラグランジアンに代入すると、

$$L = \sum_k \frac{m}{2}\left[\frac{d\alpha_{-k}}{dt}\frac{d\alpha_k}{dt} - \omega_k^2\alpha_{-k}\alpha_k\right] \tag{5}$$

を得る。ただし、$\omega(k) \equiv \sqrt{\omega_0^2 + 4\omega_1^2\sin^2\frac{\pi k}{N}}$ とおいた。これによりこの系は複素された調和振動子の集まりとなる。量子化を行った後は、座標演算子 $\hat{\alpha}(k)$ の共役運動量は $\hat{P}_k = Nm\hat{\alpha}_{-k}$ となり、$[\hat{\alpha}_k, \hat{P}_k] = i\hbar\delta_{k,k'}$ を満たす。ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_k \left[\frac{1}{2m}\hat{P}_{-k}\hat{P}_k + \frac{m\omega_k^2}{2}\hat{\alpha}_{-k}\hat{\alpha}_k\right] \tag{6}$$

となる。前と同様に演算子の順序に注意しながら因数分解すると

$$\hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k \left[\left(\frac{-i\hat{P}_{-k}}{\sqrt{2\hbar m\omega_k}} + \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}}\hat{\alpha}_k\right)\left(\frac{i\hat{P}_k}{\sqrt{2\hbar m\omega_k}} + \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}}\hat{\alpha}_{-k}\right) + \frac{1}{2}\right] \tag{7}$$

そこで生成消滅演算子を

$$\hat{a}_k \equiv \frac{i\hat{P}_{-k}}{\sqrt{2\hbar m\omega_k}} + \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}}\hat{\alpha}_k \tag{8}$$

$$\hat{a}_k^\dagger \equiv \frac{-i\hat{P}_k}{\sqrt{2\hbar m\omega_k}} + \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}}\hat{\alpha}_{-k} \tag{9}$$

と置くと交換関係は $[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}$ でハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_k \hbar\omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k + \frac{1}{2}\right) \tag{10}$$

となる。また、元の座標変数と共役運動量変数は

$$\hat{q}_n = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k N}} \left(\hat{a}_k e^{2\pi ikn/N} + \hat{a}_k^\dagger e^{-2\pi ikn/N} \right) \tag{11}$$

$$\hat{p}_n = \sum_k i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_k}{2N}} \left(-\hat{a}_k e^{2\pi ikn/N} + \hat{a}_k^\dagger e^{-2\pi ikn/N} \right) \tag{12}$$

と表される。

$$[\hat{q}_m, \hat{p}_m] = i\hbar \tag{13}$$

は連成バネ振動系を結晶格子の振動とするとこれは物性系におけるフォノン場の量子化に対応する。

1.2　ボゾン場の理論

電磁場やヒッグス場のようなボソンは波動方程式を満たす。これを量子化するにはどうすれば良いであろうか。そこで、トイモデルとして、空間 1 次元（ 1 + 1 次元時空）のスカラー場の波動を考えることにする。この系の作用は

$$S = \int dt \int dx \frac{1}{2} \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - \left(\frac{Mc}{\hbar} \right)^2 \phi^2 - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right] \tag{14}$$

オイラーラグランジュ方程式は

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \left(\frac{Mc}{\hbar} \right)^2 \phi - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0 \tag{15}$$

となり、確かに波動方程式を満たす。前節の練成バネ振動の量子力学との対応をつけるため、空間を離散化してみよう。まず、空間のサイズを L とし、 1 次元の連続な空間を格子間隔 a、格子点数 $N \equiv L/a$ の格子で置き換える。格子点 x_n は

$$x_n = \frac{n}{N} L = an (n = 1, \cdots, N) \tag{16}$$

である。周期的境界条件を課し、$\phi(x_n + L) = \phi(x_n)$ とする。このことから $x_{n+N} = x_n$ という同一視がなされる。空間微分を差分で置き換えると

$$\left. \frac{\partial \phi(t,x)}{\partial x} \right|_{x=x_n} \to \frac{\phi(t, x_{n+1}) - \phi(t, x_n)}{a} \tag{17}$$

空間積分を和で置き換えると

$$\int dx f(x) \to \sum_{n=1}^{N} a f(x_n) \tag{18}$$

となる。これらを用いて連続空間上の作用を格子上の作用に置き換えると

$$S = \int dt \sum_{n=1}^{N} \frac{a}{2c^2} \left[\left(\frac{d\phi(t, x_n)}{dt} \right)^2 - \left(\frac{Mc^2}{\hbar} \right)^2 \phi(t, x_n)^2 - c^2 \left(\frac{\phi(t, x_{n+1}) - \phi(t, x_n)}{a} \right)^2 \right] \tag{19}$$

この離散化されたスカラー場の作用を式 (1) と比較すると、以下の置き換えで連成バネ振動系と全く等価であることが分かる。

$$q_n(t) \to \phi(t, x_n) \tag{20}$$

$$m \to \frac{a}{c^2} \tag{21}$$

$$\omega_0 \to \frac{Mc^2}{\hbar} \tag{22}$$

$$\omega_1 \to \frac{c}{a} \tag{23}$$

この置き換えに基づくとハミルトニアンは式 (10) で与えられ、k に対応する基準振動の角振動数 $\omega(k)$ は

$$\omega(k) = \sqrt{\left(\frac{Mc^2}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{2c}{a}\sin(\pi ka/L)\right)^2} \tag{24}$$

となる。

1.2.1 連続極限

式 (24) に $\hbar$ をかけてエネルギーの単位にとり、さらに連続極限 $a \to 0$ を取ると

$$\hbar\omega(k) = \sqrt{(Mc^2)^2 + \left(\hbar\frac{2\pi k}{L}c\right)^2} \tag{25}$$

この関係式は波数 $2\pi k/L$ に $\hbar$ をかけたものを量子化された波動の運動量 p とすると $\hbar\omega$ をエネルギー $E(p)$ とすると

$$E(p) = \sqrt{(Mc^2)^2 + (pc)^2} \tag{26}$$

質量 M の相対論的粒子のエネルギーと運動量の関係式を与える。

場の交換関係は

$$\left[q_n, m\frac{dq_{n'}}{dt}\right] = i\hbar\delta_{nn'} \to \left[\phi(t, x_n), \frac{a}{c^2}\frac{d\phi(t, x_{n'})}{dt}\right] = i\hbar\delta_{x_n, x_{n'}} \tag{27}$$

より、$a \to 0$ の極限で、$\frac{1}{a}\delta_{x_n, x_{n'}} \to \delta(x - x')$ に注意すると、

$$\left[\phi(t, x), \frac{\partial\phi(t, x')}{\partial t}\right] = i\hbar c^2\delta(x - x') \tag{28}$$

となる。

1.2.2 無限体積極限

一方、基準座標の生成消滅演算の交換関係はどうなるだろうか。運動量を $p_k = \frac{2\pi\hbar k}{L}$ とおくと、無限体積の極限で $\sum_k \to \int \frac{dp}{2\pi}\frac{L}{\hbar}$ であるから

$$\hat{H} = \sum_k (\hbar\omega_k a_k^\dagger a_k + \text{定数}) \to \int \frac{dp}{2\pi}(\omega(p)a^\dagger(p)a(p) + \text{定数}) \tag{29}$$

となる。ここで $\omega_k \to \omega(p)$, $\sqrt{L}a_k \to a(p), \sqrt{L}a_k^\dagger \to a^\dagger(p)$ とおいた。生成消滅演算子の交換関係は

$$\left[\sqrt{L}a_k, \sqrt{L}a_{k'}^\dagger\right] = L\delta_{k,k'} \to \left[a(p), a^\dagger(p')\right] = 2\pi\delta(p - p') \tag{30}$$

1.3　自由スカラー場の理論の量子化

連成バネ振動の量子力学の連続極限・無限体積極限の結果をまとめると、

$$S = \int dt \int dx \frac{1}{2}\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^2 - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 - \left(\frac{Mc}{\hbar}\phi\right)^2\right] \tag{31}$$

の量子化は、場の演算子 $\hat{\phi}(t,x)$ に対する正準共役運動量演算子を

$$\hat{\Pi}(t,x) \equiv \frac{1}{c^2}\frac{\partial \hat{\phi}(t,x)}{\partial t} \tag{32}$$

とおいて、スカラー場の量子化は、正準共役運動量

$$\left[\hat{\phi}(t,x), \hat{\Pi}(t,x')\right] = i\hbar\delta(x-x') \tag{33}$$

を課すことで得られる。スカラー場を生成・消滅演算子で表すと

$$\phi = \int \frac{dk}{2\pi}\sqrt{\frac{c^2\hbar}{2\omega(k)}}\left(\hat{a}(k)e^{ikx} + \hat{a}^\dagger(k)e^{-ikx}\right) \tag{34}$$

ただし、$\left[\hat{a}(k), \hat{a}^\dagger(k')\right] = 2\pi\delta(k-k')$ となる。またこの系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \int \frac{dk}{2\pi}\hbar\omega(k)\hat{a}^\dagger(k)\hat{a}(k) \tag{35}$$

で与えられる。場の理論と多体系の量子力学との関係は付録で述べる。

1.4　フェルミオン

これまでボーズ粒子の場の理論について述べてきたが、フェルミオンの場の理論はどうであろうか。フェルミオンもボゾンと同様に生成・消滅演算子を用いて

$$\phi = \int \frac{dk}{2\pi}\sqrt{\frac{c^2\hbar}{2\omega(k)}}\left(\hat{b}(k)e^{ikx} + \hat{b}^\dagger(k)e^{-ikx}\right) \tag{36}$$

と書けるであろう。ただし、ここで生成・消滅演算子は次の反交換関係を満たすものとする。

$$\left\{\hat{b}(k), \hat{b}^\dagger(k')\right\} = 2\pi\delta(k-k') \tag{37}$$

2　拘束系の量子力学

力学系が座標変数 q^i $(i=1,\cdots,N)$ によって

$$S = \int dt L(q,\dot{q}) \tag{38}$$

で与えられるとき、オイラー・ラグランジェ方程式によって時間発展がえられる。

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (i=1,\cdots,N) \tag{39}$$

しかし、量子力学を念頭におくと、この系の時間発展を正準形式で取り扱う必要がある。ここでは、まず古典論での正準形式を考える。正準形式の正しい取り扱いを知った後で、$i\times$「古典論における2つの物理量についての括弧式」を「量子論における2つの物理量の交換関係」と同一視することで量子化の定義とする。

まず共役運動量を

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (i = 1, \cdots, N) \tag{40}$$

で定義し、$\dot{q}_i$ を p_i で表してから、ハミルトニアンを

$$H(q,p) = \sum_{i=1}^{N} \dot{q}_i p_i - L \tag{41}$$

によって q, p の関数として得ることができれば良い。

問題: いかなるラグランジアンに対しても、必ず $\dot{q}_i$ を p_i で表すことができるのか？

に対する答えは「ノー」である。それではどう取り扱えば良いか、というのがここでのメインテーマである。

2.1 特異系、一次的拘束条件、弱い等式

そこで式 (40) において q を固定して、$\dot{q}$ の変分をとってみよう。p の変分は

$$\delta p_i = \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \dot{q}_j} \delta \dot{q}_j \tag{42}$$

となるので、行列 $\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \dot{q}_j}$ が逆を持てば、$\dot{q}$ を p の関数として求められそうである。しかし、例えば

- ラグランジアンが $\dot{q}$ について一次までの項しか持たない
- ラクランジアンに未定乗数に対応する変数が含まれており、そもそも $\dot{q}$ の項が全くない

などの理由で行列が逆を持たない場合がある。このような系を**特異系 (singluar system)**と呼ぶ[*1]

特異系の場合に行列 $\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \dot{q}_j}$ のランクを $M_1 < N$ としよう。このときは力学データ $(q_i, \dot{q}_i)$ の $2N$ 個の変数に対して、位相空間内のデータ $(q_i, p_i(q, \dot{q}))$ の $2N$ 個の変数は $q, \dot{q}$ を変化させても p_i が応答しない方向がある。これは (物理的な) 位相空間 (q, p) の張る空間は $2N$ 次元ではなく $N + M_1$ 次元に落ちていることを意味する。すなわち $N - M_1$ 個の拘束条件

$$\phi_A(q,p) = 0 \quad (A = 1, \cdots, M_1) \tag{43}$$

で指定される超曲面に制限される。これを**一次的拘束条件 (primary constraint)**と呼ぶ。式 (41) で変分をとると

$$\begin{aligned} \delta H(q,p) &= \sum_{i=1}^{N} \left(\delta \dot{q}_i p_i + \dot{q}_i \delta p_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_I} \delta \dot{q}_i \right) \\ &= \sum_{i=1}^{N} \left(\dot{q}_i \delta p_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i \right) \end{aligned} \tag{44}$$

---

*1 このような場合でもオイラーラグランジュ方程式は常に存在するので正準形式を諦めて、ラグランジアン形式にとどまれば系の記述は可能である。問題は正準量子化を念頭に正準形式をどう取り扱うかである。

となり、ハミルトニアンは $\dot{q}$ には依存せず、q, p のみに依存することもわかる。式 (44) と H の変分の定義

$$\delta H(q,p) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i \right) \tag{45}$$

を比較すると、

$$\sum_{i=1}^{N} \left(\left(-\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i + \left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i \right) = 0 \tag{46}$$

となるが、(q, p) は拘束条件のせいで

$$\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial \phi_A}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial \phi_A}{\partial p_i} \delta p_i \right) = 0, \quad (A = 1, \cdots, M_1) \tag{47}$$

を満たす変分に制限されているため式 (46) の変分の係数がそれぞれゼロになることを意味しない。正しくは、ラグランジェの未定乗数法を用いて

$$\begin{aligned} -\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} - \sum_A \frac{\partial \phi_A}{\partial q_i} \lambda^A = 0 \\ \dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} - \sum_A \frac{\partial \phi_A}{\partial p_i} \lambda^A = 0 \end{aligned} \tag{48}$$

となる。ここで λ^A は未定乗数である。オイラーラグランジュ方程式 $\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)$ と運動量の定義式 $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ を用いると、上の二式は

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} + \sum_A \frac{\partial \phi_A}{\partial p_i} \lambda^A \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} - \sum_A \frac{\partial \phi_A}{\partial q_i} \lambda^A \end{aligned} \tag{49}$$

と書き換えられ、正準方程式に似た式が得られた。さて、ラグランジュの未定乗数法は拘束条件を忘れて広い空間で微分を考えるものであるが、この考え方を推し進めて、形式的な 2N 次元の位相空間 $q_i, p_i \ \ (i = 1, \cdots, N)$ での正準形式を考えることにしよう。そこでポアソン括弧式を

$$\{A, B\}_{PB} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right) \tag{50}$$

と定義する。運動方程式 (49) は

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \{q_i, H\}_{PB} + \sum_A \{q_i, \phi_A\}_{PB} \lambda^A = \left\{ q_i, H + \sum_A \phi_A \lambda^A \right\}_{PB} - \sum_A \phi_A \left\{ q_i, \lambda^A \right\}_{PB} \\ \dot{p}_i &= \{p_i, H\}_{PB} + \sum_A \{p_i, \phi_A\}_{PB} \lambda^A = \left\{ p_i, H + \sum_A \phi_A \lambda^A \right\}_{PB} - \sum_A \phi_A \left\{ p_i, \lambda^A \right\}_{PB} \end{aligned} \tag{51}$$

となる。ここで記号 $\approx$ は「拘束条件 $\phi_A = 0 \ \ (A = 1, \cdots, M_1)$ を満たす物理的な位相空間上で等しい」ということを表すものとして定義しよう。この等式を<u>弱い等式</u>と呼ぶ。すると運動方程式は弱い等式の意味で

$$\tilde{H} = H + \sum_A \phi_A \lambda^A \tag{52}$$

をハミルトニアンとする正準方程式

$$
\begin{aligned}
\dot{q}_i &\approx \left\{q_i, \tilde{H}\right\}_{PB} \\
\dot{p}_i &\approx \left\{p_i, \tilde{H}\right\}_{PB}
\end{aligned} \tag{53}
$$

を満たすことが言える。

2.2　二次的拘束条件

位相空間を形式的に広げてしまったので、話を閉じさせるためには拘束条件自体が時間発展で成り立たなくなることがないように制限する (λ^A を適切に選ぶ）必要がある。そこで式 (51) を用いて拘束条件そのものの時間発展が弱い等式の意味でゼロとなることを要請する。

$$
\dot{\phi}_A = \{\phi_A, H\}_{PB} + \sum_B \{\phi_A, \phi_B\}_{PB} \lambda^B \approx 0 \tag{54}
$$

行列 $\{\phi_A, \phi_B\}_{PB}$ が物理的な位相空間上で逆を持てば、λ^A がすべて決定できる。しかし、一般的には逆を持たない場合がありうる。そのときは拘束条件の線型結合を取り直すと

$$
\{\phi_A, \phi_B\}_{PB} = \begin{pmatrix} \{\phi_\alpha, \phi_\alpha\}_{PB} & \{\phi_\alpha, \phi_a\}_{PB} \\ \{\phi_a, \phi_\beta\}_{PB} & \{\phi_a, \phi_b\}_{PB} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{\alpha\beta} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\mathrm{det} C \neq 0) \tag{55}
$$

という形に帰着できるだろう。このとき $\lambda^A = (\lambda^\alpha, \lambda^a)$ とおくと式 (54) のうち $\dot{\phi}_\alpha$ が弱い等式の意味でゼロであること満たすためには λ^α を

$$
\lambda^\alpha = -\sum_\beta (C^{-1})^{\alpha\beta} \{\phi_\beta, H\}_{PB} \tag{56}
$$

と選べば良いことがわかる。一方、$\dot{\phi}_a$ に対しては λ が関与する項は全て消えるので拘束条件

$$
\{\phi_a, H\} \approx 0 \tag{57}
$$

が必要となる。左辺は元の拘束条件によって自動的に弱い等式の意味でゼロである場合もあるが、一般的には新たな拘束条件を生み出すこともある。あらたな拘束条件を**二次的拘束条件 (secondary constraint)**と呼ぶ。改めて未定乗数 λ^α を決定した後での物理量 O に対する運動方程式は

$$
\dot{O} = \{O, H\}_{PB} - \sum_{\alpha,\beta} \{O, \phi_\alpha\}_{PB} (C^{-1})^{\alpha\beta} \{\phi_\beta, H\}_{PB} + \sum_a \{O, \phi_a\} \lambda^a \tag{58}
$$

となる。ここで α は第二種拘束条件のラベル、a は第一種拘束条件のラベルである。

2.3　第一種拘束条件、第二種拘束条件

二次的拘束条件が得られたら、これを 1 次的拘束条件と合わせて、改めて同じプロセスを繰り返す。すなわち、

すべての拘束条件 $\Rightarrow$ 拘束条件の発展方程式 $\Rightarrow$ 未定乗数λの決定＋あらたな二次的拘束条件の追加

このプロセスを繰り返し、あらたな二次的拘束条件が生まれなくなったらそこで終了する。終了した結果、全ての一次的拘束条件、二次的拘束条件を合わせて式 (55) のようにポアソン括弧式をとったとき ϕ_a に対

応する部分を**第一種拘束条件 (first class constraint)** ポアソン括弧式をとったとき ϕ_α に対応する部分を**第二種拘束条件 (first class constraint)** と呼ぶ。第一種拘束条件は全ての拘束条件とのポアソン交換関係が弱い等式の意味でゼロである。第二種拘束条件はそれら同士でのポアソン交換関係から得られる行列が逆を持つ。このとき第二種拘束条件をあらわに解いて、余分な変数を消去すれば話は一見簡単そうに見える。しかし場の理論においては、系の対称性を壊す又は非局所性を生むなど不便なことが起こるので、余分な変数を残したまま別の取り扱いをすることが標準的である。

2.4 第二種拘束条件の取り扱い

運動方程式 (58) を見ると第二種拘束条件に関しては特殊な項が付け加わっていることに気づく。これはもちろん、時間発展で系が拘束条件から外れないようにする抗力のような働きをする項である。これをヒントにディラックは以下のディラック括弧を定義した。

$$\{A,B\}_{DB} = \{A,B\}_{PB} - \sum_{\alpha,\beta} \{A,\phi_\alpha\}_{PB} (C^{-1})^{\alpha\beta} \{\phi_\beta, B\}_{PB} \tag{59}$$

このディラック括弧は実は第二種拘束条件を解いて物理的な変数のみで系を記述したときの通常のポアソン括弧と一致することが証明できるが、ここでは省略する。詳しくは九後汰一郎著「ゲージ場の理論 I」を参照してほしい。物理量 O の時間発展は (58) より

$$\dot{O} = \{O,H\}_{DB} + \sum_a \{O,\phi_a\} \lambda^a \tag{60}$$

となり、時間発展はハミルトニアンとのディラックブラケットを用いてコンパクトに表される。ただし、第一種拘束条件からの寄与は決めることのできない未定乗数を含んだままで残る。

2.5 第一種拘束条件の取り扱い

式 (60) からわかるように第一種拘束条件があると物理量の発展は原理的に決まらない。決まらない方向は (q,p) に対しては

$$\delta q^i = \left\{q^i, \phi_a\right\}_{PB} \tag{61}$$
$$\delta p_i = \{p_i, \phi_a\}_{PB} \tag{62}$$

であり正準変換で表せる。このことは系にゲージ対称性があり、式 (62) は ϕ_a を母関数とするゲージ変換であると解釈される。この場合、拘束条件の取り扱いに 2 通りのやり方がある。

2.5.1 ゲージ固定による方法

時間発展の決まらなさはゲージ自由度なので、人為的に勝手なゲージ固定条件 $\chi_a = 0$ をおく。ただし、これによって λ^a が決定できるようにしたいので、

$$\det\{\chi_a, \phi_b\} \neq 0 \tag{63}$$

つまり、ゲージ条件も拘束条件と再解釈した場合には第二種拘束条件となるようにする必要がある。

2.5.2　物理状態に対する補助条件による方法

古典的物理量を量子的演算子に、ディラック括弧式を i 倍したものを交換関係に、という置き換えで量子化を行う。その段階で演算子の作用する状態に対して、物理的状態 $|\mathrm{phys}\rangle$ について

$$\phi_a|\mathrm{phys}\rangle = 0 \tag{64}$$

という補助条件を課して状態空間を制限する。以前の古典論による議論で拘束条件が新たに出なくなるまでプロセスを繰り返した結果

$$\{\phi_a, H\} \approx 0 \tag{65}$$

となるはずだから、量子論では第一種拘束条件は第一種拘束条件分のおつりをのぞいて交換する、したがってハミルトニアンで時間発展した後でも物理的状態に対する補助条件が成り立つことは保たれる。また、λ^a は決まらなかった。しかし、補助条件のおかげで別に何に選んでも、物理的状態の時間発展に影響しない。従って補助条件を課すやり方の場合はゲージ固定は不要である。

3　ゲージ理論の正準量子化

3.1　量子電磁気力学 (QED)

QED のラグランジアンは

$$F^a_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \tag{66}$$

$$D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu \quad (g = eQ) \tag{67}$$

とおいて

$$\begin{aligned} L &= -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi \\ &= \frac{1}{2}\sum_i (F_{0i})^2 - \sum_{i,j}\frac{1}{4}(F_{ij})^2 - A_\mu J^\mu + \bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi \quad (\text{where } J^\mu = g\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) \end{aligned} \tag{68}$$

で与えられる。ゲージ場の共役運動量は

$$\pi_{A_0} = 0 \tag{69}$$

$$\pi_{A_i} = F_{0i} = \dot{A}_i - \partial_i A_0 \tag{70}$$

となる。π_{A_0} は一次的拘束 $\phi_1 = \pi_{A_0}$ を与える。これにより $\dot{A}_i = \pi_{A_i} + \partial_i A_0$ と逆解きができてハミルトニアンは以下で与えられる。

$$\begin{aligned} H &= \int d^3x \left(\dot{A}_0\pi_{A_0} + \sum_i \dot{A}_i\pi_{A_i} - L \right) \\ &= \int d^3x \left(\dot{A}_0\pi_{A_0} + \sum_i (\pi_{A_i} + \partial_i A_0)\pi_{A_i} - \frac{1}{2}\sum_i \pi_{A_i}^2 + \frac{1}{4}\sum_{i,j} F_{ij}^2 + A_\mu J^\mu + \cdots \right) \\ &= \int d^3x \left(\dot{A}_0\pi_{A_0} + A_0(-\partial_i\pi_{A_i} + J^0) + \frac{1}{2}\sum_i\sum_i \pi_{A_i}^2 + \frac{1}{4}\sum_{i,j} F_{ij}^2 + \sum_i A_i J^i + \cdots \right) \end{aligned} \tag{71}$$

一時的拘束条件 $\phi_1(x) \approx 0$ が時間発展しないための条件は

$$\{\phi_1(x), H\}_{PB} = \{\pi_{A_0}(x), H\}_{PB} = \sum_i \partial_i \pi_{A_i} - J^0 \approx 0 \tag{72}$$

である。$\phi_2 = \sum_i \partial_i \pi_{A_i} - J^0$ が 2 次的拘束条件となる。ϕ_1, ϕ_2 のポアソン交換関係をとってみるとゼロとなることがわかるので、第一種拘束条件であり、かつこれ以上の 2 次的拘束条件はでないことがわかる。まとめると拘束条件は

$$\phi_1 \quad = \pi_{A_0} \approx 0 \tag{73}$$

$$\phi_2 = \sum_i \partial_i \pi_{A_i} - J^0 \approx 0 \tag{74}$$

で、これらは第一種拘束条件である。ϕ_2 は**ガウス則拘束条件 (Gauss law constraint)**と呼ばれる。

3.1.1 クーロンゲージ

クーロンゲージとは第一種拘束条件の取り扱いのところで述べたゲージ固定による方法を採用している。拘束条件 ϕ_1, ϕ_2 に対応して、手で以下のゲージ条件を課す。

$$\chi_1 = A_0 \approx 0 \tag{75}$$

$$\chi_2 = \sum_i \partial_i A_i \approx 0 \tag{76}$$

これにより、拘束条件を第二種拘束条件にすることができる。

3.1.2 共変ゲージ

共変ゲージはいったん経路積分量子化に移り、そこで経路積分の値を変えないように

1. ラグランジアンにゲージ固定項を加え、
2. Faddeev-Poppov ゴーストを導入する。

この新しい系に対して改めて正準量子化を行う。この意味で経路積分を経由しなければ定義できない量子化方法である。しかし、それでも正準量子化には、BRS 不変な状態を物理的状態と定義することでユニタリ性の証明（九後-小嶋) が可能となるなどのメリットがある。

付録 A 調和振動子

場の量子論の基礎となるのが、調和振動子である。これについて復習してみよう。

A.0.1 1 自由度系

質量 m, 角振動数 ω の 1 自由度の調和振動子の作用は

$$S = \int dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 - \frac{m\omega^2}{2} q^2 \right] \tag{77}$$

で与えられる。ここで q は振動子の位置を表す座標自由度である。量子力学に則って物理量を演算子とみなす。座標演算子は $\hat{q}$、共役運動量演算子は $\hat{p} = m\frac{d\hat{q}}{dt}$ であり、交換関係

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \tag{78}$$

を満たす。[*2]これからハミルトニアン $\hat{H}$ を作ると

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 \tag{79}$$

となる。交換関係を用いつつ、演算子の順序に注意しながら因数分解すると

$$\hat{H} = \hbar\omega \left\{ \left(\frac{-i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} \right) \left(\frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} \right) - \frac{i}{2\hbar}[\hat{q}, \hat{p}] \right\} \tag{80}$$

と書き換えられる。そこで、生成・消滅演算子 $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ を

$$\hat{a}^\dagger := \frac{-i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q}, \hat{a} := \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} \tag{81}$$

と定義すると、生成・消滅演算子の交換関係は $[a, \hat{a}] = 1$ で、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \tag{82}$$

となる。この系の基底状態 $|0\rangle$ は $\hat{a}|0\rangle = 0$ を満たす。$\left[H, \hat{a}^\dagger\right] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$ より、基底状態に $\hat{a}^\dagger$ を n 回作用させた状態 $\left(\hat{a}^\dagger\right)^n |0\rangle$ はエネルギー固有状態となる。従ってエネルギー準位は

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{83}$$

となる。

付録 B　場の理論と多体系の量子力学との関係

ハミルトニアンは個数演算子

$$\hat{N} = \int \frac{dk}{2\pi} \hat{a}^\dagger(k)\hat{a}(k) \tag{84}$$

と交換するので、自由スカラー場の量子力学では個数（粒子数）は保存する。そこで、一粒子状態 $|\psi(t)\rangle$ を考えよう。これは調和振動子の基底状態に色々な運動量の生成演算子を 1 つ作用させた状態の重ね合わせで書ける。

$$|\psi(t)\rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(t, k)\hat{a}^\dagger(k)|0\rangle \tag{85}$$

ここで、$\tilde{\psi}(t, k)$ は重ね合わせを表す係数関数である。シュレーディンガー描像での状態の時間発展は

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{86}$$

で与えられる。この方程式を一粒子状態に当てはめると、係数関数に対して

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(t, k) = \sqrt{(Mc^2)^2 + (kc)^2}\tilde{\psi}(t, k) \tag{87}$$

[*2] 2 つの演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ の交換関係は $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ で定義される。

となる。運動量が質量に比べて小さいとき、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(t,k)=\left[Mc^2+\frac{k^2}{2M}+\cdots\right]\tilde{\psi}(t,k) \tag{88}$$

となる。最初の項は静止質量エネルギーである。この項をエネルギーの原点をシフトして取り除くと非相対論的なシュレーディンガー方程式の運動量表示そのものとなる。N 粒子状態は

$$|\psi(t)\rangle=\int\prod_{i=1}^{N}\frac{dk}{2\pi}\tilde{\psi}(t,k_1,\cdots,k_N)\prod_{i=1}^{N}\hat{a}^\dagger(k_i)|0\rangle \tag{89}$$

ここで、$\tilde{\psi}(t,k_1,\cdots,k_N)$ は重ね合わせを表す係数関数であり、運動量 $k_1,\cdots,k_N$ について自動的に対称化されている。この状態にシュレーディンガー方程式を当てはめると、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(t,k_1,\cdots,k_N)=\sum_{i=1}^{N}\sqrt{(Mc^2)^2+(k_ic)^2}\;\tilde{\psi}(t,k_1,\cdots,k_N) \tag{90}$$

となる。以上のことから相対論的自由スカラー場の量子論は一粒子の量子力学系を含み、かつボーズ統計に従う同種粒子の多体系をひとまとめに取り扱うことができることがわかる。ここでは自由場を取り扱ったが、相互作用がある場合は一般にはハミルトニアンが粒子数を保存しないので、時間発展に伴って粒子数の変化が起こりうる。

付録 C　ゲージ理論と正準量子化

正準形式において、時として座標変数と共役運動量が拘束条件を満たす場合がある。ゲージ理論はその一例である。そこでまず拘束系の正準形式を考え、それをゲージ理論に適用しよう。

C.1　拘束系の量子力学

まず初めに例として、以下のような力学系のラグランジアンを考えよう。

$$L=\frac{m}{2}\dot{q}^2-V(q) \tag{91}$$

この系の共役運動量は $p=m\dot{q}$ であり、ハミルトニアンは

$$H=\dot{q}p-L=\frac{p^2}{2m}+V(q) \tag{92}$$

である。正準方程式は

$$\dot{q}=\{q,H\}_{PB}=\frac{p}{m} \tag{93}$$

$$\dot{p}=\{p,H\}_{PB}=-V'(q) \tag{94}$$

である。さて、式 (92) よりラグランジアンは以下のようにも書ける。

$$L=\dot{q}p-\frac{p^2}{2m}-V(q) \tag{95}$$

ここで、あえて q,p は独立な座標変数とみなすことにしよう。これに対するオイラーラグランジュ方程式は

$$\dot{p}=-V'(q) \tag{96}$$

$$\dot{q}\quad=\frac{p}{m} \tag{97}$$

となる。このオイラーラグランジュ方程式はハミルトニアン (92) を用いた正準方程式と同じである。その意味で、この系は q のみの 2nd order formalism でも、p, q を用いた 1st order formalism でも古典論としては同じ運動方程式を与える。しかし、量子力学を念頭にラグランジアン (97) に対して正準形式を適用するとどうなるだろうか。q に対する共役運動量を Π_q, p に対する共役運動量を Π_p と置くと

$$\Pi_q = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p \tag{98}$$

$$\Pi_p = \frac{\partial L}{\partial \dot{p}} = 0 \tag{99}$$

ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= \dot{q}\Pi_q + \dot{p}\Pi_p - L \\ &= \dot{q}(\Pi_q - p) + \dot{p}\Pi_p + \frac{p^2}{2m} + V(q) \end{aligned} \tag{100}$$