****

シュレーディンガーの方程式を満たす場の方程式

2003. 6. 20 by KENZOU

****

【序】

シュレーディンガーの方程式を満たす場の方程式は如何なるものか。以下に調べるが、あっと愕く結果が. . .

§ 1. シュレーディンガー場からBose粒子が飛び出す

シュレーディンガーの方程式は泣く子も知っているが、電子の波動関数を記述する方程式ですね。電子はFermi統計に従う粒子（電子以外に陽電子、ニュートリノ、μ中間子、中性子等）であるのに、Bose粒子（光子、π中間子等）が飛びだしてきた。。。？？？

1）シュレーディンガーの方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{1}$$

2) $\psi(\boldsymbol{x},t)$をFourie変換する（但し、場が一辺Lの立方体の中に限られているとする）

$$\psi(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k a_{\boldsymbol{k}}(t)exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) \tag{2}$$

【蛇足】

・ここで空間変数についてのFourie変換は指数関数部が慣例により$exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})$と書かれるのでなく$exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})$と書かれることに注意してください。$a_k,\ a_k^\dagger$は場の量子論では生成消滅演算子と呼ばれる。

3) ②を①に代入する

$$\frac{1}{\sqrt{V}}i\hbar\sum_k\frac{d}{dt}a_{\boldsymbol{k}}(t)exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{k}^2a_{\boldsymbol{k}}(t)exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) \tag{3}$$

各係数は等しいから

$$\therefore\quad i\hbar\frac{d}{dt}a_{\boldsymbol{k}}(t) = \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2a_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{4}$$

この複素共役式も成り立つから

$$i\hbar\frac{d}{dt}a_{\boldsymbol{k}}^\dagger(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2a_{\boldsymbol{k}}^\dagger(t) \tag{5}$$

4) 新たに正準共役変数を導入する

$$q_{\boldsymbol{k}}(t) \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2w_k}}\left\{a_{\boldsymbol{k}}(t) + a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)\right\} \tag{6. a}$$

$$p_{\boldsymbol{k}}(t) \equiv -i\sqrt{\frac{\hbar w_k}{2}}\left\{a_{\boldsymbol{k}}(t) - a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)\right\} \tag{6. b}$$

但し、$w_k = \dfrac{\hbar}{2m}\boldsymbol{k}^2$ (7)

5) 新しい正準変数を方程式 (4)、(5) に代入する

$$\dot{q}_{\boldsymbol{k}}(t) \equiv i\sqrt{\frac{\hbar}{2w_k}}\left\{\dot{a}_{\boldsymbol{k}}(t) + \dot{a}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)\right\}$$

$$= i\sqrt{\frac{\hbar}{2w_k}}\left\{w_{\boldsymbol{k}}\,\boldsymbol{k}^2\left(-a_{\boldsymbol{k}}(t) + a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)\right)\right\}$$

$$= -i\sqrt{\frac{\hbar w_k}{2}}\left\{a_{\boldsymbol{k}}(t) - a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)\right\}$$

$$= p_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{8}$$

同様にして

$$\dot{p}_k(t) = -w_k^2 q_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{9}$$

6）シュレーディンガーの場の方程式は調和振動子の方程式に還元された。

$$\dot{q}_{\boldsymbol{k}}(t) = p_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{10}$$

$$\dot{p}_k(t) = -w_k^2 q_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{11}$$

なんと (10)、(11) 式はまさに調和振動子の運動方程式ではないか！！

7）シュレーディンガー場のHamiltonian (くどい計算だが念のため)

$$H = \frac{1}{2}\sum_k\left[p_k^2(t) + w_k^2 q_k^2(t)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\sum_k \hbar w_k\left[a_k a_k^{\dagger} + a_k^{\dagger} a_k\right]$$

$$= \frac{1}{2}\sum_k \hbar w_k\left[2a_k^{\dagger} a_k + 1\right]$$

$$= \sum_k \hbar w_k \left[a_k^\dagger a_k \right] + \frac{1}{2} \sum_k \hbar w_k \tag{12}$$

ここで次の交換関係を使った

$$\left[a_k , a_{k'}^\dagger \right] = d_{kk'} \tag{13}$$

8) 生成消滅演算子 (この演算子がどうして生まれたかはhttp://hb3.seikyou.ne.jp/home/E-Yama/のCoffeeBreakを参照)

$a_k^\dagger a_k$ の固有値は0, 1, 2, ・・・ となるから、シュレーディンガー場のHamiltonianは $\boldsymbol{k}$ というラベルを持ったエネルギー量子 $\hbar w_k$ が0個、1個、2個、・・・と存在しうることになります。この意味で、これらの量子は **Bose 統計** に従う粒子となります。

※ここでアレッと思われた方は鋭い。シュレーディンガーの方程式は電子の振る舞いを記述するものではないか！！電子は **Fermi統計**に従う。なぜ、光子のような Bose 統計に従う粒子がでてきたのだ。。。しからばFermi 粒子はでてこないのか？この問題はセクション2で考える。

さて、ラベル $\boldsymbol{k}$ をもった量子は運動量 $\hbar \boldsymbol{k}$ を持ちますから、(7) の関係により量子のエネルギーと運動量の関係は

$$\hbar w_k = \frac{1}{2m} (\hbar \boldsymbol{k})^2 \tag{14}$$

となって、古典的な粒子と同じものとなります。

§2．シュレーディンガー場から Fermi粒子が飛び出す

9) §1－2) と同様に Fourie変換する。

$$y(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k C_{\boldsymbol{k}}(t) \exp (i\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{x}) \tag{15}$$

ここで展開係数が異なっていることに留意してください。

10) 調和振動子の方程式を導出する。

この計算は§1－3)～ 6) と全く同様に計算できます。（TRYしてみてください）

11) 正準交換関係を定義する。

Fourie係数の $C_{\boldsymbol{k}}$ が満たす交換関係 (反交換関係ともいう)を次のように定義します。

$$C_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}'}^\dagger + C_{\boldsymbol{k}}^\dagger C_{\boldsymbol{k}'} \equiv \left\{ C_{\boldsymbol{k}}, C_{\boldsymbol{k}'}^\dagger \right\} = d_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{16}$$

$$C_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}'} + C_{\boldsymbol{k}'} C_{\boldsymbol{k}} \equiv \left\{ C_{\boldsymbol{k}}, C_{\boldsymbol{k}'} \right\} = 0 \tag{17}$$

12) Hamiltonianを書く。

$$H=\sum_{k}\hbar w_k C_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} C_{\boldsymbol{k}'} \tag{18}$$

となります。TRY してみてください。

13) $C_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} C_{\boldsymbol{k}'}$ の固有値

$C_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} C_{\boldsymbol{k}}$ の固有値は 0, 1 の2つしかありません。つまり、$\hbar w_k$ というエネルギーをもった量子は0個か1個しかあり得ないということです。これはまさにFermi統計に従う粒子ということになります。

§3．おわり

シュレーディンガーの波動関数をFourier変換し、その係数（振幅）が調和振動子の運動方程式を満たしました。そして係数に正準交換関係を課するとＢｏｓｅ粒子が飛び出し、反交換関係を課するとFermi粒子が飛び出しました。
シュレーディンガーの方程式は電子の運動方程式だから、それからＢｏｓｅ粒子が飛び出したのにはギョ!とした方も多いのではないでしょうか。かく言う小生もナンだコリャと衝撃を受けました。しかし、シュレーディンガーの波動方程式も普通の数学的な偏微分方程式であると考え、もともとそのような解（?）を内臓しているのだと考えれば気が楽になりますね。

まぁ、それはよいとして、しからばどのようなときにＦｅｒｍｉ粒子の演算子を使い、どのようなときにＢｏｓｅ粒子の演算子を仮定するのか、、、この答えは残念ながら非相対論的な場の理論の中にはないらしい。相対論的場の理論まで待たなければならないということになります。なかなか道は険しいですね。そこでそのあたりの事情を伺うべく相対論的場の理論を少し覗いてみますと

整数スピンをもった場（スカラー場やベクトル場：湯川粒子、フォノン、光子など）ではＢｏｓｅ演算子を使い、半奇数スピンをもった場（電子、陽子、中性子など）に対してはFermi演算子を用いなければいけない、

ということになるようです。

ほとんど纏まりのないレポートとなりましたが、これ以上のことは各自の興味に従って奮戦してください。

（以上）

参考書：高橋康 著 「物理数学ノート Ⅰ、Ⅱ」 1999年7月10日 第3刷 講談社サイエンティフィック