# 初等場の量子論 (3)

KENZOU

2005 年 12 月 18 日

「初等場の量子論」も第 3 章に入りました。第 2 章では調和振動子の議論を生成消滅演算子 $a, a^\dagger$ を使っておこない，その運動の様子を調べました。固有状態を重ね合わせた波束の運動を考え，コヒーレント状態と呼ばれる状態を詳しく調べました。いよいよ第 3 章です。ここでは，結合振動子を調べます。これは第 1 章で調べたものの一般化です。したがって生成消滅演算子も $a_s, a_s^\dagger$ のようにサフィックスの付いたものとなります。さぁ，それではそろそろ参りましょうか。

## 3　結合振動子

### 3.1　ハミルトニアンの固有値

閉じた線状に並んだ振動子が隣接振動子間の相互作用を持ち，さらにその各振動子がその平衡点まわりに束縛されている場合を考える。この系のハミルトニアンと運動方程式は

$\Omega$ : 隣接原子間からの弾性定数（←→）

$\Omega_0$ : 平衡点回りの束縛力弾性定数（破線の伸び）

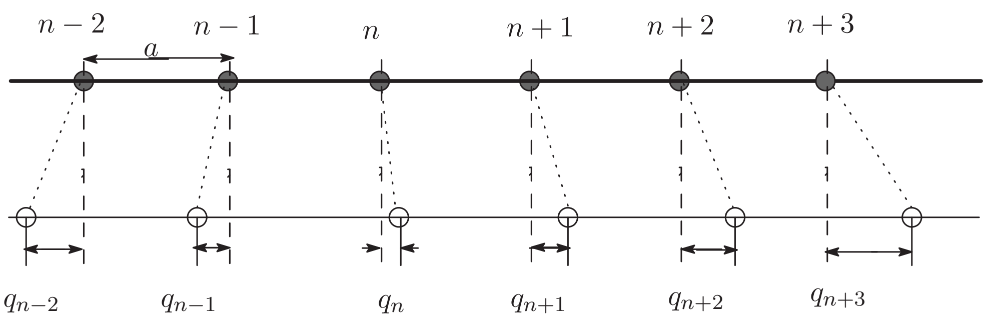


図 4: 平衡点回りに束縛された原子振動子

$$\left.\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}[p_n^2 + \Omega^2(q_n - q_{n+1})^2 + \Omega_0^2 q_n^2] \\ \ddot{q}_n &= \dot{p}_n = -\frac{\partial H}{\partial q_n} = \Omega^2(q_{n+1} + q_{n-1} - 2q_n) - \Omega_0^2 q_n \end{aligned}\right\} \tag{111}$$

となる。第 2 の独立な振動数 $\Omega_0$ を零に取れば (4) のハミルトニアンになる。連続体の極限では (4) は**質量が 0 の場**に対応し，(111) は**質量 $\Omega$ の場**に対応することがあとで明らかになる (らしい、、、)。交換関係を次のように設定する。

$$[q_\ell, p_m] = i\delta_\ell, m \qquad [q_\ell, q_m] = [p_\ell, p_m] = 0 \tag{112}$$

次に規準座標を導入する[1]。

$$q_n = \sum_s e^{isn} Q_s N^{-\frac{1}{2}} \qquad p_n = \sum_s e^{-isn} P_s N^{-\frac{1}{2}} \tag{113}$$

新変数に対する交換関係は $q, p$ の交換関係と $\sum_{n=1}^{N} e^{in(s-s')} = N\delta_{s,s'}$ を使って

$$[Q_\ell,\, P_m] = i\delta_{\ell,m} \qquad [Q_\ell,\, Q_m] = [P_\ell,\, P_m] = 0 \tag{114}$$

となることが容易に示せる。$q_n$ と $p_n$ はエルミート演算子 ($q_n^\dagger = q_n$) であるから,

$$Q_{-s} = Q_s^\dagger \qquad P_{-s} = P_s^\dagger \tag{115}$$

規準座標を使ったハミルトニアンは

$$\left.\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\sum_s (P_s P_s^\dagger + \omega_s^2 Q_s Q_s^\dagger) \\ \omega_s^2 &= \Omega^2 \left(2sin\frac{s}{2}\right)^2 + \Omega_0^2 \end{aligned}\right\} \tag{116}$$

となる。この辺の式の展開は第 1 章で詳しくやったのでここでは省略する[2]。第 2 章で導入したのと同様に次の生成消滅演算子を導入する。

$$\left.\begin{aligned} a_s &= \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(\omega_s Q_s + iP_s^\dagger) \\ a_s^\dagger &= \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(\omega_s Q_s^\dagger - iP_s) \end{aligned}\right\} \tag{117}$$

あるいは

$$\left.\begin{aligned} Q_s &= \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(a_s + a_s^\dagger) \\ P_s &= -i\left(\frac{\omega_s}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a_s - a_s^\dagger) \end{aligned}\right\} \tag{118}$$

ここで $a_s$ はエルミートでないので $a_s \neq a_s^\dagger$。また，周期境界条件より $s = 2\pi\ell/N$, $-N/2 \leq \ell \leq N/2$ に対応して $2N$ 個の独立な演算子 $a_s, a_s^\dagger$ があることになる。$a_s$ と $a_s^\dagger$ の交換関係は

$$[a_s,\, a_{s'}^\dagger] = \delta_{s,s'} \tag{119a}$$

$$[a_s,\, a_{s'}] = [a_s^\dagger,\, a_{s'}^\dagger] = 0 \tag{119b}$$

ハミルトニアン (116) を生成消滅演算子で書き換えると

$$H = \sum_s \omega_s \left(a_s^\dagger a_s + \frac{1}{2}\right) = \sum_s \omega_s \left(N_s + \frac{1}{2}\right) \qquad N_s = a_s^\dagger a_s \tag{120}$$

となる。演算子 $N_s$ の固有値は第 2 章と同様にして求められ,

$$n_s = 0,\, 1,\, 2,\, \cdots, \infty \qquad (s = 1, 2, \cdots)$$

となる。規格直交化固有ベクトルは (64) が一般化されて

$$|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots n_N!}}(a_1^\dagger)^{n_1}(a_2^\dagger)^{n_2}\cdots(a_N^\dagger)^{n_N}|0\rangle = \prod_{\ell=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{n!}}(a_\ell^\dagger)^{n_\ell}|0\rangle \tag{121}$$

[1] フーリエ変換

[2] ここでは $q_n^2 = \sum_s Q_s Q_s^*$ となることに留意すればよい。

で与えられる。ただし $|0\rangle$ は

$$N_s|0\rangle = 0 \tag{122}$$

$$a_s|0\rangle = 0 \tag{123}$$

$$\langle 0|0\rangle = 1 \tag{124}$$

を満たす真空状態である。最低エネルギーの固有値ならびに一般の固有値は

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle \longrightarrow E_0 = \frac{1}{2}\sum \omega_s \tag{125a}$$

$$H|n_1 n_2 \cdots n_N\rangle = E|n_1 n_2 \cdots n_N\rangle = \sum_s \omega_s \left(N_s + \frac{1}{2}\right)|n_1 n_2 \cdots n_N\rangle \tag{125b}$$

$$E = E_0 + \sum_s n_s\,\omega_s \qquad (n_s = 0,\,1,\,\cdots) \tag{125c}$$

エネルギー固有値 (125) が基本振動数の整数倍で表されることから，場はエネルギー $\omega_1$ の粒子を $n_1$ 個，エネルギー $\omega_2$ の粒子を $n_2$ 個，$\cdots$ 等含む状態のように振舞うことがわかる。いま，扱っている系は弾性波であるから，ここで現れる量子はフォノンとよばれ，粒子はボーズ粒子とよばれる。

**＜ Calc Check ＞**

**■ $Q_s,\,P_s$ の導出**

$$\left.\begin{aligned} a_s &= \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(\omega_s Q_s + iP_s^\dagger) \\ a_{-s}^\dagger &= \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(\omega_s Q_{-s}^\dagger - iP_{-s}) = \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(\omega_s Q_s - iP_s^\dagger) \end{aligned}\right\} \quad \text{から} \quad Q_s = \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(a_s + a_{-s}^\dagger)$$

同様に

$$\left.\begin{aligned} a_s^\dagger &= \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(\omega_s Q_s^\dagger - iP_s) \\ a_{-s} &= \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(\omega_s Q_{-s} + iP_{-s}^\dagger) = \frac{1}{(2\omega_s)^{\frac{1}{2}}}(\omega_s Q_s^\dagger + iP_s) \end{aligned}\right\} \quad \text{から} \quad P_s = -i\left(\frac{\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a_s - a_{-s}^\dagger)$$

**■交換関係**

$$\begin{aligned} [a_s,\,a_{s'}^\dagger] &= \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\omega_s}\sqrt{\omega_{s'}}}\left\{(\omega_s Q_s + iP_s^\dagger)(\omega_{s'} Q_{s'}^\dagger - iP_s') - (\omega_{s'} Q_{s'}^\dagger - iP_{s'})(\omega_s Q_s + iP_s^\dagger)\right\} \\ &= \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\omega_s}\sqrt{\omega_{s'}}}\left\{\omega_s\omega_{s'}[Q_s,\,Q_{s'}^\dagger] - i\omega_s[Q_s,\,P_{s'}] - i\omega_{s'}[Q_{s'}^\dagger,\,P_s^\dagger] + [P_s^\dagger,\,P_{s'}]\right\} \\ &= \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\omega_s}\sqrt{\omega_{s'}}}(\omega_s\delta_{s,s'} + \omega_{s'}\delta_{s,s'}) \\ &= \delta_{s,s'} \end{aligned}$$

同様に計算して

$$[a_s,\,a_{s'}] = [a_s^\dagger,\,a_{s'}^\dagger] = 0$$

**■ハミルトニアン**

$$PsPs^\dagger = \left(\frac{\omega_s}{2}\right)(a_{-s} - a_s^\dagger)(a_{-s}^\dagger - a_s) = \left(\frac{\omega_s}{2}\right)(a_{-s}a_{-s}^\dagger - a_{-s}a_s - a_s^\dagger a_{-s}^\dagger + a_s^\dagger a_s)$$

$$Q_sQ_s^\dagger = \left(\frac{1}{2\omega_s}\right)(a_s + a_{-s}^\dagger)(a_s^\dagger + a_s) = \left(\frac{1}{2\omega_s}\right)(a_s a_s^\dagger + a_s a_s - a_{-s}^\dagger a_s^\dagger + a_{-s}^\dagger a_{-s})$$

$$\therefore \qquad \sum_s(PsPs^\dagger + \omega_s^2 Q_sQ_s^\dagger) = \sum_s \omega_s(a_{-s}^\dagger a_{-s} + a_s^\dagger a_s + 1) = \sum_s \omega_s(2a_s^\dagger a_s + 1)$$

$$H = \frac{1}{2}\sum_s(P_sP_s^\dagger + \omega_s^2 Q_sQ_s^\dagger) = \sum_s \omega_s\left(a_s^\dagger a_s + \frac{1}{2}\right)$$

### 3.2 量子論的な特徴

ゼロ点エネルギーは $s$ のとりうる範囲と (116) と (125) より，$N\Omega_0/2$ と $N((2\Omega)^2+\Omega_0^2)^{\frac{1}{2}}/2$ の間にあることがわかる。ここで［テキスト］には，素粒子の場におけるゼロ点エネルギーの深刻な問題が書かれているので以下にそのまま引用することとする。

「素粒子の場では，自由度 $N$ が無限大であるから，ゼロ点エネルギーも無限大になる。しかし，相対論的不変性の要求によれば，ゼロ点エネルギーはゼロでなければならない。というのは，粒子が全く存在しない状態はいかなるローレンツ系からみても同じに見えなければならないが，ゼロ点エネルギーの存在がこの不変性を破るのである。したがって素粒子の場に対しては，$H-E_0$ をエネルギーの定義とすることによって，ゼロ点エネルギーを取り除くことにする。しかし，いつか，ゼロ点念ルギーのもつ深い意味が見出される日が恐らくくるであろう。

$n$ 番目の原子のゼロ点振動は第 2 章の議論と同様に $\langle 0|\, q_n |\, 0\rangle = 0$ であるから[3]

$$(\Delta q_n)^2 = \left\langle 0\left|q_n^2\right|0\right\rangle = \sum_{s,s'} \frac{e^{i(s-s')n}}{N}\left\langle 0\left|Q_s Q_s^\dagger\right|0\right\rangle \tag{126a}$$

$$= \left(\frac{1}{2\omega_s}\right)\sum_{s,s'} \frac{e^{i(s-s')n}}{N}\left\langle 0\left|(a_s a_s^\dagger + a_s a_s - a_{-s}^\dagger a_s^\dagger + a_{-s}^\dagger a_{-s})\right|0\right\rangle \tag{126b}$$

$$= \left(\frac{1}{2\omega_s}\right)\sum_{s,s'} \frac{e^{i(s-s')n}}{N}\left\langle 0\left|a_s a_s^\dagger\right|0\right\rangle \tag{126c}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{s}\frac{1}{2\omega_s} \tag{126d}$$

$n$ 番目の原子の座標 $q_n$ は (113) で規準座標 $Q_s$ とフーリエ変換の関係で結ばれているので，$q_n$ はいろんな $Q_s$ で構成されていることになる。異なる規準振動に属する量子論的揺らぎは独立であるから，$n$ 番目の原子の位置の揺らぎの自乗は，いろんな規準座標の振動数 $\omega_s$ に対する揺らぎの平均値となることは当然であろう[4]。結晶格子を構成する原子の揺らぎの振幅は核半径と原子半径の中間にあり，原子が軽いほど（$\Omega_0$ が小さいほど），また，原子間力が弱いほど（$\Omega$ が小さいほど）揺らぎが激しくなることが分かる。

### 3.3 力学的な側面

場の演算子 $a_s$ の時間的変化はハイゼンベルグの運動方程式 $\dot{A}_H(t) = i[H,\, A_H(t)]$ で表される。ハイゼンベルグの運動方程式より $\dot{a}_s(t) = -i\omega_s a_s(t)$。これを積分して $a_s(t) = e^{-i\omega_s t}a_s(0)$ この複素共役をとると $a_s^\dagger(t) = e^{i\omega_s t}a_s^\dagger(0)$ これから座標 $q_n(t)$ は次式で求められる。

[3]具体的な計算のやり方は第 1 章 (14) 式や第 2 章 (80) 式等を参照されたい。
[4](80) 式の $(\Delta q)^2 = \frac{1}{2\omega}$ を思いだそう

$$
\begin{aligned}
q_n(t) &= \sum_s e^{isn} Q_s N^{-\frac{1}{2}} \\
&= \sum_s (2N\omega_s)^{-\frac{1}{2}} \left( e^{isn} a_s(t) + e^{isn} a_s^\dagger(t) \right) \\
&= \sum_s (2N\omega_s)^{-\frac{1}{2}} \left( e^{i(sn-\omega_s t)} a_s(0) + e^{i(sn+\omega_s t)} a_{-s}^\dagger(0) \right) \\
&= \sum_{s>0} (2N\omega_s)^{-\frac{1}{2}} \left( e^{i(sn-\omega_s t)} a_s(0) + e^{-i(sn-\omega_s t)} a_s^\dagger(0) + e^{-i(sn+\omega_s t)} a_{-s}(0) + e^{i(sn+\omega_s t)} a_{-s}^\dagger(0) \right) \\
&= \sum_s (2N\omega_s)^{-\frac{1}{2}} \left[ e^{i(sn-\omega_s t)} a_s(0) + e^{-i(sn-\omega_s t)} a_s^\dagger(0) \right]
\end{aligned}
\tag{127}
$$

これは右向き平面波 $\left(e^{i(sn-\omega_s}\right)$ と左向き平面波 $\left(e^{-i(sn-\omega_s)}\right)$ の重ね合わせで，固有振動 $\omega_s$ の一般的な重ね合わせとなっている。運動方程式は

$$
\ddot{q}_n(t) = -\sum_s {\omega_s}^2 (2N\omega_s)^{-\frac{1}{2}} \left[ e^{i(sn-\omega_s t)} a_s(0) + e^{-i(sn-\omega_s t)} a_s^\dagger(0) \right] \tag{128}
$$

となって，古典論の運動方程式 (28) の解と同じ時間依存性を示す。
次ぎにコヒーレント状態を調べてみよう。$n$ 番目の波束が時刻 $t=0$ で平衡点から $d_{n'}$ だけずれているような波束の状態 $|d_i\rangle$ の一般形は

$$
a_s|d_i\rangle = \left(\frac{\omega_s}{2N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n'} e^{-isn'} d_{n'} |d_i\rangle \tag{129}
$$

で定義される。$a_s$ はエルミート演算子でないから，その固有値は複素数となる。$d_n$ が実数なら (129) より

$$
\langle d_i|a_s^\dagger = \left(\frac{\omega_s}{2N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n'} e^{isn'} d_{n'} \langle d_i| \tag{130}
$$

時刻 $t$ における振動子の位置は次ぎの期待値で表される。

$$
\begin{aligned}
\langle d\,|q_n(t)|\,d\rangle &= \sum_s (2N\omega_s)^{-\frac{1}{2}} \left\langle d \left| e^{i(sn-\omega_s t)} a_s(0) + e^{-i(sn-\omega_s t)} a_s^\dagger(0) \right| d \right\rangle \\
&= \sum_s (2N\omega_s)^{-\frac{1}{2}} \left[ \left\langle d \left| e^{i(sn-\omega_s t)} a_s(0) \right| d \right\rangle + \left\langle d \left| e^{-i(sn-\omega_s t)} a_s^\dagger(0) \right| d \right\rangle \right]
\end{aligned}
$$

$$
\left\langle d \left| e^{i(sn-\omega_s t)} a_s(0) \right| d \right\rangle = \sum_{s,n'} \left(\frac{\omega_s}{2N}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\{(n-n')s-\omega_s t\}} d_{n'} \langle d|d\rangle = \sum_{s,n'} \left(\frac{\omega_s}{2N}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\{(n-n')s-\omega_s t\}} d_{n'}
$$

$$
\left\langle d \left| e^{-i(sn-\omega_s t)} a_s^\dagger(0) \right| d \right\rangle = \sum_{s,n'} \left(\frac{\omega_s}{2N}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\{(n-n')s-\omega_s t\}} d_{n'} \langle d|d\rangle = \sum_{s,n'} \left(\frac{\omega_s}{2N}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\{(n-n')s-\omega_s t\}} d_{n'}
$$

であるから，これを右辺に代入すると

$$
\begin{aligned}
\langle d\,|q_n(t)|\,d\rangle &= \frac{1}{2N} \sum_{s,n'} d_{n'} \left[ e^{i\{(n-n')s-\omega_s t\}} + e^{-i\{(n-n')s-\omega_s t\}} \right] \\
&= \sum_{s,n'} \frac{1}{N} d_{n'}\, cos\left[ s(n-n') - \omega_s t \right]
\end{aligned}
\tag{131}
$$

最後の式は実数部をとった。これは古典的な振動運動 ($x = Acos(\omega t + \delta)$) に対応している。
唯一の振動数 $\omega_s$ と振幅 $d$ をもつ巨視的な音波は (129) で，$d_n$ を複素数 $d_n = de^{is'n}$ として与えられる。この状態を $|d_i\rangle$ の代わりに $|\omega_{s'}\rangle$ と書くと，$\sum_n e^{in(s-s')} = N\delta_{s,s'}$ を使って (129) は

$$a_s|\omega_{s'}\rangle = \left(\frac{\omega_s}{2N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n'} e^{-isn'} de^{isn'}|\omega_{s'}\rangle = d\delta_{s,s'}\left(\frac{1}{2}N\omega_s\right)^{\frac{1}{2}}|\omega_{s'}\rangle \tag{132}$$

となる。(132) と第 2 章の (100) を見比べ，フォノンの平均個数を求めると

$$\left[a(0)d\rangle = (\omega/2)^{\frac{1}{2}}d|d\rangle \longrightarrow \text{フォノンの平均個数 } n = \frac{\omega d^2}{2} \quad \cdots \text{第 2 章参照}\right] \text{ これから}$$

$$a_s|\omega_a\rangle = (dN^{\frac{1}{2}})(\omega_s/2)^{\frac{1}{2}}|\omega_s\rangle \longrightarrow \text{フォノンの平均個数 } n = \frac{Nd^2\omega_s}{2}$$

となる。時間に依存する解は

$$\langle q_n(t)|\omega_{s'}\rangle = \psi_{ds'}\left(q_n(t)\right) \propto exp\left[-\frac{1}{2}\omega_{s'}\left(q_n - \sum_{n'} d_{n'}e^{i(s'n-s'n'-\omega_{s'}t)}\right)^2\right] \tag{133}$$

で与えられる。平均の位置は

$$\langle d|\, q_n|\, d\rangle = dcos(s'n - \omega_{s'}t) \tag{134}$$

となる。

*Memo*

上の (133)(134) をまともに算出するのはしんどいので (笑い)，第 2 章の (108)(109)

$$\psi_d(q'(t)) \propto exp[-\frac{1}{2}\omega(q' - de^{-i\omega t})^2], \quad \langle d\,|q(t)|\,d\rangle = dcos\omega t$$

から，求める解の姿を類推することにしよう。
まず (133) は，(129) と $d_n = de^{is'n}$ を使って (108) 式の $d$ を $d \to \sum_{n'} e^{-isn'}d_{n'} = \sum_{n'} e^{-isn'}de^{is'n}$ で置き換えればでてくる。次ぎに (134) は

$$\sum_{n'} d_{n'}e^{i(s'n-\omega_{s'}t)} \cdot e^{-is'n'} = de^{i(s'n-\omega_{s'}t}$$

この実数部をとるとよい。

この古典的振動運動を観測するためには，ずれ $d$ がゼロ点振動の振幅，これは (126d) より $1/(N\omega_{s'})^{\frac{1}{2}}$ 程度であるが，これよりもはるかに大きくなければならない。つまり，この観測可能条件は

$$d \gg \frac{1}{(N\omega_{s'})^{\frac{1}{2}}} \longrightarrow Nd^2\omega_{s'} \gg 1$$

となる。ところで，フォノンの平均個数は $Nd^2\omega_{s'}/2$ であったから，この条件の意味するところは，フォノンの平均個数が 1 個よりはるかに多くなければだめだということを意味している。一定数 $n'$ 個のフォノンを含む状態での位置座標の期待値 $\langle n'|\, q|\, n'\rangle$ は 0 である[5]。このため，フォノンに対応する波の位相を決定することは不可能とよく言われる。

---

お疲れ様でした。これで第 3 章を終わります。次はいよいよ第 4 章「場」に入ります。お楽しみに〜。。。

[5]フォノンはいろんな位置に分布するがその平均の位置は $x = 0$ である。調和振動子のケースを調べてみよう。