調和振動子と粒子像

場の量子論をはじめる前にまず、もっとも単純な調和振動子を取り上げて消滅生成演算子を活用してみよう。

ここでは、c ならびに $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ をともに 1 とする単位系を用いる。

古典力学　調和振動子の運動方程式　$\ddot{q} = -\omega^2 q$　　ラグランジアン　$L = \dfrac{1}{2}(\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)$

正準変数を用いれば　$\dot{q} = p,\ \dot{p} = -\omega^2 q$　　①

$H = \dfrac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2)$　ハミルトニアン　　②

量子化　正準交換関係　$[q, p] = i$　　③

ここで p, q のかわりに次式で定義される演算子 $a, a^\dagger$ を導入する。

$$a = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(q + \frac{i}{\omega}p\right),\quad a^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2}}\left(q - \frac{i}{\omega}p\right) \qquad ④$$

逆に解くと、$q = \dfrac{1}{\sqrt{2\omega}}(a + a^\dagger)$,　$p = -i\sqrt{\dfrac{\omega}{2}}(a - a^\dagger)$　　④′

このとき③、②より、$[a, a^\dagger] = 1$,　$H = \dfrac{\omega}{2}\{a^\dagger, a\} = \omega a^\dagger a + \dfrac{\omega}{2}$　　$\{A, B\} = AB + BA$　　⑤

これより　$[H, a^\dagger] = \omega a^\dagger$,　$[H, a] = -\omega a$　　⑥

またハイゼンベルクの方程式（演算子 A が時間 t を陽に含んでいなければ $\dot{A} = i[H, A]$）と⑥を組み合わせたものは、①を与え、調和振動子を与えることがわかる。

$$\dot{q} = i[H, q] = i\left[H, \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(a + a^\dagger)\right] = -i\omega\frac{1}{\sqrt{2\omega}}(a - a^\dagger) = p$$

$$\dot{p} = i[H, p] = i\left[H, -i\sqrt{\frac{\omega}{2}}(a - a^\dagger)\right] = -\omega\sqrt{\frac{\omega}{2}}(a + a^\dagger) = -\omega^2 q$$

さて⑥からは、E を H の固有値、これに対応した固有状態を $|E>$ と書くとき、$a^\dagger|E>$, $a|E>$ はもし 0 でなければ、いずれも H の固有状態であり、対応する固有値は $E+\omega$, $E-\omega$ であることがわかる。

$$Ha^\dagger|E> = (a^\dagger H + \omega a^\dagger)|E> = (E+\omega)a^\dagger|E>$$

$$Ha|E> = (aH - \omega a)|E> = (E-\omega)a|E>$$

つまり、$a^\dagger$, a の作用は、エネルギー量子 1 個の生成、消滅をひきおこすことになる。このように p, q よりも $a^\dagger$, a を使った方が粒子像がはっきりする。

言うまでもなく⑤の形をした $a^\dagger$, a は、「生成消滅演算子」に見た Bose 演算子である。

$a^\dagger a$ の固有値は、$0, 1, 2, 3, \cdots\cdots, \infty$ である。

$H = \omega a^\dagger a + \dfrac{\omega}{2}$ の固有値は、$E_n = \omega\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$　　$n = 0, 1, \cdots\cdots$ となる。$\dfrac{\omega}{2}$ は零点エネルギー。

しかし、エネルギー量子を導くのに⑤のかわりに例えば

$$\{a^\dagger, a^\dagger\} = \{a, a\} = 0,\quad \{a, a^\dagger\} = 1,\quad H = \frac{\omega}{2}[a^\dagger, a] = \omega a^\dagger a - \frac{\omega}{2} \qquad ⑦$$

としても⑥が成立する *。これは Fermi 演算子である。

この場合、$a^{\dagger 2} = 0$ となりエネルギー量子が２回以上存在することは許されない。H の固有値は、$\dfrac{\omega}{2}$ と $-\dfrac{\omega}{2}$ の２つのみである（$a^\dagger a$ の固有値は、0 か 1 のみ）。

⑤、⑦以外でもエネルギー量子を導く具体例はいろいろある。しかし、ここにあげた２つの場合がもっとも簡単であって、しかもこれらは現実的にも意味をもつものであることが経験的に知られている。

※　⑦、④を同時に成立させるとなると、p, q の関係性も大きく書き換えなくてはならないだろう。
例えば、

$$H = i\omega qp,\quad \{p, q\} = 0,\quad p^2 = \frac{\omega}{2},\quad q^2 = \frac{1}{2\omega}$$

これらの結果を多数の調和振動子がある場合に拡張すれば、⑥に相応して

$$[H,\ a_j^{\dagger}] = \omega_j a_j^{\dagger}, \quad [H,\ a_j] = -\omega_j a_j \qquad ⑧$$

を得る。このとき⑤、⑦の拡張としてそれぞれ

$$[a_j,\ a_k] = [a_j^{\dagger},\ a_k^{\dagger}] = 0, \quad [a_j,\ a_k^{\dagger}] = \delta_{jk}, \quad H = \sum_j \frac{\omega_j}{2}\{a_j^{\dagger},\ a_j\} + cost \qquad ⑨$$

および

$$\{a_j,\ a_k\} = \{a_j^{\dagger},\ a_k^{\dagger}\} = 0, \quad \{a_j,\ a_k^{\dagger}\} = \delta_{jk}, \quad H = \sum_j \frac{\omega_j}{2}[a_j^{\dagger},\ a_j] + cost \qquad ⑩$$

が得られる。（拡張としてこれ以外のものが許されないことは、ある種の条件のもとに示すことができる。）

⑨で記述される粒子はボース統計に従うといい、これに対して⑩で記述される粒子はフェルミ統計に従うという。後者の場合、$a_j^{\dagger 2} = 0$ となるので同じ運動のモードを２個の粒子が同時にとることが禁止される。
これとスピンと統計の関係（整数スピンの粒子はボース統計に、半整数スピンの粒子はフェルミ統計に従う）を組み合わせれば、パウリの排他原理＝半整数スピンをもつ２個以上の同種粒子が同時に同じ状態にあることは許されないということが導かれる。
また、$\hat{a}_j,\ \hat{a}'_{j'}$（$\hat{a}_j$ は a_j または $a_j^{\dagger}$）が異なる粒子に対応するとき両者の間の交換関係は、いずれか一方がボース統計に従っていれば $[\hat{a}_j,\ \hat{a}'_{j'}] = 0$、ともにフェルミ統計に従うときには $\{\hat{a}_j,\ \hat{a}'_{j'}\} = 0$ としても一般性を失わないことが証明されている。