公開：2020 年 9 月 3 日　改訂：2020 年 9 月 25 日

非相対論的量子力学における生成・消滅演算子の方法（いわゆる「第二量子化」）の手引き

田崎晴明*

これは非相対論的な多体量子系における生成・消滅演算子の方法（フォック表現、「第二量子化の方法」とも呼ばれる）についての完結した（そして、多分、読みやすい）解説である[1]。波動関数の形式での通常の量子力学の知識だけを前提に、生成演算子と消滅演算子を導入し、これら演算子を用いて多体系の状態や演算子がどのように表現されるかをみる[2]。

このノートの内容は全て完全に標準的であり、ここにまとめた定義や（反）交換関係の導出の方法も多くの人に知られている。また、このノートのスタイルは通常の物理の文献よりは数学的だが、数学的に完全に厳密に書くつもりはもともとない[3]。

目次

* hal.tasaki@gakushuin.ac.jp

[1] これは以前に発表した以下の解説の（かなり忠実な）日本語訳である。
Hal Tasaki, *Introduction to the "second quantization" formalism for non-relativistic quantum mechanics: A possible substitution for Sections 6.7 and 6.8 of Feynman's "Statistical Mechanics"*
`https://arxiv.org/abs/1812.10732`
英語版のタイトルからもわかるように、もともとはファインマンの教科書の二つの節の代わりに読んでもらうことを想定して書いたので、これら二つの節のほとんどの内容をカバーしている。実際、研究室の四年生の輪講では（ファインマンの代わりに）英語版を丁寧に読んで発表してもらった。

[2] **専門家向けの注：**ここでは、生成・消滅演算子の（反）交換関係を天下りに宣言するのではなく導出する。そういう意味では、ここでの議論は上記のファインマンの教科書に近い。ただ、ファインマンは最初からスレーター行列式状態（と、そのボソン版）を徹底的に使っているのに対し、ここでは一般の N 体の波動関数に演算子がどのように作用するかを見ている。このように話を進めた方が見通しがいいと期待している。

[3] 数学にうるさい読者は演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ と $\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k})$ の扱いがいい加減だと思うはずだ。いずれにせよ、ここで扱うのは有限個の粒子の量子力学なので、これらも適切な数学的な概念を用いれば厳密に扱うことができる。

1　多粒子系の波動関数

■1 粒子　まず、通常の量子力学で、電子や原子などの粒子を一つだけ扱う場合を復習しておこう。3 次元空間にある粒子の（ある瞬間における）状態は、位置 $\boldsymbol{r} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ の複素数値の関数である波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r})$ で記述される。波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r})$ は二乗可積分の条件

$$\int d^3\boldsymbol{r}\, |\varphi(\boldsymbol{r})|^2 < \infty \tag{1.1}$$

を満たす。条件 (1.1) を満たす全ての波動関数の集合を $\mathcal{H}_1$ と表わし、1 粒子ヒルベルト空間と呼ぶ。恒等的にゼロに等しい関数も $\mathcal{H}_1$ の元とみなすが、この関数（だけ）は物理的状態とは対応しない。

ここでは「数学者風」の書き方をして、波動関数 $\varphi(\boldsymbol{r})$（ここで $\boldsymbol{r}$ は全空間 $\mathbb{R}^3$ を動く）をひとまとめにして $\boldsymbol{\varphi}$ と表わす。（量子状態のブラ・ケット表記は後から出てくるフォック表現にだけ使うことにする。）二つの状態（波動関数）$\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} \in \mathcal{H}_1$ の内積をいつものように

$$\langle \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} \rangle := \int d^3\boldsymbol{r}\, \{\varphi(\boldsymbol{r})\}^*\, \psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.2}$$

と定める。状態 $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}_1$ のノルムは $\|\boldsymbol{\varphi}\| := \sqrt{\langle \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi} \rangle}$ と定義する。

■区別できる多粒子　本題に入る前に、互いに区別できる多粒子の系について見ておこう。

まず、粒子二つの系を考え、それぞれの粒子を粒子 1、粒子 2 と呼ぼう。今、粒子 1 が 1 粒子状態 $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}_1$ をとっており、粒子 2 が 1 粒子状態 $\boldsymbol{\psi} \in \mathcal{H}_1$ をとっているとする。粒子 1 と粒子 2 の位置座標をそれぞれ $\boldsymbol{r}_1$, $\boldsymbol{r}_2$ とすると、この場合の全系の状態は $\varphi(\boldsymbol{r}_1)\, \psi(\boldsymbol{r}_2)$ という波動関数で表現されるだろう。これは一座標の組 $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ の複素数値関数である。同様に、2 粒子系の状態として $\kappa(\boldsymbol{r}_1)\, \eta(\boldsymbol{r}_2)$ を考えることもできる。すると、重ね合わせの原理から、$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ を係数とした重ね合わせ状態 $\alpha\, \varphi(\boldsymbol{r}_1)\, \psi(\boldsymbol{r}_2) + \beta\, \kappa(\boldsymbol{r}_1)\, \eta(\boldsymbol{r}_2)$ も許されることがわかる。このような状態は一般には ($\boldsymbol{r}_1$ の関数) $\times$ ($\boldsymbol{r}_2$ の関数) という形には書けないことに注意しよう。このような任意の重ね合わせが許されるわけだから、結局、2 粒子系の一般的な状態は、$(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \in \mathbb{R}^6$ の任意の複素数値関数である波動関数 $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ で表わされるということになる[4]。

全く同様にして、互いに区別できる N 個の粒子からなる量子系の状態は、$\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N$ の複素数値関数である波動関数 $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)$ で表わされる。ただし、$\boldsymbol{r}_j$ は j 番目の粒子の位置座

[4] $\{\boldsymbol{\xi}_\alpha\}_{\alpha=1,2,\ldots}$ を 1 粒子ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1$ の任意の正規直交完全系とすると、$(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ の任意の関数を $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} c_{\alpha,\beta}\, \xi_\alpha(\boldsymbol{r}_1)\, \xi_\beta(\boldsymbol{r}_2)$ と展開できることを思い出そう。

標である。ここでも波動関数は二乗可積分の条件

$$\int d^3\boldsymbol{r}_1 \cdots d^3\boldsymbol{r}_N \, |\Phi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)|^2 < \infty \tag{1.3}$$

を満たす必要がある。

ここでも波動関数 $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)$（ここで $\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N$ は全空間を動く）をひとまとめにして $\boldsymbol{\Phi}$ と書く。二つの状態 $\boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\Psi}$ の内積は

$$\langle \boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\Psi} \rangle := \int d^3\boldsymbol{r}_1 \cdots d^3\boldsymbol{r}_N \, \{\Phi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)\}^* \, \Psi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N) \tag{1.4}$$

であり、状態 $\boldsymbol{\Phi}$ のノルムは $\|\boldsymbol{\Phi}\| := \sqrt{\langle \boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\Phi} \rangle}$ である。

■二つの区別できない粒子　ウォームアップとして、二つの同種粒子からなる系について考える。この場合も状態は二乗可積分の条件 (1.3) を満たす波動関数 $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ で表わされる。

ここで、位置座標を $\boldsymbol{r}_1$, $\boldsymbol{r}_2$ のように書く際には二つの粒子に粒子 1、粒子 2 と「名前」をつけていることに注意しよう。ところが量子系では二つの同種粒子は本質的に区別ができないことが知られている。すなわち、二つの粒子の「名前」を入れ替えても、状態は全く変化しないということである[5]。波動関数を使って書けば、これは、任意の $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2 \in \mathbb{R}^3$ について

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \zeta \, \Phi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) \tag{1.5}$$

となることを意味する。ここで ζ は $|\zeta| = 1$ となる任意の複素定数である[6]。$\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ が任意だったから、(1.5) で $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ を入れ替えた

$$\Phi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = \zeta \, \Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{1.6}$$

という関係ももちろん成り立つ。これらを二つ合わせれば、任意の $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ について

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \zeta^2 \, \Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2), \tag{1.7}$$

ということになり、ここから $\zeta^2 = 1$ が得られる。

この（自明な）代数方程式を解けば ζ は 1 あるいは -1 であるとわかる．とすると、この世界の粒子は $\zeta = 1$ となる種類と $\zeta = -1$ となる種類の二つに分類されるということになりそうだ。実際、これは正しく、$\zeta = 1$ に対応する粒子はボソン、$\zeta = -1$ に対応する粒子はフェルミ

---

[5] ここでは二つの粒子を（装置で動かすなどして）物理的に入れ替えることを考えているのではない。状態には全く手をつけず、単に（われわれが勝手に決めた）「名前」を付け替えているだけである。

[6] 波動関数に複素定数をかけても対応する物理的状態は全く変わらないという重要な原理を思い出そう。

オンと呼ばれている。例えば、電子はフェルミオンであり、原子は種類に応じてボソンあるいはフェルミオンのいずれかである。本稿のここから先では、ζ は扱っている粒子に応じて 1 か -1 に定まっているものとする。

■N 個の区別できない粒子　上の考察は N 個の同種粒子の系にもそのまま拡張できる。$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)$ を二乗可積分の条件 (1.3) を満たす波動関数としよう。粒子の「名前」の付け替えについての対称性を取り入れるため、この波動関数は $\{1,2,\ldots,N\}$ の任意の置換 P について、

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N)=\zeta^P\,\Phi(\boldsymbol{r}_{P(1)},\boldsymbol{r}_{P(2)},\ldots,\boldsymbol{r}_{P(N)}) \tag{1.8}$$

を満たすとする。ここで、

$$\zeta^P=\begin{cases}1 & \zeta=1\text{ つまりボソンの場合,}\\ (-1)^P & \zeta=-1\text{ つまりフェルミオンの場合,}\end{cases} \tag{1.9}$$

とした。$(-1)^P=\pm1$ は置換 P のパリティである[7]。

状態（波動関数）の内積やノルムは区別できる粒子の場合の定義をそのまま使う。(1.4) を見よ。任意の $N=1,2,\ldots$ について、上のような波動関数すべての集合を $\mathcal{H}_N$ をと書き、N 粒子ヒルベルト空間と呼ぶ。また、0 粒子ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_0$ は複素数の集合 $\mathbb{C}$ だと定義する。

■この解説の目的　急ぎ足で見てきたが、上で述べたのが量子力学において複数の同種粒子からなる系を記述するための完全な方法である[8]。この記述法を使って様々な進んだ問題を定式化して計算を進めることもできる。ただ、上のやり方では、本来は名前をつけて区別できない粒子たちにとりあえず $1,2,\ldots$ と名前をつけて波動関数を書いておいて、それから粒子が区別できないことを (1.8) によって付加的な条件として取り入れるという、かなりまだるっこしい手続きを踏んでいる。区別できないものを便宜的に区別できるように扱うのは美しくない。また、実際に理論を展開し計算を進める上でも、このようなやり方が不便になることが少なくない。

生成・消滅演算子とフォック表現を用いると、粒子たちにそもそも名前をつけることなく、同種多粒子系の状態やそこに作用する演算子を記述できる。理論的に美しく、また実用上も便利な形式である。ただし、これは理論的には上で述べた波動関数を用いた書き方と完全に等価

[7] 置換やそのパリティのことを知らないとこの解説を読むのは難しいと思う。手頃な復習の教材として、私が公開している数学の教科書がある。
`https://www.gakushuin.ac.jp/~881791/mathbook/`

[8] 粒子のスピンが取り入れられていないがそれを含めるのは自明な拡張。

だということを強調しておきたい。つまり、物理は何も変わらないのだ。生成・消滅演算子の方法を「第二量子化の方法」と呼ぶことがあるため、今までの量子力学とは違うなにか新しいものを扱っていると思ってしまうことがあるようだが、それは純粋な誤解である。

2　生成・消滅演算子

この解説の主役である生成演算子と消滅演算子についてみていこう。

■生成演算子　任意の 1 粒子状態 $\boldsymbol{\psi} \in \mathcal{H}_1$ と任意の粒子数 $N = 1, 2, \ldots$ をとる。任意の $N-1$ 粒子状態 $\mathbf{\Phi}$ が与えられたとき、ここに状態 $\boldsymbol{\psi}$ を「付け加えて」新たな状態 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\mathbf{\Phi}$ を作り出す演算子 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}) : \mathcal{H}_{N-1} \to \mathcal{H}_N$ を定義したい。

$N = 2$ ならば、そのような演算子は

$$(\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\varphi})(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\big\{\psi(\boldsymbol{r}_1)\varphi(\boldsymbol{r}_2) + \zeta\,\psi(\boldsymbol{r}_2)\varphi(\boldsymbol{r}_1)\big\}, \tag{2.1}$$

と定義するのが自然だろう（$\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}_1$ は任意の 1 粒子状態）[9]。ここで、$\psi(\boldsymbol{r}_1)\varphi(\boldsymbol{r}_2) + \zeta\,\psi(\boldsymbol{r}_2)\varphi(\boldsymbol{r}_1)$ は二つの波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ と $\varphi(\boldsymbol{r})$ の組み合わせで作ることができる唯一の（反）対称な 2 体の波動関数であることに注意しよう。新しい状態のノルムを計算すると、

$$\begin{aligned}\|\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\varphi}\|^2 &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{r}_1 d^3\boldsymbol{r}_2 \left\{\psi(\boldsymbol{r}_1)\varphi(\boldsymbol{r}_2) + \zeta\,\psi(\boldsymbol{r}_2)\varphi(\boldsymbol{r}_1)\right\}^* \left\{\psi(\boldsymbol{r}_1)\varphi(\boldsymbol{r}_2) + \zeta\,\psi(\boldsymbol{r}_2)\varphi(\boldsymbol{r}_1)\right\} \\ &= \|\boldsymbol{\psi}\|^2 \, \|\boldsymbol{\varphi}\|^2 + \zeta\,|\langle\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi}\rangle|^2 \end{aligned} \tag{2.2}$$

となる。もし $\boldsymbol{\psi}$ と $\boldsymbol{\varphi}$ がどちらも規格化されていれば（つまり $\|\boldsymbol{\psi}\| = \|\boldsymbol{\varphi}\| = 1$ ということ）、$\langle\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\varphi}\rangle = 0$ の場合に限って 2 粒子状態 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\varphi}$ も規格化されていることが (2.2) からわかる。$\zeta = -1$ つまりフェルミオン系の場合には、なんらかの定数 α によって $\boldsymbol{\psi} = \alpha\boldsymbol{\varphi}$ となるなら $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\varphi} = 0$ であることもすぐにわかる。これは二つ以上のフェルミオンが同じ 1 粒子状態を占めることはできないというパウリの排他律の数学的な表現だと言っていい。

(2.1) を最も素直に一般の N に拡張することを考えて、任意の $\mathbf{\Phi} \in \mathcal{H}_{N-1}$ に対して

$$(\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\mathbf{\Phi})(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N) := \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N} \zeta^{j-1}\,\psi(\boldsymbol{r}_j)\,\Phi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \check{\boldsymbol{r}}_j, \ldots, \boldsymbol{r}_N) \tag{2.3}$$

がすべての $\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N \in \mathbb{R}^3$ について成り立つとする。ここで、$\boldsymbol{r}_1, \ldots, \check{\boldsymbol{r}}_j, \ldots, \boldsymbol{r}_N$ は元の列から $\boldsymbol{r}_j$ を除いた列、つまり $\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{j-1}, \boldsymbol{r}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{r}_N$ を表わすという約束にしよう。よっ

[9] 状態 $\mathbf{\Phi} \in \mathcal{H}_N$ の波動関数による表現、つまり $\Phi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)$、を $(\mathbf{\Phi})(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)$ とも書く。

て、$N=3$ の場合に定義 (2.3) をあらわに書くと、

$$(\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Phi})(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)=\frac{1}{\sqrt{3}}\bigl\{\psi(\boldsymbol{r}_1)\,\Phi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)+\zeta\,\psi(\boldsymbol{r}_2)\,\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_3)+\psi(\boldsymbol{r}_3)\,\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\bigr\} \tag{2.4}$$

となる。(2.3) あるいは (2.4) の右辺の関数は (1.8) の対称性を自動的に満たすことに注意しよう。$N=1$ で $\boldsymbol{\Phi}=1\in\mathcal{H}_0$ なら、(2.3) は

$$(\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})1)(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2.5}$$

となる。何もないところに $\boldsymbol{\psi}$ を付け加えると $\boldsymbol{\psi}$ になるということなので極めてもっともだ。また、定義 (2.3) から明らかに $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})$ は $\boldsymbol{\psi}$ について線形である。つまり、任意の状態 $\boldsymbol{\psi}_1,\ldots,\boldsymbol{\psi}_n\in\mathcal{H}_1$ と係数 $c_1,\ldots,c_n\in\mathbb{C}$ について、

$$\hat{a}^\dagger\Bigl(\sum_{\ell=1}^{n}c_\ell\,\boldsymbol{\psi}_\ell\Bigr)=\sum_{\ell=1}^{n}c_\ell\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_\ell) \tag{2.6}$$

が成り立つ。

■消滅演算子　任意の $N=1,2,\ldots$ に対して $\hat{a}(\boldsymbol{\psi}):=\{\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\}^\dagger$ によって消滅演算子 $\hat{a}(\boldsymbol{\psi}):\mathcal{H}_N\to\mathcal{H}_{N-1}$ を定義する。いうまでもなく、消滅演算子 $\hat{a}(\boldsymbol{\psi})$ は与えられた任意の N 粒子状態 $\boldsymbol{\Phi}$ から 1 粒子状態 $\boldsymbol{\psi}$ を「取り除いて」新しい $N-1$ 粒子状態 $\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Phi}$ を作る。消滅演算子 $\hat{a}(\boldsymbol{\psi})$ が状態にどのように作用するか見るため、エルミート共役の定義を思い出そう。つまり、$N=1,2,\ldots$ として、任意の状態 $\boldsymbol{\Xi}\in\mathcal{H}_{N-1}$ と $\boldsymbol{\Phi}\in\mathcal{H}_N$ に対して、

$$\langle\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi},\boldsymbol{\Phi}\rangle=\langle\boldsymbol{\Xi},\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Phi}\rangle, \tag{2.7}$$

である。定義 (2.3) から、左辺は

$$\begin{aligned}&\langle\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi},\boldsymbol{\Phi}\rangle\\&\quad=\int d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N\,\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\zeta^{j-1}\bigl\{\psi(\boldsymbol{r}_j)\,\Xi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\check{\boldsymbol{r}}_j,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\bigr\}^*\,\Phi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\end{aligned}$$

と書ける。和の変数 j を固定し、列 $(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\check{\boldsymbol{r}}_j,\ldots,\boldsymbol{r}_N)$ を $(\boldsymbol{s}_1,\ldots,\boldsymbol{s}_{N-1})$ と書き直そう (詳しく言えば、$i<j$ となる i については $\boldsymbol{s}_i=\boldsymbol{r}_i$ とし、$i>j$ となる i については $\boldsymbol{s}_{i-1}=\boldsymbol{r}_i$ とする)。すると、対称性 (1.8) に注意すると、$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)=\Phi(\boldsymbol{s}_1,\ldots,\boldsymbol{s}_{j-1},\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{s}_j,\ldots,\boldsymbol{s}_{N-1})=\zeta^{j-1}\,\Phi(\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{s}_1,\ldots,\boldsymbol{s}_{N-1})$ が得られる。$(\zeta^{j-1})^2=1$ だから、

$$=\int d^3\boldsymbol{s}_1\ldots d^3\boldsymbol{s}_{N-1}\,\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\int d^3\boldsymbol{r}_j\,\bigl\{\psi(\boldsymbol{r}_j)\,\Xi(\boldsymbol{s}_1,\ldots,\boldsymbol{s}_{N-1})\bigr\}^*\,\Phi(\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{s}_1,\ldots,\boldsymbol{s}_{N-1})$$

と書き直せる。ここで $\boldsymbol{r}_j$ を $\boldsymbol{q}$ と書き直してみると、j についての和の各項は実は全く同じ形をしていることがわかる。よって和を単に N 倍に書き換えると、

$$= \int d^3\boldsymbol{s}_1 \ldots d^3\boldsymbol{s}_{N-1} \{\Xi(\boldsymbol{s}_1, \ldots, \boldsymbol{s}_{N-1})\}^* \sqrt{N} \int d^3\boldsymbol{q} \{\psi(\boldsymbol{q})\}^* \Phi(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{s}_1, \ldots, \boldsymbol{s}_{N-1}). \tag{2.8}$$

と整理できる。この表式を (2.7) の右辺と見比べれば、任意の $N = 1, 2, \ldots$ と任意の状態 $\boldsymbol{\Phi} \in \mathcal{H}_N$ について、

$$(\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Phi})(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-1}) = \sqrt{N} \int d^3\boldsymbol{q} \{\psi(\boldsymbol{q})\}^* \Phi(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-1}) \tag{2.9}$$

であることがわかる。これが求めていた消滅演算子の作用である。得られる波動関数 $(\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Phi})(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-1})$ が対称性 (1.8) を満たすことも明らかだろう。ので、任意の $c_0 \in \mathcal{H}_0 = \mathbb{C}$ について、

$$\hat{a}(\boldsymbol{\psi})c_0 = 0 \tag{2.10}$$

と定めておこう（どのような状態 $\boldsymbol{\Phi}$ をとっても、$\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Phi}$ が $\mathcal{H}_0 = \mathbb{C}$ に入ることはないのでこの定義は自然だ)。消滅演算子 $\hat{a}(\boldsymbol{\psi})$ は状態 $\boldsymbol{\psi}$ について反線形である。つまり、任意の状態 $\boldsymbol{\psi}_1, \ldots, \boldsymbol{\psi}_n \in \mathcal{H}_1$ と係数 $c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{C}$ について、

$$\hat{a}\Big(\sum_{\ell=1}^{n} c_\ell \, \boldsymbol{\psi}_\ell\Big) = \sum_{\ell=1}^{n} (c_\ell)^* \, \hat{a}(\boldsymbol{\psi}_\ell), \tag{2.11}$$

が成り立つこれは (2.9) の表式からわかるが、そもそも (2.6) のエルミート共役をとれば自明。

■（反）交換関係　生成・消滅演算子の最も重要な性質である (2.15), (2.16), (2.23) の（反）交換関係を導こう。任意の 1 粒子状態 $\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} \in \mathcal{H}_1$ をとって、固定する。任意の $N = 2, 3, \ldots$ と任意の $\boldsymbol{\Xi} \in \mathcal{H}_N$ について、(2.9) の関係を二回用いると、

$$\begin{aligned}(\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-2}) &= \sqrt{N-1} \int d^3\boldsymbol{q} \{\varphi(\boldsymbol{q})\}^* (\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-2}) \\ &= \sqrt{N(N-1)} \int d^3\boldsymbol{q} \, d^3\boldsymbol{q}' \{\varphi(\boldsymbol{q}) \, \psi(\boldsymbol{q}')\}^* \, \Xi(\boldsymbol{q}', \boldsymbol{q}, \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-2})\end{aligned} \tag{2.12}$$

および

$$(\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-2}) = \sqrt{N(N-1)} \int d^3\boldsymbol{q} \, d^3\boldsymbol{q}' \{\psi(\boldsymbol{q}') \, \varphi(\boldsymbol{q})\}^* \, \Xi(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{q}', \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{N-2}). \tag{2.13}$$

が得られる。$\Xi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}',\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_{N-2})=\zeta\,\Xi(\boldsymbol{q}',\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_{N-2})$ だったことを思い出せば、これらから、$N=2,3,\ldots$ と任意の $\boldsymbol{\Xi}\in\mathcal{H}_N$ について、

$$\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi}=\zeta\,\hat{a}(\boldsymbol{\psi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\boldsymbol{\Xi} \tag{2.14}$$

となることがわかる。ここで、任意の演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ に対して、$[\hat{A},\hat{B}]_{-\zeta}:=\hat{A}\hat{B}-\zeta\,\hat{B}\hat{A}$ と定義しよう。$\zeta=1$ つまりボソン系の場合にはこれは通常の交換子で、$\zeta=-1$ のフェルミオン系の場合には反交換子になる。(2.14) では状態 $\boldsymbol{\Xi}$ は任意だったので、ここから消滅演算子の（反）交換関係

$$[\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}),\hat{a}(\boldsymbol{\psi})]_{-\zeta}=0, \tag{2.15}$$

が得られる。もちろん、$\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}\in\mathcal{H}_1$ は任意の 1 粒子状態である。エルミート共役をとれば、生成演算子の（反）交換関係

$$[\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}),\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})]_{-\zeta}=0. \tag{2.16}$$

が得られる。$\zeta=-1$ のフェルミオン系の場合は、(2.15) あるいは (2.16) で $\boldsymbol{\varphi}=\boldsymbol{\psi}$ とすると

$$\{\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\}^2=\{\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})\}^2=0\quad\text{（フェルミオン系だけ！）} \tag{2.17}$$

が得られる。これもパウリの排他律の数学的な表現である。

（反）交換関係 $[\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}),\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})]_{-\zeta}$ の評価は面白いのだが少しややこしい。以下の導出を $N=2$ の場合にすべてあからさまに書き下してみることをお勧めする[10]。任意の $N=1,2,\ldots$ について任意の状態 $\boldsymbol{\Xi}\in\mathcal{H}_N$ をとる。まず、(2.3) と (2.9) から

$$\begin{aligned}(\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)&=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\zeta^{j-1}\psi(\boldsymbol{r}_j)(\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\check{\boldsymbol{r}}_j,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\\&=\sum_{j=1}^{N}\zeta^{j-1}\psi(\boldsymbol{r}_j)\int d^3\boldsymbol{q}\,\{\varphi(\boldsymbol{q})\}^*\,\Xi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}_1,\ldots,\check{\boldsymbol{r}}_j,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\end{aligned} \tag{2.18}$$

が得られることは簡単にわかる。次に、(2.9) だけを使って

$$(\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)=\sqrt{N+1}\int d^3\boldsymbol{q}\,\{\varphi(\boldsymbol{q})\}^*(\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N). \tag{2.19}$$

---

[10] 研究室の四年生の輪講の際にはこの導出をすべて黒板に詳しく書いてくれたが、これは（私にとっても）有益だった。

とする。右辺を評価するために (2.3) を使って

$$
\begin{aligned}
&(\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\\
&\quad=\frac{1}{\sqrt{N+1}}\Big\{\psi(\boldsymbol{q})\,\Xi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)+\sum_{j=1}^{N}\zeta^j\psi(\boldsymbol{r}_j)\,\Xi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}_1,\ldots,\check{\boldsymbol{r}}_j,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\Big\}.
\end{aligned}
\tag{2.20}
$$

としておこう。この表式での j は (2.3) での $j-1$ に対応していることに注意。これを (2.19) に戻せば、

$$
\begin{aligned}
&(\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi})(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\\
&\quad=\int d^3\boldsymbol{q}\,\{\varphi(\boldsymbol{q})\}^*\Big\{\psi(\boldsymbol{q})\,\Xi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)+\sum_{j=1}^{N}\zeta^j\psi(\boldsymbol{r}_j)\,\Xi(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}_1,\ldots,\check{\boldsymbol{r}}_j,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\Big\}.
\end{aligned}
\tag{2.21}
$$

となる。(2.18) と (2.21) を合わせれば結局、任意の $\boldsymbol{\Xi}\in\mathcal{H}_N$ について、

$$
\Big(\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\boldsymbol{\Xi}-\zeta\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\boldsymbol{\Xi}\Big)(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)=\langle\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}\rangle\,\Xi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)
\tag{2.22}
$$

となることがわかる。こうして、任意の $\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}\in\mathcal{H}_1$ について（反）交換関係

$$
[\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}),\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})]_{-\zeta}=\langle\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}\rangle
\tag{2.23}
$$

が得られた。

■生成・消滅演算子の例　1 粒子ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1$ の任意の正規直交完全系 $\{\boldsymbol{\xi}_\alpha\}_{\alpha=1,2,\ldots}$ をとり、任意の $\alpha=1,2,\ldots$ について

$$
\hat{a}_\alpha:=\hat{a}(\boldsymbol{\xi}_\alpha),\quad \hat{a}^\dagger_\alpha:=\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha)
\tag{2.24}
$$

と定義しよう。これらは 1 粒子状態 $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ を消す演算子、作る演算子である。（反）交換関係 (2.15), (2.16), (2.23) から直ちに、任意の $\alpha,\beta=1,2,\ldots$ について、

$$
[\hat{a}_\alpha,\hat{a}_\beta]_{-\zeta}=[\hat{a}^\dagger_\alpha,\hat{a}^\dagger_\beta]_{-\zeta}=0,\quad [\hat{a}_\alpha,\hat{a}^\dagger_\beta]_{-\zeta}=\delta_{\alpha,\beta},
\tag{2.25}
$$

となることがわかる。きわめて興味深いことに、ボソン系の場合は、これらは調和振動子系の昇降演算子が満たす交換関係そのものである。

任意の $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^3$ について、粒子が位置 $\boldsymbol{x}$ に完全に局在した状態 $\eta^{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{r}):=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})$ を考える[11] このような状態二つの内積は

$$
\langle\boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{y}}\rangle=\int d^3\boldsymbol{r}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{y})=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})
\tag{2.26}
$$

[11] Feynman の “Statistical Mechanics” をはじめとする物理の文献では状態 $\boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{x}}$ は $|\boldsymbol{x}\rangle$ と書かれている。

のようにデルタ関数になることを思い出そう。状態 $\boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{x}}$ に対応する消滅演算子と生成演算子

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) := \hat{a}(\boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{x}}), \quad \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) := \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{x}}), \tag{2.27}$$

を考えよう[12]。(2.15), (2.16), (2.23), (2.26) から、任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^3$ について（反）交換関係

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}(\boldsymbol{y})]_{-\zeta} = [\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{y})]_{-\zeta} = 0, \quad [\hat{\psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{y})]_{-\zeta} = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) \tag{2.28}$$

が得られる。

演算子 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ が、基本の演算子 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})$ とどう関係するかをみておこう。まず、任意の 1 粒子状態 $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}_1$ をとろう。$\varphi(\boldsymbol{r}) = \int d^3\boldsymbol{x}\, \varphi(\boldsymbol{x})\, \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{x})$ だから $\boldsymbol{\varphi} = \int d^3\boldsymbol{x}\, \varphi(\boldsymbol{x})\, \boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{x}}$ と書ける。よって、生成演算子の線形性 (2.6) から

$$\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}) = \int d^3\boldsymbol{x}\, \varphi(\boldsymbol{x})\, \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) \tag{2.29}$$

となる。次に、$\mathcal{H}_1$ の任意の正規直交完全系 $\{\boldsymbol{\xi}_\alpha\}_{\alpha=1,2,\ldots}$ をとり、$\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{x}) = \sum_{\alpha=1}^\infty \{\xi_\alpha(\boldsymbol{x})\}^* \xi_\alpha(\boldsymbol{r})$ というデルタ関数の表式を思い出そう[13]。つまり、$\boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{x}} = \sum_{\alpha=1}^\infty \{\xi_\alpha(\boldsymbol{x})\}^* \boldsymbol{\xi}_\alpha$ ということなので、再び線形性から、

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \sum_{\alpha=1}^\infty \{\xi_\alpha(\boldsymbol{x})\}^*\, \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha) \tag{2.30}$$

となる。この関係は後でも使うことになる。

任意の波数ベクトル $\boldsymbol{k} \in \mathbb{R}^3$ について対応する平面波状態を

$$u^{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = (2\pi)^{-3/2}\, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{2.31}$$

と定義する[14]。デルタ関数の標準的な表式

$$\delta(\boldsymbol{z}) = \int \frac{d^3\boldsymbol{w}}{(2\pi)^3}\, e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{z}} \quad \text{for } \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^3 \tag{2.32}$$

---

[12] Feynman の本では $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$, $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ は $\hat{a}(\boldsymbol{x})$, $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{x})$ と書かれている。ここで使った記法も標準的である。
注意深い読者は $\boldsymbol{\eta}^{\boldsymbol{x}}$ は二乗可積分の条件 (1.1) を満たさず、そのために正確には状態ではないことに気づいただろう。それでも、実用上便利なので生成・消滅演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$, $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ を（形式的に）定義した。

[13] これは $\{\boldsymbol{\xi}_\alpha\}_{\alpha=1,2,\ldots}$ の完全性を表わす関係である。これを（物理屋風に）導くには、まずデルタ関数が $\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{x}) = \sum_{\beta=1}^\infty c_\beta\, \xi_\beta(\boldsymbol{r})$ と展開できると仮定し、両辺と $\xi_\alpha(\boldsymbol{r})$ の内積をとれば $c_\alpha = \{\xi_\alpha(\boldsymbol{x})\}^*$ が得られることをみればいい。

[14] 平面波状態も二乗可積分の条件 (1.1) を満たさないので、厳密には状態ではない。

を使えば、任意の $\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}' \in \mathbb{R}^3$ について、二つの平面波状態の内積が

$$\langle \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}'} \rangle = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \tag{2.33}$$

となることがわかる。ここでも、対応する生成・消滅演算子を

$$\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}) := \hat{a}(\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}}), \quad \hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}) := \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}}), \tag{2.34}$$

と定義しよう[15]。任意の $\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}' \in \mathbb{R}^3$ について、(反）交換関係はもちろん

$$[\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}), \hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}')]_{-\zeta} = [\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}), \hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}')]_{-\zeta} = 0, \quad [\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}), \hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}')]_{-\zeta} = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'), \tag{2.35}$$

となる。(2.31) と (2.32) から

$$\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{x}) = \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\, u^{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \tag{2.36}$$

となるので、線形性 (2.6) から

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\, \hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}) \tag{2.37}$$

が得られる。

3 フォック表現

生成・消滅演算子を使って多粒子の量子系を記述するやり方についてみていこう。このような記述方法をフォック表現と呼ぶが、「第二量子化の方法」という呼び方が使われることもある。しかし、この記述方法は通常の波動関数による表現を巧みに書き換えただけのものだということはしっかりと理解してほしい。「第二量子化」という明らかに混乱を招く呼び方は、昔の（偉大な！）人たちの初期の混乱の名残なのだ[16]。

便利のために、(反）交換関係 (2.15), (2.16), (2.23) をまとめておこう。

$$[\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}), \hat{a}(\boldsymbol{\psi})]_{-\zeta} = [\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}), \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})]_{-\zeta} = 0, \quad [\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}), \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})]_{-\zeta} = \langle \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} \rangle \tag{3.1}$$

もちろん、$\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\psi} \in \mathcal{H}_1$ は任意の 1 粒子状態である。

[15] Feynman の記号では $\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k})$, $\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k})$ は $\hat{a}(\boldsymbol{k})$, $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{k})$ である。この場合には Feyman の書き方の方が普通だと思う。

[16] 古典力学を一回「量子化」して得られた波動関数 $\psi(\boldsymbol{x})$ をもう一回「量子化」したものが $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ だという勘違いがあったということ。

■量子状態の表現　最初に、$N = 1, 2, \ldots$ について、ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_N$ の状態を新しい形に表現する。まず、粒子が一つもない「状態」、つまり $1 \in \mathcal{H}_0 = \mathbb{C}$ を $|\Phi_{\text{vac}}\rangle$ と書こう。ここで vac は vacuum（真空）の略である[17]。(2.10) より、真空状態は任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}_1$ に対して

$$\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})|\Phi_{\text{vac}}\rangle = 0 \tag{3.2}$$

を満たす。フォック表現の応用ではこの関係をくり返し使うことになる。

$\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}_1$ を任意の 1 粒子状態とする。(2.5) から $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})|\Phi_{\text{vac}}\rangle$ は状態 $\boldsymbol{\varphi}$ そのものだとわかる。すると、任意の $\boldsymbol{\psi} \in \mathcal{H}_1$ について、$\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})|\Phi_{\text{vac}}\rangle$ は (2.1) の 2 粒子状態であることがわかる。ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_2$ のすべての状態が (2.1) の形に書けるわけではないが、(2.1) のように書ける状態すべてのあらゆる線型結合をとれば $\mathcal{H}_2$ 全体がカバーできる。

この考察は任意の粒子数 $N = 1, 2, \ldots$ に簡単に一般化できる。$\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N \in \mathcal{H}_1$ を任意の 1 粒子状態とする。このとき、$\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle$ は（ゼロでなければ）$\mathcal{H}_N$ の状態である。そして、$\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle$ という形の状態すべてのあらゆる線型結合をとれば、N 粒子ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_N$ が得られるのである。

次に、任意の状態 $\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N, \boldsymbol{\psi}_1, \ldots, \boldsymbol{\psi}_N \in \mathcal{H}_1$ に対して、二つの N 粒子状態

$$|\Phi\rangle = \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle, \quad |\Psi\rangle = \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle \tag{3.3}$$

を定義しておく。次の重要で役に立つ結果を示すために、一般の $N \times N$ 行列 $\mathsf{A} = (a_{i,j})_{i,j=1,\ldots,N}$ に対して、

$$|\mathsf{A}|_\zeta := \sum_P \zeta^P \, a_{1,P(1)}\, a_{2,P(2)} \cdots a_{N,P(N)} \tag{3.4}$$

という量を定義しておく。ここでの和は $\{1, 2, \ldots, N\}$ の置換すべて（つまり $N!$ 通り）についてとる。$|\mathsf{A}|_-$ は通常のディターミナントであり、$|\mathsf{A}|_+$ はパーマネントと呼ばれている。

定理 3.1　(3.3) で定義した二つの状態の内積は、

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \begin{vmatrix} \langle\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\psi}_1\rangle & \langle\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\psi}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\psi}_N\rangle \\ \langle\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\psi}_1\rangle & \langle\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\psi}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\psi}_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\boldsymbol{\varphi}_N, \boldsymbol{\psi}_1\rangle & \langle\boldsymbol{\varphi}_N, \boldsymbol{\psi}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{\varphi}_N, \boldsymbol{\psi}_N\rangle \end{vmatrix}_\zeta . \tag{3.5}$$

である。

[17] 考えている系に粒子が一つもないので比喩的に真空と呼んでいると思えばいい。

証明：この等式を示すには、

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\Phi_{\text{vac}}|\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_N)\cdots\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_1)\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle, \tag{3.6}$$

から出発し、$\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}) = \zeta\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}) + \langle\boldsymbol{\varphi},\boldsymbol{\psi}\rangle$（これは（反）交換関係 (3.1) の一つ目）という関係をくり返し使い、さらに（使えるようになったら）$\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})|\Phi_{\text{vac}}\rangle = 0$ の関係を使えばいい。

具体的には、まず

$$\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_1)\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle = \sum_{j=1}^{N}\zeta^{j-1}\,\langle\boldsymbol{\varphi}_1,\boldsymbol{\psi}_j\rangle\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_{j-1})\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_{j+1})\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle \tag{3.7}$$

となることに注意する（ここで、和の各項には $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_j)$ が入っていない）。さらに、$\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_N)\cdots\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_1)\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle$ についても、すべての $\hat{a}^\dagger$ と $\hat{a}$ が消えるまで同じことを繰り返してやればいい。$N=3$ の場合を具体的に計算して実際に (3.5) が得られることを確かめてほしい。一般の N の場合は、計算しなくても

$$\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_N)\cdots\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_1)\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)|\Phi_{\text{vac}}\rangle = \sum_P \eta(P)\prod_{j=1}^{N}\langle\boldsymbol{\varphi}_j,\boldsymbol{\psi}_{P(j)}\rangle|\Phi_{\text{vac}}\rangle \tag{3.8}$$

となることは明らかで、そこから

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_P \eta(P)\prod_{j=1}^{N}\langle\boldsymbol{\varphi}_j,\boldsymbol{\psi}_{P(j)}\rangle \tag{3.9}$$

がわかる。ここで P はすべての置換の和であり、$\eta(P) = \pm 1$ は η だけで決まる符号である。われわれは（真面目に計算していないので）$\eta(P)$ の具体系はまだ知らない。ただし、ボソン系の場合は $\zeta = 1$ なので明らかに $\eta(P) = 1$ であり、これで定理は証明された。あとはフェルミオン系について $\eta(P) = (-1)^P$ を言えばいい。これは (3.7) のような等式に出てくる符号を地道に調べていけば証明できるはずだが、以下のようにすれば簡単に示せる。置換 P_0 を一つ選んで固定する。反交換関係 (3.1) より

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = (-1)^{P_0}\,\langle\Phi_{\text{vac}}|\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_N)\cdots\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}_1)\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_{P_0(1)})\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_{P_0(N)})|\Phi_{\text{vac}}\rangle \tag{3.10}$$

である。上と全く同様に右辺は (3.9) のように書き直せるわけだが、計算を一切することなく、この表式には $(-1)^{P_0}\prod_{j=1}^{N}\langle\boldsymbol{\varphi}_j,\boldsymbol{\psi}_{P_0(j)}\rangle$ という項が含まれていることがわかる。これは、まさに示したかった符号である。状態 $\boldsymbol{\varphi}_1,\ldots,\boldsymbol{\varphi}_N$, $\boldsymbol{\psi}_1,\ldots,\boldsymbol{\psi}_N$ はすべて任意であり、置換 P_0 も任意だったので、これで $\eta(P) = (-1)^P$ が示された。 ∎

上で見た基本的な状態の波動関数による表現について簡単に触れておこう。2 粒子状態 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi})\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})|\Phi_{\rm vac}\rangle$ に対応す波動関数が $\{\psi(\boldsymbol{r}_1)\varphi(\boldsymbol{r}_2)+\zeta\,\psi(\boldsymbol{r}_2)\varphi(\boldsymbol{r}_1)\}/\sqrt{2}$ であることは既に見た。同様に、状態 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\rm vac}\rangle$ を波動関数で表わすと、

$$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P\zeta^P\varphi_1(\boldsymbol{r}_{P(1)})\,\varphi_2(\boldsymbol{r}_{P(2)})\cdots\varphi_N(\boldsymbol{r}_{P(N)}) \tag{3.11}$$

となる。ここで P は $\{1,\ldots,N\}$ の置換すべてについて足す。

証明：(3.11) が成り立つことを帰納法で証明しよう[18]。$N=1,2$ については (3.11) は示されているので、$N-1$ の場合を仮定しよう。つまり、$(N-1)$ 粒子系の状態 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_2)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\rm vac}\rangle$ の波動関数による表現は

$$\Phi'(\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N)=\frac{1}{\sqrt{(N-1)!}}\sum_{P'}\zeta^{P'}\varphi_2(\boldsymbol{r}_{P'(2)})\,\varphi_3(\boldsymbol{r}_{P'(3)})\cdots\varphi_N(\boldsymbol{r}_{P'(N)}) \tag{3.12}$$

だとする。ここで、P' は $\{2,3,\ldots,N\}$ の置換すべてについて足す。定義 (2.3) より、状態 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1)\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_2)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\rm vac}\rangle$ の波動関数による表現は、

$$\begin{aligned}\Phi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)&=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^N\zeta^{j-1}\,\varphi_1(\boldsymbol{r}_j)\,\Phi'(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\check{\boldsymbol{r}}_j,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\\&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{j=1}^N\sum_{P'}\zeta^{j-1}\zeta^{P'}\varphi_1(\boldsymbol{r}_j)\,\varphi_2(\boldsymbol{r}_{P'_j(2)})\,\varphi_3(\boldsymbol{r}_{P'_j(3)})\cdots\varphi_N(\boldsymbol{r}_{P'_j(N)})\end{aligned} \tag{3.13}$$

と書けることがわかる。(3.12) に登場した $(\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N)$ というラベルを $(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\check{\boldsymbol{r}}_j,\ldots,\boldsymbol{r}_N)$ に書き直すにあたり、

$$P'_j(k)=\begin{cases}P'(k)-1 & P'(k)\le j\ \text{のとき}\\ P'(k) & P'(k)>j\ \text{のとき}\end{cases} \tag{3.14}$$

と定義した。ここで、$\{1,\ldots,N\}$ の置換 P を、$P(1)=j$ および $P(k)=P'_j(k)$（ただし、$k=2,\ldots,N$）によって定義した。少し考えると $\zeta^{j-1}\zeta^{P'}=\zeta^P$ とわかるので、示したい表現 (3.11) が得られた。■

■フェルミオン系のスレーター行列式状態　フェルミオン系では、基本の状態 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\rm vac}\rangle$ をスレーター行列式状態と呼ぶ。波動関数による表現 (3.11) がまさにディターミナントの形をしているからである。スレーター行列式状態はきわめて特殊

[18] この証明は別に面白くないのでとばしてもいい。

な N 粒子状態に過ぎないが、フェルミオンの多体系の理論では重要な役割を果たす。以下では、スレーター行列式状態の二つの基本的な性質を示そう。

一つ目の性質は、1 粒子状態 $\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N$ の線形独立性が物理的に重要な意味を持つことを示している。

定理 3.2　スレーター行列式状態 $|\Phi\rangle = \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle$ がゼロでないための必要十分条件は、1 粒子状態 $\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N$ が線型独立であることである。

証明：$\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N$ に対応する $N \times N$ 行列 G を $(\mathsf{G})_{j,k} = \langle \boldsymbol{\varphi}_j, \boldsymbol{\varphi}_k \rangle$ により定義する（G はグラム行列と呼ばれる）。一方、(3.5) より $\langle \Phi | \Phi \rangle = \det[\mathsf{G}]$ がいえる。$\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N$ の線型独立性と $\det[\mathsf{G}] \neq 0$ が同値であることは線形代数のよく知られた定理である[19]。 ■

二つ目の性質は、スレーター行列式状態 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle$ が状態 $\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N$ が定める線形部分空間のみに依存することを示している。

定理 3.3　$\mathcal{H}_1$ の状態の二つの集合 $\{\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N\}$ および $\{\boldsymbol{\psi}_1, \ldots, \boldsymbol{\psi}_N\}$ から定まる $\mathcal{H}_1$ の部分空間が等しいとする。このときゼロでない複素数 c について、

$$\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle = c\, \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \tag{3.15}$$

が成り立つ。つまり、二つのスレーター行列式状態は等しい。

Proof： 仮定より、$\beta_{j,k} \in \mathbb{C}$ があって、任意の $j = 1, \ldots, N$ について $\boldsymbol{\varphi}_j = \sum_{k=1}^N \beta_{j,k}\, \boldsymbol{\psi}_k$ が成り立つ。よって、

$$\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N) = \sum_{k_1, \ldots, k_N = 1}^{N} \beta_{1,k_1} \cdots \beta_{N,k_N}\, \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_{k_1}) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_{k_N}) \tag{3.16}$$

となる。$\{\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_k)\}^2 = 0$ だったから、積 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_{k_1}) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_{k_N})$ はゼロであるか $\pm\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)$ であるかのいずれかである。よって、複素数 c があって $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N) = c\, \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\psi}_N)$ となることがわかった。定理 3.2 より $c \neq 0$ がいえる。 ■

■正規直交完全系　1 粒子ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1$ の正規直交完全系 $\{\boldsymbol{\xi}_\alpha\}_{\alpha=1,2,\ldots}$ を選んで固定し、以前と同様に $\hat{a}^\dagger_\alpha := \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha)$ と定義する。すると、$\mathcal{H}_N$ の任意の状態は、

$$|\Xi_{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N}\rangle := \hat{a}^\dagger_{\alpha_1} \hat{a}^\dagger_{\alpha_2} \cdots \hat{a}^\dagger_{\alpha_N} |\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle, \tag{3.17}$$

[19] 脚注 7 で挙げた私の本にも書いてある。

という状態[20] で、$\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N = 1, 2, \dots$ としたものの線型結合で表わされる。同じ状態を重複して数えないように、$\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ としては、ボソンなら条件 $\alpha_1 \le \alpha_2 \le \cdots \le \alpha_N$ を満たすもの、フェルミオンなら条件 $\alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_N$ を満たすものだけを考えることにする。すると、(3.5) により、$(\alpha_1, \dots, \alpha_N) = (\alpha'_1, \dots, \alpha'_N)$ でない限りは $\langle \Xi_{\alpha_1,\dots,\alpha_N} | \Xi_{\alpha'_1,\dots,\alpha'_N} \rangle = 0$ であること、そして、

$$\langle \Xi_{\alpha_1,\dots,\alpha_N} | \Xi_{\alpha_1,\dots,\alpha_N} \rangle = \begin{cases} \prod_\alpha n_\alpha! & \text{ボソン系}, \\ 1 & \text{フェルミオン系}. \end{cases} \tag{3.18}$$

となることが示される。ここで、n_α は $\alpha_j = \alpha$ を満たす j の総数である。n_α は 1 粒子状態 $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ を占めている粒子の個数と解釈できるので占有数と呼ばれる。明らかに $\sum_{\alpha=1}^{\infty} n_\alpha = N$ が成り立つ。また、$0! = 1$ という流儀を使った。

こうして、N 粒子ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_N$ の正規直交完全系が求められた。ボソン系なら、条件 $\alpha_1 \le \alpha_2 \le \cdots \le \alpha_N$ を満たすすべての $\alpha_1, \dots, \alpha_N = 1, 2, \dots$ について、状態 $(\prod_\alpha n_\alpha!)^{-1/2} |\Xi_{\alpha_1,\dots,\alpha_N}\rangle$ をとればいい。フェルミオン系はより簡単で、条件 $\alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_N$ を満たすすべての $\alpha_1, \dots, \alpha_N = 1, 2, \dots$ について、状態 $|\Xi_{\alpha_1,\dots,\alpha_N}\rangle$ をとる。面白いことに、これら正規直交完全系の完全性の条件は、

$$\frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1,\dots,\alpha_N=1}^{\infty} |\Xi_{\alpha_1,\dots,\alpha_N}\rangle\langle \Xi_{\alpha_1,\dots,\alpha_N}| = \hat{1} \tag{3.19}$$

という簡潔な形にまとめて書ける。右辺の $\hat{1}$ はもちろん $\mathcal{H}_N$ の恒等演算子である。左辺の和ではあえて大小関係を制限せずにすべての $\alpha_1, \dots, \alpha_N = 1, 2, \dots$ について足し上げている。

ボソン系においてもフェルミオン系においても、状態 (3.17) を

$$|\Xi_{\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_N}\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} (\hat{a}_3^\dagger)^{n_3} \cdots |\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle = \Bigl(\prod_{\alpha=1}^{\infty} (\hat{a}_\alpha^\dagger)^{n_\alpha} \Bigr) |\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \tag{3.20}$$

と書き直すことができる。n_α は上で定義した占有数であり、ボソン系では $n_\alpha = 0, 1, 2 \dots$ の範囲を動き、フェルミオン系では $n_\alpha = 0, 1$ の二通りの値をとる。全粒子数の制約 $\sum_{\alpha=1}^{\infty} n_\alpha = N$ のため、有限個の n_α だけがゼロでないことに注意。この書き方に対応して、同じ正規直交完全系の状態を

$$|\Gamma_{n_1,n_2,n_3,\dots}\rangle := \Bigl(\prod_{\alpha=1}^{\infty} \frac{(\hat{a}_\alpha^\dagger)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} \Bigr) |\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \tag{3.21}$$

[20] Feynman の本では $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$。

と表現しよう[21]。ここで、占有数の列 $n_1, n_2, n_3, \ldots$ は、全粒子数の制約 $\sum_{\alpha=1}^{\infty} n_\alpha = N$ の範囲で、すべての許される値を取る。これらの状態をすべて集めたものが $\mathcal{H}_N$ の正規直交完全系になるのである。多粒子系の状態を基底 (3.21) で表現するやり方を占有数表示という。

■演算子の「第二量子化」 ここでも 1 粒子ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1$ の正規直交完全系 $\{\boldsymbol{\xi}_\alpha\}_{\alpha=1,2,\ldots}$ を固定し、$\hat{a}_\alpha^\dagger := \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha)$ と書く。$\mathcal{H}_1$ 上の任意の演算子 $\hat{o}$ に対して、$\mathcal{H}_N$（N は任意）上の演算子を

$$\hat{\mathcal{B}}(\hat{o}) = \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \hat{a}_\alpha^\dagger \langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\, \boldsymbol{\xi}_\beta \rangle \hat{a}_\beta \tag{3.22}$$

のように定義する。演算子 $\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})$ は今でも「演算子 $\hat{o}$ の第二量子化」と呼ばれることがあるが、これもちろん歴史的混乱を反映した妙な呼び方である。演算子 $\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})$ は最初に選んだ $\mathcal{H}_1$ の正規直交完全系の取り方には依存しない。これは $\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})$ に本質的な意味があることを示す重要な事実だ。これを見るため、$\mathcal{H}_1$ の別の正規直交完全系 $\{\boldsymbol{\kappa}_\mu\}_{\mu=1,2,\ldots}$ を取ろう。$\boldsymbol{\xi}_\alpha = \sum_{\mu=1}^{\infty} \boldsymbol{\kappa}_\mu \langle \boldsymbol{\kappa}_\mu, \boldsymbol{\xi}_\alpha \rangle$ だから、生成演算子の線形性 (2.6) より $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha) = \sum_{\mu=1}^{\infty} \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\kappa}_\mu) \langle \boldsymbol{\kappa}_\mu, \boldsymbol{\xi}_\alpha \rangle$ がいえる。 よって、

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{B}}(\hat{o}) &= \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha) \langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\, \boldsymbol{\xi}_\beta \rangle \hat{a}(\boldsymbol{\xi}_\beta) \\
&= \sum_{\alpha,\beta,\mu,\nu=1}^{\infty} \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\kappa}_\mu) \langle \boldsymbol{\kappa}_\mu, \boldsymbol{\xi}_\alpha \rangle \langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\, \boldsymbol{\xi}_\beta \rangle \langle \boldsymbol{\xi}_\beta, \boldsymbol{\kappa}_\nu \rangle \hat{a}(\boldsymbol{\kappa}_\nu) \\
&= \sum_{\mu,\nu=1}^{\infty} \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\kappa}_\mu) \langle \boldsymbol{\kappa}_\mu, \hat{o}\, \boldsymbol{\kappa}_\nu \rangle \hat{a}(\boldsymbol{\kappa}_\nu)
\end{aligned} \tag{3.23}$$

となり、$\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})$ が正規直交完全系の選択に依存しないことが示された。

任意の $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}_1$ について、(反) 交換関係 (3.1) より

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})\, \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}) &= \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \hat{a}_\alpha^\dagger \langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\, \boldsymbol{\xi}_\beta \rangle \hat{a}_\beta\, \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}) \\
&= \zeta \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \hat{a}_\alpha^\dagger\, \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}) \langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\, \boldsymbol{\xi}_\beta \rangle \hat{a}_\beta + \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \hat{a}_\alpha^\dagger \langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\, \boldsymbol{\xi}_\beta \rangle \langle \boldsymbol{\xi}_\beta, \boldsymbol{\varphi} \rangle \\
&= \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}) \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \hat{a}_\alpha^\dagger \langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\, \boldsymbol{\xi}_\beta \rangle \hat{a}_\beta + \sum_{\alpha=1}^{\infty} \hat{a}_\alpha^\dagger \langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\, \boldsymbol{\varphi} \rangle
\end{aligned} \tag{3.24}$$

[21] Feynamn の本では $|n_1, n_2, n_3, \ldots\rangle$。

が成り立つ。線形性 (2.6) を使えば、右辺第二項は、

$$\sum_{\alpha=1}^{\infty} \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha)\,\langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\,\boldsymbol{\varphi}\rangle = \hat{a}^\dagger\Big(\sum_{\alpha=1}^{\infty} \boldsymbol{\xi}_\alpha\,\langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{o}\,\boldsymbol{\varphi}\rangle\Big) = \hat{a}^\dagger(\hat{o}\boldsymbol{\varphi}) \tag{3.25}$$

と書き換えられる。こうして、ボソン系、フェルミオン系の双方について、交換関係

$$[\hat{\mathcal{B}}(\hat{o}), \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})] = \hat{a}^\dagger(\hat{o}\boldsymbol{\varphi}) \tag{3.26}$$

が示された。同じようにして、$\mathcal{H}_1$ 上の任意の演算子 $\hat{o}$, $\hat{o}'$ について

$$[\hat{\mathcal{B}}(\hat{o}), \hat{\mathcal{B}}(\hat{o}')] = \hat{\mathcal{B}}([\hat{o}, \hat{o}']) \tag{3.27}$$

を示すことができる（ちょうどいい練習問題なのでやってみよう）。

交換関係 (3.26) をくり返し用い、また $\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle = 0$ に注意すれば、任意の $\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N \in \mathcal{H}_1$ について、

$$\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)\,|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle = \sum_{j=1}^{N} \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_{j-1})\,\hat{a}^\dagger(\hat{o}\boldsymbol{\varphi}_j)\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_{j+1})\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)\,|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \tag{3.28}$$

となることが示される。右辺では、演算子 $\hat{o}$ が N 個の粒子に一つずつ順番に作用していることが見て取れる。つまり、$\mathcal{H}_N$ の状態に作用する際には、「$\hat{o}$ の第二量子化」の $\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})$ は、実質的に、

$$\hat{\mathcal{B}}(\hat{o}) = \hat{o}_1 + \hat{o}_2 + \cdots + \hat{o}_N \tag{3.29}$$

とみなせるということだ。ここで、$\hat{o}_j$ は $\hat{o}$ が j 番目の粒子に作用していることを表わしている。

簡単だが重要な例として、$\hat{o} = \hat{1}$ としてみよう。$\hat{1}$ は $\mathcal{H}_1$ 上の恒等演算子である。すると、(3.28) は $\hat{\mathcal{B}}(\hat{1})\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)\,|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle = N\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)\,|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle$ となり、任意の $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_N$ について $\hat{\mathcal{B}}(\hat{1})\,|\Phi\rangle = N\,|\Phi\rangle$ であることがわかる。そこで、$\hat{N} := \hat{\mathcal{B}}(\hat{1})$ と書き、$\hat{N}$ を数演算子と呼ぶ。定義 (3.22) に戻れば、

$$\hat{N} = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha)\,\hat{a}(\boldsymbol{\xi}_\alpha) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \hat{n}(\boldsymbol{\xi}_\alpha) \tag{3.30}$$

と書ける。ここで、$\|\boldsymbol{\varphi}\| = 1$ となる任意の 1 粒子状態 $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}_1$ について

$$\hat{n}(\boldsymbol{\varphi}) = \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}) \tag{3.31}$$

と定義した。演算子 $\hat{n}(\boldsymbol{\varphi})$ の固有値は、ボソン系については $0, 1, 2, \ldots$ であり、フェルミオン系については $0, 1$ であることは容易に示される[22]。よって、$\hat{n}(\boldsymbol{\varphi})$ は 1 粒子状態 $\boldsymbol{\varphi}$ に「入っている」粒子の個数を数える数演算子と解釈できることがわかる。 同様に、(2.30) を使えば、

$$\hat{N} = \int d^3\boldsymbol{x}\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \int d^3\boldsymbol{x}\,\hat{\rho}(\boldsymbol{x}) \tag{3.32}$$

となることがわかる。ここで、$\hat{\rho}(\boldsymbol{x}) := \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ は位置 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$ における密度を表わす演算子である。

■フォック空間　生成・消滅演算子 $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}), \hat{a}(\boldsymbol{\varphi})$ と「$\hat{o}$ を第二量子化した」演算子 $\hat{\mathcal{B}}(\hat{o})$ は、任意の N に対応する N 粒子ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_N$ に作用する。それならば、これら演算子は、様々な粒子数の状態を含む

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_3 \oplus \cdots \tag{3.33}$$

というヒルベルト空間に作用すると考えることもできる。ヒルベルト空間 $\mathcal{F}$ はフォック空間と呼ばれる。

フォック空間 $\mathcal{F}$ の状態は $c_0 + |\Phi^{(1)}\rangle + |\Phi^{(2)}\rangle + |\Phi^{(3)}\rangle + \cdots$ という形をしている。ここで、$c_0 \in \mathbb{C} = \mathcal{H}_0$ は任意の複素数であり、$|\Phi^{(N)}\rangle$ は（ゼロかもしれない）$\mathcal{H}_N$ の任意の状態である[23]。ここで、任意の $N \neq M$ については、すべての状態 $|\Phi^{(N)}\rangle \in \mathcal{H}_N$, $|\Phi^{(M)}\rangle \in \mathcal{H}_M$ について $\langle\Phi^{(N)}|\Phi^{(M)}\rangle = 0$ と定めておく。同じことだが、フォック空間 $\mathcal{F}$ は、任意の $N = 0, 1, 2, \ldots$ と任意の $\boldsymbol{\varphi}_1, \ldots, \boldsymbol{\varphi}_N \in \mathcal{H}_1$ についての $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_1)\cdots\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle$ という状態すべてのあらゆる線型結合からなるともいえる。

電子や原子の系では、異なった粒子数の状態の線型結合を考えることに物理的な意味がないことに注意しておこう。そのような状態は決して実現できない（より正確には、決して観測されない）からである。このような場合にはフォック空間は純粋に理論的な対象だと考えるべきである。ただし、超伝導やボース・アインシュタイン凝縮の平均場近似などの理論においてはフォック空間の状態を利用すると圧倒的に便利なことが知られている[24]。

---

[22] ボソン系については、(3.1) から $[\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}), \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})] = 1$ が得られることに注意して、調和振動子でおなじみの結果を思い出せばいい。フェルミオン系については、まず $\{\hat{n}(\boldsymbol{\varphi})\}^2 = \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}) = \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})\{1 - \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi})\}\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}) = \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\varphi})\hat{a}(\boldsymbol{\varphi}) = \hat{n}(\boldsymbol{\varphi})$ を示す。次に固有値 n も同じ関係 $n^2 = n$ を満たすことに注意すれば n は 0 または 1 とわかる。

[23] 厳密にいうと、フォック空間は $|c_0|^2 + \sum_{n=1}^\infty \|\Phi^{(n)}\|^2 < \infty$ を満たすすべての無限和からなる。また直和の通常の定義に慣れている読者は、上の $|\Phi^{(N)}\rangle$ を $(0, \ldots, 0, |\Phi^{(N)}\rangle, 0, \ldots)$ と解釈すればいい。

[24] これにはちゃんと理由があり、例えば、以下の拙著の第 5 章で詳しく議論されている。Hal Tasaki, *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems*, Graduate Texts in Physics (Springer, 2020)

4　シュレディンガー方程式とハミルトニアン

相互作用する非相対論的な多粒子系の、波動関数表示でのシュレディンガー方程式を

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_{\rm int})\,\Phi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N) = E\,\Phi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N) \tag{4.1}$$

と書こう。ここで、相互作用のない系のハミルトニアンは、$V(\boldsymbol{r})$ を一体のポテンシャルとして、

$$\hat{H}_0 = \sum_{j=1}^{N} \Big\{ \frac{(\hat{\boldsymbol{p}}_j)^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{r}}_j) \Big\} \tag{4.2}$$

であり、相互作用ハミルトニアンは、二体相互作用のポテンシャルを $V_{\rm int}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$ として、

$$\hat{H}_{\rm int} = \sum_{\substack{j,j'=1 \\ (j<j')}}^{N} V_{\rm int}(\hat{\boldsymbol{r}}_j - \hat{\boldsymbol{r}}_{j'}) \tag{4.3}$$

である。これらのハミルトニアンを生成・消滅演算子で書き直そう。

■相互作用のない系のハミルトニアン　まず、(4.2) と (3.29) を見比べれば、一体のハミルトニアン

$$\hat{h} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{4.4}$$

を用いて

$$\hat{H}_0 = \hat{\mathcal{B}}(\hat{h}) \tag{4.5}$$

と書けることがすぐにわかるだろう。つまり、N 体のハミルトニアン $\hat{H}_0$ は一体のハミルトニアン $\hat{h}$ の「第二量子化」なのだ。

$\hat{H}_0$ を $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ で表わしてみよう。まず、

$$\langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{h}\,\boldsymbol{\xi}_\beta \rangle = \int d^3\boldsymbol{x}\,\{\xi_\alpha(\boldsymbol{x})\}^* \Big\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle + V(\boldsymbol{x}) \Big\} \xi_\beta(\boldsymbol{x}) \tag{4.6}$$

に注意する。次に、(3.22) を用いて

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha)\,\langle \boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{h}\,\boldsymbol{\xi}_\beta\rangle\,\hat{a}(\boldsymbol{\xi}_\beta) \\
&= \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \int d^3\boldsymbol{x}\,\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{\xi}_\alpha)\,\{\xi_\alpha(\boldsymbol{x})\}^*\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\triangle + V(\boldsymbol{x})\Big\}\xi_\beta(\boldsymbol{x})\,\hat{a}(\boldsymbol{\xi}_\beta) \\
&= \int d^3\boldsymbol{x}\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\triangle + V(\boldsymbol{x})\Big\}\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3\boldsymbol{x}\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\,\triangle\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) + \int d^3\boldsymbol{x}\,V(\boldsymbol{x})\,\hat{\rho}(\boldsymbol{x}),
\end{aligned}
\tag{4.7}
$$

とすれば、標準的な表式が得られる（$\hat{\rho}(\boldsymbol{x}) = \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ である）。三行目を導く際に (2.30) を用いた。

次に同じハミルトニアンを $\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k})$ で表現しよう。(4.7) の三行目の表式に (2.37) を代入すると、

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \int d^3\boldsymbol{x} \int \frac{d^3\boldsymbol{k}\,d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k})\,e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\triangle + V(\boldsymbol{x})\Big\}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}}\,\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}') \\
&= \int d^3\boldsymbol{x} \int \frac{d^3\boldsymbol{k}\,d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}\,e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}}\,\frac{\hbar^2|\boldsymbol{k}'|^2}{2m}\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}') \\
&\quad + \int d^3\boldsymbol{x} \int \frac{d^3\boldsymbol{k}\,d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}\,e^{-i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}}\,V(\boldsymbol{x})\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}') \\
&= \int d^3\boldsymbol{k}\,\frac{\hbar^2|\boldsymbol{k}|^2}{2m}\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}) + \int \frac{d^3\boldsymbol{k}\,d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}\,\tilde{V}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}')
\end{aligned}
\tag{4.8}
$$

が得られる。ここでデルタ関数の表式 (2.32) を用い、ポテンシャルのフーリエ変換を

$$
\tilde{V}(\boldsymbol{k}) := \int d^3\boldsymbol{x}\,e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,V(\boldsymbol{x}) \tag{4.9}
$$

と定義した。第二項を書き換えて、

$$
\hat{H}_0 = \int d^3\boldsymbol{k}\,\frac{\hbar^2|\boldsymbol{k}|^2}{2m}\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}) + \int \frac{d^3\boldsymbol{k}\,d^3\boldsymbol{q}}{(2\pi)^3}\,\tilde{V}(\boldsymbol{q})\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}) \tag{4.10}
$$

のように表わすと見通しがいい。ここでは、波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の粒子が消され、代わりに波数ベクトル $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ の粒子が作られている（そして、このプロセスの複素振幅が $\tilde{V}(\boldsymbol{q})$）と見ることができる。

最後に、1 粒子ヒルベルト空間の正規直交完全系 $\{\boldsymbol{\xi}_\alpha\}_{\alpha=1,2,\ldots}$ として、1 粒子ハミルトニアン $\hat{h}$ の固有状態を取ろう。つまり、任意の $\alpha=1,2,\ldots$ について、

$$\hat{h}\,\boldsymbol{\xi}_\alpha=\epsilon_\alpha\,\boldsymbol{\xi}_\alpha \tag{4.11}$$

を仮定する。もちろん、ϵ_α は対応する 1 粒子エネルギー固有値である。すると、交換関係 (3.26) から直ちに

$$[\hat{H}_0,\hat{a}^\dagger_\alpha]=\epsilon_\alpha\,\hat{a}^\dagger_\alpha \tag{4.12}$$

となることがわかり、さらに、

$$[\hat{H}_0,\hat{a}^\dagger_{\alpha_1}\cdots\hat{a}^\dagger_{\alpha_N}]=\left(\sum_{j=1}^{N}\epsilon_{\alpha_j}\right)\hat{a}^\dagger_{\alpha_1}\cdots\hat{a}^\dagger_{\alpha_N} \tag{4.13}$$

となることがわかる。これと $\hat{H}_0|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle=0$ を使えば、(3.17) で定義した状態 $|\Xi_{\alpha_1,\ldots,\alpha_N}\rangle$ について、

$$\hat{H}_0\,|\Xi_{\alpha_1,\ldots,\alpha_N}\rangle=\left(\sum_{j=1}^{N}\epsilon_{\alpha_j}\right)|\Xi_{\alpha_1,\ldots,\alpha_N}\rangle \tag{4.14}$$

が示される。つまり、状態 $|\Xi_{\alpha_1,\ldots,\alpha_N}\rangle$ は粒子間の相互作用がない場合のエネルギー固有状態なのである。この結論は、$\hat{H}_0$ のまた別の表式

$$\hat{H}_0=\sum_{\alpha=1}^{\infty}\epsilon_\alpha\,\hat{a}^\dagger_\alpha\hat{a}_\alpha=\sum_{\alpha=1}^{\infty}\epsilon_\alpha\,\hat{n}_\alpha \tag{4.15}$$

からも導かれる。(4.15) は (4.11) と定義 (3.22) から簡単に示される。なお、ここで $\hat{n}_\alpha=\hat{n}(\boldsymbol{\xi}_\alpha)$ は 1 粒子状態 $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ に対応する数演算子である。(4.15) はハミルトニアン H_0 の対角化した表示としてよく知られている。

エネルギー固有値 $\sum_{j=1}^{N}\epsilon_{\alpha_j}$ を最小にするように $\alpha_1,\ldots,\alpha_N$ を選べば、相互作用のない系のハミルトニアン $\hat{H}_0$ の基底状態が得られる。ここで、簡単のため、一体のハミルトニアン $\hat{h}$ の固有値は縮退していないとし、これらを $\epsilon_\alpha<\epsilon_{\alpha+1}$ となるように番号付けておく。すると、ボソン系での基底状態を作るには、すべての $j=1,\ldots,N$ に対して $\alpha_j=1$ とすればいい。つまり、基底状態は $|\Xi_{1,1,\ldots,1}\rangle$ であり、基底エネルギーは $N\,\epsilon_1$ である。一方、フェルミオン系での基底状態を作るには、$j=1,\ldots,N$ について $\alpha_j=j$ とする。つまり、基底状態は $|\Xi_{1,2,\ldots,N}\rangle$ であり、基底エネルギーは $\sum_{\alpha=1}^{N}\epsilon_\alpha$ である。

■相互作用のない系での消滅演算子の時間発展　ここで、t を時刻として、相互作用のない系でのハイゼンベルク表示での消滅演算子

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) := e^{i\hat{H}_0 t}\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\,e^{-i\hat{H}_0 t} \tag{4.16}$$

を考えよう。$\frac{d}{dt}e^{i\hat{H}_0 t} = i\,e^{i\hat{H}_0 t}\hat{H}_0$ および $\frac{d}{dt}e^{-i\hat{H}_0 t} = -i\,\hat{H}_0\,e^{i\hat{H}_0 t}$ に注意すれば、(4.16) の時間微分は

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) = e^{i\hat{H}_0 t}\,[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\hat{H}_0]\,e^{-i\hat{H}_0 t} \tag{4.17}$$

と書ける。（反）交換関係 (2.28) と (4.7) の下から二つ目の表式を使って少し計算すると、

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\hat{H}_0] = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\triangle\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) + V(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \tag{4.18}$$

が得られる。この交換関係はボソン系でもフェルミオン系でも成り立つことに注意。これを (4.17) に戻して (4.16) を使えば、結局、

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\triangle\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) + V(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) \tag{4.19}$$

となる。1 粒子系のシュレディンガー方程式と完全に同じ形になった。相互作用のない系だけで見られるこの類似性が「$\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ は波動関数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ をさらに『量子化』（つまり『第二量子化』）したものだ」という誤解が生まれた（そして、なかなか消えない）一つの原因だろう。

■相互作用ハミルトニアン　生成・消滅演算子を使うと相互作用ハミルトニアン (4.3) は

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x}\,d^3\boldsymbol{y}\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{y})\,V_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{y})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \tag{4.20}$$

のように書ける。実際、これが (4.3) のハミルトニアンを再現していることを確かめるため、N 個の粒子の位置が $\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_N$ に確定している状態 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle$ にハミルトニアンを作用させてみよう。まず、（反）交換関係 (2.28) から

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle = \sum_{j=1}^{N}\zeta^{j-1}\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)\,\underbrace{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)}_{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_j)\ \text{はなし}}|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \tag{4.21}$$

が得られることに注意しよう。同様にして、

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{y})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle = \sum_{\substack{j,j'=1\\(j\neq j')}}^{N}\eta_{j,j'}\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)\,\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_{j'})\,\underbrace{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)}_{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_j),\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_{j'})\ \text{はなし}}|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \tag{4.22}$$

となることもわかる。ただし、ここでは $j > j'$ のとき $\eta_{j,j'} = \zeta^{j-1}\zeta^{j'-1}$ と、$j < j'$ のとき $\eta_{j,j'} = \zeta^{j-1}\zeta^{j'}$ とおいた。$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j) = \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_j)\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)$ となることに注意すれば、

$$
\begin{aligned}
&\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{y})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{y})\,\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \\
&\qquad = \sum_{\substack{j,j'=1\\(j\neq j')}}^{N} \eta_{j,j'}\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)\,\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_{j'})\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_j)\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_{j'})\,\underbrace{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)}_{\text{no }\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_j),\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_{j'})}|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \\
&\qquad = \sum_{\substack{j,j'=1\\(j\neq j')}}^{N} \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j)\,\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}_{j'})\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle
\end{aligned}
\tag{4.23}
$$

とわかる。よって、$\hat{H}_{\mathrm{int}}$ の (4.20) の表式を $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle$ に作用させて積分を実行すれば、

$$
\hat{H}_{\mathrm{int}}\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle = \frac{1}{2}\sum_{\substack{j,j'=1\\(j\neq j')}}^{N} V_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{x}_j-\boldsymbol{x}_{j'})\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|\Phi_{\mathrm{vac}}\rangle \tag{4.24}
$$

が得られることになる。明らかにこれは元々の相互作用ハミルトニアン (4.3) の作用と同じである。

最後に (4.20) を $\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k})$, $\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k})$ で書き直しておこう。(2.37) を (4.20) に代入すれば、

$$
\hat{H}_{\mathrm{int}} = \frac{1}{2(2\pi)^6}\int d^3\boldsymbol{x}\,d^3\boldsymbol{y}\Bigl(\prod_{\nu=1}^{4} d^3\boldsymbol{k}_\nu\Bigr)\,e^{-i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{x}-i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{y}+i\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{y}+i\boldsymbol{k}_4\cdot\boldsymbol{x}}\,V_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}_1)\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}_2)\,\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}_3)\,\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}_4)
$$

となる。積分変数を $\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$ に変更して、

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2(2\pi)^6}\int d^3\boldsymbol{w}\,d^3\boldsymbol{y}\Bigl(\prod_{\nu=1}^{4} d^3\boldsymbol{k}_\nu\Bigr)\,e^{-i(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_4)\cdot\boldsymbol{y}-i(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_4)\cdot\boldsymbol{w}}\,V_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{w})\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}_1)\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}_2)\,\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}_3)\,\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}_4) \\
&= \frac{1}{2(2\pi)^3}\int\Bigl(\prod_{\nu=1}^{4} d^3\boldsymbol{k}_\nu\Bigr)\delta(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_4)\,\tilde{V}_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_4)\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}_1)\,\hat{\mathfrak{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}_2)\,\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}_3)\,\hat{\mathfrak{a}}(\boldsymbol{k}_4)
\end{aligned}
\tag{4.25}
$$

が得られる。ここで相互作用ポテンシャルのフーリエ変換を

$$
\tilde{V}_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{k}) = \int d^3\boldsymbol{x}\,e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,V_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{x}) \tag{4.26}
$$

と定義した。(4.25) の最後の表式は、V_{int} が作用する前後での運動量が保存すること、つまり $\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{p}_3+\boldsymbol{p}_4$ となること（ただし $\boldsymbol{p}_\nu=\hbar\boldsymbol{k}_\nu$）を示している。まず $\boldsymbol{k}_1$ についての積分を実行した後、$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_4$, $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}_3$, $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_3-\boldsymbol{k}_2$ と書き直し、さらに積分変数を $\boldsymbol{k}_2$ から $\boldsymbol{q}$ に変更すると、(4.25) は、

$$\hat{H}_{\mathrm{int}}=\frac{1}{2(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{k}\,d^3\boldsymbol{k}'\,d^3\boldsymbol{q}\,\tilde{V}_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{q})\,\hat{\mathbb{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})\,\hat{\mathbb{a}}^\dagger(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q})\,\hat{\mathbb{a}}(\boldsymbol{k}')\,\hat{\mathbb{a}}(\boldsymbol{k}) \tag{4.27}$$

と書き換えられる。つまり、相互作用によって、運動量 $\hbar\boldsymbol{q}$ が一つの粒子からもう一方の粒子へ（複素振幅 $\tilde{V}_{\mathrm{int}}(\boldsymbol{q})$ で）移動することが読み取れる。

英語版の草稿に貴重なコメントをくださった井田大輔さん、英語版を丁寧に読んで様々なミスを指摘してくれた学習院大学・理論物理学研究室の 2018 年度の卒業研究生のみなさんに感謝します。