

自己共役（物理用語ではエルミート）とは限らない2つの（線形）演算子 $\hat{X}, \hat{Y}$ のカノニカル相関 (canonical correlation) を、次のように定義する：

$$\langle \hat{X}; \hat{Y} \rangle_{\hat{H}} \equiv \frac{1}{\beta} \int_0^\beta \langle e^{\lambda \hat{H}} \hat{X}^\dagger e^{-\lambda \hat{H}} \hat{Y} \rangle_{\hat{H}} d\lambda \quad (13.22)$$

これは、ハイゼンベルグ表示の演算子

$$\hat{X}(t) = e^{-t\hat{H}/i\hbar} \hat{X} e^{t\hat{H}/i\hbar} \quad (13.23)$$

に $t = -i\hbar\lambda$ を代入した演算子を用いて、

$$\langle \hat{X}; \hat{Y} \rangle_{\hat{H}} = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{X}^\dagger(-i\hbar\lambda) \hat{Y} \rangle_{\hat{H}} = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \langle \hat{X}^\dagger \hat{Y}(i\hbar\lambda) \rangle_{\hat{H}} \quad (13.24)$$

とも書ける。

このカノニカル相関の意味を明らかにするために、まず、数学的性質を見よう。定義から、カノニカル相関の値は複素数であるが、それは、（線形演算子たちの集合である複素線形空間に定義された）演算子同士の内積と見なすことができる¹。実際、内積の3つの公理

$$\langle \hat{X}; \hat{X} \rangle_{\hat{H}} \geq 0 \quad (13.25)$$

$$\langle \hat{X}; \hat{Y} \rangle_{\hat{H}}^* = \langle \hat{Y}; \hat{X} \rangle_{\hat{H}} \quad (13.26)$$

$$\langle \hat{X}; \eta \hat{Y} + \xi \hat{Z} \rangle_{\hat{H}} = \eta \langle \hat{X}; \hat{Y} \rangle_{\hat{H}} + \xi \langle \hat{X}; \hat{Z} \rangle_{\hat{H}} \quad (\eta, \xi \in \mathbb{C}) \quad (13.27)$$

を満たすことが容易に示せる（下の問題）。ゆえに、Schwarz 不等式

$$\left| \langle \hat{X}; \hat{Y} \rangle_{\hat{H}} \right|^2 \leq \langle \hat{X}; \hat{X} \rangle_{\hat{H}} \langle \hat{Y}; \hat{Y} \rangle_{\hat{H}} \quad (13.28)$$

が従う。また、(13.22) で積分変数を $\lambda' \equiv \lambda - \beta$ に置き換えれば直ちに示せるように、

$$\langle \hat{X}; \hat{Y} \rangle_{\hat{H}} = \langle \hat{Y}^\dagger; \hat{X}^\dagger \rangle_{\hat{H}} \quad (13.29)$$

次に、カノニカル相関の物理的意味を見るために、 $\hat{X}, \hat{Y}$ が、自己共役演算子 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger, \hat{B} = \hat{B}^\dagger$ である場合を考えよう。するとまず、(13.26), (13.29) より、自己共役演算子のカノニカル相関は実対称

$$\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle_{\hat{H}} = \langle \hat{B}; \hat{A} \rangle_{\hat{H}} \in \mathbb{R}. \quad (13.30)$$

だとわかる。また、恒等演算子 $\hat{1}$ と自己共役演算子のカノニカル相関は、平衡期待値になる：

$$\langle \hat{A}; \hat{1} \rangle_{\hat{H}} = \langle \hat{1}; \hat{A} \rangle_{\hat{H}} = \langle \hat{A} \rangle_{\hat{H}} \quad (13.31)$$

さらに、

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0 \text{ または } [\hat{B}, \hat{H}] = 0 \text{ ならば、 } \langle \hat{A}; \hat{B} \rangle_{\hat{H}} = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle_{\hat{H}} = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle_{\hat{H}} \quad (13.32)$$

であるから、 $\hat{H}$ と（どちらかが）交換する力学変数のカノニカル相関は、単なる相関（積の平衡期待値）に等しい。とくに古典極限では、あらゆる力学変数は $\hat{H}$ と交換するようになるので、どんな力学変数のカノニカル相関も単なる相関に等しくなる：

$$\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle_{\hat{H}} \xrightarrow{\text{古典極限}} \langle AB \rangle_{\hat{H}} \quad (13.33)$$

以上のことから、カノニカル相関とは、単なる相関（積の平衡期待値）に、若干の量子補正を施したものと分かる。

特に、力学変数の平衡値を差し引いた

$$\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\hat{H}} \quad (13.34)$$

のカノニカル相関 $\langle \Delta \hat{A}; \Delta \hat{B} \rangle_{\hat{H}}$ は、古典極限で、平衡状態における（平衡値を差し引いた真の意味の）相関 $\langle \Delta A \Delta B \rangle_{\hat{H}}$ に等しい。たとえば、同じ力学変数同士のカノニカル相関は、古典極限で

$$\langle \Delta \hat{A}; \Delta \hat{A} \rangle_{\hat{H}} \xrightarrow{\text{古典極限}} \langle (\Delta A)^2 \rangle_{\hat{H}} \quad (13.35)$$

のように平衡状態におけるゆらぎになるので、 $\langle \Delta \hat{A}; \Delta \hat{A} \rangle_{\hat{H}}$ は、ゆらぎに若干の量子補正を施したものと分かる。

なお、線形非平衡統計力学では、異なる時刻のカノニカル相関 $\langle \hat{A}; \hat{B}(t) \rangle_{\hat{H}}$ が登場するが、それについての解説は、（いつか書く予定の）線形非平衡統計力学の教科書に記すことにする。

¹内積とみなすためには、演算子を、カノニカル相関が有限な値を持つような演算子だけに制限する必要がある。対象系の量子論に現れる全ての演算子について以下が成り立つというわけではない。たとえば、 $\hat{X} = \hat{p}, \hat{Y} = \hat{q}, \hat{H} = \hat{p}^2$ の場合に、以下に現れる公式 (13.32) を機械的に適用すると、 $\langle \hat{p}\hat{q} \rangle_{\hat{H}} = \langle \hat{q}\hat{p} \rangle_{\hat{H}}$ となって、正準交換関係に矛盾する。