2. 経路積分量子化

渡辺展正*(Hiromasa Watanabe)

September 15, 2024

Abstract

この講義ノートは、「格子上の場の理論夏の学校2024」(HP:https://akio-tomiya.github.io/latticeschool2024/)の一コマ「経路積分量子化」の講義ノートである。

Contents

ま	えがる		1
1	量子力学の経路積分		
	1.1	実時間発展と遷移振幅・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	2
	1.2	Euclidean 経路積分	5
	1.3	有限温度系	8
	1.4	生成汎関数	8
2	場の	量子論の経路積分	10
3	フェ	ルミオンの経路積分	12
	3.1	Gransmann数とGrassmann積分	12
	3.2	Grassmann積分に関する関係式	14
4	ゲー	·ジ理論	16
	4.1	格子ゲージ理論と数値計算	16
		4.1.1 なぜ格子正則化なのか?	
	4.2	Faddeev-Popov処方とゲージ固定	17
	4.3	Elitzurの定理	19
	4.4	どうやって経路積分を計算するのか?	20

^{*}京都大学基礎物理学研究所, hiromasa.watanabe@yukawa.kyoto-u.ac.jp

まえがき

本講義では、格子ゲージ理論、とりわけ数値計算への応用を念頭に、「経路積分量子化」について解説した。授業の時間に限りがあるため、説明が簡略化されている箇所や重要な内容が省略されている点についてはご容赦いただきたい。

この講義ノートでは、c = h = 1 の自然単位系を使用する。

この講義ノートは、主に教科書 [1,2,3,4]の内容に基づいている。準備にあたっては、西岡辰磨氏の講義「場の量子論と量子エンタングルメント入門」(第1回極限宇宙スクール)も参考にした。他にも経路積分の教科書としては、[5,6,7]等も有名である。 3章のフェルミオンの経路積分については、格子QCDの教科書 [8]も参考にした。4章のゲージ理論の議論は、格子場の理論を扱った日本語の教科書 [9,10,11]から多くの影響を受けている。Faddeev-Popov処方の説明を含むゲージ場の理論の経路積分形式については、定番の教科書[2]に加えて、記事[12]が非常によくまとまっている。一度ゲージ理論を学んだ人でも一読の価値がある。また紙面の関係上、発表スライドには載せられなかった議論や文献情報に関する幾つかの情報を、講義ノートの方に掲載した。

1 量子力学の経路積分

1.1 実時間発展と遷移振幅

まずは1自由度の場合を考える。 Schrödinger 表示での位置演算子 \hat{q} と運動量演算子 \hat{p} は、不確定性関係 $[\hat{q},\hat{p}]=i$ を満たす。状態 $|\psi(t)\rangle$ は、系のHamiltonian \hat{H} を使って与えられるSchrödinger方程式

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle,$$
 (1.1)

に従って時間発展する。

Heisenberg 表示では、演算子が

$$\hat{O}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{O} e^{-i\hat{H}t}, \qquad (1.2)$$

のような形で時間発展する。 Schrödinger 表示と違い、状態は時間発展しない立場だが

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi\rangle,$$
 (1.3)

としておけば、両者は整合的である。位置演算子の固有状態

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle. \tag{1.4}$$

はこの時間発展との整合性から

$$|q,t\rangle = e^{i\hat{H}t} |q\rangle, \qquad \hat{q}(t) |q,t\rangle = q |q,t\rangle,$$
 (1.5)

といった関係で結ばれる。

以下でしばしば用いる完全系を準備しておく:位置演算子の固有状態を使うと

$$\mathbb{1} = \int \mathrm{d}q \, |q\rangle\langle q| \,, \tag{1.6}$$

と表される。また、 $\mathbb{1}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\,\mathbb{1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}$ でもあることから、

$$\mathbb{1} = \int dq |q, t\rangle\langle q, t|, \qquad (1.7)$$

と表すこともできる。以降では、この恒等演算 1 をあちこちに挿入することになる。

時刻 $t=t_{\rm I}$ に位置 $q=q_{\rm I}$ にある状態から、時刻 $t=t_{\rm F}$ (> $t_{\rm I}$) に位置 $q=q_{\rm F}$ にある状態に変わる遷移振幅は、

$$\langle q_{\rm F}, t_{\rm F} | q_{\rm I}, t_{\rm I} \rangle = \langle q_{\rm F} | e^{-i\hat{H}(t_{\rm F} - t_{\rm I})} | q_{\rm I} \rangle,$$
 (1.8)

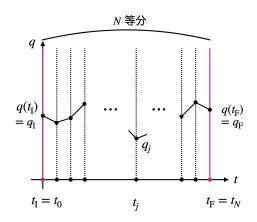


Figure 1: 経路積分と時間方向の離散化

で表される。このとき時間方向を次のように離散化する:

$$\Delta t = \frac{t_{\rm F} - t_{\rm I}}{N}, \qquad t_n = t_{\rm I} + n\Delta t, \quad (: t_0 = t_{\rm I}, \ t_N = t_{\rm F}).$$
 (1.9)

また $q_n=q(t_n)$ $(q_0=q(t_0)=q_{\rm I},\ q_N=q(t_N)=q_{\rm F})$, という記法を用いる。 各時刻 t_n ごとに先ほどの完全系を遷移振幅へ挿入していく(図1参照)と、

$$\langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | q_{\mathcal{I}}, t_{\mathcal{I}} \rangle = \int dq_{1} \langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | q_{1}, t_{1} \rangle \langle q_{1}, t_{1} | q_{\mathcal{I}}, t_{1} \rangle$$

$$= \int dq_{2} dq_{1} \langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | q_{2}, t_{2} \rangle \langle q_{2}, t_{2} | q_{1}, t_{1} \rangle \langle q_{1}, t_{1} | q_{\mathcal{I}}, t_{\mathcal{I}} \rangle$$

$$= \cdots$$

$$= \int dq_{N-1} \cdots dq_{1} \langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle q_{N-1}, t_{N-1} | \cdots | q_{1}, t_{1} \rangle \langle q_{1}, t_{1} | q_{\mathcal{I}}, t_{\mathcal{I}} \rangle$$

$$= \int dq_{N-1} \cdots dq_{1} \prod_{n=0}^{N-1} \langle q_{n+1}, t_{n+1} | q_{n}, t_{n} \rangle$$

$$= \int dq_{N-1} \cdots dq_{1} \prod_{n=0}^{N-1} \langle q_{n+1} | e^{-i\hat{H}\Delta t} | q_{n} \rangle. \qquad (1.10)$$

ここで、ある時刻 t_n からの微小時刻発展の遷移振幅 $\langle q_{n+1}|\, {
m e}^{-{
m i}\hat{H}\Delta t}\,|q_n
angle$ に注目しよう。今度は運動量基底での完全系

$$\mathbb{1} = \int \mathrm{d}p \, |p\rangle\!\langle p| \,, \tag{1.11}$$

を挿入すると、

$$\langle q_{n+1} | e^{-i\hat{H}\Delta t} | q_n \rangle = \int dp_n \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | e^{-i\hat{H}\Delta t} | q_n \rangle$$

$$= \int dp_n \left[1 - iH(p_n, q_n)\Delta t + O(\Delta t^2) \right] \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | q_n \rangle$$

$$= \int \frac{dp_n}{2\pi} \exp\left[i \left\{ p_n (q_{n+1} - q_n) - H(p_n, q_n)\Delta t + O(\Delta t^2) \right\} \right]. \quad (1.12)$$

ただし、2つ目の等式では演算子の順序を適当に決めており1、3つ目の等式では

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipq},$$
 (1.13)

であることを用いた2。すると全体の遷移振幅は

$$\langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | q_{\mathcal{I}}, t_{\mathcal{I}} \rangle = \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} dq_n \right] \left[\prod_{n=0}^{N-1} \frac{dp_n}{2\pi} \right] \exp \left[i \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \left(p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\Delta t} - H(p_n, q_n) \right) \Delta t \right\} \right] + \cdots$$

$$\stackrel{\Delta t \to 0}{\longrightarrow} \int_{q(t_{\mathcal{I}}) = q_{\mathcal{I}}}^{q(t_{\mathcal{F}}) = q_{\mathcal{F}}} \widetilde{\mathcal{D}} q \widetilde{\mathcal{D}} p \exp \left[i \int_{t_{\mathcal{I}}}^{t_{\mathcal{F}}} dt \{ p(t) \dot{q}(t) - H(p(t), q(t)) \} \right].$$

$$(1.15)$$

ただし $O(\Delta t^2)$ の寄与は点線部分として略記した。ここで積分測度は、 $\Delta t \to 0$ と $N \to \infty$ が等価であることに注意して

$$\widetilde{\mathcal{D}q}\widetilde{\mathcal{D}p} := \lim_{N \to \infty} \left[\prod_{n=1}^{N-1} dq_n \right] \left[\prod_{n=0}^{N-1} \frac{dp_n}{2\pi} \right], \tag{1.16}$$

で形式的に定義される。また、より一般的な波動関数 $\psi(q) = \langle q | \psi \rangle$ を与える状態に対しても

$$\langle \psi_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | \psi_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle = \int \mathrm{d}q_{\mathrm{F}} \, \mathrm{d}q_{\mathrm{I}} \, \langle \psi_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | q_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} \rangle \, \langle q_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | q_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle \, \langle q_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} | \psi_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle$$

$$= \int \widetilde{\mathcal{D}}q \widetilde{\mathcal{D}}p \, \psi_{\mathrm{F}}^{*}(q(t_{\mathrm{F}})) \psi_{\mathrm{I}}(q(t_{\mathrm{I}})) \exp \left[\mathrm{i} \int_{t_{\mathrm{I}}}^{t_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}t \{ p(t) \dot{q}(t) - H(p(t), q(t)) \} \right], \tag{1.17}$$

と書き表せる。式(1.15),(1.17)は、位相空間における経路積分やHamiltonian 経路積分などと呼ばれたりもする。

さらに、系のHamiltonianが

$$H = \frac{1}{2}p^2 + V(q), \tag{1.18}$$

$$\delta(x-y) = \langle x|y\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|y\rangle = C^2 \int dp e^{ipq} = 2\pi C^2 \delta(x-y), \qquad (1.14)$$

となるため、 $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ と決まっていることを思い出そう。

 $^{^1}$ 本当は演算子の順序をどう約束するかで得られる表式が変わるが、Hamiltonianが例えば式(1.18)のような格好をしていれば、 $\Delta t \to 0$ では同じ結果を与える[1]。どの順序を取ってもよく、それぞれ異なる量子系を定義したことに相当する[2]。

²この規格化定数は、式(1.11)と取ったことから

の形をしている場合に注目する3。式(1.15)の非積分関数の指数部分は

$$\sum_{n} \left(p_{n} \frac{q_{n+1} - q_{n}}{\Delta t} - H(p_{n}, q_{n}) \right) = \sum_{n} \left(-\frac{1}{2} p_{n}^{2} + \frac{q_{n+1} - q_{n}}{\Delta t} p_{n} - V(q_{n}) \right) \\
= \sum_{n} \left[-\frac{1}{2} \left(p_{n} - \frac{q_{n+1} - q_{n}}{\Delta t} \right)^{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_{n}}{\Delta t} \right)^{2} - V(q_{n}) \right], \tag{1.19}$$

と書き直すことができる。得られた表式は、各時刻での運動量 p_n について2次になっておりガウス積分できることから

$$\langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | q_{\mathcal{I}}, t_{\mathcal{I}} \rangle = C \int \left[\prod_{n} dq_{n} \right] \exp \left[i \sum_{n} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_{n}}{\Delta t} - V(q_{n}) \right)^{2} \right\} \right] + \cdots$$

$$\stackrel{\Delta t \to 0}{\longrightarrow} \int_{q(t_{\mathcal{I}}) = q_{\mathcal{F}}}^{q(t_{\mathcal{F}}) = q_{\mathcal{F}}} \mathcal{D}q \exp \left[i \int_{t_{\mathcal{I}}}^{t_{\mathcal{F}}} dt \, L(q(t), \dot{q}(t)) \right]$$

$$= \int_{q(t_{\mathcal{I}}) = q_{\mathcal{I}}}^{q(t_{\mathcal{F}}) = q_{\mathcal{F}}} \mathcal{D}q \, e^{iS[q]}, \qquad (1.20)$$

が得られる。係数 C は運動量の積分からくる因子をまとめたもので、積分測度 $\mathcal{D}q$ の定義に吸収させてしまった。また $L[q(t),\dot{q}(t)]$ はLagrangianであり、

$$L = \frac{1}{2}\dot{q}^2 - V(q) \ (= p\dot{q} - H), \tag{1.21}$$

であり、それを時間積分して得られる S[q(t)] は作用である。式(1.20)は、配位空間における経路積分やLagrangian経路積分などと呼ばれたりする 4 。

1.2 Euclidean 経路積分

これまでは実時間での時間発展を経路積分形式で議論した。実は、格子ゲージ理論をはじめとした場の量子論の経路積分では、時間を虚数に取った Euclidean 経路積分をよく扱う。

これまでの表式で使っていた時間 t を虚時間に対応させる:

$$t = -i\tau. (1.22)$$

Heisenberg 表示での位置演算子の時間発展は

$$\hat{q}_{\rm E}(\tau) := \hat{q}(-i\tau) = e^{\hat{H}\tau} \,\hat{q} \,e^{-\hat{H}\tau} \,,$$
 (1.23)

 $^{^3}$ 興味のある量子力学、場の量子論の例の多くがそうなっている。一般の Hamiltonian では、運動量を積分した際に Lagrangian 以外にも Lee-Yang 項と呼ばれる付加的な寄与が出てくる[1, 2]。

⁴Feynmanが初めて経路積分を提唱した際には、この配位空間の経路積分の形式であった[13]。

となるが、この演算子は

$$\hat{q}_{\rm E}^{\dagger}(\tau) = \left(e^{\hat{H}\tau} \, \hat{q} \, e^{\hat{H}\tau} \right)^{\dagger} = e^{-\hat{H}\tau} \, \hat{q} \, e^{+\hat{H}\tau} = \hat{q}_{\rm E}(-\tau),$$
 (1.24)

を満たす。ただし、Hamiltonian演算子は実時間のものと同じであることを強調しておく。ユークリッド化された位置演算子の固有状態

$$\hat{q}_{\mathrm{E}}(\tau) |q,\tau\rangle_{\mathrm{E}} = q |q,\tau\rangle_{\mathrm{E}}, \qquad (1.25)$$

は、

$$|q,\tau\rangle_{\rm E} = |q,-i\tau\rangle = e^{\hat{H}\tau} |q\rangle,$$
 (1.26)

の関係にある。そのため、共役な状態についても

$$_{\mathrm{E}} \langle q, \tau | := \langle q, -\mathrm{i}\tau | = \langle q, \tau | \mathrm{e}^{-\hat{H}\tau}, \qquad (1.27)$$

の関係があり、これらと式(1.7)を使うと完全系の表式が

$$\mathbb{1} = \int dq |q, \tau\rangle_{\text{EE}} \langle q, \tau |, \qquad (1.28)$$

となることがわかる。

実時間と同様に遷移振幅を考える。作用積分の変数が実時間から虚時間になって いるため

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\tau} = -\mathrm{i}, \qquad \frac{\partial}{\partial t}q(\tau) = \frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}t}\frac{\partial q}{\partial t} = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \tau}q(\tau), \tag{1.29}$$

と変数変換される。さらに、ユークリッド化された Lagrangian を

$$L_{\mathcal{E}}(q(\tau), \partial_{\tau} q(\tau)) := -L(q(\tau), i\partial_{\tau} q(\tau)), \tag{1.30}$$

で定義しておく5と

$${}_{E}\langle q_{F}, \tau_{F} | q_{I}, \tau_{I} \rangle_{E} = \langle q_{F}, -i\tau_{F} | q_{I}, -i\tau_{I} \rangle
= \int_{q(\tau_{I})=q_{I}}^{q(\tau_{F})=q_{F}} \mathcal{D}q \exp \left[-\int_{\tau_{I}}^{\tau_{F}} d\tau L_{E}(q(\tau), \partial_{\tau}q(\tau)) \right]
= \int_{q(\tau_{I})=q_{I}}^{q(\tau_{F})=q_{F}} \mathcal{D}q e^{-S_{E}[q]}.$$
(1.32)

もし Lagrangian (1.30) 中のポテンシャル項が下に有界であれば、作用積分 $S_{\rm E}$ が下限を持ち、この積分は実時間の経路積分よりも良い収束性を持つ。

$$-L(q(\tau), i\partial_{\tau}q(\tau)) = \frac{1}{2}(\partial_{\tau}q)^{2} + V(q), \qquad (1.31)$$

と運動項が正の係数を持つ、見慣れた形になる。

⁵実際、Lagrangian が式(1.21)の形をしていれば

Euclidean 経路積分の強みのひとつは、基底状態の構成が容易である点である。 Hamiltonian の固有状態、つまりエネルギー固有状態

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}, \qquad E_0 \le E_1 \le \cdots,$$
 (1.33)

を考える。ここでは簡単のため、基底状態は縮退がないと仮定する。またエネルギーの零点を適当に取って、基底エネルギー $E_0=0$ ととっておく。エネルギー固有状態を使っても完全系を組むことができ、

$$1 = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|. \tag{1.34}$$

ユークリッド化された状態は

$$|q', \tau\rangle_{\mathcal{E}} = e^{\hat{H}\tau} |q'\rangle = \sum_{n} e^{E_{n}\tau} |n\rangle \langle n|q'\rangle \xrightarrow{\tau \to -\infty} \langle 0|q'\rangle |0\rangle,$$
 (1.35)

である。従って、勝手に取ってきた波動関数 $\psi(q') = \langle q'|\psi\rangle$ をかけた上で q' で積分してやれば

$$\int dq' \psi(q') |q', \tau\rangle_{\mathcal{E}} \xrightarrow{\tau \to -\infty} \langle 0 | \psi \rangle |0\rangle. \tag{1.36}$$

これは $\langle 0|\psi\rangle\neq 0$ であれば、任意の状態 $|\psi\rangle$ から非常に長い時間発展をさせることで基底状態 $|0\rangle$ を構成できることを意味している:

$$|0\rangle = \frac{1}{\langle 0|\psi\rangle} \lim_{\tau \to -\infty} \int dq' \psi(q') |q', \tau\rangle_{E}.$$
 (1.37)

基底状態の波動関数 $\Psi(q) = \langle q|0 \rangle$ は

$$\Psi(q) = \langle q|0\rangle = \frac{1}{\langle 0|\psi\rangle} \lim_{\tau \to -\infty} \int dq' \psi(q') \langle q|q', \tau\rangle_{E}$$

$$= \frac{1}{\langle 0|\psi\rangle} \int dq' \psi(q') \int_{q(-\infty)=q'}^{q(0)=q} \mathcal{D}q e^{-S_{E}[q]}$$

$$= \frac{1}{\langle 0|\psi\rangle} \int_{\tau=-\infty,\psi}^{q(0)=q} \mathcal{D}q e^{-S_{E}[q]}, \qquad (1.38)$$

と書き表すことができる。無限の過去 $\tau=-\infty$ での波動関数 ψ は基底状態とのオーバーラップがあれば(つまり $\langle 0|\psi\rangle\neq 0$ を満たせば)なんでもよかった。共役な状態に関しても

$${}_{\rm E}\langle q',\tau| = \langle q'| \ {\rm e}^{-\hat{H}\tau} = \sum_{n} \ {\rm e}^{-E_{n}\tau} \ \langle q'|n\rangle \langle n| \stackrel{\tau \to +\infty}{\longrightarrow} \langle q'|0\rangle \langle 0|. \tag{1.39}$$

そこで基底状態の波動関数は、規格化定数を無視して

$$\Psi(q) = \int_{q(\tau = -\infty)}^{q(0) = q} \mathcal{D}q \, e^{-S_{E}[q]}, \qquad (1.40)$$

$$\Psi^*(q) = \int_{q(0)=q}^{q(\tau=-\infty)} \mathcal{D}q \, e^{-S_{\rm E}[q]}, \qquad (1.41)$$

と書き表すことができる。

1.3 有限温度系

Hamiltonian \hat{H} に対して、逆温度 $\beta > 0$ の分配関数

$$Z(\beta) = \text{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}}\right],$$
 (1.42)

とかけるのだった。 先ほどのエネルギー固有状態の組 $\{|n\rangle\}$ を使えば

$$Z(\beta) = \sum_{n} \langle n | e^{-\beta \hat{H}} | n \rangle = \sum_{n} \langle n | e^{-\beta E_n} | n \rangle = \sum_{n} e^{-\beta E_n}.$$
 (1.43)

これは前述の実時間発展の類似から、虚時間方向のβ時間発展を表す。一方で、 実時間の場合にやったように位置の固有状態を使ってもよい。逆温度と実時間を

$$\beta = it, \tag{1.44}$$

のように同一視してやれば、遷移振幅の表式

$$\langle q_{\rm F}| \,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \,|q_{\rm I}\rangle = \langle q_{\rm F}| \,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}} \,|q_{\rm I}\rangle$$
 (1.45)

から

$$Z(\beta) = \int dq \langle q | e^{-\beta \hat{H}} | q \rangle = \int dq \int_{\tilde{q}(0)=q}^{\tilde{q}(\beta)=q} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-S_{\mathcal{E}}[\tilde{q}]} = \int_{\text{a:periodic}} \mathcal{D}q e^{-S_{\mathcal{E}}[q]}, \qquad (1.46)$$

とも書き表すこともできる。有限温度の場合には、トレースを取っていることから 虚時間方向に対する周期境界条件が課されている。

1.4 生成汎関数

2つの演算子 A(t), B(t) の間の時間順序積(あるいはT積)は

$$T[A(t_1)B(t_2)] = A(t_1)B(t_2)\theta(t_1 - t_2) + B(t_2)A(t_1)\Theta(t_2 - t_1), \tag{1.47}$$

で与えられる。ここでヘビサイド関数

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t \ge 0 \end{cases}, \tag{1.48}$$

を用いた。つまり、演算子の積の順序を左側が未来、右側が過去のものになるようにするものである。 3つ以上の演算子の時間順序積についても、この定義で並び替えることにする。

物理として興味があるのは

$$\langle q_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | T[\hat{q}(t_1) \cdots \hat{q}(t_n)] | q_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle, \qquad (t_{\mathrm{F}} > t_1, \cdots, t_N > t_{\mathrm{I}}), \qquad (1.49)$$

のような行列要素(n点の相関関数)である。簡単のため、まず演算子の挿入されている時間が $t_F > t_n \geq \cdots \geq t_1 > t_1$ とする。式(1.49)の途中に完全系を挿入すると

$$\langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | T[\hat{q}(t_{1}) \cdots \hat{q}(t_{n})] | q_{\mathcal{I}}, t_{\mathcal{I}} \rangle = \langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | \hat{q}(t_{n}) \cdots \hat{q}(t_{1}) | q_{\mathcal{I}}, t_{\mathcal{I}} \rangle$$

$$= \langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | \hat{q}(t_{n}) \int dq_{n} | q_{n}, t_{n} \rangle \langle q_{n}, t_{n} | \cdots \hat{q}(t_{1}) \int dq_{1} | q_{1}, t_{1} \rangle \langle q_{1}, t_{1} | q_{\mathcal{I}}, t_{\mathcal{I}} \rangle,$$

$$= \int \left[\prod_{j=1}^{n} dq_{j} q_{j} \right] \langle q_{\mathcal{F}}, t_{\mathcal{F}} | q_{n}, t_{n} \rangle \cdots \langle q_{1}, t_{1} | q_{\mathcal{I}}, q_{\mathcal{I}} \rangle$$

$$= \int \mathcal{D}q q(t_{1}) \cdots q(t_{n}) e^{iS[q]}, \qquad (1.50)$$

と書き表される。途中で $q_j = q(t_j)$ と略記した。また、以降では経路積分の境界条件も省略して書くことにする。式(1.50)の最終式を見るとわかる通り、経路積分形式では演算子の時間順序があらわには出てこない。最右辺の行列要素が時間順序積に取られている限り、経路積分は正しい結果を与える。

この相関関数を簡単に構成するために、生成汎関数 Z[J] を導入しよう。以降では、議論を Euclidean に限ることにし、状態の添字 E も省略する。まず、Lagrangian にソースと呼ばれる外場 $J(\tau)$ ($\tau_{\rm I} \leq \tau \leq \tau_{\rm F}$)を $q(\tau)J(\tau)$ のように結合させて加える:

$$S[q, J] = \int_{\tau_{\rm I}}^{\tau_{\rm F}} d\tau (L + q(\tau)J(\tau)). \tag{1.51}$$

ソースを導入した際の遷移振幅を

$$\langle q_{\rm F}, \tau_{\rm F} | q_{\rm I}, \tau_{\rm I} \rangle_J = \int \mathcal{D}q \, \mathrm{e}^{-S[q,J]},$$
 (1.52)

と定義しておく。このとき $J(\tau)$ についての汎関数微分は

$$\frac{\delta}{\delta J(\tau)} \langle q_{\rm F}, \tau_{\rm F} | q_{\rm I}, \tau_{\rm I} \rangle_J = \int \mathcal{D}q \left(-q(\tau) \right) e^{-S[q,J]}, \qquad (1.53)$$

のように指数の方から時刻での位置を一つ叩き落とす。従って、

$$\langle q_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | T[\hat{q}(t_1) \cdots \hat{q}(t_n)] | q_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle = (-1)^n \frac{\delta^n}{\delta J(\tau_1) \cdots \delta J(\tau_n)} \int \mathcal{D}q \, \mathrm{e}^{-S[q,J]} \, \bigg|_{J=0}, \qquad (1.54)$$

と最後にソースの効果を抜き去れば、式(1.49)が得られる。

さらに、基底状態の間の遷移振幅、まさに相関関数を考えよう。ソース $J(\tau)$ がある時間 $[\tau_a, \tau_b] \subset [\tau_1, \tau_F]$ でのみ非零であるとする。このとき系のHamiltonian

$$H_J := H - q(\tau)J(\tau)\Theta(\tau - \tau_a)\Theta(\tau_b - \tau), \tag{1.55}$$

とそれから作られる時間発展演算子を用いると、遷移振幅が

$$\langle q_{\mathrm{F}}, \tau_{\mathrm{F}} | q_{\mathrm{I}}, \tau_{\mathrm{I}} \rangle_{J} = \langle q_{\mathrm{F}} | e^{-H_{J}(\tau_{\mathrm{F}} - \tau_{\mathrm{I}})} | q_{\mathrm{I}} \rangle$$

$$= \langle q_{\mathrm{F}} | e^{-H(\tau_{\mathrm{F}} - \tau_{b})} e^{-H_{J}(\tau_{b} - \tau_{a})} e^{-H_{J}(\tau_{a} - \tau_{\mathrm{I}})} | q_{\mathrm{I}} \rangle$$

$$= \sum_{n,n'} \langle q_{\mathrm{F}} | e^{-H(\tau_{\mathrm{F}} - \tau_{b})} | n \rangle \langle n | e^{-H_{J}(\tau_{b} - \tau_{a})} | n' \rangle \langle n' | e^{-H_{J}(\tau_{a} - \tau_{\mathrm{I}})} | q_{\mathrm{I}} \rangle$$

$$= \sum_{n,n'} e^{-E_{n}(\tau_{\mathrm{F}} - \tau_{b})} e^{-E_{n'}(\tau_{a} - \tau_{\mathrm{I}})} \langle q_{\mathrm{F}} | n \rangle \langle n' | q_{\mathrm{I}} \rangle \langle n | e^{-H_{J}(\tau_{b} - \tau_{a})} | n' \rangle. \tag{1.56}$$

途中の式で、エネルギー固有状態についての完全系を挿入した。ここで $\tau_F \to +\infty, \tau_I \to -\infty$ の極限を取れば、基底状態のみが残ることがわかる。

ここで生成汎関数を

$$Z[J] = \langle 0 | e^{-H_J(\tau_b - \tau_a)} | 0 \rangle = \lim_{\substack{\tau_F \to +\infty \\ \tau_I \to -\infty}} \langle 0 | e^{-H_J(\tau_F - \tau_I)} | 0 \rangle, \qquad (1.57)$$

と定義すると、先ほどのソース付きの遷移振幅は

$$\lim_{\substack{\tau_{\rm F} \to +\infty \\ \tau_{\rm I} \to -\infty}} \langle q_{\rm F}, \tau_{\rm F} | q_{\rm I}, \tau_{\rm I} \rangle_J = \langle q_{\rm F} | 0 \rangle \langle 0 | q_{\rm I} \rangle Z[J], \tag{1.58}$$

となるが、これを書き直すと

$$Z[J] = \lim_{\substack{\tau_{\rm F} \to +\infty \\ \tau_{\rm I} \to -\infty}} \frac{\langle q_{\rm F}, \tau_{\rm F} | q_{\rm I}, \tau_{\rm I} \rangle_J}{\langle q_{\rm F} | 0 \rangle \langle 0 | q_{\rm I} \rangle}.$$
 (1.59)

従って、生成汎関数の経路積分表示が

$$Z[J] = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q \, e^{-S[q,J]}, \qquad \mathcal{N}^{-1} = Z[J=0],$$
 (1.60)

と求まり、真空でのn点相関関数が

$$\langle 0|T[\hat{q}(\tau_1)\cdots\hat{q}(\tau_n)]|0\rangle = (-1)^n \frac{\delta^n}{\delta J(\tau_1)\cdots\delta J(\tau_n)} Z[J]\bigg|_{J=0}, \qquad (1.61)$$

で計算できることがわかった。

2 場の量子論の経路積分

場の量子論の経路積分形式も、基本的には量子力学の際に行った手続きと同じことをくりかえすことで構成できる。ここでは簡単のため、1成分の実スカラー場の場合を例に見る。

4次元Minkowski時空中での Lagrangian 密度

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_{\mu} \phi \partial^{\mu} \phi - \frac{m^2}{2} \phi^2 + \mathcal{L}_{int}(\phi), \qquad (2.1)$$

から出発する。 Hamiltonian はスカラー場 $\phi(x)$ の共役運動量 $\pi(x)$ を用いて

$$H = \int d^3x \mathcal{H}[\pi(x), \phi(x)] = \int d^3x \left[\frac{1}{2} \pi^2(x) + V[\phi] \right].$$
 (2.2)

導入した場の変数を演算子に格上げすると、演算子の時間発展はやはり Heisenberg 表示で表すことができる。例えば場の演算子については

$$\hat{\phi}(x) = \hat{\phi}(\vec{x}, t) = e^{i\hat{H}t} \hat{\phi}(\vec{x}) e^{-i\hat{H}t}. \tag{2.3}$$

最右辺に出てきた時間非依存の演算子 $\hat{\phi}(\vec{x})$ に対する固有状態

$$\hat{\phi}(\vec{x}) |\phi\rangle = \phi(\vec{x}) |\phi\rangle, \qquad (2.4)$$

を用いて、状態の時間発展も

$$|\phi, t\rangle = e^{iHt} |\phi\rangle,$$
 (2.5)

で表される。これは Heisenberg 表示の場の演算子が

$$\hat{\phi}(\vec{x},t) |\phi,t\rangle = \phi(\vec{x}) |\phi,t\rangle, \qquad (2.6)$$

と表されることと整合的である。

以上のことから、場の量子論は連続パラメータ $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ で指定される無限個の場の変数 $\{\phi(\vec{x})\}$ を持つ無限自由度の量子力学だと思えばよい。

実際、量子力学での位相空間の経路積分(1.15)に対応するものは

$$\langle \phi_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | \phi_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle = \int_{\phi(\vec{x}, t_{\mathrm{I}}) = \phi_{\mathrm{I}}(\vec{x})}^{\phi(\vec{x}, t_{\mathrm{F}}) = \phi_{\mathrm{F}}(\vec{x})} \widetilde{\mathcal{D}} \widetilde{\phi} \widetilde{\mathcal{D}} \widetilde{\pi} \exp \left[i \int_{t_{\mathrm{I}}}^{t_{\mathrm{F}}} dt \, d^{3}x \left\{ \pi(x) \dot{\phi}(x) - \mathcal{H}[\pi(x), \phi(x)] \right\} \right], \tag{2.7}$$

のように与えられる。積分測度は

$$\widetilde{\mathcal{D}}\phi\widetilde{\mathcal{D}}\pi \propto \prod_{t_{\mathrm{I}} \leq t \leq t_{\mathrm{F}}} \prod_{\vec{x}} \mathrm{d}\phi(\vec{x}, t) \,\mathrm{d}\pi(\vec{x}, t),$$
 (2.8)

とした。量子力学の例と同様、共役運動量 $\pi(x)$ についてのガウス積分はやはり可能 で、出てきた定数因子を含めて新たに積分測度 $\mathcal{D}\phi$ を定義したと思うと、式(1.20)に 対応する配位空間上での経路積分は

$$\langle \phi_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | \phi_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle = \int_{\phi(\vec{x}, t_{\mathrm{F}}) = \phi_{\mathrm{F}}(\vec{x})}^{\phi(\vec{x}, t_{\mathrm{F}}) = \phi_{\mathrm{F}}(\vec{x})} \mathcal{D}\phi \exp \left[i \int_{t_{\mathrm{I}}}^{t_{\mathrm{F}}} dt \, d^{3}x \left\{ \frac{1}{2} (\partial_{\mu}\phi \partial^{\mu}\phi - m^{2}\phi) + \mathcal{L}_{\mathrm{int}}(\phi) \right\} \right]$$

$$= \int \mathcal{D}\phi \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[\phi]} \,. \tag{2.9}$$

生成汎関数についても

$$Z[J] = \frac{1}{Z[J=0]} \int \mathcal{D}\phi \,e^{iS[\phi,J]},$$
 (2.10)

で与えられる。ただしソースは $J = J(t, \vec{x})$ のように時空各点で定義される。ソースに対する汎関数微分を行うことで、相関関数を求めることができる点は同じである。

3 フェルミオンの経路積分

これまでの議論では、変数として現れた量は全てボソン的であった。自然界にはフェルミオンと呼ばれるFermi-Dirac統計に従う統計性の異なる粒子が存在する。量子色力学(Quantum Chromodynamics, QCD)では、クォークと呼ばれるフェルミオンが基本的自由度として登場する。そこで、この章ではフェルミオン的な自由度に対する経路積分形式も導入する。

3.1 Gransmann数とGrassmann積分

ボソン的変数の場合には演算子の正準交換関係が成り立っていた。フェルミオン的変数の場合、例えばDirac場の場合などは、演算子に対する正準反交換関係

$$\left\{\hat{\psi}_{\alpha}(\vec{x}), \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{y})\right\} = \delta^{3}(\vec{x} - \vec{y})\delta_{\alpha\beta},\tag{3.1}$$

が成り立っていた。これはPauliの排他律を説明するためにも望ましい性質である。 この反可換性を数学的に表現するために、Grassmann数と呼ばれる数を導入する。

まずは一変数のGrassmann数 ξ の場合から始めよう。自身の反可換性から、

$$\xi \xi = -\xi \xi, \quad \to \quad \xi^2 = 0. \tag{3.2}$$

このため、 ξの任意関数のべき展開は有限(この場合1次)で止まる:

$$f(\xi) = f_0 + f_1 \xi. \tag{3.3}$$

そのため、Grassmann数の指数関数は

$$e^{c\xi} = 1 + c\xi, \qquad c \in \mathbb{C}, \tag{3.4}$$

で与えることができる。 Grassmann数の微分は通常のものと同じように

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}f(\xi) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(f_0 + f_1\xi) = f_1,\tag{3.5}$$

のように取っておく。

Grassmann数の定積分を導入する際、通常の積分が持つ以下の二つの性質を要請する。

1. ある数係数 $a,b \in \mathbb{C}$ とGrassmannな関数 $f(\xi), g(\xi)$ の積分は次の線形性を持つ:

$$\int d\xi [af(\xi) + bg(\xi)] = a \int d\xi f(\xi) + b \int d\xi g(\xi).$$
 (3.6)

2. 境界項が消えて、部分積分が可能:

$$\int d\xi \left[\frac{d}{d\xi} f(\xi) \right] = 0. \tag{3.7}$$

すると、式(3.7)の性質から

$$0 = \int d\xi \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (f_0 + f_1 \xi) \right] = f_1 \int d\xi \, 1, \tag{3.8}$$

となることから、 $\int d\xi 1 = 0$ が導かれる。また線形性(3.6)から、 $\int d\xi \xi = (const.)$ が導けるが、この定数を1に取ると約束すると、Grassmann積分は

$$\int d\xi \, 1 = 0, \qquad \int d\xi \, \xi = 1, \tag{3.9}$$

と定義される。これは、Grassmann数の積分は微分と同じであることを表している。 続いて、Grassmann積分での変数変換を考える。ただの数 a を使って

$$\xi' = a\xi, \qquad d\xi = Jd\xi',$$
 (3.10)

と変数変換したとしよう。ただし、J は変数変換に伴うJabobianである。すると、

$$\int d\xi \, a\xi = \int Jd\xi' \, \xi',\tag{3.11}$$

であるが、両辺のGrassmann積分は等しいため、a=J であることがわかる。通常の数の場合と比較してJacobianが逆数を取られた形で現れるのが、Grassmann積分の特徴の一つである 6 。

これまでの議論を N 変数 $(j=1,\cdots,N)$ のGrassmann数に対して拡張してみよう。 Grassmann積分は式(3.9)と同様に、

$$\int d\xi_j 1 = 0, \qquad \int d\xi_j \,\xi_j = 1. \tag{3.13}$$

ただし変数だけでなく積分測度もGrassmann的であることから、

$$\{\xi_j, \xi_k\} = \{\xi_j, d\xi_k\} = \{d\xi_j, d\xi_k\} = 0,$$
 (3.14)

の反交換関係を満たすことに注意する。 Grassmann数を引数にする任意関数のべき 展開⁷

$$f(\xi) = f_0 + \sum_j f_j \xi_j + \sum_{j,k} f_{jk} \xi_j \xi_k + \dots + f_N \xi_N \dots \xi_1,$$
 (3.15)

を使うと、これのGrassmann積分は

$$\int d^N \xi f(\xi) = f_N, \qquad d^N \xi = d\xi_1 \cdots d\xi_N, \tag{3.16}$$

 6 通常の数に対する変数変換として、例えば x'=ax としたとき

$$\int dx(ax) = \int Jdx'x', \qquad (3.12)$$

である点は同じだが、Jabobianは $J^{-1} = \frac{\mathrm{d} x'}{\mathrm{d} x} = a$ である。

 7 ここでは、最高次(N次)のGrassmann数の順序の取り方として、添字 j に対する降順を採用した。

と最高次の係数を取り出す。他の次数の項では、必ず1つ以上の成分 ξ_j が含まれておらず、 $\int \mathrm{d}\xi_i \, 1 = 0$ を含むため消えている。

N変数の場合に、 $A_{ik} \in \mathbb{C}$ となる行列 A を導入しておくと、変数変換

$$\xi_j' = \sum_k A_{jk} \xi_k, \qquad d^N \xi = J d^N \xi', \tag{3.17}$$

に現れるJacobian J は、一変数のときの要領で

$$\int d^N \xi f(A\xi) = \int J d^N \xi' f(\xi'), \qquad (3.18)$$

の条件式から定めることができる。 左辺の N 次項に着目すると

$$f_{N} \sum_{\{j_{1}, \dots, j_{N}\}} (A_{Nj_{N}} \dots A_{1j_{1}}) \, \xi_{j_{N}} \dots \xi_{j_{1}} = f_{N} \sum_{\{j_{1}, \dots, j_{N}\}} (A_{Nj_{N}} \dots A_{1j_{1}}) \, \epsilon_{j_{N} \dots j_{1}} \xi_{N} \dots \xi_{1}$$

$$= f_{N} \det A \, \xi_{N} \dots \xi_{1}, \qquad (3.19)$$

となる。途中に現れた $\epsilon_{j_N\cdots j_1}$ は N階完全反対称テンソルである。この項の Grassmann 積分が右辺のそれと一致するので、

$$d^{N}\xi = \det A \, d^{N}\xi', \qquad J = \det A. \tag{3.20}$$

以上の議論を使えば、複素Grassmann数

$$\psi_j = \xi_j + i\eta_j, \quad \psi_j^* = \xi_j - i\eta_j, \tag{3.21}$$

を2つのGrassmann変数 ξ_j, η_j で表すこともできる。その場合も、Grassmann積分は式(3.13)を用いればよい。

3.2 Grassmann積分に関する関係式

この節では、実用上便利なGrassmann積分の関係式をいくつか与えておく。

• デルタ関数

$$\delta(\xi) = \xi. \tag{3.22}$$

この定義は

$$f(\xi_0) = \int d\xi \, \delta(\xi - \xi_0) f(\xi) \stackrel{(3.22)}{=} \int d\xi (\xi - \xi_0) (f_0 + f_1 \xi) = \int d\xi (f_1 \xi \xi_0 + f_0 \xi) = f_0 + f_1 \xi_0,$$
(3.23)

であることから正しいことがわかる。

Fourier積分 ボソン変数のときの

$$\int dx e^{ipx} = 2\pi \delta(p), \qquad (3.24)$$

の対応物はデルタ関数(3.22)と式(3.4)から

$$\int d\xi \, e^{\xi \eta} = \delta(\eta), \tag{3.25}$$

であることがわかる。

ガウス積分

N成分変数 ξ,η と数を成分に持つ $N \times N$ 行列 Aを使って

$$\int d\eta d\xi \exp(\xi^{\mathsf{T}} A \eta) = \det A, \qquad (3.26)$$

というGrassmann変数に対するガウス積分の公式が得られる。 ただし積分測度は

$$d\eta d\xi = (d\eta_1 d\xi_1) \cdots (d\eta_N d\xi_N) = d\eta_N \cdots d\eta_1 d\xi_1 \cdots d\xi_N, \tag{3.27}$$

に取られている。これは η の変数変換を通して

$$\int d\eta d\xi \, e^{\xi^{\mathsf{T}} A \eta} = \det A \int d\eta' d\xi \, e^{\xi^{\mathsf{T}} \eta'} = \det A \int d\eta' \delta^N(\eta') = \det A, \qquad (3.28)$$

となることからわかる。 複素Grassmann数 ψ_j, ψ_j^* に対しても同様の式

$$\int d\psi d\psi^* \exp(\psi^{\dagger} A \psi) = \det A, \qquad (3.29)$$

が成り立つ。

• 生成汎関数

反交換するソース J, J^* を導入すると、複素Grassmann積分(3.29)を拡張した

$$\int d\psi d\psi^* \exp(\psi^{\dagger} A \psi + J^{\dagger} \psi + \psi^{\dagger} J) = \det A e^{-J^{\dagger} A^{-1} J}, \qquad (3.30)$$

で与えられる。

∵)式(3.30)の指数部分を平方完成すると

$$\psi_j^* A_{jk} \psi_k + J_l^* \psi_l + \psi_l^* J_l = \left(\psi_j^* + J_l^* A_{lj}^{-1}\right) A_{jk} \left(\psi_k + A_{km}^{-1} J_m\right) - J_l^* A_{lm}^{-1} J_m, \quad (3.31)$$

となる。積分変数を定数だけシフトさせて

$$\Psi_k = \psi_k + A_{km}^{-1} J_m, \qquad \Psi_i^* = \psi_i^* + J_l^* A_{li}^{-1}, \tag{3.32}$$

の変数変換を行うと、

$$\int d\psi d\psi^* e^{\psi^{\dagger} A \psi + J^{\dagger} \psi + \psi^{\dagger} J} = e^{-J^{\dagger} A^{-1} J} \int d\Psi d\Psi^* e^{\Psi^{\dagger} A \Psi} = \det A e^{-J^{\dagger} A^{-1} J}, \quad (3.33)$$

となることからわかる。

Grassmann数のガウス積分の関係式は、実際の格子ゲージ理論の数値計算でも活用されている。 QCDをはじめとしたフェルミオンと結合したゲージ理論の経路積分は (Euclideanで)

$$Z = \int \mathcal{D}A\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} \,e^{-S[A,\psi,\bar{\psi}]}, \qquad (3.34)$$

で書かれる。このとき作用としては、

$$S[A, \psi, \bar{\psi}] = S_{G}[A] + S_{F}[\psi, \bar{\psi}; A],$$
 (3.35)

のようにゲージ場の運動項 $S_{\rm G}$ とフェルミオン場の寄与 $S_{\rm F}$ とに分割できる場合が多い。このとき

$$S_{\mathcal{F}}[\psi,\bar{\psi};A] = -\bar{\psi}D[A]\psi, \tag{3.36}$$

の具体系を仮定すると、(3.29)を用いてフェルミオン部分についての経路積分

$$Z_{\mathcal{F}}[A] = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \,\mathrm{e}^{-S_{\mathcal{F}}[\psi,\bar{\psi};A]} = \det D[A], \tag{3.37}$$

を実行できてしまう。つまり、最初の経路積分をゲージ場 A のみの表式にしてしまうことができ、

$$Z = \int \mathcal{D}A \det D[A] e^{-S_{G}[A]} = \int \mathcal{D}A e^{-S_{eff}[A]}, \quad S_{eff}[A] := S_{G}[A] - \log \det D[A], \quad (3.38)$$

となる。 実際の格子QCD計算では、ゲージ場 $A_{\mu}(x)$ の代わりにリンク変数 $U_{\mu}(x)$ が用いられる。

4 ゲージ理論

4.1 格子ゲージ理論と数値計算

(経路積分形式の)場の量子論を使って物理量を計算する手法として、摂動論に基づいたものが存在する。これは理論の持つ結合定数が十分に小さいとして、Lagrangian密度を自由部分(ガウス積分ができる形)と相互作用部分(結合定数がかかった部分)とに上手く分けておき、後者を含んだBoltzmann 因子 $(\exp(-\int d^4x\mathcal{L}_{int}))$ とでも書いておこう)を Taylor 展開する方法である。このとき結合定数が小さいことから、展開を有限次で打ち切っても、計算結果は良い近似を与えているはずである。この手法は、素粒子標準模型のうち電磁相互作用や弱い相互作用の性質を調べることには極めて強力で、実験で観測される多くの物理現象を精度よく説明することに成功している 8 。一方で結合定数が十分に小さくないと、展開の無限次まで取り入れないと正しい結果を得ることができなくなる。 QCDは漸近自由性があるために高エネルギー領域では結合が弱いが、低エネルギー領域は非常に強結合な理論になるため、摂動論による解析は困難になる。そのため非摂動的な取り扱いが必要となってくる。

⁸場の量子論の摂動展開は一般に漸近展開であり、結合定数に対する形式的な展開は必ずしも収束 しない。詳細は、例えば教科書 [14]等を参照。

4.1.1 なぜ格子正則化なのか?

QCDのような強結合なゲージ理論を取り扱う手法として、**格子正則化**が Wilson によって1974年に提案された[15] (今年はちょうど50周年!)。ゲージ理論の格子正則化が重宝されている理由は様々あると思うが、ここでは「経路積分の有限性」「ゲージ対称性との相性のよさ」に注目したい。これらを説明するために、まずはゲージ理論の標準的な取り扱いであるFaddeev-Popov処方について見ていく。

4.2 Faddeev-Popov処方とゲージ固定

ゲージ場の作用が

$$S[A] = \int d^4x \, \mathcal{L}[A(x)], \tag{4.1}$$

で与えられるとする。ここでは簡単のため、理論はゲージ場のみで書かれていると し、他の物質場を無視する。この作用はゲージ変換

$$A_{\mu}(x) \mapsto A_{\mu}^{\theta}(x) = U(\theta(x))A_{\mu}(x)U^{-1}(\theta(x)) + \frac{i}{q}U(\theta(x))\partial_{\mu}U^{-1}(\theta(x)),$$
 (4.2)

の下で不変になるようつくられている。時空上の各点で与えられる $\theta(x)$ はゲージ群 G の元であり、 $U(\theta(x))$ は $\theta(x)$ に対応する表現行列である。式(4.2)で与えられるゲージ変換をくりかえすと

$$A_{\mu} \mapsto A_{\mu}^{\theta} \mapsto A_{\mu}^{\theta'} \mapsto \cdots,$$
 (4.3)

のように、関数空間上である軌道(gauge orbit)を描く。 1つの軌道上では、作用 S[A] などのゲージ不変な量は常に同じ値になっている。

ゲージ理論の経路積分を

$$Z = \int \mathcal{D}A \,\Psi_{\mathrm{F}}^* \Psi_{\mathrm{I}} \,\mathrm{e}^{-S[A]} \,, \qquad \mathcal{D}A := \prod_{x,\mu,a} \mathrm{d}A_{\mu}^a(x), \tag{4.4}$$

のように「形式的に」書き表すことにする。ただし始状態・終状態として物理的(ゲージ不変)な状態を適切に取ることにし、その際の境界条件は省略して書いた。実際には、ゲージ変換の元 $U(\theta(x)) = \exp(\mathrm{i} g \theta^a(x) T_a)$ に関する積分 9

$$\int \mathcal{D}U = \int \prod_{x} \int_{G} dU(x) \stackrel{|\theta| \ll 1}{\sim} \int \prod_{x,a} d\theta^{a}(x), \tag{4.5}$$

が「空回り」する分から発散が生じてしまう[12]ため、経路積分(4.4)はwell-definedになっていない 10 。

 $^{^9}$ ここでの $\int_G \mathrm{d}U$ は、 Haar 測度と呼ばれるもので、群G上での不変測度となっている。実は格子ゲージ理論の経路積分測度は、リンク変数に対する Haar 測度で定義されている。

¹⁰摂動論においては、場の2次項から求める伝播関数が定まらない(零固有値のために発散していた)という形で問題が顕在化していた。

そこで非可換ゲージ理論でよく採られるFaddeev-Popovの処方 [16]では、経路積分に対してゲージ固定条件を課しておき、ゲージ変換由来の「空回り」積分因子を抜き出して割っておくことで、残りの有限部分を計算している。

ここでは具体的に、共変ゲージ(Landauゲージ) $\partial_{\mu}A_{\mu}=0$ を採った場合を考える。 Faddeev-Popov (FP) 行列式(の逆)を

$$\Delta^{-1}[A] := \int \mathcal{D}U \prod_{r,a} \delta\left(\partial_{\mu} \left(A^{U}\right)_{\mu}^{a}\right), \tag{4.6}$$

で導入する。中に含まれるデルタ関数は、各ゲージ軌道上の関数から代表元を1つ選ぶ役割をしている¹¹。任意のゲージ変換 $V \in G$ に対してゲージ場が $(A^V)^U = A^{VU}$ と変換されること、さらに積分測度の不変性 $\mathcal{D}(VU) = \mathcal{D}U$ を使うと、この量がゲージ不変 $\Delta[A^V] = \Delta[A]$ であることがわかる。

経路積分の表式 (4.4)に

$$1 = \int \mathcal{D}U \prod_{x,a} \delta \left(\partial_{\mu} \left(A^{U} \right)_{\mu}^{a} \right) \Delta[A], \tag{4.7}$$

をかけると、作用やFP行列式のゲージ不変性を使って($\Psi_F^*\Psi_I = A$ と略記して)

$$Z = \int \mathcal{D}A \mathcal{A} e^{-S[A]} \int \mathcal{D}U \prod_{x,a} \delta \left(\partial_{\mu} (A^{U})_{\mu}^{a}\right) \Delta[A]$$

$$= \int \mathcal{D}U \int \mathcal{D}A \mathcal{A} \Delta[A^{U}] e^{-S[A^{U}]} \prod_{x,a} \delta \left(\partial_{\mu} (A^{U})_{\mu}^{a}\right)$$

$$= \int \mathcal{D}U \int \mathcal{D}A' \mathcal{A} \Delta[A'] e^{-S[A']} \prod_{x,a} \delta \left(\partial_{\mu} (A')_{\mu}^{a}\right)$$

$$(\because \mathcal{D}A = \mathcal{D}A^{U}, A_{\mu} \mapsto A'_{\mu} = A_{\mu}^{U})$$

$$= \int \mathcal{D}A \mathcal{A} \Delta[A] e^{-S[A]} \prod_{x,a} \delta \left(\partial_{\mu} (A)_{\mu}^{a}\right) \cdot \int \mathcal{D}U, \tag{4.8}$$

のように、ゲージ変換の積分をくくりだすことができる。以上は、先に *A* のゲージ 不変性があるときに正しい議論である。言い換えると、ゲージ不変な物理的状態に ついてのみ上の経路積分表示が構成できる。

FP行列式 $\Delta[A]$ の具体的な表式を求めてみよう。式(4.6)にはゲージ固定条件 $\partial_{\mu}A^{a}_{\mu}=0$ に関するデルタ関数があるため、ゲージ変換としては単位元近傍

$$U(x) \sim 1 + iq\theta^a(x)T_a, \tag{4.9}$$

 $^{^{11}}$ 非摂動的には、課したゲージ固定条件が複数の解を持ちうる。そのため各ゲージ軌道がゲージ固定面を貫く回数が1回とは限らなくなり、上手くゲージ固定できていないことになる。これはGribov問題 [17]として知られる未解決問題である。興味のある読者は、例えば講義ノート [18]等を参照されたい。

のみを考えれば十分で、そのときのゲージ変換後のゲージ場は

$$(A^{U})_{\mu}^{a}(x) = A_{\mu}^{a}(x) + \partial_{\mu}\theta^{a}(x) + gf_{abc}A_{\mu}^{b}(x)\theta^{c}(x) = A_{\mu}^{a}(x) + D_{\mu}\theta^{a}(x),$$
 (4.10)

であるから

$$\Delta^{-1}[A] = \int \mathcal{D}U \prod_{x,a} \delta(\partial_{\mu} D_{\mu} \theta^{a}(x)) = \text{Det}^{-1}(\partial_{\mu} D_{\mu}). \tag{4.11}$$

ただし、デルタ関数の性質 $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$ を多変数へ拡張した

$$\delta^{N}(M\vec{x}) = \prod_{j=1}^{N} \delta\left(\sum_{k=1}^{N} M_{jk} x_{k}\right) = \frac{1}{\det M} \delta^{N}(x), \tag{4.12}$$

の離散的な添字 i を連続パラメータ x にさらに格上げした

$$\prod_{x} \delta(\mathcal{M}X(x)) = \operatorname{Det}^{-1} \mathcal{M} \cdot \prod_{x} \delta(X(x)), \tag{4.13}$$

の関係式を用いた。結局、式(4.11)から $\Delta[A] = \mathrm{Det}(\partial_{\mu}D_{\mu})$ が導かれた。右辺は確かに汎関数行列式になっている。

ここで、式(4.5)まで今一度戻ってみよう。時空間の各点での群上の積分 $\int_G \mathrm{d}U(x)$ は、Gが $\mathrm{SU}(3)$ のようなコンパクト群であれば有限となっており、発散は時空点 x が非加算無限個存在することに由来している。格子ゲージ理論での格子正則化は、時空を加算有限個の格子点とそれらを結ぶ辺に離散化してしまうため、そもそも経路積分が発散を伴わない。そのため、ゲージ固定をすることなく経路積分を実行することができる [15]。

4.3 Elitzurの定理

実は、ゲージ不変量でない演算子の期待値は常にゼロになることが知られている。これはElitzurの定理 [19]と呼ばれており、「ゲージ対称性は自発的には破れない」ことを意味している。その理由は以下のように理解できる¹²;簡単のため、ゲージ場のみの理論を考える。経路積分形式での物理量の期待値は

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A \, O(A) \, e^{-S[A]}, \qquad (4.14)$$

で与えられる。ここで、ゲージ場を変数変換して A^{θ} についての表式として書くと

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A^{\theta} O(A^{\theta}) e^{-S[A^{\theta}]} = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A O(A^{\theta}) e^{-S[A]},$$
 (4.15)

となる。ただし最後の等式で、作用と積分測度のゲージ不変性を用いて、ゲージ 場Aについての表式に再度書き直した。式(4.14)と(4.15)は同じ物理量の期待値なの で、

$$0 = \int \mathcal{D}A \left(O(A) - O(A^{\theta}) \right) e^{-S[A]}, \qquad (4.16)$$

¹²筆者はこの議論を川平将志氏と谷崎佑弥氏[20]に教わった。

となることがわかる。この等式を常に満たすためには、 $O(A) = O(A^{\theta})$ となる物理量、つまりゲージ不変な物理量を考えることが一番自然である。逆に $O(A) \neq O(A^{\theta})$ となる演算子を考えたとする。すると上の関係式から、そのような演算子の期待値 $\langle O \rangle$ はゼロになる。

以上の議論は、格子正則化した後の方がより厳密に行うことができる[21]。格子正則化すると、ゲージ場(Lie代数に値を取る)の代わりにリンク変数(Lie群に値を取る)が基本的な自由度となる。それに合わせて経路積分の積分測度も、ゲージ場からリンク変数によって書き表される。ゲージ不変でない演算子として、このリンク変数 $U_{\nu}(n')$ の一点関数を考えることにする。物凄く粗っぽく言うと、これは格子正則化していない連続理論においてゲージ場の一点関数を考えるようなものである。このような場合の経路積分は

$$\langle U_{\nu}(x') \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{x,\mu} dU_{\mu}(x) U_{\nu}(x') e^{-S_{\text{lat}}[U]}$$
 (4.17)

とかける。この積分は、群上の不変測度であるHaar積分の性質から示される

$$\int dU_{\mu}(x) U_{\mu}(x) = 0, \qquad (4.18)$$

のような構造を持っているため、結果として期待値がゼロとなる。

Elitzurの定理は、(経路積分形式での)観測可能な物理量はゲージ不変なものに限られることを示している。もしゲージ不変でない量を計算したい場合には、ゲージ固定条件を課してゲージ対称性を手で破っておく必要がある。

4.4 どうやって経路積分を計算するのか?

格子正則化して積分する自由度を有限に落としてきたが、それでもなお数値計算で扱う必要のある自由度の数は膨大である。

実際に数値計算する際には、工夫して積分の値を評価している。 Euclidean経路積分で、ある物理量 O の期待値を計算は

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A \, O(A) \, e^{-S[A]}, \qquad (4.19)$$

のようにすればよい。実際の格子QCD計算では、

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N_{\text{sample}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{sample}}} O(A^{(j)}),$$
 (4.20)

のように、有限回 N_{sample} の場の配位のサンプル $\left\{A^{(j)}\right\}$ を使って期待値を近似する。 ただし、 $A^{(j)}$ は確率分布 $P[A]:=\mathrm{e}^{-S[A]}/Z$ に従って生成されたゲージ場の配位である。より具体的には、各サンプル $A^{(j)}=[A_{\mu}^{a}(x)]^{(j)}$ は離散化された時空上に住むゲージ場全体をまとめて書いたもので、大雑把には、時空点とベクトルの添え字 (x,μ) ごと

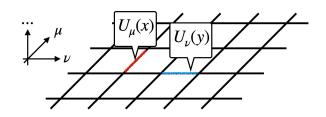


Figure 2: 格子ゲージ理論の概念図。各時空点(サイト)同士をつなぐ辺(リンク)にゲージ自由度が割り振られている。数値計算では全ての情報を数値的に持っている。

にゲージ自由度を表す行列 13 が与えられていると思えば良い(図 2 参照)。 中心極限 定理から、サンプル数 N_{sample} が無限大になる極限で式(4.20)は式(4.19)と一致する。

数値計算でやることは、場の配位のサンプル $\{A^{(j)}\}$ を「効率よく」「たくさん」つくることである。格子QCD計算で広く用いられているモンテカルロ法(Monte Carlo method)は、疑似乱数を使って確率的に場の配位を生成するものである。乱数を振ることで

$$\cdots \to A^{(j)} \xrightarrow{P[A]} A^{(j+1)} \xrightarrow{P[A]} \cdots \to A^{(N_{\text{sample}})}, \tag{4.21}$$

という場の配位の列を生成する。この特定の確率分布 P[A] に従って生成される列をマルコフ鎖(Markov Chain)と呼び、それを生成するモンテカルロ法でつくる方法がマルコフ連鎖モンテカルロ法(Markov-Chain Monte Carlo method, MCMC)である。

 $^{^{-13}}$ QCDの場合にはゲージ群がSU(3)なので、この行列は 3×3 のユニタリ行列で行列式が1のものになっている。

References

- [1] 柏太郎, 『量子力学選書 経路積分 -例題と演習-』, 裳華房, 2015.
- [2] 九後汰一郎、『ゲージ場の量子論I』, 培風館, 1989.
- [3] 中原幹夫, 『理論物理学のための幾何学とトポロジーI』[原著第2版], 日本評論 社, 2018.
- [4] S. Weinberg, **The Quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations**, Cambridge University Press, 6, 2005.
- [5] R. Feynman, A. Hibbs, and D. Styer, Quantum Mechanics and Path Integrals, Dover Publications, 2010.
- [6] R. Feynman, A. Hibbs, D. Styer, and 北原和夫(訳), 『量子力学と経路積分(新版)』, みすず書房, 2017.
- [7] 崎田文二 and 吉川圭二, 『**径路積分による多自由度系の量子力学』**, 岩波書店, 1986.
- [8] C. Gattringer and C. B. Lang, Quantum chromodynamics on the lattice, vol. 788, Springer, Berlin, 2010.
- [9] 青木慎也, 『格子上の場の理論』, 丸善出版, 2012.
- [10] 大川正典 and 石川健一, **SGCライブラリ140『格子場の理論入門』**, サイエンス 社, 2018.
- [11] 藤川和男、『現代物理学叢書ゲージ場の理論』, 岩波書店, 2001.
- [12] 九後汰一郎, 『ゲージ場の理論と経路積分』, 数理科学 2019年2月号, サイエンス社, 2019.
- [13] R. P. Feynman, "Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics," Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367–387.
- [14] M. Mariño, Instantons and Large N: An Introduction to Non-Perturbative Methods in Quantum Field Theory, Cambridge University Press, 9, 2015.
- [15] K. G. Wilson, "Confinement of Quarks," Phys. Rev. D 10 (1974) 2445–2459.
- [16] L. D. Faddeev and V. N. Popov, "Feynman Diagrams for the Yang-Mills Field," Phys. Lett. B 25 (1967) 29–30.

- [17] V. N. Gribov, "Quantization of Nonabelian Gauge Theories," Nucl. Phys. B 139 (1978) 1.
- [18] http://aries.phys.cst.nihon-u.ac.jp/~ohya/qft/main.pdf.
- [19] S. Elitzur, "Impossibility of Spontaneously Breaking Local Symmetries," Phys. Rev. D **12** (1975) 3978–3982.
- [20] https://archive.org/details/LectureAPCTPTanizaki/.
- [21] D. Tong, "Gauge Theory." https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/gaugetheory.html.