

Yamanaka Lab. の勉強  
- 量子系の物理 -

鳥居 優作

平成 28 年 5 月 30 日

# 目次

第 1 章	量子力学・統計力学の基礎知識	5
1.1	演算子と Generator	5
1.2	ハミルトニアンとの交換関係	5
1.3	演算子の対角化	5
1.4	ユニタリー非同値	5
1.5	混合状態と密度行列	6
1.6	固有状態と不確定性	7
1.7	ヒルベルト空間と平面波	7
1.8	第二量子化と Fock 空間	7
1.9	時間発展とユニタリー性	8
1.10	パリティ選択則	8
1.10.1	あらまし	8
1.10.2	奇関数・偶関数	8
1.10.3	パリティ	9
1.10.4	パリティによる選択律構築の限界	10
1.10.5	$\phi$ の積分	10
1.10.6	選択律まとめ	10
1.10.7	物理的解釈	11
第 2 章	Green 関数	12
2.1	Green 関数の一般形	12
2.1.1	数学寄りの定義	12
2.1.2	物理寄りの定義	12
2.1.3	Green 演算子のスペクトル表示	13
2.2	量子力学と Green 関数	13
2.2.1	摂動展開と Green 関数	13
2.2.2	散乱問題における Green 関数	14
2.3	場の理論における Green 関数	17
2.3.1	時間依存自由粒子 Green 関数	17
2.3.2	相関関数と温度 Green 関数	18
第 3 章	超伝導	19
3.1	超伝導の基礎	19
3.1.1	超伝導体の性質	19
3.1.2	磁束の量子化	19
3.2	超伝導の現象論: Ginzburg-Landau 理論	19
3.2.1	相転移と Order parameter	20
3.2.2	Ginzburg-Landau 方程式	20
3.2.3	ゲージ変換の復習	21
3.2.4	GL コヒーレンス長と侵入長	23

3.2.5	ソリトンの特徴 . . . . .	23
3.3	超伝導の微視的理論 : Bardeen-Cooper-Schrieffer 理論 . . . . .	24
3.3.1	金属の基本性質 . . . . .	24
3.3.2	電子-格子間相互作用 . . . . .	24
3.3.3	Cooper 問題 . . . . .	25
第 4 章	Anderson 局在とその周辺 . . . . .	26
4.1	Anderson 局在とは . . . . .	26
4.2	P.W.Anderson. Phys. Rev. <b>109</b> , 1492(1958) . . . . .	26
4.2.1	Tight-Binding 近似 . . . . .	26
4.2.2	Anderson の理論 . . . . .	27
4.3	E.Abrahams et al. Phys. Rev. Lett. <b>42</b> , 673(1979) . . . . .	27
第 5 章	熱・統計・量子統計力学 . . . . .	28
5.1	熱力学 . . . . .	28
5.1.1	状態量 . . . . .	28
5.1.2	完全な熱力学関数 . . . . .	28
5.1.3	自由エネルギー . . . . .	28
5.2	統計力学 . . . . .	29
5.2.1	目的 . . . . .	29
5.2.2	ミクロカノニカルアンサンブル . . . . .	29
5.2.3	Langevin 方程式 . . . . .	29
5.3	Born-Markov 型量子マスター方程式 . . . . .	31
5.3.1	問題設定 . . . . .	32
5.3.2	熱平衡 (問題 1) . . . . .	32
5.3.3	調和振動子のエネルギー (問題 2) . . . . .	33
5.3.4	位置・運動量平均の時間発展 (問題 3) . . . . .	34
5.3.5	数値計算 . . . . .	35
5.4	線形応答理論 . . . . .	36
5.4.1	概要 . . . . .	36
5.4.2	線形応答理論の基本概念 . . . . .	36
5.4.3	有限温度系へ . . . . .	37
5.4.4	簡単な例 . . . . .	37
第 6 章	Wigner 関数 . . . . .	39
6.1	Winger 表示 . . . . .	39
6.1.1	定義 . . . . .	39
6.1.2	任意の演算子に対する Wigner 表示 . . . . .	39
6.2	Wigner 分布関数の時間発展 . . . . .	39
6.2.1	$(\hat{A}\hat{B})_W$ の計算 . . . . .	39
6.2.2	$f_W(q, p, t)$ の時間発展 . . . . .	40
6.3	具体的な問題 . . . . .	41
6.3.1	調和振動子系の Wigner-Moyal 方程式 . . . . .	41
6.3.2	数値計算 . . . . .	41

<b>第 7 章</b>	<b>経路積分</b>	<b>43</b>
7.1	量子力学の復習	43
7.1.1	自由粒子	43
7.1.2	Green 関数	44
7.2	経路積分の基礎	44
7.2.1	経路積分の導出	44
7.2.2	自由粒子：経路積分を使わない方法	45
7.2.3	自由粒子：経路積分の方法	46
7.3	数値計算の準備及び経路積分のイメージ	47
7.3.1	基底波動関数と伝搬関数	47
7.3.2	作用とラグランジアン	47
7.3.3	作用積分の簡略化	47
7.3.4	経路とは	48
7.3.5	経路の取り方	48
7.3.6	処方箋	48
<b>第 8 章</b>	<b>Ising 模型</b>	<b>49</b>
8.1	Ising 模型と熱統計力学の基礎	49
8.1.1	ハミルトニアン	49
8.1.2	平衡状態	49
8.1.3	相転移	49
8.2	Ising 模型の厳密解	50
8.2.1	1 次元 Ising 模型：平均場近似	50
8.2.2	1 次元 Ising 模型：厳密解	50
8.2.3	2 次元 Ising 模型	51
8.3	数値計算	51
8.3.1	Monte Carlo 法	51
8.3.2	Metropolis 法	51
8.3.3	2 次元 Ising 模型	52
8.3.4	数値計算上の注意	53
<b>第 9 章</b>	<b>場の量子論</b>	<b>54</b>
9.1	Wick の定理	54
9.1.1	概要	54
9.1.2	具体例	54
9.1.3	証明	54
9.2	TFD 形式による期待値計算	54
9.2.1	TFD の基礎	55
9.2.2	具体計算	55
9.2.3	Block-de Dominics の定理	56
9.3	Gell-Mann-Low の定理	56
9.3.1	断熱因子	56
9.3.2	概要	56
9.3.3	証明	57
9.4	Tips	57
9.4.1	Heisenberg 描像	57
9.4.2	相互作用描像	57
9.4.3	デルタ関数の Fourier 変換表示	58

9.4.4	$k$ が離散・連続の場合の $\langle a_k^\dagger a_{k'} \rangle$	59
9.4.5	デルタ関数が体積になること	60
9.4.6	ハミルトニアンに対角化と Bogoliubov-de Gennes 方程式	60
9.4.7	一様系の Bogoliubov-de Gennes 方程式	61
<b>第 10 章</b>	<b>研究 - 3 次元一様有限温度系のゼロモード</b>	<b>63</b>
10.1	問題設定	63
10.1.1	冷却原子気体のハミルトニアン	63
10.1.2	相互作用描写	64
10.1.3	量子補正	65
10.2	自己無撞着ループ	66
10.2.1	GP 方程式	67
10.2.2	共役モード方程式	67
10.2.3	BdG 方程式	68
10.2.4	ゼロモード方程式	68
10.2.5	$\langle Q^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$ の計算	69
10.2.6	熱平均 $V_t$ ・異常平均 $V_a$	70
10.2.7	比熱・圧力	71
10.3	変分法による見積もり	71
10.3.1	ゼロモードハミルトニアン	72
10.3.2	変分関数	72
10.3.3	ゼロ温度期待値・エネルギー固有値の計算	72
10.3.4	各パラメータの計算	73
10.3.5	有限温度期待値	73
10.4	数値計算結果	74
<b>第 11 章</b>	<b>研究：ゼロモードの緩和</b>	<b>75</b>
11.1	公式	75
11.2	具体計算：time-convolutionless 型	75
11.3	具体計算：摂動項 $\mathcal{K}(t)$	78
11.4	数値計算へ向けて	80
11.4.1	$E_\mu \cdot E_\nu$	80
11.4.2	$A_i^{nm}$	81
11.4.3	$N_{nm} \cdot N'_{nm}$	81
11.4.4	$R_i$	81
11.5	$L^{nm,n'm'}$ の整理	82
<b>第 12 章</b>	<b>Fetter-Walecka : Quantum Theory of Many-Particle Systems</b>	<b>84</b>
12.1	Green Function	84

# 第1章 量子力学・統計力学の基礎知識

## 1.1 演算子と Generator

運動量演算子：並進変換の Generator

角運動量演算子：回転の Generator

ハミルトニアン：時間並進の Generator

## 1.2 ハミルトニアンとの交換関係

ある演算子  $\hat{O}$  がハミルトニアンと交換するとき、 $\hat{O}$  は時間発展せず、かつハミルトニアンと同時固有状態を取る状態を作ることができる。つまり、仮に運動量演算子  $\hat{p}$  がハミルトニアンと交換すれば、状態はハミルトニアンと運動量演算子の同時固有状態になっている。

ちなみに、ハミルトニアンと運動量演算子が交換するのは一様系のとき、並進対称性が破れているときである。

## 1.3 演算子の対角化

“演算子を対角化できている”の直感的理解について。エルミート演算子の固有値問題

$$\hat{H} |u_i\rangle = E_i |u_i\rangle \quad (1.1)$$

が解けるとき演算子は対角化できていると表現する。左から  $\langle u_j |$  を作用させる：

$$\langle u_j | \hat{H} |u_i\rangle = E_i \langle u_j | u_i\rangle = E_i \delta_{ij} \quad (1.2)$$

$|u\rangle$  はエルミート演算子の固有関数なので直交完全系を張っている。これを行列表示すると

$$\begin{pmatrix} \langle u_0 | \hat{H} |u_0\rangle & \langle u_0 | \hat{H} |u_1\rangle & \langle u_0 | \hat{H} |u_2\rangle & \cdots \\ \langle u_1 | \hat{H} |u_0\rangle & \langle u_1 | \hat{H} |u_1\rangle & & \\ \langle u_2 | \hat{H} |u_0\rangle & & \langle u_2 | \hat{H} |u_2\rangle & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & E_1 & & \\ 0 & & E_2 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

ハミルトニアンは対角成分のみ値を持つ。

## 1.4 ユニタリー非同値

ある直交完全系  $\{|\psi'_n\rangle\}$  があったとき別の正規直交系  $\{|\psi_n\rangle\}$  は

$$1 = \sum_j |\psi'_j\rangle \langle \psi'_j| \implies |\psi_i\rangle = \sum_j \langle \psi'_j | \psi_i \rangle |\psi'_j\rangle \quad (1.4)$$

というような線型結合で表現できるはずである。そして、 $\langle \psi'_j | \psi_i \rangle$  はユニタリー行列の成分である。つまり  $\{\psi_n\}$  と  $\{\psi'_n\}$  はユニタリー変換で結ばれているということ。これをユニタリー同値と呼ぶ。またこれは正準変数を正準変換して新たに得られた演算子で直交完全系を張ったとも解釈できる。正準変換もユニタリー変換である。量子力

学は有限自由度系なので、すべての正準変換はユニタリー同値であることが約束されている (von Neumann の一意性定理)。

ユニタリー同値な基底同士は基本的に直交せず、量子力学はその枠組みの上で議論される。しかしながら、無限自由度の場の量子論においてはその限りではなく、ユニタリー非同値な (ある Fock 空間の基底の重ね合せで表現できない) 真空が存在する場合がある。この非同値真空同士は直交し、これが自発的対称性の破れを説明する。Gell-Mann-Low の定理も、Free Hamiltonian  $H_0$  (固有関数  $|\Phi_0\rangle$ ) と Full Hamiltonian  $H$  (固有関数  $|\Psi_0\rangle$ ) がユニタリー同値であることを仮定しなければならない。詳しくは奥村さん・高橋さんの D 論参照。

## 1.5 混合状態と密度行列

熱が存在する場合、一般に系は混合状態である。混合状態をやさしく説明すると...

気体分子が 100 個と、その粒子の速度を測定する観測器がある系を考える。仮に速度が  $v_1$  の分子が 20 個、 $v_2$  の分子が 80 個あったとする。その気体分子の速度の平均は、速度  $v_1$  付近の粒子の状態を  $|\psi_1\rangle$ 、 $v_2$  付近の粒子の状態を  $|\psi_2\rangle$  とすると、

$$\langle \hat{v} \rangle = \frac{1}{5} \langle \psi_1 | \hat{v} | \psi_1 \rangle + \frac{4}{5} \langle \psi_2 | \hat{v} | \psi_2 \rangle$$

で与えられる。こういう形で期待値が与えられる場合、系は混合状態であるという。ここで  $1/5$  と  $4/5$  は統計由来の確率であり、量子力学的な確率とは別物であることに注意。前者が与えるのは粒子分布である。古典粒子であれば Maxwell-Boltzmann 分布、同種粒子であれば Fermi-Dirac 分布とか Bose-Einstein 分布。その一方で、後者が与えるのは量子論的な揺らぎである。揺らぎは  $\Delta v_1, \Delta v_2$ 。  $\langle \psi | \hat{v} | \psi \rangle$  は  $v$  の平均 (期待値)。

つまり熱がある場合、測定器で速度  $v_1$  の粒子が検出される確率は分布関数で与えられる。その粒子の速度を測定するとき、期待される  $v_1$  という値からは少しずれて  $v_1 + \Delta v_1$  という値を取る。これが「値が確定しない」ということ。 $\Delta v_1$  の値は量子力学的な確率で与えられる。

期待値を得るもっと便利な表式を用意したい。ここで

$$\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (1.5)$$

を用意する。上の例で言えば  $p_1 = 1/5, p_2 = 4/5$  である。これを密度行列と呼ぶ。密度行列に求めたい物理量 (今回は  $\hat{v}$ ) を掛けてトレースを取る:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho \hat{v} &= \sum_n \sum_m \langle \Psi_m | p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \hat{v} | \Psi_m \rangle = \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{v} \sum_m (|\Psi_m\rangle \langle \Psi_m|) |\psi_n\rangle \\ &= \sum_n p_n \langle \psi_n | \hat{v} | \psi_n \rangle = \langle \hat{v} \rangle \end{aligned} \quad (1.6)$$

これは混合状態期待値である。ここで、c-数は交換可能、完全系の性質  $\sum_m |\Psi_m\rangle \langle \Psi_m| = 1$  である性質を用いている。またトレースの巡回対称性<sup>1</sup> ( $\text{Tr} ABC = \text{Tr} CAB = \text{Tr} BCA$ ) より、 $\hat{v}$  を掛けるのは前からでも後ろからでもよい。

これで混合状態期待値を記述する統一的な表式が得られた。密度行列に物理量を掛けてトレースを取ることで期待値が得られるということは、密度行列は系の情報を全て持っているということになる。系の情報を保持しているのはハミルトニアンであり、つまるところ密度行列を確定させるためにはハミルトニアンが必要である。現に、平衡状態における密度行列は  $\rho = e^{-\beta H}$  で与えられる<sup>2</sup>。

$\text{Tr} A \rho$  は、密度行列に含まれる情報のうち  $A$  以外の情報を切り捨てることを意味する。これをトレースアウトという。マスター方程式で密度演算子の時間発展を追えるが、Full の密度演算子を計算するのは自由度が大きすぎて大変なので、求めたい物理量以外をトレースアウトした形を用いるのが普通<sup>3</sup>。

<sup>1</sup>証明してみよう!

<sup>2</sup>なぜこういう形で与えられるか考えてみよう!例えば  $\langle n \rangle = \text{Tr} a^\dagger a \rho$  が Bose-Einstein 分布になることを確認すればいい!

<sup>3</sup>山中研究室における普通です。量子開放系の理論は完成していないので、系統的にマスター方程式を作り、解く方法はまだまだとまていない。他の研究室では他の流儀があるかもしれない

## 1.6 固有状態と不確定性

状態が  $\hat{v}$  の固有状態なら、何度測定しても観測値は  $v$  になり量子的な揺らぎ  $\Delta v$  はなくなる。しかしながら不確定性原理は守られなければならないので、運動量が確定する代わりに位置の不確定性が発散する。これは現実との対応を考えるとあまりにピーキーな設定である。固有状態というのは量子力学の本質である揺らぎが存在しないとても特別な状態です。量子力学の固有状態でよく見かけるのは「エネルギー固有状態」ですが、これもエネルギーが確定する代わりにエネルギーと共役な物理量である時間の不確定性が発散します。ここでいう時間の不確定性とは「波動関数の時間的広がり」を表しています。エネルギー固有状態においては波動関数  $\psi(x)e^{-iEt/\hbar}$  の確率密度は変化しないので、確率振幅の半値幅は無限大になります。これが  $\Delta t = \infty$  の意味です。

## 1.7 ヒルベルト空間と平面波

運動量の固有状態がマズいのは設定が現実的ではないということだけでなく、量子力学の数学的構造にも反していることにあります。量子力学における状態というものはヒルベルト空間 ( $L^2$ ) で定義されるべきだが、運動量の固有状態である平面波  $e^{ipx}$  は  $L^2$  をはみ出しており、自乗可積分ではない<sup>4</sup>。つまり、運動量の固有状態は量子力学では一般的に取り扱えないものなのである。しかし、平面波というものは量子力学のいたるところで現れる。例えば自由粒子の波動関数は平面波で記述されるし、「平面波展開」というテクニックは様々なところで用いられる。

重要なのは境界条件である。自由粒子は境界条件をなにも課していない<sup>5</sup>。Dirichlet 境界条件を課すと状態は平面波ではなくなる。一方で、周期的境界条件が許される固体結晶では状態を Bloch 波で記述できる。平面波で固体中の電子状態が記述できるということは、固体中の電子は自由粒子とほぼ同等の状況下であり、これが金属の電子伝導性を如実に説明している<sup>6</sup>。また、 $L^2$  ではない平面波も、適切な重み付けをして和、ないしは積分を取ると  $L^2$  になる場合がある。これがフーリエ級数展開とかフーリエ変換とか呼ばれているもの。

## 1.8 第二量子化と Fock 空間

第二量子化した量子力学は場の量子論とは異なる理論です<sup>7</sup>。なので、第二量子化は場の理論ではなく多体量子力学の一形式と捉えられるべきです<sup>8</sup>。第二量子化された量子力学における最も気をつけなければいけない点は、「生成消滅演算子で記述されるモードは原子の生成・消滅を記述しているわけではない」ということ。生成消滅演算子は場の各点における励起を与えておりそれを素励起と呼ぶ。素励起は波であり、素励起の集まりが原子を記述している<sup>9</sup>と考えてもいいかもしれない。素励起のモードの固有状態（調和振動子における粒子数状態）のテンソル積で定義されるのが Fock 空間である。Fock 空間は Hilbert 空間を無限自由度に拡張したものだとして捉えて問題ない。つまり、第二量子化では場の各点に調和振動子を設置し、それを無限個連結させたものであり、そのモードは素励起を表現するわけである。

今回の課題で与えられた生成消滅演算子がどのような粒子の生成消滅を記述しているのかはわからないが、仮に第二量子化されたものを仮定するならば、そのモードは単純な粒子の追加とは違った意味合いを持つことは理解するべきでしょう<sup>10</sup>。

<sup>4</sup>自乗可積分でないものを量子力学の枠組みに取り込むと Born の確率解釈が死にます

<sup>5</sup>自由なのだから当然といえば当然

<sup>6</sup>古典的な Drude モデルなどでは金属結晶の電子伝導性を説明しきれなかったようです

<sup>7</sup>一般的に混同されがちですが、山中研究室ではこれを断固として主張しています。

<sup>8</sup>もっとも異なることは、「量子力学における状態は Schrödinger 方程式で決定されるが、場の理論における状態は理論を閉じるように選択されるもの」であること。粒子の生成・消滅で状態を記述する点は第二量子化された量子力学でも場の理論でも変わらない。ならば量子力学における真空（基底状態）は「粒子がひとつも存在しない状態」である。しかし、そのように真空を定義すると量子相転移を記述できなくなる。例えば、Bose-Einstein 凝縮 (BEC) はひとつの相であり、多数の Bose 粒子がエネルギー最低状態に落ち込み「真空」を形成しているものである。この「真空」には粒子が存在しているので量子力学では記述できない。場の量子論では BEC が存在する状態を真空として定義することができる。

<sup>9</sup>原子にももちろん波動性がある

<sup>10</sup>何言ってるかわからないかもしれませんが、場の理論境界の誤解されやすいかなり難しい話です。



## 1.9 時間発展とユニタリー性

量子マスター方程式による時間発展と Heisenberg 方程式 (Schrödinger 方程式) による時間発展は何が違うのかというと、緩和が記述できるかどうか。量子力学におけるユニタリーな時間発展では系のノルムが保存しなければならないので、物理量の時間発展は振動し、緩和することはない。Schrödinger 方程式で物理量が減衰するようなグラフが得られたとしても、時間領域を広げれば再び値が立ち上がる (revival) はずである。仮に revival しないとしたら、それは時間発展のユニタリー性が壊れていることになる<sup>11</sup>。時間発展のユニタリー性を壊すのは番先生の本でもやってます<sup>12</sup>。一方、開放系の統計力学では系・熱浴のハミルトニアンを分けて熱浴をトレースアウトするテクニックを用いてユニタリーな時間発展で緩和が記述できる。

## 1.10 パリティ選択則

### 1.10.1 あらまし

$n = 2$  水素原子は 2s-軌道 ( $l = 0$ ) と p-軌道 ( $l = 1$ ) についての 3 重縮退 ( $m = -1, 0, 1$ ) によって 4 重に縮退している。これに一樣な電場をかけると縮退していた準位が一部 Split する現象が見られる。これを Stark 効果と呼ぶ。 $n = 3$  以上の励起状態についても同様の議論が可能。

一樣な電場のもとにある電子のエネルギーを求めようとすると、縮退のある摂動論に頼ることになる。が、その計算はなかなか面倒。具体的には水素原子の波動関数を

$$\langle r, \theta, \phi | \psi_{nlm} | r, \theta, \phi | \psi_{nlm} \rangle = \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.7)$$

と記述するとき、永年方程式

$$\begin{vmatrix} \langle \psi_{200} | \hat{z} | \psi_{200} \rangle - E_2^{(1)} & \langle \psi_{200} | \hat{z} | \psi_{210} \rangle & \langle \psi_{200} | \hat{z} | \psi_{211} \rangle & \langle \psi_{200} | \hat{z} | \psi_{21-1} \rangle \\ \langle \psi_{210} | \hat{z} | \psi_{200} \rangle & \langle \psi_{210} | \hat{z} | \psi_{210} \rangle - E_2^{(1)} & \langle \psi_{210} | \hat{z} | \psi_{211} \rangle & \langle \psi_{210} | \hat{z} | \psi_{21-1} \rangle \\ \langle \psi_{211} | \hat{z} | \psi_{200} \rangle & \langle \psi_{211} | \hat{z} | \psi_{210} \rangle & \langle \psi_{211} | \hat{z} | \psi_{211} \rangle - E_2^{(1)} & \langle \psi_{211} | \hat{z} | \psi_{21-1} \rangle \\ \langle \psi_{21-1} | \hat{z} | \psi_{200} \rangle & \langle \psi_{21-1} | \hat{z} | \psi_{210} \rangle & \langle \psi_{21-1} | \hat{z} | \psi_{211} \rangle & \langle \psi_{21-1} | \hat{z} | \psi_{21-1} \rangle - E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.8)$$

を計算することになる。 $E_2^{(1)}$  は  $n = 2$  における 1 次摂動エネルギー。 $E_2^{(1)}$  の 4 次方程式になって各軌道のエネルギーが求まる... というシナリオだが、真面目にやると計算がめんどくさい:

$$\langle \psi_{200} | \hat{z} | \psi_{210} \rangle \sim \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi (2-r) r e^{-r} r \cos \theta \quad (1.9)$$

みたいなのを 10 個くらい計算しなければいけない。とはいえ  $z$  方向に一樣な電場を掛けるだけなら結構な数の項が消えそう。対称性を使って計算を簡略化したい。

### 1.10.2 奇関数・偶関数

ブラケット表記の期待値を波動関数に置き換える:

$$\langle \psi_\alpha | X | \psi_\beta \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_\alpha^*(x) X(x) \psi_\beta(x) \quad (1.10)$$

積分区間から、被積分関数が奇関数ならゼロになる。奇関数、つまり空間反転<sup>13</sup>に対して符号が反転するものを「パリティが-」偶関数を「パリティが+」と呼ぶことにする。

つまるところ永年方程式の各成分は積分なので、その関数 ( $\psi$ ) やら演算子 ( $\hat{z}$ ) やらのパリティを調べてあげれば消える項を見つめることができる。この性質を水素原子に限定せず体系的に語るのがパリティ選択律である。

<sup>11</sup>一般解の一部を捨てることにより、意図的にユニタリー性を壊すこともできる。

<sup>12</sup>量子と非平衡系の物理 量子力学の基礎と量子情報・量子確率過程 (2009)

<sup>13</sup>ここでいう「空間」とは、測度空間のこと。今回のお話で言えば  $r, \theta, \phi$ 。パリティ変換を  $\mathcal{P}$  とすると、 $\mathcal{P} : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$ 、もしくは  $\mathcal{P} : (r, \theta, \phi) \mapsto (r, \pi - \theta, \phi + \pi)$  である。これは三次元の図を書いてみればわかるでしょう。

### 1.10.3 パリティ

永年方程式に含まれる要素に対するパリティを調べる. 以下適当に無次元化してます.

動径波動関数  $R_{nl}(r)$

動径  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  のパリティ変換に関与しそうなのが動径波動関数  $R_{nl}(r)$ . 動径波動関数のざっくりとした具体形は

$$R_{nl}(r) \sim r^l e^{-r} L_{n+l}^{2l+1}(r) \quad (1.11)$$

$L_\alpha^\beta$  は Laguerre 陪多項式. とはいえこの形に特に重要ではない. 空間反転は  $\mathcal{P} : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$  のように作用するので, そもそもパリティ変換によって  $r$  の符号は変化しない. 動径  $r$  がマイナスになることは物理的にあり得ない.

球面調和関数  $Y_{lm}$

角度成分  $\theta, \phi$  のパリティは球面調和関数  $Y_{lm}$  で決定される. ざっくりとした具体形:

$$Y_{lm} \sim (-1)^{(m+|m|)/2} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (1.12)$$

$P_\alpha^\beta$  は Legendre 陪関数.  $\theta$  のパリティは  $(-1)^m(-1)^l$ ,  $\phi$  は  $(-1)^m$  なので, 磁気量子数のパリティ依存性は消える.

電場  $\hat{z}$

パリティ変換  $\mathcal{P} : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$  より明らか.

ヤコビアン  $J$

3次元球座標系のヤコビアン

$$J = r^2 \sin \theta \quad (1.13)$$

について.  $r$  はパリティ変換に関与せず,  $\mathcal{P} : \sin \theta \mapsto \sin(\pi - \theta) = \sin \theta$  より  $\theta$  についてもパリティは+.

パリティまとめ

以上の各要素についてのパリティをまとめる:

- 動径波動関数のパリティは+
- 球面調和関数のパリティは  $(-1)^l$
- 電場のパリティは-
- ヤコビアンのパリティは+

#### 1.10.4 パリティによる選択律構築の限界

まとめると、期待値のパリティは  $(-1)^{l+l'+1}$  である。今回の  $n = 2$  の水素原子であれば、 $l, l' = 0$  or  $1$  なので、期待値  $\langle \psi_{n'l'm'} | \hat{z} | \psi_{nlm} \rangle$  は方位量子数については  $(l, l') = (1, 0), (0, 1)$  しか生き残らない。

今回対称性で語れるのはこの程度である<sup>14</sup>。他にも消せる項はあるが、これ以上は対称性だけではなく具体的に被積分関数を見ていく必要がある。積分のおおまかな具体系は以下の通り：

$$\langle \psi_{n'l'm'} | \hat{z} | \psi_{nlm} \rangle \sim \int dr r^3 R_{n'l'}(r) R_{nl}(r) \int d\theta P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \cos \theta P_l^m(\cos \theta) \sin \theta \int d\phi e^{i(m'-m)\phi} \quad (1.14)$$

ここで  $z = r \cos \theta$  としている。

#### Legendre 陪関数

パリティのみを考慮すると、 $\Delta l = l - l' = \text{odd}$  である全ての遷移<sup>15</sup>が許されることになるが、実験的には  $\Delta l = \pm 1$  のみが許される。これはパリティからは導かれませんが数学的に導出は可能<sup>16</sup>。Legendre 陪関数は以下の漸化式を満たす：

$$z P_l^m(z) = \frac{l-m+1}{2l+1} P_{l+1}^m(z) + \frac{l-m}{2l+1} P_{l-1}^m(z) \quad (1.15)$$

式 (1.14) に代入すると、Legendre 陪関数の直交性

$$\int dz P_l^{m'} P_l^m \sim \delta_{ll'} \quad (1.16)$$

より、 $\Delta l = \pm 1$  のみが許されることがわかる。

#### 1.10.5 $\phi$ の積分

式 (1.14) を見てわかる通り、 $m = m'$  以外では積分がゼロになる。

#### 1.10.6 選択律まとめ

$n = 2$  励起状態にある水素原子の Stark 効果の一次摂動における選択律は

- $\Delta l = \pm 1$
- $m = m'$

であることがわかった。つまり残るのは  $\langle \psi_{200} | \hat{z} | \psi_{210} \rangle$  とその複素共役のみである。この結果は系の空間反転対称性の考察のみから得られたわけではないので「パリティ選択律」と呼ぶべきではないと思う。「 $n = 2$  水素の Stark 効果における選択律」と呼ぶべき。

その他の励起の選択律はまた少し違う形になる可能性はある。また、2 次摂動まで考慮した場合にどうなるかも考えていない<sup>17</sup>。

<sup>14</sup>もちろん、もっと複雑な系を考えるとパリティのみでもっと踏み込んで語ることができる。例えば LS 結合を考えた系とか。

<sup>15</sup> $\langle f | X | i \rangle$  の意味するところは、「 $|i\rangle$  に演算子  $X$  が作用した結果を  $|i'\rangle$  とすると、 $|i'\rangle$  は  $\langle f |$  とどの程度重なるか」ということである。これ ( $\langle f | i' \rangle \langle i' | i \rangle$ ) を遷移確率と呼ぶ。つまり Stark 効果の計算は物理的に「一様な電場がかかることによって状態は各量子数に対してどのような遷移が許されるか」という話に還元される。

<sup>16</sup>量子力学の枠組みで数学的に導けないが実験的に現れるような現象があった場合はそういう「要請」を課することになる。例えば、波動関数の境界条件（ディリクレ境界条件）は確率解釈の要請であるし、波動関数の時間発展が Schrödinger 方程式で記述されるのもまた量子力学の要請である。また、粒子と呼ばれるものはすべて Boson と Fermion に分類できる、ということも要請のひとつ。

<sup>17</sup>暇があったら考えてみてください。そんなに難しくはないはず

### 1.10.7 物理的解釈

一様電場には電子の回転運動<sup>18</sup>の向きを変えることはできないことから、磁気量子数  $m$  が変化するような遷移が禁制であることは直感と一致している。一方で回転の向きを変えることができる可能性があるのは電場ではなく磁場である。磁場がかかった系で縮退していた準位が Split する現象のことを Zeeman 効果という。こちらでは  $\Delta m = 0, \pm 1$  の遷移が許されている<sup>19</sup>。

---

<sup>18</sup>もちろん電子が原子の周りを回転しているというのは古典的解釈であることに注意。

<sup>19</sup>しかしながら、この古典的な描像とのアナロジーをもってして現象を正当化するのはとてもよくない。なぜなら、量子と古典との対応関係は（当然ながら）何も保証されていないから。全ての量子系の現象が古典とのアナロジーで説明できたら、もはや量子論は必要なくなる。

## 第2章 Green関数

### 2.1 Green関数の一般形

#### 2.1.1 数学寄りの定義

##### Green 関数

ある微分演算子  $\mathcal{D}$  について

$$\mathcal{D}G(x, x') = \delta(x - x') \quad (2.1)$$

が成立するとき,  $G$  を  $\mathcal{D}$  に対する Green 関数と呼ぶ.

ただし, 境界条件がないと  $G(x, x')$  は一意に決まらない.

#### 2.1.2 物理寄りの定義

ある線形エルミート演算子  $L$  が

$$L|a\rangle = |a\rangle \quad (2.2)$$

のように定義されているとする.  $|a\rangle$  の形式解は

$$|a\rangle = L^{-1}|a\rangle \quad (2.3)$$

のように表される. このとき  $L^{-1}$  を Green 演算子と呼び  $L^{-1} = G$  と書く. (2.3) を任意の連続基底<sup>1</sup>で縮約を取り, 完全系を用いて式変形をする:

$$\langle l|a\rangle = \langle l|G|a\rangle \quad (2.4)$$

$$= \int dl' \langle l|G|l'\rangle \langle l'|a\rangle \quad (2.5)$$

$$\left( = \int dl' G(l, l') \psi(l', a) \right) \quad (2.6)$$

このとき,  $\langle l|G|l'\rangle$  を演算子  $L$  に対する Green 関数と呼ぶ.

ここで定常 Schrödinger 方程式

$$(E - \hat{H})\psi(x) = 0 \iff \hat{L}\psi(x) = 0 \quad (2.7)$$

が与えられたとする.  $\hat{L}$  に対する Green 関数は  $G = (E - \hat{H})^{-1}$  と表される. また

$$\hat{L}G = (E - \hat{H})G = I \quad (2.8)$$

という関係に左右からハミルトニアン<sup>2</sup>の固有状態<sup>2</sup>を作用させると

$$\langle x|(E - \hat{H})G|x'\rangle = \langle x|I|x'\rangle \quad (2.9)$$

$$\int dx'' \langle x|(E - \hat{H})|x''\rangle \langle x''|G|x'\rangle = \delta(x - x') \quad (2.10)$$

$$\int dx'' (E - H)\delta(x - x'') \langle x''|G|x'\rangle = \delta(x - x') \quad (2.11)$$

<sup>1</sup>生成消滅演算子の固有状態などを持ってくると基底は離散になってしまうので Delta 関数が現れない.

<sup>2</sup>固有状態でないと  $\langle x|(E - \hat{H})|x''\rangle = (E - H)\langle x|x''\rangle$  のような変形が正当化されない.

よって見慣れた形式

$$(E - H)G(x, x') = \delta(x - x') \quad (2.12)$$

を得る.

### 2.1.3 Green 演算子のスペクトル表示

生成消滅演算子の粒子数状態の完全系を用いて

$$G = (E - \hat{H})^{-1} = \sum_{nn'} |n\rangle \langle n| (E - \hat{H})^{-1} |n'\rangle \langle n'| \quad (2.13)$$

$$= \sum_{nn'} (E - E_n)^{-1} |n\rangle \langle n'| \delta_{nn'} \quad (2.14)$$

$$= \sum_{nn'} \frac{|n\rangle \langle n|}{(E - E_n)} \quad (2.15)$$

と表すことができる. ただし, ハミルトニアンが生成消滅演算子の 2 次形式で記述できていなければならない.

## 2.2 量子力学と Green 関数

### 2.2.1 摂動展開と Green 関数

定常シュレディンガー方程式

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.16)$$

が与えられており, ハミルトニアンは

$$H = H_u + H_p \quad (2.17)$$

と書けるものとする.  $H_u, H_p$  はそれぞれ非摂動ハミルトニアン, 摂動ハミルトニアンである<sup>3</sup>. (2.16) を変形する:

$$(E - H_u)\psi(x) = H_p\psi(x) \quad (2.18)$$

非摂動ハミルトニアンを線形演算子として線形演算子  $L_u$  及び Green 関数  $G_u$  を定義する:

$$L_u = E - H_u \quad G_u = (E - H_u)^{-1} \quad (2.19)$$

さらに, Schrödinger 方程式は

$$(L_0 - H_p)\psi(x) = 0 \quad (2.20)$$

と書け, この式の Green 関数は

$$G = (L_0 - H_p)^{-1} \quad (2.21)$$

である. ここで, 一般に非可換な演算子  $A, B$  に対する逆演算子は

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{A} \quad (2.22)$$

$$= \frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\left(\frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{A}\right) \quad (2.23)$$

$$= \frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{A} \quad (2.24)$$

$$= \frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{B}(B - A)\left(\frac{1}{B} + \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{A}\right) \quad (2.25)$$

$$= \dots$$

<sup>3</sup>摂動部を解析的に解ける線形項に, 非摂動部を解析的に解けない非線形項にするのが一般的. 量子力学において解析的に解けるものは調和振動子くらいしかないが, 生成消滅演算子の 2 次形式になってさえいれば Bogoliubov 変換などを通して対角化が可能な形式にできる. 一方相互作用項は非線形 (生成消滅演算子の 4 次) になっているので解析的に解けない.

のように逐次展開を繰り返すことができる.  $A \rightarrow A - B$ ,  $B \rightarrow A$  と変形することにより

$$\frac{1}{A - B} = A^{-1} + A^{-1}BA^{-1} + A^{-1}BA^{-1}BA^{-1} + \dots \quad (2.26)$$

という公式を得る. これを用いると

$$G = \frac{1}{L_u - H_p} = L_u^{-1} + L_u^{-1}H_pL_u^{-1} + L_u^{-1}H_pL_u^{-1}H_pL_u^{-1} + \dots \quad (2.27)$$

$$= G_0 + G_0H_pG_0 + G_0H_pG_0H_pG_0 + \dots \quad (2.28)$$

$$= G_0 + G_0H_pG = G_0 + GH_pG_0 \quad (2.29)$$

のように, Full のハミルトニアン  $\hat{H}$  の Green 関数は非摂動 Green 関数を用いて展開できる.

ここで, ハミルトニアン  $\hat{H} = \hat{H}_u + \hat{H}_p$  の固有状態  $|n\rangle$  について

$$(E - \hat{H})|n\rangle = 0 \quad (2.30)$$

$$(E - \hat{H}_u)|n\rangle = \hat{H}_p|n\rangle \quad (2.31)$$

$$|n\rangle = \frac{\hat{H}_p}{E - \hat{H}_u}|n\rangle = G_u\hat{H}_p|n\rangle \quad (2.32)$$

が成立している. さらに左から  $\langle x|$  を作用させる:

$$\langle x|n\rangle = \int dx' dx'' \langle x|G_u|x''\rangle \langle x''|\hat{H}_p|x'\rangle \langle x'|n\rangle \quad (2.33)$$

$$\psi_n(x) = \int dx' dx'' G_u(x, x'')H_p(x'')\delta(x' - x'')\psi_n(x') \quad (2.34)$$

$$= \int dx' G_u(x, x')H_p(x')\psi_n(x') \quad (2.35)$$

$\langle x|$  を作用させるのは  $x$  表示にして微分方程式を解くようなものなので, これには境界条件が足りない.  $H_p = 0$ , つまり摂動項がない場合の特解を  $\langle x|n\rangle_0 = \psi_{0n}(x)$  とすると

$$\psi_n(x) = \psi_{0n}(x) + \int dx' G_u(x, x')H_p(x')\psi_n(x') \quad (2.36)$$

となる. ただしこれはあくまで形式解である. 両辺に未知関数  $\psi_n(x)$  があるので, 繰り返し代入することで展開していく:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \psi_{0n}(x) + \int dx' G_u(x, x')H_p(x') \left[ \psi_{0n}(x') + \int dx'' G_u(x', x'')H_p(x'')\psi_n(x'') \right] \\ &= \psi_{0n}(x) + \int dx' G_u(x, x')H_p(x')\psi_{0n}(x') + \int dx' \int dx'' G_u(x, x')H_p(x')G_u(x', x'')H_p(x'')\psi_n(x'') \\ &= \dots \end{aligned} \quad (2.37)$$

これが Green 関数による具体的な摂動計算手法である.

## 2.2.2 散乱問題における Green 関数

ポテンシャル壁の幅を  $a$ , 入射波の波数を  $k_1$ , ポテンシャル壁内部の波数を  $k_2$ , 透過波の波数を  $k_3$ , また各波動の規格化係数を  $c_i$  とするような散乱問題を考える. 入射波を平面波として波動関数の接続条件を考慮することにより, 透過率は

$$\frac{c_3}{c_1} = \frac{4k_1k_2e^{i(k_2-k_1)a}}{(k_1-k_2)^2 - (k_1+k_2)^2e^{2ik_2a}} \quad (2.38)$$

と計算できる. この手の散乱問題は Green 関数を形式的に求めることができる. 入射波が平面波であることから Green 演算子のスペクトル表示を用いると

$$G = \int dk' \frac{|k'\rangle \langle k'|}{(k^2 - k'^2)} \quad (2.39)$$

となる<sup>4</sup>。よってグリーン関数は

$$G(x, x') = \langle x | G | x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{\langle x | k' \rangle \langle k' | x' \rangle}{(k^2 - k'^2)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{(k^2 - k'^2)} \quad (2.40)$$

のようにして得られる。この積分を具体的に計算することになるが、被積分関数に極が存在するので留数定理を用いることになる。 $k'$  軸上に特異点があると計算が面倒になるので、 $k \rightarrow i\epsilon$  のように極を移動し、後々  $\epsilon \rightarrow 0$  とする極限を取ることにする。極を移動した Green 関数は

$$G^\epsilon(x, x') = -\frac{1}{2\pi} \int dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{(k' + k + i\epsilon)(k' - k - i\epsilon)} \quad (2.41)$$

とする。極が  $k'$  軸をはさんで上下に分かれているので

$$G^\epsilon(x, x') = \begin{cases} G_+^\epsilon(x, x') & (x > x') \\ G_-^\epsilon(x, x') & (x < x') \end{cases} \quad (2.42)$$

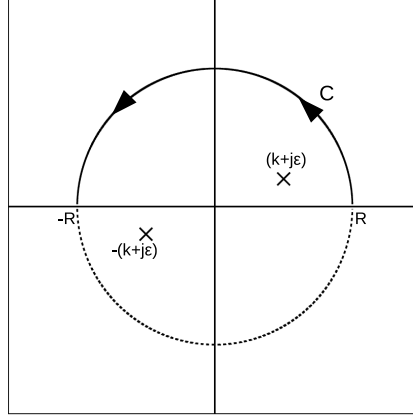
と分割することにする。

---

<sup>4</sup> $k$  は連続変数なので和が積分に変化した。



i)  $x > x'$  の場合



$$F_+ = \int_C dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{(k' + k + i\epsilon)(k' - k - i\epsilon)} = \int_{-R}^R dk' f_+(k') + \int_{C_1} dk' f_+(k') \quad (2.43)$$

ただし

$$f_+(k') = \frac{e^{ik'(x-x')}}{(k' + k + i\epsilon)(k' - k - i\epsilon)} \quad (2.44)$$

ここで留数定理

$$\int_C dz f(z) = 2\pi i \sum_j R(a_j) \quad (2.45)$$

を用いる. 極を  $a_j$ , Laurent 展開における  $(z - a)^{-n}$  の係数を  $R(a)$  としている. 今回の積分には 1 位の極しか含まれていないので Laurent 展開は

$$R(a) = \lim_{z \rightarrow a} (z - a) f(z) \quad (2.46)$$

で与えられる. 以上より, (2.43) は

$$F_+ = 2\pi i \lim_{k' \rightarrow k + j\epsilon} \left[ (k' - k - j\epsilon) \frac{e^{ik'(x-x')}}{(k' + k + i\epsilon)(k' - k - i\epsilon)} \right] \quad (2.47)$$

$$= \pi i \frac{e^{i(x-x')(k+j\epsilon)}}{k + j\epsilon} \quad (2.48)$$

と計算できる. さらに

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{C_1} dk' f_+(k') = 0 \quad (2.49)$$

であることはすぐにわかる. 以上から

$$G_+^\epsilon(x, x') = -\frac{1}{2\pi} \pi i \frac{e^{i(x-x')(k+j\epsilon)}}{k + j\epsilon} \quad (2.50)$$

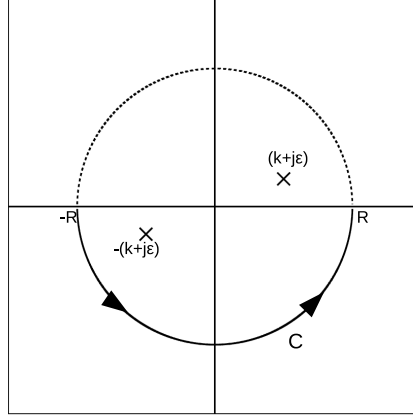
$$\therefore G_+(x, x') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G_+^\epsilon(x, x') = -\frac{i}{2k} e^{ik(x-x')} \quad (2.51)$$

のように, Green 関数を具体的に計算できた.

ii)  $x < x'$  の場合 先程と同様の計算より,

$$G_-(x, x') = -\frac{i}{2k} e^{-ik(x-x')} \quad (2.52)$$

となる.



まとめると,

$$G_{\pm}(x, x') = -\frac{i}{2k} e^{\pm ik(x-x')} \quad (2.53)$$

グリーン関数が求まったので, これを用いて波動関数を求める. 波動関数の摂動展開は

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int dx' G_+(x, x') H_p(x') \psi(x') \quad (2.54)$$

と表される.  $\psi_0(x)$  は非摂動解なので平面波であり,  $H_p$  はポテンシャルである. つまり, 領域ごとに  $H_p$  を変えてこの積分を計算すれば良い.

## 2.3 場の理論における Green 関数

場の理論と書きましたが, 以下では第二量子化された量子力学<sup>5</sup>における Green 関数についてまとめます.

### 2.3.1 時間依存自由粒子 Green 関数

場の演算子  $\psi(x, t)$  は Schrödinger 方程式

$$(i\hbar\partial_t - H) \psi(x, t) = 0 \quad (2.55)$$

で記述される. 今までの 1 粒子波動関数と同様に, 非摂動部の Green 演算子は

$$G_0(x, t) = (i\hbar\partial_t - H_0)^{-1} \quad (2.56)$$

と表せ, グリーン関数は

$$(i\hbar\partial_t - H_0) G_0(x, x'; t, t') = \delta(t - t') \delta(x - x') \quad (2.57)$$

である. この微分方程式の解は 2 つ存在する:

$$G_0^R(k, \tau) = -i\theta(\tau)e^{-iE_k\tau} \quad \tau = t - t' \quad (2.58)$$

$$G_0^A(k, \tau) = i\theta(\tau)e^{-iE_k\tau} \quad \tau = t' - t \quad (2.59)$$

$G^R$  を遅延グリーン関数,  $G^A$  を先進グリーン関数と呼ぶ. 現象が時間に対して未来に進むのが遅延グリーン関数, 過去に進むのが先進グリーン関数になっている<sup>6</sup>. 因果律を考慮しなくて良い場合であればどちらを用いてもよいが, 遅延グリーン関数の方が物理的な直感と合致している.

<sup>5</sup>「第二量子化された量子力学」と「場の量子論」は明確に区別されるべきです. 量子力学はあくまで Schrödinger 方程式によって真空 (基底状態) が決まるが, 場の量子論では真空は理論を閉じるように選ぶものである. 第二量子化における真空は消滅演算子  $a$  が消去する状態で確定しますが, 場の量子論においては真空期待値  $\langle 0 | \psi | 0 \rangle$  がゼロでない値を持つことが許されます. こういう構造がないと, 粒子が存在する状態を真空とする BEC のような物理を記述できなくなります.

<sup>6</sup>数学的には時間が反転するような解を持っていたりもおかしいし, むしろ持っているべき. 時間発展がユニタリーなら解は時間反転対称性がある.

### 2.3.2 相関関数と温度 Green 関数

系が熱平衡状態にあるとき,  $t = 0$  の基底状態  $|\psi(0)\rangle$  を用いて Green 関数は, 可観測量  $A, B$  の時間相関関数で与えられる<sup>7</sup>:

$$G(t - t') \equiv \langle\langle A(t)B(t') \rangle\rangle = -i \langle\psi(0)| T[A(t)B(t')] |0\rangle \quad (2.60)$$

$A(t), B(t')$  は Heisenberg 描像,  $T[ ]$  は時間順序積.  $T$  積は因果律を守るために導入されている.  
有限温度系における期待値は

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} A e^{-\beta H}}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \quad (2.61)$$

で与えられるので, 上の Green 関数は

$$G(t - t') = -i \frac{\text{T}[\text{Tr} A(t)B(t')e^{-\beta H}]}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \quad (2.62)$$

$$= -i \frac{\text{T}[\text{Tr} e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} e^{iHt'/\hbar} B e^{-iHt'/\hbar} e^{-\beta H}]}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \quad (2.63)$$

$$= -i \frac{\text{T}[\text{Tr} e^{iHt/\hbar} A B e^{-(it/\hbar + \beta)H}]}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \quad (2.64)$$

これを温度 Green 関数 (松原 Green 関数) と呼ぶ.

---

<sup>7</sup>Green 関数が系に何かしらの揺動を与えた時の応答と解釈するなら自然な定義と言える.

## 第3章 超伝導

超伝導の現象論である Ginzburg-Landau 理論と BCS 理論を扱う.

### 3.1 超電導の基礎

#### 3.1.1 超電導体の性質

- 電気抵抗ゼロ
- 磁束の侵入を許さない (flux exclusion)
- 磁束の排除が起こる (flux expulsion)

超伝導でない抵抗ゼロの金属では flux expulsion はない.

#### 3.1.2 磁束の量子化

磁束の量子化は超伝導の巨視波動関数  $\psi = \psi_0 e^{i\theta}$  の一価性の要請から導かれる.

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_s &= \frac{e}{2m} \frac{\hbar}{i} (\psi^* \nabla - \nabla \psi) - \frac{e^2}{m} |\psi|^2 \mathbf{A} \\ &= -\frac{e}{m} |\psi|^2 (\hbar \nabla \theta + e \mathbf{A}) \end{aligned} \quad (3.1)$$

$\mathbf{J}_s = n_s e v_s = |\psi|^2 e v_s$  であることに着目すると

$$\nabla \theta = -\frac{m}{\hbar} \mathbf{v}_s - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \quad (3.2)$$

となる. 波動関数の一価性が保証されるには, 閉曲面  $C$  に沿って線積分したものが  $2\pi$  の整数倍でなければならない:

$$\int_C d\ell \nabla \theta = \int_C d\ell v_s = 2\pi n \quad (3.3)$$

循環が量子化されている.

### 3.2 超伝導の現象論 : Ginzburg-Landau 理論

超伝導を現象論的にモデル化した Ginzburg-Landau 理論について.

### 3.2.1 相転移と Oder parameter

ハミルトニアンが

$$H = -2 \sum_{i,j} J s_i \cdot s_j \quad (3.4)$$

と書けるようなスピン相互作用を考える。これをハイゼンベルグ模型という。系の平衡状態は Helmholtz 自由エネルギー

$$F = U - TS \quad (3.5)$$

を最小にするように決まる。低温 ( $T \ll U/S$ ) ならば内部エネルギー  $U = \langle H \rangle$  が leading であり, これを最小化するようにスピンの向きが揃う。これを強磁性体と呼ぶ。一方で高温ならばエントロピーの項が優勢なのでエントロピーが最大になるようにスピンの向きがバラバラになる。これを常磁性体と呼ぶ。

スピンの向きが揃うときに真空期待値が値を持ち, これを秩序変数と呼ぶ。秩序変数がゼロでない値に変化するとき, これを相転移と呼ぶ。

### 3.2.2 Ginzburg-Landau 方程式

自由エネルギーを秩序変数  $\psi$  の冪で展開:

$$\mathcal{F}[\psi] = \mathcal{F}_0 + \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 \quad (3.6)$$

ここで  $\alpha = a(T - T_C)$  である。自由エネルギーの最小を与える  $|\psi|$  は微分すれば

$$|\psi| = \begin{cases} 0 & (T > T_C) \\ \sqrt{\frac{a(T_C - T)}{\beta}} & (T < T_C) \end{cases} \quad (3.7)$$

と求められる。そもそも  $|\psi| = M$  (磁化) と考えるのが自然で, なおかつ時間反転対称性を持っているので  $M$  の奇数次はない。  $\alpha < 0$  のときに  $|\psi| = 0$  以外の極値を持つようになる。  $\alpha(T) = a(T - T_C)$  とすれば相転移を記述できる。

$\psi$  が空間一様でない, つまり  $\psi$  が  $r$  依存性を持つ場合は

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + \int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \quad (3.8)$$

$$= \mathcal{F}_0 + \int dV \left[ \alpha |\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi(\mathbf{r})|^4 \right] \quad (3.9)$$

と書くことにする。外部磁場などがある場合, 粒子の運動エネルギーによる補正項を加えなければならない:

$$\int dV \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\mathbf{r})|^2 \quad (3.10)$$

自由エネルギーにはゲージ対称性があるので, ゲージ変換に対して不変な形で導入しなければならない:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + \int dV \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) \right|^2 + \alpha |\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi(\mathbf{r})|^4 + \frac{\mu_0}{2} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] \quad (3.11)$$

この変分がゼロになるところを探す:

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{F} &= \int dV \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \psi(\mathbf{r}) + \alpha \psi(\mathbf{r}) + \beta |\psi(\mathbf{r})|^2 \psi(\mathbf{r}) \right] \delta \psi^*(\mathbf{r}) \\ &+ \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) \right] \delta \psi^*(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} \end{aligned} \quad (3.12)$$

右辺第一項の被積分関数がゼロになることから

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + \alpha + \beta |\psi(\mathbf{r})|^2 \right] \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.13)$$

を得る。これが秩序変数を記述する Ginzburg-Landau (GL) 方程式である。ちなみに今回は  $\mathcal{F}$  について  $\psi$  の変分を取ったが、 $A$  についての変分を取るとアンペールの法則が出てくる。

### 3.2.3 ゲージ変換の復習

Maxwell 方程式

電磁気学におけるゲージ変換のおはなし。Maxwell 方程式

$$\text{rot} \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{ファラデーの法則}) \quad (3.14)$$

$$\text{rot} \mathbf{B} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mu_0 \mathbf{i} \quad (\text{アンペールの法則}) \quad (3.15)$$

$$\text{div} \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (\text{電荷のガウスの法則}) \quad (3.16)$$

$$\text{div} \mathbf{B} = 0 \quad (\text{電荷のガウスの法則}) \quad (3.17)$$

について、 $\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A}$  という仮定をすると  $\text{div} \mathbf{B} = \text{div} \text{rot} \mathbf{A} = 0$  という関係が自明に出てくる (ただし、これは  $\mathbf{A}$  に特異点がない場合)。この仮定をファラデーの法則に代入:

$$\text{rot} \left( \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0 \quad (3.18)$$

もし

$$\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\text{grad} \phi \quad \implies \quad \mathbf{E} = -\text{grad} \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (3.19)$$

という仮定をすればファラデーの法則も自明となる。 $\phi$  と  $\mathbf{A}$  が導入できれば Maxwell 方程式がとてもカンタンになる。 $\phi$  と  $\mathbf{A}$  をまとめて電磁ポテンシャルと呼ぶ。新しい方程式は

$$\left( \nabla^2 - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A} - \text{grad} \left( \text{div} \mathbf{A} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = -\mu_0 \mathbf{i} \quad (3.20)$$

$$\nabla^2 \phi + \text{div} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (3.21)$$

となる。ここで

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \text{grad} \chi \quad (3.22)$$

という量を定義しても、磁束密度  $\mathbf{B}$  は変わらない。その代わり電場は変わってしまうので

$$\phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \quad (3.23)$$

を導入すると全て辻褄が合う。この  $(\phi, \mathbf{A}) \mapsto (\phi', \mathbf{A}')$  の変換をゲージ変換と呼び、Maxwell 方程式はゲージ不変性を持つ。

### ローレンツゲージ

(3.20)(3.21) には各々  $\phi, \mathbf{A}$  が含まれているので計算がめんどくさい。せめて

$$\text{div} \mathbf{A} + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (3.24)$$

となってくれば (3.20) は

$$\left(\nabla^2 - \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial}{\partial t}\right) \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{i} \quad (3.25)$$

のように  $\mathbf{A}$  だけの式になり, (3.24) を (3.21) に代入すると

$$\left(\nabla^2 - \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (3.26)$$

という対称性のとてもよい形になる. (3.24) をローレンツ条件という.

——— ローレンツゲージにおける Maxwell 方程式 ———

$$\begin{aligned} \left(\nabla^2 - \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial}{\partial t}\right) \mathbf{A} &= -\mu_0 \mathbf{i} \\ \left(\nabla^2 - \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \end{aligned}$$

ただし

$$\operatorname{div} \mathbf{A} + \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$$

$$(\phi, \mathbf{A}) \mapsto (\phi', \mathbf{A}') \implies \begin{cases} \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \operatorname{grad} \chi \\ \phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \end{cases} \quad (3.27)$$

がローレンツ条件 (3.24) を満たすような  $\chi$  が存在すれば, この以上の変形が正当化される. ローレンツゲージによる Maxwell 方程式はローレンツ共変である.

## クーロンゲージ

ローレンツ条件に対して

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0 \quad (3.28)$$

という条件を課すと, クーロンの法則と等価なポアソン方程式が導かれることからこれをクーロン条件 (クーロンゲージ) と呼ぶ.

——— クーロンゲージにおける Maxwell 方程式 ———

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \\ \nabla^2 \mathbf{A} - \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{grad} \phi &= \mu_0 \mathbf{i} \end{aligned}$$

ただし

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$$

クーロンゲージはローレンツ共変ではなくあまり方程式の対称性は良くないが, 電磁場の量子化などでは便利なので用いられることがある.

### 3.2.4 GL コヒーレンス長と侵入長

外部磁場がない場合の一次元 GL 方程式 (3.13) を境界条件  $\psi(0) = 0$  のもとで解く:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \alpha + \beta |\psi(x)|^2 \right] \psi(x) = 0 \quad (3.29)$$

これは  $x = 0$  の境界には超伝導体はなく,  $x > 0$  を超伝導体で占められているような状況である. コヒーレンス長  $\xi$  を

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m|\alpha|} \quad (3.30)$$

と定義する. 超伝導状態では  $\alpha < 0$  である<sup>1</sup>. 両辺を  $\psi_0 = \sqrt{|\alpha|/\beta}$  を用いて整理して

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} - \psi + \psi^3 = 0 \quad (3.31)$$

を得る. 左辺に  $2\frac{d\psi}{dx}$  を掛ける:

$$2\frac{d\psi}{dx} \left[ -\frac{d^2\psi}{dx^2} - \psi + \psi^3 \right] = 0 \quad (3.32)$$

ここで

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 = 2\frac{d\psi}{dx} \left( \frac{d^2\psi}{dx^2} \right), \quad \frac{d\psi^2}{dx} = 2\psi \frac{d\psi}{dx}, \quad \frac{d\psi^4}{dx} = 4\psi^3 \frac{d\psi}{dx} \quad (3.33)$$

を用いて変形する:

$$\frac{d}{dx} \left[ -\xi^2 \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 - \psi^2 + \frac{1}{2}\psi^4 \right] = 0 \quad (3.34)$$

微分がゼロなので微分関数は定数:

$$-\xi^2 \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 - \psi^2 + \frac{1}{2}\psi^4 = A \text{ (const)} \quad (3.35)$$

また, 境界条件  $d\psi/dx \rightarrow 0, \psi \rightarrow 1$  ( $x \rightarrow +\infty$ ) を課すと  $A = -\frac{1}{2}$  であることがわかる. これにより

$$\xi^2 \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 = \frac{1}{2} (1 - \psi^2) \quad (3.36)$$

という方程式が得られる.

これは非線形微分方程式だが特解を持っている:

$$\psi(x) = \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right) \quad (3.37)$$

これはソリトン解と呼ばれる.  $x = 0$  で強制的にゼロにされた  $\psi$  が  $\xi$  程度で回復している. また

$$\xi = \left( \frac{\hbar^2}{2m|\alpha|} \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \frac{\hbar^2}{2ma(T - T_C)} \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \frac{\hbar^2}{2maT_C} \right)^{\frac{1}{2}} \left( 1 - \frac{T}{T_C} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.38)$$

$T \rightarrow T_C$  ( $T_C > T$ ) でコヒーレンス長は発散していく自然な結果が得られる.

### 3.2.5 ソリトンの特徴

普通の線形波なら波動方程式で記述される異なる波長を持つ波の重ね合わせで記述できる. 異なる波長の波は  $v = f\lambda$  に従って伝搬速度も異なるので, 波束は次第に崩壊していく (分散が発散していく). しかしソリトンはある非線形微分方程式の定常解なので形を変えずに伝搬していき, 波束も崩壊しない.

<sup>1</sup>こうしないと GL ヘルムホルツエネルギーが  $\psi > 0$  の領域で最小値を持たなくなる.



### 3.3 超伝導の微視的理論：Bardeen-Cooper-Schrieffer 理論

#### 3.3.1 金属の基本性質

一辺  $L$  の箱に閉じ込められた自由電子について考える。周期境界条件を課すと、波動関数は平面波で記述できる：

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (3.39)$$

エネルギー分散関係は

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.40)$$

である。ここで波数は

$$k_i = n_i \left( \frac{2\pi}{L} \right) \quad (i = x, y, z) \quad (3.41)$$

で与えられる。3次元  $k$  空間の単位体積  $(2\pi/L)^3$  あたりに 1 つ (スピン自由度を考えると 2 つ) の状態が入れる。下の準位から埋めていくと、状態が埋まった空間は球になる。これをフェルミ球と呼び、その境界をフェルミ面と呼ぶ。フェルミ面の半径を  $k_F$  とすると

$$N = 2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \times \frac{4}{3} \pi k_F^3 \quad (3.42)$$

である。電子密度を  $n = N/L^3$  とすると

$$k_F = (3\pi n)^{\frac{1}{3}} \quad (3.43)$$

となる。エネルギー  $\varepsilon$  の状態を電子が占める確率は Fermi-Dirac 分布関数

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp[(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_B T] + 1} \quad (3.44)$$

で与えられる。

#### 3.3.2 電子-格子間相互作用

電子と金属イオンの間の相互作用は電子がイオン構造を歪めるという描像で理解される<sup>2</sup>。つまり、電子がフォノンを放出して異なる波数を持つモードへ遷移する、という描像である。フォノンを介した 2 電子間相互作用とは、波数  $k_1, k_2$  の電子が  $k_1 - q, k_2 + q$  となる過程である。

フォノンを介した相互作用ハミルトニアンを  $H'$  とすると、エネルギーの 2 次摂動は

- 同じ電子がフォノンを出して吸収した場合は自己エネルギー
- 異なる電子同士がフォノンのやりとりをした場合は相互作用

---

<sup>2</sup>金属イオン中に電子があると電子と金属イオンが引力相互作用で近づき合い、金属イオンの配列が微妙に歪むことになる。この電子が金属中を移動すると、金属イオンの配列の歪みも一緒に伝搬していくように見える。これが格子振動であり、これを量子化するとフォノンになる。さて、この場合は電子の運動エネルギーが格子振動に一部持って行かれることになり、これが電気抵抗の由来になる。しかし、この電子の近くに別の電子がある場合は、格子振動により正電荷密度が大きくなっているところからさらに引力相互作用を受けて加速することができる。つまり、ある電子が創りだした格子振動エネルギーを別の電子が受け取る、というメカニズムである。もちろんこれは古典的な描像であり、全ての格子振動エネルギーが別の電子に引き継がれることは一見なさそうだが、格子振動を量子化したフォノンであれば discrete なエネルギーのやりとりしかできないことになるので、電子がフォノンのやりとりをすることでエネルギーの散逸を防ぐ枠組みを正当化することができそうである。このフォノンのやり取りをする電子の組を Cooper-pair という。

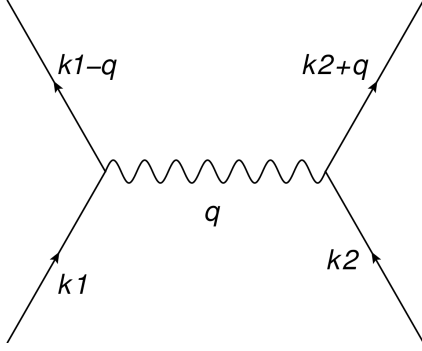


図 3.1:  $k_1$  がフォノン  $q$  を放出する過程

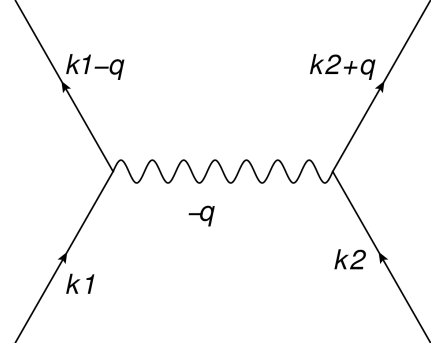


図 3.2:  $k_1$  がフォノン  $-q$  を吸収する過程

を表すことになる。さて、上の 2 種類の過程を考慮すると相互作用項の期待値は

$$U_2 = \sum_m \frac{\langle f | H' | m \rangle \langle m | H' | i \rangle}{E_i - E_m} \quad (3.45)$$

$$E_i = \varepsilon_{\mathbf{k}_1} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} \quad (3.46)$$

$$E_m = \begin{cases} \varepsilon_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}_1} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} \end{cases} \quad (3.47)$$

より

$$U_2 = \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}_1} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}} + \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}_2} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \quad (3.48)$$

$$= \frac{2|V_{\mathbf{q}}|\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{(\varepsilon_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}_1})^2 - (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2} \quad (3.49)$$

となる。ここではエネルギー保存則を用いた。  $|\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}| \ll \hbar\omega_{\mathbf{q}}$  であれば電子間相互作用は引力となる。つまり、フェルミ面上の電子間にはフォノンを介した引力相互作用が働く可能性がある。

### 3.3.3 Cooper 問題

次に問題になるのが、「フェルミ面直上にある 2 つの電子間相互作用を考えると、この電子対が束縛状態を作るか」ということ。言い換えると、「いかに弱くても引力相互作用があれば電子対の束縛状態が実現するかどうか」。着目する 2 電子の波動関数を

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2) \quad (3.50)$$

とする。  $\psi$  が満たすのは Schrödinger 方程式

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.51)$$

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) \quad (3.52)$$

重心・相対座標  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ ,  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  を用いて

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi(\mathbf{r})e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} \quad (3.53)$$

## 第4章 Anderson局在とその周辺

### 4.1 Anderson局在とは

不純物がある系において, Drude の電子論などでは説明できない電気伝導度が実験的に確かめられた. 具体的には, Drude モデルでは電気伝導度は平均自由行程に比例するはずだが, ある点を境に相転移のごとく電気伝導度が落ち込む結果が得られた<sup>1</sup>.

Anderson はこの不純物による電子の局在という問題に対して新しい理論を作った.

### 4.2 P.W.Anderson. Phys. Rev. 109, 1492(1958)

#### 4.2.1 Tight-Binding 近似

電子が規則正しい格子の上にある場合を考える. このとき電子の波動関数は原子軌道  $\phi$  の相対座標表示を用いて

$$|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})\rangle \quad (4.1)$$

のように展開できる<sup>2</sup>. 展開係数は Bloch 条件を守るために平面波になっている. これが TB 近似<sup>3</sup>である.

今回は不純物が混じった系を考えるので展開係数は平面波ではない:

$$|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = \sum_{\mathbf{R}} a_{\mathbf{R}}^{\dagger} |\phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})\rangle \quad (4.2)$$

これを各格子点のインデックスごとに和を取ることを考えて以下のように簡略化した記号を導入する:

$$\sum_{\mathbf{R}} a_{\mathbf{R}}^{\dagger} |\phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})\rangle = \sum_j a_j^{\dagger} |j\rangle \quad (4.3)$$

Schrödinger 方程式は以下ようになる:

$$H |\psi\rangle = (H_{\text{atom}} + \Delta V(\mathbf{r})) |\psi\rangle \quad (4.4)$$

$$= \sum_j \epsilon_j |j\rangle a_j + \sum_j \Delta V(\mathbf{r}) |j\rangle a_j \quad (4.5)$$

$\Delta V$  は全ポテンシャルから孤立原子中で電子が感じるポテンシャルを引いたもの. これの右から  $\langle i|$  を作用させると

$$\langle i| H |\psi\rangle = \epsilon_i a_i + \sum_j V_{ij} a_j \quad (4.6)$$

となる.  $V_{ij} = \langle i| \Delta V(\mathbf{r}) |j\rangle$  であり,  $\langle i|j\rangle \simeq \delta_{ij}$  であることを用いている. 以上からハミルトニアンは

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} V_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (4.7)$$

であることがわかる<sup>4</sup>.

<sup>1</sup>Anderson 転移と呼ぶ

<sup>2</sup>ケットの中に位置依存性  $\mathbf{r}$  を入れる不自然さには目を瞑る方向で

<sup>3</sup>LCAO 近似とも

<sup>4</sup>量子力学・場の理論ではまずハミルトニアンがあり, そこから Schrödinger 方程式やら Heisenberg 方程式やらを導出することが多いが, 今回の文脈ではその逆を行っている. つまり波動関数を作り, その波動関数で Schrödinger 方程式を作り, ハミルトニアンを推定している. 一見不思議に思えるがこのような議論は論文でもよく見かける. 理論が Self-consistent であればどこからスタートするかは任意であるということか

これらを用いて時間依存 Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = H\psi_t \quad (4.8)$$

を時間依存性を展開系数に押し付けた波動関数の展開

$$\psi_t = \sum_j a_j(t) |j\rangle \quad (4.9)$$

を用いて書き換える:

$$i\hbar \frac{\partial a_i(t)}{\partial t} = \epsilon_i a_i(t) + \sum_{j(\neq i)} V_{ij} a_j(t) \quad (4.10)$$

#### 4.2.2 Anderson の理論

初期時刻にあるサイト  $i = 0$  に電子を一つ置いて時間発展させたとき,  $a_i$  が時刻  $\infty$  で有限の値を取る場合, 電子は局在していると言える. これを計算するために (4.10) を Laplace 変換する:

$$i[sf_j(s) - a_j(0)] = \epsilon_j f_j(s) + \sum_{k(\neq j)} V_{jk} f_k(s) \quad (4.11)$$

$$f_j(s) = \frac{i\delta_{j0}}{is - \epsilon_j} + \sum_{k(\neq j)} \frac{1}{is - \epsilon_j} V_{jk} f_k(s) \quad (4.12)$$

ここでは  $\hbar = 1$  の単位系を用いている. また  $a_j(0) = \delta_{j0}$  という性質も用いている. なぜこんなことをするのかというと,  $sf_j(s) \rightarrow a_j(\infty)$  ( $s \rightarrow 0^+$ ) という性質があるから.  $f_j(s)$  から  $a_j(\infty)$  の情報が得られるのである.

この右辺第二項の  $f_k$  に逐次代入してき,  $j = 0$  を代入すると

$$\begin{aligned} f_0(s) &= \frac{i}{is - \epsilon_0} + \sum_k \frac{1}{is - \epsilon_0} V_{0k} \frac{1}{is - \epsilon_k} V_{k0} \frac{1}{is - \epsilon_0} \\ &+ \sum_{k,m} \frac{1}{is - \epsilon_0} V_{0k} \frac{1}{is - \epsilon_k} V_{km} \frac{1}{is - \epsilon_m} V_{m0} \frac{1}{is - \epsilon_0} + \dots \end{aligned} \quad (4.13)$$

となる. これは  $j = 0$  からスタートして様々な格子点を通り過ぎてまた  $j = 0$  に戻ってくる経路を全て足し合わせるような計算を行っている. その経路の中にはループを作るものも存在するが, 自己エネルギーは

$$\mathcal{L}_k(s) = \frac{1}{is - \epsilon_k - \varsigma} \quad (4.14)$$

というようにカウンター項  $\varsigma$  でくりこみが可能である. よってループのない経路のみを考えれば良い. また, コネクティビティが最近接サイト数  $z$  を用いて  $z - 2 < K \leq z - 1$  と書けること,  $P$  ステップ後のコネクティビティが  $K^P$  で概算できることを用いて (4.13) を摂動的に処理し,  $a_i(\infty)$  がゼロになるところと有限の値を取るところを解析したのが Anderson の 1958 年の論文である.

しかしこの取り扱いはなかなか難しい. この見通しを良くするのがスケーリング理論である.

#### 4.3 E.Abrahams et al. Phys. Rev. Lett. 42, 673(1979)

## 第5章 熱・統計・量子統計力学

### 5.1 熱力学

#### 5.1.1 状態量

系の状態のみで一意に決まり、過去の履歴・経路に依らない (積分値が経路に依らない) ものを状態量と呼ぶ。

#### 5.1.2 完全な熱力学関数

系の平衡状態における熱力学的性質の情報を全て持っているものを完全な熱力学関数と呼ぶ。示量性状態量。系の情報を全て持っているというのは、状態量がこの関数の偏微分で全て求まるということ。例えば内部エネルギー  $U(S, N, V)$  を用いて

$$\partial_S U = T \quad (5.1)$$

$$\partial_N U = \mu \quad (5.2)$$

$$\partial_V U = -p \quad (5.3)$$

という状態量が求まる。全微分は

$$dU = TdS - pdV + \mu dN \quad (5.4)$$

である。これを变形して

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{p}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN \quad (5.5)$$

となり、 $S$  は  $U, V, N$  を変数とする関数として表された時に完全な熱力学関数となる。統計力学においては温度を定義するときに

$$\partial_U S = \frac{1}{T} \quad (5.6)$$

という表式をしばしば用いる。

#### 5.1.3 自由エネルギー

熱力学第二法則より、系は自由エネルギーが減少する方向に遷移する。

#### ヘルムホルツ自由エネルギー

等温下で仕事として取り出し可能なエネルギーを表す。ヘルムホルツエネルギーが極小値を取るとき、系は熱平衡状態にある。

定義:

$$F(T, V, N) = U(S(T, V, N), V, N) - TS(T, V, N) \quad (5.7)$$

ここで現れるエントロピーは完全な熱力学関数ではない。各変数による偏微分は

$$\partial_T F = -S \quad (5.8)$$

$$\partial_V F = -p \quad (5.9)$$

$$\partial_N F = \mu \quad (5.10)$$

である。全微分は

$$dF = -S(T, V, N)dT - p(T, V, N)dV + \mu(T, V, N)dN \quad (5.11)$$

## ギブズ自由エネルギー

等温等圧下で仕事として取り出し可能なエネルギーを表す。ヘルムホルツエネルギーとの違いは等圧条件の有無。  
定義:

$$G(T, p, N) = U(S(T, p, N), p, N) - TS(T, p, N) \quad (5.12)$$

以下ヘルムホルツエネルギーと同様。

## 5.2 統計力学

### 5.2.1 目的

微視的状態の数をかぞえて巨視的状态を導く。

### 5.2.2 ミクロカノニカルアンサンブル

### 5.2.3 Langevin 方程式

ブラウン粒子の運動を記述する方程式として Langevin が導入した。

$$M \frac{dv}{dt} = -\frac{v}{\mu} + F_{\text{ext}} + R(t) \quad (5.13)$$

ここで  $\mu$  を移動度,  $F_{\text{ext}}$  をマクロな外力,  $R(t)$  をミクロなノイズとする。  $R$  が確率過程であるので, 初期条件を与えても  $v$  が決定論的に定まらない。

速度を Fourier 変換する:

$$v(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{v}(\omega) \quad (5.14)$$

$$\tilde{v}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dt e^{i\omega t} v(t) \quad (5.15)$$

さらに速度の時間相関関数とその Fourier 変換を定義する:

$$C_v(t) = \langle v(t_0)v(t_0+t) \rangle \quad (5.16)$$

$$\tilde{C}_v(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dt' e^{i\omega' t'} \langle v(t_0)v(t_0+t') \rangle \quad (5.17)$$

ここで  $\tilde{v}^*(\omega) = \tilde{v}(-\omega)$  が成立している。(5.15) より

$$\langle \tilde{v}(\omega) \tilde{v}^*(\omega') \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dt dt' e^{i\omega t - i\omega' t'} \langle v(t)v(t') \rangle \quad (5.18)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int dt dt' |\det(J)| e^{i\omega t'} e^{i(\omega - \omega')t} \langle v(t+t')v(t) \rangle \quad (5.19)$$

$$= \delta(\omega - \omega') \int dt' e^{i\omega' t'} \langle v(t+t')v(t) \rangle \quad (5.20)$$

$$= \delta(\omega - \omega') I_v(\omega') \quad (5.21)$$

ただし

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial(t+t')}{\partial t} & \frac{\partial(t+t')}{\partial t'} \\ \frac{\partial t'}{\partial t} & \frac{\partial t'}{\partial t'} \end{pmatrix} \quad |\det(J)| = 1 \quad (5.22)$$

である。この式から

$$I_v(\omega) = \int dt C_v(t) e^{i\omega t} = \tilde{C}(\omega) \quad (5.23)$$

がわかる。これを Wiener-Khinchin の定理という。相関関数とパワースペクトルは Fourier 変換を通して関係付けられる。 $\tilde{R}(\omega)$  についても同様のことが言える:

$$\tilde{R}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dt e^{i\omega t} R(t) \quad (5.24)$$

$$\tilde{C}_R(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dt e^{i\omega t} \langle R(t_0) R(t_0 + t) \rangle \quad (5.25)$$

$$\langle \tilde{R}(\omega) \tilde{R}^*(\omega') \rangle = \tilde{C}_R(\omega) \delta(\omega - \omega') \quad (5.26)$$

以降  $F_{\text{ext}} = 0$  のもとで Langevin 方程式の解析をする。(5.13) に (5.14) を代入:

$$M \frac{d}{dt} \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{v}(\omega) = \int d\omega e^{-i\omega t} \left( -\frac{\tilde{v}(\omega)}{\mu} + \tilde{R}(\omega) \right) \quad (5.27)$$

$$\iff M(-i\omega) \tilde{v}(\omega) = -\frac{\tilde{v}(\omega)}{\mu} + \tilde{R}(\omega) \quad (5.28)$$

$\gamma = (M\mu)^{-1}$  とすると

$$\tilde{v}(\omega) = \frac{1}{-i\omega + \gamma} \frac{\tilde{R}(\omega)}{M} \quad (5.29)$$

であることがわかる。時間相関関数は

$$\tilde{C}_v(\omega) = \int d\omega' \langle \tilde{v}(\omega) \tilde{v}^*(\omega') \rangle = \frac{1}{(-i\omega + \gamma)(i\omega' + \gamma)M^2} \int d\omega' \langle R(\omega) R^*(\omega') \rangle \quad (5.30)$$

$$= \frac{1}{(-i\omega + \gamma)(i\omega' + \gamma)M^2} \int d\omega' \tilde{C}_R(\omega') \delta(\omega - \omega') = \frac{1}{\omega^2 + \gamma^2} \frac{\tilde{C}_R(\omega)}{M^2} \quad (5.31)$$

$R$  の確率過程の性質が与えられてパワースペクトル  $C_R$  が定まると速度  $v$  の相関関数やパワースペクトルが決定される。 $R$  がホワイトノイズだと仮定すると,

$$C_R(t) = \langle R(t_0 + t) R(t_0) \rangle = C_R \delta(t) \quad (5.32)$$

$$\tilde{C}_R(\omega) = \int dt e^{-i\omega t} C_R(t) = C_R \quad (5.33)$$

ということで,  $\tilde{C}_R$  は  $\omega$  によらない定数になる。このようなノイズを仮定すると, 速度相関関数は

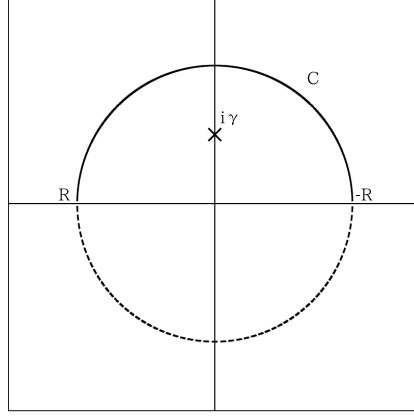
$$C_v(t) = \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{C}_v(\omega) = \int d\omega \frac{C_R e^{-i\omega t}}{M^2(\omega^2 + \gamma^2)} \quad (5.34)$$

この積分を実行するために複素積分の応用を用いる:

$$\int_C dz \frac{C_R e^{-izt}}{M^2(z^2 + \gamma^2)} = \int_{C_1} \frac{C_R e^{-izt}}{M^2(z^2 + \gamma^2)} + \int_{-R}^R \frac{C_R e^{-izt}}{M^2(z^2 + \gamma^2)} \quad (5.35)$$

極は  $\omega = \pm i\gamma$  で一位の極。積分経路は上半円とする。留数定理より

$$R(i\gamma) = \lim_{z \rightarrow i\gamma} (z - i\gamma) f(z) = \frac{C_R e^{\gamma t}}{2i\gamma} \quad (5.36)$$



ここで  $z = Re^{i\theta}$  の変数変換を施すことにより

$$\int_{C_1} dz \frac{e^{-izt}}{(z^2 + \gamma^2)} = \int_0^\pi d\theta \frac{iRe^{-iRe^{i\theta}t}}{(R^2e^{2i\theta} + \gamma^2)} = \int_0^\pi d\theta \frac{iRe^{-iRt \cos \theta} e^{Rt \sin \theta}}{(R^2e^{2i\theta} + \gamma^2)} \quad (5.37)$$

かつ一般に  $|\alpha + \beta| > |\alpha| - |\beta|$  が成立することから

$$\left| \frac{iRe^{-iRt \cos \theta} e^{Rt \sin \theta}}{(R^2e^{2i\theta} + \gamma^2)} \right| < \frac{Re^{Rt \sin \theta}}{R^2 - \gamma^2} \quad (5.38)$$

これが  $R \rightarrow \infty$  で発散しないためには  $t < 0$  である必要があるが,  $t > 0$  の場合も発散しないようにしたい. そのためには  $e^{-izt} \rightarrow e^{iz|t|}$  とすればよい. つまり, (5.36) は

$$R(i\gamma) = \lim_{z \rightarrow i\gamma} (z - i\gamma)f(z) = \frac{C_R e^{-\gamma|t|}}{2i\gamma} \quad (5.39)$$

とすべきである. 以上からコーシーの積分定理より

$$C_v(t) = \frac{C_R e^{-\gamma|t|}}{2M^2\gamma} \quad (5.40)$$

となる. 同時刻 ( $t = 0$ ) の相関は

$$C_v = \frac{C_R}{2M^2\gamma} \quad (5.41)$$

であり, 熱平衡状態のエネルギー等分配則

$$M \langle v^2 \rangle = k_B T \quad (5.42)$$

を認めれば

$$C_R = 2k_B T M \gamma \quad (5.43)$$

となる. これは Nyquist の定理と呼ばれ, 揺動散逸定理のひとつである.

### 5.3 Born-Markov 型量子マスター方程式

熱浴と接している一次元調和振動子系の Born-Markov 型量子マスター方程式を解く.

- 系のハミルトニアンは調和振動子  $H = \hbar\omega a^\dagger a$ .
- Born-Markov 近似なので熱浴の密度演算子は時間発展せず, 回転波近似 (弱結合) も有効.



- マスター方程式は系の密度演算子の時間発展を与えている。<sup>1</sup>.
- 生成消滅演算子と粒子数状態
- 交換関係の計算

あたりの知識が必要です.

### 5.3.1 問題設定

量子マスター方程式が与えられている:

$$\begin{aligned}\partial_t \rho(t) = & -i\omega[a^\dagger a, \rho(t)] + \kappa \bar{n}(2a^\dagger \rho(t)a - aa^\dagger \rho(t) - \rho(t)aa^\dagger) \\ & + \kappa(\bar{n}+1)(2a\rho(t)a^\dagger - a^\dagger a\rho(t) - \rho(t)a^\dagger a)\end{aligned}\quad (5.44)$$

ただし

$$\kappa > 0, \quad \bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}, \quad [a, a^\dagger] = 1 \quad (5.45)$$

であり,  $\kappa$  は減衰定数,  $\bar{n}$  は Bose-Einstein 分布関数,  $a, a^\dagger$  は生成消滅演算子である.

### 5.3.2 熱平衡 (問題 1)

熱浴の温度が  $T$  であることから, 系の温度を  $T$  とする有限温度系を考えればそれが熱平衡状態にあることは明らか. 平衡状態なので密度演算子が系のハミルトニアンを用いて

$$\rho_{th} = \frac{e^{-H/kT}}{\text{Tr} e^{-H/kT}} \quad (5.46)$$

と書ける. (8.20) の分母は規格化条件であり, 以下のように計算できる<sup>2</sup>(以下, 逆温度  $1/kT$  を  $\beta$  と置き換えています):

$$\begin{aligned}\text{Tr} e^{-\beta\hbar\omega a^\dagger a} &= \sum_n \langle n | e^{-\beta\hbar\omega a^\dagger a} | n \rangle \\ &= \sum_n e^{-\beta\hbar\omega n} \\ &= \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = (\bar{n} + 1)\end{aligned}\quad (5.47)$$

密度演算子は Liouville-von Neumann 方程式を満たす:

$$i\hbar\partial_t \rho_{th} = [H, \rho_{th}] \quad (5.48)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{\bar{n} + 1} [a^\dagger a, e^{\beta\hbar\omega a^\dagger a}] \quad (5.49)$$

$[A, [B, A]] = [B, [B, A]] = 0$  が成立しているときに  $[B, e^{\lambda A}] = \lambda[B, A]e^{\lambda A}$  であることを利用して<sup>3</sup>

$$(5.49) = \frac{\hbar\omega}{\bar{n} + 1} \beta\hbar\omega [a^\dagger a, a^\dagger a] e^{\beta\hbar\omega a^\dagger a} = 0 \quad (5.50)$$

したがって,  $\rho_{th}$  の時間微分がゼロであることから時間発展しない熱平衡状態であることがわかる<sup>4</sup>.

<sup>1</sup>描像によっては生成消滅演算子も時間依存しそうである. 普通 (?) マスター方程式を導出するときは相互作用描像を経由するので生成消滅演算子も一般に時間依存性を持つ. しかし今回は回転波近似が有効であるため,  $a(t) = a(0)e^{-i\omega t}$  のように分解できる. 後述のマスター方程式には  $a^\dagger, a$  がペアになって現れているので, マスター方程式には生成消滅演算子に依る時間依存性は現れない.  $a^\dagger, a$  がペアになっていないような項が現れたら生成消滅演算子由来の時間依存性を考慮しなければならないが, そもそもそういう項を落とすのが Born-Markov 近似である.

<sup>2</sup>トレースは直行完全系ではちゃんと和を取ればいい. 規格化は後でできるので, 正規直行完全系でなくてもいいらしい. つまりどんな完全系を選んできても規格化係数を除けば同じ結論に辿り着く. 今回は明らかに  $a^\dagger a$  の固有状態  $|n\rangle$  を用いるのが簡単.

<sup>3</sup>証明してみよう!

<sup>4</sup>式 (5.44) を使っていないが良いのか? と思うかもしれないが, そもそも量子マスター方程式を導出するときは Liouville-von Neumann 方程式からスタートするので, QME $\subset$ LVNE である

### 5.3.3 調和振動子のエネルギー (問題 2)

続いて式 (5.44) を用いてエネルギー期待値の時間発展を追う。物理量の期待値はハミルトニアンに密度演算子を掛けてトレースアウトすればよい<sup>5</sup>:

$$\partial_t E(t) = \partial_t \text{Tr}[H\rho(t)] = \hbar\omega \partial_t \sum_n \langle n | a^\dagger a \rho(t) | n \rangle = \hbar\omega \partial_t \sum_n n \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.51)$$

また、式 (5.44) に左から  $H = \hbar\omega a^\dagger a$  を掛けてトレースアウトする:

$$\begin{aligned} \partial_t E(t) = & -i\hbar\omega^2 \text{Tr}(a^\dagger a [a^\dagger a, \rho(t)])_1 + \kappa \bar{n} \hbar\omega \left( \text{Tr} a^\dagger a a^\dagger \rho(t) a_2 - \text{Tr} a^\dagger a a a^\dagger \rho(t)_3 - \text{Tr} a^\dagger a \rho(t) a a^\dagger_4 \right) \\ & + \kappa(\bar{n} + 1) \hbar\omega \left( \text{Tr} a^\dagger a a \rho(t) a^\dagger_5 - \text{Tr} a^\dagger a a^\dagger a \rho(t)_6 - \text{Tr} a^\dagger a \rho(t) a^\dagger a_7 \right) \end{aligned} \quad (5.52)$$

式 (5.52) の右辺は,

$$\begin{aligned} 1. \quad \text{Tr}(a^\dagger a [a^\dagger a, \rho(t)]) &= \text{Tr}[a^\dagger a (a^\dagger a \rho(t) - \rho(t) a^\dagger a)] \\ &= \sum_n [\langle n | a^\dagger a a^\dagger a \rho(t) | n \rangle - \langle n | a^\dagger a \rho(t) a^\dagger a | n \rangle] \\ &= \sum_n [n^2 \langle n | \rho(t) | n \rangle - n^2 \langle n | \rho(t) | n \rangle] = 0 \end{aligned} \quad (5.53)$$

$$2. \quad \text{Tr} a^\dagger a a^\dagger \rho(t) a = \sum_n (n+1)^2 \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.54)$$

$$3. \quad \text{Tr} a^\dagger a a a^\dagger \rho(t) = \sum_n n(n+1) \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.55)$$

$$4. \quad \text{Tr} a^\dagger a \rho(t) a a^\dagger = \sum_n n(n+1) \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.56)$$

$$5. \quad \text{Tr} a^\dagger a a \rho(t) a^\dagger = \sum_n (n-1)n \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.57)$$

$$6. \quad \text{Tr} a^\dagger a a^\dagger a \rho(t) = \sum_n n^2 \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.58)$$

$$7. \quad \text{Tr} a^\dagger a \rho(t) a^\dagger a = \sum_n n^2 \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.59)$$

用いて整理することができる<sup>6</sup>:

$$\begin{aligned} \partial_t E(t) &= \sum_n 2\hbar\omega [\kappa \bar{n} ((n+1)^2 - n(n+1)) + \kappa(\bar{n} + 1)((n-1)n - n^2)] \langle n | \rho(t) | n \rangle \\ &= \sum_n 2\hbar\omega [\kappa \bar{n}(n+1) - \kappa(\bar{n} + 1)n] \langle n | \rho(t) | n \rangle \end{aligned} \quad (5.60)$$

$$= \sum_n 2\hbar\omega \kappa (\bar{n} - n) \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.61)$$

式 (5.51) と比較すると

$$\hbar\omega \sum_n \partial_t n \langle n | \rho(t) | n \rangle = \sum_n 2\hbar\omega \kappa (\bar{n} - n) \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.62)$$

$$\partial_t n \langle n | \rho(t) | n \rangle = 2\kappa (\bar{n} - n) \langle n | \rho(t) | n \rangle \quad (5.63)$$

$$\therefore n \langle n | \rho(t) | n \rangle = C_n e^{2\kappa(\frac{\bar{n}}{n} - 1)t} \quad (5.64)$$

よってエネルギー固有値は式 (5.51) より

$$E(t) = \sum_n C_n e^{2\kappa(\frac{\bar{n}}{n} - 1)t} \quad (5.65)$$

<sup>5</sup>本来、密度演算子を用いた物理量の期待値は  $\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} A \rho(t)}{\text{Tr} \rho(t)}$  で記述されるが、今回は  $\text{Tr} \rho(t) = 1$  を課している。つまり  $\rho(t)$  が規格化されているという条件である。

<sup>6</sup> $n$  の和については  $n = 0$  とか  $n = \infty$  の境界を雑に扱っているように見えるが、ちゃんと Dirichlet 境界条件を考慮してあげれば問題は起きない(と思う)

となる<sup>7</sup>.  $C_n$  は積分定数<sup>8</sup>. 初期状態  $t = 0$  のエネルギー平均が  $E(0)$  であることから

$$E(0) = \sum_n n \langle n | \rho(0) | n \rangle = \sum_n C_n \quad (5.66)$$

となる.

### 5.3.4 位置・運動量平均の時間発展 (問題 3)

(問題 2) と同様にマスター方程式のトレースアウトで期待値を見積もる. 以下, 位置と運動量は  $m = \hbar = \omega = 1$  で無次元化している<sup>9</sup>.

生成消滅演算子の言葉で位置は  $q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$  と表されることを用いて

$$\begin{aligned} \partial_t q(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_t \text{Tr}(a^\dagger + a) \rho(t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_t \sum_n [\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + \sqrt{n+1} \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \end{aligned} \quad (5.67)$$

マスター方程式の右边をトレースアウト:

$$\begin{aligned} (5.44) \rightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ -i\omega \text{Tr}(a^\dagger + a)(a^\dagger a \rho(t) - \rho(t) a^\dagger a)_1 \right. \\ & + \kappa \bar{n} \left( 2\text{Tr}(a^\dagger + a) a^\dagger \rho(t) a_2 - \text{Tr}(a^\dagger + a) a a^\dagger \rho(t)_3 - \text{Tr}(a^\dagger + a) \rho(t) a a^\dagger_4 \right) \\ & \left. + \kappa(\bar{n} + 1) \left( 2\text{Tr}(a^\dagger + a) a \rho(t) a^\dagger_5 - \text{Tr}(a^\dagger + a) a^\dagger a \rho(t)_6 - \text{Tr}(a^\dagger + a) \rho(t) a^\dagger a_7 \right) \right] \end{aligned} \quad (5.68)$$

各項について整理:

$$1. \quad \sum_n [-\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + \sqrt{n+1} \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \quad (5.69)$$

$$2. \quad \sum_n [(n+1)\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + \sqrt{n+1}(n+2) \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \quad (5.70)$$

$$3. \quad \sum_n [n\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + \sqrt{n+1}(n+2) \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \quad (5.71)$$

$$4. \quad \sum_n [(n+1)\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + \sqrt{n+1}(n+1) \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \quad (5.72)$$

$$5. \quad \sum_n [(n-1)\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + n\sqrt{n+1} \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \quad (5.73)$$

$$6. \quad \sum_n [(n-1)\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + (n+1)\sqrt{n+1} \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \quad (5.74)$$

$$7. \quad \sum_n [n\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + n\sqrt{n+1} \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \quad (5.75)$$

式 (5.68) をまとめる:

$$\begin{aligned} (5.68) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n \left[ -i\omega (-\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + \sqrt{n+1} \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle) \right. \\ &\quad + \kappa \bar{n} (\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle + \sqrt{n+1} \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle) \\ &\quad \left. + \kappa(\bar{n} + 1) (-\sqrt{n} \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle - \sqrt{n+1} \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle) \right] \end{aligned} \quad (5.76)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n [\sqrt{n} (i\omega - \kappa) \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle - \sqrt{n+1} (i\omega + \kappa) \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle] \quad (5.77)$$

<sup>7</sup> 熱平衡状態では物理量に温度が関与していそうだが, (平衡状態ではない) 非平衡の形式では系の温度が式に現れていないことを不思議に思うかもしれない. しかし, そもそも温度とは平衡状態でなければ定義できない. むしろ平衡状態によって定義される量である. 熱力学においては温度という概念が当たり前のよう存在するが, そもそもは熱力学第零法則に則って熱平衡の下で定義される (熱力学は平衡状態に関する理論). つまり我々は平衡有限温度系では式 (8.20) を用いて温度を定義することになる. この式だけでは定義のしようがないと思うかもしれないが, 場の量子論の形式においては理論を閉じるようにうまく繰り込み条件を選ぶことにより, 自己無同着的に定義されることになる.

<sup>8</sup>  $C$  が  $n$  依存性を持っていないと式 (5.66) が発散してしまう.

<sup>9</sup> マスター方程式は無次元化されていないのでアンバランスなあまり良い notation ではない. 本来ならマスター方程式,  $\bar{n}$  も合わせて無次元化すべき.

(5.67) と比較:

$$\sum_n \partial_t \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle = \sum_n (i\omega - \kappa) \langle n-1 | \rho(t) | n \rangle \quad (5.78)$$

$$\sum_n \partial_t \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle = - \sum_n (i\omega + \kappa) \langle n+1 | \rho(t) | n \rangle \quad (5.79)$$

これを解くと

$$\langle n-1 | \rho(t) | n \rangle = C_1 e^{(i\omega - \kappa)t} \quad (5.80)$$

$$\langle n+1 | \rho(t) | n \rangle = C_2 e^{-(i\omega + \kappa)t} \quad (5.81)$$

以上より

$$q = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n \left[ \sqrt{n} C_1 e^{(i\omega - \kappa)t} + \sqrt{n+1} C_2 e^{-(i\omega + \kappa)t} \right] \quad (5.82)$$

$$\dot{q} = p = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n \left[ \sqrt{n} C_1 (i\omega - \kappa) e^{(i\omega - \kappa)t} - \sqrt{n+1} C_2 (i\omega + \kappa) e^{-(i\omega + \kappa)t} \right] \quad (5.83)$$

$$\ddot{q} = \dot{p} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n \left[ \sqrt{n} C_1 (i\omega - \kappa)^2 e^{(i\omega - \kappa)t} - \sqrt{n+1} C_2 (i\omega + \kappa)^2 e^{-(i\omega + \kappa)t} \right] \quad (5.84)$$

ここでは  $\dot{q} = p$  であることを用いている. 以上から  $\dot{p}, p, q$  による微分方程式を立てる<sup>10</sup>:

$$\dot{p} = -(\omega^2 + \kappa^2)q - 2\kappa p \quad (5.85)$$

右辺第2項が速度に比例する減衰を表している. 角振動数に  $\kappa$  が入っており, 減衰の幅が増加するほど角振動数も大きくなる. 古典的な減衰振動を摩擦のあるばねの振動と解釈する場合, 角振動数は減衰 (摩擦) がない場合と変わらないはずなので, 古典と完全には対応していないように見える. 一方で, 減衰をエネルギーの散逸と捉えるならば, 低温の熱浴からの影響で角振動数が大きくなるという解釈は, 低温ではばね定数が大きくなる古典的な解釈と一致する.

きれいになったとはいえまだミスがないか不安です...

### 5.3.5 数値計算

問題2の和が計算しきれなかったので, 数値計算で (5.66) が本当に緩和するかどうかを確認.  $E(0)$  の情報は  $C_n$

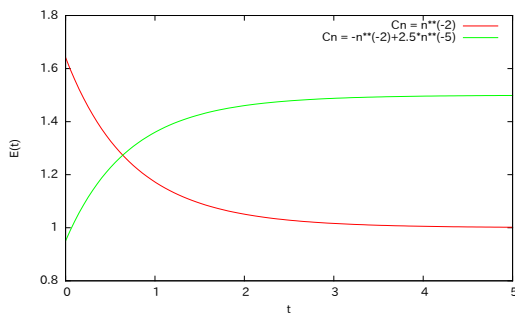


図 5.1:  $\kappa = \bar{n} = 1$

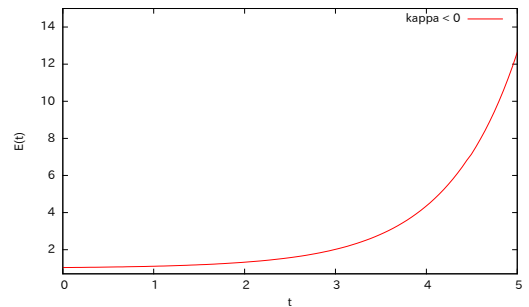


図 5.2:  $\kappa$  が負の場合

に組み込まれており, さらに  $C_n$  の関数列の形に制限は収束すること以外には特にはない.  $E(0)$  は  $C_n$  の汎関数だとも言える. つまり,  $C_n$  の与え方によって熱浴を通じてエネルギーが流出するか流入するかが決まる<sup>11</sup>. 汎関数は

<sup>10</sup>ちょっと式とにらめっこしてれば簡単

<sup>11</sup>系の初期温度が熱浴の温度  $T$  より大きければ流出するし, 逆なら流入するのが普通. 非平衡状態では温度は定義できないので, 正確には流入・流出を支配しているのは温度ではなくエントロピーである.

無限個の自由度を持つ関数なので  $E(0)$  は単なる系のエネルギーの初期値だけでなく、熱浴との相関具合などの自由度を含んでいる (かもしれない)。図 1 にエネルギーが緩和する様子を示した。今回は  $C_n = \frac{1}{n^2}, -\frac{1}{n^2} + \frac{5}{2n^5}$  の 2 つを計算。これは単に流入と流出を見たかったために選んできたものであり、 $C_n$  が収束するような関数列を選べば緩和は観測できるはず。

また、 $\kappa$  が負の場合、振幅は減衰することなく増幅することを図 2 で確認している。

## 5.4 線形応答理論

### 5.4.1 概要

ある平衡系に  $t = t_0$  で何かしらの外場がかかったときの非平衡過程を見る理論。摂動 1 次までの応答を見るので線形応答と呼ばれる。

### 5.4.2 線形応答理論の基本概念

平衡系のハミルトニアンを  $H$ 、外場  $H_{\text{ex}}(t)$  として Full Hamiltonian

$$H_T = H + H_{\text{ex}}(t) \quad (5.86)$$

を考える。 $H_{\text{ex}}(t)$  は  $t < t_0$  においてはゼロである。平衡系の時間依存 Schrödinger 方程式:

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (5.87)$$

に対して外場を加えた Schrödinger 方程式:

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle = (H + H_{\text{ex}}(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (5.88)$$

がある。 $|\Psi(t)\rangle$  は非平衡系の状態である。平衡系の形式解が

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle \quad (5.89)$$

であることから、ユニタリー演算子を用いて  $|\Psi(t)\rangle$  が

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} U(t) |\psi(0)\rangle \quad (5.90)$$

と書けるものとする。これを Schrödinger 方程式に代入すると

$$i\partial_t U(t) = e^{iHt} H_{\text{ex}}(t) e^{-iHt} U(t) = H'_{\text{ex}}(t) U(t) \quad (5.91)$$

という  $U(t)$  の時間発展方程式が得られる。ここで  $H'_{\text{ex}}(t)$  は  $H$  による  $H_{\text{ex}}(t)$  の Heisenberg 描像になっている。相互作用描像のときの議論と同様に

$$U(t) = 1(t < t_0) \quad (5.92)$$

という条件を課すと

$$U(t) = 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 H'_{\text{ex}}(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H'_{\text{ex}}(t_1) H'_{\text{ex}}(t_2) + \cdots \quad (5.93)$$

が得られる。外場に対して 1 次のオーダーのみを扱うことにすると、状態は

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle - ie^{-iHt} \int_{t_0}^t dt_1 H'_{\text{ex}}(t_1) |\psi(0)\rangle \quad (5.94)$$

となる。これを用いて任意の演算子  $O(t)$  (Schrödinger 描像) の期待値は

$$\langle \Psi(t) | O(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \left( 1 + i \int_{t_0}^t dt_1 H'_{\text{ex}}(t_1) \right) e^{iHt} O(t) e^{-iHt} \left( 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 H'_{\text{ex}}(t_1) \right) | \psi(0) \rangle \quad (5.95)$$

$$= \langle \psi(0) | O'(t) | \psi(0) \rangle + i \langle \psi(0) | \int_{t_0}^t dt_1 [H'_{\text{ex}}(t_1), O'(t)] | \psi(0) \rangle + \dots \quad (5.96)$$

$O'(t) = e^{iHt} O(t) e^{-iHt}$  であり, これまた  $H$  による Heisenberg 描像である。外場が無い場合の期待値との差は  $|\psi_S(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)} |\psi_H(t_0)\rangle$  を用いて

$$\begin{aligned} \delta \langle \Psi(t) | O(t) | \Psi(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | O(t) | \Psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | O(t) | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \Psi(t) | O(t) | \Psi(t) \rangle - \langle \psi(0) | e^{iHt} O(t) e^{-iHt} | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \Psi(t) | O(t) | \Psi(t) \rangle - \langle \psi(0) | O'(t) | \psi(0) \rangle \\ &= i \langle \psi(0) | \int_{t_0}^t dt_1 [H'_{\text{ex}}(t_1), O'(t)] | \psi(0) \rangle \end{aligned} \quad (5.97)$$

外場が弱いと仮定して一次のオーダーまでその寄与を見ようというのが線形応答理論 (linear response theory, 久保理論)。上式は描像がごちゃまぜになっているように見えるが Schrödinger 描像と Heisenberg 描像は

$$|\psi(0)\rangle_S = |\psi(0)\rangle_H \quad (5.98)$$

という関係にあるのであえてラベル付けをしていない。

### 5.4.3 有限温度系へ

次に (5.97) を有限温度の期待値に拡張する。これは単純に期待値の取り方を変えれば良い:

$$\delta \langle O(t) \rangle = \frac{\sum_j e^{\beta H_j} \delta \langle i | O(t) | i \rangle}{\sum_j e^{\beta H_j}} = \frac{\text{Tr}[\rho \delta O(t)]}{\text{Tr}[\rho]} = i \int_{t_0}^t dt_1 \text{Tr}(\rho [H'_{\text{ex}}(t_1), O'(t)]) \quad (5.99)$$

ここで重要なことは (5.97) を見てもわかる通り, 非平衡系を記述するのに平衡系の情報しか用いていないことである。逆を言えば取り扱いの難しい非平衡系の相互作用みたいな項は 2 次のオーダーから効いてくるということである<sup>12</sup>。線形応答は非平衡系のとても簡単な取り扱いの方法になっている。

### 5.4.4 簡単な例

$t = t_0$  での外場の影響を

$$H_{\text{ex}}(t) = \int d\mathbf{x} J(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \quad (5.100)$$

のような形で考える。 $J$  はただの c-数で  $\phi$  は実スカラー場。場の演算子  $\phi(\mathbf{x}, t)$  の熱平均を見ると

$$\delta \langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle = i \int_{t_0}^t dt_1 \text{Tr} \left( \rho \int d\mathbf{x}_1 [J(\mathbf{x}_1, t_1) \phi'(\mathbf{x}_1, t_1), \phi'(\mathbf{x}, t)] \right) \quad (5.101)$$

$$= -i \int_{t_0}^t dt_1 \int d\mathbf{x}_1 J(\mathbf{x}_1, t_1) \text{Tr}(\rho [\phi(\mathbf{x}, t), \phi'(\mathbf{x}_1, t_1)]) \quad (5.102)$$

ここでトレース部分はグリーン関数 (2 点相関関数) の定義になっている。密度行列が規格化されていると仮定すると温度グリーン関数は

$$iD(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_1, t_1) = \langle T[\phi'(\mathbf{x}, t) \phi'(\mathbf{x}_1, t_1)] \rangle = \text{Tr}[\rho T(\phi(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}_1, t_1))] \quad (5.103)$$

<sup>12</sup> 平衡系から大きくずれた非平衡系を取り扱うのに線形応答理論は不適切である。尤も, そのような非平衡系の取り扱いはまだ明確に確立されていない。量子マスター方程式は線形応答を超える枠組みとして期待されている。

であり、遅延グリーン関数を

$$iD_R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_1, t_1) = \langle [\phi'(\mathbf{x}, t), \phi'(\mathbf{x}_1, t_1)] \rangle \theta(t - t_1) = \text{Tr}(\rho[\phi'(\mathbf{x}, t), \phi'(\mathbf{x}_1, t_1)])\theta(t - t_1) \quad (5.104)$$

と定義すれば (5.102) はこれを用いて

$$\delta \langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int d\mathbf{x} D_R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_1, t_1) J(\mathbf{x}_1, t_1) \quad (5.105)$$

$$= - \int d^4x D_R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_1, t_1) J(\mathbf{x}_1, t_1) \quad (5.106)$$

とまとめることができる。時間  $t$  をまとめて 4 元ベクトルにしてしまっているが、遅延グリーン関数の  $\theta$  関数で  $t$  が負のところは消えるので問題はない。

さて、これを今度は運動量表示に持っていく。外場を加えているものの時間は平衡系のハミルトニアン  $H$  で発展しているので、空間の一様性は保たれていると考える<sup>13</sup>。  $D_R, J$  それぞれをフーリエ変換すると

$$D_R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}_1, t_1) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} e^{-ip(x-x_1)} D_R(\mathbf{p}, p_0) \quad (5.107)$$

$$J(\mathbf{x}_1, t_1) = \int \frac{d^4p'}{(2\pi)^4} e^{-ip'x_1} J(\mathbf{p}', p'_0) \quad (5.108)$$

これを代入すると

$$\delta \langle \phi(\mathbf{x}, t) \rangle = - \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} e^{-ipx} J(\mathbf{p}, p_0) D_R(\mathbf{p}, p_0) \quad (5.109)$$

$$\delta \langle \phi(\mathbf{p}, p_0) \rangle = -J(\mathbf{p}, p_0) D_R(\mathbf{p}, p_0) \quad (5.110)$$

というとても簡単な形に落ち着く。結論としては、外場の影響による熱平均の変化は運動量空間において外場の Source  $J$  と遅延グリーン関数  $D_R$ <sup>14</sup> を掛けたものになる。

<sup>13</sup>もちろんこれは線形部分までしか考えていないから。

<sup>14</sup>これも当然、外場のないときの遅延グリーン関数である。

## 第6章 Wigner関数

### 6.1 Winger 表示

#### 6.1.1 定義

Wigner 関数の定義は以下の通り:

$$f_W(q, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} ds \left\langle q - \frac{s}{2} \middle| \psi(t) \right\rangle \left\langle \psi(t) \middle| q + \frac{s}{2} \right\rangle e^{ips/\hbar} \quad (6.1)$$

もしくは

$$f_W(q, p, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (6.2)$$

とすることもできる. ここでは  $q_{12} = (q_1 + q_2)/2$ ,  $\bar{q}_{12} = q_1 - q_2$  である.

#### 6.1.2 任意の演算子に対する Wigner 表示

任意の演算子  $\hat{A}$  に対する Wigner 表示は

$$A_W(q_{12}, p) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | \hat{A} | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (6.3)$$

である. ここで

$$\langle q_1 | \hat{A} | q_2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dp A_W(q_{12}, p) e^{-ip\bar{q}_{12}} \quad (6.4)$$

が成立している.

### 6.2 Wigner 分布関数の時間発展

$f_W(q, p, t)$  の時間発展方程式を導く. その準備として 2 つの演算子同士の積 ( $\hat{A}\hat{B}$ ) の Wigner 変換がどのように計算できるかを考える.

#### 6.2.1 $(\hat{A}\hat{B})_W$ の計算

今回は式 (6.1) の流儀を採用する:

$$(\hat{A}\hat{B})_W = \int_{-\infty}^{\infty} ds \left\langle q - \frac{s}{2} \middle| \hat{A}\hat{B} \middle| q + \frac{s}{2} \right\rangle e^{ips/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} ds dq' \left\langle q - \frac{s}{2} \middle| \hat{A} \middle| q' \right\rangle \left\langle q' \middle| \hat{B} \middle| q + \frac{s}{2} \right\rangle e^{ips/\hbar} \quad (6.5)$$

ここで式 (6.4) を用いて変形する:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int ds dq' dp' dp'' e^{ips/\hbar} e^{-ip'(q-q'-\frac{s}{2})/\hbar} e^{-ip''(q'-q-\frac{s}{2})/\hbar} A_W\left(\frac{q+q'}{2} - \frac{s}{4}, p'\right) B_W\left(\frac{q+q'}{2} + \frac{s}{4}, p''\right) \quad (6.6)$$



$\exp$  の肩の変数に着目して  $A_W, B_W$  の変数を変形する:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int ds dq' dp' dp'' \quad e^{ips/\hbar} e^{-ip'(q-q'-\frac{s}{2})/\hbar} e^{-ip''(q'-q-\frac{s}{2})/\hbar} \\ \times A_W\left(q + \frac{1}{2}\left(q' - q - \frac{s}{2}\right), p'\right) B_W\left(q - \frac{1}{2}\left(q - q' - \frac{s}{2}\right), p''\right) \quad (6.7)$$

これを並進演算子を用いて

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int ds dq' dp' dp'' \quad e^{ips/\hbar} e^{-ip'(q-q'-\frac{s}{2})/\hbar} e^{-ip''(q'-q-\frac{s}{2})/\hbar} \\ \times \left( e^{\frac{1}{2}(q'-q-\frac{s}{2})\partial_q} A_W(q, p') \right) \left( e^{-\frac{1}{2}(q-q'-\frac{s}{2})\partial_q} B_W(q, p'') \right) \quad (6.8)$$

と変形. さらに並進変換  $e^{a\partial_q} e^{pq} = e^{p(q+a)}$  を用いて

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int ds dq' dp' dp'' e^{ips/\hbar} \\ \times \left( A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p''}} e^{-ip''(q'-q-\frac{s}{2})/\hbar} \right) \left( e^{-ip'(q-q'-\frac{s}{2})/\hbar} e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p'') \right) \quad (6.9)$$

とする. ここで  $\overleftarrow{\partial}, \overrightarrow{\partial}$  はそれぞれ左側, 右側に作用する演算子である. 次に  $q'$  の積分を計算する:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int ds dp' dp'' e^{ips/\hbar} \\ \times \left( A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p''}} e^{i(p'-p'')q/\hbar} \delta(p'' - p') e^{-\frac{i}{2}(p''+p')s/\hbar} e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p'') \right) \quad (6.10)$$

$p''$  で積分:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int ds dp' e^{ips/\hbar} \left( A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p'}} e^{-ip's/\hbar} e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p') \right) \quad (6.11)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int ds dp' \left( A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p'}} e^{i(p-p')s/\hbar} e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p') \right) \quad (6.12)$$

$s$  で積分:

$$\int dp' \left( A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p'}} \delta(p - p') e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p') \right) \quad (6.13)$$

最後に  $p'$  で積分:

$$\left( A_W(q, p) e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p} e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p) \right) \quad (6.14)$$

つまり,  $e^{\frac{i\hbar}{2} (\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)} = e^{\frac{i\hbar}{2} \Lambda}$  とおくと,

$$(\hat{A}\hat{B})_W = A_W(q, p) e^{\frac{i\hbar}{2} \Lambda} B_W(q, p) \quad (6.15)$$

### 6.2.2 $f_W(q, p, t)$ の時間発展

以上の結果を基に  $f_W(q, p, t)$  の時間発展方程式を導く. Schrödinger 方程式

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (6.16)$$

を用いて, 式 (6.2) の時間微分は以下のようにまとめられる:

$$i\hbar\partial_t f_W(q, p, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | (i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|) | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (6.17)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | (i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle) \langle \psi(t) | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \\ + \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | \psi(t) \rangle (i\hbar\partial_t \langle \psi(t) |) | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (6.18)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \left\langle q_1 \left| \left[ \hat{H}, |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \right] \right| q_2 \right\rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (6.19)$$

$$= (\hat{H} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|)_W - (|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \hat{H})_W \quad (6.20)$$

$$= H_W(q, p) e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda} f_W(q, p, t) - f_W(q, p, t) e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda} H_W(q, p) \quad (6.21)$$

### 6.3 具体的な問題

以上の定式化を具体的なモデルに落とし込み, 数値計算で相空間上の運動を見る.

#### 6.3.1 調和振動子系の Wigner-Moyal 方程式

ハミルトニアンを

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \quad (6.22)$$

とする. このハミルトニアンの Wigner 表示は

$$H_W(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \quad (6.23)$$

である. これを (6.21) に代入:

$$i\hbar\partial_t f_W(q, p, t) = \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \right) e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda} f_W(q, p, t) - f_W(q, p, t) e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda} \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \right) \quad (6.24)$$

これを計算する. 面倒なので以下では  $m = \omega = \hbar = 1$  の単位系を採用.

$$\partial_t f_W(q, p, t) = (q\partial_p - p\partial_q) f_W(q, p, t) \quad (6.25)$$

のような偏微分方程式が導出される. これを数値的に解きたい.

#### 6.3.2 数値計算

差分化

今回は簡単のため, 普通に差分化する. 差分化した方程式は Moyal 方程式は

$$f(t_{n+1}) = k_1[q_l f(p_{m+1}) - p_m f(q_{l+1})] + [k_1(-q_l + p_m) + 1]f \quad (6.26)$$

となる. ここでいくつかの記号の省略ルールを示す:

- Wigner 表示の添字  $W$  は省略
- $f(q_l, p_m, t_n)$  のように差分化しており,  $q, p$  の幅は  $h_{qp}$ ,  $t$  の幅は  $h_t$ .
- $f(q_l, p_m, t_n) \rightarrow f$ ,  $f(q_{l+1}, p_m, t_n) \rightarrow f(q_{l+1})$  などの表記を用いている.
- $h_t/h_{qp} = k_1$ .

これで数値計算が可能な形になった.

## 問題点

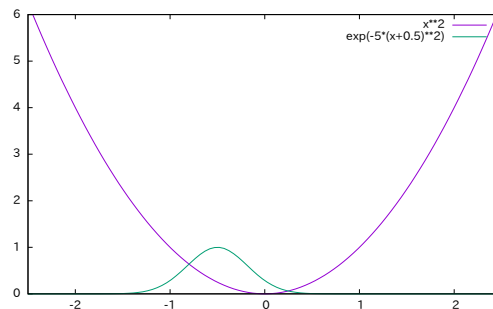
上の差分化は単なる前進差分なので  $\mathcal{O}(h_{qp}), \mathcal{O}(h_t)$  の誤差を生じる。これで計算すると、よほど細かく差分化しないとヤバいです。誤差が累積して襲ってきます。せめて中央差分にしましょう。

## 初期条件

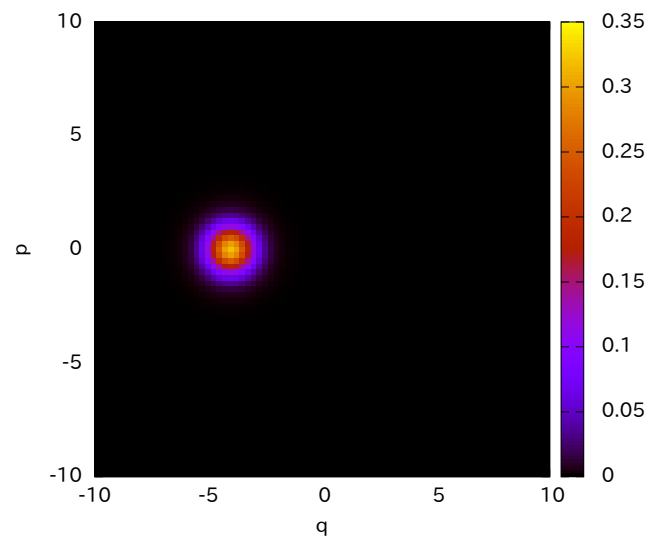
あるガウス波束  $f_0$  の Wigner 表示として

$$f_{0W} = \frac{1}{\pi} e^{-(q+4)^2 - p^2} \quad (6.27)$$

を用意する。 $f_0$  はこんなかんじ:



この波束が調和型トラップによって振動する。古典粒子が調和振動子トラップ内で振動するとき、位相空間上の点は楕円を描くように動くはずであり Wigner 関数も同様の動きをするが、相空間上では  $q, p$  方向の広がりがある。



こんなほんやりした玉みたいなのが位相空間上をぐるぐる回るはず。

## 第7章 経路積分

### 7.1 量子力学の復習

#### 7.1.1 自由粒子

自由粒子を記述する Schrödinger 方程式は

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m} |\psi(t)\rangle \quad (7.1)$$

これを  $p$ -表示に移すと簡単に解ける:

$$i\partial_t \langle p|\psi(t)\rangle = \langle p|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi(t)\rangle = \frac{p^2}{2m} \langle p|\psi(t)\rangle \quad (7.2)$$

$$\therefore \langle p|\psi(t)\rangle = C e^{-i\frac{p^2}{2m}t} \quad (7.3)$$

これを運動量固有値  $p$  でパラメトライズされたケットで表現すると

$$|p, t\rangle_S = |p\rangle e^{-i\frac{p^2}{2m}t} \quad (7.4)$$

ということ. もちろん  ${}_S\langle p', t|p, t\rangle_S = \delta(p - p')$ . 一般解はこの線型結合で書ける:

$$|\Psi, t\rangle = \int dp f(p) |p\rangle e^{-i\frac{p^2}{2m}t} \quad (7.5)$$

これは規格化条件  $\langle \Psi, t|\Psi, t\rangle = 1$  を満たしているものとする. ここで,  $t = 0$  で  $x = 0$  に局在している波束を用意する:

$$\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{(\pi\alpha)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{1}{2\alpha}x^2} \quad (7.6)$$

この  $p$ -表示は完全系を挿入することで求まる:

$$\langle p|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha}{2}p^2} \quad (7.7)$$

**問1**  $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}$  であることを示せ. また, この操作が Fourier 変換と等価であることを確認せよ.

ここで  $\Delta t$  だけ時間発展させると

$$\langle p|e^{-iH\Delta t}|\psi\rangle = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha}{2}p^2} e^{-i\frac{p^2}{2m}\Delta t} \quad (7.8)$$

である.

**問2**  $i\partial_t |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$  の形式解が  $e^{-i\hat{H}t} |\psi\rangle$  であることを確かめよ.

これを  $x$ -表示に移すと

$$\langle x|\psi\rangle = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{1}{\alpha + i\frac{\Delta t}{m}}} e^{-\frac{1}{\alpha + i\frac{\Delta t}{m}}x^2} \quad (7.9)$$

となる. 自由粒子の波束の幅は時間発展と共に広がっていくことがわかる.

### 7.1.2 Green 関数

以上のような「様々な初期波束を置いてみて、時間発展に従って波動関数がどのように変化するのか」を考える問題では Green 関数 (伝搬関数, propagator) を計算しておくとう便利。

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \langle x|e^{-iH(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle = \int dx' \langle x|e^{-iH(t-t_0)}|x'\rangle \langle x'|\psi(t_0)\rangle \quad (7.10)$$

$$= \int dx' G(x, t; x', t_0) \langle x'|\psi(t_0)\rangle \quad (7.11)$$

Green 関数  $G(x, t; x', t_0)$  は、時刻  $t_0$  に場所  $x_0$  にいた粒子が時刻  $t$  に場所  $x$  に移動している確率振幅密度のようなもの。この Green 関数が分かりさえすれば波束を掛けて積分することで時間発展を追うことができる。この Green 関数を計算する方法としてよく用いられるのが経路積分である。

Green 関数の数学的な定義などについては別途勉強しましょう。

## 7.2 経路積分の基礎

### 7.2.1 経路積分の導出

伝搬関数は初期状態を  $(q_i, t_i)$ , 終状態を  $(q_f, t_f)$  とすると

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) \equiv \langle q_f, t_f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} | q_i, t_i \rangle \quad (7.12)$$

と定義できる<sup>1</sup>。  $|q, t\rangle$  は時刻  $t$  で粒子が座標  $q$  に局在している  $\hat{q}$  の固有状態である。自由粒子などの簡単なモデルであれば伝搬関数の計算もそんなに大変ではないが、もっと複雑なモデルではそう簡単に求まらない。これをうまく計算するために経路積分 (Path Integral) を導出する。

まず時間を微小区間  $\delta t$  に分割する:

$$e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)} = \prod_{I=1}^N e^{-i\hat{H}\delta t}, \quad \delta t = \frac{t_f-t_i}{N} \quad (7.13)$$

時間を  $N+1$  分割したことになる。  $\hat{q}$  が  $\hat{p}$  より右側にあることを仮定し、各分割点に位置演算子  $\hat{q}(t_i + I\delta t)$  の固有状態  $|q_I\rangle$  の完全系

$$\int dq_I |q_I\rangle \langle q_I| = 1 \quad (7.14)$$

を挟むと伝搬関数は以下のように書き直せる:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \int dq_{N-1} dq_{N-2} \cdots dq_I \cdots dq_2 dq_1 \langle q_f | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_{N-2} \rangle \langle q_{N-2} | \cdots \\ \cdots \langle q_{I+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_I \rangle \cdots \langle q_2 | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_1 \rangle \langle q_1 | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_i \rangle \quad (7.15)$$

以下では  $\langle q_{I+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_I \rangle$  を計算することを考える。これに運動量演算子  $\hat{p}(t_i + I\delta t)$  の固有状態  $|p_I\rangle$  の完全系

$$\int dp_I |p_I\rangle \langle p_I| = 1 \quad (7.16)$$

を挿入する:

$$\langle q_{I+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_I \rangle = \int dp_I \langle q_{I+1} | p_I \rangle \langle p_I | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_I \rangle \quad (7.17)$$

$$= \int dp_I \langle q_{I+1} | p_I \rangle e^{-iH(q_I, p_I)\delta t} \langle p_I | q_I \rangle \quad (7.18)$$

<sup>1</sup>以降伝搬関数は  $K$  と書く。これを Feynman 核 (Feynman kernel) と呼ぶ。  $t > 0$  を約束すれば Green 関数と Feynman 核は同じもの。

問3  $\hat{H}$  に演算子  $\hat{q}, \hat{p}$  が含まれていることから,  $\langle p_I | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_I \rangle$  のハットハミルトニアンが  $c$ -数の  $H(q_I, p_I)$  に化けることを示せ.

$\langle q | p \rangle$  は平面波になることから

$$\langle q_{I+1} | e^{-i\hat{H}\delta t} | q_I \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dp_I e^{i\left(p_I \frac{q_{I+1} - q_I}{\delta t} - iH(q_I, p_I)\right)\delta t} \quad (7.19)$$

$\delta t \rightarrow 0$  の極限では  $\frac{q_{I+1} - q_I}{\delta t} \rightarrow \frac{dq}{dt}$  であることから

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q e^{i \int_{t_i}^{t_f} dt \left(p \frac{dq}{dt} - H\right)} \quad (7.20)$$

$$\mathcal{D}p \mathcal{D}q = \prod_{I=0}^N \frac{\mathcal{D}p \mathcal{D}q}{2\pi} \quad (7.21)$$

問4  $\exp$  の肩が (和ではなく) 積分になることを確認せよ.

$N$  はいずれ  $\infty$  になるので, 無限回の積分を行わなくてはならない. この積分は  $q(t_i) = q_i, q(t_f) = q_f$  となるような境界条件をつけて行うとする.

$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$  の場合について考える:

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q e^{i \int_{t_i}^{t_f} dt \left(p \frac{dq}{dt} - \frac{p^2}{2m} - V(q)\right)} = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q e^{i \int_{t_i}^{t_f} dt \left(-\frac{(p-m\dot{q})^2}{2m} + \frac{\dot{q}^2}{2m} - V(q)\right)} \quad (7.22)$$

これで  $p$  について積分が可能.  $q$  の積分は  $V(q)$  の具体系が与えられて初めて計算が可能になる.  $p$  の積分を実行し, その解が  $\mathcal{N}$  だったとすると

$$K(q_f, t_f; q_i, t_i) = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q e^{i \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{\dot{q}^2}{2m} - V(q)\right)} \quad (7.23)$$

$\exp$  の肩に作用 (action)  $S[q(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{\dot{q}^2}{2m} - V(q)\right)$  に虚数単位を掛けて積分すれば伝搬関数が求まることがわかる. これが経路積分である.

作用が (プランク定数より) 十分大きい場合  $\exp(iS)$  は極値の近傍を除いて激しく振動して積分に効いてこないことが期待される. この極値のみを取り出してきたものを「古典極限」と呼ぶ. 作用がプランク定数と同程度のオーダーを持つ場合, 極値近傍以外にも積分に効いてくる可能性があり, これが量子効果として取り入れられることになる.

問5 無次元化をしない場合, 経路積分の被積分関数は  $\exp(iS/\hbar)$  と書ける.  $S$  がプランク定数  $\hbar$  より十分大きい時,  $S$  の極値以外の積分が値に効いてこない理由を考えよ.

## 7.2.2 自由粒子: 経路積分を使わない方法

自由粒子 ( $V(q) = 0$ ) の場合は経路積分を使わなくても伝搬関数がすぐに求まる. まず  $p$ -表示で確率振幅を書き下す:

$$\langle p_f | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}(t_f - t_i)} | p_i \rangle = e^{-i\frac{p_f^2}{2m}(t_f - t_i)} \delta(p_f - p_i) \quad (7.24)$$

これを  $x$ -表示に移す:

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \langle x_f | e^{-i \frac{\hat{p}^2}{2m}(t_f - t_i)} | x_i \rangle = \int dp \langle x_f | p \rangle \langle p | e^{-i \frac{\hat{p}^2}{2m}(t_f - t_i)} | x_i \rangle \quad (7.25)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_f - t_i)}} e^{-i \frac{m}{2(t_f - t_i)}(x_f - x_i)^2} \quad (7.26)$$

問 6 (7.26)(7.9) を用いて (7.6) を再現せよ.

### 7.2.3 自由粒子：経路積分の方法

まずは伝搬関数 (の被積分関数) を時間について離散化する ( $\dot{x} = \frac{x_{j+1} - x_j}{\delta t}$ ):

$$e^{-i \int dt \frac{m(x)^2}{2}} \rightarrow \prod_{j=0}^N e^{i \frac{m}{2} \left( \frac{x_{j+1} - x_j}{\delta t} \right)^2 \delta t} \quad (7.27)$$

ただし  $x_0 = x_i, x_{N+1} = x_f$  とする. これに  $\int dx_1 dx_2 \cdots dx_N$  をかけて積分すれば (7.23) が計算できたことになる. ここで公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ia(x-x_1)^2 + ib(x-x_2)^2} = \sqrt{\frac{i\pi}{a+b}} e^{i \frac{ab}{a+b} (x_1 - x_2)^2} \quad (7.28)$$

を用いる.

問 7 (7.28) を証明せよ.

$x_1$  に関する積分:

$$\int dx_1 e^{i \frac{m}{2\delta t} ((x_i - x_1)^2 - (x_1 - x_2)^2)} = \sqrt{\frac{i\pi\delta t}{m}} e^{-i \frac{m}{4\delta t} (x_i - x_2)^2} \quad (7.29)$$

これより,  $x_2$  の積分は:

$$\int dx_2 e^{i \frac{m}{2\delta t} \left( \frac{1}{2} (x_i - x_2)^2 - (x_2 - x_3)^2 \right)} = \sqrt{\frac{4i\pi\delta t}{3m}} e^{-i \frac{m}{6\delta t} (x_i - x_3)^2} \quad (7.30)$$

これを繰り返していくと  $x_n$  の積分因子として  $\sqrt{\frac{i2n\pi\delta t}{(n+1)m}}$  が現れることがわかる. 全積分が終わったとき

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \langle x_f | e^{-i \frac{\hat{p}^2}{2m}(t_f - t_i)} | x_i \rangle = \mathcal{N} \left( \sqrt{\frac{i2\pi\delta t}{m}} \right)^N \sqrt{\frac{1}{N+1}} e^{i \frac{m}{2(N+1)\delta t} (x_f - x_i)^2} \quad (7.31)$$

$\mathcal{N}$  は  $p$  積分の結果出てくる因子で, 積分 1 回につき  $\sqrt{\frac{m}{2\pi i\delta t}}$  が出てくる. さらに  $\delta t(N+1) = t_f - t_i$  であることを用いると

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i(t_f - t_i)}} e^{-i \frac{m}{2(t_f - t_i)}(x_f - x_i)^2} \quad (7.32)$$

となり, (7.26) と一致している.

問 8  $p$  成分の積分を計算せよ.

問 9 数学的帰納法を用いて Feynman kernel が (7.31) のように計算できることを示せ.

経路積分を使わない方法に比べてかなり面倒ですが, モデルがもっと複雑になると有り難みが出てきます.

## 7.3 数値計算の準備及び経路積分のイメージ

直感的理解へ向けて経路積分について数値計算を行う。

### 7.3.1 基底波動関数と伝搬関数

伝搬関数を束縛状態の固有関数  $|n\rangle$  で展開:

$$G(x, t; x_0, t_0 = 0) \equiv \langle x | e^{-i\hat{H}(t-t_0)} | x_0 \rangle = \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | e^{-i\hat{H}t} | x_0 \rangle = \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x_0) e^{-iE_n t} \quad (7.33)$$

ここで  $t = -i\tau$  として  $\tau \rightarrow \infty$  を考えると, 高い励起状態は指数関数的に減衰していくことがわかる。これより伝搬関数と基底波動関数の関係

$$G(x, t = 0 - i\tau; x_0, t_0 = 0) \rightarrow \psi_0(x) \psi_0^*(x_0) e^{E_0 \tau} \quad (7.34)$$

$$\therefore |\psi_0(x)|^2 \rightarrow e^{-E_0 \tau} G(x, t = 0 - i\tau; x_0 = x, t_0 = 0) \quad (7.35)$$

が明らかになる。第二式は始点と終点が同じになっていることに注意。Green 関数から基底波動関数の情報を抜き出すためには, 虚時間を導入し時間発展を行えば良い。これを虚時間発展法と呼ぶ。

### 7.3.2 作用とラグランジアン

ラグランジアンを虚時間で記述すると, ハミルトニアンに化ける:

$$L\left(x, \frac{dx}{dt}\right) = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x) \quad (7.36)$$

$$\rightarrow L\left(x, \frac{dx}{-id\tau}\right) = -\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - V(x) = -H\left(x, \frac{dx}{d\tau}\right) \quad (7.37)$$

これにより作用がラグランジアンの積分からハミルトニアンの積分に書き換えられる:

$$S[x(t)] = \int_{t_0=0}^t dt L(x, t) = i \int_{\tau_0=0}^{\tau} d\tau H(x, \tau) \quad (7.38)$$

$$G(x, -i\tau; x_0, 0) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{N+1} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N e^{-\int_0^{\tau} H(\tau)} \quad (7.39)$$

**問 10** (7.38)(7.39) を確かめよ。

### 7.3.3 作用積分の簡略化

前述のハミルトニアンの積分を差分化で書き直し, 数値計算に持ち込めるようにする:

$$\int H(\tau) \simeq \sum_j \epsilon E_j = \epsilon W(\{x_j\}) \quad (7.40)$$

$$W(\{x_j\}) \equiv \sum_j \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon} \right)^2 + V\left(\frac{x_j + x_{j-1}}{2}\right) \right] \quad (7.41)$$



規格化を考慮したうえで (7.35) に代入する:

$$|\psi_0(x)|^2 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{G(x, t = -i\tau; x_0 = x, t_0 = 0)}{\int dx G(x, t = -i\tau; x_0 = x, t_0 = 0)} \quad (7.42)$$

$$= \frac{1}{Z} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N e^{-\epsilon W(x, x_1, \dots, x_N)} \quad (7.43)$$

$$Z = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int dx dx_1 dx_2 \cdots dx_N e^{-\epsilon W} \quad (7.44)$$

$W$  はエネルギー線積分になっている。また  $W(x, x_1, \dots, x_N)$  は始点と終点を  $x$  に固定している。

### 7.3.4 経路とは

(7.39) の  $\exp$  の肩においてハミルトニアンを時間軸に沿って積分している。また  $S[x(t)] = i \int_{\tau_0=0}^{\tau} d\tau H(x, \tau)$  から作用は  $x(t)$  の経路によって決定される。つまり、「取りうるすべての  $x(t)$  の経路についてエネルギー (ハミルトニアン) を足しあげていく」ことが経路積分の具体的なイメージである。エネルギーが大きい経路が効いてこない理由は (7.39) から直感的にわかる。

### 7.3.5 経路の取り方

$|\psi_0(x)|^2$  を求めたい訳だが、数値計算の上では離散化するので  $|\psi_0(x[1])|^2, |\psi_0(x[2])|^2, |\psi_0(x[3])|^2 \dots |\psi_0(x[N-1])|^2$  を求めることになる。本来なら  $G(x[1], -i\tau; x[1], 0), G(x[2], -i\tau; x[2], 0), G(x[3], -i\tau; x[3], 0), \dots G(x[N-1], -i\tau; x[N-1], 0)$  について別々の初期設定で計算する必要がある。これを別々に計算すると計算コストが非常に高くなる。 $x_j$  は時間で差分、 $x[j]$  は空間で差分化していることに注意。

具体的な計算においては (7.43) を各  $x[1], x[2] \dots$  について計算すればよいのだが

$$|\psi_0(x[1])|^2 = \frac{1}{Z} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N e^{-\epsilon W(x[1], x_1, x_2, \dots)} \quad (7.45)$$

$$|\psi_0(x[2])|^2 = \frac{1}{Z} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N e^{-\epsilon W(x[2], x_1, x_2, \dots)} \quad (7.46)$$

⋮

における  $W(x[1], x_1, x_2, \dots)$  と  $W(x[2], x_1, x_2, \dots)$  は始点 (終点) が異なるので、それぞれ別々に計算を実行しなければならない。これが計算コストの肥大化の原因である。

### 7.3.6 処方箋

この問題に関する処方箋は Rubin の本<sup>2</sup>にあるのでこれを参考勉強するのがいいと思います。が、翻訳があまり良くないのかそもそも原文の内容が丁寧でないためか、理解するのはなかなか難しいと思います。理解のための重要なポイントは

1.  $x_0$  が始点 (終点) の経路における  $x_i$  を  $x'_i$  にフリップしたときに  $x_0$  からの作用積分が  $x_i$  からの作用積分と同じ値であることを利用して  $|\psi(x'_i)|^2$  を求めることが経路積分の計算と等価であること
2. 作用を計算して確率分布に計上することと、フリップする確率を Boltzmann 分布で与えてその経路 (格子点) に乗った粒子をそのまま足し上げることがだいたい等価であること

の2点にあると思います。この2つが Monte Carlo 法・Metropolis 法による数値計算を正当化しています。是非一緒にお勉強しましょう。

<sup>2</sup>Rubin H. Landau, *Computational Physics* (1997) pp. 313-317

## 第8章 Ising 模型

### 8.1 Ising 模型と熱統計力学の基礎

強磁性体を記述するモデルのひとつ.

#### 8.1.1 ハミルトニアン

ハミルトニアンを

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i \cdot s_j \quad (8.1)$$

とする.  $\langle i,j \rangle$  は隣接サイト間のみの和を表す.  $J$  は相互作用定数.  $s$  はスピン. スピンはアップ ( $s = 1$ ) とダウン ( $s = -1$ ) の2種類. 非常に単純なスピン系モデルでありながら相転移の記述が可能である. 1・2次元系については厳密解が求められている.

外部磁場を考慮したモデルもある:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i \cdot s_j - h \sum_i s_i \quad (8.2)$$

#### 8.1.2 平衡状態

系の平衡状態は Helmholtz エネルギー

$$F = U - TS \quad (8.3)$$

が最小になるように決まる. 低温 ( $T \ll U/S$ ) ならば内部エネルギー  $U = \langle H \rangle$  が leading であり, これを最小化するようにスピンの向きが揃う. これを強磁性体と呼ぶ. 一方で高温ならばエントロピーの項が優勢なのでエントロピーが最大になるようにスピンの向きがバラバラになる. これを常磁性体と呼ぶ.

#### 8.1.3 相転移

Gibbs 自由エネルギーの1回微分が不連続変化をするときこれを第一種相転移と呼び, Gibbs 自由エネルギーの2回微分については第二種相転移と呼ぶ. 第一種は体積, エントロピーとか.

$$\left( \frac{\partial G}{\partial p} \right)_T = V, \quad \left( \frac{\partial G}{\partial T} \right)_p = -S \quad (8.4)$$

第二種は比熱など.

$$\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} = -\frac{\partial S}{\partial T} = -\frac{C_P}{T} \quad (8.5)$$

有限温度 1次元 Ising 模型は相転移を起こさないが, 2次元系はその限りではない.

## 8.2 Ising 模型の厳密解

### 8.2.1 1 次元 Ising 模型：平均場近似

まずは厳密解の前に Ising 模型を平均場近似で解析してみる。多体系で相互作用を平均場として理解することは非常に重要なので、手法として知っておく必要がある。

平均場近似ではまず任意のサイトのスピンに着目し、その周囲のスピンからの影響を時間や空間によらない平均値で置き換える。スピンを

$$s_i = \langle s \rangle + \delta s_i \quad (8.6)$$

置くことにする。これを (8.2) に代入：

$$H = -H_{\text{eff}} \sum_{i=1}^N s_i + \frac{NzJ\langle s \rangle^2}{2} \quad (8.7)$$

$$H_{\text{eff}} = h + zJ\langle s \rangle \quad (8.8)$$

ここで  $\delta s$  の 2 次は無視している。 $N$  はスピンの総数、 $z$  は最隣接サイト数 (1 次元なら 2, 2 次元なら 4) である。計算途中で

$$\sum_{\langle i,j \rangle} s_i = z \sum_i s_i, \quad \sum_{\langle i,j \rangle} 1 = \frac{1}{2}zN \quad (8.9)$$

を用いている。これより分配関数は

$$Z = \exp(-\beta H) = \exp \left[ -\beta \left( -H_{\text{eff}} \sum_{i=1}^N s_i + \frac{NzJ\langle s \rangle^2}{2} \right) \right] = Z_0 \left( \prod_i Z_i \right) = Z_0 (Z_i)^N \quad (8.10)$$

$$Z_0 = \exp \left( -\beta \frac{NzJ\langle s \rangle^2}{2} \right), \quad Z_i = \sum_{s_i=1,-1} e^{\beta H_{\text{eff}} s_i} = 2 \cosh(\beta H_{\text{eff}}) \quad (8.11)$$

全体の分配関数は

$$Z = \exp \left( -\beta \frac{NzJ\langle s \rangle^2}{2} \right) 2^N \cosh^N(\beta H_{\text{eff}}) \quad (8.12)$$

Helmholtz エネルギーは

$$F = \frac{NzJ}{2} \langle s \rangle^2 - Nk_B T \log [2 \cosh(\beta H_{\text{eff}})] \quad (8.13)$$

磁化は単位体積あたりのスピン数を  $n$  としたときに  $M = n \langle s \rangle$  であるが、今回すべてのスピンは等価と考えているので  $\langle s_i \rangle$  を計算すれば十分である：

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{s_i} \cdots \sum_{s_i} \cdots s_i e^{-\beta H} = \frac{1}{Z_i} \sum_{s_i=-1,1} s_i e^{\beta s_i H_{\text{eff}}} \quad (8.14)$$

$$= \tanh(\beta H_{\text{eff}}) \quad (8.15)$$

これは自己無同着方程式である。

### 8.2.2 1 次元 Ising 模型：厳密解

教科書を参考にしながら是非自分で手を動かして解いてみてください。

### 8.2.3 2次元 Ising 模型

2次元 Ising 模型の厳密解は Onsager によって求められている:

$$\frac{U}{N} = -J \coth 2\beta J \left[ 1 + \frac{2}{\pi} \kappa_1 K(\kappa) \right] \quad (8.16)$$

$$\frac{C_H}{N} = k_B (\beta J \coth 2\beta J)^2 \frac{2}{\pi} \left[ 2K(\kappa) - 2E(\kappa) - (1 - \kappa_1) \left( \frac{2}{\pi} + \kappa_1 K(\kappa) \right) \right] \quad (8.17)$$

$K(\kappa), E(\kappa)$  は楕円積分:

$$K(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \theta}} \quad (8.18)$$

$$E(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \theta} \quad (8.19)$$

導出は難しいので、これが数値計算と一致するかどうかを確かめたい。

## 8.3 数値計算

### 8.3.1 Monte Carlo 法

系は Helmholtz エネルギーを最小にするように平衡状態を決める (ゼロ温度の場合は内部エネルギーが最小). これを実現するためには, 任意のサイトの状態を変化させて内部エネルギーが小さくなるようにする操作を繰り返せば良い. 「任意のサイトを選ぶ」ために乱数を用いることになるが, 乱数を用いるアルゴリズムの総称が Monte Carlo 法である.

単純に前述の通り内部エネルギーが最小な平衡状態はゼロ温度なので, 有限温度系に拡張するためには工夫が必要である.

### 8.3.2 Metropolis 法

系が平衡状態にあるとき, 内部エネルギーの分布を  $P(E)$ , エネルギー  $E' \rightarrow E$  遷移確率を  $W(E, E')$  とすると

$$W(E, E')P(E') = W(E', E)P(E) \quad (8.20)$$

が成立している.  $P(E')$  の状態が  $P(E)$  の状態に遷移しようとする流れとその逆の流れが平衡状態にあるということである. 系のエネルギー分布がカノニカル分布になることを仮定すると,

$$P(E) = \frac{e^{-\beta E}}{Z(\beta)} \quad (8.21)$$

であることがわかる.  $Z(\beta)$  は分配関数. これを (8.20) に代入すると以下の関係式を得る:

$$e^{-\beta(E-E')} = \frac{W(E, E')}{W(E', E)} \quad (8.22)$$

ここで, (8.22) を満たすような  $W(E, E')$  を与える:

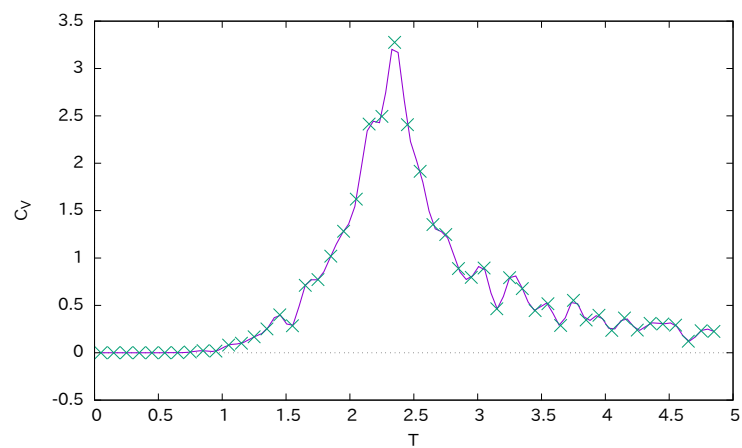
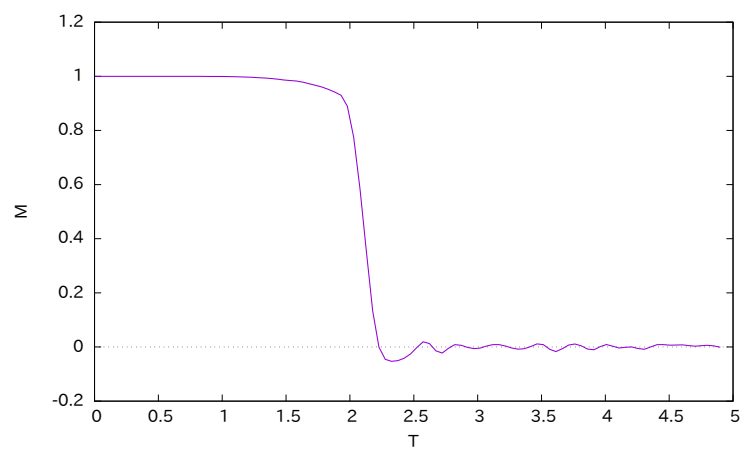
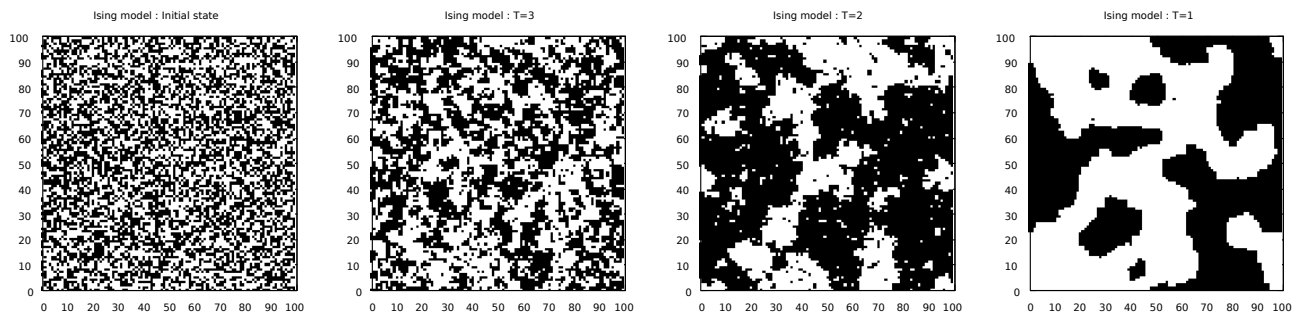
$$W(E, E') = \begin{cases} 1 & (E \leq E') \\ e^{-\beta(E-E')} & (E > E') \end{cases} \quad (8.23)$$

これが Metropolis 法である.

Ising モデルに置き換えると, スピンをフリップしたときにエネルギー的に安定ならばそのままにして, 不安定な場合も, ボルツマン因子に依る確率でフリップを許可する. これで有限温度系への拡張が可能になる.

### 8.3.3 2次元 Ising 模型

シミュレーション結果:



磁区の図は  $N = 100^2$ ,  $J = 1$ , 磁化と比熱は  $N = 16^2$ ,  $J = 1$  で計算した. 以上の図から

- 温度が下がるほどはっきりとした磁区が形成されること
- 磁化・比熱は転移温度 ( $T_C \simeq 2.26$ ) 付近で drastic に変化していること

- 2次相転移が起こっている (であろう) こと

などがわかる.

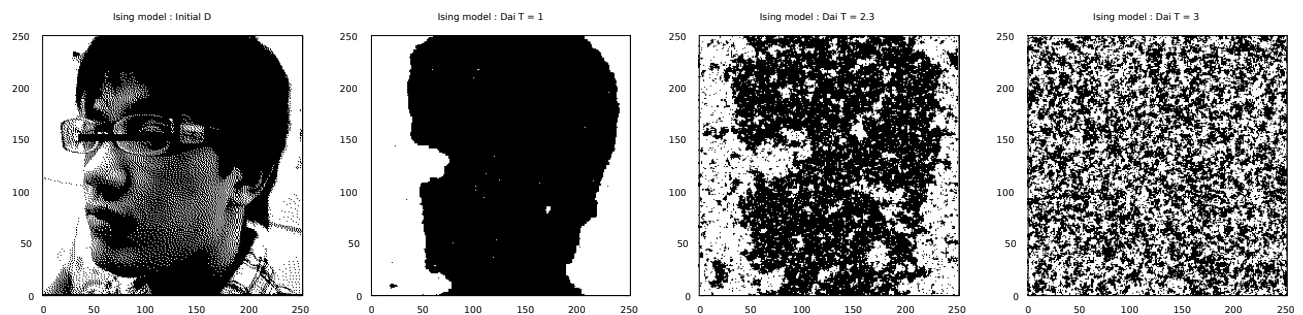
### 8.3.4 数値計算上の注意

#### 乱数

なるべく良い乱数を用いるようにしましょう. C 言語の `rand()` はあまり良くありません. 単純な線形合同法では周期が短く大量の乱数を用いるシミュレーションには向きません. Mersenne twister などのアルゴリズムを用いましょう.

#### ローカルな極小点

ゼロ温度系ではあまり明確な磁区が生まれません. ただの Monte Carlo 法ではローカルな極小点にハマるとそこから抜け出せないからです. Metropolis 法を適応するとある程度解決しますが, やはり正の磁区と負の磁区に分かれるのでグローバルな磁化は熱力学極限とは異なる値を示します. 上の図の  $T = 1$  もやはりローカルな極小点であり真の最小点であるスピンの全て揃った状態にはなりません. これを解決するために, 物理量の計算の際は  $T = 0$  でスピンの全て揃った状態を用意しそこから Monte Carlo シミュレーションを行っています. 焼きなまし法を用いるとどんな初期状態でも Helmholtz エネルギーが最小な状態を作れるかもしれません.



ご覧の通り, Metropolis 法だと磁化の形成は初期状態の選び方に強く依存します.

## 第9章 場の量子論

### 9.1 Wick の定理

摂動計算において重要な役割を果たす。ただし、この定理が成立するのは生成消滅演算子の代数を満たすものに限られる。つまり、ゼロモード演算子は Wick の定理を満たさない。

#### 9.1.1 概要

ざっくり言うと

場の演算子の時間順序積 (T 積) はそれらの演算子から構成される全ての可能な正規積 (N 積) と伝搬関数の積の和で表される。

伝搬関数 (因果 Green 関数, Feynman propagator) は

$$\Delta_F(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, t_1 - t_2) = -i \langle 0 | T [\phi(\mathbf{x}_1, t_1) \phi^\dagger(\mathbf{x}_2, t_2)] | 0 \rangle \quad (9.1)$$

で与えられるので、 $\phi$  の可能な組を全て足し上げればよい。伝搬関数は  $\phi^\dagger, \phi$  の組で作られるので、 $\phi\phi, \phi^\dagger\phi^\dagger$  の組は考えなくても良い。N 積は生成演算子を前に、消滅演算子を後ろに持ってくる順序積:

$$: \phi_1 \phi_2^\dagger \phi_3 \phi_4^\dagger : = \phi_2^\dagger \phi_4^\dagger \phi_1 \phi_3 \quad (9.2)$$

大事なことは、N 積の真空期待値は必ずゼロになるということと、演算子が時間に依存していないならば勝手に T 積をつけてもよいということ。期待値を計算するための面倒な交換関係計算があるとき、Wick が使えることがある。基本的には伝搬関数が真空中で作られているので有限温度では使えないが、議論を有限温度期待値に拡張した Block-de Dominics の定理というのがある。有限温度系における Wick の定理とかも呼ばれる。

#### 9.1.2 具体例

n=2 の場合

$$T[\phi_1 \phi_2] = : \phi_1 \phi_2 : + \langle 0 | T[\phi_1 \phi_2] | 0 \rangle \quad (9.3)$$

n=3 の場合

$$T[\phi_1 \phi_2 \phi_3] = : \phi_1 \phi_2 \phi_3 : + \langle 0 | T[\phi_1 \phi_2] | 0 \rangle \phi_3 + \langle 0 | T[\phi_1 \phi_3] | 0 \rangle \phi_2 + \langle 0 | T[\phi_2 \phi_3] | 0 \rangle \phi_1 \quad (9.4)$$

#### 9.1.3 証明

### 9.2 TFD 形式による期待値計算

$k$  が連続自由度を持つ場合の期待値を TFD の力を借りて計算する。

### 9.2.1 TFD のド基礎

熱的真空は

$$|0\rangle = (1-f) \sum_m f^m |m, m\rangle \quad (9.5)$$

$$\langle 0| = \sum_m \langle\langle m, m| \quad (9.6)$$

で定義される.  $f$  はボルツマン因子.  $f \neq e^{-\beta\omega}$  のとき非平衡であるという. 熱的ブラ・ケットは双対ではない. 超演算子形式における  $\langle\langle I_R | \bullet | \rho_R \rangle\rangle$  は熱的真空期待値  $\langle 0 | \bullet | 0 \rangle$  に置き換えが可能<sup>1</sup>. また Boson の熱的 Bogoliubov 変換の具体形は

$$b_{\mathbf{k}}^\dagger = \tilde{\xi}_{\mathbf{k}} + (1+n_{\mathbf{k}})\xi_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (9.7)$$

$$b_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} + n_{\mathbf{k}}\tilde{\xi}_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (9.8)$$

で与えられ,  $\xi$  演算子は熱的真空を消去する消滅演算子である:

$$\xi |0\rangle = \tilde{\xi} |0\rangle = 0, \quad \langle 0 | \xi^\dagger = \langle 0 | \tilde{\xi}^\dagger = 0 \quad (9.9)$$

$$[\xi, \xi^\dagger] = [\tilde{\xi}_{\mathbf{k}}, \tilde{\xi}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad [\xi_{\mathbf{k}}, \tilde{\xi}_{\mathbf{k}'}] = [\xi_{\mathbf{k}}, \tilde{\xi}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0 \quad (9.10)$$

この熱的真空,  $\xi$  演算子を用いて計算をする. 以下  $x = (x, t), y = (y, s)$  とする.

### 9.2.2 具体計算

例として以下の計算をする:

$$\begin{aligned} \langle R_3(x) R_3(y) \rangle &\equiv \langle 0 | \frac{1}{(2\pi)^6} \int dk_1 dk_2 dk_3 dk_4 b_{k_1}^\dagger b_{k_2} b_{k_3}^\dagger b_{k_4} e^{-i(k_1-k_2)x} e^{-i(k_3-k_4)y} e^{i(\omega_{k_1}-\omega_{k_2})t} e^{i(\omega_{k_3}-\omega_{k_4})s} |0\rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^6} \int dk_1 dk_2 dk_3 dk_4 e^{-i(k_1-k_2)x} e^{-i(k_3-k_4)y} e^{i(\omega_{k_1}-\omega_{k_2})t} e^{i(\omega_{k_3}-\omega_{k_4})s} \\ &\quad \langle 0 | \left( \tilde{\xi}_1 + (1+n_1)\xi_1^\dagger \right) \left( \xi_2 + n_2\tilde{\xi}_2^\dagger \right) \left( \tilde{\xi}_3 + (1+n_3)\xi_3^\dagger \right) \left( \xi_4 + n_4\tilde{\xi}_4^\dagger \right) |0\rangle \end{aligned} \quad (9.11)$$

ここでは  $\xi, n$  の添字について  $(k_1, k_2, k_3, k_4) \rightarrow (1, 2, 3, 4)$  という置換をしている. 上式の熱的真空期待値を計算する:

$$\langle 0 | \left( \tilde{\xi}_1 + (1+n_1)\xi_1^\dagger \right) \left( \xi_2 + n_2\tilde{\xi}_2^\dagger \right) \left( \tilde{\xi}_3 + (1+n_3)\xi_3^\dagger \right) \left( \xi_4 + n_4\tilde{\xi}_4^\dagger \right) |0\rangle \quad (9.13)$$

$$= \langle 0 | \tilde{\xi}_1 \left( \xi_2 + n_2\tilde{\xi}_2^\dagger \right) \left( \tilde{\xi}_3 + (1+n_3)\xi_3^\dagger \right) n_4\tilde{\xi}_4^\dagger |0\rangle \quad (9.14)$$

$$= \langle 0 | \left( \tilde{\xi}_1 \xi_2 + n_2\tilde{\xi}_1\tilde{\xi}_2^\dagger \right) \left( n_4\tilde{\xi}_3\xi_4^\dagger + n_4(1+n_3)\xi_3^\dagger\tilde{\xi}_4^\dagger \right) |0\rangle \quad (9.15)$$

$$= \langle 0 | \left( \tilde{\xi}_1 \xi_2 + n_2 \left\{ \tilde{\xi}_2^\dagger \tilde{\xi}_1 + [\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2^\dagger] \right\} \right) \left( n_4 \left\{ \tilde{\xi}_4^\dagger \tilde{\xi}_3 + [\tilde{\xi}_3, \tilde{\xi}_4^\dagger] \right\} + n_4(1+n_3)\xi_3^\dagger\tilde{\xi}_4^\dagger \right) |0\rangle \quad (9.16)$$

$$= \langle 0 | \left( \tilde{\xi}_1 \xi_2 + n_2\delta(1-2) \right) \left( n_4\delta(3-4) + n_4(1+n_3)\xi_3^\dagger\tilde{\xi}_4^\dagger \right) |0\rangle \quad (9.17)$$

$$= \langle 0 | \left( \tilde{\xi}_1 \xi_2 n_4\delta(3-4) + \tilde{\xi}_1 \xi_2 \xi_3^\dagger \tilde{\xi}_4^\dagger n_4(1+n_3) + n_2 n_4 \delta(1-2) \delta(3-4) + \xi_3^\dagger \tilde{\xi}_4^\dagger n_2 n_4 (1+n_3) \delta(1-2) \right) |0\rangle \quad (9.18)$$

$$= \langle 0 | \left( \tilde{\xi}_1 \xi_2 \xi_3^\dagger \tilde{\xi}_4^\dagger n_4(1+n_3) + n_2 n_4 \delta(1-2) \delta(3-4) \right) |0\rangle \quad (9.19)$$

$$= \langle 0 | \{ n_4(1+n_3) \delta(1-4) \delta(2-3) + n_2 n_4 \delta(1-2) \delta(3-4) \} |0\rangle \quad (9.20)$$

よって

$$\langle R_3(x) R_3(y) \rangle \equiv \left( \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk n_k \right)^2 + \frac{1}{(2\pi)^6} \int dk_1 dk_2 e^{-i(k_1-k_2)(x-y)} e^{i(\omega_{k_1}-\omega_{k_2})(t-s)} n_1(1+n_2) \quad (9.21)$$

<sup>1</sup>超演算子形式のチェック・チルダと TFD のノンチルダ・チルダは単射同型の関係にある.



### 9.2.3 Block-de Dominics の定理

TFD 形式だと計算が簡単になることがわかった<sup>2</sup>。ただ、熱平均については Block-de Dominics の定理という Wick の定理に対応するものがあるので、もっと簡単に計算できそうである。\$b\_1 \sim b\_6\$ まであるものを考えるが、\$x, y\$ が couple するか否かは区別しないといけない<sup>3</sup>:

$$\langle R_1(x) R_1^\dagger(y) \rangle \sim \langle 0 | b_{1x}^\dagger b_{2x}^\dagger b_{3x} b_{4y}^\dagger b_{5y} b_{6y} | 0 \rangle = \langle 0 | T [b_{1x}^\dagger b_{2x}^\dagger b_{3x} b_{4y}^\dagger b_{5y} b_{6y}] | 0 \rangle \quad (9.22)$$

$$= 2 \langle 0 | T \overbrace{b_{1x}^\dagger b_{2x}^\dagger b_{3x} b_{4y}^\dagger b_{5y} b_{6y}}^{\text{diagram}} | 0 \rangle + 4 \langle 0 | T \overbrace{b_{1x}^\dagger b_{2x}^\dagger b_{3x} b_{4y}^\dagger b_{5y} b_{6y}}^{\text{diagram}} | 0 \rangle \quad (9.23)$$

$$= 2 \langle b_{1x}^\dagger b_{5y} \rangle \langle b_{2x}^\dagger b_{6y} \rangle \langle b_{3x} b_{4y}^\dagger \rangle + 4 \langle b_{1x}^\dagger b_{3x} \rangle \langle b_{2x}^\dagger b_{5y} \rangle \langle b_{4y}^\dagger b_{6y} \rangle \quad (9.24)$$

$$= 2\delta(1-5)\delta(2-6)\delta(3-4)n_1 n_2 (1+n_3) + 4\delta(1-3)\delta(2-5)\delta(4-6)n_1 n_2 n_4 \quad (9.25)$$

\$\xi\$ 演算子で真面目に計算しなくてもいける。

## 9.3 Gell-Mann-Low の定理

### 9.3.1 断熱因子

ハミルトニアンの摂動部が断熱因子を持っている場合を考える:

$$H = H_0 + e^{-\epsilon|t|} H_I \quad (9.26)$$

これは \$t = 0\$ で full の相互作用を取り入れた系になり、\$t \to \pm\infty\$ で自由粒子になるようなハミルトニアンである。ここで、\$t = t\_0\$ かつ \$t\_0 \sim -\infty\$ で相互作用描像の状態が非摂動ハミルトニアンの固有状態になっている場合を考える<sup>4</sup>:

$$H_0 |\Psi(t_0)\rangle_I = E_0 |\Psi(t_0)\rangle_I \quad (9.27)$$

さらに \$t\_0 \sim -\infty\$ であることから時間発展演算子を用いてハイゼンベルグ描像は

$$|\Psi\rangle_H = |\Psi(0)\rangle_I = U_\epsilon(0, t_0) |\Psi(t_0)\rangle_I = U_\epsilon(0, -\infty) |\Psi(t_0)\rangle_I \quad (9.28)$$

と書ける。これは、相互作用系の状態が非摂動系の固有状態を用いて表現できたことを意味している。

あとは \$\epsilon\$ について考える必要がある。そもそもこの系は 2 つの粒子の散乱実験をテーマにしたようなものである。2 つの粒子が \$t = 0\$ で衝突することを考えると、相互作用が効いてくるのは \$t = 0\$ 近傍のみであって、それ以外は自由粒子とほぼ同じ振る舞いをするだろうというアイデアから断熱因子は導入されている。粒子を平面波的に記述するためにも \$\epsilon \to 0\$ としたいが、この極限のもとで果たして (9.28) は意味ある結果を与えるのだろうか?

これに答えるのが Gell-Mann-Low の定理である。以降は基底状態に対する議論であることに注意。

### 9.3.2 概要

Gell-Mann-Low の定理が主張することは

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{U_\epsilon(0, -\infty) |\phi_0(-\infty)\rangle_I}{\langle \phi_0(-\infty) | U_\epsilon(0, -\infty) | \phi_0(-\infty) \rangle_I} = \frac{|\Psi_0\rangle_H}{\langle \phi_0(-\infty) | \Psi_0 \rangle_H} \quad (9.29)$$

<sup>2</sup>超演算子形式のままだとトレース演算になるのでなかなか面倒。

<sup>3</sup>たとえば \$1x - 2x\$ が couple すると対応するデルタ関数 \$\delta(1-2)\$ が出てきて \$e^{-i(k\_1-k\_2)(x-y)}, e^{i(\omega\_1-\omega\_2)(t-s)}\$ が消える。これは (9.21) の右辺第一項にあたる項の起源。一方で \$x-y\$ の cross coupling があると exponential の空間・時間成分が消えずに残る。これが (9.21) の右辺第二項にあたる。

<sup>4</sup>相互作用描像も自由粒子のハイゼンベルグ描像と一致するという近似できる。

が存在するなら固有状態  $|\Psi_0\rangle_H$  は well-defined であり, 固有値は

$$E - E_0 = \frac{I \langle \phi_0(-\infty) | H_I | \Psi_0 \rangle_H}{I \langle \phi_0(-\infty) | \Psi_0 \rangle_H} \quad (9.30)$$

で与えられるということである。ここで添字の 0 は真空を意味している。また,  $|\phi_0(-\infty)\rangle$  は非摂動ハミルトニアンの固有状態になっているので解析的に求めることができる。あとは, (9.29) が成立するかどうかが問題になる。

これが成立すれば Free Hamiltonian  $H_0$  と Full Hamiltonian  $H$  をユニタリー演算子でつなぐことができる。つまり, Free Hamiltonian の固有状態  $|\Phi_0\rangle$  を求めたあとにユニタリー演算子  $U(0, -\infty)$  を All order で取り入れれば Full Hamiltonian の固有状態が求まることになる。もちろん All order は無理なので摂動的に取り入れることになる。これが場の理論における摂動論である。

### 9.3.3 証明

## 9.4 Tips

忘れやすいことをメモしておきます。

### 9.4.1 Heisenberg 描像

Schrödinger 描像は時間発展の情報が状態にある:

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (9.31)$$

$$\langle \hat{A} \rangle = {}_S \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle_S \quad (9.32)$$

Schrödinger 方程式の形式解

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (9.33)$$

を用いると期待値は

$$\langle \hat{A} \rangle = {}_S \langle \psi(0) | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi(0) \rangle_S \quad (9.34)$$

と書くことができる。Heisenberg 描像における演算子と状態は

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (9.35)$$

$$|\psi\rangle_H = |\psi(0)\rangle_S \quad (9.36)$$

### 9.4.2 相互作用描像

ハミルトニアンを

$$H = H_0 + H_I \quad (9.37)$$

のように非摂動部  $H_0$  と摂動部  $H_I$  に分割する。分割の方法は任意だが, 非摂動部を解析的に解ける形にしておくのが普通<sup>5</sup>。Heisenberg 描像の時と同じように形式解を代入する:

$$|\psi(t)\rangle_S = e^{-i(\hat{H}_0 + \hat{H}_I)t/\hbar} |\psi(0)\rangle_S \quad (9.38)$$

<sup>5</sup>たとえば生成消滅演算子の 2 次で記述できれば Bogoliubov 変換を通して対角化が可能。IZMF においては真空を  $|0\rangle_{\text{ex}} |\Psi_0\rangle$  のように励起部とゼロモード部の直積にする。ゼロモードの真空は非摂動部にゼロモードの高次を取り込んで場の分割条件を守るようにカウンター項を決定する。ゼロモードは生成消滅演算子の代数を持っていないので取り扱いとは本質的に異なることに注意。

ここで、相互作用描像の状態を

$$|\psi(t)\rangle_I \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_S = e^{-i\hat{H}_I t/\hbar} |\psi(0)\rangle_S \quad (9.39)$$

$$= e^{-i\hat{H}_I t/\hbar} |\psi\rangle_H \quad (9.40)$$

と定義する。つまり、相互作用描像の状態は摂動部  $H_I$  (相互作用ハミルトニアン) による時間変化を担っている。一方で相互作用描像の演算子は

$$A_I(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A}_S e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (9.41)$$

で定義され、非摂動部  $H_0$  による時間変化を担っている。

この描像においては  $t = 0$  で真空は Heisenberg 描像と一致し、演算子の時間発展は Heisenberg 方程式

$$i\hbar \partial_t A_I(t) = [A_I(t), H_0] \quad (9.42)$$

で記述される。ここで重要なのが、演算子の時間発展は非摂動ハミルトニアンで記述されているということ。演算子の時間発展を追うのは難しくなさそう<sup>6</sup>。一方で状態の時間発展は

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle_I = H_I |\psi(t)\rangle_I \quad (9.43)$$

のように、解析的に解けない相互作用ハミルトニアンで記述されているのでそんなに簡単ではない。よって、状態は摂動展開によって評価することになる。

### 9.4.3 デルタ関数の Fourier 変換表示

1 次元 Fourier 変換

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{f}(k) e^{ikx} \quad (9.44)$$

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx f(x) e^{-ikx} \quad (9.45)$$

を相互に代入する:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx' f(x') e^{-ikx'} \right) e^{ikx} \quad (9.46)$$

$$= \int dx' \left( \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x-x')} \right) f(x') \quad (9.47)$$

これより

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x-x')} \quad (9.48)$$

$$(9.49)$$

ひいては

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ikx} \quad (9.50)$$

であることがわかる。「1 の Fourier 変換は  $2\pi\delta(x)$  だ」という表現もできる。

<sup>6</sup>もちろん非摂動ハミルトニアンが解析的に解ける形である場合に限る

#### 9.4.4 $k$ が離散・連続の場合の $\langle a_k^\dagger a_{k'} \rangle$

有限体積の場合

まずは  $[\psi(x), \psi^\dagger(x')] = \delta(x - x')$  を満たす一般的な演算子  $\psi(x)$  を離散変数  $k_n$  で展開した場合を考える。体積  $L$  の一次元系について:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} e^{ik_n x} a_{k_n} \quad (9.51)$$

ただし  $k_n = \frac{2\pi}{L}n$  とする。すると,

$$\int dx \psi(x) e^{-ik_n x} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n'} \int dx e^{-i(k_n - k_{n'})x} a_{k_{n'}} \quad (9.52)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n'} L \delta_{nn'} a_{k_{n'}} = \sqrt{L} a_{k_n} \quad (9.53)$$

$$\therefore a_{k_n} = \frac{1}{\sqrt{L}} \int dx \psi(x) e^{-ik_n x} \quad (9.54)$$

このとき交換関係は

$$[a_{k_n}, a_{k_{n'}}^\dagger] = \frac{1}{L} \int dx dx' e^{-i(k_n x - k_{n'} x')} [\psi(x), \psi^\dagger(x')] = \frac{1}{L} \int dx e^{-i(k_n - k_{n'})x} = \delta_{nn'} \quad (9.55)$$

であり, 確かに本文の記述の通り,

$$\langle a_{k_n}^\dagger a_{k_n} \rangle = \frac{1}{e^{\beta\omega_{k_n}} - 1} \equiv n_{k_n} \quad (9.56)$$

である。

熱力学極限

$L \rightarrow \infty$ , つまり  $k$  の連続極限を取ることを考える。Fourier 変換から

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} a_k \quad (9.57)$$

となって欲しい。交換関係が  $[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta(k - k')$  に変わる。これを守るために,  $a_{k_n} \rightarrow c a_k$  となる  $c$  を求める。 $\sum_n \Delta k e^{ik_n x} \rightarrow \int dk e^{ikx}$  かつ  $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$  であることを用いて

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \frac{2\pi}{L} e^{ik_n x} a_{k_n} \frac{L}{2\pi} \rightarrow \frac{\sqrt{L}}{2\pi} \int dk e^{ikx} c a_n \quad (9.58)$$

となる。これより

$$c = \sqrt{\frac{2\pi}{L}} \quad (9.59)$$

以上より,

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \frac{L}{2\pi} n_k \quad (9.60)$$

であることがわかる。今回は体積無限の系を考えているので,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx = L \quad (9.61)$$

であることから,

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} \quad (9.62)$$

$$\Rightarrow \delta(0) = \frac{1}{2\pi} \int dk = \frac{L}{2\pi} \quad (9.63)$$

つまり式 (9.64) はデルタ関数を用いて

$$\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \delta(0) n_k \quad (9.64)$$

と表現できる.

#### 9.4.5 デルタ関数が体積になること

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx = V \quad (9.65)$$

であり, デルタ関数の Fourier 変換表示

$$\delta(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk e^{ikx} \quad \Rightarrow \quad \delta(0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int dx = \frac{V}{(2\pi)^3} \quad (9.66)$$

#### 9.4.6 ハミルトニアンの対角化と Bogoliubov-de Gennes 方程式

対角化とは

ハミルトニアンの対角化とはハミルトニアンを生成消滅演算子を用いて

$$H = \sum_{\ell} \omega_{\ell} a_{\ell} a_{\ell}^{\dagger} \quad (9.67)$$

と表現することである.  $\omega_{\ell} > 0$  であれば  $a_{\ell}$  が消去する  $|0\rangle$  が  $H$  の基底状態であることは量子力学における調和振動子の議論から明らか.  $\omega_{\ell} < 0$  である場合は  $a_{\ell}$  でいくらでもエネルギーを下げるできるので,  $a_{\ell}$  が張る Fock 空間には基底状態が存在しない<sup>7</sup>.

正準交換関係を満たす場の演算子から生成消滅演算子を構成するのは簡単. 正規直交完全系  $w_{\ell}$  で場の演算子  $\varphi$  を展開する:

$$\varphi = \sum_{\ell} a_{\ell}(t) w_{\ell}(\mathbf{x}), \quad a_{\ell} = \int d\mathbf{x} w_{\ell}(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}) \quad (9.68)$$

ただし

$$\sum_{\ell} w_{\ell}(\mathbf{x}) w_{\ell'}^*(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \int d\mathbf{x} w_{\ell}(\mathbf{x}) w_{\ell'}^*(\mathbf{x}) = \delta_{\ell\ell'} \quad (9.69)$$

である.  $[\varphi(\mathbf{x}), \varphi^{\dagger}(\mathbf{x}')] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  から

$$[a_{\ell}, a_{\ell'}^{\dagger}] = \delta_{\ell\ell'} \quad (9.70)$$

であることがわかり, この  $a, a^{\dagger}$  は生成消滅演算子の代数を満たしている. つまり, 対角化のためには (9.67) となるような適切な  $w_{\ell}$  を見つければ良い.  $w_{\ell}$  が変わると  $a_{\ell}$  の定義も変わるので, (9.68) で展開した時  $a_{\ell}$  が生成消滅演算子になるように構成しなければいけない.

---

<sup>7</sup> こういうのを Landau 不安定性という.

ここであるハミルトニアン

$$H_0 = \int d\mathbf{x} \varphi^\dagger(\mathbf{x}) h_0(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}) \quad (9.71)$$

を対角化したい.  $h_0$  の固有値方程式

$$h_0(\mathbf{x}) w_\ell(\mathbf{x}) = \omega_\ell w_\ell(\mathbf{x}) \quad (9.72)$$

から正規直交完全系をつくり, それでもって  $\varphi$  を展開する:

$$H_0 = \int d\mathbf{x} \sum_{\ell\ell'} a_\ell^\dagger(t) w_\ell^*(\mathbf{x}) h_0(\mathbf{x}) w_{\ell'}(\mathbf{x}) a_{\ell'}(t) \quad (9.73)$$

$$= \int d\mathbf{x} \sum_{\ell\ell'} a_\ell^\dagger(t) w_\ell^*(\mathbf{x}) \omega_{\ell'} w_{\ell'}(\mathbf{x}) a_{\ell'}(t) \quad (9.74)$$

$$= \sum_{\ell\ell'} \omega_{\ell'} a_\ell^\dagger(t) a_{\ell'}(t) \delta_{\ell\ell'} \quad (9.75)$$

$$= \sum_{\ell} \omega_{\ell} a_\ell^\dagger(t) a_{\ell}(t) \quad (9.76)$$

対角化完了. つまり, (9.71) のようなハミルトニアンは  $h_0$  の固有値問題を解き, その固有完全系でもって場の演算子を展開することで対角化ができる. これがほぼ唯一の対角化の方法である.

#### Bogoliubov-de Gennes 方程式

冷却原子系のハミルトニアンの非摂動部を doublet で書くと

$$H_u = \int d\mathbf{x} \begin{pmatrix} \varphi^\dagger & -\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{L} & \mathcal{M} \\ -\mathcal{M}^* & -\mathcal{L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi^\dagger \end{pmatrix} \quad (9.77)$$

$$= \int d\mathbf{x} \bar{\Phi} T \Phi \quad (9.78)$$

となる<sup>8</sup>. 先ほどのアナロジーから,  $T$  についての固有値方程式を解き, その固有関数系で  $\Phi$  を展開すれば非摂動部の対角化が可能である. この  $T$  についての固有値方程式が Bogoliubov-de Gennes 方程式である.  $T$  が一般にエルミートでないことに注意.

#### 9.4.7 一様系の Bogoliubov-de Gennes 方程式

一様系では Bogoliubov 変換と Bogoliubov-de Gennes 方程式による対角化は等価であり, 解析的に計算が可能. 場の演算子を Fourier 変換:

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int d\mathbf{k} b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (9.79)$$

ここで場を

$$\psi = \xi + \varphi \quad (9.80)$$

のように分割している. これを用いると冷却原子系の非摂動ハミルトニアンは

$$H_2 = \int d\mathbf{k} \begin{pmatrix} b_{\mathbf{k}}^\dagger & -b_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{\mathbf{k}} & \mathcal{M} \\ -\mathcal{M}^* & -\mathcal{L}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\mathbf{k}} \\ b_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \quad (9.81)$$

<sup>8</sup> マイナスをつけたのは doublet の  $\Phi, \bar{\Phi}$  が正準交換関係を満たすようにするため

ただし

$$\mathcal{L}_k = \varepsilon_k + gn_0, \mathcal{M} = gn_0 e^{2i\theta} \quad (9.82)$$

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \xi(\boldsymbol{x}) = \sqrt{n_0} e^{i\theta}, \mu = gn_0 \quad (9.83)$$

つまり,  $k$  表示された BdG 行列の固有値問題を解けばよいことになり, さらに  $\mathcal{L}_k, \mathcal{M}$  は演算子を含まないので簡単である. これを解くと

$$\omega_k = \sqrt{\varepsilon_k(\varepsilon_k + 2gn_0)} \quad (9.84)$$

を得る.

## 第10章 研究 - 3次元一様有限温度系のゼロモード

2015年度夏の学校. 有限温度ゼロモード系における自己無撞着計算がメイン. 有限温度系で重要な計算や考え方が頻出.

また, 夏の学校時点では凝縮粒子数の定義にゼロモード演算子の期待値を加えていなかったため, Depletion は相互作用定数  $g$  が小さいところで持ち上がる結果を得た. 凝縮粒子数の定義を変えたところ, Depletion は相互作用定数  $g$  に対してロバストになった. こっちのほうの方が自然だろうというのが今のところの結論.

### 10.1 問題設定

粒子間の相互作用を考慮に入れてゼロモード演算子の期待値を計算をする. この効果のことを量子補正と呼ぶ. 相互作用がある場合はゼロ温度でも全ての粒子が凝縮するわけではないことから, 今回は主に凝縮粒子数と非凝縮粒子数の割合 (depletion) が相互作用によってどのように変わるか, またゼロモードの寄与がある場合とない場合で結果がどのように変わるかを見る.

まずは, 量子補正を考慮した方程式の定式化から入る.

#### 10.1.1 冷却原子気体のハミルトニアン

冷却原子気体のハミルトニアンは以下のように与えられる.

$$H_H = \int d\mathbf{x} \left[ \psi_H^\dagger (h_0 - \mu) \psi_H + \frac{g}{2} \psi_H^\dagger \psi_H^\dagger \psi_H \psi_H \right] \quad (10.1)$$

添字の H は Heisenberg 描像であることを示している.  $\mu$  は化学ポテンシャル,  $g$  は相互作用定数,  $h_0$  は

$$h_0 = -\frac{\nabla^2}{2m} \quad (10.2)$$

であるような一様系を取り扱う. 場の演算子  $\psi_H$  は同時刻交換関係

$$\left[ \psi_H(\mathbf{x}, t), \psi_H^\dagger(\mathbf{x}', t) \right] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (10.3)$$

$$\left[ \psi_H(\mathbf{x}, t), \psi_H(\mathbf{x}', t) \right] = 0, \quad \left[ \psi_H^\dagger(\mathbf{x}, t), \psi_H^\dagger(\mathbf{x}', t) \right] = 0 \quad (10.4)$$

を満たす. このとき,  $\psi_H$  は真空期待値を持つ:

$$\langle 0 | \psi_H(\mathbf{x}) | 0 \rangle = \xi(\mathbf{x}) \quad (10.5)$$

$\xi$  は秩序変数と呼ばれ,  $|\xi|^2$  は凝縮体の密度と解釈できる. 秩序変数は今回は時間に依存しないと仮定する. 場の演算子を以下のように分割する:

$$\psi_H = \xi + \varphi_H \quad (10.6)$$

$\xi$  は凝縮体を記述する古典場,  $\varphi_H$  は非凝縮体を記述する場の演算子と解釈できる. これは同時刻交換関係

$$\left[ \varphi_H(\mathbf{x}, t), \varphi_H^\dagger(\mathbf{x}', t) \right] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (10.7)$$

を満たしている.



ハミルトニアンを  $\varphi_H$  の次数について整理すると

$$H_{H,1} = \int d\mathbf{x} \left[ \varphi_H^\dagger (h_0 - \mu + g|\xi|^2) \xi + \varphi_H (h_0 - \mu + g|\xi|^2) \xi^* \right] \quad (10.8)$$

$$H_{H,2} = \int d\mathbf{x} \left[ \varphi_H^\dagger \mathcal{L} \varphi_H + \frac{1}{2} \varphi_H \mathcal{M}^* \varphi_H + \frac{1}{2} \varphi_H^\dagger \mathcal{M} \varphi_H^\dagger \right] \quad (10.9)$$

$$H_{H,3} = g \int d\mathbf{x} \left[ \xi^* \varphi_H^\dagger \varphi_H \varphi_H + \xi \varphi_H^\dagger \varphi_H^\dagger \varphi_H \right] \quad (10.10)$$

$$H_{H,4} = \frac{g}{2} \int d\mathbf{x} \varphi_H^\dagger \varphi_H^\dagger \varphi_H \varphi_H \quad (10.11)$$

であり

$$\mathcal{L} = h_0 - \mu + 2g|\xi|^2, \quad \mathcal{M} = g\xi^2 \quad (10.12)$$

である。

### 10.1.2 相互作用描像

系が十分低温であり相互作用  $g$  が小さいとする。この場合  $H_{H,3}, H_{H,4}$  の効果は小さいとして、非摂動ハミルトニアンを  $H_{H,u} = H_{H,1} + H_{H,2}$  のように選び、Heisenberg 描像から相互作用描像に移行する。まず

$$i \frac{d}{dt} U(t, t_0) = U(t, t_0) H_{H,p}, \quad U(t_0, t_0) = 1, \quad H_{H,p} = H_H - H_{H,u} \quad (10.13)$$

を満たすようなユニタリー演算子  $U(t, t_0)$  を考え、Heisenberg 描像の任意の演算子  $A_H(t)$  を用いて相互作用描像の演算子を

$$A(t) = U(t, t_0) A_H(t) U^{-1}(t, t_0) \quad (10.14)$$

と定義する。 $t_0$  は Heisenberg 描像と相互作用描像が一致する時間である。Heisenberg 方程式は

$$i \frac{d}{dt} A(t) = [A(t), H_u(t)] \quad (10.15)$$

である。ここで  $A = H_u$  と代入すると時間に依存しないことがわかるので、 $H_u = H_{H,u}$  である。

$U(t, t_0)$  の時間発展は  $H_{H,p} = H_{H,3} + H_{H,4}$  に依存し、かつその効果が小さいことから場の演算子の摂動ゼロ次は

$$\langle 0 | \varphi_H(x) | 0 \rangle = \langle 0 | U^{-1}(t, t_0) \varphi(x) U(t, t_0) | 0 \rangle \simeq \langle 0 | \varphi(x) | 0 \rangle \quad (10.16)$$

となっている。また相互作用描像の Heisenberg 方程式より

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) = [\varphi(x), H_u] \quad (10.17)$$

であることがわかる。これ以降  $x = (x, t)$  とする。つまり、場の分割条件を

$$\langle 0 | \varphi_H(x) | 0 \rangle \simeq \langle 0 | \varphi(x) | 0 \rangle = 0 \quad (10.18)$$

とした場合、この性質が保存するためには式 (10.17) より

$$\langle 0 | [\varphi(x), H_u] | 0 \rangle = 0 \quad (10.19)$$

が必要となる。ここから定常 Gross-Pitaevskii 方程式 (GP 方程式)

$$[h_0 - \mu + g|\xi|^2] \xi = 0 \quad (10.20)$$

が導かれる。

### 10.1.3 量子補正

量子補正を取り入れる場合は場の分割条件を  $\langle 0 | [\varphi, H_u] | 0 \rangle = 0$  ではなく

$$\langle 0 | [\varphi, H] | 0 \rangle = 0 \quad (10.21)$$

とする. これはもともとの場の分割条件  $\langle 0 | \varphi_H | 0 \rangle = 0$  の摂動 1 次までを取り入れたことになっている<sup>1</sup>. これを具体的に計算する:

$$\begin{aligned} \langle 0 | [\varphi, H_1] | 0 \rangle &= \langle 0 | \int d\mathbf{x} [\varphi, \{\varphi^\dagger \mathcal{L} \xi + \varphi \mathcal{L} \xi^*\}] | 0 \rangle \\ &= (h_0 - \mu + g|\xi|^2) \xi \end{aligned} \quad (10.22)$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | [\varphi, H_2] | 0 \rangle &= \langle 0 | \int d\mathbf{x} \left[ \varphi, \left\{ \varphi^\dagger \mathcal{L} \varphi + \frac{1}{2} \varphi \mathcal{M}^* \varphi + \frac{1}{2} \varphi^\dagger \mathcal{M} \varphi^\dagger \right\} \right] | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \mathcal{L} \varphi + \mathcal{M} \varphi^\dagger | 0 \rangle = 0 \end{aligned} \quad (10.23)$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | [\varphi, H_3] | 0 \rangle &= \langle 0 | g \int d\mathbf{x} [\varphi, \{\xi^* \varphi^\dagger \varphi \varphi + \xi \varphi^\dagger \varphi^\dagger \varphi\}] | 0 \rangle \\ &= g \langle 0 | \varphi \varphi | 0 \rangle \xi^* + 2g \langle 0 | \varphi^\dagger \varphi | 0 \rangle \xi \end{aligned} \quad (10.24)$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | [\varphi, H_4] | 0 \rangle &= \langle 0 | \frac{g}{2} \int d\mathbf{x} [\varphi, \varphi^\dagger \varphi^\dagger \varphi \varphi] | 0 \rangle \\ &= g \langle 0 | \varphi^\dagger \varphi \varphi | 0 \rangle \end{aligned} \quad (10.25)$$

ここで  $\varphi$  の 3 次の期待値の寄与は小さいものとする, 式 (10.21) より

$$[h_0 - \mu + g|\xi|^2 + 2g \langle 0 | \varphi^\dagger \varphi | 0 \rangle] \xi + g \langle 0 | \varphi \varphi | 0 \rangle \xi^* = 0 \quad (10.26)$$

これが量子補正を考慮した GP 方程式である. ここでゼロモード部と励起部に分けて記述すると

$$\begin{aligned} \langle 0 | \varphi^\dagger \varphi | 0 \rangle &= {}_{\text{ex}} \langle 0 | \varphi_{\text{ex}}^\dagger \varphi_{\text{ex}} | 0 \rangle_{\text{ex}} + |\xi|^2 \langle \Psi | Q^2 | \Psi \rangle + |\eta|^2 \langle \Psi | P^2 | \Psi \rangle \\ &\quad - \text{Re} \xi^* \eta - \text{Im} \xi^* \eta (QP + PQ) \end{aligned} \quad (10.27)$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | \varphi \varphi | 0 \rangle &= {}_{\text{ex}} \langle 0 | \varphi_{\text{ex}} \varphi_{\text{ex}} | 0 \rangle_{\text{ex}} - \xi^2 \langle \Psi | Q^2 | \Psi \rangle + \eta^2 \langle \Psi | P^2 | \Psi \rangle \\ &\quad - i \xi \eta \langle \Psi | QP + PQ | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (10.28)$$

となる. ここで  $\varphi = -iQ\xi + P\eta + \varphi_{\text{ex}}$  とし, かつ  $|0\rangle = |0\rangle_{\text{ex}} \otimes |\Psi\rangle$  としている.  $Q, P$  は正準交換関係  $[Q, P] = i$  を満たすゼロモード演算子, 非摂動ハミルトニアン  $H_u$  の励起部  $H_u^{\text{ex}}$ , ゼロモード部  $H_u^{QP}$  の固有状態をそれぞれ  $|0\rangle_{\text{ex}}, |\Psi\rangle$  である.

GP 方程式が補正を受けたので, Bogoliubov-de Gennes 方程式 (BdG 方程式) にも補正を加える. 具体的には

$$\mathcal{L} = h_0 - \mu + 2g(|\xi|^2 + \langle 0 | \varphi^\dagger \varphi | 0 \rangle) \quad (10.29)$$

$$\mathcal{M} = g(\xi^2 - \langle 0 | \varphi \varphi | 0 \rangle) \quad (10.30)$$

となっていれば  $\mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} \xi & -\xi^* \end{pmatrix}$  がゼロモードであることを守れる. ここで非摂動ハミルトニアンを

$$H_u = H_1 + H_2 + [H_3 + H_4]_{QP} - \delta\mu P - \delta\nu Q + \delta H \quad (10.31)$$

と取り, カウンター項  $\delta H$  を

$$\delta H = g \int d\mathbf{x} \left[ 2\varphi^\dagger \varphi \langle 0 | \varphi^\dagger \varphi | 0 \rangle - \frac{1}{2} \varphi \varphi \langle 0 | \varphi^\dagger \varphi^\dagger | 0 \rangle - \frac{1}{2} \varphi^\dagger \varphi^\dagger \langle 0 | \varphi \varphi | 0 \rangle \right] \quad (10.32)$$

と選ぶことで,  $H_u^{QP}$  は量子補正を考慮しない場合と同じ形を取ることができる. 式 (11.53)(10.30) より共役モード方程式  $\begin{pmatrix} \mathcal{L} & \mathcal{M} \\ -\mathcal{M} & -\mathcal{L} \end{pmatrix} \mathbf{y}_{-1} = I \mathbf{y}_0$  は

$$[h_0 - \mu + 2g(|\xi|^2 + \langle 0 | \varphi^\dagger \varphi | 0 \rangle)] \eta + g(\xi^2 - \langle 0 | \varphi \varphi | 0 \rangle) \eta^* = I \xi \quad (10.33)$$

となる. 以上の定式化を用いて各物理量の計算を行っていく.

<sup>1</sup> 実は正確な表現ではない.

## 10.2 自己無撞着ループ

前節で導いた関係式に現れる物理量は自己無撞着に決定されるが、その関係式同士のつながりは複雑である。以下では 3 次元一様有限温度系に現れる自己無撞着ループについてまとめる。2 章のはなしを有限温度に拡張するために期待値のとり方を変えていることに注意。

### 0. 初期設定

$V_t = \langle \varphi^\dagger \varphi \rangle = 0, V_a = \langle \varphi \varphi \rangle = 0$  からスタート

↓

### 1. GP 方程式

GP 方程式より  $\xi, \mu$  を求める

↓

### 2. 共役モード方程式

共役モード方程式より  $\eta, I$  を求める

↓

### 3. BdG 方程式

BdG 方程式 (Bogoliubov 変換) より  $u_l, v_l$  を求める

↓

### 4. ゼロモード方程式

ゼロモード方程式より固有関数  $\langle q | \Psi \rangle$  を求め、 $\langle P \rangle$  を求める

⇕

$\langle P \rangle = 0$  となるように自己無撞着に  $\delta\mu$  を決定

↓

### 5. ゼロモード演算子

$\langle Q^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$  を求める

↓

### 6. 熱平均・異常平均

$V_t, V_a$  を求める。

↓

### ループ/終了条件

「1. GP 方程式」に戻って計算を繰り返す。 $V_t, V_a$  の値が変化しなくなったら終了。

### 10.2.1 GP 方程式

入力:  $V_t, V_a$

$\xi, \eta$  は実数とする．量子補正を含む GP 方程式は

$$[-\mu + g\xi^2 + g(2V_t + V_a)]\xi = 0 \quad (10.34)$$

である．今回は一様系を扱うため微分項  $h_0$  がなくなり，簡単な代数方程式になる．これを  $\mu$  について解く：

$$\mu = g(\xi^2 + 2V_t + V_a) \quad (10.35)$$

ここで粒子数  $N$  が保存するためには

$$\begin{aligned} N &= \int d\mathbf{x} \langle \psi^\dagger \psi \rangle \\ &= \int d\mathbf{x} \langle (\xi + \varphi^\dagger)(\xi + \varphi) \rangle \\ &= V(\xi^2 + V_t) \end{aligned} \quad (10.36)$$

を満たさなければならない．ここでは分割条件から  $\langle \varphi \rangle, \langle \varphi^\dagger \rangle$  はゼロになっている．したがって，

GP 方程式

$$\xi = \sqrt{\frac{N}{V} - V_t} \quad (10.37)$$

$$\mu = g\left(\frac{N}{V} + V_t + V_a\right) \quad (10.38)$$

となることがわかる．

### 10.2.2 共役モード方程式

入力:  $V_a, V_t, \xi, \mu$

量子補正を含む共役モード方程式は

$$[-\mu + g(3\xi^2 + 2V_t - V_a)]\eta = I\xi \quad (10.39)$$

である．GP 方程式と同様の理由で代数方程式となっている．これを  $I$  について解く：

$$I = \frac{\eta}{\xi} [-\mu + g(3\xi^2 + 2V_t - V_a)] \quad (10.40)$$

ここでゼロモードと共役モードの規格化条件から

$$\begin{aligned} (y_0, y_{-1}) &= \int d\mathbf{x} \begin{pmatrix} \xi & -\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta \\ \eta \end{pmatrix} \\ &= 2V\xi\eta = 1 \end{aligned} \quad (10.41)$$

を満たさなければならない．したがって

共役モード方程式

$$\eta = \frac{1}{2V\xi} \quad (10.42)$$

$$I = \frac{-\mu + g(3\xi + 2V_t - V_a)}{2V\xi^2} \quad (10.43)$$

となることがわかる．

### 10.2.3 BdG 方程式

入力:  $V_a, V_t, \xi, \mu$

一様系では Bogoliubov 変換から  $u_l, v_l$  を求めることができる.

$$\varphi = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{k} b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}x} \quad (10.44)$$

と展開すると, ハミルトニアン の 2 次  $H_2$  は

$$H_2 = \frac{1}{2} \int d\mathbf{k} [2\mathcal{L}_k b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \mathcal{M}(b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger + b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}})] \quad (10.45)$$

とかける. ただし

$$\mathcal{M} = g(\xi^2 - V_a) \quad (10.46)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_k &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \mu + 2g(\xi^2 + V_t) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \mathcal{M} \end{aligned} \quad (10.47)$$

である. ここで

$$H_2 = \int d\mathbf{k} \omega_k a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (10.48)$$

となるような

$$a_{\mathbf{k}} = u_k b_{\mathbf{k}} - v_k b_{-\mathbf{k}} \quad (10.49)$$

を満たす  $u_k, v_k$  を探す.  $a_k$  は生成消滅演算子の代数を満たさなければならないので

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = 1 \quad (10.50)$$

が必要であり, 式 (10.49) を  $b$  について解いて  $H_2$  に代入することにより, 対角化の条件は

$$2\mathcal{L}_k u_k v_k - \mathcal{M}(u_k^2 + v_k^2) = 0 \quad (10.51)$$

であることがわかる. これらを連立させることにより

Bogoliubov 変換

$$\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}} \begin{pmatrix} \sqrt{\mathcal{L}_k + \omega_k} \\ -\sqrt{\mathcal{L}_k - \omega_k} \end{pmatrix} \quad (10.52)$$

$$\omega_k = \sqrt{\mathcal{L}_k^2 - \mathcal{M}^2} \quad (10.53)$$

を得る.

### 10.2.4 ゼロモード方程式

入力:  $\xi, \eta, I$

今回考えるゼロモード方程式は以下:

$$H_u^{QP} |\Psi_m\rangle = E_m |\Psi_m\rangle \quad (10.54)$$

ただし

$$H_u^{QP} = -(\delta\mu + 4C)P + \frac{I - 4D}{2}P^2 + 2BQPQ + 2DP^3 + \frac{1}{2}AQ^4 - 2BQ^2 + CQP^2Q + \frac{1}{2}EP^4 \quad (10.55)$$

である. これを  $q$  空間で差分化して数値的に解く.  $q$  空間での波束の幅はおよそ  $N_0^{-1/3}$  のオーダーであることを基に系のサイズを決める.

$$\Psi_q = \sqrt{\Delta q} \langle q | \Psi \rangle \quad (10.56)$$

として差分化すると, ハミルトニアン  $H_u^{QP}$  は以下のようになる

$$H_u^{QP} = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_0 & \gamma_0 & & & \\ \beta_0^* & \alpha_1 & \beta_1 & \gamma_1 & & \\ \gamma_0^* & \beta_1^* & \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & \\ & \gamma_1^* & \beta_2^* & \alpha_3 & \ddots & \ddots \\ & & \gamma_2^* & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (10.57)$$

$$\alpha_q = \frac{3E}{\Delta q^4} + \frac{I - 4D}{\Delta q^2} + (2C - 2\Delta q^2 B)(q - \frac{N_q}{2})^2 + \frac{\Delta q^4}{2} Aq^4 \quad (10.58)$$

$$\beta_q = -\frac{2E}{\Delta q^4} - \frac{2iD}{\Delta q^3} - \frac{I - 4D}{2\Delta q^2} + \frac{i(\delta\mu + 4C)}{2\Delta q} - (C + i\Delta q B)(q - \frac{N_q}{2})(q - \frac{N_q}{2} + 1) \quad (10.59)$$

$$\gamma_q = \frac{E}{2\Delta q^4} + \frac{iD}{\Delta q^3} \quad (10.60)$$

有限温度系での期待値の取り方に注意すると

$$\begin{aligned} \langle P \rangle &= \frac{\text{Tr} \rho P}{\text{Tr} \rho} \\ &= \frac{\sum_m \langle \Psi_m | P | \Psi_m \rangle e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \\ &= \frac{\sum_m \sum_q \text{Im} \Psi_q^{*,m} \Psi_{q+1}^m e^{-\beta E_m}}{\Delta q \sum_m e^{-\beta E_m}} \end{aligned} \quad (10.61)$$

ただし密度演算子  $\rho$  は

$$\rho = e^{-\beta H_u^{QP}} \quad (10.62)$$

である. 場の分割条件から  $\langle P \rangle = 0$  を満たさなければならないので, それに合わせて自己無撞着的に  $\delta\mu$  を決定することになる. 数値計算上では二分法を用いる.

### 10.2.5 $\langle Q^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$ の計算

前節で決定された  $\delta\mu$  を基に求めたゼロモード固有関数  $\Psi_q^m$  を用いて  $\langle P \rangle$  と同様の計算で  $\langle Q^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$  を求める.

——— ゼロモード演算子の有限温度期待値 ———

$$\langle Q^2 \rangle = \frac{\Delta q^2 \sum_m \sum_q (q - \frac{N_q}{2}) |\Psi_q^m|^2 e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \quad (10.63)$$

$$\langle P^2 \rangle = \frac{2 \sum_m \sum_q (|\Psi_q^m|^2 - \text{Re} \Psi_q^{*,m} \Psi_{q+1}^m) e^{-\beta E_m}}{\Delta q^2 \sum_m e^{-\beta E_m}} \quad (10.64)$$

### 10.2.6 熱平均 $V_t$ ・ 異常平均 $V_a$

入力:  $\xi, \eta, u_l, v_l, \langle Q^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$

熱平均 ・ 異常平均は以下の通り:

$$V_t = \langle \varphi^\dagger \varphi \rangle = {}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}}^\dagger \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}} + \xi^2 \langle Q^2 \rangle + \eta^2 \langle P^2 \rangle - \xi \eta \quad (10.65)$$

$$V_a = \langle \varphi \varphi \rangle = {}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}} \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}} - \xi^2 \langle Q^2 \rangle + \eta^2 \langle P^2 \rangle + i \xi \eta \langle QP + PQ \rangle \quad (10.66)$$

$\varphi_{\text{ex}}$  を以下のように展開する:

$$\varphi_{\text{ex}} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k} [a_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger v_{\mathbf{k}}^*] e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (10.67)$$

ここで  $a_{\mathbf{k}}$  が消去する真空を  $|0\rangle_k$ , 粒子数状態を

$$|n\rangle = |n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes |n_3\rangle_3 \otimes \dots = \bigotimes_k |n_k\rangle_k \quad (10.68)$$

とする.

以上から  ${}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}}^\dagger \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}}$ ,  ${}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}} \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}}$  の計算をしていくために励起モードの期待値計算についてまとめる.

$${}_{\text{ex}} \langle A \rangle_{\text{ex}} = \frac{\text{Tr} \rho A}{\text{Tr} \rho}, \quad \rho = e^{-\beta H_u^{\text{ex}}} \quad (10.69)$$

であり

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho &= \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \langle n | e^{-\beta \sum_k \omega_k a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}} | n \rangle = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \langle n | e^{-\beta \sum_k \omega_k n_k} | n \rangle = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \prod_k e^{-\beta \omega_k n_k} \\ &= \prod_k \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots e^{-\beta \omega_k n_k} = \prod_k \sum_{n_k} e^{-\beta \omega_k n_k} = \prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta \omega_k}} \end{aligned} \quad (10.70)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} &= \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \langle n | e^{-\beta \sum_k \omega_k a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} | n \rangle = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \left( \prod_{l \neq k} e^{-\beta \omega_l n_l} \right) n_k e^{-\beta \omega_k n_k} \\ &= \prod_{l \neq k} \left( \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_{l-1}} \sum_{n_{l+1}} \dots e^{-\beta \omega_l n_l} \right) \sum_k n_k e^{-\beta \omega_k n_k} = \left( \prod_{k \neq l} \sum_{n_k} e^{-\beta \omega_l n_l} \right) \sum_k n_k e^{-\beta \omega_k n_k} \\ &= \left( \prod_{l \neq k} \frac{1}{1 - e^{-\beta \omega_l}} \right) \frac{e^{-\beta \omega_k}}{(1 - e^{-\beta \omega_k})^2} \end{aligned} \quad (10.71)$$

から,

$$\begin{aligned} {}_{\text{ex}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle_{\text{ex}} &= \frac{\text{Tr} \rho a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}}{\text{Tr} \rho} \\ &= \frac{\left( \prod_{l \neq k} \frac{1}{1 - e^{-\beta \omega_l}} \right) \frac{e^{-\beta \omega_k}}{(1 - e^{-\beta \omega_k})^2}}{\prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta \omega_k}}} \\ &= \frac{1}{e^{\beta \omega_k} - 1} \end{aligned} \quad (10.72)$$

$${}_{\text{ex}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger \rangle_{\text{ex}} = {}_{\text{ex}} \langle a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \rangle_{\text{ex}} = 0 \quad (10.73)$$

となる. これは Bose-Einstein 分布関数である. ただし, これは  $k$  が離散の場合である.  $k$  が連続の場合は以下のように拡張する<sup>2</sup>:

$${}_{\text{ex}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \rangle_{\text{ex}} = \frac{1}{e^{\beta \omega_k} - 1} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (10.74)$$

<sup>2</sup>付録参照

これより

$$\begin{aligned}
{}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}}^\dagger \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk' dk {}_{\text{ex}} \langle (a_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^\dagger v_{\mathbf{k}'}^*)^\dagger (a_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^\dagger v_{\mathbf{k}}^*) \rangle_{\text{ex}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')x} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk' dk \left[ {}_{\text{ex}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle_{\text{ex}} u_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} + {}_{\text{ex}} \langle a_{-\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger \rangle_{\text{ex}} v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \right] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')x} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[ \frac{1}{e^{\beta\omega_k} - 1} (|u_k|^2 + |v_k|^2) + |v_k|^2 \right]
\end{aligned} \tag{10.75}$$

となり, 同様の計算により

$${}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}} \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[ \left( \frac{2}{e^{\beta\omega_k} - 1} + 1 \right) \text{Re} u_k v_k^* \right] \tag{10.76}$$

であることもわかる. ここに  $u_k, v_k$  の値を代入して  $(k_x, k_y, k_z)$  から  $(k, \theta, \phi)$  の変数変換を施すと

熱平均・異常平均

$${}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}}^\dagger \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{\omega_k} \left[ \frac{2\mathcal{L}_k}{e^{\beta\omega_k} - 1} + \mathcal{L}_k - \omega_k \right] \tag{10.77}$$

$${}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}} \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}} = -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2 \mathcal{M}}{\omega_k} \left[ \frac{2}{e^{\beta\omega_k} - 1} + 1 \right] \tag{10.78}$$

であることがわかる. これらを Simpson 積分することで  $V_t, V_a$  を計算する.

#### 積分範囲の設定

数値計算上では無限大の積分は不可能なので, 適当な値で積分を打ち切る必要がある.  ${}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}}^\dagger \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}}$  の被積分関数は遠方で収束するので問題ない一方,  ${}_{\text{ex}} \langle \varphi_{\text{ex}} \varphi_{\text{ex}} \rangle_{\text{ex}}$  では被積分関数第2項の影響より紫外発散が生じる. これを除去するために Bose-Einstein 分布が収束する領域では粒子密度が希薄であることを考慮して第一項が収束する程度までを積分範囲とする.

なお, 量子補正を考慮したゼロ温度系の計算をする場合は励起モードが存在しないため, どのような正当性をもって積分範囲を限定するかが自明ではない. 現状では逆温度  $\beta$  が  $10^6$  程度の極低温の場合の計算とフィットするように積分範囲を決めている.

#### 10.2.7 比熱・圧力

ゼロモードを含めた全エネルギーを  $E$  とすると, 比熱  $C_V$ , 圧力  $P$  はそれぞれ以下の通り:

$$\begin{aligned}
C_V = \frac{\partial \mathcal{E}_{\text{total}}}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[ \int d\mathbf{k} {}_{\text{ex}} \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle_{\text{ex}} + \langle H_u^{QP} \rangle \right] \\
&= \frac{\partial}{\partial T} \left[ 4\pi \int dk \frac{k^2 \omega_k}{e^{\beta\omega_k} - 1} + \frac{\sum_m E_m e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \right]
\end{aligned} \tag{10.79}$$

$$P = -\frac{\partial \mathcal{E}_{\text{total}}}{\partial V} = -\frac{\partial}{\partial V} \left[ 4\pi \int dk \frac{k^2 \omega_k}{e^{\beta\omega_k} - 1} + \frac{\sum_m E_m e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \right] \tag{10.80}$$

### 10.3 変分法による見積もり

ゼロモード演算子の期待値  $\langle Q^4 \rangle, \langle Q^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$  の値を変分計算で見積もる.



### 10.3.1 ゼロモードハミルトニアン

非摂動ハミルトニアンのゼロモード部は実効的な項のみを残すことにする:

$$H_u^{QP} = \frac{IP^2}{2} + \frac{1}{2}AQ^4 \quad (10.81)$$

### 10.3.2 変分関数

有限温度系では基底状態だけではなく励起状態も必要なので, 変分関数を

$$\langle q|\psi_n\rangle = \sqrt{\frac{2^n n!}{\sqrt{2\pi}(2n)! \gamma^{2n+1}}} q^n e^{-q^2/4\gamma^2} \quad (10.82)$$

とする.

### 10.3.3 ゼロ温度期待値・エネルギー固有値の計算

上の変分関数を用いて各ゼロモード演算子のゼロ温度期待値を計算する:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | Q^4 | \psi_n \rangle &= \frac{2^n n!}{\sqrt{2\pi}(2n)! \gamma^{2n+1}} \int_{-\infty}^{\infty} dq q^4 q^{2n} e^{-q^2/2\gamma^2} \\ &= (2n+1)(2n+3)\gamma^4 \end{aligned} \quad (10.83)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | Q^2 | \psi_n \rangle &= \frac{2^n n!}{\sqrt{2\pi}(2n)! \gamma^{2n+1}} \int_{-\infty}^{\infty} dq q^2 q^{2n} e^{-q^2/2\gamma^2} \\ &= (2n+1)\gamma^2 \end{aligned} \quad (10.84)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | P^2 | \psi_n \rangle &= \frac{2^n n!}{\sqrt{2\pi}(2n)! \gamma^{2n+1}} \int_{-\infty}^{\infty} dq q^n e^{-q^2/4\gamma^2} \left( -\frac{d^2}{dq^2} \right) q^n e^{-q^2/4\gamma^2} \\ &= \frac{4n-1}{4(2n-1)} \frac{1}{\gamma^2} \end{aligned} \quad (10.85)$$

以上からハミルトニアンの期待値は

$$\begin{aligned} \langle H_u^{QP} \rangle &= f_n(\gamma) = \frac{I \langle P^2 \rangle}{2} + \frac{1}{2} A \langle Q^4 \rangle \\ &= I \frac{4n-1}{8(2n-1)} \frac{1}{\gamma^2} + \frac{A}{2} (2n+1)(2n+3)\gamma^4 \end{aligned} \quad (10.86)$$

である. この  $f_n(\gamma)$  が停留する  $\gamma$  を求める:

$$f'_n(\gamma_0) = -I \frac{4n-1}{4(2n-1)} \frac{1}{\gamma_0^3} + 2A(2n+1)(2n+3)\gamma_0^3 = 0 \quad (10.87)$$

$$\therefore \gamma_0 = \sqrt[6]{\frac{4n-1}{8(4n^2-1)(2n+3)} \frac{I}{A}} \quad (10.88)$$

よってエネルギー固有値  $E_n$  は

$$f_n(\gamma_0) = E_n = \frac{3}{8} \left[ \frac{(4n-1)^2(2n+1)(2n+3)}{(2n-1)^2} A I^2 \right]^{\frac{1}{3}} \quad (10.89)$$

となる.

### 10.3.4 各パラメータの計算

$\xi, \mu, \eta, I$  を凝縮粒子数  $N_0$  でパラメトライズする. 今回は  $N_0$  が十分大きい場合を想定し,  $V_t = V_a = 0$  とする.  
 $N_0$  の定義より

$$N_0 = \int d\mathbf{x} \xi^2 \quad \therefore \xi = \sqrt{\frac{N_0}{V}} \quad (10.90)$$

GP 方程式より

$$[-\mu + g\xi^2]\xi = 0 \quad \therefore \mu = \frac{gN_0}{V} \quad (10.91)$$

$\eta$  の定義より

$$\eta = \frac{\partial \xi}{\partial N_0} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{N_0 V}} \quad (10.92)$$

共役モード方程式より

$$\eta[-\mu + 3g\xi^2] = I\xi \quad \therefore I = \frac{g}{V} \quad (10.93)$$

$A$  の定義より

$$A = \int d\mathbf{x} \xi^4 = \frac{gN_0}{V} \quad (10.94)$$

以上のパラメータを用いてゼロモード演算子のゼロ温度期待値・エネルギー固有値を  $N_0$  のことばで書き換える:

$$\langle \psi_n | Q^2 | \psi_n \rangle = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{(4n-1)(2n+1)^3}{(4n^2-1)(2n+3)}} N_0^{-\frac{2}{3}} \quad (10.95)$$

$$\langle \psi_n | P^2 | \psi_n \rangle = \frac{4n-1}{4(2n-1)} \sqrt[3]{\frac{8(4n^2-1)(2n+3)}{4n-1}} N_0^{\frac{2}{3}} \quad (10.96)$$

$$E_n = \frac{3g}{8V} \sqrt[3]{\frac{(4n-1)^2(2n+1)(2n+3)}{(2n-1)^2}} N_0^{\frac{2}{3}} \quad (10.97)$$

### 10.3.5 有限温度期待値

以上の結果を用いると, ゼロモード演算子の有限温度期待値は以下の通り:

変分法による近似計算

$$\begin{aligned} \langle Q^2 \rangle &= \frac{\sum_n \langle \psi_n | Q^2 | \psi_n \rangle e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} \\ &= \frac{\sum_n \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{(4n-1)(2n+1)^3}{(4n^2-1)(2n+3)}} N_0^{-\frac{2}{3}} \exp\left\{\left(-\frac{3g\beta}{8V} \sqrt[3]{\frac{(4n-1)^2(2n+1)(2n+3)}{(2n-1)^2}} N_0^{\frac{2}{3}}\right)\right\}}{\sum_n \exp\left\{\left(-\frac{3g\beta}{8V} \sqrt[3]{\frac{(4n-1)^2(2n+1)(2n+3)}{(2n-1)^2}} N_0^{\frac{2}{3}}\right)\right\}} \end{aligned} \quad (10.98)$$

$$\begin{aligned} \langle P^2 \rangle &= \frac{\sum_n \frac{4n-1}{4(2n-1)} \sqrt[3]{\frac{8(4n^2-1)(2n+3)}{4n-1}} N_0^{\frac{2}{3}} \exp\left\{\left(-\frac{3g\beta}{8V} \sqrt[3]{\frac{(4n-1)^2(2n+1)(2n+3)}{(2n-1)^2}} N_0^{\frac{2}{3}}\right)\right\}}{\sum_n \exp\left\{\left(-\frac{3g\beta}{8V} \sqrt[3]{\frac{(4n-1)^2(2n+1)(2n+3)}{(2n-1)^2}} N_0^{\frac{2}{3}}\right)\right\}} \end{aligned} \quad (10.99)$$

値が変化しなくなるまで和を取るよう数値計算をする.

## 10.4 数値計算結果

相互作用定数に対する  $\langle Q^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$  の数値計算結果を以下に示す

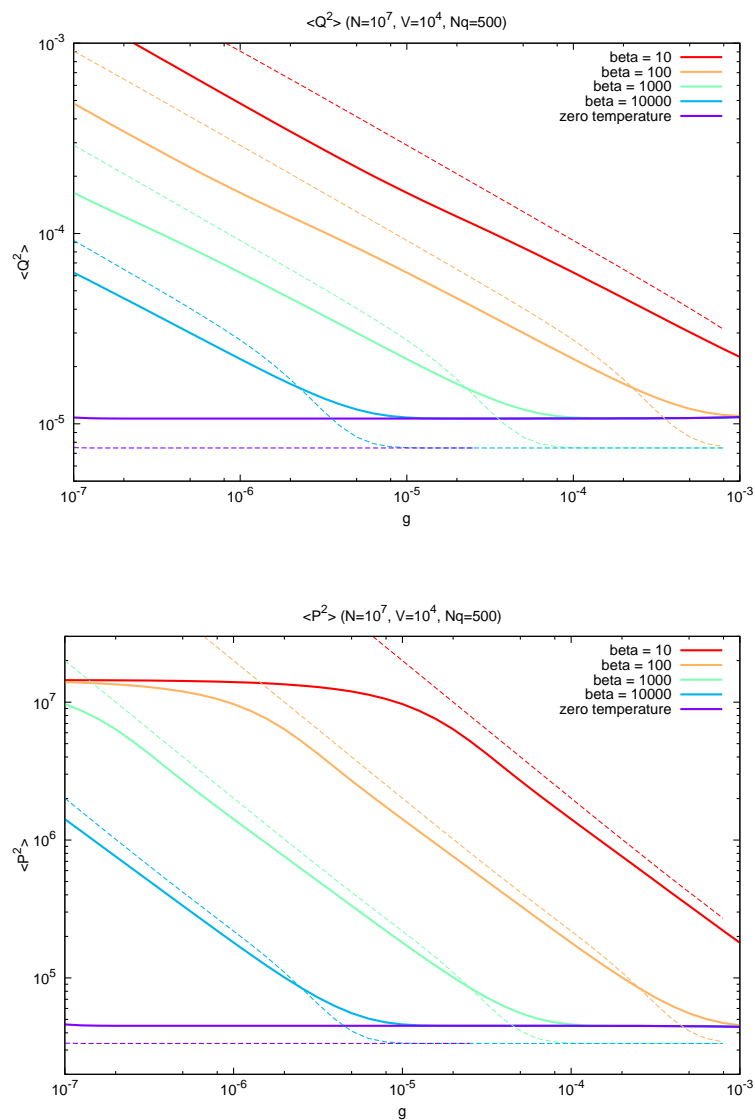


図 10.4, 10.4 : 破線は各温度に対する変分法による計算結果のプロット。 $\langle Q^2 \rangle, \langle P^2 \rangle$  共に幂についてはよく一致している。

高温領域で位相ゆらぎ  $\Delta Q = \sqrt{\langle Q^2 \rangle}$ , 凝縮粒子数ゆらぎ  $\Delta P = \sqrt{\langle P^2 \rangle}$  が増加する振る舞いは直感と一致している。

## 第11章 研究：ゼロモードの緩和

凝縮相と非凝縮相の couple を考え、非平衡的な取り扱いを実現したい。核生成のお話と関係がある。位相の緩和とか見れるんじゃないかと期待。

### 11.1 公式

QuantumMaster e.q.

$$i \frac{d}{dt} \rho_a^{nm}(t) = \sum_{n'm'} \left[ \sum_{\mu\nu} (E_\mu - E_\nu) \Psi_n^{*\mu} \Psi_m^{*\nu} \Psi_n^\mu \Psi_m^\nu \rho_a^{n'm'}(t) + i \langle (nm | \hat{\mathcal{K}}(t) | n'm') \rangle \rho_a^{n'm'}(t) \right] \quad (11.1)$$

$A$  をゼロモード演算子を含む項とする:

$$\langle (nm | A | n'm') \rangle = A^{nn'} \delta_{mm'} \quad (11.2)$$

$$\langle (nm | A^\dagger | n'm') \rangle = A^{*,n'n} \delta_{mm'} \quad (11.3)$$

$$\langle (nm | \tilde{A} | n'm') \rangle = A^{*,mm'} \delta_{nn'} \quad (11.4)$$

$$\langle (nm | \tilde{A}^\dagger | n'm') \rangle = A^{m'm} \delta_{nn'} \quad (11.5)$$

$$(11.6)$$

プライム (') がつく位置に注意。これより

$$\langle (nm | \hat{A} | n'm') \rangle = A^{nn'} \delta_{mm'} - A^{m'm} \delta_{nn'} \quad (11.7)$$

$$\langle (nm | \hat{A}^\dagger | n'm') \rangle = A^{*,n'n} \delta_{mm'} - A^{*,mm'} \delta_{nn'} \quad (11.8)$$

### 11.2 具体計算：time-convolutionless 型

もともと  $\hat{\mathcal{K}}(t, s)$ ,  $|\rho_a(t)\rangle$  は相互作用描像のもとで定義されていたのを Schrödinger 描像に移して計算。s の時間成分が exponential の形で残ることになる。

$$\begin{aligned} & \langle (nm | \hat{A}_i e^{-i\hat{H}_a(t-s)} \hat{A}_j^\dagger e^{i\hat{H}_a(t-s)} | n'm') \rangle \\ &= \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} \langle (nm | \hat{A}_i | \mu\nu) \rangle e^{-i(E_\mu - E_\nu)(t-s)} \langle \langle \mu\nu | \hat{A}_j^\dagger | \mu'\nu' \rangle \rangle e^{i(E_{\mu'} - E_{\nu'})(t-s)} \langle \langle \mu'\nu' | | nm \rangle \rangle \end{aligned} \quad (11.9)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n''m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} \left[ A_i^{nn''} \delta_{mm''} - A_i^{m''m} \delta_{nn''} \right] A_j^{*,\mu'\mu} \delta_{\nu\nu'} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_\mu - E_\nu)(t-s)} e^{i(E_{\mu'} - E_{\nu'})(t-s)} \\ &= \sum_{n''m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} A_i^{nn''} \delta_{mm''} A_j^{*,\mu'\mu} \delta_{\nu\nu'} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_\mu - E_\nu)(t-s)} e^{i(E_{\mu'} - E_{\nu'})(t-s)} \\ &\quad - \sum_{n''m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} A_i^{m''m} \delta_{nn''} A_j^{*,\mu'\mu} \delta_{\nu\nu'} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_\mu - E_\nu)(t-s)} e^{i(E_{\mu'} - E_{\nu'})(t-s)} \end{aligned} \quad (11.10)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'} A_i^{nn''} A_j^{*,\mu'\mu} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \\ &\quad - \sum_{m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'} A_i^{m''m} A_j^{*,\mu'\mu} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \end{aligned} \quad (11.11)$$

ここで  $A_j^{*,\mu'\mu} = \sum_{nm} A_n^{*,mn} \Psi_n^{*,\mu} \Psi_m^{\mu'}$ ,  $\sum_{\alpha} \Psi_{\beta}^{*,\alpha} \Psi_{\beta'}^{\alpha} = \delta_{\beta\beta'}$  であることを用いる:

$$(11.11) = \sum_{n''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{nn''} A_j^{*,\mu'\mu} \Psi_{n''}^{\mu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \delta_{mm'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \\ - \sum_{m''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{m''m} A_j^{*,\mu'\mu} \Psi_n^{\mu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \delta_{m'm''} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \quad (11.12)$$

$$= \sum_{n''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{nn''} A_j^{*,\mu'\mu} \Psi_{n''}^{\mu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \delta_{mm'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \\ - \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{m'm} A_j^{*,\mu'\mu} \Psi_n^{\mu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \quad (11.13)$$

$$= \sum_{n'''m'''} \sum_{n''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{nn''} A_j^{*,m''n'''} \Psi_{n'''}^{*,\mu} \Psi_{m'''}^{\mu'} \Psi_{n''}^{\mu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \delta_{mm'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \\ - \sum_{n'''m'''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{m'm} A_j^{*,m''n'''} \Psi_{n'''}^{*,\mu} \Psi_{m'''}^{\mu'} \Psi_n^{\mu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \quad (11.14)$$

$$= \sum_{n'''m'''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \left[ \sum_{n''} A_i^{nn''} A_j^{*,m''n'''} \Psi_{n''}^{\mu} \delta_{mm'} - A_i^{m'm} A_j^{*,m''n'''} \Psi_n^{\mu} \right] \Psi_{n'''}^{*,\mu} \Psi_{m'''}^{\mu'} \Psi_{n'}^{*,\mu'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \quad (11.15)$$

同様に  $\hat{\mathcal{K}}$  に必要な項を計算していく.

$$((nm|\hat{A}_i^{\dagger} e^{-i\hat{H}_a(t-s)} \tilde{A}_j^{\dagger} e^{i\hat{H}_a(t-s)} |n'm')) \\ = \sum_{n''m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} \left[ A_i^{*,n''n} \delta_{mm''} - A_i^{*,mm''} \delta_{nn''} \right] A_j^{\nu'\nu} \delta_{\mu\mu'} \Psi_{n''}^{\mu} \Psi_{m''}^{\nu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\nu})(t-s)} e^{i(E_{\mu'}-E_{\nu'})(t-s)} \\ = \sum_{n''m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} A_i^{*,n''n} \delta_{mm''} A_j^{\nu'\nu} \delta_{\mu\mu'} \Psi_{n''}^{\mu} \Psi_{m''}^{\nu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\nu})(t-s)} e^{i(E_{\mu'}-E_{\nu'})(t-s)} \\ - \sum_{n''m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} A_i^{*,mm''} \delta_{nn''} A_j^{\nu'\nu} \delta_{\mu\mu'} \Psi_{n''}^{\mu} \Psi_{m''}^{\nu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\nu})(t-s)} e^{i(E_{\mu'}-E_{\nu'})(t-s)} \quad (11.16)$$

$$= \sum_{n''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\nu'} A_i^{*,n''n} A_j^{\nu'\nu} \Psi_{n''}^{\mu} \Psi_m^{\nu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \\ - \sum_{m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\nu'} A_i^{*,mm''} A_j^{\nu'\nu} \Psi_n^{\mu} \Psi_{m''}^{\nu} \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \quad (11.17)$$

$$= \sum_{\nu} \sum_{\nu'} A_i^{*,n'n} A_j^{\nu'\nu} \Psi_m^{\nu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \\ - \sum_{m''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} A_i^{*,mm''} A_j^{\nu'\nu} \Psi_{m''}^{\nu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} \delta_{nn'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \quad (11.18)$$

$$= \sum_{n'''m'''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} A_i^{*,n'n} A_j^{n''m'''} \Psi_{n'''}^{*,\nu'} \Psi_{m'''}^{\nu} \Psi_m^{\nu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \\ - \sum_{n'''m'''} \sum_{m''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} A_i^{*,mm''} A_j^{n''m'''} \Psi_{n'''}^{*,\nu'} \Psi_{m'''}^{\nu} \Psi_{m''}^{\nu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} \delta_{nn'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \quad (11.19)$$

$$= \sum_{n'''m'''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} \left[ A_i^{*,n'n} A_j^{n''m'''} \Psi_m^{\nu} - \sum_{m''} A_i^{*,mm''} A_j^{n''m'''} \Psi_{m''}^{\nu} \delta_{nn'} \right] \Psi_{n'''}^{*,\nu'} \Psi_{m'''}^{\nu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \quad (11.20)$$

$$\begin{aligned}
& ((nm|\hat{A}_i e^{-i\hat{H}_a(t-s)} \tilde{A}_j e^{i\hat{H}_a(t-s)}|n'm')) \\
&= \sum_{n''m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} \left[ A_i^{nn''} \delta_{mm''} - A_i^{m''m} \delta_{nn''} \right] A_j^{*,\nu'\nu} \delta_{\mu\mu'} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_\mu - E_\nu)(t-s)} e^{i(E_{\mu'} - E_{\nu'})(t-s)} \\
&= \sum_{n''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\nu'} A_i^{nn''} A_j^{*,\nu'\nu} \Psi_{n''}^\mu \Psi_m^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_\nu - E_{\nu'})(t-s)} \\
&\quad - \sum_{m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\nu'} A_i^{m''m} A_j^{*,\nu'\nu} \Psi_n^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_\nu - E_{\nu'})(t-s)} \tag{11.21}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} A_i^{nn''} A_j^{*,\nu'\nu} \Psi_m^\nu \Psi_{m'}^{*,\nu'} \delta_{n'n''} e^{i(E_\nu - E_{\nu'})(t-s)} \\
&\quad - \sum_{m''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} A_i^{m''m} A_j^{*,\nu'\nu} \Psi_{m''}^\nu \Psi_{m'}^{*,\nu'} \delta_{nn''} e^{i(E_\nu - E_{\nu'})(t-s)} \tag{11.22}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n'''m'''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} A_i^{nn'} A_j^{*,m''n'''} \Psi_{n'''}^{*,\nu'} \Psi_{m'''}^\nu \Psi_m^\nu \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_\nu - E_{\nu'})(t-s)} \\
&\quad - \sum_{n'''m'''} \sum_{m''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} A_i^{m''m} A_j^{*,m''n'''} \Psi_{n'''}^{*,\nu'} \Psi_{m'''}^\nu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{m'}^{*,\nu'} \delta_{nn''} e^{i(E_\nu - E_{\nu'})(t-s)} \tag{11.23}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n'''m'''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} \left[ A_i^{nn'} A_j^{*,m''n'''} \Psi_m^\nu - \sum_{m''} A_i^{m''m} A_j^{*,m''n'''} \Psi_{m''}^\nu \delta_{nn''} \right] \Psi_{n'''}^{*,\nu'} \Psi_{m'''}^\nu \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_\nu - E_{\nu'})(t-s)} \tag{11.24}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& ((nm|\hat{A}_i^\dagger e^{-i\hat{H}_a(t-s)} A_j e^{i\hat{H}_a(t-s)}|n'm')) \\
&= \sum_{n''m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} \left[ A_i^{*,n''n} \delta_{mm''} - A_i^{*,mm''} \delta_{nn''} \right] A_j^{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_\mu - E_\nu)(t-s)} e^{i(E_{\mu'} - E_{\nu'})(t-s)} \\
&= \sum_{n''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'} A_i^{*,n''n} A_j^{\mu\mu'} \Psi_{n''}^\mu \Psi_m^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \\
&\quad - \sum_{m''} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'} A_i^{*,mm''} A_j^{\mu\mu'} \Psi_n^\mu \Psi_{m''}^\nu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \tag{11.25}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{*,n''n} A_j^{\mu\mu'} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \delta_{mm'} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \\
&\quad - \sum_{m''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{*,mm''} A_j^{\mu\mu'} \Psi_n^\mu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \delta_{m'm''} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \tag{11.26}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n'''m'''} \sum_{n''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{*,n''n} A_j^{n''m'''} \Psi_{n'''}^{*,\mu} \Psi_{m'''}^{\mu'} \Psi_{n''}^\mu \Psi_{n'}^{*,\mu'} \delta_{mm'} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \\
&\quad - \sum_{n'''m'''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} A_i^{*,mm'} A_j^{n''m'''} \Psi_{n'''}^{*,\mu} \Psi_{m'''}^{\mu'} \Psi_n^\mu \Psi_{n'}^{*,\mu'} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \tag{11.27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n'''m'''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \left[ \sum_{n''} A_i^{*,n''n} A_j^{n''m'''} \Psi_{n''}^\mu \delta_{mm'} - A_i^{*,mm'} A_j^{n''m'''} \Psi_n^\mu \right] \Psi_{n'''}^{*,\mu} \Psi_{m'''}^{\mu'} \Psi_{n'}^{*,\mu'} e^{-i(E_\mu - E_{\mu'})(t-s)} \tag{11.28}
\end{aligned}$$

まとめると,

$$\begin{aligned}
& ((nm|\hat{A}_i e^{-i\hat{H}_a(t-s)} A_j^\dagger e^{i\hat{H}_a(t-s)}|n'm')) \\
&= \sum_{n''m'''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \left[ \sum_{n''} A_i^{nn''} A_j^{*,m''n'''} \Psi_{n''}^{\mu} \delta_{mm'} - A_i^{m'm} A_j^{*,m''n'''} \Psi_n^{\mu} \right] \Psi_{n'''}^{*,\mu} \Psi_{m'''}^{\mu'} \Psi_{n'}^{*,\mu'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \\
& \hspace{15em} (11.29)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& ((nm|\hat{A}_i^\dagger e^{-i\hat{H}_a(t-s)} \tilde{A}_j^\dagger e^{i\hat{H}_a(t-s)}|n'm')) \\
&= \sum_{n''m'''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} \left[ A_i^{*,n'n} A_j^{n''m'''} \Psi_m^{\nu} - \sum_{m''} A_i^{*,mm''} A_j^{n''m'''} \Psi_{m''}^{\nu} \delta_{nn'} \right] \Psi_{n'''}^{*,\nu'} \Psi_{m'''}^{\nu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \\
& \hspace{15em} (11.30)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& ((nm|\hat{A}_i e^{-i\hat{H}_a(t-s)} \tilde{A}_j e^{i\hat{H}_a(t-s)}|n'm')) \\
&= \sum_{n''m'''} \sum_{\nu} \sum_{\nu'} \left[ A_i^{nn'} A_j^{*,m''n'''} \Psi_m^{\nu} - \sum_{m''} A_i^{m''m} A_j^{*,m''n'''} \Psi_{m''}^{\nu} \delta_{nn'} \right] \Psi_{n'''}^{*,\nu'} \Psi_{m'''}^{\nu} \Psi_{m'}^{*,\nu'} e^{i(E_{\nu}-E_{\nu'})(t-s)} \\
& \hspace{15em} (11.31)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& ((nm|\hat{A}_i^\dagger e^{-i\hat{H}_a(t-s)} A_j e^{i\hat{H}_a(t-s)}|n'm')) \\
&= \sum_{n''m'''} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \left[ \sum_{n''} A_i^{*,n'n} A_j^{n''m'''} \Psi_{n''}^{\mu} \delta_{mm'} - A_i^{*,mm'} A_j^{n''m'''} \Psi_n^{\mu} \right] \Psi_{n'''}^{*,\mu} \Psi_{m'''}^{\mu'} \Psi_{n'}^{*,\mu'} e^{-i(E_{\mu}-E_{\mu'})(t-s)} \\
& \hspace{15em} (11.32)
\end{aligned}$$

添字が合ってるかとっても心配.

### 11.3 具体計算：摂動項 $\mathcal{K}(t)$

我々が計算したいのは

$$\mathcal{K}(t) = \mathcal{K}_1(t) + \mathcal{K}_2(t) \quad (11.33)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_1(t) &= -\frac{2Vg^2}{(2\pi)^6} \int_{t_0}^t ds \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3 \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \\
&\times \left[ n_{k_1} n_{k_2} (1 + n_{k_3}) \left\{ e^{i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_3})(t-s)} \hat{A}_1(t) A_1^\dagger(s) - e^{-i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_3})(t-s)} \hat{A}_1^\dagger(t) \tilde{A}_1^\dagger(s) \right\} \right. \\
&\quad \left. - (1 + n_{k_1})(1 + n_{k_2}) n_{k_3} \left\{ e^{i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_3})(t-s)} \hat{A}_1(t) \tilde{A}_1(s) - e^{-i(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_3})(t-s)} \hat{A}_1^\dagger(t) A_1(s) \right\} \right] \\
& \hspace{15em} (11.34)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_2(t) &= -\frac{Vg^2}{2(2\pi)^6} \int_{t_0}^t ds \int d\mathbf{k} \left[ n_k^2 \left\{ e^{2i\omega_k(t-s)} \hat{A}_2(t) A_2^\dagger(s) - e^{-2i\omega_k(t-s)} \hat{A}_2^\dagger(t) \tilde{A}_2^\dagger(s) \right\} \right. \\
&\quad \left. - (1 + n_k)^2 \left\{ e^{2i\omega_k(t-s)} \hat{A}_2(t) \tilde{A}_2(s) - e^{-2i\omega_k(t-s)} \hat{A}_2^\dagger(t) A_2(s) \right\} \right] \\
& \hspace{15em} (11.35)
\end{aligned}$$

だが、演算子は全て相互作用描像である. これを Schrödinger 描像に移して計算するので,  $A(s) \rightarrow e^{-i\hat{H}_a(t-s)} A e^{i\hat{H}_a(t-s)}$  として期待値を取る. Schrödinger 描像に移した期待値の公式は既に上で導出した.

さらに Quantum Master e.q. をマルコフ近似すると  $|\rho_a(s)\rangle\rangle \rightarrow |\rho_a(t)\rangle\rangle$  かつ  $t_0 \rightarrow -\infty$  とすればよい.  $s$  積分は

$$\int_{-\infty}^t ds e^{iW(t-s)} \simeq \pi \delta(W) \quad (11.36)$$

のように計算できる (主値を捨てている) ことから,  $((nm|\mathcal{K}_2(t)|n'm'))$  は

$$((nm|\mathcal{K}_2(t)|n'm')) = -\frac{Vg^2}{2(2\pi)^6} \int d\mathbf{k} \quad (11.37)$$

$$\begin{aligned} & \times \sum_{n''m'''} \left[ n_k^2 \left\{ \sum_{n''} A_2^{nn''} A_2^{*,m''n'''} \delta_{mm'} M_{n''n'''} M'_{n'm'''} - A_2^{m'm} A_2^{*,m''n'''} M_{n''n} M'_{n'm'''} \right\} \delta(2\omega_k - E_\mu + E_{\mu'}) \right. \\ & + n_k^2 \left\{ A_2^{*,n'n} A_2^{n''m'''} N_{mm'''} N'_{n''m'} - \sum_{m''} A_2^{*,mm''} A_2^{n''m'''} \delta_{nn'} N_{m''m'''} N'_{n''m'} \right\} \delta(-2\omega_k + E_\nu - E_{\nu'}) \\ & - (1+n_k)^2 \left\{ A_2^{nn'} A_2^{*,m''n'''} N_{mm'''} N'_{n''m'} - \sum_{m''} A_2^{m''m} A_2^{*,m''n'''} \delta_{nn'} N_{m''m'''} N'_{n''m'} \right\} \delta(2\omega_k + E_\nu - E_{\nu'}) \\ & \left. - (1+n_k)^2 \left\{ \sum_{n''} A_2^{*,n'n} A_2^{n''m'''} \delta_{mm'} M_{n''n'''} M'_{n'm'''} - A_2^{*,mm'} A_2^{n''m'''} M_{n''n} M'_{n'm'''} \right\} \delta(-2\omega_k - E_\mu + E_{\mu'}) \right] \end{aligned} \quad (11.38)$$

ここで

$$M_{\alpha\beta} \equiv \sum_{\mu} \Psi_{\alpha}^{*,\mu} \Psi_{\beta}^{\mu} \quad M'_{\alpha\beta} \equiv \sum_{\mu'} \Psi_{\alpha}^{*,\mu'} \Psi_{\beta}^{\mu'} \quad (11.39)$$

$$N_{\alpha\beta} \equiv \sum_{\nu} \Psi_{\alpha}^{\nu} \Psi_{\beta}^{\nu} \quad N'_{\alpha\beta} \equiv \sum_{\nu'} \Psi_{\alpha}^{*,\nu'} \Psi_{\beta}^{*,\nu'} \quad (11.40)$$

としている. さらに  $k$  積分を実行する. ここで

$$\int d\mathbf{k} n_k^2 \delta(2\omega_k - E) = \int_0^\infty dk \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi k \sin \theta n_k^2 \delta(k^2 - E) \quad (11.41)$$

$$= \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sqrt{E} \theta(E) \sin \theta n_k^2 \quad (11.42)$$

$$= 4\pi \sqrt{E} \theta(E) n_E^2 \quad (11.43)$$

であることから

$$R_2(E) \equiv \frac{Vg^2}{8\pi} \theta(E) n_E^2 \sqrt{E} \quad R'_2(E) \equiv \frac{Vg^2}{8\pi} \theta(E) (1+n_E)^2 \sqrt{E} \quad (11.44)$$

とする. スターの位置に注意. ここで  $\theta(E)$  は階段関数. これを用いると

$$\begin{aligned} & ((nm|\mathcal{K}_2(t)|n'm')) = \\ & \sum_{n''m'''} \left[ - \left\{ \sum_{n''} A_2^{nn''} A_2^{*,m''n'''} \delta_{mm'} M_{n''n'''} M'_{n'm'''} - A_2^{m'm} A_2^{*,m''n'''} M_{n''n} M'_{n'm'''} \right\} R_2(E_\mu - E_{\mu'}) \right. \\ & - \left\{ A_2^{*,n'n} A_2^{n''m'''} N_{mm'''} N'_{n''m'} - \sum_{m''} A_2^{*,mm''} A_2^{n''m'''} \delta_{nn'} N_{m''m'''} N'_{n''m'} \right\} R_2(E_\nu - E_{\nu'}) \\ & + \left\{ A_2^{nn'} A_2^{*,m''n'''} N_{mm'''} N'_{n''m'} - \sum_{m''} A_2^{m''m} A_2^{*,m''n'''} \delta_{nn'} N_{m''m'''} N'_{n''m'} \right\} R'_2(-E_\nu + E_{\nu'}) \\ & \left. + \left\{ \sum_{n''} A_2^{*,n'n} A_2^{n''m'''} \delta_{mm'} M_{n''n'''} M'_{n'm'''} - A_2^{*,mm'} A_2^{n''m'''} M_{n''n} M'_{n'm'''} \right\} R'_2(-E_\mu + E_{\mu'}) \right] \end{aligned} \quad (11.45)$$

符号が合ってるかどうかとても心配.

さらに  $((nm|\mathcal{K}_1(t)|n'm'))$  を計算する前に 積分公式を導出しておく:

$$I(E) = \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3 \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \delta(\omega_{k_1} + \omega_{k_2} - \omega_{k_3} + E) a(\omega_{k_1}) b(\omega_{k_2}) c(\omega_{k_3}) \quad (11.46)$$

$$= 8\pi^2 \int_0^\infty d\omega_1 \int_{\frac{E_2}{4\omega_1}}^\infty d\omega_2 a(\omega_1) b(\omega_2) c(\omega_1 + \omega_2 + E) \quad (11.47)$$



となる. これ以上は  $a, b, c$  の具体形が必要. これを用いると (11.45) の添字を  $2 \rightarrow 1$  にしたものと同様. ただし:

$$R_1(E) = \frac{Vg^2}{4\pi^3} \int_0^\infty d\omega_1 \int_{\frac{E^2}{4\omega_1}}^\infty d\omega_2 n_{\omega_1} n_{\omega_2} (1 + n_{\omega_1 + \omega_2 + E}) \quad (11.48)$$

$$R'_1(E) = \frac{Vg^2}{4\pi^3} \int_0^\infty d\omega_1 \int_{\frac{E^2}{4\omega_1}}^\infty d\omega_2 (1 + n_{\omega_1})(1 + n_{\omega_2}) n_{\omega_1 + \omega_2 + E} \quad (11.49)$$

とする. つまり解くべき方程式は

$$i \frac{d}{dt} \rho_a^{nm}(t) = \sum_{n'm'} \left[ \sum_{\mu\nu} (E_\mu - E_\nu) \Psi_n^{*,\mu} \Psi_m^{*,\nu} \Psi_{n'}^\mu \Psi_{m'}^\nu + i \langle (nm | \hat{\mathcal{K}}(t) | n'm') \rangle \right] \rho_a^{n'm'}(t) \quad (11.50)$$

$$\equiv \sum_{n'm'} L^{nm, n'm'} \rho_a^{n'm'}(t) \quad (11.51)$$

である. ただし

$$\begin{aligned} L^{nm, n'm'} &= \sum_{\mu\nu} (E_\mu - E_\nu) \Psi_n^{*,\mu} \Psi_m^{*,\nu} \Psi_{n'}^\mu \Psi_{m'}^\nu \\ &+ \sum_{i=1,2} \sum_{n''m''} \left[ - \left\{ \sum_{n'''} A_i^{nn''} A_i^{*,m''m'''} \delta_{mm'} M_{n''m'''} M'_{n'm'''} - A_i^{m'm} A_i^{*,m''m'''} M_{n''m'''} M'_{n'm'''} \right\} R_i(E_\mu - E_{\mu'}) \right. \\ &- \left\{ A_i^{*,n'n} A_i^{n''m''m'''} N_{mm''m'''} N'_{n''m''m'} - \sum_{m''} A_i^{*,mm''} A_i^{n''m''m'''} \delta_{nn'} N_{m''m''m'''} N'_{n''m''m'} \right\} R_i(E_\nu - E_{\nu'}) \\ &+ \left\{ A_i^{nn'} A_i^{*,m''m''m'''} N_{mm''m'''} N'_{n''m''m'} - \sum_{m''} A_i^{m''m} A_i^{*,m''m''m'''} \delta_{nn'} N_{m''m''m'''} N'_{n''m''m'} \right\} R'_i(-E_\nu + E_{\nu'}) \\ &\left. + \left\{ \sum_{n''} A_i^{*,n'n} A_i^{n''m''m'''} \delta_{mm'} M_{n''m''m'''} M'_{n'm''m'''} - A_i^{*,mm'} A_i^{n''m''m'''} M_{n''m''m'''} M'_{n'm''m'''} \right\} R'_i(-E_\mu + E_{\mu'}) \right] \end{aligned} \quad (11.53)$$

## 11.4 数値計算へ向けて

期待値の計算のために Quantum Master e.q.(11.51) を解いて密度行列  $\rho_a$  を得るのがひとまずの目的. これが得られればいろんな物理量の計算ができる. (11.51) のエッセンスは  $L^{nm, n'm'}$  にある.  $L^{nm, n'm'}$  を数値計算においてどのように表現するかをまとめる.

### 11.4.1 $E_\mu \cdot E_\nu$

$|\mu\rangle, |\nu\rangle$  は  $H_a$  のエネルギー固有状態として定義されている:

$$H_a |\mu\rangle = E_\mu |\mu\rangle, \quad \tilde{H}_a |\nu\rangle = E_\nu |\nu\rangle \quad (11.54)$$

$|\nu\rangle$  はチルダハミルトニアン固有状態というだけで, 実質ノンチルダとモノに変わりはない. ということで, これを  $\varphi_{\text{ex}}, \varphi_{\text{ex}}^\dagger$  の粒子数状態で行列表示する:

$$\sum_m (n | H_a | m) (m | \mu) = E_\mu (n | \mu) \quad (11.55)$$

$$\iff \sum_m (n | H_a | m) \Psi_m^\mu = E_\mu \Psi_n^\mu \quad (11.56)$$

これを Lapack で解けば  $\Psi, E$  のセットが得られる.

#### 11.4.2 $A_i^{nm}$

$i = 1, 2$  のみなので具体的に計算してみる:

$$A_1^{nm} = (n|A_1|m) = (n|\varphi_0|m) = \sqrt{m}(n|m-1) = \sqrt{m}\delta_{n,m-1} \quad (11.57)$$

$$A_2^{nm} = (n|A_2|m) = (n|\varphi_0^2|m) = \sqrt{m(m-1)}(n|m-2) = \sqrt{m(m-1)}\delta_{n,m-2} \quad (11.58)$$

$$A_2^{*,nm} = (A_2^{nm})^* = A_2^{nm} \quad (11.59)$$

とても簡単になる.

#### 11.4.3 $N_{nm} \cdot N'_{nm}$

$$N_{nm} = \sum_{\nu} \Psi_n^{\nu} \Psi_m^{\nu} \quad (11.60)$$

なので  $\Psi$  のセットがあれば自明.

#### 11.4.4 $R_i$

$R_1, R_2$  共に  $n_k$  が必要.  $n_k$  の定義は

$$n_k \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \langle b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \rangle \quad (11.61)$$

であり,  $H_R$  は  $\varphi_{\text{ex}}$  の 2 次なので対角化可能. 系の時間発展に対して変化が少ない過程をしているので熱平衡状態にあると考えて良い:

$$n_k = \frac{1}{e^{\beta\omega'_k} - 1} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (11.62)$$

一様系では

$$\omega'_k = \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2gn_0 \right)} \quad (11.63)$$

であることを利用して

$$n_E = \frac{1}{e^{\beta\omega'_E} - 1} \quad \omega'_E = \sqrt{\frac{\hbar^2 E}{2m} \left( \frac{\hbar^2 E}{2m} + 2gn_0 \right)} \quad (11.64)$$

$$n_{\omega_1+\omega_2+E} = \frac{1}{e^{\beta\omega'} - 1} \quad \omega' = \sqrt{\frac{\hbar^2 \left( \frac{\omega_1+\omega_2}{2} + E \right)}{2m} \left( \frac{\hbar^2 \left( \frac{\omega_1+\omega_2}{2} + E \right)}{2m} + 2gn_0 \right)} \quad (11.65)$$

とすることができる. また  $\xi^2 = n_0$  より  $n_0$  は TDGP 方程式により決定される. つまり,  $\xi$  の時間発展は密度行列の時間発展とは別の枠組みで与えられていることになる. TDGP に量子補正を加えるべきかどうかはわからない. 量子補正を入れると自己無撞着の計算がとてもめんどくさくなる. 今のところ, ゼロモードは Depletion に影響を与えない (比熱は影響を受ける) という結論なので, 補正無しの TDGP でもよい気がする.

ちなみに今回は  $\xi$  は時間発展しないものとしているのであしからず.

## 11.5 $L^{nm,n'm'}$ の整理

以上の結論から  $L^{nm,n'm'}$  を整理する. (11.53) の第二項の和を  $i = 1, 2$  それぞれについて計算する.

$i = 1$  について:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n''m'''} \left[ - \left\{ \sum_{n''} A_1^{nn''} A_1^{*,m''n''} \delta_{mm'} M_{n''n''} M'_{n''m''} - A_1^{m'm} A_1^{*,m''n''} M_{n''n''} M'_{n''m''} \right\} R_1(E_\mu - E_{\mu'}) \right. \\
& - \left\{ A_1^{*,n'n} A_1^{n''m''} N_{mm''} N'_{n''m''} - \sum_{m''} A_1^{*,mm''} A_1^{n''m''} \delta_{nn'} N_{m''m''} N'_{n''m''} \right\} R_1(E_\nu - E_{\nu'}) \\
& + \left\{ A_1^{nn'} A_1^{*,m''n''} N_{mm''} N'_{n''m''} - \sum_{m''} A_1^{m''m} A_1^{*,m''n''} \delta_{nn'} N_{m''m''} N'_{n''m''} \right\} R'_1(-E_\nu + E_{\nu'}) \\
& \left. + \left\{ \sum_{n''} A_1^{*,n'n} A_1^{n''m''} \delta_{mm'} M_{n''n''} M'_{n''m''} - A_1^{*,mm'} A_1^{n''m''} M_{n''n''} M'_{n''m''} \right\} R'_1(-E_\mu + E_{\mu'}) \right] \\
& = \sum_{n''m'''} \left[ - \left\{ \sum_{n''} \sqrt{n''} \delta_{n,n''-1} \sqrt{n'''} \delta_{m''',n''-1} \delta_{mm'} M_{n''n''} M'_{n''m''} - \sqrt{m} \delta_{m',m-1} \sqrt{n'''} \delta_{m''',n''-1} M_{n''n''} M'_{n''m''} \right\} \right. \\
& \quad \times R_1(E_\mu - E_{\mu'}) \\
& - \left\{ \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \sqrt{m'''} \delta_{n''',m''-1} N_{mm''} N'_{n''m''} - \sum_{m''} \sqrt{m''} \delta_{m,m''-1} \sqrt{m'''} \delta_{n''',m''-1} \delta_{nn'} N_{m''m''} N'_{n''m''} \right\} \\
& \quad \times R_1(E_\nu - E_{\nu'}) \\
& + \left\{ \sqrt{n'} \delta_{n,n'-1} \sqrt{n'''} \delta_{m''',n''-1} N_{mm''} N'_{n''m''} - \sum_{m''} \sqrt{m} \delta_{m',m-1} \sqrt{n'''} \delta_{m''',n''-1} \delta_{nn'} N_{m''m''} N'_{n''m''} \right\} \\
& \quad \times R'_1(-E_\nu + E_{\nu'}) \\
& + \left\{ \sum_{n''} \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \sqrt{m'''} \delta_{n''',m''-1} \delta_{mm'} M_{n''n''} M'_{n''m''} - \sqrt{m'} \delta_{m,m'-1} \sqrt{m'''} \delta_{n''',m''-1} M_{n''n''} M'_{n''m''} \right\} \\
& \quad \times R'_1(-E_\mu + E_{\mu'}) \Big] \\
& \quad (11.66)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& = \sum_{\ell} \left[ - \sum_{\mu\mu'} \left\{ \sqrt{n+1} \sqrt{\ell} \delta_{mm'} M_{\ell,n+1} M'_{n',\ell-1} - \sqrt{m} \delta_{m',m-1} \sqrt{\ell} M_{\ell n} M'_{n',\ell-1} \right\} R_1(E_\mu - E_{\mu'}) \right. \\
& - \sum_{\nu\nu'} \left\{ \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \sqrt{\ell+1} N_{m,\ell+1} N'_{\ell m'} - \sqrt{m+1} \sqrt{\ell+1} \delta_{nn'} N_{m+1,\ell+1} N'_{\ell m'} \right\} R_1(E_\nu - E_{\nu'}) \\
& + \sum_{\nu\nu'} \left\{ \sqrt{n'} \delta_{n,n'-1} \sqrt{\ell} N_{m,\ell-1} N'_{\ell m'} - \sqrt{m} \sqrt{\ell} \delta_{nn'} N_{m-1,\ell-1} N'_{\ell m'} \right\} R'_1(-E_\nu + E_{\nu'}) \\
& \left. + \sum_{\mu\mu'} \left\{ \sqrt{n} \sqrt{\ell+1} \delta_{mm'} M_{\ell,n-1} M'_{n',\ell+1} - \sqrt{m'} \delta_{m,m'-1} \sqrt{\ell+1} M_{\ell n} M'_{n',\ell+1} \right\} R'_1(-E_\mu + E_{\mu'}) \right] \\
& \quad (11.67)
\end{aligned}$$

$L^{nm,n'm'}$  内の  $n''m'', n''m'''$  和は  $\ell$  のみにまとまった. またここでは  $MN, M'N'$  に含まれていた  $\mu\nu, \mu'\nu'$  の和を露わに書き直した.

i = 2 について:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n''m'''} \left[ - \left\{ \sum_{n''} A_2^{nn''} A_2^{*,m''m'''} \delta_{mm'} M_{n''m'''} M'_{n''m'''} - A_2^{m'm} A_2^{*,m''m'''} M_{n''m'''} M'_{n''m'''} \right\} R_2(E_\mu - E_{\mu'}) \right. \\
& - \left\{ A_2^{*,n'n} A_2^{n''m''m'''} N_{mm'''} N'_{n''m''m'} - \sum_{m''} A_2^{*,mm''} A_2^{n''m''m'''} \delta_{nn'} N_{m''m'''} N'_{n''m''m'} \right\} R_2(E_\nu - E_{\nu'}) \\
& + \left\{ A_2^{nn'} A_2^{*,m''m''m'''} N_{mm'''} N'_{n''m''m'} - \sum_{m''} A_2^{m''m} A_2^{*,m''m''m'''} \delta_{nn'} N_{m''m'''} N'_{n''m''m'} \right\} R'_2(-E_\nu + E_{\nu'}) \\
& \left. + \left\{ \sum_{n''} A_2^{*,n''n} A_2^{n''m''m'''} \delta_{mm'} M_{n''m''m'''} M'_{n''m''m'''} - A_2^{*,mm'} A_2^{n''m''m'''} M_{n''m''m'''} M'_{n''m''m'''} \right\} R'_2(-E_\mu + E_{\mu'}) \right] \\
& \hspace{25em} (11.69)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\ell} \left[ - \sum_{\mu\mu'} \left\{ \sqrt{(n+2)(n+1)} \sqrt{\ell(\ell-1)} \delta_{mm'} M_{\ell,n+2} M'_{n',\ell-2} - \sqrt{m(m-1)} \delta_{m',m-2} \sqrt{\ell(\ell-1)} M_{\ell,n} M'_{n',\ell-2} \right\} \right. \\
& \hspace{15em} \times R_2(E_\mu - E_{\mu'}) \\
& - \sum_{\nu\nu'} \left\{ \sqrt{n(n-1)} \delta_{n',n-2} \sqrt{(\ell+2)(\ell+1)} N_{m,\ell+2} N'_{\ell m'} - \sqrt{(m+2)(m+1)} \sqrt{m''(m'''-1)} \delta_{nn'} N_{m+2,\ell+2} N'_{\ell m'} \right\} \\
& \hspace{15em} \times R_2(E_\nu - E_{\nu'}) \\
& + \sum_{\nu\nu'} \left\{ \sqrt{n'(n'-1)} \delta_{n,n'-2} \sqrt{\ell(\ell-1)} N_{m,\ell-2} N'_{\ell m'} - \sqrt{m(m-1)} \sqrt{\ell(\ell-1)} \delta_{nn'} N_{m-2,\ell-2} N'_{\ell m'} \right\} \\
& \hspace{15em} \times R'_2(-E_\nu + E_{\nu'}) \\
& + \sum_{\mu\mu'} \left\{ \sqrt{n(n-1)} \sqrt{(\ell+2)(\ell+1)} \delta_{mm'} M_{\ell,n-2} M'_{n',\ell+2} - \sqrt{m'(m'-1)} \delta_{m,m'-2} \sqrt{(\ell+2)(\ell+1)} M_{\ell n} M'_{n',\ell+2} \right\} \\
& \hspace{15em} \times R'_2(-E_\mu + E_{\mu'}) \left. \right] \\
& \hspace{25em} (11.70)
\end{aligned}$$

$R_i$  はシンブソン積分でいける.

## 第12章 Fetter-Walecka : Quantum Theory of Many-Particle Systems

### 12.1 Green Function