

非平衡多体理論

中国科学院大学 Kavli 理論科学研究所, 藤本純治[†]

このメモは主に, H. J. W. Haug と A.-P. Jauho による著書"*Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*"の Part II に従う。まず前準備として, 経路順序 Green 関数を定義し, それが causal, greater, lesser, antitime-ordered Green 関数に分解できることを見る。次に, 経路順序 Green 関数の摂動展開について調べる。それから, 経路順序 Green 関数の積を実時間の各種 Green 関数の積に書き換えるときに有用な Langreth 則を紹介する。以上の準備ののち, lesser Green 関数の時間発展を記す方程式である量子運動方程式を Kadanoff と Baym の方法に基づいて議論する。

4 経路順序 Green 関数

4.1 総説

非平衡問題は以下のように定式化される。以下のハミルトニアンのもとで時間発展する系を考える。

$$H = h + H'(t). \quad (4.1)$$

ここでハミルトニアンにおいて時間に依存しない部分 h を 2 つの部分に分ける: $h = H_0 + H_i$, ただし H_0 は (対角化でき, それゆえに Wick の定理が適用できるという意味で) “シンプル”であり, H_i は (問題の多体的側面を含んでおり, それゆえに特別な取り扱いが必要であるという意味で) “複雑”であるとする。さらに仮定として, 非平衡部分は $t < t_0$ においては消えるとする。

適切な時点で $t_0 \rightarrow -\infty$ と置き換えることがしばしばある。この手続きは問題の取り扱いを単純化し, 非平衡理論の構造を可能な限り簡潔に示すことができるので, まず初めはこの極限を採用する。しかし, そのような極限をとってしまうと過渡現象 (transient phenomena) を取り扱うことが不可能になってしまう。過渡現象は我々が述べたい中心的話題の一つなので, また必要ときにこの点に戻ってくことにする。(このメモでは戻ってきません。)

摂動を加える前では, 系は熱平衡の密度行列

$$\rho(h) = \frac{\exp(-\beta h)}{\text{Tr}[\exp(-\beta h)]} \quad (4.2)$$

によって記述されている。 $\beta = 1/k_B T$ は逆温度である。遂行すべきことは, 与えられた観測量の期待値を計算することである。その観測量に関連づけられた量子力学的な演算子を O とすると, 時刻 $t > t_0$ においては, その期待値は

$$\langle O(t) \rangle = \text{Tr}[\rho(h) O_H(t)] \quad (4.3)$$

と書ける。下付き添字 H は, Heisenberg 描像で, その時間依存性は全ハミルトニアン H によって支配されていることを意味している。定義 (4.3) は, 容易に 2 時刻 (あるいはそれ以上) の量 (たとえば Green 関数や相関関数) に一般化することができる。

ここで, 式 (4.3) において, 何らかの時間依存した密度行列ではなく, 熱平衡密度行列を用いたことを記しておく。これは, 物理的には, h に含まれている熱力学的な自由度は, $H'(t)$ に含まれる速い振動に即座に追従しないことを意味している。この他に選び方があってもよいが, それに伴う困難¹⁾を避けるため, ここではこの選び方を採用する。潜在的にとっても見込みのある代替的方法是, 期待値に含まれる熱平衡密度行列を, あ

[†] junji@ucas.ac.cn

¹⁾ たとえば, 文献 [1] の p.214-216 を参照。

る適切な一般化したものに置き換えることで構成され、それは Hershfield などによって指摘され [2], 近年いくつかの文献 [3–6] において精巧化された。この方法の可能性についても、半導体微細構造における時間依存輸送について書かれた 13 章で述べる。

4.2 2つの変換

式 (4.3) を攻略する一般的な戦略は、熱平衡の場合に似ている。すなわち、 $O_H(t)$ の“望みが薄そうなほどに複雑な”時間依存性を、より簡単な O_{H_0} の時間依存の形へと変換させることである。消去すべき演算子は 2 つある；時間依存する外的摂動 $H'(t)$ と“複雑な”相互作用項 H_i である。したがって、熱平衡の場合よりも込み入った変換を行うことが予想される。しかしながら、適当に一般化することによって、非平衡と熱平衡の定式化を構造的に等価に行うことができると示せる。

最初に、 O_H の時間依存性を O_h の時間依存性に書き換える。これは、次の関係式を用いて行う。

$$O_H(t) = v_h^\dagger(t, t_0) O_h(t) v_h(t, t_0), \quad (4.4)$$

ここで

$$v_h(t, t_0) = T \left\{ \exp \left[-i \int_{t_0}^t dt' H'_h(t') \right] \right\}, \quad (4.5)$$

また $H'_h(t)$ は $H'(t)$ の相互作用表示で、

$$H'_h(t) = e^{ih(t-t_0)} H'(t) e^{-ih(t-t_0)} \quad (4.6)$$

で与えられ、 T は遅い時刻を左から並べていく時間順序演算子を表す。

ここで経路順序量を導入しよう。表式 (4.4) はまた別の、しかし等価な表式に書き換えることができる。

$$O_H(t) = T_{C_t} \left\{ \exp \left[-i \int_{C_t} d\tau H'_h(\tau) \right] O_h(t) \right\}, \quad (4.7)$$

ただし、経路 C_t は図 1 に示す。以下では、複素経路上の時刻を表す変数をギリシャ文字で表記し、実時刻を

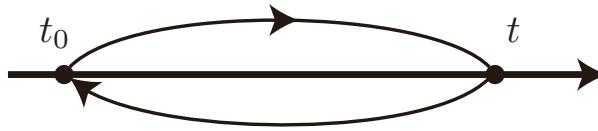


図 1 経路 C_t 。

表す変数に対してはローマ文字を用いるようにする。経路 C_t は、 t_0 から t に向けて実軸上を走り、もう一度 t から t_0 に戻る。（あるいは、実軸の少しだけ上を走る； $H'(t)$ が解析的に連続であるならば何ら問題は起こらない。）経路順序演算子 T_{C_t} の意味は、次のようになる。 t_1 と t_2 が C_t 上の 2 つの時刻を表すとして、経路上で t_2 が t_1 に対して後に現れるならば、 $T_{C_t} \{ H'_h(t_1) H'_h(t_2) \} = H'_h(t_2) H'_h(t_1)$ のように、後ろの時刻を左に並べかえる演算を表す。次の計算で経路上に定義された関数の性質を示す。

式 (4.4) と式 (4.7) が等しいことを示す

経路上で定義された関数について理解を深めるために、ここで式 (4.4) と式 (4.7) が厳密に等しいことを示そう。まず、式 (4.7) に対して \exp を展開する。

$$T_{C_t} \left\{ \exp \left[-i \int_{C_t} d\tau H'_h(\tau) \right] O_h(t) \right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{C_t} d\tau_1 \cdots \int_{C_t} d\tau_n T_{C_t} [H'_h(\tau_1) \cdots H'_h(\tau_n) O_h(t)]. \quad (4.8)$$

ここで、経路 C_t を 2 つに分ける:

$$\int_{C_t} = \int_{\rightarrow} + \int_{\leftarrow}, \quad (4.9)$$

ただし \int_{\rightarrow} は t_0 から t へ向かい、 \int_{\leftarrow} は t から t_0 に戻ることを表している。よって、式 (4.8) の n 次の項は 2^n 個の項に分けられるが、そのうちの 1 つについて考えてみると、

$$\begin{aligned} & \int_{\rightarrow} d\tau_1 \int_{\rightarrow} d\tau_2 \int_{\leftarrow} d\tau_3 \cdots \int_{\leftarrow} d\tau_n T_{C_t} [H'_h(\tau_1) \cdots H'_h(\tau_n) O_h(t)] \\ &= \int_{\leftarrow} d\tau_3 \cdots \int_{\leftarrow} d\tau_n T_{\leftarrow} [H'_h(\tau_3) \cdots H'_h(\tau_n)] O_h(t) \int_{\rightarrow} d\tau_1 \int_{\rightarrow} d\tau_2 T_{\rightarrow} [H'_h(\tau_1) H'_h(\tau_2)]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

2^n 個の項のうち、 m ($m = 0, \dots, n$) 個の \int_{\rightarrow} を含み、 $n - m$ 個の \int_{\leftarrow} を含む項は $n!/[m!(n-m)!]$ つあり、それらは全て等しく寄与する。よって、

$$\begin{aligned} & \int_{C_t} d\tau_1 \cdots \int_{C_t} d\tau_n T_{C_t} [H'_h(\tau_1) \cdots H'_h(\tau_n) O_h(t)] \\ &= \sum_{m=0}^n \frac{n!}{m!(n-m)!} \int_{\leftarrow} d\tau_{m+1} \cdots \int_{\leftarrow} d\tau_n T_{\leftarrow} [H'_h(\tau_{m+1}) \cdots H'_h(\tau_n)] O_h(t) \\ & \quad \times \int_{\rightarrow} d\tau_1 \cdots \int_{\rightarrow} d\tau_m T_{\rightarrow} [H'_h(\tau_1) \cdots H'_h(\tau_m)] \end{aligned} \quad (4.11)$$

と書ける。 $k = n - m$ と変数を書き換え、Kronecker のデルタを用いて $k + m = n$ を保ちつつ k と m の和を 0 から ∞ までとるように書き換える。すると、式 () は、

$$\begin{aligned} & \rightarrow \sum_{m,k=0}^{\infty} \frac{n!}{m!k!} \delta_{n,k+m} \left\{ \int_{\leftarrow} d\tau_1 \cdots \int_{\leftarrow} d\tau_k T_{\leftarrow} [H'_h(\tau_1) \cdots H'_h(\tau_k)] \right\} O_h(t) \\ & \quad \times \left\{ \int_{\rightarrow} d\tau_1 \cdots \int_{\rightarrow} d\tau_m T_{\rightarrow} [H'_h(\tau_1) \cdots H'_h(\tau_m)] \right\}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

さて、式 (4.8) に戻ると、 n の和は $\delta_{n,k+m}$ のために簡単に実行でき、以下を得る。

$$\begin{aligned} & T_{C_t} \left\{ \exp \left[-i \int_{C_t} d\tau H'_h(\tau) \right] O_h(t) \right\} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \left\{ \int_{\leftarrow} d\tau_1 \cdots \int_{\leftarrow} d\tau_k T_{\leftarrow} [H'_h(\tau_1) \cdots H'_h(\tau_k)] \right\} O_h(t) \\ & \quad \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i)^m}{m!} \left\{ \int_{\rightarrow} d\tau_1 \cdots \int_{\rightarrow} d\tau_m T_{\rightarrow} [H'_h(\tau_1) \cdots H'_h(\tau_m)] \right\}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

しかして、 $O(t)$ に左右から掛けられている因子を見比べると、それらがそれぞれ $v_h^\dagger(t_0, t)$ と $v_h(t_0, t)$ に等しいことが分かる。以上で、式 (4.4) と式 (4.7) の等価性が示された。■

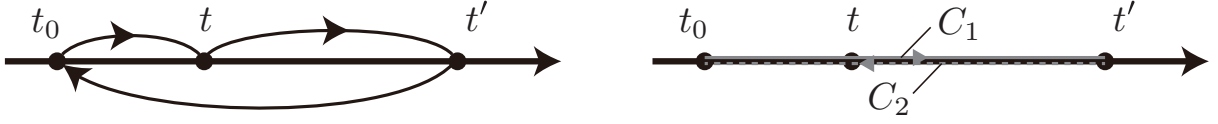
経路順序演算子は、熱平衡理論と全く同じように非平衡理論を構築するのに強力な形式的道具である。

さて、経路順序 Green 関数 (contour-ordered Green function) を定義しよう：

$$G(x, x') \equiv -i \langle T_C [\psi_H(x) \psi_H^\dagger(x')] \rangle, \quad (4.14)$$

ただし、経路 C は t_0 に始まり、同じ t_0 で終わる図 2 のような、実軸に沿って t と t' を一度だけ通るような経路を表す。ここで、Part I と同じように、 $\psi_H(x)$ はフェルミオンの場の演算子で、Heisenberg 表示を表す。また、以下では $x = (\mathbf{r}, t)$ あるいは $x = (\mathbf{r}, \tau)$ という簡略表記を用いる²⁾。

²⁾ 原文では $\mathbf{l} = (\mathbf{x}_1, t_1)$ などと書かれているが、個人的にはあまり馴染みがないため、馴染みのある表記に書き換えた。

図2 経路 C .

非平衡の理論において経路順序 Green 関数は、熱平衡の理論における因果 Green 関数に類似の役割を果たす。すなわち、以下で見るように、Wick の定理に基づいた摂動展開を有している。しかしながら、時刻ラベル τ と τ' は経路上の2つの分枝にあるため、それらがどの分枝にあるのかが問題になる。 τ と τ' は、図2の経路の2つの分枝のどちらの分枝にもありうるので、4つの可能性がある。ゆえに、式 (4.14) は、4つの異なる関数を内包する。

$$G(x, x') = \begin{cases} G_c(x, x') & t, t' \in C_1 \\ G^>(x, x') & t \in C_2, t' \in C_1 \\ G^<(x, x') & t \in C_1, t' \in C_2 \\ G_{\bar{c}}(x, x') & t, t' \in C_2. \end{cases} \quad (4.15)$$

ここで、因果 (あるいは時間順序) Green 関数 G_c を

$$\begin{aligned} G_c(x, x') &= -i\langle T[\psi_H(x)\psi_H^\dagger(x')] \rangle \\ &= -i\theta(t - t')\langle \psi_H(x)\psi_H^\dagger(x') \rangle + i\theta(t' - t)\langle \psi_H^\dagger(x')\psi_H(x) \rangle \end{aligned} \quad (4.16)$$

のように、また “greater” Green 関数 $G^>$ を

$$G^>(x, x') = -i\langle \psi_H(x)\psi_H^\dagger(x') \rangle \quad (4.17)$$

のように、そして “lesser” Green 関数 $G^<$ を

$$G^<(x, x') = +i\langle \psi_H^\dagger(x')\psi_H(x) \rangle \quad (4.18)$$

のように、最後に反時間順序 Green 関数 $G_{\bar{c}}$ を

$$\begin{aligned} G_{\bar{c}}(x, x') &= -i\langle \bar{T}[\psi_H(x)\psi_H^\dagger(x')] \rangle \\ &= -i\theta(t' - t)\langle \psi_H(x)\psi_H^\dagger(x') \rangle + i\theta(t - t')\langle \psi_H^\dagger(x')\psi_H(x) \rangle \end{aligned} \quad (4.19)$$

のように導入した。 $G_c + G_{\bar{c}} = -i\langle \psi_H(x)\psi_H^\dagger(x') \rangle + i\langle \psi_H^\dagger(x')\psi_H(x) \rangle = G^> + G^<$ なので、独立な関数は3つである。この自由度の選び方には幾つかの流儀があり、幾つもの表記法が見られる。我々の目的のために最も最適な関数は $G^>$ と $G^<$ (これらはしばしば「相関関数」という一般的な名前で書かれることもある) と、先進 Green 関数と遅延 Green 関数である。先進 Green 関数は

$$\begin{aligned} G^A(x, x') &= i\theta(t' - t)\langle \{\psi_H(x), \psi_H^\dagger(x')\} \rangle \\ &= -\theta(t' - t) [G^>(x, x') - G^<(x, x')] \end{aligned} \quad (4.20)$$

と遅延 Green 関数は

$$\begin{aligned} G^R(x, x') &= -i\theta(t - t')\langle \{\psi_H(x), \psi_H^\dagger(x')\} \rangle \\ &= \theta(t - t') [G^>(x, x') - G^<(x, x')] \end{aligned} \quad (4.21)$$

で定義される。ここで $\{A, B\} = AB + BA$ は反交換関係を表す。 $G^R(x, x') - G^A(x, x') = G^>(x, x') - G^<(x, x')$ が見てとれる。後ろの章にて、 $G^>, G^<, G^R, G^A$ の物理的な解釈について詳細に議論する予定である (どこ?)。

必要な関数の定義を終えて、本節の中心課題に戻るとする。すなわち、経路順序 Green 関数 (4.14) を Wick の定理を用いられる形に変形するということだ。第一段階として、式 (4.7) を導いた解析、つまり H 依存性を h 依存性に書き換えることをここでも繰り返す。その結果は、³⁾

$$G(x, x') = -i \langle T_C [S_C^H \psi_h(x) \psi_h^\dagger(x')] \rangle, \quad (4.22)$$

ここで、 $\psi_h^{(\dagger)}(x) = e^{ih(t-t_0)} \psi^{(\dagger)}(\mathbf{r}) e^{-ih(t-t_0)}$ は $\psi^{(\dagger)}(\mathbf{r})$ の相互作用表示であり、

$$S_C^H = \exp \left[-i \int_C d\tau H'_h(\tau) \right] \quad (4.23)$$

である。ダイヤグラムの摂動理論が存在することを示すためには、さらにもう一段階の式変形が必要である。 $h = H_0 + H_i$ のように h が 2 つの項を含んでいたこと、そして Wick の定理が H_0 に対してのみ機能することを思い出せば、 h 依存性を H_0 依存性に置き換えなければならないことになる。また、密度行列にも h が含まれており、それゆえに、式 (4.22) には、 $\rho(h)$, S_C^H , $\psi_h(x)$, $\psi_h^\dagger(x')$ の合計で 4 箇所に h が含まれていることに留意する。

この式変形は、いくぶん退屈であるが躓くところはほとんどないはずなので、詳細は文献 [7] に譲り、最終結果を記すだけで十分だろう。⁴⁾

$$G(x, x') = -i \frac{\text{Tr} \left\{ T_{C_v} [S_{C_v}^i S'_C \psi_{H_0}(x) \psi_{H_0}^\dagger(x')] \right\}}{\text{Tr} [\rho_0 T_{C_v} (S_{C_v}^i S'_C)]}, \quad (4.24)$$

ここで、密度行列 ρ_0 は

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta H_0)}{\text{Tr} [\exp(-\beta H_0)]} \quad (4.25)$$

で与えられ、

$$\begin{aligned} S'_C &= \exp \left[-i \int_C d\tau H'_{H_0}(\tau) \right], \\ S_{C_v}^i &= \exp \left[-i \int_{C_v} d\tau H_{i,H_0}(\tau) \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

であるが、 H'_{H_0} と H_{i,H_0} は H_0 による時間発展を表す；

$$H'_{H_0}(t) = e^{iH_0(t-t_0)} H' e^{-iH_0(t-t_0)}, \quad H_{i,H_0}(t) = e^{iH_0(t-t_0)} H_i e^{-iH_0(t-t_0)}.$$

また、経路 C は図 2 にて定義したものであり、経路 C_v は図 3 に示した。

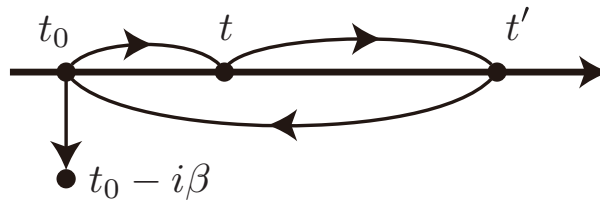


図 3 経路 C_v .

式 (4.24) は、重要な結果であり、見た目の複雑さに関わらず、多くの魅力的な性質を有している。まず第一に、厳密であるという点である。次に、全ての時間依存性は、 H_0 によって記されているため、「解くことがで

³⁾ このあたりの計算が端折られている点が、あまり親切ではないと感じる点ではある。

⁴⁾ このあたりの計算が端折られている点が、あまり親切ではないと感じる点ではある。

きる」。特に、平方完成できる密度行列 ($\sim \exp(-\beta H_0)$) のために、Wick の定理を用いることが可能であり、そのため Feynman ダイアグラムを非平衡系の問題に構成することができる。ちょうど熱平衡系のときのように、分母が非連結のダイアグラムからの寄与を打ち消してくれるのである。

以下のようにこの節の中心的な結果をまとめられる。すなわち、熱平衡理論と非平衡理論は構造的に等価であり、それらの違いは、単に実時間における積分が径路上の積分に置き換えられただけである。

4.3 解析接続

式 (4.24) は強力な公式であるが、径路上の積分を実時間の積分に置き換えられなければ、実用的とはいえない。実時間積分への書き換えの手続きは解析接続と呼ばれ、多くの異なる定式化がこれまで行われてきた。ここでは Langreth [8] による Kadanoff と Baym の方法 [9] を詳しく記す。

前節で示したように、径路順序 Green 関数は、熱平衡理論における時間順序 Green 関数と同じ摂動展開の構造を持っている。その結果、自己エネルギー汎関数を定義することができて、熱平衡のときと同じように Dyson 方程式を径路順序 Green 関数は有する：

$$G(x, x') = G_0(x, x') + \int dr_1 \int_{C_v} d\tau_1 G_0(x, x_1) U(x_1) G(x_1, x') \\ + \int dr_1 \int dr_2 \int_{C_v} d\tau_1 \int_{C_v} d\tau_2 G_0(x, x_1) \Sigma(x_1, x_2) G(x_2, x'), \quad (4.27)$$

ここでハミルトニアンにおける非平衡を与える項は 1 体のポテンシャル U で表されることを仮定した。そして相互作用は (既約な) 自己エネルギー $\Sigma[G]$ にすべて含まれている。

4.1 節で言及したが、 $t_0 \rightarrow -\infty$ とすることができるならば問題は簡略化する。もし相互作用が断熱的に印加されたのならば、 $[t_0, t_0 - i\beta]$ 区間からの寄与は消えるのである。この手続きによる情報の欠落は初期相関に関係している。多くの現実的な状況、たとえば定常輸送のような場合では、系が定常状態に達したとき初期相関は相互作用によって消失することは尤もらしい。その一方で、過渡的な応答を調べようとしたとき、初期相関は重要になりえて、興味深い問題を提示しているが、研究者による注目はごく限られてものに留まっている [10, 11]。また、ごく最近になって、径路の複素部分を数値的に計算するという重要な研究が行われた [12–15]。ともあれ、ここでは $t_0 \rightarrow -\infty$ の極限をとろう。この極限では径路 C_v と C は一致し、結局は径路 C のみを考えればよい。

Langreth の定理

Dyson 方程式 (4.27) を考えるうえで、 $C = AB$ 、あるいは厳密に表現すると、

$$C(t, t') = \int_C d\tau A(t, \tau) B(\tau, t') \quad (4.28)$$

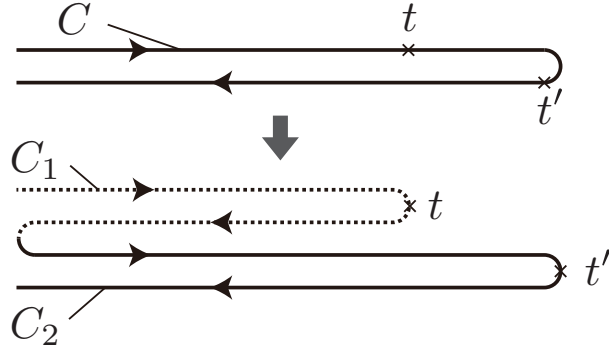
という構造と、同様の 3 つ以上の積を扱うことになる。ここでは時間変数のみに関心があるので、その他の空間変数やスピンなどについては (明らかな行列構造を有するのみなので) 省略することにする。式 (4.28) を評価するために、まず t を径路 C の前半部分 ($t_0 \rightarrow t'$ の径路) にあるとし、また t' は径路 C の後半部分 ($t' \rightarrow t_0$) にある場合を考えよう。式 (4.16)~(4.21) での議論によれば、lesser 成分を解析することになる。

次の段階として図 4 に示すように径路を変形させる。その結果、式 (4.28) は以下ようになる。

$$C^<(t, t') = \int_{C_1} d\tau A(t, \tau) B^<(\tau, t') + \int_{C_2} d\tau A^<(t, \tau) B(\tau, t'). \quad (4.29)$$

ここで、第 1 項において B に $<$ の記号が現れているが、径路の意味において積分変数 τ は常に t' より以前の時刻を表すという事実を用いた⁵⁾。同様の論理で第 2 項にも記号 $<$ が付与されている。さて、式 (4.29) の第 1

⁵⁾ ※ A や B を具体的に何と言及せずに記しているが、Green 関数の他にも自己エネルギーもありえる。しかしここまでで自己エネルギーの lesser 成分は未定義なので、あまり良い記述とは言えないように思う。

図4 経路 C の変形.

項を考え、その積分を2つの部分に分けると、

$$\begin{aligned}
 \int_{C_1} d\tau A(t, \tau) B^<(\tau, t') &= \int_{-\infty}^t dt_1 A^>(t, t_1) B^<(t_1, t') + \int_t^{-\infty} dt_1 A^<(t, t_1) B^<(t_1, t') \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 [\theta(t - t_1) (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1))] B^<(t_1, t') \\
 &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 A^R(t, t_1) B^<(t_1, t'), \tag{4.30}
 \end{aligned}$$

ただし、記号 $>, <$ を greater, lesser 関数 (4.17) と (4.18) の意味合いで導入し、遅延関数の定義 (4.21) を拡張する形で記号 R を導入した。第2項についても同様に、

$$\begin{aligned}
 \int_{C_2} d\tau A^<(t, \tau) B(\tau, t') &= \int_{-\infty}^{t'} dt_1 A^<(t, t_1) B^<(t_1, t') + \int_{t'}^{-\infty} dt_1 A^<(t, t_1) B^>(t_1, t') \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 A^<(t, t_1) [\theta(t' - t_1) (B^<(t_1, t') - B^>(t_1, t'))] \\
 &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 A^<(t, t_1) B^A(t_1, t'),
 \end{aligned}$$

ただし記号 A を先進関数 (4.20) を拡張する形で導入した。これらをまとめると、第一の Langreth の結果を得る:

$$C^<(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 [A^R(t, t_1) B^<(t_1, t') + A^<(t, t_1) B^A(t_1, t')]. \tag{4.31}$$

また、 $<$ を $>$ に置き換えるだけで、 $>$ 成分について同様の結果が得られる。実際、 t が $t' \rightarrow t_0$ の経路上にあり、 t' が $t_0 \rightarrow t'$ の経路上にある場合、

$$\begin{aligned}
 C^>(t, t') &= \int_{C'_1} d\tau A^>(t, \tau) B(\tau, t') + \int_{C'_2} d\tau A(t, \tau) B^>(\tau, t') \\
 &= \int_{-\infty}^{t'} dt_1 A^>(t, t_1) B^<(t_1, t') + \int_{t'}^{-\infty} dt_1 A^>(t, t_1) B^>(t_1, t') \\
 &\quad + \int_{-\infty}^t dt_1 A^>(t, t_1) B^>(t_1, t') + \int_t^{-\infty} dt_1 A^<(t, t_1) B^>(t_1, t') \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 A^>(t, t_1) [\theta(t' - t_1) (B^<(t_1, t') - B^>(t_1, t'))] \\
 &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 [\theta(t - t_1) (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1))] B^>(t_1, t') \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 [A^R(t, t_1) B^>(t_1, t') + A^>(t, t_1) B^A(t_1, t')],
 \end{aligned}$$

ただし C'_1, C'_2 はそれぞれ $-\infty \rightarrow t' \rightarrow -\infty$ と $-\infty \rightarrow t \rightarrow -\infty$ の径路を表す。

この結果 (4.31) は、3 つの (行列) 積に対して容易に一般化できる。仮に $D = ABC$ が径路上に定義されていたとすると、実軸上では

$$D^< = A^R B^R C^< + A^R B^< C^A + A^< B^A C^A \quad (4.32)$$

となる。実際、 $X = AB$ とおくと、

$$D^< = X^R C^< + X^< C^A = A^R B^R C^< + (A^R B^< + A^< B^A) C^A$$

となり、式 (4.32) を得る。また $D^>$ についても同様の計算で簡単に示すことができる。ここで、 $C^R = A^R B^R$ を用いたが、それは

$$\begin{aligned} C^R(t, t') &= \theta(t - t') [C^>(t, t') - C^<(t, t')] \\ &= \theta(t - t') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 [A^R(t, t_1) (B^>(t_1, t') - B^<(t_1, t')) + (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) B^A(t_1, t')] \\ &= \theta(t - t') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 [\theta(t - t_1) (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) (B^>(t_1, t') - B^<(t_1, t')) \\ &\quad + (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) \theta(t' - t_1) (B^<(t_1, t') - B^>(t_1, t'))] \\ &= \theta(t - t') \left[\int_{-\infty}^t dt_1 (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) (B^>(t_1, t') - B^<(t_1, t')) \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\infty}^{t'} dt_1 (A^>(t, t_1) - A^<(t, t_1)) (B^<(t_1, t') - B^>(t_1, t')) \right] \\ &= \int_{t'}^t dt_1 A^R(t, t_1) B^R(t_1, t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 A^R(t, t_1) B^R(t_1, t') \end{aligned} \quad (4.33)$$

最終行では $t_1 < t$ では $A^R(t, t_1) = 0$ かつ $t_1 > t'$ では $B^R(t_1, t') = 0$ であることを用いた。

ダイアグラムによる摂動展開において様々な項を考慮するとき、2 つの Green 関数線が平行（または反平行）に走るようなものに出会うことがある。たとえば、分極や、電子フォノン相互作用の自己エネルギーなどである。この場合、

$$\begin{aligned} E(\tau, \tau') &= A(\tau, \tau') B(\tau, \tau'), \\ F(\tau, \tau') &= A(\tau, \tau') B(\tau', \tau) \end{aligned} \quad (4.34)$$

のような項の lesser 成分や先進/遅延成分を計算しなければならなくなる。ここで τ と τ' は径路上の変数である。これらの lesser 成分はすなわち $\tau(\rightarrow t)$ が径路の前半部分にあり、 $\tau'(\rightarrow t')$ が経路の後半部分にあることを意味しているので、

$$\begin{aligned} E^<(t, t') &= A^<(t, t') B^<(t, t'), \\ F^<(t, t') &= A^<(t, t') B^>(t, t') \end{aligned} \quad (4.35)$$

となる。また、greater 成分についても同様に考えれば、

$$\begin{aligned} E^>(t, t') &= A^>(t, t') B^>(t, t'), \\ F^>(t, t') &= A^>(t, t') B^<(t, t') \end{aligned}$$

となるので,

$$\begin{aligned}
E^R(t, t') &= \theta(t - t') [E^>(t, t') - E^<(t, t')] \\
&= \theta(t - t') [A^>(t, t')B^>(t, t') - A^<(t, t')B^<(t, t')] \\
&= \theta(t - t') [A^>(t, t') - A^<(t, t')] B^>(t, t') + \theta(t - t') A^<(t, t') [B^>(t, t') - B^<(t, t')] \\
&= A^R(t, t')B^>(t, t') + A^<(t, t')B^R(t, t') \\
&= A^R(t, t') [B^>(t, t') - B^<(t, t')] + A^R(t, t') + B^<(t, t') + A^<(t, t')B^R(t, t') \\
&= A^R(t, t')B^R(t, t') + A^R(t, t') + B^<(t, t') + A^<(t, t')B^R(t, t')
\end{aligned}$$

ただし最終行で $t < t'$ では $A^R(t, t') = 0$ であることから $\theta(t - t')$ を補った。また,

$$\begin{aligned}
F^R(t, t') &= \theta(t - t') [F^>(t, t') - F^<(t, t')] \\
&= \theta(t - t') [A^>(t, t')B^<(t', t) - A^<(t, t')B^>(t', t)] \\
&= \theta(t - t') [A^>(t, t') - A^<(t, t')] B^<(t', t) + \theta(t - t') A^<(t, t') [B^<(t', t) - B^>(t', t)] \\
&= A^R(t, t')B^<(t', t) + A^<(t, t')B^A(t', t).
\end{aligned} \tag{4.36}$$

平衡状態における電子フォノン相互作用の自己エネルギー。

飛ばす。

5 基礎量子運動学的方程式

5.1 序論

この章では、非平衡 Green 関数に対する（実時間の）運動方程式を導入する。それらの式は後の章すべての基礎を成す。定式化には、等価であるが異なる方法が2つあり、一つは Kadanoff-Baym の方法、もう一つは Keldysh の方法である。最終結果は (5.7) と (5.11) でそれぞれ与えられており、それらは 5.2 節と 5.3 節において別個に議論する。ここでは原著の導出を再現するのではなく、むしろ前節で述べた解析接続の法則を用いた導出を行う。その方が簡潔で系統的な導出となるためである。

5.2 Kadanoff-Baym 形式

出発点は Dyson 方程式 (4.27) の微分形である:

$$\begin{aligned}
\left\{ i \frac{\partial}{\partial \tau} - \left[-\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + U(x) \right] \right\} G(x, x') &= \delta(x - x') + \int_C d\tau_1 \int d\mathbf{r}_1 \Sigma(x, x_1) G(x_1, x'), \\
\left\{ -i \frac{\partial}{\partial \tau'} - \left[-\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 + U(x') \right] \right\} G(x, x') &= \delta(x - x') + \int_C d\tau_1 \int d\mathbf{r}_1 G(x, x_1) \Sigma(x_1, x'),
\end{aligned} \tag{5.1}$$

ここで $x = (\mathbf{r}, \tau)$ と略記し、それに伴って $\delta(x - x') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(\tau - \tau')$ である。以下では、2 項の積を内部変数（空間 \mathbf{r} , 時間 τ , スピンなど）についての行列積であると解釈するという表記を採用するとより便利であり、ただ一つの変数のみに依存する量、たとえば G_0 や U は、この表記において対角行列となる。よって、式 (5.1) は、

$$\begin{aligned}
(G_0^{-1} - U) G &= 1 + \Sigma G, \\
G (G_0^{-1} - U) &= 1 + G \Sigma
\end{aligned} \tag{5.2}$$

と書くことができる。相関関数 $G^<$ や $G^>$ に対する式を求めたいので、規則 (4.31) を適用すると、

$$\begin{aligned} (G_0^{-1} - U) G^< &= \Sigma^R G^< + \Sigma^< G^A, \\ G^< (G_0^{-1} - U) &= G^R \Sigma^< + G^< \Sigma^A \end{aligned} \quad (5.3)$$

を得る。ここで注意しておきたいこととして、式 (5.2) におけるデルタ関数は、必ずゼロになる。それは、 $G^<$ の定義により τ と τ' は異なる分枝に位置して必ず τ' の方が経路上で後ろに現れるためである。

次に、式 (5.3) の二つの式を差分を取ると、

$$\left[(G_0^{-1} - U), G^< \right] = \Sigma^R G^< + \Sigma^< G^A - G^R \Sigma^< - G^< \Sigma^A. \quad (5.4)$$

ここで、恒等式

$$\begin{aligned} P^R &= \frac{1}{2}(P^R + P^A) + \frac{1}{2}(P^R - P^A), \\ P^A &= \frac{1}{2}(P^R + P^A) - \frac{1}{2}(P^R - P^A) \end{aligned} \quad (5.5)$$

を用いて式 (5.4) の右辺に現れる R と A を含む項を対称化する。

$$\begin{aligned} (5.4) &= \left[\frac{1}{2}(\Sigma^R + \Sigma^A) + \frac{1}{2}(\Sigma^R - \Sigma^A) \right] G^< + \Sigma^< \left[\frac{1}{2}(G^R + G^A) - \frac{1}{2}(G^R - G^A) \right] \\ &\quad - \left[\frac{1}{2}(G^R + G^A) + \frac{1}{2}(G^R - G^A) \right] \Sigma^< - G^< \left[\frac{1}{2}(\Sigma^R + \Sigma^A) - \frac{1}{2}(\Sigma^R - \Sigma^A) \right] \\ &= \left[\frac{1}{2}(\Sigma^R + \Sigma^A), G^< \right] + \left[\Sigma^<, \frac{1}{2}(G^R + G^A) \right] + \frac{1}{2} \{ (\Sigma^R - \Sigma^A), G^< \} - \frac{1}{2} \{ (G^R - G^A), \Sigma^< \} \end{aligned}$$

となるので、結局、 $\Sigma = \frac{1}{2}(\Sigma^R + \Sigma^A)$ と $G = \frac{1}{2}(G^R + G^A)$ という量を導入すると、式 (5.4) は

$$\left[(G_0^{-1} - U), G^< \right] - [\Sigma, G^<] - [\Sigma^<, G] = \frac{1}{2} \{ (\Sigma^R - \Sigma^A), G^< \} - \frac{1}{2} \{ (G^R - G^A), \Sigma^< \} \quad (5.6)$$

と書ける。ただし波括弧は反交換関係を表す。この右辺はまだ少し計算が必要である。 $G^R - G^A = G^> - G^<$ とそれに類する関係式 $\Sigma^R - \Sigma^A = \Sigma^> - \Sigma^<$ を用いると、(一般化)Kadanoff-Baym (GKB) 方程式

$$\begin{aligned} \left[(G_0^{-1} - U), G^< \right] - [\Sigma, G^<] - [\Sigma^<, G] &= \frac{1}{2} \{ (\Sigma^> - \Sigma^<), G^< \} - \frac{1}{2} \{ (G^> - G^<), \Sigma^< \} \\ &= \frac{1}{2} \{ \Sigma^>, G^< \} - \frac{1}{2} \{ G^>, \Sigma^< \} \end{aligned} \quad (5.7)$$

を得る。平衡系の理論においてスペクトル関数 $a = -2\text{Im} g^R = i(g^R - g^A)$ や自己エネルギーの虚部 $\gamma = -2\text{Im} \sigma^R = i(\sigma^R - \sigma^A)$ に出会することがあったが、同様の概念を非平衡系に拡張しよう。すなわち $A \equiv i(G^R - G^A)$ と $\Gamma \equiv i(\Sigma^R - \Sigma^A)$ 。この表記を用いると、

$$\left[(G_0^{-1} - U), G^< \right] - [\Sigma, G^<] - [\Sigma^<, G] = \frac{1}{2i} \{ \Gamma, G^< \} - \frac{1}{2i} \{ A, \Sigma^< \}$$

という式を得られる。これらの式が今後の議論における基礎となる。

greater 成分 $G^>$ に対する GKB 方程式を同様に導出することができる。結果としては、式 (5.7) との違いは、左辺における $<$ という記号がすべて $>$ に置き換えられるだけで、右辺は変更を受けない。実際、Langreth 則は $>$ についても全く同様に成り立つため、式 (5.6) まではすべての $<$ を $>$ に置き換えるだけでよい。

$$\begin{aligned} \left[(G_0^{-1} - U), G^> \right] - [\Sigma, G^>] - [\Sigma^>, G] &= \frac{1}{2} \{ (\Sigma^R - \Sigma^A), G^> \} - \frac{1}{2} \{ (G^R - G^A), \Sigma^> \} \\ &= \frac{1}{2} \{ (\Sigma^> - \Sigma^<), G^> \} - \frac{1}{2} \{ (G^> - G^<), \Sigma^> \} \\ &= -\frac{1}{2} \{ \Sigma^<, G^> \} + \frac{1}{2} \{ G^<, \Sigma^> \} \\ &= (5.7). \end{aligned}$$

この式と式 (5.7) の差分をとると、非平衡スペクトル関数 A に対する式

$$\left[\left(G_0^{-1} - U - \Sigma \right), A \right] - [F, G] = 0 \quad (5.8)$$

を得る。この関係式は時に整合性の確認として用いられる。

GKB 方程式の大雑把な導出をまとめると、1. lesser 成分に対する右 Dyson と左 Dyson 方程式の差分をとる、2. R/A について対称と反対称に分離して整理する、3. スペクトル関数と自己エネルギーの虚部を導入する、という手順になる。

具体的な応用に移る前に、いくつかの一般的性質についてコメントしておこう。第一に、閉じた方程式を得るためには、GKB 方程式は G^R と G^A の Dyson 方程式を補助的に用いなければならない。 G^R と G^A の非平衡な Dyson 方程式は平衡系におけるものと等価である。これは前の章で示した Langreth 則に従えば明らかである。よって、非常によく計算すべきものは 2 つの段階に分けられる。すなわち、まず G^R と G^A に対する Dyson 方程式を解く（あるいは解こうとする！）。それからその結果を入力として GKB 方程式に対して用いる。しかしながら、一つ難点がある。 $G^<$ や $G^>$ が G^R と G^A に対する Dyson 方程式に含まれているという状況に出会することがあるのだ。たとえば、電子格子相互作用の遅延自己エネルギーがあり、それは遅延関数に加えて、相関関数をも含んでいる。これは極めて複雑である。なぜなら Dyson 方程式と GKB 方程式を同時に解かなければならないのだから。

次に、一見すると分かりにくいだが、GKB 方程式の構造は、輸送方程式の構造をしている。相関関数 $G^<$ は、歴史的解釈を避けたとしても、ある意味で、分布関数を一般化させたものに相当している。この点については後に詳しく述べる。概略すると、式 (5.7) の左辺の第一の交換関係は（一般化した）駆動力を表し、第 2 項と第 3 項はくりこみを、そして右辺は量子的な衝突項を表している。

また、GKB 方程式もまた厳密であり、非可逆性はない。Boltzmann 方程式により予測されるような非可逆的ふるまいは、GKB 方程式にある近似を施した後に導かれる。

GKB 方程式を導出する過程で、右 Dyson 方程式と左 Dyson 方程式 (5.1) の差分をとった。この過程でどのような情報が落ちたのか気になるかもしれない。輸送方程式として、GKB 方程式はある（一般化された）分布関数の時間発展を決めることができるが、この分布関数に対してどのような初期状態が整合するかについては教えてくれない。この情報は元の Dyson 方程式 (5.1) には含まれており、差分にするときには落ちたのである。ゆえに、原理的には、GKB 方程式はさらに別の方程式、たとえば式 (5.1) の和の方程式を補助的に用いるべきだろう。後にこのやり方が実際に機能する例を見る。

5.3 Keldysh 形式

特定の応用に対しては Boltzmann 方程式を積分方程式、より正確には積分微分方程式として書いた方が都合がよい場合（たとえば 10 章や 12 章で議論するような応用例）がある。量子運動論において類似の状況がある。つまり、GKB 方程式 (5.7) を用いるよりも、その積分形を考える方が使い勝手がよいということである。歴史的には Keldysh [16] は、Kadanoff と Baym とはほぼ同時期に、しかし独立にこの方法を導いた。（もちろん両者は Schwinger スクールの先駆の仕事 [17–19] をその起源としてもっている。）

Keldysh の方法と Kadanoff-Baym の方法は等価であるが、完全性のために、ここで Keldysh の積分方程式を導出しておこう。ただし、ここでも Keldysh の原著に従うというよりは、複素時間 Dyson 方程式に対して解析接続の方法（Langreth 則）を適用した導出を行ない、少し書き換えた Keldysh 方程式に等価なものでまとめる。式 (4.27) を簡潔に書いた $G = G_0 + G_0 \Sigma G$ に⁶⁾式 (4.32) を用いると、

$$G^< = G_0^< + G_0^R \Sigma^R G^< + G_0^R \Sigma^< G^A + G_0^< \Sigma^A G^A. \quad (5.9)$$

⁶⁾ 簡単のために 1 体のポテンシャル項については落とした。それは自由な Green 関数を再定義し直すことで吸収させることができる。

ここで左辺を右辺の $G^<$ に再起的に代入すると,

$$\begin{aligned} G^< &= G_0^< + G_0^R \Sigma^R \left(G_0^< + G_0^R \Sigma^R G^< + G_0^R \Sigma^< G^A + G_0^< \Sigma^A G^A \right) + G_0^R \Sigma^< G^A + G_0^< \Sigma^A G^A \\ &= (1 + G_0^R \Sigma^R) G_0^< (1 + \Sigma^A G^A) + (G_0^R + G_0^R \Sigma^R G_0^R) \Sigma^< G^A + G_0^R \Sigma^R G_0^R \Sigma^R G^<. \end{aligned} \quad (5.10)$$

上式は非常に示唆的であり, 無限次まで再起的に代入し続けると,

$$G^< = (1 + G^R \Sigma^R) G_0^< (1 + \Sigma^A G^A) + G^R \Sigma^< G^A \quad (5.11)$$

が得られる. 実際, 代入していくと,

$$\begin{aligned} G^< &= (1 + G_0^R \Sigma^R) G_0^< (1 + \Sigma^A G^A) + (G_0^R + G_0^R \Sigma^R G_0^R) \Sigma^< G^A \\ &\quad + G_0^R \Sigma^R G_0^R \Sigma^R (G_0^< + G_0^R \Sigma^R G^< + G_0^R \Sigma^< G^A + G_0^< \Sigma^A G^A) \\ &= (1 + G_0^R \Sigma^R + G_0^R \Sigma^R G_0^R \Sigma^R) G_0^< (1 + \Sigma^A G^A) + (G_0^R + G_0^R \Sigma^R G_0^R + G_0^R \Sigma^R G_0^R \Sigma^R) \Sigma^< G^A \\ &\quad + G_0^R \Sigma^R G_0^R \Sigma^R G_0^R \Sigma^R G^< \\ &= \dots \\ &= (1 + G^R \Sigma^R) G_0^< (1 + \Sigma^A G^A) + G^R \Sigma^< G^A. \end{aligned}$$

式 (5.11) が Keldysh の結果と同等である. ただし原著では, 別の関数 $G^K = G^< + G^>$ に対して書かれていたが, それは些細な違いでしかない.

Keldysh 方程式と GKB 方程式の関係は, 通常の微分方程式+境界条件とそれに対応する積分方程式の関係に類似している. 出発点をどのように選ぶかの違いだけに見える.

参考文献

- [1] G. D. Mahan, “Many-Particle Physics”, 2nd edn. (Plenum, New York, 1990).
- [2] S. Hershfield: Phys. Rev. Lett. 70, 2135 (1993).
- [3] P. Bokes, H. Mera, R. W. Godby: Phys. Rev. B 72 165425 (2005).
- [4] P. Coleman, W. Mao: J. Phys. Cond. Matt. 16, L263 (2004).
- [5] B. Doyon, N. Andrei: Phys. Rev. B 73, 245326 (2006).
- [6] J. E. Han, Phys. Rev. B 73, 125319 (2006).
- [7] J. Rammer, H. Smith: Rev. Mod. Phys. 58, 323 (1986).
- [8] D. C. Langreth: in Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids, ed. by J. T. Devreese, E. Van Doren (Plenum, New York, 1976).
- [9] L. P. Kadanoff, G. Baym: Quantum Statistical Mechanics (Benjamin, New York, 1962).
- [10] Yu. A. Kukharev, S. G. Tikhodeev: Sov. Phys. JETP 56, 831 (1982).
- [11] M. Wagner: Phys. Rev. B 44, 6104 (1991).
- [12] N. E. Dahlen, R. van Leeuwen: Phys. Rev. Lett. 98, 153004 (2007).
- [13] P. Danielewicz: Ann. Phys. (N.Y.) 152, 239 (1984).
- [14] P. Danielewicz: Ann. Phys. (N.Y.) 152, 305 (1984).
- [15] R. van Leeuwen, N. E. Dahlen, A. Stan: Phys. Rev. B 74, 195105 (2006).
- [16] L. P. Keldysh: Sov. Phys. JETP 20, 1018 (1965).
- [17] P. M. Bakshi, K. T. Mahanthappa: J. Mat. Phys. 4, 1 (1963).
- [18] P. M. Bakshi, K. T. Mahanthappa: J. Mat. Phys. 4, 12 (1963).
- [19] J. Schwinger: J. Math. Phys. 2, 407 (1961).