

多体系の量子力学

LouiG*

2025 年 4 月 9 日

* <https://pr440.github.io>

目次

第 I 部	量子多体系の一般的な取扱い	7
第 1 章	量子多体系の記述	8
1.1	多体量子状態	8
1.2	生成消滅演算子	10
1.3	量子多体系の力学	12
1.3.1	多粒子系の 1 体演算子	13
1.3.2	量子状態の変換則 I : 連続変換	15
1.3.3	量子多体系のダイナミクス	17
1.3.4	2 体演算子	19
1.3.5	スピン	20
1.3.6	量子状態の変換則 II : 離散変換	22
1.4	熱力学極限での多体量子状態	23
1.4.1	正準典型性と熱力学ポテンシャルの微視的表式	23
1.4.2	アンサンブル形式による熱平衡状態の表現	25
1.4.3	密度行列によるアンサンブル形式の表現	27
1.4.4	同種粒子系の統計性	29
1.4.5	熱的純粋量子状態による熱平衡状態の表現	31
1.5	経路積分	31
1.5.1	1 粒子系の経路積分 (導入)	31
1.5.2	多粒子系の経路積分	34
1.5.3	スピン系の経路積分	40
1.5.4	拘束系の経路積分	40
1.6	エンタングルメント	40
第 2 章	量子多体系の解析手法	41
2.1	Rayleigh-Schrödinger の摂動論	41
2.2	Brillouin-Wigner の摂動論	42
2.3	相互作用描像	43
2.3.1	Fermi の黄金律	44
2.3.2	調和摂動	46
2.4	量子状態の位相不変量	47
2.4.1	Chern の定理	47
2.4.2	Berry 接続・曲率	47
2.5	Green 関数	52
2.5.1	実時間 Green 関数	52
2.5.2	相関関数のスペクトル表示	57

2.5.3	因果 Green 関数による摂動展開	60
2.5.4	温度 Green 関数：虚時間形式	73
2.5.5	Schwinger-Keldysh 形式	79
2.6	スケーリングの方法	84
2.6.1	臨界現象のスケーリング理論	84
2.6.2	くりこみ群	86
2.6.3	時空のスケール変換と量子相	86
2.6.4	共形不変性	86
2.7	ボソン化法	86
2.8	Floquet の定理	86
2.9	行列積状態・テンソルネットワーク状態	89
第 3 章	量子多体系の応答現象	90
3.1	線形応答の現象論	90
3.1.1	応答関数	90
3.1.2	因果律と Kramers-Kronig の関係式	91
3.1.3	線形応答と熱力学	92
3.2	量子系の線形応答	93
3.3	量子系の非線形応答	97
第 II 部	量子多体系各論	101
第 4 章	電子相関の一般論	102
4.1	相互作用の遮蔽と集団励起	102
4.2	個別励起のくりこみ：Fermi 流体	102
4.3	超伝導相：BCS 基底状態	102
4.4	朝永-Luttinger 流体	102
第 5 章	固体結晶中の電子多体系	103
5.1	固体電子の 1 粒子状態とバンド描像	103
5.1.1	Bloch 状態	104
5.1.2	Wannier 状態	108
5.2	固体結晶中の電子相関	110
5.3	不純物ポテンシャルの効果	110
第 6 章	格子上のスピン多体系	111
6.1	固体結晶中の磁性イオン	111
6.1.1	多電子原子系の磁気モーメント	111
6.1.2	交換相互作用	111
6.1.3	スピン軌道相互作用	111
6.2	スピン波近似とマグノン	111
6.3	1 次元スピン鎖の厳密な結果	111
6.4	フラストレート系と量子スピン液体	111
第 7 章	格子振動の量子論	112
第 8 章	電磁場の量子論	113

第 III 部	多体系間の相互作用	115
第 9 章	電子-格子相互作用	116
第 10 章	固体結晶の光学応答	117
10.1	固体電子の光学応答	117
10.1.1	光学伝導度	118
10.2	格子振動の光学応答	120
第 11 章	遍歴電子系	121
第 IV 部	量子多体系のトポロジカル相	123
第 12 章	トポロジカル相の一般論	124
12.1	対称性とトポロジカル相	124
12.2	エッジ状態とバルクエッジ対応	124
12.3	トポロジカル秩序	124
第 13 章	電子系のトポロジ	125
13.1	量子 Hall 効果	125
13.2	トポロジカル絶縁体	125
13.3	トポロジカル超伝導体	125
第 14 章	スピン系のトポロジ	126
第 V 部	非平衡ダイナミクス下での量子多体系	127
第 15 章	周期駆動された量子多体系	128
第 16 章	クエンチ過程での量子多体系	129
第 17 章	散逸をもつ量子多体系	130
第 VI 部	付録	131
付録 A	1 粒子系の量子力学	132
A.1	角運動量代数	132
A.1.1	一般化角運動量の代数	132
A.1.2	角運動量の合成	133
A.2	Bloch の定理	134
A.3	Aharonov-Bohm 効果	134
付録 B	場の古典論	135
B.1	場の解析力学	135
B.1.1	Lagrange 形式	135
B.1.2	Hamilton 形式	136
B.1.3	複素場の解析力学	137
B.1.4	Noether カレント	139
B.2	Dirac 場	141
B.2.1	相対論的な系	142
B.2.2	Dirac のスピノル場	143
B.2.3	Dirac 場の Noether カレント	146
B.2.4	非相対論極限	147
B.3	ゲージ場	148

B.3.1	Schrödinger 場に付随するゲージ場	148
B.3.2	Dirac 場に付随するゲージ場	150
B.3.3	ゲージ場の解析力学	152
B.4	物質中の電磁場	155
B.5	Ginzburg-Landau 理論	156
付録 C	数学的補足	157
C.1	積分公式	157
C.2	Fourier 変換	157
C.2.1	Fourier 級数展開	157
C.2.2	Fourier 変換	157
C.2.3	離散 Fourier 変換	158
C.3	Baker-Campbell-Hausdorff の公式・Trotter 積公式	159
C.4	キュムラント展開	161
C.5	特異値分解	161
C.6	汎関数解析	161

第I部 量子多体系の一般的な取扱い

第 1 章 量子多体系の記述

1 粒子の量子力学についての知識をもとに、多粒子系の量子力学的な取り扱いの基礎を構築していく。

1.1 多体量子状態

1 粒子状態 $|\psi_i\rangle$ を持つ粒子が $i = 1, 2, \dots, N$ まで存在するとき、これら N 粒子全体の量子状態は、各粒子が識別可能な別種の粒子である場合には、

$$|\psi\rangle \equiv |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \cdots |\psi_N\rangle$$

と通常のテンソル積で表せばよいが、識別不可能な同種粒子である場合にはそのようなテンソル積の状態に粒子を入れ替えてできるテンソル積の状態も等確率で重ね合わせた状態

$$|\psi\rangle = |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \zeta^P |\psi_{P(1)}\rangle |\psi_{P(2)}\rangle \cdots |\psi_{P(N)}\rangle \quad (1.1.1)$$

で表されるべきである。ここで P は $\{1, 2, \dots, N\}$ に対する置換を表し、総和は可能な全ての置換 P に対しとっている。同じ粒子の組を 2 回入れ替えたときには状態が戻るように、 $\zeta = \pm 1$ に対し、

$$\zeta^P = \begin{cases} \zeta & (P \text{ が奇置換}) \\ 1 & (P \text{ が偶置換}) \end{cases}$$

となる。 $\zeta = +1$ であるような粒子を Bose 粒子 (ボソン)、 $\zeta = -1$ であるような粒子のことを Fermi 粒子 (フェルミオン) という¹⁾。定義から、

$$|\psi_{P(1)}, \psi_{P(2)}, \dots, \psi_{P(N)}\rangle = \zeta^P |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle$$

となっており、特に Fermi 粒子は 1 粒子状態の並べ方によっては同じ状態の組の多粒子系でも全体の状態の符号が反転しうることに注意する。

Fermi 粒子については N 粒子の中に同じ状態を持つものがあると、その間に入れ替えてできるテンソル積が元のテンソル積と打ち消し合うため、得られる粒子系全体の状態ベクトルが 0 となってしまう。すなわち、Fermi 粒子系では 2 つ以上の粒子が同じ状態をとることが許されない。これを Pauli の排他原理という。

1) 上の ζ^P の定義は $\zeta = \pm 1$ のときのみである。 $|\zeta| = 1$ を満たす範囲で ζ は複素数に拡張すると、 ζ^P は置換 P を互換の積に直したときの積の個数だけ ζ の冪乗をとることで与えられる。 $\zeta \neq \pm 1$ であるような粒子はエニオンと呼ばれる。

(1.1.1) で定義された多体量子状態に対し、同種 N 粒子の量子状態との内積は、

$$\begin{aligned}\langle\phi|\psi\rangle &= \langle\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{P,Q} \zeta^P \zeta^Q \langle\phi_{P(1)}|\psi_{Q(1)}\rangle \langle\phi_{P(2)}|\psi_{Q(2)}\rangle \cdots \langle\phi_{P(N)}|\psi_{Q(N)}\rangle \\ &= \sum_R \zeta^R \langle\phi_1|\psi_{R(1)}\rangle \langle\phi_2|\psi_{R(2)}\rangle \cdots \langle\phi_N|\psi_{R(N)}\rangle\end{aligned}$$

で与えられる。ここで、 P, Q, R は $\{1, 2, \dots, N\}$ に対する置換を表し、 $R = P^{-1} \circ Q$ である。総和は全て可能な置換 P, Q, R に対しとっている。特に、 $\zeta = -1$ の Fermi 粒子系の場合、この内積は、

$$\langle\phi|\psi\rangle = \begin{vmatrix} \langle\phi_1|\psi_1\rangle & \langle\phi_1|\psi_2\rangle & \cdots & \langle\phi_1|\psi_N\rangle \\ \langle\phi_2|\psi_1\rangle & \langle\phi_2|\psi_2\rangle & \cdots & \langle\phi_2|\psi_N\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\phi_N|\psi_1\rangle & \langle\phi_N|\psi_2\rangle & \cdots & \langle\phi_N|\psi_N\rangle \end{vmatrix}$$

というように行列式で表される。また、同様にしてケット-ブラの積も

$$|\phi\rangle\langle\psi| = \sum_P \zeta^P (|\phi_1\rangle\langle\psi_{P(1)}|) \otimes (|\phi_2\rangle\langle\psi_{P(2)}|) \otimes \cdots \otimes (|\phi_N\rangle\langle\psi_{P(N)}|)$$

で与えられることがわかる。

正規直交系をなす 1 粒子状態の正規直交系 $\{|\alpha_i\rangle\}$ を用意すると、

$$\begin{aligned}\frac{1}{N!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} |\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle \langle\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_N}| \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \sum_P \zeta^P (|\alpha_{i_1}\rangle\langle\alpha_{i_{P(1)}}|) \otimes (|\alpha_{i_2}\rangle\langle\alpha_{i_{P(2)}}|) \otimes \cdots \otimes (|\alpha_{i_N}\rangle\langle\alpha_{i_{P(N)}}|) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \sum_P \zeta^P (|\alpha_{i_{P(1)}}\rangle\langle\alpha_{i_1}|) \otimes (|\alpha_{i_{P(2)}}\rangle\langle\alpha_{i_2}|) \otimes \cdots \otimes (|\alpha_{i_{P(N)}}\rangle\langle\alpha_{i_N}|)\end{aligned}$$

に対して、 $|\alpha_{j_1}, \alpha_{j_2}, \dots, \alpha_{j_N}\rangle$ を右から作用させると、

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{N!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \sum_P \zeta^P (|\alpha_{i_{P(1)}}\rangle\langle\alpha_{i_1}|) \otimes (|\alpha_{i_{P(2)}}\rangle\langle\alpha_{i_2}|) \otimes \cdots \otimes (|\alpha_{i_{P(N)}}\rangle\langle\alpha_{i_N}|) \right] |\alpha_{j_1}, \alpha_{j_2}, \dots, \alpha_{j_N}\rangle \\ &= \left(\frac{1}{N!} \right)^{3/2} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \sum_{P,Q} \zeta^P \zeta^Q |\alpha_{i_{P(1)}}\rangle |\alpha_{i_{P(2)}}\rangle \cdots |\alpha_{i_{P(N)}}\rangle \\ &\quad \times \langle\alpha_{i_1}|\alpha_{j_{Q(1)}}\rangle \langle\alpha_{i_2}|\alpha_{j_{Q(2)}}\rangle \cdots \langle\alpha_{i_N}|\alpha_{j_{Q(N)}}\rangle \\ &= \left(\frac{1}{N!} \right)^{3/2} \sum_{P,Q} \zeta^P \zeta^Q |\alpha_{j_{Q \circ P(1)}}\rangle |\alpha_{j_{Q \circ P(2)}}\rangle \cdots |\alpha_{j_{Q \circ P(N)}}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_R \zeta^R |\alpha_{j_{R(1)}}\rangle |\alpha_{j_{R(2)}}\rangle \cdots |\alpha_{j_{R(N)}}\rangle = |\alpha_{j_1}, \alpha_{j_2}, \dots, \alpha_{j_N}\rangle\end{aligned}$$

となることから、完全性関係

$$\frac{1}{N!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} |\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle \langle\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_N}| = \hat{I}^{(N)} \quad (1.1.2)$$

が導かれる ($\hat{I}^{(N)}$ は N 粒子状態に対する恒等演算子)。 $\{|\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle\}$ は、Fermi 粒子の場合には $i_1 < i_2 < \dots < i_N$ の条件²⁾のもとで正規直交系をなす一方、Bose 粒子の場合には $i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_N$ の条件を課しても直交系は成すが正規化は満たされない。実際に、1 粒子状態 $|\alpha_i\rangle$ を持つ粒子が n_i 個ある N 粒子系の状態のノルムは

$$\langle \alpha_1, \dots, \alpha_1, \alpha_2, \dots | \alpha_1, \dots, \alpha_1, \alpha_2, \dots \rangle = \prod_i (n_i)!$$

となることが導かれる。

以上で議論してきた N 粒子状態を $N = 0$ の場合でも考えておくと、粒子がないという状態は (位相の不定性を除いて) 1 つしかない。それを $|0\rangle$ とおき ($\langle 0|0\rangle = 1$ とする)、真空状態と呼ぶ。

1 粒子系の量子力学において状態は Hilbert 空間 \mathcal{V} の元であった³⁾。それに対して N 粒子系の状態は 1 粒子状態の Hilbert 空間のテンソル積 $\mathcal{V}^{\otimes N}$ の元となる。多体量子状態が張る空間はこれら $\mathcal{V}^{\otimes N}$ から構成される線形空間で、Fock 空間と呼ばれる。

1.2 生成消滅演算子

N 粒子系の量子状態 $|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle$ と、それに 1 粒子状態 $|\phi\rangle$ の粒子を加え入れた $(N + 1)$ 粒子系の量子状態 $|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N, \phi\rangle$ に対し、次のような作用をもつ演算子 $\hat{a}^\dagger(\phi)$ を考える。

$$\hat{a}^\dagger(\phi) |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle = |\phi, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle$$

$(N + 1)$ 粒子系の量子状態 $|\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{N+1}\rangle$ と上式の両辺との内積をとり、複素共役をとると、

$$\begin{aligned} \langle \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N | \hat{a}(\phi) | \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{N+1} \rangle &= \langle \phi, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N | \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{N+1} \rangle \\ &= \sum_P \zeta^P \langle \phi | \chi_{P(1)} \rangle \langle \psi_1 | \chi_{P(2)} \rangle \langle \psi_2 | \chi_{P(3)} \rangle \cdots \langle \psi_N | \chi_{P(N+1)} \rangle \\ &= \sum_k \zeta^{k-1} \langle \phi | \chi_k \rangle \sum_Q \zeta^Q \langle \psi_1 | \chi_{Q(1)} \rangle \langle \psi_2 | \chi_{Q(2)} \rangle \cdots \langle \psi_N | \chi_{Q(N)} \rangle \\ &= \sum_k \zeta^{k-1} \langle \phi | \chi_k \rangle \langle \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N | \chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{k-1}, \chi_{k+1}, \dots, \chi_{N+1} \rangle \end{aligned}$$

となる (P は $\{1, 2, \dots, N\}$ の置換、 Q は $\{1, 2, \dots, k-1, k+1, \dots, N\}$ の置換) ことから、 $\hat{a}(\phi)$ の作用が

$$\hat{a}(\phi) |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle = \sum_k \zeta^{k-1} \langle \phi | \chi_k \rangle |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle$$

と表せることがわかる。ここで右辺は全ての $|\chi_i\rangle$ で $\langle \phi | \chi_i \rangle = 0$ である場合は 0 に、それ以外の場合には $(N - 1)$ 粒子系の量子状態になっていることに注意する。このように系に粒子を追加する演算子 $\hat{a}^\dagger(\phi)$ の複素共役 $\hat{a}(\phi)$ は粒子を減少させる演算子になっていることがわかる。これらを生成消滅演算子という。

2) ある 1 粒子状態の組で表される多体状態が一意に定まるように状態のとり方を制限している。Bose 粒子での条件も同じ。

3) 「1 粒子状態の完全系」は \mathcal{V} を張る状態の集合の意味で用いている。以降も同様。

異なる 1 粒子状態の生成消滅演算子の積がどのように作用するかを考える。生成演算子と消滅演算子の積は、

$$\begin{aligned}\hat{a}(\phi_1)\hat{a}^\dagger(\phi_2)|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle &= \langle\phi_1|\phi_2\rangle|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle \\ &\quad + \sum_k \zeta^k \langle\phi_1|\chi_k\rangle|\phi_2, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{k-1}, \chi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle \\ \hat{a}^\dagger(\phi_2)\hat{a}(\phi_1)|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle &= \sum_k \zeta^{k-1} \langle\phi_1|\chi_k\rangle|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{k-1}, \chi_{k+1}, \dots, \psi_N, \phi_2\rangle\end{aligned}$$

となることから、

$$[\hat{a}(\phi_1), \hat{a}^\dagger(\phi_2)]_{-\zeta} \equiv \hat{a}(\phi_1)\hat{a}^\dagger(\phi_2) - \zeta\hat{a}^\dagger(\phi_2)\hat{a}(\phi_1) = \langle\phi_1|\phi_2\rangle$$

が成り立つとわかる。 $[\hat{A}, \hat{B}]_{-\zeta}$ は $\zeta = +1$ の Bose 粒子のときには交換子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ 、 $\zeta = -1$ の Fermi 粒子のときは反交換子 $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ である。生成演算子同士、消滅演算子同士の交換・反交換子は、

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger(\phi_1)\hat{a}^\dagger(\phi_2)|\phi_1, \phi_2, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle &= |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{k-1}, \chi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle \\ &= \zeta|\phi_2, \phi_1, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{k-1}, \chi_{k+1}, \dots, \psi_N\rangle \\ &= \zeta\hat{a}^\dagger(\phi_2)\hat{a}^\dagger(\phi_1)|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle\end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned}\hat{a}(\phi_1)\hat{a}(\phi_2)|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle &= \sum_{k < l} \zeta^{k-1} \zeta^{l-1} \langle\phi_1|\chi_k\rangle \langle\phi_2|\chi_l\rangle |\psi_1, \psi_2, \dots, (\psi_k, \psi_l \text{ のみなし}) \dots, \psi_N\rangle \\ &\quad + \sum_{k > l} \zeta^{k-2} \zeta^{l-1} \langle\phi_1|\chi_k\rangle \langle\phi_2|\chi_l\rangle |\psi_1, \psi_2, \dots, (\psi_k, \psi_l \text{ のみなし}) \dots, \psi_N\rangle \\ &= \zeta \sum_{k > l} \zeta^{k-1} \zeta^{l-1} \langle\phi_2|\chi_l\rangle \langle\phi_1|\chi_k\rangle |\psi_1, \psi_2, \dots, (\psi_k, \psi_l \text{ のみなし}) \dots, \psi_N\rangle \\ &\quad + \zeta \sum_{k < l} \zeta^{k-2} \zeta^{l-1} \langle\phi_2|\chi_l\rangle \langle\phi_1|\chi_k\rangle |\psi_1, \psi_2, \dots, (\psi_k, \psi_l \text{ のみなし}) \dots, \psi_N\rangle \\ &= \zeta\hat{a}(\phi_1)\hat{a}(\phi_2)|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle\end{aligned}$$

より、

$$[\hat{a}(\phi_1), \hat{a}(\phi_2)]_{-\zeta} = 0, \quad [\hat{a}^\dagger(\phi_1), \hat{a}^\dagger(\phi_2)]_{-\zeta} = 0$$

となる⁴⁾。

前節の正規直交系をなす 1 粒子状態の完全系 $\{|\alpha_i\rangle\}$ を再び用いる。 $\hat{a}(\alpha_i) = \hat{a}_i$ と表すことにすると、

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle &= \sum_k \zeta^{k-1} \langle\alpha_i|\alpha_{i_k}\rangle |\alpha_i, \alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_{k-1}}, \alpha_{i_{k+1}}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle \\ &= \sum_k \langle\alpha_i|\alpha_{i_k}\rangle |\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_{k-1}}, \alpha_i, \alpha_{i_{k+1}}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle \\ &= n_i |\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_{k-1}}, \alpha_{i_k} \alpha_{i_{k+1}}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle\end{aligned}$$

4) ここで、前節で見た Fermi 粒子系の多粒子状態が 1 粒子状態の並べ方で符号を反転させうることを再考すると、Fermi 粒子系は生成演算子の並べ方についての情報を状態の符号という形で有していることがわかる。

となり、 $\hat{n}_i \equiv \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ に対して $|\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle$ は固有値 n_i の固有状態となることがわかる。また、 n_i は $|\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \dots, \alpha_{i_N}\rangle$ に含まれる 1 粒子状態 $|\alpha_i\rangle$ の粒子数である。このため \hat{n}_i の固有値は Bose 粒子系では $n_i = 0, 1, 2, \dots$ に、Fermi 粒子系では $n_i = 0, 1$ に限られる。1 粒子状態の直交系に対応した \hat{n}_i の組に対し、全てを足し合わせた

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i$$

は系の総粒子数を与える演算子である。一般に $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ と \hat{N} の間には次の交換関係が成り立つ⁵⁾。

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{N}] &= \sum_j [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] = \sum_j \left([\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_{-\zeta} \hat{a}_j + \zeta \hat{a}_j^\dagger [\hat{a}_i, \hat{a}_j]_{-\zeta} \right) = \hat{a}_i \\ [\hat{a}_i^\dagger, \hat{N}] &= - \left([\hat{a}_i, \hat{N}] \right)^\dagger = -\hat{a}_i^\dagger \end{aligned} \quad (1.2.1)$$

生成消滅演算子の導入により、異なる粒子数状態の間での内積が必ず 0 になることが示される。なぜなら、任意の多粒子系に量子状態は存在する粒子の 1 粒子状態の数だけ生成演算子を真空に作用させることで得られるため、粒子数の違う状態間での内積は生成演算子と消滅演算子の数がつりあわず、交換関係・反交換関係を用いることで消滅演算子が真空ケットベクトルに、あるいは生成演算子が真空ブラベクトルに作用するように変形することができて、そのような項は 0 になるからである。また、 N 粒子状態空間上での完全性関係が (1.1.2) で与えられたことから、Fock 空間全体での恒等演算子 \hat{I} を与える完全性関係が

$$\hat{I} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2}^\dagger \cdots \hat{a}_{i_N}^\dagger \hat{a}_{i_N} \cdots \hat{a}_{i_2} \hat{a}_{i_1}$$

で与えられることもわかる。

異種粒子の多体状態

異種粒子の多体状態は各同種粒子系の多体状態のテンソル積で与えればよいので、その状態空間は各同種粒子系の Fock 空間の直積である。各同種粒子系に対する生成消滅演算子を他の同種粒子系の恒等演算子とのテンソル積という形でこの状態空間上の演算子に拡張すれば、異種粒子の多体状態は次のように表せる。

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_N; \beta_1, \dots, \beta_{N'}\rangle = \hat{a}^\dagger(\alpha_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\alpha_N) \hat{b}^\dagger(\beta_1) \cdots \hat{b}^\dagger(\beta_{N'}) |0\rangle$$

ここで、 \hat{a}_i^\dagger と \hat{b}_i^\dagger は異種粒子の生成演算子であり、 $|0\rangle$ は各粒子系の真空状態のテンソル積である。生成消滅演算子と恒等演算子は可換であることから、異種粒子の生成消滅演算子は必ず可換である。

1.3 量子多体系の力学

1 粒子系の量子力学における扱いを拡張する形で、多体系の物理量に対する演算子を導入し、力学・運動学的記述の方法を確立する。

5) 生成消滅演算子を作用させた状態は必ず粒子数が ± 1 変化していることをふまえれば (1.2.1) は自明な関係である。

1.3.1 多粒子系の 1 体演算子

1 粒子系の量子力学で定義された物理量 A に対応する演算子 $\hat{A}^{(1)}$ は、正規直交系をなす 1 粒子状態の完全系 $\{|\alpha_i\rangle\}$ を用いて、

$$\hat{A}^{(1)} = \sum_{i,j} |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| \hat{A}^{(1)} |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j| = \sum_{i,j} \langle \alpha_i| \hat{A} |\alpha_j\rangle |\alpha_i\rangle \langle \alpha_j|$$

と表せた。そこで、 $|\alpha_i\rangle$ に対応する生成消滅演算子 $\hat{a}^\dagger(\alpha_i), \hat{a}(\alpha_i)$ を用いて、

$$\hat{A} = \sum_{i,j} \langle \alpha_i| \hat{A} |\alpha_j\rangle \hat{a}^\dagger(\alpha_i) \hat{a}(\alpha_j)$$

で多粒子系に定義が拡張された 1 体演算子 \hat{A} を導入する。なお、(1.2.1) から、

$$[\hat{a}^\dagger(\alpha_i) \hat{a}(\alpha_j), \hat{N}] = \hat{a}^\dagger(\alpha_i) [\hat{a}(\alpha_j), \hat{N}] + [\hat{a}^\dagger(\alpha_i), \hat{N}] \hat{a}(\alpha_j) = 0$$

であるので、このように構成される 1 体演算子はすべて粒子数演算子 \hat{N} と可換になる。すなわち、1 体演算子の固有状態は必ず粒子数演算子との同時固有状態になっている。

上述の構成法に従い、1 粒子の位置演算子 \hat{x} と運動量演算子 \hat{p} を多粒子系に拡張する。 \hat{x} と \hat{p} の間の正準交換関係

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

に由来して、 \hat{x} の固有値 x の 1 粒子固有状態 $|x\rangle$ と \hat{p} の固有値 p の 1 粒子固有状態 $|p\rangle$ の間には、

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$$

が成り立っていた。ここで V は系の体積であり、 $V^{-1/2}$ の因子は、 $|x\rangle$ の完全性関係

$$\int_V d^3\mathbf{x} |x\rangle \langle x| = \hat{I} \quad (1.3.1)$$

に基づき、規格化条件

$$\langle p|p'\rangle = \delta_{pp'}$$

により定まる。また、 p は系の周期境界条件⁶⁾により

$$\mathbf{p} = \left(\frac{2\pi\hbar}{L} n_1, \frac{2\pi\hbar}{L} n_2, \frac{2\pi\hbar}{L} n_3 \right) \quad (n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}, L \equiv V^{1/3})$$

という離散値に制限されている (詳しくは付録 A 参照)。これらの結果から、Fourier 級数展開

$$|p\rangle = \int_V d^3\mathbf{x} |x\rangle \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V d^3\mathbf{x} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} |x\rangle, \quad |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} |p\rangle \quad (1.3.2)$$

が成り立つので、 \hat{p} の作用が

$$\hat{p}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \mathbf{p} |p\rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \nabla e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} |p\rangle = -\frac{\hbar}{i} \nabla |x\rangle$$

6) このノートでは常に後述する熱力学極限で考えるため、固定境界条件でなくとも物理的結果に影響は生じない。

と表され、完全性関係 (1.3.1) により $\hat{\mathbf{p}}$ 自体は

$$\hat{\mathbf{p}} = \int_V d^3\mathbf{x} \hat{\mathbf{p}} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \int_V d^3\mathbf{x} \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla |\mathbf{x}\rangle \right) \langle \mathbf{x}| = \int_V d^3\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \langle \mathbf{x}| \right)$$

と表されることがわかる⁷⁾。また、同じく完全性関係から

$$\hat{\mathbf{x}} = \int_V d^3\mathbf{x} \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|$$

と表されることもわかる。以上の 1 粒子系の量子力学の結果は、1 粒子状態 $|\mathbf{x}\rangle$ に対応する生成消滅演算子 $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x})$ を用いて多粒子系に拡張されて、

$$\hat{\mathbf{x}} = \int_V d^3\mathbf{x} \mathbf{x} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}), \quad \hat{\mathbf{p}} = \int_V d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \frac{\hbar}{i} \nabla \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \quad (1.3.3)$$

となる。なお、(1.3.2) からすぐわかるように、 $|\mathbf{p}\rangle$ に対応する生成消滅演算子 $\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$ と $\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$ は次の関係を満たす。

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{p}} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3\mathbf{x} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \hat{\Psi}(\mathbf{x}), & \hat{\Psi}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}} \\ \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3\mathbf{x} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}), & \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

角運動量演算子は 1 粒子系の量子力学では $\hat{\mathbf{L}} \equiv \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$ で与えられていた。これも $\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$ を用いて多粒子系へ定義を拡張すると、

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}} &= \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \langle \mathbf{x} | (\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}) | \mathbf{x}' \rangle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \\ &= \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \left[\mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right] \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \\ &= - \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \\ &= - \int_V d^3\mathbf{x} \left[\mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \\ &= \int_V d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left(\mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

と表せるとわかる。

1 粒子系の量子力学において、質量 $m(\neq 0)$ の自由粒子系のハミルトニアン \hat{H} は、

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$$

7) 3 つ目の等号では部分積分を行っている。このとき生じた境界項は周期境界条件により境界面上で向かい合う \mathbf{x} 同士の寄与が打ち消し合って 0 になる。以降の $\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$ の積分でも同様の理由で部分積分の境界項は 0 になる。

で与えられた。 $\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$ を用いて多粒子系に拡張されたハミルトニアンを書き下すと、

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \frac{1}{2m} \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{p}}^2 | \mathbf{x}' \rangle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \nabla^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla^2 \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x} \left[\nabla^2 \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla^2 \hat{\Psi}(\mathbf{x})
\end{aligned} \tag{1.3.5}$$

となる。ただし、これは相互作用のない自由粒子系のハミルトニアンである。

1.3.2 量子状態の変換則 I：連続変換

古典力学では、対称変換の生成子が系の保存量になるという Noether の定理が存在するため、量子力学においてもこのような保存則が満たされるように状態ベクトルおよび演算子の変換が定められる。状態の変換はすべてユニタリ変換で表されるので、

$$|\psi'\rangle = \hat{U}^\dagger |\psi\rangle, \quad \hat{A}' = \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} \quad \left(\hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I} \right)$$

と作用の形を決めると、変換に対応した保存量に対してはこの変換に対して不変に保たれるためには、物理量 \hat{A} を保存する対称変換は

$$\hat{U} = e^{i\alpha\hat{A}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha)^n}{n!} \hat{A}^n, \quad \hat{U}^\dagger = e^{-i\alpha\hat{A}} \quad (\alpha \in \mathbb{R})$$

で与えられるべきと考えられる。

空間並進・回転変換

古典論において運動量保存則は空間並進対称性から導かれていた。系の運動量 \mathbf{p} を保存するユニタリ変換 $\hat{U} = e^{-i\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar}$ が古典論に対応して空間並進変換となることは、実際に場の演算子 $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ に対して施してみると確認できる： $\hat{\mathbf{p}}$ と $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ の間の交換関係は、

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\Psi}(\mathbf{x})] &= \int_V d^3\mathbf{x}' \left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \left(\frac{\hbar}{i} \nabla' \right) \hat{\Psi}(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right] \\
&= \int_V d^3\mathbf{x}' \left(\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \frac{\hbar}{i} \nabla' [\hat{\Psi}(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x})]_{-\zeta} + \zeta [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x})]_{-\zeta} \frac{\hbar}{i} \nabla' \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \right) \\
&= - \int_V d^3\mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{\hbar}{i} \nabla' \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \\
&= -\frac{\hbar}{i} \nabla \hat{\Psi}(\mathbf{x})
\end{aligned}$$

であるので、BCH 公式 (C.3 節参照) より、

$$\begin{aligned}
e^{-i\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{p}}/\hbar} &= \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \mathbf{a} \cdot \nabla \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2!} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^2 \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{3!} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^3 \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \dots \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^n \hat{\Psi}(\mathbf{x}) = e^{\mathbf{a}\cdot\nabla} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \\
&= \hat{\Psi}(\mathbf{x} + \mathbf{a})
\end{aligned}$$

となり、確かに \hat{p} を生成子にもつユニタリ変換は空間並進変換を行う演算子になっている。

角運動量演算子 \hat{L} を生成子にもつユニタリ変換についても同様に、古典論で角運動量保存則が空間回転対称性によることに対応して空間回転変換の演算子になっていることが、実際に $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ に変換を施すことで確認できる。ここでは \hat{L}^z を生成子としたユニタリ変換について計算してみる。球面座標系 (r, θ, φ) を

$$\mathbf{x} = (x, y, z) = (r \sin \theta \cos \varphi, r \sin \theta \sin \varphi, r \cos \theta)$$

で定めると、

$$x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

であることから、

$$\begin{aligned} [\hat{L}^z, \hat{\Psi}(\mathbf{x})] &= \int_V d^3 \mathbf{x}' \left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi'} \hat{\Psi}(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right] \\ &= \int_V d^3 \mathbf{x}' \left(\zeta \left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right]_{-\zeta} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi'} \hat{\Psi}(\mathbf{x}') + \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi'} \left[\hat{\Psi}(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right]_{-\zeta} \right) \\ &= - \int_V d^3 \mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi'} \hat{\Psi}(\mathbf{x}') = - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

と交換関係が計算されるため、BCH 公式 (C.3 節参照) より、

$$\begin{aligned} e^{-i\Delta\varphi \hat{L}^z / \hbar} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) e^{i\Delta\varphi \hat{L}^z / \hbar} &= \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \Delta\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{(\Delta\varphi)^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{(\Delta\varphi)^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial \varphi^3} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\Delta\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^n \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \\ &= \hat{\Psi}(r, \theta, \varphi + \Delta\varphi) \end{aligned}$$

とわかり、確かに z 軸周りでの回転変換であることが確かめられる。

場の位相変換：大域的ゲージ対称性と粒子数保存則

1 粒子系の量子力学では考えられなかった変換として、粒子数演算子

$$\hat{N} \equiv \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \int_V d^3 \mathbf{x} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}(\mathbf{x})$$

を生成子にもつユニタリ変換を考えると、

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{\Psi}(\mathbf{x})] &= \int_V d^3 \mathbf{x}' \left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right] \\ &= \int_V d^3 \mathbf{x}' \left(\zeta \left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right]_{-\zeta} \hat{\Psi}(\mathbf{x}') + \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \left[\hat{\Psi}(\mathbf{x}'), \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right]_{-\zeta} \right) \\ &= - \int_V d^3 \mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}') = - \hat{\Psi}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

であることから、BCH 公式 (C.3 節参照) より、

$$e^{-i\phi \hat{N}} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) e^{i\phi \hat{N}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\phi)^n}{n!} \hat{\Psi}(\mathbf{x}) = e^{i\phi} \hat{\Psi}(\mathbf{x})$$

とわかる。後述するように $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ に対応する物理量 $\Psi(t, \mathbf{x})$ は系の力学的変数とみなすことができ、この変換の結果は複素場 $\Psi(t, \mathbf{x})$ の位相変換に対する対称性が

$$\int_V d^3\mathbf{x} \bar{\Psi}(t, \mathbf{x}) \Psi(t, \mathbf{x})$$

の保存則を導くことに対応している (B.1.4 節参照)。

1.3.3 量子多体系のダイナミクス

エネルギーを保存するユニタリ変換 $\hat{U}^\dagger(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ は、エネルギー保存則が時間並進対称性に対する Noether の定理から導かれることから時間並進変換、すなわち (孤立系の) 時間発展演算子であると考えられる。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}^\dagger(t) = \hat{H} \hat{U}^\dagger(t)$$

となることから、 $\hat{U}^\dagger(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ が時間発展演算子であることを要請すると、Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.3.6)$$

および Heisenberg 描像の演算子

$$\hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}(t) \hat{A} \hat{U}^\dagger(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

に対する Heisenberg 方程式

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}] \quad (1.3.7)$$

が多体系においても成り立つことが直ちに導かれる。

一方、時間発展演算子がユニタリ演算子 $\hat{U}(t)$ として先に与えられていた場合、

$$\hat{H}(t) = \frac{i\hbar}{2} \left[\left(\frac{d}{dt} \hat{U}(t) \right) \hat{U}^\dagger(t) - \hat{U}(t) \left(\frac{d}{dt} \hat{U}^\dagger(t) \right) \right]$$

で与えられる Hermite 演算子 $\hat{H}(t)$ は、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t) = \hat{H}(t) \hat{U}(t)$$

を満たすため⁸⁾、状態および演算子の時間発展が (1.3.6), (1.3.7) の \hat{H} を $\hat{H}(t)$ に置き換えた形で同様に記述されることがわかる。すなわち $\hat{H}(t)$ は系のハミルトニアンである。このように系の時間発展がユニタリ演算子で表せる場合は一般に、ハミルトニアンが時間に依存していてエネルギーが保存しない場合も含んでいる。この場合の $\hat{U}(t)$ は $\hat{H}(t)$ を用いて、

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &= \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n) \\ &= \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \cdots \int_0^t dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n) \\ &\equiv T \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}(t') \right] \end{aligned}$$

8) ユニタリ演算子の性質として $\hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) = \hat{I}$ が成り立つため、

$$0 = \frac{d}{dt} [\hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t)] = \left(\frac{d}{dt} \hat{U}(t) \right) \hat{U}^\dagger(t) + \hat{U}(t) \left(\frac{d}{dt} \hat{U}^\dagger(t) \right)$$

となる。これを用いて示される。

で表せる。なお、 $\hat{U}(t), \hat{H}(t)$ の関数形は時間軸の原点 $t = 0$ の取り方に依存していることに注意する。

多粒子系と場の理論の対応

$\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ は時間発展しない Schrödinger 描像の演算子である。Heisenberg 描像に移行して、Schrödinger 描像でのハミルトニアン \hat{H} が (1.3.5) の \hat{H}_0 で与えられる相互作用のない自由粒子系での $\hat{\Psi}(t, \mathbf{x})$ の Heisenberg 方程式を考えると、

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x}) &= [\hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x}), \hat{H}_0] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x}' \hat{U}(t) [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \nabla'^2 \hat{\Psi}(\mathbf{x}')] \hat{U}^\dagger(t) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x}' \hat{U}(t) \left([\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}')]_{\zeta} \nabla'^2 \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \right. \\
&\quad \left. + \zeta \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \nabla'^2 [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x}')]_{-\zeta} \right) \hat{U}^\dagger(t) \\
&= \left(\cdot [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]_{-\zeta} \hat{C} + \zeta \hat{B} [\hat{A}, \hat{C}]_{-\zeta} \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x}' \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla'^2 \hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x}') \\
&\quad \left(\cdot [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}')]_{-\zeta} = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), [\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x}')]_{-\zeta} = 0 \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x}) \tag{1.3.8}
\end{aligned}$$

というように、(Schrödinger 表示での) 自由粒子系の Schrödinger 方程式と同じ形式をとることがわかる。この式の左から真空 $|0\rangle$ を、右から何らかの 1 粒子状態を演算させれば 1 粒子系の量子力学における Schrödinger 方程式そのものに帰着しなければならないから、この結果は当然と言える。一方、(1.3.8) は $\hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x})$ が対応する物理量 $\Psi(t, \mathbf{x})$ について

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(t, \mathbf{x}) \tag{1.3.9}$$

で運動方程式が与えられることを示唆している。そこでこの多体系を複素場 $\Psi(t, \mathbf{x})$ を変数にもつ系とみなす。このとき $\hat{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{x})$ が対応する物理量は $\Psi(t, \mathbf{x})$ の複素共役 $\bar{\Psi}(t, \mathbf{x})$ であり、ハミルトニアン演算子 \hat{H}_0 が (1.3.5) で与えられることに対応して、

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x} \bar{\Psi}(t, \mathbf{x}) \nabla^2 \Psi(t, \mathbf{x})$$

が古典論でのハミルトニアンになると考えられる。複素場の性質として $\Psi(t, \mathbf{x})$ の共役運動量の場合は $i\bar{\Psi}(t, \mathbf{x})$ の定数倍となることが知られており (B.1.3 項参照)、実際 (1.3.9) は $\Psi(t, \mathbf{x})$ と $i\hbar \bar{\Psi}(t, \mathbf{x})$ の正準方程式となっている。また、 $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ の周期境界条件を $\Psi(t, \mathbf{x})$ も引き継ぐため、このハミルトニアンは

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x} |\nabla \Psi(t, \mathbf{x})|^2$$

と表し直せる。ラグランジアンは

$$L = \int_V d^3\mathbf{x} \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\bar{\Psi}(t, \mathbf{x}) \dot{\Psi}(t, \mathbf{x}) - \dot{\bar{\Psi}}(t, \mathbf{x}) \Psi(t, \mathbf{x}) \right) - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(t, \mathbf{x})|^2 \right]$$

で与えられ⁹⁾、この Euler-Lagrange 方程式はまた (1.3.9) を与える。

1.3.4 2体演算子

ハミルトニアンが1粒子系の量子力学のものを拡張しただけの1体演算子で表されている場合、系のダイナミクスにおいて同種粒子間の相互作用は全く考慮されていない。相互作用系を記述するにはハミルトニアンに相互作用項を付け加える必要がある。

2体相互作用を表せるような2体演算子は、1体演算子を与える際に1粒子系から始めたように、2粒子系から考え始めればよい。ただし、2粒子系における完全性関係は

$$\hat{I}^{(2)} = \frac{1}{2!} \sum_{i,j,k,l} |\alpha_i, \alpha_j\rangle \langle \alpha_k, \alpha_l|$$

となることに注意する (1.1 節参照)。ここから2粒子系での2体演算子は

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} \langle \alpha_i, \alpha_j | \hat{V}^{(2)} | \alpha_k, \alpha_l \rangle |\alpha_i, \alpha_j\rangle \langle \alpha_k, \alpha_l|$$

と表されると考えられるので、一般の多粒子系については、

$$\hat{V} = \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} \langle \alpha_i, \alpha_j | \hat{V}^{(2)} | \alpha_k, \alpha_l \rangle \hat{a}^\dagger(\alpha_i) \hat{a}^\dagger(\alpha_j) \hat{a}(\alpha_l) \hat{a}(\alpha_k)$$

とすればよいとわかる。ただし、 $[\hat{a}^\dagger(\alpha_k) \hat{a}^\dagger(\alpha_l)]^\dagger = \hat{a}(\alpha_l) \hat{a}(\alpha_k)$ を用いた。なお、

$$\begin{aligned} [\hat{a}^\dagger(\alpha_i) \hat{a}^\dagger(\alpha_j) \hat{a}(\alpha_l) \hat{a}(\alpha_k), \hat{N}] &= \zeta [\hat{a}^\dagger(\alpha_i) \hat{a}(\alpha_l) \hat{a}^\dagger(\alpha_j) \hat{a}(\alpha_k), \hat{N}] + \delta_{jl} [\hat{a}^\dagger(\alpha_i) \hat{a}(\alpha_k), \hat{N}] \\ &= \zeta \left(\hat{a}^\dagger(\alpha_i) \hat{a}(\alpha_l) [\hat{a}^\dagger(\alpha_j) \hat{a}(\alpha_k), \hat{N}] + [\hat{a}^\dagger(\alpha_i) \hat{a}(\alpha_l), \hat{N}] \hat{a}^\dagger(\alpha_j) \hat{a}(\alpha_k) \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

より、このように構成される2体演算子もまた粒子数演算子 \hat{N} と可換である。

特に2体相互作用が、2粒子の位置 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ で決まるものなら、

$$\hat{V}^{(2)} = V(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2) \quad (V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = V(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1))$$

として表せるので、場の演算子 $\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$ を用いて多粒子系に定義を拡張すると、

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{4} \int_V d^3\mathbf{x}_1 \int_V d^3\mathbf{x}_2 \int_V d^3\mathbf{x}'_1 \int_V d^3\mathbf{x}'_2 V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2 \rangle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}'_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}'_1) \\ &= \frac{1}{4} \int_V d^3\mathbf{x}_1 \int_V d^3\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \left(\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}_1) + \zeta \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}_1) \hat{\Psi}(\mathbf{x}_2) \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_V d^3\mathbf{x}_1 \int_V d^3\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}_1) \\ &= \frac{1}{2} \int_V d^3\mathbf{x}_1 \int_V d^3\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{\rho}(\mathbf{x}_1) \hat{\rho}(\mathbf{x}_2) - \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} V(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \hat{\rho}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

9) 時間の全微分を付け加えられる不定性からこのラグランジアンは次のようにも表し直せる：

$$L = \int_V d^3\mathbf{x} \left(i\hbar \dot{\Psi}(t, \mathbf{x}) \dot{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{x}) + \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(t, \mathbf{x})|^2 \right) = - \int_V d^3\mathbf{x} \left(i\hbar \dot{\Psi}(t, \mathbf{x}) \Psi(t, \mathbf{x}) + \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(t, \mathbf{x})|^2 \right)$$

となる。このような 2 体相互作用を含む系のハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla^2 \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int_V d^3\mathbf{x}_1 \int_V d^3\mathbf{x}_2 V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{x}_1)$$

に対して、場の演算子 $\hat{\Psi}(t, \mathbf{x})$ の Heisenberg 方程式を求めると、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(t, \mathbf{x}) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Psi}(t, \mathbf{x}) + \left(\int_V d^3\mathbf{x}' V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \hat{\Psi}^\dagger(t, \mathbf{x}') \hat{\Psi}(t, \mathbf{x}') \right) \hat{\Psi}(t, \mathbf{x}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Psi}(t, \mathbf{x}) + \left(\int_V d^3\mathbf{x}' V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \hat{\rho}(t, \mathbf{x}') \right) \hat{\Psi}(t, \mathbf{x}) \end{aligned}$$

というように、非線形な項が現れることがわかる。

1.3.5 スピン

量子力学において粒子は、位置・運動量といった実空間運動の自由度の他にスピンという 3 成分の自由度

$$\mathbf{S} = (S^x, S^y, S^z)$$

をもっていることが知られている。それらの演算子 $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z)$ は角運動量と同じ代数を持ち、角運動量としての大きさ s は粒子に固有である。Fermi 粒子がもつスピンの大きさは半整数に限られるのに対し、Bose 粒子のそれは整数に限られることが知られている (スピン統計定理)。

Fermi 粒子はこのスピン自由度による $2s + 1$ 個の準位も含めて Pauli の排他原理を満たすので、ハミルトニアンにスピンが関与する項がなければスピン準位により固有状態が分裂せず、 $2s + 1$ 個の Fermi 粒子が同じ運動状態をとりうる。

1 粒子の運動状態 i に加えて $\sigma = -s, -s + 1, \dots, s$ で 1 粒子のスピン準位の状態¹⁰⁾を指定すると、対応した生成消滅演算子 $\hat{a}_{i,\sigma}, \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger$ をとることができる。すると運動状態 i の粒子のスピン演算子を、1 体演算子として

$$\hat{S}^z = \sum_i \sum_{\sigma=-s}^s \hbar \sigma \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}$$

で定義できるとわかる。1 粒子系の量子力学において $\hat{S}^\pm \equiv \hat{S}^x \pm i\hat{S}^y$ は昇降演算子の役割を果たしたので、これらも 1 体演算子として

$$\begin{aligned} \hat{S}^+ &= \sum_i \sum_{\sigma=-s}^{s-1} \sqrt{\hbar^2(s-\sigma)(s+\sigma+1)} \hat{a}_{i,\sigma+1}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}, \\ \hat{S}^- &= \sum_i \sum_{\sigma=-s}^{s-1} \sqrt{\hbar^2(s-\sigma)(s+\sigma+1)} \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma+1} \end{aligned}$$

で定義される¹¹⁾。よって、 \hat{S}_i^x, \hat{S}_i^y は、

$$\begin{aligned} \hat{S}^x &= \frac{\hbar}{2} \sum_i \sum_{\sigma=-s}^{s-1} \sqrt{(s-\sigma)(s+\sigma+1)} \left(\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma+1} + \hat{a}_{i,\sigma+1}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} \right) \\ \hat{S}^y &= \frac{i\hbar}{2} \sum_i \sum_{\sigma=-s}^{s-1} \sqrt{(s-\sigma)(s+\sigma+1)} \left(\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma+1} - \hat{a}_{i,\sigma+1}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} \right) \end{aligned}$$

10) 以降では必ず \hat{S}^z の固有状態をスピン準位の基底にとることにする。

11) 演算子の係数については、付録 A.1.1 の (A.1.3) を参照。

と表されることがわかる。また、 s は固有であるから、

$$\hat{S}^2 = \hbar^2 s(s+1) \sum_i \sum_{\sigma=-s}^s \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} = \hbar^2 s(s+1) \hat{N}$$

である。

前節の議論から、スピン演算子を生成子とするユニタリ変換はスピン自由度に対する回転変換となっているはずである。ここではスピン演算子の変換について、計算の都合上 \hat{S}^\pm に対する変換性を考える。(1.2.1) より、

$$\begin{aligned} \left[\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}, \hat{a}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma''} \right] &= \left[\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}, \hat{a}_{j,\sigma'}^\dagger \right] \hat{a}_{j,\sigma''} - \hat{a}_{j,\sigma'}^\dagger \left[\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}, \hat{a}_{j,\sigma''} \right] \\ &= \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma''} \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} - \hat{a}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma''} \\ &= \hat{a}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma''} \delta_{ij} (\delta_{\sigma,\sigma'} - \delta_{\sigma,\sigma''}) \end{aligned}$$

となることから、

$$\begin{aligned} \left[\hat{S}^z, \hat{S}^+ \right] &= \hbar^2 \sum_{i,j} \sum_{\sigma=-s}^s \sum_{\sigma'=-s}^{s-1} \sigma \sqrt{(s-\sigma')(s+\sigma'+1)} \left[\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}, \hat{a}_{j,\sigma'+1}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma'} \right] \\ &= \hbar^2 \sum_i \sum_{\sigma=-s}^s \sum_{\sigma'=-s}^{s-1} \sigma \sqrt{(s-\sigma')(s+\sigma'+1)} \hat{a}_{i,\sigma'+1}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma'} (\delta_{\sigma,\sigma'+1} - \delta_{\sigma,\sigma'}) \\ &= -\hbar^2 \sum_i \sum_{\sigma=-s}^{s-1} \sqrt{(s-\sigma)(s+\sigma+1)} \hat{a}_{i,\sigma+1}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} = -\hbar \hat{S}^+ \end{aligned}$$

同様にして、

$$\begin{aligned} \left[\hat{S}^z, \hat{S}^- \right] &= \hbar^2 \sum_{i,j} \sum_{\sigma=-s}^s \sum_{\sigma'=-s}^{s-1} \sigma \sqrt{(s-\sigma')(s+\sigma'+1)} \left[\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}, \hat{a}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma'+1} \right] \\ &= \hbar^2 \sum_i \sum_{\sigma=-s}^s \sum_{\sigma'=-s}^{s-1} \sigma \sqrt{(s-\sigma')(s+\sigma'+1)} \hat{a}_{i,\sigma'+1}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma'} (\delta_{\sigma,\sigma'} - \delta_{\sigma,\sigma'+1}) \\ &= \hbar^2 \sum_i \sum_{\sigma=-s}^{s-1} \sqrt{(s-\sigma)(s+\sigma+1)} \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma+1} = \hbar \hat{S}^- \end{aligned}$$

と交換関係が求まるので、BCH 公式 (C.3 節参照) を用いて計算してみると、

$$\begin{aligned} e^{-i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar} \hat{S}^\pm e^{i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar} &= \hat{S}^\pm \pm i\Delta\varphi\hat{S}^\pm + \frac{1}{2!} (\pm i\Delta\varphi)^2 \hat{S}^\pm + \frac{1}{3!} (\pm i\Delta\varphi)^3 \hat{S}^\pm + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\pm i\Delta\varphi)^n \hat{S}^\pm = e^{\pm i\Delta\varphi} \hat{S}^\pm \end{aligned}$$

と求まる。この結果と \hat{S}^\pm と \hat{S}^z の関係から、

$$\begin{cases} e^{-i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar} \hat{S}^x e^{i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar} = \hat{S}^x \cos \Delta\varphi + \hat{S}^y \sin \Delta\varphi, \\ e^{-i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar} \hat{S}^y e^{i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar} = \hat{S}^x \sin \Delta\varphi - \hat{S}^y \cos \Delta\varphi \end{cases}$$

とわかるので、確かにスピン自由度に対する z 軸周りの回転変換である。

生成消滅演算子に対してスピン自由度の回転変換を行うと、

$$\left[\hat{S}^z, \hat{a}_{i,\sigma} \right] = \sum_j \sum_{\sigma'=-s}^s \hbar \sigma' \left[\hat{a}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma'}, \hat{a}_{i,\sigma} \right] = \hbar \sigma \hat{a}_{i,\sigma}, \quad \left[\hat{S}^z, \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \right] = \left(- \left[\hat{S}^z, \hat{a}_{i,\sigma} \right] \right)^\dagger = -\hbar \sigma \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger$$

より、

$$e^{-i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar}\hat{a}_{i,\sigma}e^{i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\sigma\Delta\varphi)^n}{n!}\hat{a}_{i,\sigma} = e^{-i\sigma\Delta\varphi}\hat{a}_{i,\sigma}, \quad e^{-i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar}\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger e^{i\Delta\varphi\hat{S}^z/\hbar} = e^{i\sigma\Delta\varphi}\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger$$

というように、生成消滅するスピン準位 σ に応じた位相変換が現れる。注目すべきは、 σ が半奇数値しかとらない Fermi 粒子が奇数個存在する系では $\Delta\varphi = 2\pi$ 、すなわち系を 1 回転させると、スピン自由度自体は元通りに戻るはずなのに量子状態には必ず $e^{\pm i\pi} = -1$ の位相差が現れることである。これは同じ角運動量でも軌道角運動量を生成子にとるユニタリ変換では $\Delta\varphi = 2\pi$ のとき恒等変換となるのと対照的である。このために奇数個の Fermi 粒子多体系では 2 回転させることで系の量子状態が元に戻る。

1.3.6 量子状態の変換則 II：離散変換

パリティ・時間反転変換といった離散変換も量子状態の変換にあたる。これらの離散変換は 1.3.2 項で見た連続変換とは異なり特定の物理量の保存則を与えないため、量子論での時刻・座標およびそれらに関連した物理量のふるまいに注目して定式化することになる。

時間反転変換

時間反転変換 $\hat{\Theta}$ は時間軸を反転させる変換である。

$$|\psi\rangle \longrightarrow \hat{\Theta}|\psi\rangle, \quad \hat{A} \longrightarrow \hat{\Theta}\hat{A}\hat{\Theta}^{-1}$$

古典論においてはこの変換に対して空間自由度は保存するが、運動量、角運動量およびスピン自由度は反転することが知られる。よって $\hat{\Theta}$ は、 $|\mathbf{p}, \sigma\rangle$ の生成消滅演算子 $\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}$, $\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger$ に対して、

$$\hat{\Theta}\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}\hat{\Theta}^{-1} = \hat{a}_{-\mathbf{p}, -\sigma}, \quad \hat{\Theta}\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger\hat{\Theta}^{-1} = \hat{a}_{-\mathbf{p}, -\sigma}^\dagger$$

と作用することになる。

一方、量子論において時間の自由度は Schrödinger 方程式 (1.3.6) にも現れているため、 $\hat{\Theta}$ のふるまいには Schrödinger 方程式に対する変換性も考慮する必要がある。状態と演算子および時刻 t について時間反転変換を施すと

$$i\hbar \frac{d}{d(-t)}\hat{\Theta}|\psi\rangle = \hat{\Theta}\hat{H}\hat{\Theta}^{-1}\hat{\Theta}|\psi\rangle = \hat{\Theta}\hat{H}|\psi\rangle = \hat{\Theta}\left(i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle\right)$$

が得られる。最後の等号は変換前の Schrödinger 方程式を用いて導かれ、ここから Schrödinger 方程式から導かれる変換性として次がわかる。

$$\hat{\Theta}\left(i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle\right) = -i\hbar \frac{d}{dt}\hat{\Theta}|\psi\rangle$$

これは $\hat{\Theta}$ が複素共役変換を施すことを示している。2 回時間反転を行えば理論は元に戻る必要があるから、パリティ変換 \hat{P} のように $\hat{\Theta}$ も状態のノルムを保つ変換であることはわかるが、時間反転した状態同士の内積は、

$$\langle\psi|\hat{\Theta}^\dagger\hat{\Theta}|\varphi\rangle = \langle\psi^*|\varphi^*\rangle = (\langle\psi|\varphi\rangle)^* = \langle\varphi|\psi\rangle$$

とふるまうことになる。このような $\hat{\Theta}$ は反ユニタリ変換と呼ばれる。

以上を踏まえて $\hat{a}_{p\sigma}^\dagger$ を用いて構成された多体量子状態に対する $\hat{\Theta}$ のふるまいを考えると、

$$\hat{a}_{-p,-\sigma} = \hat{\Theta} \hat{a}_{p\sigma} \hat{\Theta}^{-1} = \hat{a}_{p\sigma}^*$$

であることがわかる。この関係式に (1.3.4) を用いると、場の演算子 $\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x})$, $\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x})$ に対して次が成り立つこともわかる。

$$\hat{\Psi}_\sigma^*(\mathbf{x}) = \hat{\Theta} \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}) \hat{\Theta}^{-1} = \hat{\Psi}_{-\sigma}(\mathbf{x})$$

この式は量子多体系を場の理論で扱う際に、各スピン準位 σ ごとの場 $\Psi_\sigma(\mathbf{x})$ に対し、

$$\bar{\Psi}_\sigma(t, \mathbf{x}) = \Psi_{-\sigma}(-t, \mathbf{x})$$

が要請されることを意味している。

カイラル変換

1.4 熱力学極限での多体量子状態

多体系においては、その微視的な物理から創発する巨視的現象が主要なテーマである。巨視的に平衡にある状態は巨視的な物理量のみで理論を展開することができ、(平衡) 熱力学として体系化されている。この熱力学を微視的観点から基礎づける試みが (平衡) 統計力学である。

1.4.1 正準典型性と熱力学ポテンシャルの微視的表式

粒子数 N で孤立した体積 V の系にエネルギー E が与えられたとき、系はエネルギー固有値 E の固有状態から成る膨大な数の多体量子状態¹²⁾をとることになるが、系の大きさが非常に大きい場合にはそのほとんどが同じ巨視的性質、具体的には同じ熱平衡状態の性質を示すとされる。この性質は (正準) 典型性と呼ばれ、典型性が成り立つ系が熱力学極限である。

典型性を満たす系には、固有状態の数 $W_{V,N}(E)$ に対して

$$S(E, V, N) = k_B \ln W_{V,N}(E) \quad (1.4.1)$$

で系の熱力学ポテンシャルであるエントロピー $S(E, V, N)$ が与えられ (k_B は Boltzmann 定数)¹³⁾、表す熱平衡状態に結び付けられるとするのが Boltzmann の原理である。

熱力学において、エネルギーのゆらぎを許す環境では E の代わりに温度 T 、あるいは逆温度 $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$ を用いて $(T; V, N)$ で熱平衡状態を指定できる。その際には、Legendre 変換

$$F(T; V, N) \equiv \min_{E \geq 0} [E - TS(E, V, N)]$$

12) 1.4.3 項で定義される混合状態も含む。

13) エネルギー E の固有状態の数 $W_{V,N}(E)$ をエネルギー E 以下の固有状態の数 $\Omega_{V,N}(E)$ に置き換えても成り立つ。エントロピー $S(E)$ の示量性から $W(E)$ は系を大きくすると指数関数的に増加するとわかるので、確率分布は $\Omega(E)$ に置き換えてもほとんど変わらず、Boltzmann の原理から導かれるエントロピー $S(E, V, N)$ も熱力学極限では無視できる $\mathcal{O}(V)$ 程度の変化しかない。

で定義される Helmholtz の自由エネルギー $F(T; V, N)$ が理論形式を与える熱力学ポテンシャルになる¹⁴⁾。この式の両辺を $-\beta$ 倍して指数関数の肩にのせると、

$$e^{-\beta F(T; V, N)} = \exp \left\{ \max_{E \geq 0} \left[\frac{1}{k_B} S(E, V, N) - \beta E \right] \right\}$$

という等式が得られる。しかし、 $f(E) = E - TS(E, V, N)$ で最小値を与える E を E^* とおくと、指数関数

$$\exp \left[\frac{1}{k_B} S(E, V, N) - \beta E \right]$$

は $E = E^*$ で極大となり、微視的定数 k_B に対する巨視的物理量 S, E のスケールと指数関数のふるまいからその周りでの値は極大値に比べて無視できるほど小さい。よって先の等式は、

$$\exp \left\{ \max_{E \geq 0} \left[\frac{1}{k_B} S(E, V, N) - \beta E \right] \right\} \simeq \sum_{E \geq 0} e^{S(E, V, N)/k_B} e^{-\beta E}$$

というように無限和を近似した結果とみなせて、Boltzmann の原理 (1.4.1) から、

$$e^{-\beta F(T; V, N)} = \sum_{E \geq 0} W_{V, N}(E) e^{-\beta E} = \sum_i e^{-\beta E_{N, i}} (\equiv Z_{V, N}) \quad (1.4.2)$$

という、系のエネルギー固有値 $E_{N, i}$ という微視的情報と自由エネルギー $F(T; V, N)$ を接続する表式が得られる。最右辺の量 $Z_{V, N}$ を分配関数という。

エネルギーのゆらぎに加えて粒子数のゆらぎも許される系では、 N の代わりに化学ポテンシャル μ を用いて $(T, \mu; V)$ で熱平衡状態を指定できる。その際には、Legendre 変換

$$J(T, \mu; V) \equiv \min_{N \geq 0} [F(T; V, N) - \mu N]$$

で定義されるグランドポテンシャル $J(T, \mu; V)$ が熱力学ポテンシャルである。この式の両辺を $-\beta$ 倍して指数関数の肩にのせると、

$$e^{-\beta J(T, \mu; V)} = \exp \left\{ \max_{N \geq 0} [-\beta F(T; V, N) + \beta \mu N] \right\}$$

という等式が得られて、カノニカル分布のときと同様にこの右辺は

$$\exp \left\{ \max_{N \geq 0} [-\beta F(T; V, N) + \beta \mu N] \right\} \simeq \sum_{N \geq 0} e^{-\beta F(T; V, N)} e^{\beta \mu N}$$

というように無限和を近似した結果とみなせて、自由エネルギーを肩にのせた指数関数は (1.4.2) から分配関数 $Z_{V, N}$ であるので、

$$e^{-\beta J(T, \mu; V)} = \sum_N Z_{V, N} e^{\beta \mu N} = \sum_N \sum_i e^{-\beta (E_{N, i} - \mu N)} (\equiv \Xi_V) \quad (1.4.3)$$

という、系のエネルギー固有値 $E_{N, i}$ という微視的情報とグランドポテンシャル $J(T, \mu; V)$ を接続する表式が得られる。最右辺の量 Ξ_V を大分配関数という。

14) $S(E, V, N)$ が E の単調増加関数であるために $f(E) = E - TS(E, V, N)$ は (E の関数として) 最小値を必ず 1 つしか持たないことから、 $F(T; V, N)$ は常に一意に決まる。

示量・示強変数

関数 \mathcal{K} とその変数 $\{P_i\}, \{X_j\}$ のいくつかの間には、変数の α 倍と関数の α^d 倍が等しくなる同次性と呼ばれる性質が成り立つことがある。今、 $\{X_j\}$ に対してのみ $d = 1$ の同次性が成り立つとする。

$$\alpha \mathcal{K}(\{P_i\}; \{X_j\}) = \mathcal{K}(\{P_i\}; \{\alpha X_j\}) \quad (\alpha > 0)$$

このとき、両辺の α 微分から次の等式が導かれる。

$$\mathcal{K}(\{P_i\}; \{X_j\}) = \sum_j \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial X_j} X_j$$

$d = 1$ の同次性から導かれるこの関係式は Euler の関係式とも呼ばれる。

\mathcal{K} が熱力学ポテンシャルであったとき、 $d = 1$ の同次性が成り立つ変数 $\{X_j\}$ が必ず存在し、示量変数と呼ばれる。また、同次性が成り立たない変数 $\{P_i\}$ は示強変数という。Boltzmann の原理 (1.4.1) での系の状態数 $W_{V,N}(E)$ は E, V, N の指数関数としてふるまうと期待されることから、エントロピー $S(E, V, N)$ は全ての変数が示量変数であることがわかる。

1.4.2 アンサンブル形式による熱平衡状態の表現

典型性を満たす系ではエネルギー固有値 E の固有状態のみから成る状態であればどの状態でも巨視的物理量は同じ値が得られる。これはそれらの固有状態が古典的な確率分布を以て生起するような状態での期待値でも同じ巨視的物理量の値が得られるということである。この際の確率分布はまたどのようなものでもよいので、全ての固有状態が等確率に起こるような確率分布がよく仮定される¹⁵⁾。

$$p_{N,i} = \frac{1}{W_{V,N}(E)}$$

この確率分布をミクロカノニカル分布 (小正準分布) という。

$(T; V, N)$ で指定されたエネルギーのゆらぎが許された系においては、分配関数 $Z_{V,N}$ の定義式 (1.4.2) に Boltzmann の原理 (1.4.1) を用いることで、

$$W_{V,N}(E(T; V, N)) e^{-\beta E(T; V, N)} \simeq \sum_{E \geq 0} W_{V,N}(E) e^{-\beta E} \quad (1.4.4)$$

という関係式が成り立っていることがわかる。この式は次のようにして解釈ができる：今注目している系には外部でエネルギーをやり取りする系 (熱浴という) が存在していて、注目系と熱浴を合わせた全体系はエネルギーが保存するようにとられている。全体系をエネルギー U 、体積 V_{tot} 、粒子数 N_{tot} で熱平衡状態が指定したとき、仮に注目系の状態がエネルギー E 、体積 V 、粒子数 N で指定されていれば、熱浴はエネルギー $U - E$ 、体積 $V_{\text{tot}} - V (\equiv V_R)$ 、粒子数 $N_{\text{tot}} - N (\equiv N_R)$ で状態が指定される。 E はいろいろな値をとるが、それぞれの系が典型性を満たす熱力学極限であればエントロピーが定義されて、さらに全体系に対して熱力学におけるエントロピー増大則から

$$S_{\text{tot}}(U, V_{\text{tot}}) \geq S(E, V, N) + S_R(U - E, V_R, N_R)$$

15) この確率分布を原理として要請する際には等重率の原理と呼ばれる。

という不等式が要請される。 E を仮置きした状態では Boltmann の原理 (1.4.1) から各系に対してエントロピーが、

$$\begin{aligned} S_{\text{tot}}(U, V_{\text{tot}}, N_{\text{tot}}) &= k_B \ln W_{\text{tot}}(U) \\ S(E, V, N) &= k_B \ln W_{V,N}(E) \\ S_R(U - E, V_R, N_R) &= k_B \ln W_R(U - E) \end{aligned}$$

で与えられるので、この不等式はほとんどの E で、各系の固有状態数に対して

$$W_{\text{tot}}(U) \gg W_{V,N}(E)W_R(U - E)$$

が成り立ち、ある E でのみ

$$W_{\text{tot}}(U) \simeq W_{V,N}(E)W_R(U - E)$$

が成り立つことを示している。すなわち、

$$W_{\text{tot}}(U) = \sum_E W_{V,N}(E)W_R(U - E)$$

で総数が与えられる実際に生起すべき全体系の固有状態の内、実際には部分系があるエネルギー E をとる状態が圧倒的大多数を占めるということである。このことを式で表すと次のようになる。

$$W_{V,N}(E)W_R(U - E) \simeq \sum_{E' \geq 0} W_{V,N}(E')W_R(U - E')$$

Boltzmann の原理 (1.4.1) から状態数 $W_{V,N}(E)$ は示量変数に対して指数関数的に増大するので、(1.4.4) は、

$$e^{-\beta E} \propto W_R(U - E)$$

という比例性を上式に適用したものとわかる。注目系が熱浴とエネルギーをやり取りしている場合に確率分布で熱平衡状態を得るには、その中で圧倒的に多い状態数をとるエネルギー配位が現れるように、異なるエネルギー配位に異なる確率分布を割り振る必要があるが、以上の解釈を元に具体的な状態数の表式 (と等価な)(1.4.4) を参考にすれば、

$$p_{N,i} = \frac{1}{Z_{V,N}} e^{-\beta E_{N,i}}$$

という確率分布で期待値をとるようにすればよいとわかる。この確率分布をカノニカル分布 (正準分布) という。

粒子数のゆらぎも許された系での熱平衡状態 $(T, \mu; V)$ も同様の理屈で確率分布を考えることにより再現することができる。この際の確率分布は、大分配関数の定義式 (1.4.3) に Boltzmann の原理を適用して得られる

$$W_{V,N(T,\mu;V)}(E(T, \mu; V)) e^{-\beta(E(T,\mu;V) - \mu N(T,\mu;V))} = \sum_{E,N} W_{V,N}(E) e^{-\beta(E - \mu N)}$$

から、次のように与えればよい。

$$p_{N,i} = \frac{1}{\Xi_V} e^{-\beta(E_{N,i} - \mu N)}$$

この確率分布はグランドカノニカル分布 (大正準分布) と呼ばれる。

1.4.3 密度行列によるアンサンブル形式の表現

量子状態 $\{|\psi_i\rangle\}$ が確率 $\{p_i\}$ で生起するような状態は、

$$\hat{\rho} \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad \left(\sum_i p_i = 1 \right)$$

という演算子で表現することができる。実際 $\hat{\rho}$ と、考えている状態空間の正規直交基底 $|\alpha_i\rangle$ を用いた

$$\text{Tr}_{\{\alpha_i\}} \hat{A} \equiv \sum_i \langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_i\rangle$$

という演算を用いると、ある演算子 \hat{A} に対する期待値 $\langle A \rangle$ を、

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \text{Tr}_{\{\alpha_i\}} [\hat{\rho} \hat{A}] = \sum_{i,j} p_j \langle\alpha_i|\hat{A}|\psi_j\rangle \langle\psi_j|\alpha_i\rangle \\ &= \sum_j p_j \langle\psi_j| \left(\sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \right) \hat{A} |\psi_j\rangle \\ &= \sum_j p_j \langle\psi_j|\hat{A}|\psi_j\rangle \end{aligned}$$

というように量子状態 $\{|\psi_i\rangle\}$ が古典的確率 $\{p_i\}$ で混合された状態での期待値として与えることができる。演算子に対するこの演算はトレースという¹⁶⁾。

$\hat{\rho}$ の性質を一般化すると、まずトレース演算に対して

$$\text{Tr} \hat{\rho} = 1$$

を必ず満たし、また負の固有値を持たないことが要請される。これは最初の $\hat{\rho}$ の定義で

$$\sum_i p_i = 1, \quad 0 \leq p_i \leq 1$$

であることに対応している。また、これらの $\{p_i\}$ に対して Schwartz の不等式

$$\sum_i p_i^2 \leq \left(\sum_i p_i \right)^2 = 1$$

が成り立つため、対応して一般の $\hat{\rho}$ には

$$\text{Tr} \hat{\rho}^2 \leq 1$$

が成り立つことも要請される。Schwartz の不等式は、ある 1 つの j に対して $p_i = \delta_{ij}$ であるようなときに等号が成立するが、そのような確率分布 $\{p_i\}$ は量子状態を混合しない。よって、一般に

$$\text{Tr} \hat{\rho}^2 = 1$$

を満たす $\hat{\rho}$ は 1 つの量子状態のみが必ず現れる状態に対応している。このような状態は純粋状態と呼び、逆に

$$\text{Tr} \hat{\rho}^2 < 1$$

16) 以降、 Tr の右下に特別な表記がない場合はトレース演算は Fock 空間の正規直交基底を用いて行うものとする。このノートでは常に系の大きさを V で固定するが、本来 Fock 空間の正規直交基底は V に依存して決まるものであり、グランドカノニカル分布での計算ではあえてこのことを明示的にしてトレース演算を行う。

を満たす $\hat{\rho}$ が表す、必ず量子状態が確率混合されている状態は混合状態という。混合状態は、純粋状態にある大きな系の中の部分系などで実現しうる状態で、このような一般の量子状態も表せる

$$\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0, \quad \text{Tr} \hat{\rho} = 1$$

を満たす演算子 $\hat{\rho}$ のことを密度行列と呼ぶ ($|\psi\rangle$ は $\hat{\rho}$ が定義域とする Hilbert 空間上の任意の元)。密度行列で表される状態の時間発展は、Schrödinger 方程式 (1.3.6) から、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} &= i\hbar \sum_i p_i \frac{d}{dt} (|\psi_i\rangle \langle \psi_i|) \\ &= \sum_i p_i \left[\left(i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_i\rangle \right) \langle \psi_i| + |\psi_i\rangle \left(i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_i| \right) \right] \\ &= \sum_i p_i \left[\hat{H} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| - |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \hat{H} \right] \\ &= \hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

で記述できるとわかる。この方程式は von Neumann 方程式と呼ばれる¹⁷⁾。

ミクロカノニカル分布は、系のエネルギー固有値 $E_{N,i}$ の固有状態を $|N, i\rangle$ と表すと、密度行列

$$\hat{\rho}_{\text{mc}} = \frac{1}{W_{V,N}(E)} \sum_{E_{N,i}=E} |N, i\rangle \langle N, i|$$

で表すことができる。Boltzmann の関係式はこの $\hat{\rho}$ と、エネルギー固有値が $E_{N,i} = E$ の N 粒子固有状態 $|N, i\rangle$ のみを基底にとって行うトレース演算を用いて、

$$S(E, V, N) = -k_B \text{Tr}_{(E,V,N)} [\hat{\rho}_{\text{mc}} \ln \hat{\rho}_{\text{mc}}]$$

とも表せる。また、 $W_{V,N}(E) = \text{Tr}_{(E,V,N)} [\hat{I}]$ である。

カノニカル分布の密度行列による表現は、

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_c &= \frac{1}{Z_{V,N}} \sum_i e^{-\beta E_{N,i}} |N, i\rangle \langle N, i| \\ &= \frac{1}{Z_{V,N}} \sum_i |N, i\rangle \langle N, i| e^{-\beta \hat{H}} |N, i\rangle \langle N, i| \quad \left(\because e^{-\beta E_{N,i}} = \langle N, i | e^{-\beta \hat{H}} | N, i \rangle \right) \\ &= \frac{1}{Z_{V,N}} \sum_{i,j} |N, i\rangle \langle N, i| e^{-\beta \hat{H}} |N, j\rangle \langle N, j| \quad \left(\because \langle N, i | e^{-\beta \hat{H}} | N, j \rangle = e^{-\beta E_{N,i}} \delta_{ij} \right) \end{aligned}$$

である。この $\hat{\rho}_c$ と $|N, i\rangle$ を基底にとって行うトレース演算により $F(T; V, N)$ は、

$$F(T; V, N) = \text{Tr}_{(V,N)} [\hat{\rho}_c \hat{H}] + k_B T \text{Tr}_{(V,N)} [\hat{\rho}_c \ln \hat{\rho}_c]$$

で与えられる。実際、

$$\text{Tr}_{(V,N)} [\hat{\rho}_c \ln \hat{\rho}_c] = \sum_i \frac{e^{-\beta E_{N,i}}}{Z_{V,N}} \ln \frac{e^{-\beta E_{N,i}}}{Z_{V,N}} = -\frac{\beta}{Z_{V,N}} \sum_i E_i e^{-\beta E_{N,i}} - \ln Z_{V,N}$$

および

$$\text{Tr}_{(V,N)} [\hat{\rho}_c \hat{H}] = \frac{1}{Z_{V,N}} \sum_i E_{N,i} e^{-\beta E_{N,i}}$$

17) Heisenberg 方程式とは符号が異なっていることに注意する。この意味で密度行列は通常の物理量に対応する演算子とは区別される。

から表式が従う。また、 $Z_{V,N} = \text{Tr}_{(V,N)}[e^{-\beta\hat{H}}]$ で与えられる。

グランドカノニカル分布に対応する密度行列は、

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_{\text{gc}} &= \frac{1}{\Xi_V} \sum_N \sum_i e^{-\beta(E_{N,i} - N\mu)} |N, i\rangle \langle N, i| \\
&= \frac{1}{\Xi_V} \sum_N \sum_i |N, i\rangle \langle N, i| e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} |N, i\rangle \langle N, i| \\
&\quad \left(\because e^{-\beta(E_{N,i} - N\mu)} = \langle N, i| e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} |N, i\rangle \right) \\
&= \frac{1}{\Xi_V} \sum_{N,N'} \sum_{i,j} |N, i\rangle \langle N, i| e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} |N', j\rangle \langle N', j| \\
&\quad \left(\because \langle N, i| e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} |N', j\rangle = e^{-\beta(E_{N,i} - N\mu)} \delta_{NN'} \delta_{ij} \right) \\
&= \frac{1}{\Xi_V} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \left(\because \sum_N \sum_i |N, i\rangle \langle N, i| = \hat{I} \right)
\end{aligned}$$

となり、この $\hat{\rho}_{\text{gc}}$ と Fock 空間上の正規直交基底を用いて行うトレース演算によりグランドポテンシャル $J(T, \mu; V)$ は、

$$J(T, \mu; V) = \text{Tr}_V \left[\hat{\rho}_{\text{gc}} (\hat{H} - \mu\hat{N}) \right] + k_B T \text{Tr}_V [\hat{\rho}_{\text{gc}} \ln \hat{\rho}_{\text{gc}}]$$

で与えられる。実際、

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_V [\hat{\rho}_{\text{gc}} \ln \hat{\rho}_{\text{gc}}] &= \sum_N \sum_i \frac{e^{-\beta(E_{N,i} - \mu N)}}{\Xi_V} \ln \frac{e^{-\beta(E_{N,i} - \mu N)}}{\Xi_V} \\
&= -\frac{\beta}{\Xi_V} \sum_N \sum_i E_{N,i} e^{-\beta(E_{N,i} - \mu N)} - \ln \Xi_V
\end{aligned}$$

および

$$\text{Tr}_V \left[\hat{\rho}_{\text{gc}} (\hat{H} - \mu\hat{N}) \right] = \frac{1}{\Xi_V} \sum_N \sum_i E_{N,i} e^{-\beta(E_{N,i} - \mu N)}$$

から表式が従う。また、 $\Xi_V = \text{Tr}_V[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}]$ である。

1.3 節の構成法で導入したハミルトニアン演算子 \hat{H} から化学ポテンシャルの項を差し引いた $\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ は、 $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$ から \hat{H}, \hat{N} との同時固有状態をとる。そのため、 $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ の代わりに $e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}$ を時間発展演算子としてもダイナミクスの記述は変わらないことがわかる。量子多体系を熱力学極限で考える上では Fock 空間上で定式化されたグランドカノニカル分布が最も扱いやすく、ダイナミクスも $\hat{\mathcal{H}}$ で考えたほうが良い。そこで以降では粒子系を扱う際には $\mathcal{H} = H - \mu N$ をハミルトニアンとして扱い、ハミルトニアン密度 \mathcal{H} からは化学ポテンシャルの項として $\mu\bar{\Psi}(t, \mathbf{x})\Psi(t, \mathbf{x})$ が初めから差し引かれているものとする。

1.4.4 同種粒子系の統計性

相互作用のない多粒子系においては、系の固有状態 (N, i) は各粒子の 1 粒子固有状態の組み合わせで与えられる。その結果大分配関数が

$$\Xi_V = \sum_N \sum_{\{n_i\}} \prod_i e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} = \prod_i \sum_n e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n}$$

と表せるようになる。ここで $\{n_i\} = \{n_1, n_2, \dots | \sum_i n_i = N\}$ 、 n_i はエネルギー固有値 ϵ_i の 1 粒子固有状態をとる粒子数で、これは Bose 粒子系か Fermi 粒子系かで値域が変わるのだった。このため、

$$\Xi_V^{\text{Bose}} = \prod_i \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n} = \prod_i \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}}, \quad \Xi_V^{\text{Fermi}} = \prod_i \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}\right)$$

と、大分配関数も場合分けが生じる。よって 1 粒子固有状態 i をとる粒子数の期待値

$$\begin{aligned} \langle n_j \rangle &\equiv \frac{1}{\Xi_V} \sum_N \sum_{\{n_i\}} \prod_i n_i e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)n_i} \\ &= \sum_n n e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n} \left(\sum_n e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n} \right)^{-1} \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left(\sum_n e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)n} \right) \end{aligned}$$

も、Bose 粒子系か Fermi 粒子系かによって

$$\begin{aligned} \langle n_j \rangle^{\text{Bose}} &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left(1 - e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)} \right) = \frac{e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}}{1 - e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} - 1} \\ \langle n_j \rangle^{\text{Fermi}} &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)} \right) = \frac{e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} + 1} \end{aligned}$$

と関数形が変わる。またこの結果は、相互作用のない Bose/Fermi 気体のエネルギーに対する粒子数の分布関数が

$$b_{\beta, \mu}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}, \quad f_{\beta, \mu}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

と与えられることを示す。この分配関数をそれぞれ Bose 分布関数、Fermi 分布関数という。

相互作用のない Fermi 粒子系では β が大きくなるにつれて分布関数 $f_{\beta, \mu}(\epsilon)$ が階段関数 $\Theta(\mu - \epsilon)$ に近づいていく。Pauli の排他律から励起の際は必ず空いている準位へと移らなければならないが、 $\epsilon = \mu$ 付近を除いて $\epsilon < \mu$ の固有状態は全て占有されているため、励起が可能なのは $\epsilon = \mu$ 付近の状態を占める Fermi 粒子のみである。このような状態を Fermi 縮退といい、 $\epsilon_F = \mu$ を Fermi エネルギーという。

相互作用のない Bose 粒子系は、分布関数 $b_{\beta, \mu}(\epsilon)$ が正でなければならないことから系の 1 粒子基底状態 ϵ_0 に対して必ず $\mu < \epsilon_0$ が満たされる。 $\beta \gg 1$, $\mu \simeq \epsilon_0$ の低温高密度の環境では、

$$\langle N \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_0 - \mu)} - 1} + \int_{\epsilon_0}^{\infty} d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}$$

で与えられる系の粒子数の内、1 粒子励起状態を占める粒子数を表す第 2 項が小さくなり、

$$\langle N \rangle \simeq \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_0 - \mu)} - 1}$$

というように 1 粒子基底状態をとる粒子数が巨視的量となるような状態が実現する。状態密度 $D(\epsilon)$ は $(\epsilon - \epsilon_0)^\alpha$ ($\alpha > 0$) の形で表され¹⁸⁾、 $\epsilon = \epsilon_0$ に比べて $\epsilon > \epsilon_0$ の準位は圧倒的に多いにもかかわらず、そのほとんどが空になるという非常に特異な現象であり、Bose-Einstein 凝縮という。

18) 3 次元系の場合。2 次元以下の系では $\alpha \leq 0$ となり、積分が収束しない (C.1 節参照)。

1.4.5 熱的純粋量子状態による熱平衡状態の表現

1.5 経路積分

量子力学は、物理量を Hilbert 空間上の状態ベクトルに作用させる演算子に対応させることで理論が展開される。しかし、演算子形式に移行せずに物理量を数として扱ったまま量子力学を構成することもでき、ここで導入する経路積分はそのような構成法の道具として重要なものである。多粒子系を場の理論に移行して扱う際には経路積分を用いたほうが演算子形式より見通しが良いことがある。

1.5.1 1 粒子系の経路積分 (導入)

1 粒子の位置 \mathbf{x} から \mathbf{x}' への遷移振幅 $U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') \equiv \langle \mathbf{x} | e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle$ は、 $|\mathbf{x}\rangle$ の完全性関係 (1.3.1) を用いることで、

$$U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') = \langle \mathbf{x} | \left(\prod_{k=1}^{N-1} \int_V d^3 \mathbf{x}_k e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | \mathbf{x}_k \rangle \langle \mathbf{x}_k | \right) e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | \mathbf{x}' \rangle$$

と表せ ($\Delta t \equiv (t-t')/N$)、さらに $|\mathbf{x}\rangle$ の完全性関係 (1.3.1) に (1.3.2) を用いることで得られる $|\mathbf{p}\rangle$ の完全性関係

$$\sum_{\mathbf{p}} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \hat{I} \quad (1.5.1)$$

を用いることで、

$$\begin{aligned} U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') &= \langle \mathbf{x} | \left(\prod_{k=1}^{N-1} \int_V d^3 \mathbf{x}_k \sum_{\mathbf{p}_k} |\mathbf{p}_k\rangle \langle \mathbf{p}_k| e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | \mathbf{x}_k \rangle \langle \mathbf{x}_k | \right) \sum_{\mathbf{p}_0} |\mathbf{p}_0\rangle \langle \mathbf{p}_0| e^{-i\frac{\hat{H}\Delta t}{\hbar}} | \mathbf{x}' \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}_{N-1}}{\sqrt{V}} \cdots \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}_1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}_{N-1}} \cdots \sum_{\mathbf{p}_0} \left(\prod_{k=0}^{N-1} e^{i\mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_{k+1}/\hbar} \langle \mathbf{p}_k | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | \mathbf{x}_k \rangle \right) \end{aligned}$$

と表せる。ここで、積分は $\mathbf{x}_0 \equiv \mathbf{x}'$, $\mathbf{x}_N \equiv \mathbf{x}$ を満たすようにとられた相空間上の任意の経路にわたって取られている。 $N \gg 1$ であれば $e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \simeq \hat{I} - i\hat{H}\Delta t/\hbar$ と近似出来て、 $\hat{H} = H(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$ なら

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_k | e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} | \mathbf{x}_k \rangle &\simeq \frac{1}{\sqrt{V}} \langle \mathbf{p}_k | \mathbf{x}_k \rangle - i(\Delta t/\hbar) \langle \mathbf{p}_k | \hat{H} | \mathbf{x}_k \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_k/\hbar} (1 - iH(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k)\Delta t/\hbar) \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i[\mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_k + H(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k)\Delta t]/\hbar} \end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned} U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') &= \frac{1}{V} \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}_{N-1}}{V} \cdots \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}_1}{V} \sum_{\mathbf{p}_{N-1}} \cdots \sum_{\mathbf{p}_0} \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\mathbf{p}_k \cdot \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} - H(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k) \right] \Delta t \right\} \end{aligned}$$

と表されるようになる。 V が十分大きいとして、

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \longrightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\mathbf{p}$$

と連続化すると、次のようにも表せる。

$$U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') = \int_V d^3\mathbf{x}_{N-1} \cdots \int_V d^3\mathbf{x}_1 \int \frac{d^3\mathbf{p}_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} \cdots \int \frac{d^3\mathbf{p}_0}{(2\pi\hbar)^3} \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\mathbf{p}_k \cdot \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} - H(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k) \right] \Delta t \right\}$$

この $N \rightarrow \infty$ の極限をとり、積分としてとった径路を連続化したものを一般に径路積分という。連続化された経路にわたる積分因子を

$$\int_V d^3\mathbf{x}_{N-1} \cdots \int_V d^3\mathbf{x}_1 \int \frac{d^3\mathbf{p}_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} \cdots \int \frac{d^3\mathbf{p}_0}{(2\pi\hbar)^3} \longrightarrow \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \mathcal{D}\mathbf{p}(t)$$

と表すことにする。 $N \rightarrow \infty$ では $\Delta t \rightarrow 0$ 、 $(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)/\Delta t \rightarrow \dot{\mathbf{x}}(t)$ となるため、径路積分としては

$$U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') = \frac{1}{V} \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t'') \mathcal{D}\mathbf{p}(t'') \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt'' (\mathbf{p}(t'') \cdot \dot{\mathbf{x}}(t'') - H(\mathbf{x}(t''), \mathbf{p}(t''))) \right]$$

と表される。

1 粒子系では $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{x})$ と表されることから、 $N \rightarrow \infty$ の極限をとる前に \mathbf{p}_k に対して積分を実行することができる。実際、 \mathbf{p}_k に関与する因子について抜き出すと、

$$\int \frac{d^3\mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p}_k \cdot \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} - \frac{1}{2m} \mathbf{p}_k^2 \right) \Delta t \right] \\ = \int \frac{d^3\mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2m} \left| \mathbf{p}_k - m \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} \right|^2 - \frac{m}{2} \left| \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} \right|^2 \right] \Delta t \right\} \\ = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \left| \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} \right|^2 \Delta t \right)$$

というように Gauss 積分として実行できる。その結果、

$$U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{3N/2} \int_V d^3\mathbf{x}_{N-1} \cdots \int_V d^3\mathbf{x}_1 \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left| \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} \right|^2 - V(\mathbf{x}_k) \right] \Delta t \right\}$$

と表せて、 $N \rightarrow \infty$ の極限をとって径路積分として表すと、

$$U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t'') \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt'' \left(\frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}(t'')^2 - V(\mathbf{x}(t'')) \right) \right] = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathbf{x} e^{iS[\mathbf{x}]/\hbar}$$

というふうに作用 S を用いて遷移確率を表現できるようになる。ここで、

$$\mathcal{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{3N}{2}}$$

である。この表式から S が停留する経路 $\mathbf{x}(t)$ 、すなわち最小作用の原理を満たす古典力学の解が積分因子の中で最大の寄与を与えることがわかる。また \hbar で特徴付けられた量子ゆらぎが古典解周りに存在するという量子論の原理も明らかに見て取れるようになる。この遷移振幅の表式を要請と

みなすと、径路積分が有限の範囲に収束するように定数 N が満たすべき条件が正準量子化に代わる量子化の条件と考えることができ、そのような形式は径路積分量子化と呼ばれる。

径路積分による定式化ではまた、前節における分配関数 Z_V および平衡状態の物理量の期待値 $\langle \hat{A} \rangle$ も表現することができる。どちらも 1 粒子状態のみで張られる状態空間上で $e^{-\beta \hat{H}}$ に対するトレース演算を行うが、 $|\mathbf{x}\rangle$ の完全性関係 (1.3.1) よりこれらの計算は、

$$\mathrm{Tr}_V [\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}] = \int_V d^3 \mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{x} \rangle$$

と表せるため、期待値部分は遷移振幅の場合と同様にして $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}$ から $\mathbf{x}_N = \mathbf{x}$ への周回路上の径路積分として表せることが、またトレース演算自体は任意の周回路に対する径路積分となることがわかる。実際に Z_V について $|\mathbf{x}\rangle$ と $|\mathbf{p}\rangle$ の完全性関係 (1.3.1), (1.5.1) を用いた計算を行うと、

$$\begin{aligned} Z_V &= \int_V d^3 \mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \left(\prod_{k=1}^{N-1} \int_V d^3 \mathbf{x}_k \sum_{\mathbf{p}_k} |\mathbf{p}_k\rangle \langle \mathbf{p}_k| e^{-\hat{H} \Delta u} | \mathbf{x}_k \rangle \langle \mathbf{x}_k| \right) \sum_{\mathbf{p}_0} |\mathbf{p}_0\rangle \langle \mathbf{p}_0| e^{-\hat{H} \Delta u} | \mathbf{x} \rangle \\ &= \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}_{N-1}}{\sqrt{V}} \cdots \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}_0}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}_{N-1}} \cdots \sum_{\mathbf{p}_0} \left(\prod_{k=0}^{N-1} e^{i \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_{k+1} / \hbar} \langle \mathbf{p}_k | e^{-\hat{H} \Delta u} | \mathbf{x}_k \rangle \right) \end{aligned}$$

と表せ ($\Delta u \equiv \beta/N$, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_N = \mathbf{x}$)、 $N \gg 1$ であれば $e^{-\hat{H} \Delta u} = \hat{I} - \hat{H} \Delta u$ と近似できて、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_k | e^{-\hat{H} \Delta u} | \mathbf{x}_k \rangle &\simeq \langle \mathbf{p}_k | \mathbf{x}_k \rangle - \Delta u \langle \mathbf{p}_k | \hat{H} | \mathbf{x}_k \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_k / \hbar} (1 - H(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k) \Delta u) \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-[i \mathbf{p}_k \cdot \mathbf{x}_k / \hbar + H(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k) \Delta u]} \end{aligned}$$

となるので、分配関数 Z_V は

$$Z_V = \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}_{N-1}}{V} \cdots \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}_0}{V} \sum_{\mathbf{p}_{N-1}} \cdots \sum_{\mathbf{p}_0} \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_k \cdot \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta u} - H(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k) \right] \Delta u \right\}$$

と表され、 \mathbf{p}_k を連続変数化して和を積分に置き換えれば、

$$Z_V = \int_V d^3 \mathbf{x}_{N-1} \cdots \int_V d^3 \mathbf{x}_0 \int \frac{d^3 \mathbf{p}_{N-1}}{(2\pi\hbar)^3} \cdots \int \frac{d^3 \mathbf{p}_0}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_k \cdot \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta u} - H(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}_k) \right] \Delta u \right\}$$

となる。 $N \rightarrow \infty$ の極限では $(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)/\Delta u \rightarrow \dot{\mathbf{x}}(u)$ とすると、

$$Z_V = \int \mathcal{D}\mathbf{x}(u) \mathcal{D}\mathbf{p}(u) \exp \left[\int_0^\beta du \left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(u) \cdot \dot{\mathbf{x}}(u) - H(\mathbf{x}(u), \mathbf{p}(u)) \right) \right] \quad (1.5.2)$$

と径路積分で表されることがわかる。積分範囲は、周期境界条件 $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\beta)$ を満たす任意の径路である。同様に $\langle \hat{A} \rangle$ も次のように表されることがわかる。

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z_V} \int \mathcal{D}\mathbf{x}(u) \mathcal{D}\mathbf{p}(u) A(\mathbf{x}(0), \mathbf{p}(0)) \exp \left[\int_0^\beta du \left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(u) \cdot \dot{\mathbf{x}}(u) - H(\mathbf{x}(u), \mathbf{p}(u)) \right) \right]$$

ただし、 $A(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ は $\hat{A} = A(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}})$ から定められた関数である。

$U(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x})$ の計算のときと同様に、 $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m + V(\mathbf{x})$ を代入して、 $N \rightarrow \infty$ の極限をとる前に \mathbf{p}_k に対して積分を実行する。 \mathbf{p}_k に関与する因子について抜き出すと、

$$\begin{aligned} & \int \frac{d^3 \mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_k \cdot \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta u} - \frac{1}{2m} \mathbf{p}_k^2 \right) \Delta u \right] \\ &= \int \frac{d^3 \mathbf{p}_k}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[- \left(\frac{1}{2m} \left| \mathbf{p}_k - i \frac{m}{\hbar} \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta u} \right|^2 + \frac{m}{2\hbar^2} \left| \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta u} \right|^2 \right) \Delta u \right] \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2 \Delta u} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m}{2\hbar^2} \left| \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta u} \right|^2 \Delta u \right) \end{aligned}$$

というように Gauss 積分として実行できて、その結果、

$$Z_V = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2 \Delta t} \right)^{3N/2} \int_V d^3 \mathbf{x}_{N-1} \cdots \int_V d^3 \mathbf{x}_1 \exp \left\{ - \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left| \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta u} \right|^2 + V(\mathbf{x}_k) \right] \Delta u \right\}$$

と表せる。 $N \rightarrow \infty$ の極限をとって経路積分として表すと、

$$Z_V = \mathcal{N}' \int \mathcal{D}\mathbf{x}(u) \exp \left[- \int_0^\beta du \left(\frac{m}{2\hbar^2} \dot{\mathbf{x}}(u)^2 + V(\mathbf{x}(u)) \right) \right]$$

という形になる。ここで、

$$\mathcal{N}' = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2 \Delta u} \right)^{\frac{3N}{2}}$$

である。分配関数 Z_V の値に最も寄与の大きい経路 $\mathbf{x}(u)$ では指数関数の肩の積分が停留するので、その経路は

$$0 = \frac{\delta}{\delta \mathbf{x}(u)} \left[\int_0^\beta du \left(\frac{m}{2\hbar^2} \dot{\mathbf{x}}(u)^2 + V(\mathbf{x}(u)) \right) \right] = - \frac{m}{\hbar^2} \ddot{\mathbf{x}}(u) + \nabla V(\mathbf{x}(u))$$

という方程式で定まる。定義に \hbar を含むためにこの経路は古典的運動の軌道ではない。また、時間に当たるパラメータ u は逆温度の次元である。このような解軌道はインスタントン解と呼ばれる。

1.5.2 多粒子系の経路積分

多粒子系における経路積分による表現は、場の演算子 $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$, $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$ が与える物理量 $\Psi(\mathbf{x})$, $\bar{\Psi}(\mathbf{x})$ が古典論的には正準変数とみなせることから、1 粒子系での分配関数 Z_V を経路積分で表した (1.5.2) における正準変数 \mathbf{x}, \mathbf{p} にそれぞれ $\Psi(t, \mathbf{x})$, $i\hbar \bar{\Psi}(t, \mathbf{x})$ を対応させて、

$$\Xi_V = \int \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du \int_V d^3 \mathbf{x} \left[\bar{\Psi}(u, \mathbf{x}) \partial_u \Psi(u, \mathbf{x}) + \mathcal{H}(\Psi(u, \mathbf{x}), \bar{\Psi}(u, \mathbf{x})) \right] \right\} \quad (1.5.3)$$

で大分配関数を与えることができると予想される。一方、多粒子系のハミルトニアン演算子 $\hat{\mathcal{H}}$ は一般に 1 粒子固有状態の生成消滅演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ から構成できたのだった (1.3 節参照)。本項では後者の立場から多粒子系での大分配関数の経路積分表示を導く。

Bose 粒子系の場合

まずは 1 準位 Bose 多体系から考えてみる。すなわちハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ が交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I}$ を満たす 1 組の生成消滅演算子 \hat{a}, \hat{a}^\dagger の関数 $\mathcal{H}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ で与えられる系である。

1 粒子系での導入の際の $|\mathbf{x}\rangle$ にあたるものとして用いられるのが、消滅演算子 \hat{a} の固有状態であるコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ である：

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (\alpha \in \mathbb{C})$$

$|\alpha\rangle$ の完全性関係を求めるためにはコヒーレント状態の表現を考える必要がある。消滅演算子に対して固有状態となることから、コヒーレント状態は異なる粒子数状態の重ね合わせであると考えられるので、

$$|\alpha\rangle = \sum_{n \geq 0} c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

と $|\alpha\rangle$ が展開できる。すると、

$$\sum_{n \geq 0} \alpha c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \alpha |\alpha\rangle = \hat{a} |\alpha\rangle = \sum_{n \geq 0} c_n \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \sum_{n \geq 1} n c_n (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle$$

となつて、最左辺と最右辺を $\langle 0 | (\hat{a})^m$ と内積をとって比較すると、 $\alpha c_m = (m+1) c_{m+1}$ が導かれる。 $b_m \equiv (m!) c_m$ を定義すれば $b_{m+1} = \alpha b_m$ とわかり、直ちに

$$b_m = b_0 \alpha^m, \quad c_m = \frac{\alpha^m}{m!} c_0 \quad (b_0 = (0!) c_0)$$

と一般の c_m がわかる。よってコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は、

$$|\alpha\rangle = c_0 \sum_{n \geq 0} \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

と表せるとわかる。さらに規格化条件 $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$ も課すと、

$$|c_0|^2 \sum_{n \geq 0} \frac{(\bar{\alpha} \alpha)^n}{n!} = |c_0|^2 e^{\bar{\alpha} \alpha} = 1$$

となるため、 $c_0 = e^{-\bar{\alpha} \alpha / 2}$ と定められる。コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ の表式が得られたので、考えている系の Fock 空間全体に対する完全性関係

$$\sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \langle 0| \hat{a}^n = \hat{I}$$

をこの $|\alpha\rangle$ で表すことを考えると、

$$|\alpha\rangle \langle \alpha| = e^{-\bar{\alpha} \alpha} \sum_{n \geq 0} \sum_{m \geq 0} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{\bar{\alpha}^m}{m!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \langle 0| \hat{a}^m$$

に対して、複素平面全体での積分公式

$$\sum_{n \geq 0} \sum_{m \geq 0} \int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha} \alpha} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{\bar{\alpha}^m}{m!} = \sum_{n \geq 0} \sum_{m \geq 0} \frac{\pi}{n!} \delta_{nm}$$

が成り立つ (付録 C.1 節参照) ため、

$$\frac{1}{\pi} \int d(\alpha, \bar{\alpha}) |\alpha\rangle \langle \alpha| = \hat{I}$$

とわかる。最後に、任意の複素数 α, β に対して、コヒーレント状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ の内積が、

$$\langle \alpha | \beta \rangle = e^{-(\bar{\alpha} \alpha + \bar{\beta} \beta) / 2} \sum_{n \geq 0} \frac{(\bar{\alpha} \beta)^n}{n!} = e^{-\bar{\alpha}(\alpha - \beta) / 2 + (\bar{\alpha} - \bar{\beta}) \beta / 2} \quad (1.5.4)$$

で与えられることを注意しておく。さて、大分配関数 Ξ_V の計算に移ると、

$$\begin{aligned}\Xi_V &\equiv \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right] = \frac{1}{\pi} \int d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0) \langle \alpha_0 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | \alpha_0 \rangle \\ &= \int \frac{d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0)}{\pi} \langle \alpha_0 | \left(\prod_{k=1}^{N-1} \frac{d(\alpha_k, \bar{\alpha}_k)}{\pi} e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} | \alpha_k \rangle \langle \alpha_k | \right) e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} | \alpha_0 \rangle \\ &= \int \frac{d(\alpha_{N-1}, \bar{\alpha}_{N-1})}{\pi} \dots \frac{d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0)}{\pi} \prod_{k=0}^{N-1} \langle \alpha_{k+1} | e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} | \alpha_k \rangle\end{aligned}$$

となり ($\Delta u = \beta/N$)、 $N \gg 1$ で $e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} \simeq \hat{I} - \hat{\mathcal{H}} \Delta u$ の近似を行う際には、 $\mathcal{H}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ の関数形が \hat{a} の右側に \hat{a}^\dagger がないようなもの (正規順序と呼ぶ) であれば、

$$\begin{aligned}\langle \alpha_{k+1} | e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} | \alpha_k \rangle &\simeq \langle \alpha_{k+1} | \left[\hat{I} - \mathcal{H}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) \Delta u \right] | \alpha_k \rangle \\ &= \langle \alpha_{k+1} | \alpha_k \rangle \{ 1 - \mathcal{H}(\alpha_k, \bar{\alpha}_{k+1}) \Delta u \} \\ &\simeq \exp \left[-\bar{\alpha}_{k+1} \frac{\alpha_{k+1} - \alpha_k}{2} + \frac{\bar{\alpha}_{k+1} - \bar{\alpha}_k}{2} \alpha_k - \mathcal{H}(\alpha_k, \bar{\alpha}_{k+1}) \Delta u \right]\end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned}\Xi_V &= \int \frac{d(\alpha_{N-1}, \bar{\alpha}_{N-1})}{\pi} \dots \frac{d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0)}{\pi} \\ &\quad \times \exp \left\{ - \sum_{k=0}^N \left[\bar{\alpha}_{k+1} \frac{\alpha_{k+1} - \alpha_k}{2 \Delta u} - \frac{\bar{\alpha}_{k+1} - \bar{\alpha}_k}{2 \Delta u} \alpha_k + \mathcal{H}(\alpha_k, \bar{\alpha}_{k+1}) \right] \Delta u \right\}\end{aligned}$$

$N \rightarrow \infty$ の極限をとって α_k の添字を連続変数化し、

$$\begin{cases} \frac{\alpha_{k+1} - \alpha_k}{\Delta u} \rightarrow \partial_u \alpha(u), & \frac{\bar{\alpha}_{k+1} - \bar{\alpha}_k}{\Delta u} \rightarrow \partial_u \bar{\alpha}(u) \\ \int \frac{d(\alpha_{N-1}, \bar{\alpha}_{N-1})}{\pi} \dots \frac{d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0)}{\pi} \rightarrow \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \end{cases}$$

と表すことにすると、

$$\Xi_V = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du \left[\frac{1}{2} \bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) - \frac{1}{2} \partial_u \bar{\alpha}(u) \alpha(u) + \mathcal{H}(\alpha(u), \bar{\alpha}(u)) \right] \right\}$$

と径路積分で表されることがわかる。積分範囲は、周期境界条件 $\alpha(0) = \alpha(\beta)$, $\bar{\alpha}(0) = \bar{\alpha}(\beta)$ を満たす任意の径路である。このことを用いると u の被積分関数部が

$$\begin{aligned}\int_0^\beta du \left(\frac{1}{2} \bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) - \frac{1}{2} \partial_u \bar{\alpha}(u) \alpha(u) \right) &= \int_0^\beta du \left[\bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) - \frac{1}{2} \frac{d}{du} (\bar{\alpha}(u) \alpha(u)) \right] \\ &= \int_0^\beta du \bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) - \frac{1}{2} [\bar{\alpha}(u) \alpha(u)]_0^\beta \\ &= \int_0^\beta du \bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u)\end{aligned}$$

と変形できることもわかる。よって Ξ_V の径路積分はさらに簡略化できて、

$$\Xi_V = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du [\bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) + H(\alpha(u), \bar{\alpha}(u))] \right\}$$

となる。

多準位、あるいは離散無限準位の場合については、全準位の消滅演算子に対するコヒーレント状態

$$\hat{a}_i|\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle = \alpha_i|\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle, \quad |\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_i \bar{\alpha}_i \alpha_i\right) \prod_i \sum_{n_i \geq 0} \frac{\alpha_i^{n_i}}{n_i!} (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle$$

を定義することで同様に証明される。その際の大分配関数 Ξ_V の経路積分表示は

$$\Xi_V = \int \mathcal{D}(\alpha_i, \bar{\alpha}_i) \exp\left\{-\int_0^\beta du \left[\sum_i \bar{\alpha}_i(u) \partial_u \alpha_i(u) + \mathcal{H}(\alpha_i(u), \bar{\alpha}_i(u))\right]\right\}$$

となるため、連続準位極限をとると (1.5.3) のようになることが理解できる。また (1.5.3) での積分経路は $\Psi(0, \mathbf{x}) = \Psi(\beta, \mathbf{x})$, $\bar{\Psi}(0, \mathbf{x}) = \bar{\Psi}(\beta, \mathbf{x})$ を満たす任意の経路にわたるとわかる。

Fermi 粒子系の場合

しかし上の議論が成り立つのは、 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ が交換する Bose 粒子系のときのみである。 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ が反交換する Fermi 粒子系での経路積分表示を次に考える。

再度、簡単のために 1 準位 Fermi 多体系¹⁹⁾を考える。このとき系のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ は反交換関係 $\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = \hat{I}$ を満たす 1 組の生成消滅演算子 \hat{a}, \hat{a}^\dagger の関数 $\mathcal{H}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ で与えられる。

先ほどと同様にコヒーレント状態

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (\alpha \in \mathbb{C})$$

を用いるが、問題となるのはそのコヒーレント状態の性質である：Fermi 粒子系は Pauli の排他原理により 2 粒子以上は同じ準位を占められない。その結果、コヒーレント状態の展開は

$$|\alpha\rangle = (\hat{I} + \hat{a}^\dagger c_1)|0\rangle$$

となり、Bose 系の場合のように上式両辺に \hat{a} を作用させても、

$$\alpha(\hat{I} + \hat{a}^\dagger c_1)|0\rangle = \alpha|\alpha\rangle = \hat{a}|\alpha\rangle = (\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger c_1)|0\rangle = c_1|0\rangle$$

となって、 $c_1 = \alpha$ とともに $\alpha^2 = 0$ という結果が導かれる。これは反交換する消滅演算子の固有値として α が自身との積について反交換する数であるためである。このような反交換な積をもつ数は Grassmann 数と呼ばれる。状態ベクトルと α の積は反交換しないとする²⁰⁾が、 $\bar{\alpha}$ と \hat{a}, \hat{a}^\dagger の積は必ず反交換しなければならない²¹⁾。よって、

$$|\alpha\rangle = (\hat{I} + \hat{a}^\dagger \alpha)|0\rangle = (\hat{I} - \alpha \hat{a}^\dagger)|0\rangle$$

となることに注意する。コヒーレント状態のブラベクトル

$$\langle\alpha|\hat{a}^\dagger = \bar{\alpha}\langle\alpha|$$

19) 1 準位 Fermi 粒子系は Pauli の排他律から 2 粒子以上存在する状態が許されないので多体系とは本来呼べないが、分配関数は定義可能である (熱力学関数と結びつけることはできない)。

20) もしそうでなければ、 \hat{a} を期待値を計算する際、固有値をブラケットの中から取り出す度に一々符号を変えなければならない、計算の手間を増やすだけである。

21) 展開表式の仮定で c_1 を \hat{a}^\dagger の後ろに置いたのは、 c_1 が Grassmann 数 α になることを見越して反可換性の議論を回避するためであった。

の展開表式は、ケットベクトルと同様にして次のように求まる。

$$\langle \alpha | = \langle 0 | \left(\hat{I} + \bar{\alpha} \hat{a} \right) = \langle 0 | \left(\hat{I} - \hat{a} \bar{\alpha} \right)$$

$|\alpha\rangle$ に規格化条件 $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$ を課すと、

$$\langle 0 | \left(\hat{I} + \bar{\alpha} \hat{a} \right) \left(\hat{I} + \hat{a}^\dagger \alpha \right) | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle + \bar{\alpha} \alpha \langle 0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle = 1 + \bar{\alpha} \alpha$$

より規格化因子が $(1 + \bar{\alpha} \alpha)^{-1/2}$ とわかるが、 $\alpha^2 = 0$ であることから、

$$e^{\bar{\alpha} \alpha} = \sum_{n \geq 0} \frac{(\bar{\alpha} \alpha)^n}{n!} = 1 + \bar{\alpha} \alpha$$

より、 $e^{-\bar{\alpha} \alpha/2}$ としてもかまわないことがわかる。すなわち規格化された Fermi 系のコヒーレント状態は、

$$|\alpha\rangle = e^{-\bar{\alpha} \alpha/2} \left(\hat{I} + \hat{a}^\dagger \alpha \right) | 0 \rangle = e^{-\bar{\alpha} \alpha/2} \left(\hat{I} - \alpha \hat{a}^\dagger \right) | 0 \rangle$$

で与えられることになる。

以上を踏まえて、 $|\alpha\rangle$ の完全性関係を導く。任意の Grassmann 数 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ に対して $\overline{\alpha\beta} = \bar{\beta}\bar{\alpha}$ であることに注意すると、

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle \langle \alpha| &= e^{-\bar{\alpha} \alpha} \left(\hat{I} - \alpha \hat{a}^\dagger \right) | 0 \rangle \langle 0 | \left(\hat{I} - \hat{a} \bar{\alpha} \right) \\ &= e^{-\bar{\alpha} \alpha} \left(| 0 \rangle \langle 0 | - \alpha \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \langle 0 | - | 0 \rangle \langle 0 | \hat{a} \bar{\alpha} + \alpha \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \langle 0 | \hat{a} \bar{\alpha} \right) \\ &= e^{-\bar{\alpha} \alpha} \left(| 0 \rangle \langle 0 | + \alpha \bar{\alpha} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \langle 0 | \hat{a} \right) \end{aligned}$$

とわかる。これに対して複素平面全体での積分

$$\int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha} \alpha} = \int d(\alpha, \bar{\alpha}) (1 + \alpha \bar{\alpha}), \quad \int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha} \alpha} \alpha \bar{\alpha} = \int d(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha \bar{\alpha}$$

を計算する必要がある。Grassmann 変数による $-\infty < \xi < \infty$ での積分については、

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi + \eta)$$

が成り立つと仮定すれば (Berezin 積分)、Grassmann 変数の関数は $f(\xi) = a + b\xi$ の形に限られるため、

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi = \text{Const.}$$

と値が定まることがわかる。 $\int d\xi \xi$ の具体的数値はスケールの取り方で自由に変えられるので、ここでは

$$\int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha} \alpha} = \int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha} \alpha} \alpha \bar{\alpha} = 1$$

が成り立つようなスケールをとることにする。以上により完全性関係は次のように求まる。

$$\int d(\alpha, \bar{\alpha}) |\alpha\rangle \langle \alpha| = \hat{I}$$

大分配関数 Ξ_V を計算する際には、トレース演算が

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \hat{A} &\equiv \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle = \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{a} \hat{A} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \\
&= \int d(\alpha, \bar{\alpha}) \left(\langle 0 | \hat{A} | \alpha \rangle \langle \alpha | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{a} \hat{A} | \alpha \rangle \langle \alpha | \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \right) \\
&= \int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha}\alpha} \left(\langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle + \alpha \bar{\alpha} \langle 0 | \hat{a} \hat{A} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \right) \\
&= \int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha}\alpha} \langle 0 | \left(\hat{I} - \bar{\alpha} \hat{a} \right) \hat{A} \left(\hat{I} + \hat{a}^\dagger \alpha \right) | 0 \rangle \\
&\quad \left(\because \int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha}\alpha} \alpha = \int d(\alpha, \bar{\alpha}) e^{-\bar{\alpha}\alpha} \bar{\alpha} = 0 \right) \\
&= \int d(\alpha, \bar{\alpha}) \langle -\alpha | \hat{A} | \alpha \rangle
\end{aligned}$$

となることに注意すると、

$$\begin{aligned}
\Xi_V &= \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right] = \int d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0) \langle -\alpha_0 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | \alpha_0 \rangle \\
&= \int d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0) \langle \alpha_0 | \left(\prod_{k=1}^{N-1} d(\alpha_k, \bar{\alpha}_k) e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} | \alpha_k \rangle \langle \alpha_k | \right) e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} | \alpha_0 \rangle \\
&= \int d(\alpha_{N-1}, \bar{\alpha}_{N-1}) \cdots d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0) \prod_{k=0}^{N-1} \langle \alpha_{k+1} | e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} | \alpha_k \rangle
\end{aligned}$$

となり ($\Delta u = \beta/N$)、 $N \gg 1$ で $e^{-\hat{\mathcal{H}} \Delta u} \simeq \hat{I} - \hat{\mathcal{H}} \Delta u$ の近似を行う際には、コヒーレント状態の内積が Bose 粒子系と同じく (1.5.4) で与えられるため、 $\mathcal{H}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ の関数形が正規順序をとっていれば Bose 粒子系と同じ表式を得られる。

$$\begin{aligned}
\Xi_V &= \int d(\alpha_{N-1}, \bar{\alpha}_{N-1}) \cdots d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0) \\
&\quad \times \exp \left\{ - \sum_{k=0}^N \left[\bar{\alpha}_{k+1} \frac{\alpha_{k+1} - \alpha_k}{2\Delta u} - \frac{\bar{\alpha}_{k+1} - \bar{\alpha}_k}{2\Delta u} \alpha_k + \mathcal{H}(\alpha_k, \bar{\alpha}_{k+1}) \right] \Delta u \right\}
\end{aligned}$$

$N \rightarrow \infty$ の極限をとって u を連続変数化し、

$$\begin{cases} \frac{\alpha_{k+1} - \alpha_k}{\Delta u} \rightarrow \partial_u \alpha(u), & \frac{\bar{\alpha}_{k+1} - \bar{\alpha}_k}{\Delta u} \rightarrow \partial_u \bar{\alpha}(u) \\ \int d(\alpha_{N-1}, \bar{\alpha}_{N-1}) \cdots d(\alpha_0, \bar{\alpha}_0) \longrightarrow \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \end{cases}$$

と表すことにすると、

$$\Xi_V = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du \left[\frac{1}{2} \bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) - \frac{1}{2} \partial_u \bar{\alpha}(u) \alpha(u) + \mathcal{H}(\alpha(u), \bar{\alpha}(u)) \right] \right\}$$

と経路積分で表されることがわかる。積分範囲は、反周期境界条件 $\alpha_0 = -\alpha(\beta)$, $\bar{\alpha}_0 = -\bar{\alpha}(\beta)$ を満たす任意の経路である。このことを用いると u の被積分関数部が

$$\begin{aligned}
\int_0^\beta du \left(\frac{1}{2} \bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) - \frac{1}{2} \partial_u \bar{\alpha}(u) \alpha(u) \right) &= \int_0^\beta du \left[\bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) - \frac{1}{2} \frac{d}{du} (\bar{\alpha}(u) \alpha(u)) \right] \\
&= \int_0^\beta du \bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) - \frac{1}{2} [\bar{\alpha}(u) \alpha(u)]_0^\beta \\
&= \int_0^\beta du \bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u)
\end{aligned}$$

と変形できることもわかる。よって Ξ_V の経路積分はさらに簡略化できて、

$$\Xi_V = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du [\bar{\alpha}(u) \partial_u \alpha(u) + H(\alpha(u), \bar{\alpha}(u))] \right\}$$

となる。

結局 1 準位 Bose 多体系と同じ Ξ_V の表式を得たため、多準位、あるいは離散無限準位の場合について全準位の消滅演算子に対するコヒーレント状態

$$\hat{a}_i |\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle = \alpha_i |\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle, \quad |\alpha_1, \alpha_2, \dots\rangle = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_i \bar{\alpha}_i \alpha_i \right) \prod_i \left(\hat{I} - \alpha_i \hat{a}_i^\dagger \right) |0\rangle$$

を定義して示される多準位系での Ξ_V 、および連続準位極限をとったときの Ξ_V も Bose 粒子系のもと同じ形式 (1.5.3) になる。しかし、Bose 粒子系の場合と違って Fermi 粒子系の場合 $\Psi(u, \mathbf{x}), \bar{\Psi}(u, \mathbf{x})$ は Grassmann 数である。また、足し上げる経路は $\Psi(0, \mathbf{x}) = -\Psi(\beta, \mathbf{x}), \bar{\Psi}(0, \mathbf{x}) = -\bar{\Psi}(\beta, \mathbf{x})$ という反周期境界条件を満たす任意の経路になる。

1.5.3 スピン系の経路積分

1.5.4 拘束系の経路積分

1.6 エンタングルメント

第 2 章 量子多体系の解析手法

量子多体系を解析する際に用いられる理論手法・定理または公式等について述べる。

2.1 Rayleigh-Schrödinger の摂動論

多体状態の時間発展は 1 粒子系の量子力学と全く同じ形式の Schrödinger 方程式 (1.3.6) で記述されることから、1 粒子系の量子力学で用いられる解析手法はそのまま多体系にも適用ができる。本節では、いわゆる「時間に依存しない摂動論」である Rayleigh-Schrödinger の摂動論について述べる。

系のハミルトニアンを $\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$ と分け、 \hat{V} を摂動項として摂動パラメータ λ のべきで $\hat{H}(\lambda)$ の固有状態およびエネルギー固有値を展開する。すなわち、 $\hat{H}(\lambda)$ の固有値方程式 $\hat{H}(\lambda)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ について、

$$|\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \lambda|\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi^{(2)}\rangle + \dots, \quad E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

と λ のべきで展開されるとして、

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}) (|\psi^{(0)}\rangle + \lambda|\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi^{(2)}\rangle + \dots) \\ = (E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots) (|\psi^{(0)}\rangle + \lambda|\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi^{(2)}\rangle + \dots) \end{aligned}$$

の両辺の λ の同次項の係数を比較して各展開係数を求める。

\hat{H}_0 の固有状態とエネルギー固有値をそれぞれ $|n\rangle$, E_n とおき、まず縮退がない場合を考える。まず 0 次項からは

$$\hat{H}_0|\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle \quad (2.1.1)$$

が得られて、 $|\psi^{(0)}\rangle$ は \hat{H}_0 の固有状態 $|n\rangle$ 、 $E^{(0)}$ は対応するエネルギー固有値 E_n とわかる。次に 1 次項を比較すると、

$$\hat{H}_0|\psi^{(1)}\rangle + \hat{V}|\psi^{(0)}\rangle = E^{(0)}|\psi^{(1)}\rangle + E^{(1)}|\psi^{(0)}\rangle \quad (2.1.2)$$

を得る。両辺 $|\psi^{(0)}\rangle = |n\rangle$ と内積をとり、 $E^{(0)} = E_n$ を代入すると $E^{(1)} = \langle n|\hat{V}|n\rangle (\equiv V_{nn})$ を得る。 $|n\rangle$ と直交する別の固有状態 $|m\rangle$ ($m \neq n$) との内積をとると、

$$E_m \langle m|\psi^{(1)}\rangle + \langle m|\hat{V}|n\rangle = E_n \langle m|\psi^{(1)}\rangle \quad \therefore \langle m|\psi^{(1)}\rangle = \frac{V_{mn}}{E_n - E_m} \quad (V_{mn} \equiv \langle m|\hat{V}|n\rangle)$$

を得る。固有状態 $|n\rangle$ の全体は完全系を張るから、この関係式より

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_m |m\rangle \langle m|\psi^{(1)}\rangle = C|n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n - E_m} |m\rangle$$

を得る (C は適当な複素数¹⁾)。2 次項の比較からは、

$$\hat{H}_0|\psi^{(2)}\rangle + \hat{V}|\psi^{(1)}\rangle = E^{(0)}|\psi^{(2)}\rangle + E^{(1)}|\psi^{(1)}\rangle + E^{(2)}|\psi^{(0)}\rangle$$

が得られて、両辺 $|n\rangle$ との内積をとった式に 0,1 次項の結果を用いると、

$$E^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n - E_m}$$

を得る。 $|n\rangle$ が基底状態のときにはこの項は必ず負になる。

\hat{H}_0 の固有状態に縮退があった場合を考える。具体的には $|n_1\rangle, |n_2\rangle, \dots$ が全てエネルギー固有値 E_n で縮退していて、また全て直交しているとする、 λ の 0 次項の係数比較の結果 (2.1.1) からは任意の線形結合

$$|\psi^{(0)}\rangle = \sum_i c_i |n_i\rangle$$

がエネルギー固有値 $E^{(0)} = E_n$ の固有状態になりうることにしか導かれない。これらの係数 $\{c_j\}$ は 1 次の係数比較 (2.1.2) において、 $|n_i\rangle$ との内積から

$$\sum_i c_i \langle n_j | \hat{V} | n_i \rangle = E^{(1)} c_j$$

という固有値方程式の固有ベクトル (c_1, c_2, \dots) が導かれて初めて定まる。よって各固有ベクトルに対応した $|\psi^{(0)}\rangle$ ごとに系は縮退が解ける。後は完全に縮退が解けた $|\psi^{(0)}\rangle$ を $|n\rangle$ とすることで、縮退がなかった場合と同様に高次の寄与を求めることができる。

2.2 Brillouin-Wigner の摂動論

系の状態空間 \mathcal{V} に対して低エネルギー励起状態で張られた部分空間への射影演算子 \hat{P} を導入すると、低エネルギー励起を記述する有効ハミルトニアンを求めることができる。Brillouin-Wigner の摂動論とも呼ばれるこの手法について説明する。

まず、一般のハミルトニアン \hat{H}_0 に対し、その固有状態 $|\phi\rangle$ のいくつかについて、

$$\hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle, \quad \hat{H}_0\hat{P}|\phi\rangle = E\hat{P}|\phi\rangle$$

を満たす射影演算子を導入する。同時に $\hat{Q} \equiv \hat{I} - \hat{P}$ も導入しておく。 \hat{P}, \hat{Q} と \hat{H}_0 は可換になる。

今、摂動項を加えたハミルトニアン $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ の固有値方程式

$$\hat{H}|\psi(E)\rangle = E|\psi(E)\rangle$$

に対して左から H_0 の固有状態に対する \hat{Q} を作用させると、 \hat{Q} と \hat{V} は可換とは限らないため、

$$\begin{aligned} \hat{H}_0\hat{Q}|\psi(E)\rangle + \hat{Q}\hat{V}|\psi(E)\rangle &= E\hat{Q}|\psi(E)\rangle \\ \therefore \hat{Q}\left(E - \hat{H}_0\right)^{-1}\hat{V}|\psi(E)\rangle &= \hat{Q}|\psi(E)\rangle \end{aligned}$$

1) 摂動展開を打ち切った後に規格化条件を課すことで定まる。

が導かれる。ここで、 \hat{H}_0 の固有状態に対する \hat{P} の作用を引き戻す演算子 $\hat{\Omega}$ を考える：

$$\hat{\Omega}\hat{P}|\phi\rangle \equiv |\phi\rangle$$

\hat{P} の像空間 $\hat{P}(\mathcal{V})$ を \hat{H} の固有状態の射影 $\hat{P}|\psi(E)\rangle$ が含まれるようにとれば、上述した関係式は $|\phi\rangle$ を $|\psi(E)\rangle$ に置き換えても成り立つ。よって、

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}(E)\hat{P}|\psi(E)\rangle &= |\psi(E)\rangle = \hat{P}|\psi(E)\rangle + \hat{Q}|\psi(E)\rangle \\ &= \hat{P}|\psi(E)\rangle + \hat{Q}(E - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V}|\psi(E)\rangle \\ &= \hat{P}|\psi(E)\rangle + \hat{Q}(E - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V}\hat{\Omega}(E)\hat{P}|\psi(E)\rangle\end{aligned}$$

より、

$$\begin{aligned}\left[\hat{I} - \hat{Q}(E - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V}\right]\hat{\Omega}(E)\hat{P}|\psi(E)\rangle &= \hat{P}|\psi(E)\rangle \\ \therefore \hat{\Omega}(E) &= \left[\hat{I} - \hat{Q}(E - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V}\right]^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\hat{Q}(E - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V}\right]^n\end{aligned}$$

というように $\hat{\Omega}$ の表式を E に依存した形で得ることができる²⁾。この上で、

$$\hat{P}\hat{H}\hat{\Omega}(E)\hat{P}|\psi(E)\rangle = E\hat{P}|\psi(E)\rangle$$

とできるから、 \hat{H} の低エネルギー有効ハミルトニアン

$$\hat{H}_{\text{eff}} \equiv \hat{P}\hat{H}\hat{\Omega}(E)$$

の表式が求まっていることがわかる。 $\Omega(E)$ について \hat{V} の低次項で打ち切ることで摂動論が展開されることになる。 \hat{H}_0 の固有状態の組 $\{|n\rangle\}$ を用いると、

$$\hat{Q}(E - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V} = \sum_{m \in \hat{Q}(\mathcal{V})} \sum_{n \in \mathcal{V}} \frac{V_{mn}}{E - E_m} |m\rangle\langle n|$$

と表せるので ($V_{mn} \equiv \langle m|\hat{V}|n\rangle$)、 \hat{H}_{eff} の表式を \hat{V} の3次まで求めてみると、次のようになる³⁾。

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{eff}} &= \sum_{n \in \hat{P}(\mathcal{V})} (E_n + V_{nn})|n\rangle\langle n| + \sum_{l \in \hat{P}(\mathcal{V})} \sum_{m \in \hat{Q}(\mathcal{V})} \sum_{n \in \hat{P}(\mathcal{V})} \frac{V_{lm}V_{mn}}{E - E_m} |l\rangle\langle n| \\ &\quad + \sum_{k \in \hat{P}(\mathcal{V})} \sum_{l \in \hat{Q}(\mathcal{V})} \sum_{n \in \hat{Q}(\mathcal{V})} \sum_{m \in \hat{P}(\mathcal{V})} \frac{V_{kl}V_{lm}V_{mn}}{(E - E_l)(E - E_m)} |k\rangle\langle n| + \mathcal{O}(\hat{V}^4)\end{aligned}$$

2.3 相互作用描像

ハミルトニアンが $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ で与えられるような、時間に依存する外場が加わる系を考える際には、Schrödinger 描像の任意の状態 $|\psi(t)\rangle$ および任意の演算子 \hat{A} に対する次のような変換

2) 無限級数が収束することから、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[(E - \hat{H}_0)^{-1}\hat{V} \right]^n = 0$$

が暗に仮定されていることになるが、このふるまいは \hat{V} が摂動項であることから自然である。

3) 第2項以降では、 \hat{H}_{eff} が作用する空間が $\hat{P}(\mathcal{V})$ に限られていることを用いている。

で移る新たな描像が有用である：

$$|\psi(t)\rangle_I \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle, \quad \hat{A}_I(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

この時間発展の描像は相互作用描像⁴⁾という。相互作用描像においては状態と演算子が両方時間発展するため、Schrödinger 方程式と Heisenberg 方程式の両方で時間発展が記述されることになる。

Schrödinger 方程式については、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_I \right) \\ &= i\hbar e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I + e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{H}_0 |\psi(t)\rangle_I \\ \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle &= \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle_I \\ &= e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \left(\hat{H}_0 + \hat{V}_I(t) \right) |\psi(t)\rangle_I \end{aligned}$$

より、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (2.3.1)$$

が従う。Heisenberg 方程式は次で与えられる。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = [\hat{A}_I(t), \hat{H}_0]$$

2.3.1 Fermi の黄金律

Schrödinger 方程式 (2.3.1) の解は、

$$|\psi(t)\rangle_I = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{V}_I(t') \right] |\psi(0)\rangle_I$$

で与えられるとすぐわかる。 $|\psi(0)\rangle_I = |\psi(0)\rangle$ であり、 T -指数関数は

$$\begin{aligned} T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{V}_I(t') \right] &\equiv \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n T \left[\hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \cdots \hat{V}_I(t_n) \right] \\ &= \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \cdots \hat{V}_I(t_n) \end{aligned}$$

で与えられるから、この級数展開を打ち切ることで摂動論が展開することができる。

無摂動項 \hat{H}_0 の固有状態と対応するエネルギー固有値をそれぞれ $|n\rangle$, E_n とおくと、始状態が $|\psi(0)\rangle = |n\rangle$ のときに $|\psi(t)\rangle = |j\rangle$ となる確率 $P_{n \rightarrow j}(t)$ は、

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow j}(t) &\equiv \left| {}_I \langle j(t) | T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{V}_I(t') \right] | n \rangle \right|^2 \\ &= \left| \delta_{jn} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \langle j | \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \cdots \hat{V}_I(t_n) | n \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

4) 以降、添え字のない状態と演算子は Schrödinger 描像のものとする。

で与えられるとわかる。外場が時間に陽に依存しない場合に \hat{V} の 3 次以上を無視して $j \neq n$ の場合の $P_{n \rightarrow j}(t)$ を計算すると、

$$\begin{aligned}
P_{n \rightarrow j}(t) &= \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt_1 \langle j | \hat{V}_1(t_1) | n \rangle \right|^2 + \mathcal{O}(V^3) \\
&= \left| \frac{1}{i\hbar} \langle j | \hat{V} | n \rangle \int_0^t dt_1 e^{i(E_j - E_n)t_1/\hbar} \right|^2 + \mathcal{O}(V^3) \\
&= \left| \frac{\langle j | \hat{V} | n \rangle}{E_j - E_n} \left(1 - e^{i(E_j - E_n)t/\hbar} \right) \right|^2 + \mathcal{O}(V^3) \\
&= \frac{2|V_{jn}|^2}{(E_j - E_n)^2} \left(1 - \cos \frac{(E_j - E_n)t}{\hbar} \right) + \mathcal{O}(V^3) \\
&= \frac{4|V_{jn}|^2}{(E_j - E_n)^2} \sin^2 \frac{(E_j - E_n)t}{2\hbar} + \mathcal{O}(V^3)
\end{aligned}$$

となる ($V_{jn} \equiv \langle j | \hat{V} | n \rangle$)。一般的に多体系のエネルギー固有値は連続的で、エネルギースペクトル上で固有状態は密に分布している。あるエネルギー幅に属する状態への遷移確率 $P_{n \rightarrow \{j\}}(t)$ を考えた場合には、系の状態密度 $\rho(E)$ を用いて

$$P_{n \rightarrow \{j\}}(t) \simeq \int \frac{4|V_{jn}(E_j)|^2}{(E_j - E_n)^2} \sin^2 \frac{(E_j - E_n)t}{2\hbar} \rho(E_j) dE_j \quad (2.3.2)$$

とすればよい。このとき様々な終状態 $|j\rangle$ を考えるために V_{jn} には E_j への依存性が現れている⁵⁾。ここで、次の関数のふるまいについて考える。

$$f(x; \alpha) = \left(\frac{\sin \alpha x}{x} \right)^2$$

まず $x \rightarrow 0$ では、 $\sin x/x \rightarrow 1$ より $f(x; \alpha) \rightarrow \alpha^2$ となっていることがわかる。一方、 x 全域でこの $f(x; \alpha)$ を積分すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x; \alpha) dx = \text{Re} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - e^{2i\alpha x}}{2x^2} dx \right] = \pi\alpha$$

となっている (Jordan の補題と留数定理を用いた)。よって α が大きくなるにつれて $f(x; \alpha)$ は $x = 0$ で発散するが、 $x \neq 0$ では値がほぼ 0 に抑えられることがわかる。そこで、十分大きな α では

$$f(x; \alpha) \simeq \pi\alpha\delta(x)$$

とみなすことにする。このことを (2.3.2) に用いると、

$$\begin{aligned}
P_{n \rightarrow \{j\}}(t) &= \int \frac{|V_{jn}(E_j)|^2}{\hbar^2} f\left(\frac{E_j - E_n}{2\hbar}; t\right) \rho(E_j) dE_j \\
&\simeq \int \frac{\pi t |V_{jn}(E_j)|^2}{\hbar^2} \delta\left(\frac{E_j - E_n}{2\hbar}\right) \rho(E_j) dE_j \\
&= \frac{2\pi t |V_{jn}(E_n)|^2}{\hbar} \rho(E_n)
\end{aligned}$$

5) 本来は $|j\rangle$ は E_j のみに依存するものではなく、同じエネルギー固有値 E_j をとる状態が互いに直交して縮退している。しかし熱力学的な系を考えていれば典型性によりそれらの状態は全て同じような性質を満たすことが期待されるため、 $V_{jn} = \langle j | \hat{V} | n \rangle$ は E_j のみに依存する。

というふるまうことになる。このように、十分長い時間外場のもとで時間発展したときの遷移は、始状態に非常に近い状態への遷移が支配的となる。 $P_{n \rightarrow j}(t)$ を時間で微分して単位時間あたりの遷移率 $w_{n \rightarrow j}(t)$ を求めると、

$$w_{n \rightarrow \{j\}}(t) = \frac{d}{dt} P_{n \rightarrow \{j\}}(t) \simeq \frac{2\pi |V_{jn}|^2}{\hbar} \rho(E_n)$$

と一定になる。この式、および終状態を 1 つの $|j\rangle$ に絞った際の表式

$$w_{n \rightarrow j}(t) = \frac{2\pi |V_{jn}|^2}{\hbar} \delta(E_j - E_n) \quad (2.3.3)$$

は Fermi の黄金律と呼ばれる。

実際には $t \rightarrow \infty$ とすることは不可能であるため、Fermi の黄金律 (2.3.3) に現れたデルタ関数はあくまで見做しのものであることに注意する。 α を十分に大きくして $f(x) \sim \pi\alpha\delta(x)$ とみなせるようになって、 $f(0) = \alpha^2$ より実際には

$$\Delta x \sim \frac{\pi}{\alpha}$$

のピーク幅が $x = 0$ 周りにある。よって、Fermi の黄金律 (2.3.3) におけるデルタ関数 $\delta(E_j - E_n)$ にも、実際には $E_j = E_n$ 周りで

$$\Delta E \sim \frac{2\pi\hbar}{t} = \frac{h}{t}$$

のピーク幅が存在している。

2.3.2 調和摂動

前節の摂動論の形式において、摂動項 $\hat{V}(t)$ が

$$\hat{V}(t) = \hat{A}e^{-i\omega t} + \hat{A}^\dagger e^{i\omega t}$$

というように周波数 ω の振動で表されていた場合には、 $\hat{V}(t)$ の 1 次の摂動論で求めた遷移確率 $P_{n \rightarrow j}(t)$ ($n \neq j$) が、

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow j}(t) &= \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt_1 \langle j | \hat{V}_I(t_1) | n \rangle \right|^2 + \mathcal{O}(V^3) \\ &= \left| \frac{1}{i\hbar} \left(\langle j | \hat{A} | n \rangle \int_0^t dt_1 e^{i(E_j - E_n - \hbar\omega)t_1/\hbar} + \langle j | \hat{A}^\dagger | n \rangle \int_0^t dt_1 e^{i(E_j - E_n + \hbar\omega)t_1/\hbar} \right) \right|^2 + \mathcal{O}(V^3) \\ &= \left| \frac{\langle j | \hat{A} | n \rangle}{E_j - E_n - \hbar\omega} \left(1 - e^{\frac{i}{\hbar}(E_j - E_n - \hbar\omega)t} \right) + \frac{\langle n | \hat{A} | j \rangle}{E_j - E_n + \hbar\omega} \left(1 - e^{\frac{i}{\hbar}(E_j - E_n + \hbar\omega)t} \right) \right|^2 + \mathcal{O}(V^3) \\ &= \frac{4|A_{jn}|^2}{(E_j - E_n - \hbar\omega)^2} \sin^2 \frac{(E_j - E_n - \hbar\omega)t}{2\hbar} + \frac{4|A_{nj}|^2}{(E_j - E_n + \hbar\omega)^2} \sin^2 \frac{(E_j - E_n + \hbar\omega)t}{2\hbar} \\ &\quad + \frac{(A_{jn})^2}{(E_j - E_n)^2 - (\hbar\omega)^2} \left(1 - e^{\frac{i}{\hbar}(E_j - E_n + \hbar\omega)t} \right) \left(1 - e^{-\frac{i}{\hbar}(E_j - E_n - \hbar\omega)t} \right) \\ &\quad + \frac{(A_{jn}^*)^2}{(E_j - E_n)^2 - (\hbar\omega)^2} \left(1 - e^{-\frac{i}{\hbar}(E_j - E_n + \hbar\omega)t} \right) \left(1 - e^{\frac{i}{\hbar}(E_j - E_n - \hbar\omega)t} \right) + \mathcal{O}(V^3) \end{aligned}$$

となるので、遷移過程は $E_j \simeq E_n \pm \hbar\omega$ の準位へのものが支配的であるとわかる。この条件を満たす E_j について

$$1 - e^{\frac{i}{\hbar}(E_j - E_n \mp \hbar\omega)t} \ll 1, \quad E_j - E_n \mp \hbar\omega \ll E_j - E_n \pm \hbar\omega$$

が成り立つから、上式の $P_{n \rightarrow j}(t)$ は近似的に

$$P_{n \rightarrow j}(t) \simeq \begin{cases} \frac{4|A_{jn}|^2}{(E_j - E_n - \hbar\omega)^2} \sin^2 \frac{(E_j - E_n - \hbar\omega)t}{2\hbar} & (E_j \simeq E_n + \hbar\omega) \\ \frac{4|A_{nj}|^2}{(E_j - E_n + \hbar\omega)^2} \sin^2 \frac{(E_j - E_n + \hbar\omega)t}{2\hbar} & (E_j \simeq E_n - \hbar\omega) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

と表せる。この表式には前節の議論をそのまま適用することができるので、系のエネルギー準位が連続的で t が十分大きい場合には、

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow j}(t) &= \frac{2\pi t |A_{jn}|^2}{\hbar} \delta(E_j - E_n - \hbar\omega) + \frac{2\pi t |A_{nj}|^2}{\hbar} \delta(E_j - E_n + \hbar\omega) \\ \therefore w_{n \rightarrow j}(t) &= \frac{2\pi |A_{jn}|^2}{\hbar} \delta(E_j - E_n - \hbar\omega) + \frac{2\pi |A_{nj}|^2}{\hbar} \delta(E_j - E_n + \hbar\omega) \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

と単位時間当たりの遷移率の表式が表せるとわかる。このように周波数 ω で振動する弱い摂動が加わった場合には、 $\hbar\omega$ だけエネルギーを吸収・放出する過程が生じる。

逆過程の遷移率 $w_{j \rightarrow n}(t)$ は、(2.3.4) で $n \leftrightarrow j$ と入れ替えることで得られて、 $w_{j \rightarrow n}(t) = w_{n \rightarrow j}(t)$ とわかる。ただし (2.3.4) は十分大きい t で成り立つ関係であり、Fermi の黄金律と同様にデルタ関数には時間 t に依存したピーク幅が存在していることを踏まえるべきである。

$$\hbar\omega \gg \frac{2\pi\hbar}{t} \quad \therefore t \gg \frac{2\pi}{\omega}$$

が満たされていればピークは十分鋭く、遷移はエネルギー差が $\hbar\omega$ 開いた準位間でのみ生じる。順過程と逆過程の遷移率が等しいことからこのときの系の状態は定常的になっている。

2.4 量子状態の位相不変量

多様体をなすパラメータ空間を定義域にもつ量はトポロジカルな特徴付けをすることが可能である。量子系においてこのことはトポロジカル相の概念の導入にあたる。本節ではそのような特徴付けを可能にする Chern の定理について説明するとともに、Chern の定理が適用できる量の代表例として Berry 接続・Berry 曲率を導入する。

2.4.1 Chern の定理

2.4.2 Berry 接続・曲率

m 個のパラメータ $R = \{R^\mu | \mu = 1, 2, \dots, m\} \in \mathbb{R}^m$ で指定される状態 $|\varphi(R)\rangle$ について、パラメータ空間上の点列 $R_1, R_2 \dots R_n$ に対して定義される次のような量を導入する。

$$e^\phi \equiv \prod_{i=1}^{n-1} \langle \varphi(R_{i+1}) | \varphi(R_i) \rangle$$

点列がパラメータ空間上で連続的に 1 次元軌道 C をなす場合にこの量は、

$$\begin{aligned}
\phi &= \sum_{j=1}^{n-1} \ln \langle \varphi(R_{j+1}) | \varphi(R_j) \rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n-1} \ln [1 + (\langle \varphi(R_{j+1}) | - \langle \varphi(R_j) |) | \varphi(R_j) \rangle] \\
&\simeq \sum_{j=1}^{n-1} \ln \left[1 + \sum_{\mu=1}^m \langle \partial^\mu \varphi(R_j) | \varphi(R_j) \rangle (R_{j+1}^\mu - R_j^\mu) \right] \quad \left(\partial^\mu \equiv \frac{\partial}{\partial R^\mu} \right) \\
&\simeq \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{\mu=1}^m \langle \partial^\mu \varphi(R_j) | \varphi(R_j) \rangle (R_{j+1}^\mu - R_j^\mu) \\
&\longrightarrow \int_C \sum_{\mu=1}^m dR^\mu \langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle
\end{aligned} \tag{2.4.1}$$

というように線積分で表せるようになり、被積分ベクトル場

$$A^\mu(R) \equiv \langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle$$

が局所的な幾何学的位相を反映した量として得られる。 $A^\mu(R)$ は Berry 接続と呼ばれ、

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial R^\mu} \langle \varphi(R) | \varphi(R) \rangle = \langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle + \langle \varphi(R) | \partial^\mu \varphi(R) \rangle \\
&= \langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle + (\langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle)^* \\
&= 2\text{Re} \langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle
\end{aligned}$$

より、

$$A^\mu(R) = i \text{Im} \langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle = -i \text{Im} \langle \varphi(R) | \partial^\mu \varphi(R) \rangle$$

である。またこれを積分した ϕ も純虚数である。

(2.4.1) において積分経路 C が閉経路であった場合には Stokes の定理を適用することができて、 C を境界にもつ向き付け可能な 2 次元曲面 S に対して、

$$\begin{aligned}
\phi &= \int_S \sum_{\mu, \nu} dR^\mu \wedge dR^\nu \partial^\mu A^\nu(R) \\
&= \int_S \sum_{\mu, \nu} dR^\mu \wedge dR^\nu [\langle \partial^\mu \varphi(R) | \partial^\nu \varphi(R) \rangle + \langle \partial^\mu \partial^\nu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle] \\
&= \int_S \sum_{\mu, \nu} dR^\mu \wedge dR^\nu \langle \partial^\mu \varphi(R) | \partial^\nu \varphi(R) \rangle \quad (\because dR^\nu \wedge dR^\mu = -dR^\mu \wedge dR^\nu)
\end{aligned}$$

が成り立つとわかる (微分形式については C.4 節参照)。

$$\Omega^{\mu\nu}(R) \equiv \langle \partial^\mu \varphi(R) | \partial^\nu \varphi(R) \rangle$$

も $A^\mu(R)$ と同様に $|\varphi(R)\rangle$ の局所的なパラメータ依存性のみから定まる、幾何学的位相を反映した

量である。また、 $\Omega^{\mu\nu}$ の反対称成分は

$$\begin{aligned}
\sigma^{\mu\nu} &\equiv \frac{1}{2} (\Omega^{\mu\nu} - \Omega^{\nu\mu}) \\
&= \frac{1}{2} (\langle \partial^\mu \varphi | \partial^\nu \varphi \rangle - \langle \partial^\nu \varphi | \partial^\mu \varphi \rangle) \\
&= \frac{1}{2} [\langle \partial^\mu \varphi | \partial^\nu \varphi \rangle - (\langle \partial^\mu \varphi | \partial^\nu \varphi \rangle)^*] \\
&= i \operatorname{Im} \langle \partial^\mu \varphi | \partial^\nu \varphi \rangle
\end{aligned}$$

というように $\Omega^{\mu\nu}(R)$ の虚部に一致し、かつ

$$\phi = \int_S \sum_{\mu, \nu} dR^\mu \wedge dR^\nu \sigma^{\mu\nu}(R)$$

で ϕ を与える。 $\sigma^{\mu\nu}(R)$ は Berry 曲率と呼ばれる。

幾何学的位相と物理量

状態ベクトルの位相には不定性があり、その効果が物理量に現れることはない。このことを原理的に用いて、パラメータに依存した位相変換

$$|\varphi(R)\rangle \longrightarrow |\varphi'(R)\rangle = e^{i\alpha(R)} |\varphi(R)\rangle \quad (\alpha : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R})$$

に対してパラメータ空間の幾何学的位相に関連した量が不変に保たれるかどうかで、それらが物理量として現れるかどうかを判断できると考えられる。上で導入した $\phi, A^\mu, \Omega^{\mu\nu}, \sigma^{\mu\nu}$ についてこの評価法を適用してみる： ϕ は次のように変換される。

$$\begin{aligned}
\phi \longrightarrow \phi' &\equiv i \oint \sum_\mu dR^\mu \langle \partial^\mu \varphi'(R) | \varphi'(R) \rangle \\
&= \oint \sum_\mu dR^\mu [\langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle - i \partial^\mu \alpha(R)] \\
&= \phi - i \oint d\alpha = \phi
\end{aligned}$$

Berry 接続 $A^\mu(R)$ の変換は次のとおりである。

$$\begin{aligned}
A^\mu(R) \longrightarrow A'^\mu(R) &= i \operatorname{Im} \langle \partial^\mu \varphi'(R) | \varphi'(R) \rangle \\
&= i \operatorname{Im} \langle \partial^\mu \varphi(R) | \varphi(R) \rangle - i \partial^\mu \alpha(R) \\
&= A^\mu(R) - i \partial^\mu \alpha(R)
\end{aligned}$$

$\Omega^{\mu\nu}(R)$ は次のように変換される。

$$\begin{aligned}
\Omega^{\mu\nu}(R) \longrightarrow \Omega'^{\mu\nu}(R) &\equiv \langle \partial^\mu \varphi' | \partial^\nu \varphi' \rangle \\
&= \langle \partial^\mu \varphi | \partial^\nu \varphi \rangle - i \partial^\mu \alpha \langle \varphi | \partial^\nu \varphi \rangle + i \partial^\nu \alpha \langle \partial^\mu \varphi | \varphi \rangle + \partial^\mu \alpha \partial^\nu \alpha \\
&= \Omega^{\mu\nu} + i A^\nu \partial^\mu \alpha + i A^\mu \partial^\nu \alpha + \partial^\mu \alpha \partial^\nu \alpha
\end{aligned}$$

Berry 曲率 $\sigma^{\mu\nu}(R)$ の変換は次のとおりである。

$$\begin{aligned}\sigma^{\mu\nu}(R) &\longrightarrow \sigma'^{\mu\nu}(R) \equiv i \operatorname{Im} \langle \partial^\mu \varphi'(R) | \partial^\nu \varphi'(R) \rangle \\ &= i \operatorname{Im} \Omega'^{\mu\nu}(R) \\ &= i \operatorname{Im} \Omega^{\mu\nu}(R) = \sigma^{\mu\nu}\end{aligned}$$

以上から $\phi, \sigma^{\mu\nu}(R)$ は可観測量になりうる一方で $A^\mu(R), \Omega^{\mu\nu}(R)$ は可観測量になってはいけなことがわかる。しかし、例えば $A^\mu(R), \Omega^{\mu\nu}(R)$ を組み合わせて構成される

$$Q^{\mu\nu} \equiv \Omega^{\mu\nu} + A^\mu A^\nu$$

という量は、パラメータに依存した位相変換の下では $A^\mu, \Omega^{\mu\nu}$ の変化が相殺し合うことで不変に保たれるため可観測量になりうる。 $\sigma^{\mu\nu}(R)$ および $Q^{\mu\nu}(R)$ は⁶⁾、 $|\phi(R)\rangle$ の局所的なパラメータ依存性のみから定まり、かつ物理量として観測できる可能性があるため重要である。

断熱変化における幾何学的位相

$|\varphi(R)\rangle$ として、同じパラメータ R で指定されるハミルトニアン $\hat{H}(R)$ の基底状態を選ぶと、そのダイナミクスについて幾何学的な特徴付けを行うことができる。

パラメータの時間変化 $R(t)$ で駆動される $\hat{H}(R(t))$ のダイナミクスは、時間発展演算子

$$\hat{U}(t) = \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(R(t_1)) \hat{H}(R(t_2)) \cdots \hat{H}(R(t_n))$$

で表される。これに対して、各 $\hat{H}(R(t_n))$ の間に対応する固有状態 $\{|\varphi_m(R(t_n))\rangle\}$ による完全性関係

$$\hat{I} = \sum_m |\varphi_m(R(t_n))\rangle \langle \varphi_m(R(t_n))|$$

を挟み込むと、各 $\hat{H}(R(t_n))$ は固有値 $E_m(R(t_n))$ に置き換わっていき、

$$\begin{aligned}\hat{U}(t) = \hat{I} + \left[\sum_{m_1, \dots, m_n} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n E_{m_1}(R(t_1)) E_{m_2}(R(t_2)) \cdots E_{m_n}(R(t_n)) \right. \\ \left. \times |\varphi_{m_1}(R(t_1))\rangle \left(\prod_{i=1}^{n-1} \langle \varphi_{m_i}(R(t_i)) | \varphi_{m_{i+1}}(R(t_{i+1})) \rangle \right) \langle \varphi_{m_n}(R(t_n)) | \right]\end{aligned}$$

と表せる。ここで $t \simeq t'$ であるときに基底状態 $|\varphi_0(R(t))\rangle$ について、

$$\langle \varphi_0(R(t)) | \varphi_m(R(t')) \rangle \simeq \delta_{m0} \langle \varphi_0(R(t)) | \varphi_0(R(t')) \rangle \quad (2.4.2)$$

が成り立つとすると、さらに完全性関係を挟みこんでいくことで、

$$\begin{aligned}\langle \varphi_0(R(t=0)) | \varphi_{m_1}(R(t_1)) \rangle \left(\prod_{i=1}^{n-1} \langle \varphi_{m_i}(R(t_i)) | \varphi_{m_{i+1}}(R(t_{i+1})) \rangle \right) \langle \varphi_{m_n}(R(t_n)) | \\ \simeq \sum_m e^{-\phi} \langle \varphi_0(R(t)) | \left(\prod_{i=1}^n \delta_{m_i 0} \right)\end{aligned}$$

6) 定義からわかるように、 $Q^{\mu\nu}$ の反対称成分および虚部が $\sigma^{\mu\nu}$ である。

が任意の t_1, t_2, \dots および $n = 1, 2, \dots$ で成り立つことがわかる⁷⁾。ただし ϕ は経路 $C = \{R(t') : 0 < t' < t\}$ 上での $|\varphi_0(R)\rangle$ の幾何学的位相である。

$$\phi \equiv \int_C \sum_{\mu} dR^{\mu} \langle \partial^{\mu} \varphi_0(R) | \varphi_0(R) \rangle$$

また同様にして、

$$\langle \varphi_0(R(t=0)) | \simeq e^{-\phi} \langle \varphi_0(R(t)) |$$

と近似できることもわかるため、基底状態のダイナミクスは、

$$\begin{aligned} \hat{U}^{\dagger}(t) |\varphi_0(R(t=0))\rangle &\simeq e^{\phi} \left[\hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_0(R(t')) \right)^n \right] |\varphi_0(R(t))\rangle \\ &= \exp \left[\phi - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_0(R(t')) \right] |\varphi_0(R(t))\rangle \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

となることがわかる。この近似の適用範囲は (2.4.2) により次のように定まる： $\hat{H}(R(t + \Delta t))$ を $\hat{H}(R(t))$ に摂動を加えたハミルトニアンとみて、

$$\hat{H}(R(t + \Delta t)) = \hat{H}(R(t)) + \Delta t \sum_{\mu} \dot{R}(t) \partial^{\mu} \hat{H}(R(t)) + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

に対する RS 摂動論 (2.1 節参照) を展開して $|\varphi_m(R(t + \Delta t))\rangle$ を Δt の 1 次まで求めると、

$$\begin{aligned} |\varphi_m(R(t + \Delta t))\rangle &= |\varphi_m(R(t))\rangle + \Delta t \sum_{m' \neq m} \sum_{\mu} \frac{\langle \varphi_{m'}(R(t)) | \dot{R}^{\mu}(t) \partial^{\mu} \hat{H}(R(t)) | \varphi_m(R(t)) \rangle}{E_m(R(t)) - E_{m'}(R(t))} |\varphi_{m'}(R(t))\rangle + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned}$$

とわかる。よって、

$$\begin{aligned} \langle \varphi_0(R(t)) | \varphi_m(R(t + \Delta t)) \rangle &= \delta_{m0} + \Delta t \sum_{\mu} \frac{\langle \varphi_0(R(t)) | \dot{R}^{\mu}(t) \partial^{\mu} \hat{H}(R(t)) | \varphi_m(R(t)) \rangle}{E_m(R(t)) - E_0(R(t))} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= \delta_{m0} + \Delta t \sum_{\mu} \frac{\langle \varphi_0(R(t)) | \dot{R}^{\mu}(t) \partial^{\mu} \hat{H}(R(t)) | \varphi_m(R(t)) \rangle}{E_m(R(t)) - E_0(R(t))} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned}$$

というように評価できる。 Δt の 1 次で (2.4.2) が成り立つには、

$$\sum_{\mu} \dot{R}^{\mu}(t) \frac{\langle \varphi_0(R(t)) | \partial^{\mu} \hat{H}(R(t)) | \varphi_m(R(t)) \rangle}{E_m(R(t)) - E_0(R(t))} \ll 1$$

が満たされればよい。左辺の分母は系のエネルギーギャップで下から抑えられるため、そのエネルギースケールに対応した R の変化スケールに対して $\dot{R}(t)$ が十分小さいことが (2.4.3) の成立条件である。このようなゆっくりとした変化は断熱変化と呼ばれる。

7) 全ての t_1, t_2, \dots, t_n の組み合わせが $[0, t]$ の間を走るため、経路 C を辿る形に内積を並べられることがわかる。また、 t_i の間で時間を遡る組み合わせも考えられるが、 ϕ が純虚数に限られることから逆向きの経路で完全に打ち消すことができる。

2.5 Green 関数

座標の並進変換 x に対して不変な線形演算子 \mathcal{L} についての非斉次線形微分方程式

$$\mathcal{L}u(x) = f(x) \quad (x \in I, I \subset \mathbb{R}) \quad (2.5.1)$$

の解を求める方法として、次で定義される Green 関数 $g(x - x')$ を用いるものがよく知られている。

$$\mathcal{L}g(x - x') \equiv \delta(x - x')$$

この $g(x - x')$ を用いると、 \mathcal{L} の作用の線形性から (2.5.1) の解が

$$u(x) = \int_I dx' f(x') g(x - x')$$

で与えられる。微分方程式は境界条件によりその解が変化するが、その自由度は Green 関数に含まれている。

このようにして定義された Green 関数 $g(x - x')$ は、斉次線形微分方程式

$$\mathcal{L}u(x) = 0$$

の $I' \subset I$ で定義された解 $u(x)$ に対して、

$$u(x) = \int_{I'} dx' g(x - x') u(x') \quad (x \notin I')$$

で I' に含まれない区間での解 $u(x)$ を与えることができる。実際、上式の最右辺に \mathcal{L} を作用させると、

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \int_{I'} dx' g(x - x') u(x') &= \int_{I'} dx' \mathcal{L}g(x - x') u(x') \\ &= \int_{I'} dx' \delta(x - x') u(x') \\ &= 0 \quad (\because x \notin I') \end{aligned}$$

となって、この $u(x)$ は解になっている。このように $g(x - x')$ は線形方程式の解 $u(x)$ についての相対的な情報をもっており、この性質を指して伝播関数 (プロパゲーター) と呼ぶこともある。

2.5.1 実時間 Green 関数

一般的な相互作用のない粒子系のハミルトニアン

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \equiv \sum_{j,j'} \left(\langle j | \hat{H}^{(1)} | j' \rangle - \mu \delta_{jj'} \right) \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'}$$

に対し、 \hat{a}_j の Heisenberg 方程式は⁸⁾、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_j(t) = [\hat{a}_j(t), \hat{\mathcal{H}}_0] = \sum_{j'} \left(\langle j | \hat{H}^{(1)} | j' \rangle - \mu \delta_{jj'} \right) \hat{a}_{j'}(t)$$

8) 1.4.3 項の最後で述べたように、本節では化学ポテンシャルの項を差し引いたハミルトニアンで系の時間発展を考える。

で与えられる。この式はベクトル $\alpha(t) = (\alpha_1(t), \alpha_2(t), \dots)$ に対する斉次線形偏微分方程式

$$\left(i\hbar \frac{d}{dt} - H^{(1)} + \mu \right) \alpha(t) = 0$$

を成している。ただし、 $\langle j | \hat{H}^{(1)} | j' \rangle$ を (j, j') 成分にもつ行列、すなわち $\{|j\rangle\}$ を基底にとった $\hat{H}^{(1)}$ の行列表示を単に $H^{(1)}$ と表している。この方程式に対して Green 関数 $G(t, t')$ を、

$$\left(i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H}^{(1)} + \mu \right) G(t, t') = \delta(t - t') \quad (2.5.2)$$

で与えることができる。 $G(t, t')$ は一般にはベクトル $\alpha(t)$ の線形変換として行列をなしている。

元々演算子の運動方程式であったものに対して与えた Green 関数 $G(t, t')$ は、演算子の期待値として与えることができる。代表的なものが、

$$\text{遅延 Green 関数: } g_{jj'}^R(t, t') \equiv \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{a}_j(t), \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t - t') \quad (2.5.3)$$

$$\text{先進 Green 関数: } g_{jj'}^A(t, t') \equiv -\frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{a}_j(t), \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t' - t) \quad (2.5.4)$$

$$\text{因果 Green 関数: } g_{jj'}^C(t, t') \equiv \frac{1}{i\hbar} \left\langle T \left[\hat{a}_j(t) \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \right] \right\rangle \quad (2.5.5)$$

で (j, j') 成分が与えられる 3 種類の $G(t, t')$ である。ここで Heisenberg 描像の演算子は $\hat{\mathcal{H}}_0$ に従うもので与えられていて、期待値は時刻の原点での状態に対しとられている。また、時間順序積 T は Heisenberg 描像の生成消滅演算子に対して次を意味する：

$$T[\hat{a}(t) \hat{a}^\dagger(t')] = \begin{cases} \hat{a}(t) \hat{a}^\dagger(t') & (t > t') \\ \zeta \hat{a}^\dagger(t') \hat{a}(t) & (t < t') \end{cases}$$

$g_{jj'}^R(t, t')$ に対して、 $\hat{a}_j(t)$ の Heisenberg 方程式と $\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger$ の (反) 交換関係、および

$$\frac{d}{dt} \Theta(t - t') = \delta(t - t')$$

を用いると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} g_{jj'}^R(t, t') = \sum_{j''} \left(\langle j | \hat{H}^{(1)} | j'' \rangle - \mu \delta_{jj''} \right) g_{j''j'}^R(t, t') + \delta_{jj'} \delta(t - t')$$

を満たすことがわかる。これは $G^R(t, t')$ が (2.5.2) を満たすことに他ならない。 $G^A(t, t')$ についても同様にして (2.5.2) を満たすことが示せて、 $G^C(t, t')$ については $\Theta(t - t')$ を用いて

$$g_{jj'}^C(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \left[\left\langle \hat{a}_j(t) \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \right\rangle \Theta(t - t') + \zeta \left\langle \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \hat{a}_j(t) \right\rangle \Theta(t' - t) \right]$$

と表すことでやはり (2.5.2) を満たすことが確認できる。演算子形式での定義により、 $G(t, t')$ は時刻 t での状態 $|j\rangle$ と時刻 t' での状態 $|j'\rangle$ 間の粒子の伝播確率を表す、文字通り伝播関数であると物理的に解釈できることも確かにわかる。

Green 関数の Fourier 成分

(2.5.2) で定義された Green 関数 $G(t, t')$ は時刻の原点のとり方に依るべきでない。これは演算子での定義 (2.5.3), (2.5.4), (2.5.5) において、 $\hat{\mathcal{H}}_0$ に時間依存性がないため Heisenberg 描像に時刻の原点の不定性があることからわかる。このため $G(t, t')$ の関数形は実際には

$$G(t, t') = G(t - t')$$

となっている。Green 関数の性質から $t \rightarrow \pm\infty$ で $G(t) \rightarrow 0$ に必ず収束しなければならない⁹⁾ ことも合わせると、 $G(t, t')$ には次のように Fourier 成分を定義することができる。

$$\tilde{G}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt G(t) e^{i\omega t}$$

(2.5.2) の両辺を素朴に Fourier 変換すると、

$$(\hbar\omega - H^{(1)} + \mu) \tilde{G}(\omega) = I$$

となるため、

$$\tilde{G}(\omega) = (\hbar\omega - H^{(1)} + \mu)^{-1}$$

と表せるように思えるが、以下で示すように厳密には正しくない： $G^R(t, t')$ と $\tilde{G}^A(t, t')$ を計算するには、1 粒子状態の基底を $\hat{H}^{(1)}$ の固有状態 $\hat{H}^{(1)}|k\rangle = \epsilon_k|k\rangle$ に取り直した方がよい。このようにすると多体系のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_0$ が、 $|k\rangle$ に対応した生成消滅演算子 $\hat{a}_k, \hat{a}_k^\dagger$ を用いて

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_k (\epsilon_k - \mu) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$$

と表せるようになるため、 $\hat{a}_k(t)$ の時間発展は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_k(t) = [\hat{a}_k(t), \hat{\mathcal{H}}_0] = (\epsilon_k - \mu) \hat{a}_k(t) \quad \therefore \hat{a}_k(t) = \hat{a}_k e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar}$$

とわかり、(2.5.3) に代入すると、

$$\begin{aligned} g_{kk'}^R(t, t') &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger]_{-\zeta} \right\rangle e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} e^{i(\epsilon_{k'} - \mu)t'/\hbar} \Theta(t - t') \\ &= \frac{1}{i\hbar} e^{-i(\epsilon_k - \mu)(t - t')/\hbar} \delta_{kk'} \Theta(t - t') \end{aligned}$$

また、(2.5.4) に代入すると、

$$\begin{aligned} g_{kk'}^A(t, t') &= -\frac{1}{i\hbar} \left\langle [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger]_{-\zeta} \right\rangle e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} e^{i(\epsilon_{k'} - \mu)t'/\hbar} \Theta(t' - t) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} e^{-i(\epsilon_k - \mu)(t - t')/\hbar} \delta_{kk'} \Theta(t' - t) \end{aligned}$$

と表せるからである。一方、この表式では $t \rightarrow \pm\infty$ で $g_{kk'}(t, t') \rightarrow 0$ に収束しないため、無限小の $\delta > 0$ を用いた収束因子 $e^{-\delta|t|}$ を乗じる必要がある。収束因子を踏まえると $\tilde{g}_{kk'}(\omega)$ は、

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{kk'}^R(\omega) &= \frac{1}{i\hbar} \delta_{kk'} \int_0^\infty dt e^{-i(\epsilon_k - \mu - \hbar\omega)t/\hbar} e^{-\delta t} = \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) + i\delta} \delta_{kk'} \\ \tilde{g}_{kk'}^A(\omega) &= -\frac{1}{i\hbar} \delta_{kk'} \int_{-\infty}^0 dt e^{-i(\epsilon_k - \mu - \hbar\omega)t/\hbar} e^{\delta t} = \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) - i\delta} \delta_{kk'} \end{aligned}$$

と計算される。この式は $\tilde{G}^R(\omega), \tilde{G}^A(\omega)$ が

$$\tilde{G}^R(\omega) = (\hbar\omega - H^{(1)} + \mu + i\delta)^{-1}, \quad \tilde{G}^A(\omega) = (\hbar\omega - H^{(1)} + \mu - i\delta)^{-1}$$

という逆行列で与えられることを表している。1 粒子状態の基底 $\{|j\rangle\}$ を取り直しても両辺をユニタリ変換するに過ぎないので、上の逆行列による表式は任意の 1 粒子状態基底において成り立つ。

9) 元の微分方程式に対して $t \rightarrow \pm\infty$ で Dirichlet 境界条件を課していることにあたる。

無限小の $\pm i\delta$ は $\tilde{g}_{kk'}(\omega)$ が ω の複素関数として 1 位の極 $\hbar\omega = \epsilon_k - \mu$ をとるときに無視できなくなる。このことは $\tilde{g}_{kk'}(\omega)$ を $-\infty < \omega < \infty$ で積分する際に極をどのように回避するかに関係していて、 $g_{kk'}^R(\omega)$ は虚軸正方向に、 $\tilde{g}_{kk'}^A(\omega)$ は虚軸負方向に避けることになる。 $g(t, t')$ は $\tilde{g}_{kk'}(\omega)$ の Fourier 逆変換

$$g_{kk'}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{g}_{kk'}(\omega) e^{-i\omega(t-t')}$$

で与えられるため、留数積分でこの Fourier 逆変換を計算すると確かに $g_{kk'}^R(t, t')$ は $t - t' < 0$ で、 $g_{kk'}^A(t, t')$ は $t - t' > 0$ で値を持たない (詳しくは付録 C.1 節参照)。

熱平衡状態での因果 Green 関数

$\tilde{G}^C(\omega)$ についても同様に上の手順で計算を試みる。1 粒子固有状態の基底で $g_{kk'}^C$ を表すと、

$$\begin{aligned} g_{kk'}^C(t - t') &= \frac{1}{i\hbar} \left(\left\langle \hat{a}_k \hat{a}_{k'}^\dagger \right\rangle e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} e^{i(\epsilon_{k'} - \mu)t'/\hbar} \Theta(t - t') + \zeta \left\langle \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k \right\rangle e^{i-(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} e^{i(\epsilon_{k'} - \mu)t'/\hbar} \Theta(t' - t) \right) \end{aligned}$$

となり、期待値部分が時間の原点においた状態に依存するため一般の表式を得られないことがわかる。これは $\tilde{G}^R(\omega), \tilde{G}^A(\omega)$ が時間の原点においた状態によらない表式を得られたことと対照的である。

期待値を熱平衡状態 $(T, \mu; V)$ に対してとるならば、この系は相互作用がないので、Fermi 粒子系であれば Fermi 分布関数 $f_{\beta, \mu}(\epsilon)$ と反交換関係より

$$\left\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right\rangle = f_{\beta, \mu}(\epsilon_k) \delta_{kk'}, \quad \left\langle \hat{a}_k \hat{a}_{k'}^\dagger \right\rangle = [1 - f_{\beta, \mu}(\epsilon_k)] \delta_{kk'}$$

Bose 粒子系であれば Bose 分布関数 $b_{\beta, \mu}(\epsilon)$ と交換関係より

$$\left\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \right\rangle = b_{\beta, \mu}(\epsilon_k) \delta_{kk'}, \quad \left\langle \hat{a}_k \hat{a}_{k'}^\dagger \right\rangle = [1 + b_{\beta, \mu}(\epsilon_k)] \delta_{kk'}$$

と期待値部分を表せる (1.4.4 項参照)。よって $g_{kk'}^C(t)$ は、Fermi 粒子系の場合、

$$\begin{aligned} g_{kk'}^C(t) &= \frac{1}{i\hbar} \delta_{kk'} e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} \{ [1 - f_{\beta, \mu}(\epsilon_k)] \Theta(t) - f_{\beta, \mu}(\epsilon_k) \Theta(-t) \} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \delta_{kk'} e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} \left[\frac{\Theta(t)}{1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} - \frac{\Theta(-t)}{1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right] \end{aligned}$$

Bose 粒子系の場合は、

$$\begin{aligned} g_{kk'}^C(t) &= \frac{1}{i\hbar} \delta_{kk'} e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} \{ [1 + b_{\beta, \mu}(\epsilon_k)] \Theta(t) + b_{\beta, \mu}(\epsilon_k) \Theta(-t) \} \\ &= \frac{1}{i\hbar} e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} \left[\frac{\Theta(t)}{1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} - \frac{\Theta(-t)}{1 - e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right] \end{aligned}$$

と表せる。これらを Fourier 変換することで $\tilde{g}_{kk'}^C(\omega)$ は次のように求まる。

$$\tilde{g}_{kk'}^C(\omega) = \begin{cases} \left(\frac{1}{1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) + i\delta} + \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) - i\delta} \right) \delta_{kk'} & (\text{Fermi 粒子系}) \\ \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) + i\delta} + \frac{1}{1 - e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) - i\delta} \right) \delta_{kk'} & (\text{Bose 粒子系}) \end{cases}$$

ここでも $t \rightarrow \pm\infty$ での収束性を表すために無限小の $\delta > 0$ を用いた収束因子 $e^{-\delta|t|}$ を付して積分を行っている。特に $T = 0$ での $\tilde{g}_{kk'}^C(\omega)$ は、Bose 粒子系では $\tilde{g}_{kk'}^C(\omega) = \tilde{g}_{kk'}^R(\omega)$ となり、Fermi 粒子系の場合には、

$$\tilde{g}_{kk'}^C(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) + i\delta} \delta_{kk'} = \tilde{g}_{kk'}^R(\omega) & (\epsilon_k > \mu) \\ \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) - i\delta} \delta_{kk'} = \tilde{g}_{kk'}^A(\omega) & (\epsilon_k < \mu) \end{cases}$$

となる。 $\tilde{G}^C(\omega)$ の表式については 2.5.2 項で述べる。

相互作用がある系への Green 関数の拡張

$g_{jj'}(t, t')$ の定義において、 $\hat{a}_j(t), \hat{a}_j^\dagger(t)$ を、相互作用項をもつハミルトニアン

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{j,j'} \left(\langle j | \hat{H}^{(1)} | j' \rangle - \mu \delta_{jj'} \right) \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} + \frac{1}{4} \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} \langle j_1, j_2 | \hat{V}^{(2)} | j_3, j_4 \rangle \hat{a}_{j_1}^\dagger \hat{a}_{j_2}^\dagger \hat{a}_{j_4} \hat{a}_{j_3}$$

に対する Heisenberg 描像の演算子にとると、 \hat{a}_j の Heisenberg 方程式が

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}_j(t) &= [\hat{a}_j(t), \hat{\mathcal{H}}] \\ &= \sum_{j'} \left(\langle j | \hat{H}^{(1)} | j' \rangle - \mu \delta_{jj'} \right) \hat{a}_{j'}(t) \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{j_1, j_2, j_3} \left(\langle j, j_1 | \hat{V}^{(2)} | j_2, j_3 \rangle + \zeta \langle j_1, j | \hat{V}^{(2)} | j_2, j_3 \rangle \right) \hat{a}_{j_1}^\dagger(t) \hat{a}_{j_2}(t) \hat{a}_{j_3}(t) \\ &= \sum_{j'} \left(\langle j | \hat{H}^{(1)} | j' \rangle - \mu \delta_{jj'} \right) \hat{a}_{j'}(t) + \frac{1}{2} \sum_{j_1, j_2, j_3} \langle j, j_1 | \hat{V}^{(2)} | j_2, j_3 \rangle \hat{a}_{j_1}^\dagger(t) \hat{a}_{j_2}(t) \hat{a}_{j_3}(t) \end{aligned}$$

と変わるの¹⁰⁾、遅延 Green 関数は次式を満たすようになる。

$$\begin{aligned} \sum_{j''} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta_{jj''} - \langle j | \hat{H}^{(1)} | j'' \rangle + \mu \delta_{jj''} \right) g_{j''j'}^R(t, t') \\ = \delta_{jj'} \delta(t - t') + \frac{1}{2} \sum_{j_1, j_2, j_3} \langle j, j_1 | \hat{V}^{(2)} | j_2, j_3 \rangle \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{a}_{j_1}^\dagger(t) \hat{a}_{j_2}(t) \hat{a}_{j_3}(t), \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t - t') \quad (2.5.6) \end{aligned}$$

右辺第 2 項の内、

$$g_{j_1 j_2 j_3 j}^R(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{a}_{j_1}^\dagger(t) \hat{a}_{j_2}(t) \hat{a}_{j_3}(t), \hat{a}_j^\dagger(t') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t - t')$$

という 4 階のテンソルで表される因子は 2 体遅延 Green 関数といい、遅延 Green 関数に対するハミルトニアンに加わった自己相互作用の効果を表している。先進・因果 Green 関数に対しても

$$\begin{aligned} g_{j_1 j_2 j_3 j}^A(t, t') &= -\frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{a}_{j_1}^\dagger(t) \hat{a}_{j_2}(t) \hat{a}_{j_3}(t), \hat{a}_j^\dagger(t') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t' - t) \\ g_{j_1 j_2 j_3 j}^C(t, t') &= \frac{1}{i\hbar} \left\langle T \left[\hat{a}_{j_1}^\dagger(t) \hat{a}_{j_2}(t) \hat{a}_{j_3}(t) \hat{a}_j^\dagger(t') \right] \right\rangle \end{aligned}$$

10) 3 番目の等号で用いた次の関係式は、2 体相互作用は必ず 2 粒子に対称的に作用するという自然な仮定の帰結である。

$$\hat{V}^{(2)} |j_1, j_2\rangle = \zeta \hat{V}^{(2)} |j_2, j_1\rangle$$

で 2 体 Green 関数が定義され、

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta_{jj''} - \langle j | \hat{H}^{(1)} | j'' \rangle + \mu \delta_{jj''} \right) g_{jj''}(t, t') = \delta_{jj''} \delta(t - t') + \frac{1}{2} \langle j, j_1 | \hat{V}^{(2)} | j_2, j_3 \rangle g_{j_1 j_2 j_3 j''}(t, t')$$

を満たす (和の記号を省略した。2 回登場する添字は全て和をとっている)。

量子論的に相互作用系へ定義を拡張した $g_{jj''}(t, t')$ は、相互作用のない系の運動方程式から導かれる (2.5.2) の Green 関数として適切ではない。しかし演算子での定義を見る限り、物理的に伝播関数としての性質が失われているとは考えられない。ここで $g_{jj''}(t, t')$ と $g_{j_1 j_2 j_3 j''}(t, t')$ に対して

$$\frac{1}{2} \sum_{j_1, j_2, j_3} \langle j, j_1 | \hat{V}^{(2)} | j_2, j_3 \rangle g_{j_1 j_2 j_3 j''}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \sum_{j''} \Sigma_{jj''}(t, t'') g_{jj''}(t'', t')$$

を満たす $\Sigma_{jj''}(t, t')$ を導入できたとすると、(2.5.6) は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt'' \sum_{j''} \left[\left(i\hbar \frac{d}{dt} \delta_{jj''} - \langle j | \hat{H}^{(1)} | j'' \rangle + \mu \delta_{jj''} \right) \delta(t - t'') + \Sigma_{jj''}(t, t'') \right] g_{jj''}(t'', t') = \delta_{jj''} \delta(t - t') \quad (2.5.7)$$

となり、 $g_{jj''}(t, t')$ に作用する演算子が線形性を取り戻す。すなわち、 $g_{jj''}(t, t')$ は (2.5.7) を運動方程式とする自由粒子系の Green 関数となったと考えられる。また、 $\Sigma_{jj''}(t, t')$ もその定義上時刻の原点に依存すべきでないため、Fourier 変換

$$\tilde{\Sigma}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \Sigma(t) e^{i\omega t}$$

を定義できるが、(2.5.7) を両辺 t に関して素朴に Fourier 変換すると、

$$\left[\hbar\omega - H^{(1)} + \mu + \tilde{\Sigma}(\omega) \right] \tilde{G}(\omega) = I \quad \therefore \tilde{G}(\omega) = \left[\hbar\omega - H^{(1)} + \mu + \tilde{\Sigma}(\omega) \right]^{-1}$$

と表せることになるので、 $\tilde{\Sigma}(\omega)$ は相互作用による 1 粒子状態の準位変化を表していることがわかる。 Σ は自己エネルギーと呼ばれ、相互作用系を自己エネルギーをくりこんだ励起構造をもつ自由粒子系とみなすことを準粒子描像という。

2.5.2 相関関数のスペクトル表示

ここで、一般の Heisenberg 描像の演算子 $\hat{A}(t), \hat{B}(t)$ に対して前節の各 Green 関数の対応物

$$\begin{aligned} G_{AB}^R(t, t') &\equiv \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t - t') \\ G_{AB}^A(t, t') &\equiv -\frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t' - t) \\ G_{AB}^C(t, t') &\equiv \frac{1}{i\hbar} \left\langle T \left[\hat{A}(t) \hat{B}(t') \right] \right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\left\langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \right\rangle \Theta(t - t') + \zeta \left\langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \right\rangle \Theta(t' - t) \right] \end{aligned}$$

を考えてみる。この節での ζ は、 \hat{A}, \hat{B} が系の生成消滅演算子 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ の積として表されていると考えて、どちらか一方が偶数次の積なら系の統計性によらず $\zeta = 1$ を、ともに奇数次の積なら系の統計性に基づいた ζ をとることにする。2.3.2 項の応答関数や 2.5.1 項の 2 体 Green 関数もこのように定義される相関関数の一例である。

期待値をとる状態が系の固有状態や熱平衡状態であれば時刻の原点に不定性が存在するので、 $G_{AB}(t, t')$ は $t - t'$ にのみ依存する関数となるべきで、Fourier 変換

$$\tilde{G}_{AB}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt G_{AB}(t) e^{i\omega t}, \quad G_{AB}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{G}_{AB}(\omega) e^{-i\omega t}$$

が定義できる。 $\hat{\mathcal{H}}$ の固有状態を $\hat{\mathcal{H}}|n\rangle = E_n|n\rangle$ とおき、 \hat{A}, \hat{B} に対して

$$A_{nm} \equiv \langle n|\hat{A}|m\rangle, \quad B_{nm} \equiv \langle n|\hat{B}|m\rangle$$

で定義される行列要素を用いて $\tilde{G}_{AB}(\omega)$ を表すことを考える： $\tilde{G}_{AB}^R(\omega)$ について計算してみると、

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{AB}^R(\omega) &= \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi_V} \int_0^{\infty} dt \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n| [\hat{A}(t)\hat{B} - \zeta \hat{B}\hat{A}(t)] |n\rangle e^{-\delta t} e^{i\omega t} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi_V} \int_0^{\infty} dt \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left(e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} A_{nm} B_{mn} - \zeta e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} B_{nm} A_{mn} \right) e^{-\delta t} e^{i\omega t} \end{aligned}$$

となる。ここで、

$$J_{AB}(\omega) \equiv \frac{1}{\Xi_V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} A_{nm} B_{mn} e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} e^{i\omega t} \quad (2.5.8)$$

を定義する。この関数の (逆)Fourier 変換は、

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J_{AB}(\omega) e^{-i\omega t} = \frac{1}{\Xi_V} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} A_{nm} B_{mn} e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar}$$

で与えられるため、 $\tilde{G}_{AB}^R(\omega)$ をこの $J_{AB}(\omega)$ を用いて次のように表せるとわかる。

$$\tilde{G}_{AB}^R(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[J_{AB}(\omega') e^{-i\omega' t} - \zeta J_{BA}(\omega') e^{i\omega' t} \right] e^{-\delta t} e^{i\omega t}$$

さらに、 $J_{AB}(\omega)$ の定義式 (2.5.8) における積分を実行すると、

$$J_{AB}(\omega) = \frac{2\pi}{\Xi_V} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} A_{nm} B_{mn} \delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)$$

となるため、

$$\begin{aligned} J_{BA}(\omega) &= \frac{2\pi}{\Xi_V} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} B_{nm} A_{mn} \delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right) \\ &= \frac{2\pi}{\Xi_V} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} B_{mn} A_{nm} \delta\left(\omega - \frac{E_n - E_m}{\hbar}\right) \\ &= \frac{2\pi}{\Xi_V} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{-\beta(E_m - E_n)} A_{nm} B_{mn} \delta\left(-\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right) \\ &= e^{\beta\hbar\omega} J_{AB}(-\omega) \quad \left(\begin{array}{l} \because n, m \text{ の和は } \hbar\omega = E_n - E_m \\ \text{を満たすものに限定されている} \end{array} \right) \end{aligned}$$

が成り立つ。このことを先に導いた $\tilde{G}_{AB}^R(\omega)$ の表式に適用すると、

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{AB}^R(\omega) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[J_{AB}(\omega') e^{-i\omega' t} - \zeta J_{AB}(-\omega') e^{\beta\hbar\omega'} e^{i\omega' t} \right] e^{-\delta t} e^{i\omega t} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left(1 - \zeta e^{-\beta\hbar\omega'} \right) J_{AB}(\omega') e^{i(\omega - \omega' + i\delta)t} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(1 - \zeta e^{-\beta\hbar\omega'}) J_{AB}(\omega')}{\omega - \omega' + i\delta} \end{aligned} \quad (2.5.9)$$

という表式が導かれる。 $\tilde{G}_{AB}^A(\omega), \tilde{G}_{AB}^C(\omega)$ についても同様に $J_{AB}(\omega)$ を用いて表すことができ、次のようになる。

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{AB}^A(\omega) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(1 - \zeta e^{-\beta\hbar\omega'}) J_{AB}(\omega')}{\omega - \omega' - i\delta} \\ \tilde{G}_{AB}^C(\omega) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \left(\frac{J_{AB}(\omega')}{\omega - \omega' + i\delta} - \frac{\zeta e^{-\beta\hbar\omega'} J_{AB}(\omega')}{\omega - \omega' - i\delta} \right)\end{aligned}$$

これらの $J_{AB}(\omega)$ を用いた表式はスペクトル表示あるいは Lehmann 表示と呼ばれ、 $J_{AB}(\omega)$ はスペクトル関数と呼ばれる。

$\tilde{G}_{AB}(\omega)$ のスペクトル表示は主値公式 (3.1.3) が適用できる形をしており、

$$\begin{aligned}\text{Re}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) &= \text{Re}\tilde{G}_{AB}^C(\omega) = \text{Re}\tilde{G}_{AB}^A(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(1 - \zeta e^{-\beta\hbar\omega'}) J_{AB}(\omega')}{\omega - \omega'} \\ \text{Im}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) &= -\text{Im}\tilde{G}_{AB}^A(\omega) = -\frac{1}{2\hbar} (1 - \zeta e^{-\beta\hbar\omega}) J_{AB}(\omega) \\ \text{Im}\tilde{G}_{AB}^C(\omega) &= -\frac{1}{2\hbar} (1 + \zeta e^{-\beta\hbar\omega}) J_{AB}(\omega)\end{aligned}$$

というように各 \tilde{G}_{AB} の実部と虚部が求められる。注目すべきは、虚部について各 \tilde{G}_{AB} の間に

$$\text{Im}\tilde{G}_{AB}^C(\omega) = \begin{cases} \tanh \frac{\beta\hbar\omega}{2} \text{Im}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) & (\zeta = -1) \\ \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \text{Im}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) & (\zeta = 1) \end{cases} \quad (2.5.10)$$

という関係が成立していることである。特に $T = 0$ においてこの関係は

$$\text{Im}\tilde{G}_{AB}^C(\omega) = \begin{cases} \text{Im}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) & (\omega > 0) \\ -\text{Im}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) & (\omega < 0) \end{cases}$$

となるため、 $\tilde{G}_{AB}^C(\omega)$ は $\omega > 0$ では $\tilde{G}_{AB}^R(\omega)$ と、 $\omega < 0$ では $\tilde{G}_{AB}^A(\omega)$ と完全に一致する。よって $T = 0$ の系においては $\tilde{G}_{AB}^R, \tilde{G}_{AB}^A, \tilde{G}_{AB}^C$ のいずれか 1 つさえ求めれば他 2 つも求まる。また、 $\tilde{G}_{AB}(\omega)$ の実部については、

$$\text{Re}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) = \text{Re}\tilde{G}_{AB}^C(\omega) = \text{Re}\tilde{G}_{AB}^A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im}\tilde{G}_{BA}^R(\omega')}{\omega - \omega'} = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\text{Im}\tilde{G}_{BA}^A(\omega')}{\omega - \omega'}$$

も成り立っているので、実質的にはいずれか一つの $G_{AB}(\omega)$ の虚部さえ求まれば 3 種の相関関数全ての情報を得ることができる。

Green 関数のスペクトル表示

$\hat{A} = \hat{a}_j, \hat{B} = \hat{a}_{j'}^\dagger$ としたときの $\tilde{G}_{AB}(\omega)$ は Green 関数 $\tilde{g}_{jj'}(\omega)$ を与える。このときのスペクトル関数は、

$$\rho_{jj'}(\omega) = \frac{2\pi}{\Xi_V} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{a}_j | m \rangle \langle m | \hat{a}_{j'}^\dagger | n \rangle \delta\left(\omega - \frac{E_m - E_n}{\hbar}\right)$$

となり、特に自由粒子系であれば $|m\rangle \propto \hat{a}_j^\dagger |n\rangle$ のものに限られるから、 \hat{a}_j^\dagger が 1 粒子固有状態の生成演算子の場合は

$$\begin{aligned}\rho_{jj'}(\omega) &= \frac{2\pi}{\Xi_V} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{a}_j \hat{a}_{j'}^\dagger | n \rangle \delta_{jj'} \delta\left(\omega - \frac{\epsilon_j - \mu}{\hbar}\right) \\ &= \begin{cases} 2\pi[1 - f_{\beta, \mu}(\epsilon_j)] \delta\left(\omega - \frac{\epsilon_j - \mu}{\hbar}\right) & (\text{Fermi 粒子系, } \zeta = -1) \\ 2\pi[1 + b_{\beta, \mu}(\epsilon_j)] \delta\left(\omega - \frac{\epsilon_j - \mu}{\hbar}\right) & (\text{Bose 粒子系, } \zeta = 1) \end{cases} \\ &= \frac{2\pi\hbar}{1 - \zeta e^{-\beta\hbar\omega}} \delta(\hbar\omega - (\epsilon_j - \mu))\end{aligned}$$

と求まって、 $G_{AB}(\omega)$ の表式に代入すると確かに $g_{jj'}(\omega)$ が得られる。スペクトル表示での定式化では、 $T = 0$ での $\tilde{G}_{AB}^C(\omega) = \tilde{g}_{jj'}^C(\omega)$ について、

$$\tilde{g}_{jj'}^C(\omega) = \begin{cases} \tilde{g}_{jj'}^R(\omega) & (\omega > 0) \\ \tilde{g}_{jj'}^A(\omega) & (\omega < 0) \end{cases}$$

が成り立つことになるが、 $\rho_{jj'}(\omega)$ が $\hbar\omega = \epsilon_j - \mu$ でのみ値をピーク状にもち、追従して $\tilde{g}_{jj'}^C(\omega)$ もまた $\hbar\omega = \epsilon_j - \mu$ でのみ虚部にピーク状に値が立つため、この ω の正負による分岐はそのまま $T = 0$ で Bose 粒子系で $\tilde{g}_{jj'}^C(\omega) = \tilde{g}_{jj'}^R(\omega)$ となること、および Fermi 粒子系で ϵ_j と μ の大小により $\tilde{g}_{jj'}^C(\omega)$ が分岐したことに対応している。ここから、 $T = 0$ での $\tilde{G}^C(\omega)$ は次のように表せばよいとわかる。

$$\tilde{G}^C(\omega) = \left[\hbar\omega - H^{(1)} + \mu + i\delta \text{sgn}(\omega) \right]^{-1} \quad (2.5.11)$$

2.5.3 因果 Green 関数による摂動展開

本項では相互作用系に拡張された因果 Green 関数が、系の状態が $T = 0$ の熱平衡状態であるときには相互作用項による摂動展開が可能であることをみる。

経路積分表示の因果 Green 関数・相関関数

考える系の状態が固有状態 $|n\rangle$ (エネルギー固有値を E_n とする) の場合には、因果 Green 関数 $g_{jj'}^C(t, t')$ を経路積分の形式で与えることができる。実際 $g_{jj'}^C(t, t')$ はその定義から、

$$\begin{aligned}g_{jj'}^C(t, t) &\equiv \frac{1}{i\hbar} \langle n | T \left[\hat{a}_j(t) \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \right] | n \rangle \\ &= \begin{cases} \frac{1}{i\hbar} \langle n | \hat{U}(t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t') | n \rangle & (t > t') \\ \frac{\zeta}{i\hbar} \langle n | \hat{U}(t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t') \hat{U}(t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t) | n \rangle & (t < t') \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{i\hbar} \frac{\langle n | \hat{U}^\dagger(t_f - t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t - t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t' - t_i) | n \rangle}{\langle n | \hat{U}^\dagger(t_f - t_i) | n \rangle} & (t > t') \\ \frac{\zeta}{i\hbar} \frac{\langle n | \hat{U}(t_f - t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t' - t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t - t_i) | n \rangle}{\langle n | \hat{U}^\dagger(t_f - t_i) | n \rangle} & (t < t') \end{cases}\end{aligned}$$

というように時間発展演算子 $\hat{U}^\dagger(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ を挟んだ期待値になっている。ここで、 t_i, t_f は

$$t_i < \min(t, t'), \quad t_f > \max(t, t')$$

を満たす時刻であり、式変形中では

$$\hat{U}(t) = \hat{U}^\dagger(-t), \quad \hat{U}^\dagger(t_1)\hat{U}^\dagger(t_2) = \hat{U}^\dagger(t_1 + t_2)$$

および

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{U}(t) = e^{iE_n t/\hbar} \langle n |, \quad \hat{U}^\dagger(t') | n \rangle &= e^{-iE_n t'/\hbar} | n \rangle, \\ e^{iE_n(t_f - t_i)/\hbar} &= \left(e^{-iE_n(t_f - t_i)/\hbar} \right)^{-1} = \left(\langle n | \hat{U}^\dagger(t_f - t_i) | n \rangle \right)^{-1} \end{aligned}$$

を用いた。このため、時間発展を細分化して、

$$\hat{U}^\dagger(\Delta t) = e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \simeq \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) \Delta t \quad (\Delta t \ll 1)$$

の近似式を用いるとともに、分割した間にコヒーレント状態による完全性関係を挿入することで、

$$\begin{aligned} \langle \alpha_{k+1} | \hat{U}^\dagger(\Delta t) | \alpha_k \rangle &\simeq \langle \alpha_{k+1} | \alpha_k \rangle \left(1 - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\alpha_k, \bar{\alpha}_{k+1}) \Delta t \right) \\ &\simeq \exp \left[\left(-\bar{\alpha}_{k+1}^T \frac{\alpha_{k+1} - \alpha_k}{2\Delta t} + \frac{\bar{\alpha}_{k+1}^T - \bar{\alpha}_k^T}{2\Delta t} \alpha_k - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\alpha_k, \bar{\alpha}_{k+1}) \right) \Delta t \right] \end{aligned}$$

というように \hat{U}^\dagger を c 数 (演算子でない数) に変換できる。また、時間発展演算子の間の $\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger$ はそれぞれ $\alpha(t), \bar{\alpha}(t')$ のコヒーレント状態に作用して c 数を与える。ここで $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ は \hat{a}_i のコヒーレント固有値を第 i 成分に持つベクトルで、T は転置を表している。

$$\begin{aligned} \left(\hat{U}^\dagger(t_f - t_i) \text{ の c 数 } \right) &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{i\hbar}{2} (\bar{\alpha}^T \partial_t \alpha - \partial_t \bar{\alpha}^T \alpha) - \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha}) \right] \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [i\hbar \bar{\alpha}^T \partial_t \alpha - \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})] \right\} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (|\alpha(t_f)|^2 - |\alpha(t_i)|^2) \right] \\ &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [i\hbar \bar{\alpha}^T \partial_t \alpha - \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})] \right\} \\ &\left(\because \text{時刻 } t_i, t_f \text{ での } \alpha(t) \text{ はともに } |n\rangle \text{ での配位なので、} |\alpha(t_i)|^2 = |\alpha(t_f)|^2 \right) \end{aligned}$$

であるので、

$$S(t; t') \equiv \int_{t'}^t dt'' [i\hbar \bar{\alpha}^T(t'') \partial_{t''} \alpha(t'') - \mathcal{H}(\alpha(t''), \bar{\alpha}(t''))]$$

とにおいて g^C を経路積分で表すと、次のようになる。

$$\begin{aligned} g_{jj'}^C(t, t') &= \begin{cases} \frac{1}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha_j(t) \bar{\alpha}_{j'}(t') e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}} & (t > t') \\ \frac{\zeta}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha_{j'}(t') \alpha_j(t) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}} & (t < t') \end{cases} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha_j(t) \bar{\alpha}_{j'}(t') e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}} \end{aligned} \tag{2.5.12}$$

分母と分子の積分経路はともに $t = t_i, t_f$ で $|n\rangle$ がとるべき $\alpha(t)$ になっているような任意の経路である¹¹⁾。任意の t, t' で g^C が定義されるように、一般的には $t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow +\infty$ にとる。

2.5.2 項で導入した一般の物理量 \hat{A}, \hat{B} の相関関数 $G_{AB}(t, t')$ も、因果的なものは $G^C(t, t')$ と同様にして次のように経路積分で表せるとわかる。

$$G_{AB}^C(t, t') \equiv \frac{1}{i\hbar} \left\langle T \left[\hat{A}(t) \hat{B}(t') \right] \right\rangle = \frac{1}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) A(t) B(t') e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}} \quad (2.5.13)$$

ただし、 $A(t), B(t')$ はそれぞれ時刻 t, t' でのコヒーレント状態による \hat{A}, \hat{B} の期待値、すなわち各時刻の場の配位が与える A, B の値である。

生成汎関数による摂動展開公式

以下では次の汎関数微分の恒等式を多用する (式の詳細は C.6 節参照)¹²⁾。

$$\frac{\delta^n}{\delta\phi(x_1)\delta\phi(x_2)\cdots\delta\phi(x_n)} \exp \left[\int dx \phi(x) J(x) \right] = J(x_1) J(x_2) \cdots J(x_n) \exp \left[\int dx \phi(x) J(x) \right] \quad (2.5.14)$$

(2.5.12) のように経路積分で表示された因果 Green 関数 g^C は、

$$\Xi[\eta, \bar{\eta}] = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(\infty; -\infty) + \int_{-\infty}^{\infty} dt [\bar{\eta}^T(t) \alpha(t) + \bar{\alpha}^T(t) \eta(t)] \right\} \quad (2.5.15)$$

で与えられる汎関数により、

$$g_{jj'}^C(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi[\eta = \bar{\eta} = \mathbf{0}]} \zeta \frac{\delta^2 \Xi}{\delta \bar{\eta}_j(t) \delta \eta_{j'}(t')} \Big|_{\eta = \bar{\eta} = \mathbf{0}} \quad (2.5.16)$$

と表すことができる。 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ は生成汎関数と呼ばれ、因果 Green 関数の関数形について完全な情報をもっている。また、 $\Omega[\eta, \bar{\eta}] \equiv \ln(\Xi[\eta, \bar{\eta}]/\Xi[\eta = \bar{\eta} = \mathbf{0}])$ を定義すると、 G^C は次でも与えられる。

$$g_{jj'}^C(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \zeta \frac{\delta^2 \Omega}{\delta \bar{\eta}_j(t) \delta \eta_{j'}(t')} \Big|_{\eta = \bar{\eta} = \mathbf{0}} \quad (2.5.17)$$

摂動論を展開する上での前提として、ハミルトニアンを $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(\alpha, \bar{\alpha})$ と分けたときに \mathcal{H}_0 に対する生成汎関数 $\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]$ が必要である。相互作用のない系の因果 Green 関数は (2.5.11) で解析的な形を求めているので、これを G_0^C として等価な情報量をもつ $\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]$ を求めておく。まず相互作用のない系の作用汎関数に注目すると、 $\alpha(t), \bar{\alpha}(t)$ の Fourier 変換 $\alpha(\omega), \bar{\alpha}(\omega)$ を用いて次のように表し直せることがわかる¹³⁾。

$$\begin{aligned} S_0(\infty; -\infty) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[i\hbar \bar{\alpha}^T(t) \partial_t \alpha(t) - \bar{\alpha}^T(t) (H^{(1)} - \mu) \alpha(t) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{\alpha}^T(\omega) [\tilde{G}_0^C(\omega)]^{-1} \alpha(\omega) \end{aligned}$$

11) $|n\rangle$ は種々の配位をとりうるので、厳密には各配位を $t = t_i, t_f$ でとる任意の経路についての経路積分を配位の実現確率で重みづけして足し合わせる。

12) ϕ, J が Grassmann 数を値にとる場合には積の順序を考慮する必要がある。すなわち (2.5.14) はこの順序でのみ成立し、適用する際には必ずこの順に並び替える必要がある。(2.5.16) や (2.5.19) で乗じられている ζ はその並べ替えにより生じる因子の補正である。

13) $\tilde{G}_0^R(\omega), \tilde{G}_0^A(\omega)$ の関数形を見ると、ここで $\tilde{G}_0^C(\omega)$ を用いることは恣意的に見えるが、最後の (2.5.20) から (2.5.16) を得るためにはここで因果 Green 関数を選ぶ必要がある。

そこで、 $\eta(t), \bar{\eta}(t)$ の Fourier 変換 $\eta(\omega), \bar{\eta}(\omega)$ も定義して (2.5.15) を表し直すと、

$$\begin{aligned}\Xi_0[\eta, \bar{\eta}] &= \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[\bar{\alpha}^T(\omega) [\tilde{G}_0^C(\omega)]^{-1} \alpha(\omega) + \bar{\eta}^T(\omega) \alpha(\omega) + \bar{\alpha}^T(\omega) \eta(\omega) \right] \right\} \\ &= \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[\bar{\alpha}^T(\omega) - i\hbar \bar{\eta}^T(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \right] [\tilde{G}_0^C(\omega)]^{-1} [\alpha(\omega) - i\hbar \tilde{G}_0^C(\omega) \eta(\omega)] \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{\eta}^T(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \eta(\omega) \right\}\end{aligned}$$

というように $\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]$ を平方完成できることがわかる。汎関数積分の測度は一様な関数の足し引きでは不変なので、 $\alpha(\omega) - i\hbar \tilde{G}_0^C(\omega) \eta(\omega)$ を新しく $\alpha(\omega)$ と置き直すと、

$$\begin{aligned}\Xi_0[\eta, \bar{\eta}] &= \exp \left\{ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{\eta}^T(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \eta(\omega) \right\} \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{\alpha}^T(\omega) [\tilde{G}_0^C(\omega)]^{-1} \alpha(\omega) \right\} \\ &= \exp \left\{ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \bar{\eta}^T(t) G^C(t, t') \eta(t') \right\} \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(\infty; -\infty)/\hbar} \\ &= \Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0] \exp \left\{ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \bar{\eta}^T(t) G_0^C(t, t') \eta(t') \right\}\end{aligned}\tag{2.5.18}$$

と汎関数積分を実行した形に表し直すことができる。以降では $\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]$ がこの形で表されることを前提に摂動論を考える。

\mathcal{H} に対する生成汎関数 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ に対して、(2.5.14) を素朴に用いると、

$$\begin{aligned}\Xi[\eta, \bar{\eta}] &= \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\frac{i}{\hbar} (i\hbar \bar{\alpha}^T \partial_t \alpha - \mathcal{H}_0 - \mathcal{H}_1) + \bar{\eta}^T \alpha + \bar{\alpha}^T \eta \right] \right\} \\ &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{H}_1 \left(\frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(t)}, \zeta \frac{\delta}{\delta \eta(t)} \right) \right] \Xi_0[\eta, \bar{\eta}] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{H}_1 \left(\frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(t)}, \zeta \frac{\delta}{\delta \eta(t)} \right) \right]^n \Xi_0[\eta, \bar{\eta}]\end{aligned}\tag{2.5.19}$$

という関係が成り立つと期待される。この関係式に (2.5.18) を代入すれば、

$$\frac{\Xi[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{H}_1 \left(\frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(t)}, \zeta \frac{\delta}{\delta \eta(t)} \right) \right]^n \exp \left\{ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \bar{\eta}^T(t) G_0^C(t, t') \eta(t') \right\}\tag{2.5.20}$$

という形で $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ の摂動展開公式が得られるが、(2.5.19) の適用範囲には注意する必要がある：経路積分による Green 関数および生成汎関数の定義では、積分経路の $t = \pm\infty$ において設定する状態は系の固有状態および熱平衡状態に限られていた。よって $\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]$ と $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ の各積分経路において設定される $t = \pm\infty$ の状態は一般には一致しない。そこで、摂動展開を目的とするような今回の状況では \mathcal{H}_0 と $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ の基底状態がほとんど変わらないという仮定 (断熱仮定) をおき、かつ $T = 0$ での熱平衡状態に限って議論を進める必要がある。

Wick の定理

生成汎関数の摂動展開公式 (2.5.20) を用いる上で、

$$\frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} = \exp \left\{ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \bar{\eta}^T(t) G_0^C(t, t') \eta(t') \right\}$$

の $\eta, \bar{\eta}$ での多重汎関数微分に関する表題の定理が非常に重要になる：まず、それぞれでの 1 階汎関数微分を計算すると、次のようになる (以降 G_0^C の (j, j') 成分を $g_{jj'}^C$ と 0 を付さずに表記する)。

$$\begin{aligned}\zeta \frac{\delta}{\delta \eta_j(t)} \left(\frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \right) &= i\hbar \frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{j'} \bar{\eta}_{j'}(t') g_{jj'}^C(t', t) \\ \frac{\delta}{\delta \bar{\eta}_j(t)} \left(\frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \right) &= i\hbar \frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{j'} g_{jj'}^C(t, t') \eta_{j'}(t')\end{aligned}$$

ハミルトニアン関数形は必ず $\alpha_j, \bar{\alpha}_j$ の正規順序積に必ずなっているが、正規順序積の関数の積は必ず偶数回の置換で全体を正規順序積にすることができる。また逆に、全体で正規順序になった積を 2 つで正規順序をなす $\alpha_j, \bar{\alpha}_j$ の組の積に並べ直すことも可能である。よってここで考えるべきは正規順序での 2 階汎関数微分に対するふるまひのみになる。上の 1 階汎関数微分の結果から、

$$\begin{aligned}\frac{\delta^2}{\delta \bar{\eta}_j(t) \delta \eta_j(t)} \left(\frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \right) &= i\hbar \zeta \frac{\delta}{\delta \bar{\eta}_j(t)} \left[\frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{j'} \bar{\eta}_{j'}(t') g_{jj'}^C(t', t) \right] \\ &= \frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \left[i\hbar \zeta g_{jj}^C(t, t) + (i\hbar)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \sum_{j_1, j_2} \bar{\eta}_{j_1}(t_1) g_{j_1 j}^C(t_1, t) g_{jj_2}^C(t, t_2) \eta_{j_2}(t_2) \right]\end{aligned}$$

というように、1 度作用させるごとに増えていく項が求まるので、2 度目の作用の結果に $\eta = \bar{\eta} = 0$ を課すと、

$$\begin{aligned}\left(\frac{\zeta}{i\hbar} \right)^2 \frac{\delta^2}{\delta \bar{\eta}_{j_1}(t_1) \delta \eta_{j_1}(t_1)} \frac{\delta^2}{\delta \bar{\eta}_{j_2}(t_2) \delta \eta_{j_2}(t_2)} \left(\frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \right) \Big|_{\eta = \bar{\eta} = 0} \\ = g_{j_1 j_1}^C(t_1, t_1) g_{j_2 j_2}^C(t_2, t_2) + \zeta g_{j_1 j_2}^C(t_1, t_2) g_{j_2 j_1}^C(t_2, t_1)\end{aligned}$$

となることがわかる。この結果を一般化した次式が Wick の定理である。

$$\left(\frac{\zeta}{i\hbar} \right)^n \frac{\delta^2}{\delta \bar{\eta}_1 \delta \eta_1} \frac{\delta^2}{\delta \bar{\eta}_2 \delta \eta_2} \cdots \frac{\delta^2}{\delta \bar{\eta}_n \delta \eta_n} \left(\frac{\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_0[\eta = \bar{\eta} = 0]} \right) \Big|_{\eta = \bar{\eta} = 0} = \sum_P \zeta^P g_{1P(1)}^C g_{2P(2)}^C \cdots g_{nP(n)}^C \quad (2.5.21)$$

ただし $\eta_m \equiv \eta_{j_m}(t_m)$, $g_{mm'}^C \equiv g_{j_m j_{m'}}^C(t_m, t_{m'})$ と略記している。

Feynman 図による生成汎関数の摂動展開

Wick の定理をふまえて、摂動展開公式 (2.5.20) を用いて実際に $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ を計算する。ここで \mathcal{H}_1 としては次のような 2 体相互作用を考えることにする (共通する添字は縮約をとる)。

$$\begin{aligned}-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{H}_1(\alpha(t), \bar{\alpha}(t)) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{1}{4} \langle j_1, j_2 | \hat{V} | j_3, j_4 \rangle \bar{\alpha}_{j_1}(t) \bar{\alpha}_{j_2}(t) \alpha_{j_4}(t) \alpha_{j_3}(t) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' V_{j_1 j_2; j_3 j_4} \delta(t - t') \alpha_{j_3}(t) \bar{\alpha}_{j_1}(t) \alpha_{j_4}(t') \bar{\alpha}_{j_2}(t')\end{aligned} \quad (2.5.22)$$

$\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ の n 次の展開項

$$\frac{1}{n!} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{H}_1 \left(\frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(t)}, \zeta \frac{\delta}{\delta \eta(t)} \right) \right]^n \exp \left\{ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \bar{\eta}^T(t) G_0^C(t, t') \eta(t') \right\} \Big|_{\eta = \bar{\eta} = 0} \quad (2.5.23)$$

に Wick の定理 (2.5.21) を適用すると、 $V_{j_1 j_2; j_3 j_4} \equiv \frac{1}{4} \langle j_1, j_2 | \hat{V} | j_3, j_4 \rangle$ と G_0^C の縮約として表せることがわかる。このとき、

t -表示での Feynman 則

- (i) $\int dt_n$: 入る実線と出ていく実線がつながる足をそれぞれ 1 つずつもつ頂点
- (ii) $i\hbar G_0^C(t_n; t_{n'})$: $t_{n'}$ から t_n の向きに、対応する頂点の足をつなぐ実線
- (iii) 実線がつながってできたループが奇数個なら、 ζ が乗じられる。
- (iv) $-\frac{i}{\hbar} V \delta(t_n - t_{n'})$: $t_{n'}$ から t_n の向きに、対応した頂点を結ぶ波線

というように各因子を図形に対応させてダイアグラムでその積を表すことができる。この因子と図形の間の対応関係の規則は Feynman 則ともいい、Feynman 則に従って式を表すダイアグラムは Feynman 図と呼ばれる。

生成汎関数の摂動展開における Feynman 図の描き方

1. 摂動展開の次数 n を決める。
2. n 本の波線を描く。
3. 波線がもつ頂点 1 つあたりに入る実線と出ていく実線がそれぞれ 1 本ずつになるよう、全ての頂点を実線で結ぶ。1 本の実線で同じ頂点に出入りするループを描いても構わない。

の手順で描いた Feynman 図の内、回転や連続変形で一致するものを除く全てが摂動展開 (2.5.20) の各項と一対一に対応する。摂動展開項のダイアグラムの例を図 2.1 に示す。

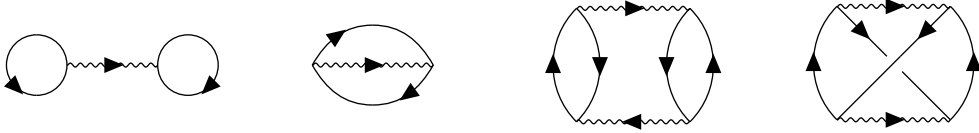


図 2.1 生成汎関数の摂動展開項を表す Feynman 図の例

$G_0^C(t, t')$, $\delta(t - t')$ はそれぞれ次のように Fourier 逆変換が可能である。

$$G_0^C(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{G}_0^C(\omega) e^{-i\omega(t-t')}, \quad \delta(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')}$$

摂動展開した各項にこれらの展開を代入して各頂点に対応した t_n の積分を先に実行すると、頂点につながる 2 本の実線と 1 本の波線に対応した

$$\tilde{G}^C(\omega_1) e^{-i\omega_1(t_n - t_m)}, \quad \tilde{G}^C(\omega_2) e^{-i\omega_2(t_l - t_n)}, \quad V e^{\pm i\omega(t_n - t_{n'})}$$

が積分に関わることになるので、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_n e^{-i(\omega_1 - \omega_2 \pm \omega)t_n} = 2\pi \delta(\omega_1 - \omega_2 \pm \omega)$$

というようにデルタ関数が生じる。摂動展開の各項はこのようなデルタ関数の制約に則って $\tilde{G}_0^C(\omega)$, $V_{j_1 j_2; j_3 j_4}$ の縮約を各周波数成分で積分したものとしても表すことができる。すなわち、先と同じ Feynman 図に対して、

ω-表示での Feynman 則

- (i) 頂点：つながる実線・波線の周波数に対するデルタ関数 $2\pi\delta(\omega_1 - \omega_2 \pm \omega)$ 。周波数の正負は入る向きを +、出ていく向きを - にとる
- (ii) 実線： $i\hbar \int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{G}_0^C(\omega)$
- (iii) 実線がつながってできたループが奇数個なら、 ζ が乗じられる。
- (iv) 波線： $-\frac{i}{\hbar} \int d\omega V$

という対応関係の規則を与えることで、摂動展開の ω-表示が得られる。

Feynman 図による因果 Green 関数の摂動展開

生成汎関数を用いた G^C の表式 (2.5.16) に生成汎関数の摂動展開公式 (2.5.20) を代入すると、 $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ で考えた摂動展開項 (2.5.23) に対して、

$$\frac{1}{n!} \frac{\zeta}{i\hbar} \frac{\delta^2}{\delta\bar{\eta}_j(t)\delta\eta_{j'}(t')} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{H}_1\left(\frac{\delta}{\delta\bar{\eta}(t)}, \zeta \frac{\delta}{\delta\eta(t)}\right) \right]^n \exp\left\{ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \bar{\eta}^T(t) G_0^C(t, t') \eta(t') \right\} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0}$$

が G^C の摂動展開項になることがわかるが、これに対しても Feynman 則を立てて全ての展開項を図形で表すことができる。生成汎関数のときと異なるのは、出ていくか入るかのどちらか 1 本の実線としかつながらない頂点が、元の $G^C(t, t')$ の引数および足に対応して 2 点現れることである。よって G^C の摂動展開項をダイアグラムで表すために、Feynman 則には次が加えられる：

t-表示での Feynman 則 (続き)

- (iv) G^C の足および t, t' ：実線が 1 本しかつながらない頂点。 t に対応する頂点は入る向き、 t' に対応する頂点は出ていく向きの実線とつながる。

また、 G^C の摂動展開に G_0^C の Fourier 逆変換を代入して内部の頂点に対応した t_n の積分を実行して ω-表示に移ろうとすると、外の頂点につながる実線に対応した \tilde{G}_0^C は Feynman 則 (i) のデルタ関数の制約により引数 ω が必ずそろふ。この ω が \tilde{G}^C の引数となるので、ω-表示での Feynman 則 (iv) は次のようになる：

ω-表示での Feynman 則 (続き)

- (iv) 外の頂点にのびる実線 (外線)：元の \tilde{G}^C の ω をもった $i\hbar\tilde{G}_0^C(\omega)$

外の頂点および外線の存在から、 G^C の摂動展開項を表すダイアグラムの描き方は生成汎関数の摂動展開項の場合から次のように変更する必要がある。

因果 Green 関数の摂動展開における Feynman 図の描き方

1. 摂動展開の次数 n を決める。
2. n 本の波線と 2 つの頂点を描く。
3. 波線がもつ頂点には入る実線と出ていく実線がそれぞれ 1 本ずつになるよう、外の 2 つの頂点には一方は入る実線が、他方には出ていく実線が 1 本のみつながるように、全ての頂点を実線で結ぶ。1 本の実線で同じ頂点に出入りするループを描いても構わない。

G^C の摂動展開項を表すダイアグラムの例を図 2.2 に示す。

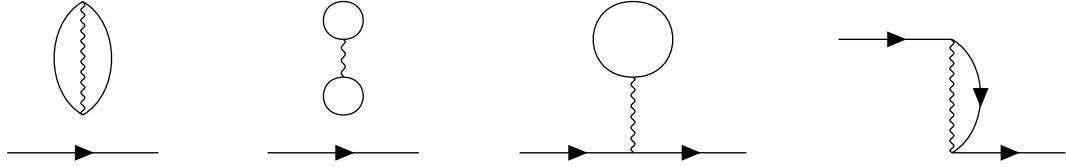


図 2.2 $G^C(\omega)$ の摂動展開項を表す Feynman 図の例

独立した図形を持たない Feynman 図は既約であるという。既約でない Feynman 図はその既約部分に対応する因子が式の上では独立に積分を実行できて、全体としては既約部分の単純な積として表される。生成汎関数の摂動展開においてもこのことは成り立っているが、因果 Green 関数の摂動展開においては特に、

$$\begin{aligned} \zeta \frac{\delta^2 \Xi}{\delta \bar{\eta}(t) \delta \eta(t')} &= \sum_{\text{可能な全ての Feynman 図}} \left[\left(\begin{array}{c} \text{外の頂点とつながった} \\ \text{既約部分} \end{array} \right) \times \left(\begin{array}{c} \text{外の頂点とつながらない} \\ \text{既約部分およびその積} \end{array} \right) \right] \\ &= \left[\sum \left(\begin{array}{c} \text{外の頂点とつながった} \\ \text{既約な Feynman 図} \end{array} \right) \right] \times \left[\sum \left(\begin{array}{c} \text{外の頂点とつながらない} \\ \text{既約な Feynman 図およびその積} \end{array} \right) \right] \end{aligned}$$

となることを意味する重要な性質である。すなわち、最右辺の第 2 因子は $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ に他ならず、(2.5.16) を見ると G^C は上式を $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ で約分して与えられることから、因果 Green 関数の摂動展開項を Feynman 図で書き下す場合には、

因果 Green 関数の摂動展開における Feynman 図の書き方 (続き)

3. 独立した部分のない、既約な図形となるもののみ描く。

だけでよいのである。図 2.2 の例では、後ろ 2 つのみを計算することになる。また、(2.5.17) からこのことは $\Omega[\eta, \bar{\eta}]$ の摂動展開には既約な Feynman 図で表される項しか現れないことを示している。これをふまえて $\Omega[\eta, \bar{\eta}]$ を既約な生成汎関数と呼ぶこともある。

さらに、高次摂動項の既約 Feynman 図のいくつかは低次摂動の既約 Feynman 図の組み合わせで表すことができるものがある (そのようなダイアグラムは非固有であるという)。よって、低次の既約かつ固有な Feynman 図の外線を外した部分をまとめることで、因果 Green 関数の摂動展開を表す Feynman 図の足し上げは図 2.3 のように表せる。特に ω -表示では Feynman 則の (i) より、ダイアグラムをつなぐことは式の上では単に積をとることではないので、固有な Feynman 図の外線以外の部分をまとめたもの (図 2.3 において斜線で塗りつぶした図形) に対応する因子を $\hat{\Sigma}(\omega)$ とおくと、

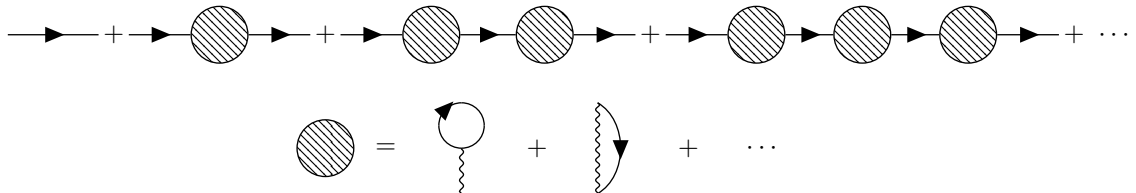


図 2.3 g^C の摂動展開を、固有ダイアグラムをまとめた形で表した Feynman 図

$$\begin{aligned}
\tilde{G}^C(\omega) &= \tilde{G}_0^C(\omega) + \tilde{G}_0^C(\omega)\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega) \\
&\quad + \tilde{G}_0^C(\omega)\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega)\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega) \\
&\quad + \tilde{G}_0^C(\omega)\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega)\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega)\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega) + \cdots \\
&= \tilde{G}_0^C(\omega) \sum_{n=0}^{\infty} [\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega)]^n \\
&= \tilde{G}_0^C(\omega) + \tilde{G}_0^C(\omega)\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega) \sum_{n=0}^{\infty} [\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}_0^C(\omega)]^n \\
&= \tilde{G}_0^C(\omega) + \tilde{G}_0^C(\omega)\tilde{\Sigma}(\omega)\tilde{G}^C(\omega)
\end{aligned} \tag{2.5.24}$$

というように式でも表せる。(2.5.24) は Dyson 方程式と呼ばれ、その解は

$$\tilde{G}^C(\omega) = [I - \tilde{G}_0^C\tilde{\Sigma}(\omega)]^{-1} \tilde{G}_0^C(\omega) = \left\{ [\tilde{G}_0^C(\omega)]^{-1} - \tilde{\Sigma}(\omega) \right\}^{-1}$$

で与えることができる¹⁴⁾。 \mathcal{H}_0 が自由粒子系のハミルトニアン

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{j,j'} \left(\langle j | \hat{H}^{(1)} | j' \rangle - \mu \delta_{jj'} \right) \bar{\alpha}_j \alpha_{j'} = \bar{\alpha}^T (H^{(1)} - \mu) \alpha$$

であるなら \tilde{G}_0^C は

$$\tilde{G}_0^C(\omega) = \left[\hbar\omega - H^{(1)} + \mu + i\delta \text{sgn}(\omega) \right]^{-1}$$

で与えられたので、

$$\tilde{G}^C(\omega) = \left[\hbar\omega - H^{(1)} + \mu - \tilde{\Sigma}(\omega) + i\delta \text{sgn}(\omega) \right]^{-1}$$

と表せて、 $\tilde{\Sigma}(\omega)$ は自己エネルギーに他ならないことがわかる。

Feynman 図による相関関数の摂動展開

1 体演算子で表される物理量 \hat{A}, \hat{B} に対する相関関数 $G_{AB}^C(t, t')$ は、 \hat{A}, \hat{B} が

$$\hat{A} = \sum_{j_1, j_2} A_{j_1 j_2} \hat{a}_{j_2}^\dagger \hat{a}_{j_1}, \quad \hat{B} = \sum_{j_1, j_2} B_{j_1 j_2} \hat{a}_{j_2}^\dagger \hat{a}_{j_1}$$

という形式をとることから、径路積分表示 (2.5.13) から生成汎関数 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ を用いて

$$G_{AB}^C(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]} \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} A_{j_2 j_1} B_{j_4 j_3} \frac{\delta^4 \Xi}{\delta \bar{\eta}_{j_1}(t) \delta \eta_{j_2}(t) \delta \bar{\eta}_{j_3}(t') \delta \eta_{j_4}(t')} \bigg|_{\eta = \bar{\eta} = 0}$$

と表せるとわかる。これを Feynman 図を用いた摂動展開で求める場合は、汎関数微分を行う $\eta, \bar{\eta}$ の数だけそれぞれ出ていくだけ・入るだけの頂点を加えてダイアグラムを描けばよい。各ダイアグラムは変分をとった $\eta, \bar{\eta}$ の足および時刻を引数にもつが、それらの足の縮約と時刻の一致はほとんどの場合同じ頂点で対応付けられるため、頂点をまとめて1つにすることが多い。 ω -表示に移った場合にはこれらの頂点に対しても $\tilde{G}_{AB}^C(\omega)$ が持つ周波数 ω の出入りもふまえた周波数の保存則を課す必要がある。相関関数の摂動展開項のダイアグラムの例を図 2.4 に示す¹⁵⁾。

14) 行列 A, B について、 $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ であることに注意する。

15) 図 2.4 の左から 3 番目のダイアグラムは、 $\text{Tr}[G^C(t, t)A]\text{Tr}[G^C(t', t')B] = \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$ での V の 1 次の寄与に等しい。

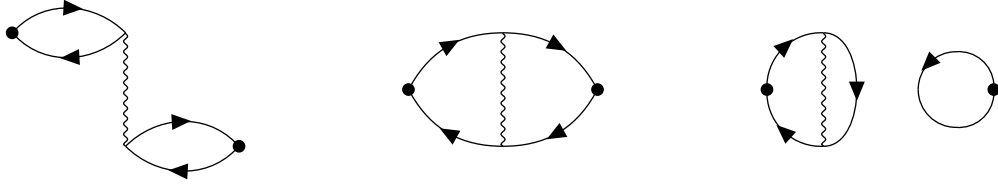


図 2.4 G_{AB}^C の摂動展開項を表す Feynman 図の例

Hartree-Fock 近似・乱雑位相近似

以上の摂動展開の方法で注意しなければならないのは、 \tilde{G}_0^C の極付近の ω では V の高次摂動が無視できないどころか高次であればあるほど寄与が強くなっていくことである。このため、摂動計算の際には基本的に V の無限次までの寄与を取り入れるようにしなければ有意な結果を得られない¹⁶⁾。しかし、全ての摂動項を無限次まで足し上げる計算を系統的に行うことは難しく、特定のタイプの摂動項のみを無限次まで拾い上げる近似計算で済ますのが現実的である。

Feynman 図を描くという観点では、低次の摂動展開項を表す簡単なダイアグラムを描くだけで無限次までの寄与を取り込めるようにしたい。Green 関数の摂動展開に対しては、自己エネルギー $\tilde{\Sigma}(\omega)$ の展開を低次で打ち切る代わりに Dyson 方程式 (2.5.24) を自己無撞着的に解くと望みの計算を行うことができる。特に $\tilde{\Sigma}(\omega)$ の展開を 1 次で打ち切った自己無撞着計算のことを Hartree-Fock 近似という¹⁷⁾。

一方、一般の相関関数の摂動展開については、図 2.5 のダイアグラムで表されるように \tilde{G}_0^C の効果を無限次まで足し上げた有効相互作用因子 $\tilde{V}(\omega)$ (図 2.5 の二重波線で表したもの) で相互作用因子 V を置き換える乱雑位相近似のほうが適用しやすい¹⁸⁾。

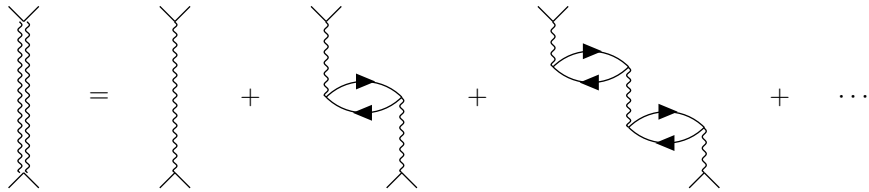


図 2.5 乱雑位相近似による有効相互作用因子 $\tilde{V}(\omega)$ のダイアグラム

有効相互作用因子 $\tilde{V}(\omega)$ が Dyson 方程式を満たすことは明らかである。図 2.5 の同じ頂点から出入りする実線の対 (バブル) に対応する 4 階テンソル因子

$$\Pi(\omega) = (i\hbar)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \tilde{G}_0^C(\omega') \otimes \tilde{G}_0^C(\omega' + \omega)$$

を用いると、Dyson 方程式は

$$\tilde{V}(\omega) = V + V\Pi(\omega)\tilde{V}(\omega)$$

で与えられる。この式を変形すると、

$$(1 - V\Pi(\omega))\tilde{V}(\omega) = V$$

16) 取り込んだ結果発散したとしても、後述するようにそれは高エネルギースケールの集団励起が存在していることを意味するという点で有意である。

17) 図 2.3 で示した Σ の展開の内、第 1 項を Hartree 項、第 2 項を Fock 項と呼ぶことが由来である。しかし Hartree 項は発散することが多く、足し上げない場合も多い。

18) Feynman 則 (i) による頂点での周波数保存を考えると、乱雑位相近似が取り込む \tilde{G}_0^C は全て周波数全域にわたって積分がとられることになるので、 \tilde{G}_0^C の極の寄与を十分に取り込んで いると考えられる。

となり、例えば $V\Pi(\omega)$ が恒等テンソルであれば $\tilde{V}(\omega)$ の全成分が発散することがわかる。このような $\tilde{V}(\omega)$ の発散は $\Pi(\omega)$ に $\tilde{G}_0^C(\omega)$ の極の寄与が効きにくくなる高周波域で実際にいくつかの成分で起きることがあり、高エネルギー準位の集団励起モードが生じていることを示している。1 粒子固有状態を基底にとって $\Pi(\omega)$ を計算すると、次のようになる。

$$\begin{aligned}\Pi_{k_1 k_2; k_3 k_4}(\omega) &= (i\hbar)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\delta_{k_1 k_3}}{\hbar\omega' - \epsilon_{k_1} + \mu + i\delta \text{sgn}(\omega')} \frac{\delta_{k_2 k_4}}{\hbar(\omega' + \omega) - \epsilon_{k_2} + \mu + i\delta \text{sgn}(\omega' + \omega)} \\ &= -\frac{i\hbar[1 - \Theta(\epsilon_{k_1} - \mu)]\delta_{k_1 k_3}\delta_{k_2 k_4}}{\hbar\omega - (\epsilon_{k_2} - \epsilon_{k_1}) + i\delta \text{sgn}(\epsilon_{k_2} - \mu)} + \frac{i\hbar[1 - \Theta(\epsilon_{k_2} - \mu)]\delta_{k_1 k_3}\delta_{k_2 k_4}}{\hbar\omega - (\epsilon_{k_2} - \epsilon_{k_1}) - i\delta \text{sgn}(\epsilon_{k_1} - \mu)}\end{aligned}$$

有効作用と頂点関数

既約な生成汎関数 $\Omega[\eta, \bar{\eta}]$ と与えられた $\alpha(t), \bar{\alpha}(t)$ に対して、

$$\alpha_j(t) = \frac{\delta\Omega}{\delta\bar{\eta}_j(t)}, \quad \bar{\alpha}_j(t) = \frac{\delta\Omega}{\delta\eta_j(t)}$$

を課すことを考える。上の条件式の右辺はなおそれぞれ $\eta, \bar{\eta}$ の汎関数であるから、この関係式を解くことで外場 $\eta(t), \bar{\eta}(t)$ が $\alpha(t), \bar{\alpha}(t)$ の汎関数として表されるようになる。この条件の下で次の汎関数を考える。

$$\Gamma[\alpha, \bar{\alpha}] \equiv \Omega[\eta, \bar{\eta}] - \int_{-\infty}^{\infty} dt [\bar{\eta}^T(t)\alpha(t) + \bar{\alpha}^T(t)\eta(t)]$$

$\Omega[\eta, \bar{\eta}]$ とこの $\Gamma[\alpha, \bar{\alpha}]$ の関係は凸関数とその Legendre 変換の間のそれに似ている。実際、

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta\alpha(t)} = -\bar{\eta}_j(t), \quad \frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{\alpha}_j(t)} = \eta_j(t) \quad (2.5.25)$$

というように「逆変換」が汎関数微分で与えられている。このような生成汎関数の「Legendre 変換」を有効作用と呼ぶ。

$\alpha(t), \bar{\alpha}(t)$ の汎関数として表された $\eta(t), \bar{\eta}(t)$ に対しては、汎関数微分の連鎖律

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_j \frac{\delta\alpha_{j_1}(t_1)}{\delta\eta_j(t)} \frac{\delta\eta_j(t)}{\delta\alpha_{j_2}(t_2)} = \delta_{j_1 j_2} \delta(t_1 - t_2), \quad \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_j \frac{\delta\bar{\alpha}_{j_1}(t_1)}{\delta\bar{\eta}_j(t)} \frac{\delta\bar{\eta}_j(t)}{\delta\bar{\alpha}_{j_2}(t_2)} = \delta_{j_1 j_2} \delta(t_1 - t_2) \quad (2.5.26)$$

が成り立つ¹⁹⁾。そこで $\eta = \bar{\eta} = 0$ となるように $\alpha, \bar{\alpha}$ の配位を固定すると、

$$\begin{aligned}\left. \frac{\delta\alpha_j(t)}{\delta\eta_{j'}(t')} \right|_{\eta=\bar{\eta}=0} &= \left. \frac{\delta^2\Omega}{\delta\eta_{j'}(t')\delta\eta_j(t)} \right|_{\eta=\bar{\eta}=0} = i\hbar g_{jj'}^C(t, t') \\ \left. \frac{\delta\bar{\alpha}_j(t)}{\delta\bar{\eta}_{j'}(t')} \right|_{\eta=\bar{\eta}=0} &= \left. \frac{\delta^2\Omega}{\delta\bar{\eta}_j(t)\delta\bar{\eta}_{j'}(t')} \right|_{\eta=\bar{\eta}=0} = \frac{i\hbar}{\zeta} g_{jj'}^C(t, t')\end{aligned}$$

となるため、

$$\left. \frac{\delta\eta_j(t)}{\delta\alpha_{j'}(t')} \right|_{\eta=\bar{\eta}=0} = \frac{1}{i\hbar} [G^C(t, t')]_{jj'}^{-1} = \zeta \frac{\delta\bar{\eta}_{j'}(t')}{\delta\bar{\alpha}_j(t)} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0}$$

19) (2.5.26) が成り立たなければ $\alpha, \bar{\alpha}$ と $\eta, \bar{\eta}$ は移り合えないため、上の汎関数の「Legendre 変換」の議論も含めて (2.5.26) が要請になっていると考えるべきである。例えば 1 組の $\alpha, \bar{\alpha}$ に対して複数の $\eta, \bar{\eta}$ の組が与えられる場合や、逆に可能な $\eta, \bar{\eta}$ の組が存在しない場合がこの要請を満たさない場合として挙げられる。(2.5.26) が満たされない場合は、満たされるように配位を与える関数空間を制限する必要がある。

が成り立つことになる²⁰⁾。(2.5.25) からこのことは、

$$\zeta \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \bar{\alpha}_j(t) \delta \alpha_{j'}(t')} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0} = \frac{1}{i\hbar} [G^C(t, t')]_{jj'}^{-1} = - \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j'}(t') \delta \bar{\alpha}_j(t)} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0}$$

として表すことができる。Green 関数の逆元は系のハミルトニアンと相互作用をくりこんだ自己エネルギーの和として表されていたことを 2.6.1 項で見たが、 $\Gamma[\alpha, \bar{\alpha}]$ を有効作用と呼ぶのはこの意味である。

$\eta = \bar{\eta} = 0$ における (2.5.26) は、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_j i\hbar g_{j1j}^C(t_1, t) \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} = \delta_{j1j2} \delta(t_1 - t_2)$$

という関係式を導いていたわけだが、(2.5.26) をさらに両辺 $\bar{\alpha}_{j3}(t_3)$ で汎関数微分したものが $\eta = \bar{\eta} = 0$ で導く関係式を考える。右辺は 0 になるが、左辺からは $\delta^2 \Gamma / \delta \alpha \delta \bar{\alpha}$ と $\delta \alpha / \delta \eta$ それぞれに対する汎関数微分の項が生じるため、後者を右辺に移項して汎関数微分の結果を書き下すと、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_j \frac{\delta \alpha_{j1}(t_1)}{\delta \eta_j(t)} \frac{\delta^3 \Gamma}{\delta \bar{\alpha}_{j3}(t_3) \delta \alpha_{j2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \\ = - \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_j \frac{\delta}{\delta \bar{\alpha}_{j3}(t_3)} \left(\frac{\delta \alpha_{j1}(t_1)}{\delta \eta_j(t)} \right) \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \\ = - \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_j \left(\int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{j'} \frac{\delta \bar{\eta}_{j'}(t')}{\delta \bar{\alpha}_{j3}(t_3)} \frac{\delta^2 \alpha_{j1}(t_1)}{\delta \bar{\eta}_{j'}(t') \delta \eta_j(t)} \right) \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \\ = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{j, j'} \frac{\delta^3 \Omega}{\delta \bar{\eta}_{j'}(t') \delta \eta_j(t) \delta \bar{\eta}_{j1}(t_1)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \bar{\alpha}_{j3}(t_3) \delta \alpha_{j'}(t')} \end{aligned}$$

となるため、 $\eta = \bar{\eta} = 0$ では、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_j i\hbar g_{j1j}^C(t_1, t) \left[\frac{\delta^3 \Gamma}{\delta \bar{\alpha}_{j3}(t_3) \delta \alpha_{j2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \right]_{\eta=\bar{\eta}=0} \\ = - \frac{1}{\zeta} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{j, j'} \left[\frac{\delta^3 \Omega}{\delta \bar{\eta}_{j'}(t') \delta \eta_j(t) \delta \bar{\eta}_{j1}(t_1)} \right]_{\eta=\bar{\eta}=0} [G^C(t_2, t)]_{j2j}^{-1} [G^C(t', t_3)]_{j'j3}^{-1} \end{aligned}$$

すなわち、

$$\begin{aligned} \left[\frac{\delta^3 \Omega}{\delta \bar{\eta}_{j'}(t'') \delta \eta_j(t') \delta \bar{\eta}_j(t)} \right]_{\eta=\bar{\eta}=0} &= (i\hbar)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \sum_{j_1, j_2, j_3} g_{j'j_3}^C(t'', t_3) g_{j_2j'}^C(t_2, t') g_{jj_1}^C(t, t_1) \\ &\quad \times \left[- \zeta \frac{\delta^3 \Gamma}{\delta \bar{\alpha}_{j3}(t_3) \delta \alpha_{j2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_{j1}(t_1)} \right]_{\eta=\bar{\eta}=0} \end{aligned}$$

が成り立つことがわかる。今、Feynman 則に従って右辺をダイアグラムで描き表すと、図 2.6 のようになる ($\delta^3 \Gamma / \delta \bar{\alpha} \delta \alpha \delta \bar{\alpha}$ の因子を $\Gamma^{(3)}$ と略記している)。相互作用系を考えていた場合、 G^C とともに $\delta^3 \Omega / \delta \bar{\eta} \delta \eta \delta \bar{\eta}$ も相互作用についての摂動展開を行えるが、 $\delta^3 \Gamma / \delta \bar{\alpha} \delta \alpha \delta \bar{\alpha}$ はその中でこれ以上非固有な Green 関数を取り外すことができない部分を表している。これは系における実質的な相互作用の強さを与えており、3 本の足をもつこのような固有部分を 3 点頂点関数という。

20) 1 粒子状態の基底をとりかえて G^C を対角化し、逆 Fourier 変換を代入して周波数表示にすると確かに (2.5.26) を満たすことがわかる。

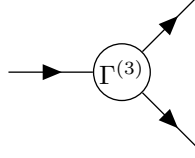


図 2.6 3 点頂点関数のダイアグラム

同様に今度は (2.5.26) を両辺 $\bar{\alpha}_{j_3}(t_3), \alpha_{j_4}(t_4)$ で汎関数微分したものが $\eta = \bar{\eta} = 0$ で導く関係式を考える。汎関数微分の結果を書き下すと次のようになる。

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_j \frac{\delta \alpha_{j_1}(t_1)}{\delta \eta_j(t)} \frac{\delta^3 \Gamma}{\delta \alpha_{j_4}(t_4) \delta \bar{\alpha}_{j_3}(t_3) \delta \alpha_{j_2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \sum_{j,j',j''} \frac{\delta^4 \Omega}{\delta \eta_{j''}(t'') \delta \bar{\eta}_{j'}(t') \delta \eta_j(t) \delta \bar{\eta}_{j_1}(t_1)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j_2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \bar{\alpha}_{j_3}(t_3) \delta \alpha_{j'}(t')} \\
&\quad \times \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j_4}(t_4) \delta \bar{\alpha}_{j''}(t'')} \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{j,j'} \frac{\delta^3 \Omega}{\delta \bar{\eta}_{j'}(t') \delta \eta_j(t) \delta \bar{\eta}_{j_1}(t_1)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j_4}(t_4) \delta \alpha_{j_2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \bar{\alpha}_{j_3}(t_3) \delta \alpha_{j'}(t')} \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \sum_{j,j'} \frac{\delta^3 \Omega}{\delta \bar{\eta}_{j'}(t') \delta \eta_j(t) \delta \bar{\eta}_{j_1}(t_1)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j_2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_j(t)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j_4}(t_4) \delta \bar{\alpha}_{j_3}(t_3) \delta \alpha_{j'}(t')}
\end{aligned}$$

よって、 $\eta = \bar{\eta} = 0$ で導かれる関係式として次が得られる。

$$\begin{aligned}
& (i\hbar)^4 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_4 \sum_{j_1,j_2,j_3,j_4} g_{j''''j_4}^C(t''', t_4) g_{j_3j''}^C(t_3, t'') g_{j'j_2}^C(t', t_2) g_{jj_1}^C(t, t_1) \\
&\quad \times \zeta \frac{\delta^3 \Gamma}{\delta \alpha_{j_4}(t_4) \delta \bar{\alpha}_{j_3}(t_3) \delta \alpha_{j_2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_{j_1}(t_1)} \\
&= (i\hbar)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \sum_{j_1,j_2,j_3} \left[\frac{\delta^3 \Omega}{\delta \bar{\eta}_{j''}(t'') \delta \eta_{j_1}(t_1) \delta \bar{\eta}_j(t)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j_3}(t_3) \delta \alpha_{j_2}(t_2) \delta \bar{\alpha}_{j_1}(t_1)} \right]_{\eta=\bar{\eta}=0} \\
&\quad \times g_{j'j_2}^C(t', t_2) g_{j''''j_3}^C(t''', t_3) \\
&- (i\hbar)^2 \zeta \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \sum_{j_1,j_2,j_3} \left[\frac{\delta^3 \Omega}{\delta \bar{\eta}_{j_1}(t_1) \delta \eta_{j'}(t') \delta \bar{\eta}_j(t)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \alpha_{j_3}(t_3) \delta \bar{\alpha}_{j_2}(t_2) \delta \alpha_{j_1}(t_1)} \right]_{\eta=\bar{\eta}=0} \\
&\quad \times g_{j_2j''}^C(t_2, t'') g_{j''''j_3}^C(t''', t_3) \\
&\quad + \frac{\delta^4 \Omega}{\delta \eta_{j''''}(t''') \delta \bar{\eta}_{j''}(t'') \delta \eta_{j'}(t') \delta \bar{\eta}_j(t)} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0}
\end{aligned}$$

Ω の 3 階汎関数微分は先に見たように Green 関数と 3 点頂点関数の組み合わせで表せたので、上式から Ω の 4 階汎関数微分は Feynman 図に Γ が寄与する因子を組み合わせで図 2.7 のようにあらわすことができる (Γ の 4 階汎関数微分の因子の因子を $\Gamma^{(4)}$ と略記している)。このように Γ の 4 階汎関数微分は、 Ω の 4 階汎関数微分の中でこれ以上非固有な Green 関数と 3 点頂点関数を取り外すことができない部分を表す有効的な相互作用因子であり、4 点頂点関数という。

4 点頂点関数是有効的な相互作用因子の厳密な形式である。一方、乱雑位相近似は有効的な相互作用因子を Dyson 方程式を満たす無限級数で近似的に与える手法であった。4 点頂点関数のダイアグラムを用いて乱雑位相近似が満たす Dyson 方程式を表すと、図 2.8 のようになる。

このような有効的な相互作用因子を無限級数の形で与える近似手法としては、図 2.9 のような

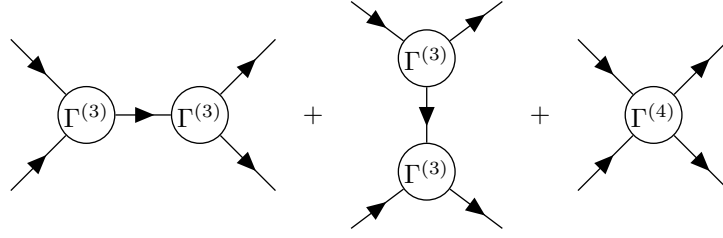


図 2.7 Ω の 4 階汎関数微分にあたる Feynman 図

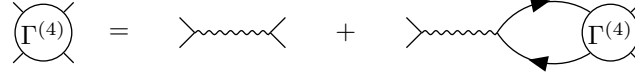


図 2.8 4 点頂点関数に対する乱雑位相近似

Dyson 方程式を課すはしご近似も知られている (裸の相互作用因子の間の足の繋ぎ方で 2 通りの近似があることに注意)。

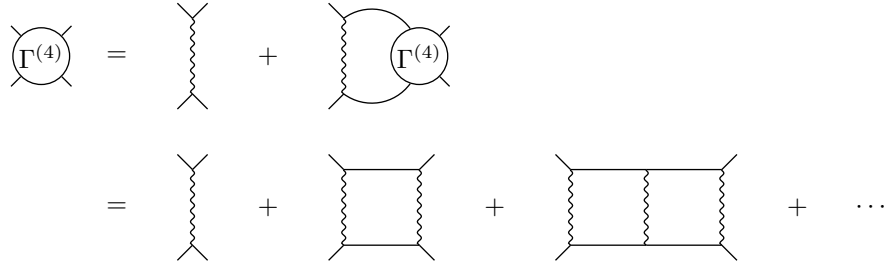


図 2.9 4 点頂点関数に対するはしご近似

Ward-高橋の恒等式

2.5.4 温度 Green 関数：虚時間形式

ここからは次で定義される虚時間 Green 関数 $\mathcal{G}^\beta(u, u')$ について考える²¹⁾。

$$\mathcal{G}_{jj'}^\beta(u, u') \equiv - \left\langle \mathcal{T} \left[\hat{a}_j(-i\hbar u) \hat{a}_{j'}^\dagger(-i\hbar u') \right] \right\rangle_{\text{eq}} = - \frac{1}{\Xi_V} \text{Tr}_V \left\{ \mathcal{T} \left[\hat{a}_j(-i\hbar u) \hat{a}_{j'}^\dagger(-i\hbar u') \right] e^{-\beta \hat{H}} \right\}$$

ここで、時間順序積は

$$\mathcal{T}[\hat{a}(-i\hbar u) \hat{a}^\dagger(-i\hbar u')] = \begin{cases} \hat{a}(-i\hbar u) \hat{a}^\dagger(-i\hbar u') & (u > u') \\ \zeta \hat{a}^\dagger(-i\hbar u') \hat{a}(-i\hbar u) & (u < u') \end{cases}$$

で定義されている。熱平均は同じ \hat{H} に対する熱平衡状態 $(T, \mu; V)$ に対してとっている。

虚時間 Green 関数を導入する動機として、生成汎関数 $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ と分配関数 $\Xi_V(\beta, \mu)$ の経路積分表示での類似性に注目する：

$$\begin{cases} \Xi[\eta = \bar{\eta} = 0] = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt [i\hbar \bar{\alpha}^T \partial_t \alpha - \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})] \right\} \\ \Xi_V(\beta, \mu) = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du [\bar{\alpha}^T \partial_u \alpha + \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})] \right\} \end{cases}$$

21) $\hat{a}_j^\dagger(-i\hbar u) \neq [\hat{a}_j(-i\hbar u)]^\dagger$ であることに注意する。

後者について $t' = -i\hbar u$ と変数変換を行うと、

$$\Xi_V(\beta, \mu) = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{-i\hbar\beta} dt' [i\hbar \bar{\alpha}^T \partial_{t'} \alpha - \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})] \right\}$$

と表せるので、生成汎関数 $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ が実軸に沿って時間積分した作用

$$S(\infty; -\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} dt [i\hbar \bar{\alpha}^T \partial_t \alpha - \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})]$$

を肩にもつ指数関数を足し上げているのに対し、分配関数 Ξ_V は虚軸に沿った時間積分により与えられる、

$$S(\beta) = \int_0^{-i\hbar\beta} dt [i\hbar \bar{\alpha}^T \partial_t \alpha - \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})] = i\hbar \int_0^{\beta} du [\bar{\alpha}^T \partial_u \alpha + \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})]$$

を肩にもつ指数関数を足し上げていることがわかる。このため一般の生成汎関数 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ に対応して

$$\Xi^\beta[\eta, \bar{\eta}] \equiv \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ - \int_0^{\beta} du [\bar{\alpha}^T \partial_u \alpha + \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha}) + \bar{\eta} \alpha + \alpha \eta] \right\}$$

を導入できて、

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{jj'}^\beta(u, u') &\equiv -\frac{1}{\Xi_V} \zeta \frac{\delta^2 \Xi^\beta}{\delta \bar{\eta}_j(u) \delta \eta_{j'}(u')} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0} \\ &= -\frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha_j(u) \bar{\alpha}_{j'}(u') e^{iS(\beta)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(\beta)/\hbar}} \end{aligned}$$

という因果 Green 関数に似た関数を、 $0 < u, u' < \beta$ の範囲で導入できるが、これは先に導入した虚時間 Green 関数に他ならない。この意味で \mathcal{G}^β を温度 Green 関数とも呼ぶ。以降では前項までの $G(t, t')$ を扱う方法を実時間形式、 $\mathcal{G}^\beta(u, u')$ を扱う方法を虚時間形式と呼び分けることにする。

松原周波数

Ξ_V の経路積分表示において、その積分経路は $\alpha(0, \mathbf{x}) = \zeta \alpha(\beta, \mathbf{x})$, $\bar{\alpha}(0, \mathbf{x}) = \zeta \bar{\alpha}(\beta, \mathbf{x})$ を満たしていたので、

$$\mathcal{G}^\beta(u, \beta) = \zeta \mathcal{G}^\beta(u, 0)$$

が成り立つ。一方、定義から \mathcal{G}^β は実際には $u - u'$ にのみ依存する関数 $\mathcal{G}^\beta(u - u') (-\beta < u - u' < \beta)$ になっているので、この条件は

$$\mathcal{G}^\beta(u - \beta) = \zeta \mathcal{G}^\beta(u)$$

となる。このため周期境界条件

$$\mathcal{G}^\beta(-\beta) = \zeta \mathcal{G}^\beta(0) = \mathcal{G}^\beta(\beta)$$

から導かれる Fourier 級数展開

$$\tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} du \mathcal{G}^\beta(u) e^{i\omega_n u}, \quad \mathcal{G}^\beta(u) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\omega_n) e^{-i\omega_n u} \quad \left(\omega_n = \frac{n\pi}{\beta} \right)$$

は²²⁾、 $\mathcal{G}^\beta(u)$ は ζ の符号、すなわち Fermi 粒子系か Bose 粒子系かによって、

$$\tilde{\omega}_l = \begin{cases} \omega_{2l+1} = \frac{(2l+1)\pi}{\beta} & (\text{Fermi 粒子系}) \\ \omega_{2l} = \frac{2l\pi}{\beta} & (\text{Bose 粒子系}) \end{cases}$$

の周波数のみでしか $\tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\omega_n)$ が値を残さないという違いが現れる。このことを踏まえて上の Fourier 級数展開を次のように表し直しておく。

$$\tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\tilde{\omega}_l) = \int_0^\beta du \mathcal{G}^\beta(u) e^{i\tilde{\omega}_l u}, \quad \mathcal{G}^\beta(u) = \frac{1}{\beta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\tilde{\omega}_l) e^{-i\tilde{\omega}_l u} \quad (2.5.27)$$

粒子の種類ごとに $\tilde{\omega}_l$ の定義を取り換えれば (2.5.27) はそのまま成り立つ。 $\tilde{\omega}_l$ は松原振動数と呼ばれる。

$\beta \rightarrow \infty$ とすると松原周波数は連続変数化するとともに Fermi 粒子系か Bose 粒子系かでの区別ができなくなる。(2.5.27) の和は積分に置き換わり、

$$\tilde{\mathcal{G}}^\infty(i\tilde{\omega}) = \int_0^\infty du \mathcal{G}^\infty(u) e^{i\tilde{\omega} u}, \quad \mathcal{G}^\infty(u) = \int_{-\infty}^\infty \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} \tilde{\mathcal{G}}^\infty(i\tilde{\omega}) e^{-i\tilde{\omega} u}$$

となる。

自由粒子系での温度 Green 関数

自由粒子系での温度 Green 関数 $\mathcal{G}^\beta(u)$ を、1 粒子状態の基底を $\hat{H}^{(1)}$ の固有状態 $\hat{H}^{(1)}|k\rangle = \epsilon_k|k\rangle$ にとって考えると、 $\hat{a}_k(-i\hbar u) = \hat{a}_k e^{-\epsilon_k u}$ であるので、

$$\mathcal{G}_{kk'}^\beta(u - u') = - \left(\langle \hat{a}_k \hat{a}_{k'}^\dagger \rangle e^{(\epsilon_k - \mu)u - (\epsilon_{k'} - \mu)u'} \Theta(u - u') + \zeta \langle \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_k \rangle e^{(\epsilon_k - \mu)u - (\epsilon_{k'} - \mu)u'} \Theta(u' - u) \right)$$

となる。期待値は熱平衡状態 $(T, \mu; V)$ に対してとられているので、Fermi 粒子系の場合には、

$$\mathcal{G}_{kk'}^\beta(u) = -e^{-(\epsilon_k - \mu)u} \left[\frac{\Theta(u)}{1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} - \frac{\Theta(-u)}{1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right] \delta_{kk'}$$

Bose 粒子系の場合は、

$$\mathcal{G}_{kk'}^\beta(u) = -e^{-(\epsilon_k - \mu)u} \left[\frac{\Theta(u)}{1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} - \frac{\Theta(-u)}{1 - e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right] \delta_{kk'}$$

である。よって、 $\tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\tilde{\omega}_l)$ は次のように行列表示できる。

$$\tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\tilde{\omega}_l) = \left[i\tilde{\omega}_l - H^{(1)} + \mu \right]^{-1}$$

この表式は Fermi・Bose どちらの粒子系でも共通であり、次式が形式上成り立つ。

$$\tilde{\mathcal{G}}^\beta(\hbar\omega + i\delta) = \left[\hbar\omega - H^{(1)} + \mu + i\delta \right] = \tilde{\mathcal{G}}^R(\omega)$$

22) 松原周波数を導入した後の表式に合わせて、標準的でない規格化因子による Fourier 級数展開をとっている。後述する虚時間の相関関数 \mathcal{G}_{AB}^β についても同様。

虚時間形式のスペクトル表示

2.5.2 項と同様に一般の演算子 \hat{A}, \hat{B} について、温度 Green 関数の対応物

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{AB}^\beta(u, u') &\equiv -\left\langle \mathcal{T} \left[\hat{A}(-i\hbar u) \hat{B}(-i\hbar u') \right] \right\rangle_{\text{eq}} \\ &= -\left[\left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \hat{B}(-i\hbar u') \right\rangle_{\text{eq}} \Theta(u - u') + \zeta \left\langle \hat{B}(-i\hbar u') \hat{A}(-i\hbar u) \right\rangle_{\text{eq}} \Theta(u' - u) \right]\end{aligned}$$

を考えてみる。期待値をとる状態が熱平衡状態であるので、トレースの可換性から $\mathcal{G}_{AB}(u, u')$ は $u - u'$ にのみ依存する周期関数となるべきなので、Fourier 級数展開

$$\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(i\omega_n) \equiv \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} du \mathcal{G}_{AB}^\beta(u) e^{i\omega_n u}, \quad \mathcal{G}_{AB}^\beta(u) = \frac{1}{\beta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(i\omega_n) e^{-i\omega_n u} \quad \left(\omega_n = \frac{n\pi}{\beta} \right)$$

が定義できる。 $\hat{\mathcal{H}}$ の固有状態に対する \hat{A}, \hat{B} の行列要素を用いて $\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(i\omega_n)$ を表すと、

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(i\omega_n) &= -\frac{1}{2} \frac{1}{\Xi_V} \int_{-\beta}^{\beta} du \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \mathcal{T} [\hat{A}(u) \hat{B}] | n \rangle e^{i\omega_n u} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{1}{\Xi_V} \int_{-\beta}^{\beta} du \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left[e^{(E_n - E_m)u} \Theta(u) A_{nm} B_{mn} + \zeta e^{(E_m - E_n)u} \Theta(-u) B_{nm} A_{mn} \right] e^{i\omega_n u}\end{aligned}$$

となる。ここでスペクトル関数 $J_{AB}(\omega)$ に対して

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J_{AB}(\omega) e^{-\hbar\omega u} = \frac{1}{\Xi_V} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} A_{nm} B_{mn} e^{-(E_m - E_n)u}$$

が成り立つこと、および $J_{BA}(\omega) = e^{\beta\hbar\omega} J_{AB}(-\omega)$ を用いると、

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(i\omega_n) &= -\frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} du \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\Theta(u) J_{AB}(\omega') e^{-\hbar\omega' u} + \zeta \Theta(-u) J_{AB}(-\omega') e^{\beta\hbar\omega'} e^{\hbar\omega' u} \right] e^{i\omega_n u} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' J_{AB}(\omega') \left[\int_0^{\beta} du e^{(i\omega_n - \hbar\omega')u} + \zeta e^{-\beta\hbar\omega'} \int_{-\beta}^0 du e^{(i\omega_n - \hbar\omega')u} \right] \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{J_{AB}(\omega')}{i\omega_n - \hbar\omega'} \left\{ \left[(-1)^n e^{-\beta\hbar\omega'} - 1 \right] + \zeta \left[e^{-\beta\hbar\omega'} - (-1)^n \right] \right\}\end{aligned}$$

という $\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(i\omega_n)$ のスペクトル表示が得られる。 $\zeta = +1$ のときは $n = 2l + 1$ 、 $\zeta = -1$ のときは $n = 2l$ のときに $\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(i\omega_n) = 0$ になるので、松原周波数

$$\tilde{\omega}_l = \begin{cases} \omega_{2l+1} = \frac{(2l+1)\pi}{\beta} & (\zeta = -1) \\ \omega_{2l} = \frac{2l\pi}{\beta} & (\zeta = +1) \end{cases}$$

を導入してスペクトル表示を表し直すと次のようになる。

$$\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(i\tilde{\omega}_l) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(1 - \zeta e^{-\beta\hbar\omega'}) J_{AB}(\omega')}{i\tilde{\omega}_l - \hbar\omega'} \quad (2.5.28)$$

$\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(z)$ はここまで $z = i\omega_n$ という離散点でのみ定義していたが、(2.5.28) により $J_{AB}(z/\hbar) \neq 0$ を満たす全ての $z \in \mathbb{C}$ に定義域を拡張することが正当化される。これは $\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(z)$ が複素関数として解析接続が可能であることにあたる。この上で $\tilde{G}_{AB}^R(\omega)$ のスペクトル表示 (2.5.9) と比較すると、

$$\tilde{\mathcal{G}}_{AB}^\beta(\hbar\omega + i\delta) = \tilde{G}_{AB}^R(\omega)$$

が一般に成り立つことがわかる。

温度 Green 関数による摂動展開

生成汎関数 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ と $\Xi^\beta[\eta, \bar{\eta}]$ の類似性から、 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ における (2.5.19) に対応した式として、

$$\begin{aligned}\Xi^\beta[\eta, \bar{\eta}] &= \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du [\bar{\alpha}^T \partial_u \alpha + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \bar{\eta} \alpha + \bar{\alpha} \eta] \right\} \\ &= \exp \left[- \int_0^\beta du \mathcal{H}_1 \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(u)}, \frac{\delta}{\delta \eta(u)} \right) \right] \Xi_0^\beta[\eta, \bar{\eta}]\end{aligned}$$

が成り立ち、また (2.5.20) に対応した式として、

$$\frac{\Xi^\beta[\eta, \bar{\eta}]}{\Xi_{0;V}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[- \int_0^\beta du \mathcal{H}_1 \left(\frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(u)}, \zeta \frac{\delta}{\delta \eta(u)} \right) \right]^n \exp \left\{ - \int_0^\beta du \int_0^\beta du' \bar{\eta}^T(u) \mathcal{G}_0^\beta(u, u') \eta(u') \right\} \quad (2.5.29)$$

という摂動展開公式が成り立つ ($\Xi_{0;V}, \mathcal{G}_0^\beta$ はそれぞれ \mathcal{H}_0 に対して定義された大分配関数と温度 Green 関数)。ここで、生成汎関数の場合と違って分配関数の径路積分はどのような \mathcal{H} に対しても (反) 周期境界条件を満たす任意の径路にわたって足し上げられているため、分配関数の摂動展開時に断熱仮定の必要はないことに注意する。

\mathcal{H}_1 は実時間形式での摂動展開の際と同じ 2 体相互作用項 (2.5.22) であるとする。大分配関数 $\Xi_V = \Xi^\beta[\eta = \bar{\eta} = 0]$ を摂動展開公式 (2.5.29) を用いて計算するには、

$$\frac{1}{n!} \left[- \int_0^\beta du \mathcal{H}_1 \left(\frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(u)}, \zeta \frac{\delta}{\delta \eta(u)} \right) \right]^n \exp \left\{ - \int_0^\beta du \int_0^\beta du' \bar{\eta}^T(u) \mathcal{G}_0^\beta(u, u') \eta(u') \right\} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0}$$

を計算する必要があるが、生成汎関数からの類推で $\mathcal{G}_0^\beta(u, u')$ と $V_{j_1, j_2; j_3, j_4}$ の縮約に分解されることが期待される。実際この予想は正しく、 \mathcal{G}^β のテンソル積への分解について Wick の定理と同様の規則性が成り立つことが Bloch-de Dominicis の定理として知られる。このため Ξ_V の摂動展開にも Feynman 図を用いた手法が適用できる。ただし、

大分配関数の摂動展開における Feynman 図の書き方

1. 摂動展開の次数 n を決める。
2. n 本の波線を描く。
3. 波線がもつ頂点 1 つあたりに入る実線と出ていく実線がそれぞれ 1 本ずつになるよう、全ての頂点を実線で結ぶ。1 本の実線で同じ頂点に出入りするループを描いても構わない。

の手順でダイアグラムを書くことは全く変わらないが、Feynman 則が

u -表示での Feynman 則

- (i) $\int du_n$: 入る実線と出ていく実線がつながる足をそれぞれ 1 つずつもつ頂点
- (ii) $-\mathcal{G}_0^\beta(u_n; u_{n'})$: $u_{n'}$ から u_n の向きに、対応する頂点の足をつなぐ実線
- (iii) 実線がつながってできたループが奇数個なら、 ζ が乗じられる。
- (iv) $-V\delta(u_n - u_{n'})$: $u_{n'}$ から u_n の向きに、対応した頂点を結ぶ波線

というように少し変更される。

$\delta(u - u')$ は $\tilde{\omega}_l = 2l\pi/\beta$ の松原周波数で Fourier 級数展開ができる。

$$\delta(u - u') = \frac{1}{\beta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{-i\tilde{\omega}_l(u-u')}$$

これと g_0^β の級数展開 (2.5.27) を代入した摂動展開の各項について、Feynman 図の波線の両端の頂点に対応する u を先に積分した際に生じるデルタ関数は、

$$\int_0^\beta du_1 e^{-i(\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_2 \pm \tilde{\omega}_l)u_1} = \beta \delta_{l_1 \pm l, l_2}$$

というようになる²³⁾ので、 $\tilde{\omega}_l$ -表示での Feynman 則もまた変更が必要で、次のようになる。

$\tilde{\omega}_l$ -表示での Feynman 則

- (i) 頂点：つながる実線・波線の松原周波数の添字に対する和則 $\beta \delta_{l_1 \pm l, l_2}$ (入る線と出ていく線で松原周波数の添字の和が合うようにする)
- (ii) 実線： $-\beta^{-1} \sum_l \tilde{g}_0^\beta(i\tilde{\omega}_l)$
- (iii) 実線がつながってできたループが奇数個なら、 ζ が乗じられる。
- (iv) 波線： $-\beta^{-1} \sum_l V$

大分配関数 Ξ_V は (1.4.3) によりグランドポテンシャル $J(T, \mu; V)$ と関係づけられるため、(2.5.29) を両辺 $\eta = \bar{\eta} = 0$ とすれば左辺は $e^{-\beta(J-J_0)}$ となる ($J_0(T, \mu; V)$ は相互作用がない系のグランドポテンシャル)。一方、右辺のダイアグラム展開は既約部分をもつ Feynman 図の性質から、

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{c} \text{式 (2.5.29) の} \\ \text{右辺} \end{array} \right) &= \left(\begin{array}{c} \text{可能な全ての} \\ \text{Feynman 図} \end{array} \right) = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\begin{array}{c} \text{可能な全ての} \\ \text{既約な Feynman 図} \end{array} \right)^n \\ &= \exp \left(\begin{array}{c} \text{可能な全ての} \\ \text{既約な Feynman 図} \end{array} \right) \end{aligned}$$

となっているため²⁴⁾、グランドポテンシャルの摂動展開の際には、

グランドポテンシャルの摂動展開における Feynman 図の書き方 (1., 2. は大分配関数と同じ)

- 3). 独立した部分のない、既約な図形となるもののみ描く。

が成り立つ。

(2.5.29) を用いることで温度 Green 関数の摂動展開公式も導かれ、因果 Green 関数の場合とほぼ同様に Feynman 図を描いて Feynman 則で式と対応させることができる。

u -表示での Feynman 則 (続き)

- (vi) 元の g_0^β の引数 u, u' ：実線が 1 本しかつながらない頂点。 u に対応する頂点は入る向き、 u' に対応する頂点は出ていく向きの実線とつながる。

$\tilde{\omega}_l$ -表示での Feynman 則 (続き)

- (vii) 外の頂点にのびる実線 (外線)：元の \tilde{g}_0^β の松原周波数を引数にとる \tilde{g}_0^β

23) 表記の規則は、 l_1, l_2 が頂点につながる実線に対応した \tilde{g}_0^β 、 l が同じ頂点につながる波線に対応した $V e^{\pm i\tilde{\omega}_l(u-u')}$ の松原周波数の添字。

24) この $(n!)^{-1}$ は摂動展開公式に現れている因子ではなく、既約 Feynman 図を n 個つなぐ場合の数で可能な図の数えすぎをなくすために付したものである。

1. 摂動展開の次数 n を決める。
2. n 本の波線と 2 つの頂点を描く。
3. 波線がもつ頂点には入る実線と出ていく実線がそれぞれ 1 本ずつになるよう、外の 2 つの頂点には一方は入る実線が、他方には出ていく実線が 1 本のみつながるように、全ての頂点を実線で結んで、独立した部分がない既約な図形を描く。1 本の実線で同じ頂点に出入りするループを描いても構わない。

なお摂動計算の際に、 $z = i\tilde{\omega}_l$ を含む複素平面上の領域 D で解析的な関数 $g(z)$ と D に含まれる反時計回りの周回路 C に対する次の公式が有用である：

$$\frac{1}{\beta} \sum_l g(i\tilde{\omega}_l) = \begin{cases} -\frac{1}{2\pi i} \oint_C dz g(z) f_{\beta,\mu}(z) & (\text{Fermi 粒子系}) \\ \frac{1}{2\pi i} \oint_C dz g(z) b_{\beta,\mu}(z) & (\text{Bose 粒子系}) \end{cases}$$

D は実用的には、実軸を含まないように無限遠点と $z = i\tilde{\omega}_l$ を全て含むような領域をとる。摂動計算での $g(\omega)$ はほとんどの場合実軸にしか極がないので、このように D をとれば周回路 C は実軸を往復する経路に変形することができて、上式の右辺は $g(z)$ の極についての留数積分で求まるようになる。

2.5.5 Schwinger-Keldysh 形式

2.5.3 項で因果 Green 関数の経路積分表示 (2.5.12) を導いた際には期待値をとる状態を固有状態 $|n\rangle$ に限っていた。これは積分経路の始点と終点 $t = t_i, t_f$ の状態を一致させるためである。一般の純粋状態 $|\Phi\rangle$ に対しては、

$$\begin{aligned} g_{jj'}^C(t, t') &\equiv \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi | T \left[\hat{a}_j(t) \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \right] | \Phi \rangle \\ &= \begin{cases} \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi' | \hat{U}(t - t_i) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t' - t_i) | \Phi' \rangle & (t > t') \\ \frac{\zeta}{i\hbar} \langle \Phi' | \hat{U}(t' - t_i) \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t') \hat{U}(t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t - t_i) | \Phi' \rangle & (t < t') \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi' | \hat{U}(t - t_i) \left[\hat{U}(t_f - t) \hat{U}^\dagger(t_f - t') \right] \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t - t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t' - t_i) | \Phi' \rangle & (t > t') \\ \frac{\zeta}{i\hbar} \langle \Phi' | \hat{U}(t' - t_i) \left[\hat{U}(t_f - t') \hat{U}^\dagger(t_f - t') \right] \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t' - t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t - t_i) | \Phi' \rangle & (t < t') \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{i\hbar} \frac{\langle \Phi' | \hat{U}(t_f - t_i) \hat{U}^\dagger(t_f - t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t - t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t' - t_i) | \Phi' \rangle}{\langle \Phi' | \hat{U}(t_f - t_i) \hat{U}^\dagger(t_f - t_i) | \Phi' \rangle} & (t > t') \\ \frac{\zeta}{i\hbar} \frac{\langle \Phi' | \hat{U}(t_f - t_i) \hat{U}^\dagger(t_f - t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t' - t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t - t_i) | \Phi' \rangle}{\langle \Phi' | \hat{U}(t_f - t_i) \hat{U}^\dagger(t_f - t_i) | \Phi' \rangle} & (t < t') \end{cases} \end{aligned}$$

とすることで、コヒーレント状態を用いて次のように経路積分で表すことができる。

$$g_{jj'}^C(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha_j^{\rightarrow}(t) \bar{\alpha}_{j'}^{\rightarrow}(t') e^{iS^C/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS^C/\hbar}}$$

しかし、積分経路は $t = t_i$ から $t = t_f$ まで行った後 $t = t_i$ に戻るという時間経路をとるものになる。各経路は始点と終点 $t = t_i$ での状態を $|\Phi'\rangle = \hat{U}^\dagger(t_i) |\Phi\rangle$ に一致させるのみで、往路と復路で場

の配位を一致させる必要はない。このため往路の配位を α^\rightarrow 、復路の配位を α^\leftarrow と表記して区別している。この表記の下で S^C は次式のように与えられている。

$$\begin{aligned} S^C &= \int_C dt [i\hbar \bar{\alpha}^T \dot{\alpha} - \mathcal{H}(\alpha, \bar{\alpha})] \\ &\equiv \int_{t_i}^{t_f} dt \{ i\hbar [\bar{\alpha}^\rightarrow(t)]^T \partial_t \alpha^\rightarrow(t) - \mathcal{H}(\alpha^\rightarrow(t), \bar{\alpha}^\rightarrow(t)) \} \\ &\quad + \int_{t_f}^{t_i} dt \{ i\hbar [\bar{\alpha}^\leftarrow(t)]^T \partial_t \alpha^\leftarrow(t) - \mathcal{H}(\alpha^\leftarrow(t), \bar{\alpha}^\leftarrow(t)) \} \\ &= S[\alpha^\rightarrow, \bar{\alpha}^\rightarrow] - S[\alpha^\leftarrow, \bar{\alpha}^\leftarrow] \end{aligned}$$

このような二重経路を Schwinger-Keldysh 経路という。SK 経路の場合は $t_i = 0, t_f \rightarrow +\infty$ にとることが多い。

2.5.3 項のときと同様に、因果 Green 関数を与える生成汎関数 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ を次のように定義する。

$$\Xi^C[\eta, \bar{\eta}] = \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^C + \int_C dt [\bar{\eta}^T \alpha + \bar{\alpha}^T \eta] \right\}$$

ただし、積分経路の範囲は SK 経路上の任意の $\alpha(t)$ の配位である。また、外場との畳み込み積分は往路と復路で時間積分の向きが逆転していることに注意する。この $\Xi^C[\eta, \bar{\eta}]$ を用いた $g_{jj'}^C(t, t')$ の表式は次のようになる。

$$g_{jj'}^C(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi^C[\eta = \bar{\eta} = 0]} \zeta \frac{\delta^2 \Xi^C}{\delta \bar{\eta}_j^\rightarrow(t) \delta \eta_{j'}^\rightarrow(t')} \Big|_{\eta = \bar{\eta} = 0}$$

ここで、 $g_{jj'}^C(t, t')$ の類推から得られる次の関数を考える：

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{jj'}^C(t, t') &\equiv \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi^C[\eta = \bar{\eta} = 0]} \zeta \frac{\delta^2 \Xi^C}{\delta \bar{\eta}_j^\leftarrow(t) \delta \eta_{j'}^\leftarrow(t')} \Big|_{\eta = \bar{\eta} = 0} \\ g_{jj'}^{>}(t, t') &\equiv -\frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi^C[\eta = \bar{\eta} = 0]} \zeta \frac{\delta^2 \Xi^C}{\delta \bar{\eta}_j^\leftarrow(t) \delta \eta_{j'}^\rightarrow(t')} \Big|_{\eta = \bar{\eta} = 0} \\ g_{jj'}^{<}(t, t') &\equiv -\frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi^C[\eta = \bar{\eta} = 0]} \zeta \frac{\delta^2 \Xi^C}{\delta \bar{\eta}_j^\rightarrow(t) \delta \eta_{j'}^\leftarrow(t')} \Big|_{\eta = \bar{\eta} = 0} \end{aligned}$$

演算子形式の因果 Green 関数を経路積分表示にした手順を逆に辿ってこれらの関数を演算子形式で表してみる。まず $\tilde{g}_{jj'}^C(t, t')$ について計算してみると、

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{jj'}^C(t, t') &= \begin{cases} \frac{\zeta}{i\hbar} \langle \Phi' | \hat{U}(t' - t_i) \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}(t - t') \hat{a}_j \hat{U}(t_f - t) \hat{U}^\dagger(t_f - t_i) | \Phi' \rangle & (t > t') \\ \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi' | \hat{U}(t' - t_i) \hat{a}_j \hat{U}(t' - t) \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}(t_f - t') \hat{U}^\dagger(t_f - t_i) | \Phi' \rangle & (t < t') \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{\zeta}{i\hbar} \langle \Phi | \hat{U}(t') \hat{a}_j^\dagger \hat{U}^\dagger(t') \hat{U}(t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t) | \Phi \rangle & (t > t') \\ \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi | \hat{U}(t) \hat{a}_j \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t') \hat{a}_{j'}^\dagger \hat{U}^\dagger(t') | \Phi \rangle & (t < t') \end{cases} \\ &\equiv \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi | \tilde{T} [\hat{a}_j(t) \hat{a}_{j'}^\dagger(t')] | \Phi \rangle \end{aligned}$$

となることがわかる。ここで、Heisenberg 描像の演算子に対する反時間順序積 \tilde{T} を次のように定義した。

$$\tilde{T}[\hat{a}(t) \hat{a}^\dagger(t')] = \begin{cases} \zeta \hat{a}^\dagger(t') \hat{a}(t) & (t > t') \\ \hat{a}(t) \hat{a}^\dagger(t') & (t < t') \end{cases}$$

この意味で $g^{\tilde{C}}(t, t')$ を反因果 Green 関数と呼ぶことがある。同様にして $g_{jj'}^{<}(t, t'), g_{jj'}^{>}(t, t')$ についても演算子形式の表式を求めると、

$$g_{jj'}^{>}(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi | \hat{a}_j(t) \hat{a}_{j'}^\dagger(t') | \Phi \rangle, \quad g_{jj'}^{<}(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \langle \Phi | \hat{a}_{j'}^\dagger(t') \hat{a}_j(t) | \Phi \rangle$$

というように、時間順序が指定されていない Green 関数であることがわかる²⁵⁾。このように 1 方向の時間経路で見ると様々な時間順序の Green 関数になっているが、SK 経路上ではどれも単に経路の進む向きに演算子を並べ替えているに過ぎない。以上の Green 関数をまとめて呼ぶ際にはこの意味で経路順序の Green 関数ということにする。

期待値の線形性から、経路順序の Green 関数の間には次の関係が成り立っている。

$$G^C(t, t') + G^{\tilde{C}}(t, t') = G^{>}(t, t') + G^{<}(t, t')$$

また、経路順序の Green 関数を用いると、

$$\begin{aligned} G^R(t, t') &= G^C(t, t') - G^{<}(t, t') = G^{>}(t, t') - G^{\tilde{C}}(t, t') \\ G^A(t, t') &= G^C(t, t') - G^{>}(t, t') = G^{<}(t, t') - G^{\tilde{C}}(t, t') \end{aligned}$$

というようにして遅延・先進 Green 関数を与えることができ、次式が成り立つこともわかる。

$$G^R(t, t') + G^A(t, t') = G^C(t, t') - G^{\tilde{C}}(t, t'), \quad G^R(t, t') - G^A(t, t') = G^{>}(t, t') - G^{<}(t, t')$$

因果 Green 関数と遅延・先進 Green 関数との間に (2.5.10) が成り立つのは熱平衡状態のみであり、今考えている一般の純粋状態 $|\Phi\rangle$ では成り立たない。しかし SK 経路を用いた定式化ではその代わりに、このように 4 つの Green 関数を用いることで一般の量子状態における遅延・先進 Green 関数を与えることができる。

4 種類の経路順序 Green 関数を考えることで初めて SK 形式での (2.5.18) にあたる式を与えることができ、次のようになる。

$$\frac{\Xi^C[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}]}{\Xi^C[\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0]} = \exp \left[i\hbar \int_0^\infty dt \int_0^\infty dt' \begin{pmatrix} \bar{\boldsymbol{\eta}}^\rightarrow(t) \\ \bar{\boldsymbol{\eta}}^\leftarrow(t) \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} G^C(t, t') & -G^{<}(t, t') \\ -G^{>}(t, t') & G^{\tilde{C}}(t, t') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\eta}^\rightarrow(t') \\ \boldsymbol{\eta}^\leftarrow(t') \end{pmatrix} \right] \quad (2.5.30)$$

SK 形式における Feynman 図を用いた摂動展開は実時間形式とほとんど同様に行われ、Feynman 則は 2.6.3 項で述べたものと変わらない。ただし、同じ時刻に対して往路か復路かの自由度が生まれたことで、頂点に対応する時刻がどちらに属するかに応じてその間を結ぶ実線に対応した Green 関数が経路順序の 4 種類の内のどれかを考える必要がある。

Keldysh 回転

経路順序の Green 関数からは、

$$K \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad K^\dagger = K^{-1} = K$$

25) 厳密には $G^{<}, G^{>}$ は Green 関数の定義式 (2.5.2) を満たしていない (右辺が 0 になる)。また、 $G^{\tilde{C}}$ も (2.5.2) そのものは満たさず、右辺のデルタ関数が負になった式を満たす。

を用いて、

$$\begin{pmatrix} G^C(t, t') & -G^>(t, t') \\ -G^<(t, t') & G^{\bar{C}}(t, t') \end{pmatrix} \longrightarrow K \begin{pmatrix} G^C(t, t') & -G^>(t, t') \\ -G^<(t, t') & G^{\bar{C}}(t, t') \end{pmatrix} K = \begin{pmatrix} 0 & G^R(t, t') \\ G^A(t, t') & G^K(t, t') \end{pmatrix}$$

と変換することで、遅延・先進 Green 関数を得ることができる。ここで定義した

$$\begin{aligned} G^K(t, t') &\equiv \frac{1}{2} \left[G^C(t, t') + G^>(t, t') + G^<(t, t') + G^{\bar{C}}(t, t') \right] \\ &= G^C(t, t') + G^{\bar{C}}(t, t') = G^>(t, t') + G^<(t, t') \end{aligned}$$

は Keldysh-Green 関数とも呼ばれる。

低エネルギー有効理論・散逸系の作用汎関数

2つの系 $(\alpha, \bar{\alpha})$, $(\beta, \bar{\beta})$ が相互作用している場合を考える。このときハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1(\alpha, \bar{\alpha}) + \mathcal{H}_2(\beta, \bar{\beta}) + \mathcal{H}_{\text{int}}(\alpha, \bar{\alpha}, \beta, \bar{\beta})$$

というように3つの項に分けられる。この \mathcal{H} に対して生成汎関数は SK 形式で次のように定義される。

$$\begin{aligned} \Xi^C[\eta, \bar{\eta}, \theta, \bar{\theta}] &= \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}, \beta, \bar{\beta}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S^C + \int_C dt \left[\bar{\eta}^T \alpha + \bar{\alpha}^T \eta + \bar{\theta}^T \beta + \bar{\beta}^T \theta \right] \right\} \\ &\quad \left(S^C \equiv \int_C dt \left[i\hbar(\bar{\alpha}^T \dot{\alpha} + \bar{\beta}^T \dot{\beta}) - \mathcal{H} \right] \right) \end{aligned}$$

\mathcal{H}_{int} の形が $\alpha, \bar{\alpha}$ の複素ベクトル関数 $A(\alpha, \bar{\alpha})$ によって、

$$\mathcal{H}_{\text{int}}(\alpha, \bar{\alpha}, \beta, \bar{\beta}) = g \left[\bar{A}^T(\alpha, \bar{\alpha}) \beta + \bar{\beta}^T A(\alpha, \bar{\alpha}) \right]$$

と表せたとすると²⁶⁾、 $\Xi^C[\eta, \bar{\eta}, \theta, \bar{\theta}]$ は $\beta, \bar{\beta}$ に関する汎関数積分を、

$$\begin{aligned} \Xi^C[\eta, \bar{\eta}, \theta, \bar{\theta}] &= \int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_1^C + \int_C dt (\bar{\eta}^T \alpha + \bar{\alpha}^T \eta) \right] \Xi^{\text{ext}}[\alpha, \bar{\alpha}; \theta, \bar{\theta}] \\ \Xi^{\text{ext}}[\alpha, \bar{\alpha}; \theta, \bar{\theta}] &\equiv \int \mathcal{D}(\beta, \bar{\beta}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_2^C + \int_C dt \left([\bar{\theta} + g \bar{A}(\alpha, \bar{\alpha})]^T \beta + \bar{\beta}^T [\theta + g A(\alpha, \bar{\alpha})] \right) \right] \end{aligned}$$

というように分離できる。ただし、

$$S_1^C \equiv \int_C dt [i\hbar \bar{\alpha}^T \dot{\alpha} - \mathcal{H}_1(\alpha, \bar{\alpha})], \quad S_2^C \equiv \int_C dt [i\hbar \bar{\beta}^T \dot{\beta} - \mathcal{H}_2(\beta, \bar{\beta})]$$

はそれぞれ部分系が独立していた場合の作用汎関数である。このように分離した時、(2.5.30) を用いることで Ξ^{ext} を $\alpha, \bar{\alpha}$ の被積分関数である指数関数の肩に押し込められると考える。実際、SK 形式であれば積分経路の始状態 $|\Phi\rangle$ を自由にとれるので、2つの系それぞれが純粋状態であるような積状態にとれば経路積分の分割が可能である。 $\beta, \bar{\beta}$ の自由度をないものとして扱うことになるので、以降では $\theta = \bar{\theta} = 0$ に固定して表記を省く：

$$\Xi^{\text{ext}}[\alpha, \bar{\alpha}] \equiv \int \mathcal{D}(\beta, \bar{\beta}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_2^C + \int_C dt \left(g[\bar{A}(\alpha, \bar{\alpha})]^T \beta + g\bar{\beta}^T A(\alpha, \bar{\alpha}) \right) \right]$$

26) 物理的には、 $\alpha, \bar{\alpha}$ の系の運動で $\beta, \bar{\beta}$ の系の粒子が吸収・放出されることにあたる。

これに (2.5.30) を適用すると、

$$\frac{\Xi^{\text{ext}}[\boldsymbol{\alpha}, \bar{\boldsymbol{\alpha}}]}{\Xi^{\text{ext}}[\mathbf{A} = \bar{\mathbf{A}} = 0]} = \exp \left[i\hbar g^2 \int_0^\infty dt \int_0^\infty dt' \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{A}}(\boldsymbol{\alpha}^\rightarrow(t), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\rightarrow(t)) \\ \bar{\mathbf{A}}(\boldsymbol{\alpha}^\leftarrow(t), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\leftarrow(t)) \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} G^C(t, t') & -G^<(t, t') \\ -G^>(t, t') & G^{\tilde{C}}(t, t') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}^\rightarrow(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\rightarrow(t')) \\ \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}^\leftarrow(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\leftarrow(t')) \end{pmatrix} \right]$$

と表せるとわかる。ここで用いた Green 関数は、

$$g_{jj'}(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\boldsymbol{\beta}, \bar{\boldsymbol{\beta}}) \beta_j(t) \bar{\beta}_{j'}(t') e^{iS_2^C/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\boldsymbol{\beta}, \bar{\boldsymbol{\beta}}) e^{iS_2^C/\hbar}}$$

というように S_2^C のみから定まる $(\boldsymbol{\beta}, \bar{\boldsymbol{\beta}})$ の系のものである。よって、 $\Xi^C[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}]$ については、

$$\begin{aligned} \tilde{S}_1^C &\equiv \int_C dt [i\hbar \bar{\boldsymbol{\alpha}}^T \dot{\boldsymbol{\alpha}} - \mathcal{H}_1(\boldsymbol{\alpha}, \bar{\boldsymbol{\alpha}})] \\ &+ i\hbar g^2 \int_0^\infty dt \int_0^\infty dt' \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{A}}(\boldsymbol{\alpha}^\rightarrow(t), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\rightarrow(t)) \\ \bar{\mathbf{A}}(\boldsymbol{\alpha}^\leftarrow(t), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\leftarrow(t)) \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} G^C(t, t') & -G^<(t, t') \\ -G^>(t, t') & G^{\tilde{C}}(t, t') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}^\rightarrow(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\rightarrow(t')) \\ \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}^\leftarrow(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\leftarrow(t')) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

に対して、

$$\frac{\Xi^C[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}]}{\Xi^{\text{ext}}[\mathbf{A} = \bar{\mathbf{A}} = 0]} = \int \mathcal{D}(\boldsymbol{\alpha}, \bar{\boldsymbol{\alpha}}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \tilde{S}_1^C + \int_C dt (\bar{\boldsymbol{\eta}}^T \boldsymbol{\alpha} + \bar{\boldsymbol{\alpha}}^T \boldsymbol{\eta}) \right]$$

が成り立つことになる。 $\Xi^{\text{ext}}[\mathbf{A} = \bar{\mathbf{A}} = 0]$ は $\boldsymbol{\beta}, \bar{\boldsymbol{\beta}}$ のみに依存した汎関数であるため、 $\boldsymbol{\beta}, \bar{\boldsymbol{\beta}}$ の寄与が \tilde{S}_1^C に押し込められた今は定数とみなせる。すなわち、

$$\tilde{\Xi}^C[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}] \equiv \frac{\Xi^C[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}]}{\Xi^{\text{ext}}[\mathbf{A} = \bar{\mathbf{A}} = 0]}$$

が $\boldsymbol{\alpha}, \bar{\boldsymbol{\alpha}}$ の運動の情報をもつ生成汎関数で、また \tilde{S}_1^C が運動を定める作用汎関数とみなせることになる。

このような有効的な作用汎関数 \tilde{S}_1^C が示すダイナミクスを考える。Euler-Lagrange 方程式を求めると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha_j^\rightarrow}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial \bar{\alpha}_j^\rightarrow} - g^2 \int_0^\infty dt' \left\{ \frac{\partial \bar{\mathbf{A}}^T}{\partial \bar{\alpha}_j^\rightarrow} [G^C(t, t') \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}^\rightarrow(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\rightarrow(t')) - G^>(t, t') \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}^\leftarrow(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\leftarrow(t'))] \right\} \\ &- g^2 \int_0^\infty dt' \left\{ [\bar{\mathbf{A}}^T(\boldsymbol{\alpha}^\rightarrow(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\rightarrow(t')) G^C(t', t) - \bar{\mathbf{A}}^T(\boldsymbol{\alpha}^\leftarrow(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}^\leftarrow(t')) G^<(t', t)] \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \bar{\alpha}_j^\rightarrow} \right\} \end{aligned}$$

というように往路の運動に復路の配位が影響する形になることがわかる。任意の往路と復路が径路積分の中で寄与を持つ量子論に対して、作用汎関数の停留経路で運動が定まる古典論では同じ状態間の往路と復路で配位が一致させることができるため、

$$\frac{\partial \alpha_j}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial \bar{\alpha}_j} - g^2 \int_0^t dt' \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{A}}^T}{\partial \bar{\alpha}_j} G^R(t, t') \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}(t')) + \bar{\mathbf{A}}^T(\boldsymbol{\alpha}(t'), \bar{\boldsymbol{\alpha}}(t')) G^A(t', t) \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \bar{\alpha}_j} \right] \quad (2.5.31)$$

というように往路と復路の区別がなくなる場合があるが、それでも過去の $\alpha, \bar{\alpha}$ の配位に依存したダイナミクスになることがわかる²⁷⁾。このように、一般に系が外部と相互作用して散逸を持つと注目系のダイナミクスからは有効的に時間反転対称性が失われる。

外部系 $\beta, \bar{\beta}$ の運動の時間スケールが非常に短い場合、注目系の運動方程式 (2.5.31) においては $G(t, t') \propto \delta(t, t')$ とみなせるようになり、過去の配位に依存しないダイナミクスになるとともに G^R と G^A の区別がなくなる：

$$\frac{\partial \alpha_j}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial \bar{\alpha}_j} - g^2 \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{A}}^T}{\partial \bar{\alpha}_j} G \mathbf{A}(\alpha(t), \bar{\alpha}(t)) + \bar{\mathbf{A}}^T(\alpha(t), \bar{\alpha}(t)) G \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \bar{\alpha}_j} \right]$$

\mathbf{A} が $\alpha, \bar{\alpha}$ の 2 次形式で表されていた場合、 $\alpha_j, \bar{\alpha}_j$ は生成消滅演算子 $\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger$ の対応物であったことを考えると上の方程式は 2 体自己相互作用を持つ系の運動方程式になっている (1.3.4 項参照)。このように非常に運動が速い外部系への散逸は自己相互作用としてダイナミクスに現れる。

2.6 スケーリングの方法

場を自由度にもつ系において、系全体の大きさを決めるような巨視的な長さスケール L を無限大であるとき、系の大きさを保ったまま長さスケールのみを変える変換を考えることができる。長さスケールを大きくしていくと系は粗視化されることになるので、微視的には異なる理論で記述される系がスケール変換を続けた先で同じふるまいに帰着した場合はそれらの系が同じ巨視的な性質をもつことを示している。このようにスケール変換は場の理論と熱力学を繋ぐ重要な概念である。

2.6.1 臨界現象のスケーリング理論

示強変数による相変化が発現するかどうかの境になる温度は臨界点と呼ばれ、その付近で種々の熱力学量が系の微視的な性質に依らない普遍的な発散を示すことが知られている。先に述べたスケール変換と巨視的な性質の関係をふまえると、臨界点はスケール変換を続けた先にたどり着いた状態としてスケール不変性があると考えられる。

熱力学系にスケール不変性が存在する場合には、温度 t と示強変数 $\pi = \{\pi_i\}$ で表された単位体積あたりの理論を粗視化しても示強変数がスケール変換の影響を受けただけの同じ理論に帰着する。連続したスケール変換 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}/b_1 \rightarrow \mathbf{x}/(b_1 b_2)$ に対するふるまいは 1 度に $b = b_1 b_2$ でスケール変換 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}/b$ を行ったときと一致しなければならないため、スケール変換に対する示強変数のふるまいは b のべきで表されなければならない。このため示強変数を臨界点から測るようにして、スケール変換の影響を

$$t' = b^{\Delta_t} t, \quad \pi'_i = b^{\Delta_{\pi_i}} \pi_i$$

と表す。以上をふまえると、スケール不変性は熱力学ポテンシャル密度 $f(t, \pi)$ に次を満たすことを要請する ($\pi = \{\pi_i\}$ のスケール変換をまとめて $\pi' = b^{\Delta_\pi} \pi$ と表している)。

$$f(b^{\Delta_t} t, b^{\Delta_\pi} \pi) = b^d f(t, \pi)$$

任意の t に対して $b = (t_0/t)^{-1/\Delta_t}$ ($0 < t_0 < t$) に対するスケール不変性を考えると、上式は $f(t, \pi)$

27) G^R, G^A の定義から、 t' の積分範囲は必ず $0 < t' < t$ に制限される。

が臨界点近傍の任意の (t, π) で

$$f(t, \pi) = \left(\frac{t}{t_0}\right)^{d/\Delta_t} f\left(t_0, \left(\frac{t_0}{t}\right)^{\Delta_\pi/\Delta_t} \pi\right)$$

と表されることを導く。すなわち、 $f(t, \pi)$ の関数形は臨界点近傍では

$$f(t, \pi) = t^{d/\Delta_t} \mathcal{F}\left(\frac{\pi}{t^{\Delta_\pi/\Delta_t}}\right)$$

という形に制限されることになる。これにより種々の熱力学量の臨界点近傍でのふるまいが Δ_t, Δ_π を用いて表されるようになる。例えば、比熱 $c \equiv -(T_c + t)\partial^2 f / \partial t^2 \sim -\partial^2 f / \partial t^2$ については

$$c \sim t^{d/\Delta_t - 2} \mathcal{F}'\left(\frac{\pi}{t^{\Delta_\pi/\Delta_t}}\right)$$

π_i に共役な示量変数密度 $\varphi_i \equiv -\partial f / \partial \pi_i$ は、

$$\varphi_i \sim t^{(d-\Delta_i)/\Delta_t} \mathcal{F}'\left(\frac{\pi}{t^{\Delta_\pi/\Delta_t}}\right)$$

感受率 $\chi_i \equiv \partial \varphi_i / \partial \pi_i$ は、

$$\chi_i \sim t^{(d-2\Delta_i)/\Delta_t} \mathcal{F}''\left(\frac{\pi}{t^{\Delta_\pi/\Delta_t}}\right)$$

というように、 t, π に対する冪的なふるまいの指数が全て Δ_t, Δ_π と空間次元 d で定められる。

示量変数密度 φ の相関関数 $G_i(\mathbf{x}; t, \pi) \equiv \langle \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_i(0) \rangle_{(t, \pi)}$ の臨界点近傍でのふるまいも Δ_t, Δ_π を用いて特徴付けられる。 φ のスケール変換に対する影響は、先に導いた $\phi_i(t, \pi)$ のふるまいから

$$\varphi_i(b^{\Delta_t} t, b^{\Delta_\pi} \pi) = b^{d-\Delta_i} \varphi_i(t, \pi)$$

と表されることが示せるので、相関関数に対するスケール変換の影響は、

$$G_i\left(\frac{\mathbf{x}}{b}; b^{\Delta_t} t, b^{\Delta_\pi} \pi\right) = b^{2(d-\Delta_i)} G_i(\mathbf{x}; t, \pi)$$

となり、熱力学ポテンシャル密度の議論と同様に $b = (t_0/t)^{-1/\Delta_t}$ でのスケール変換を考えると関数形が次のように制限されるとわかる。

$$G_i(\mathbf{x}; t, \pi) = t^{2(d-\Delta_i)/\Delta_t} \mathcal{G}\left(t^{1/\Delta_t} \mathbf{x}, \frac{\pi}{t^{\Delta_\pi/\Delta_t}}\right)$$

相関関数の空間依存性を $G_i \sim \exp(-|\mathbf{x}|/\xi_i)$ と見積もって相関長 ξ_i を定義すると、上の関数形から臨界点近傍で相関長は、

$$\xi_i \sim |t|^{-1/\Delta_t}$$

というように、どの示量変数密度においても共通の指数で発散することがわかる。また、別のスケール変換 $b = |\mathbf{x}|/x_0$ を考えると、

$$G_i(\mathbf{x}; t, \pi) \sim |\mathbf{x}|^{-2(d-\Delta_i)} \tilde{\mathcal{G}}\left(\frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|}, |\mathbf{x}|^{\Delta_t} t, |\mathbf{x}|^{\Delta_\pi} \pi\right)$$

という冪的な空間方向の減衰も導かれる。これは臨界点で相関長が発散した時のふるまいである。

2.6.2 くりこみ群

前項でスケール不変性による普遍的なふるまいが Δ_t, Δ_π で特徴付けられることを見た。 Δ_t, Δ_π の値を求めるには実際に粗視化のふるまいを場の理論から調べる必要があり、その計算手法はくりこみ群として体系化されている。ここでは系の (離散) 並進対称性を利用して場を波数ごとのモードに分解して行うくりこみ群の方法を見る。

2.6.3 時空のスケール変換と量子相

一般的な熱力学系でスケール変換が可能なのは空間方向のみであったが、経路積分表示の大分配関数 (1.5.3) を見ると、絶対零度極限 $\beta \rightarrow 0$ では虚時間方向にもスケール変換が定義できるようになっている。絶対零度で実現する状態は基底状態であるから、このスケール変換が特徴付けるのは基底状態が属する量子相である。また、時空のスケール不変性が存在する系では量子臨界現象と呼ぶべき現象が存在すると期待される。

2.6.4 共形不変性

2.7 ボソン化法

2.8 Floquet の定理

系に周期 T の時間並進対称性 $H(t) = H(t+T)$ が存在するとき、系がとる状態 $|\Psi(t)\rangle$ は

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-i\epsilon_{\alpha} t/\hbar} |\Phi_{\alpha}(t)\rangle \quad (2.8.1)$$

$$(|\Phi_{\alpha}(t)\rangle = |\Phi_{\alpha}(t+T)\rangle, \langle \Phi_{\alpha}(t) | \Phi_{\beta}(t) \rangle = \delta_{\alpha\beta}, 0 < \epsilon_{\alpha} < \hbar\Omega)$$

という形の時間周期性をもつという Floquet の定理が知られている ($\Omega = 2\pi/T$)：系の時間を周期 T だけ進める時間発展演算子

$$\hat{U}_T \equiv T \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt \hat{H}(t) \right]$$

は $\hat{H}(t)$ の周期性から、

$$\hat{U}_{(n+m)T} = \hat{U}_{nT} \hat{U}_{mT} = \hat{U}_{mT} \hat{U}_{nT}, \quad \hat{U}_{nT} = \left(\hat{U}_T \right)^n$$

が成り立っている。すなわち、 \hat{U}_T の固有値 c_{α} は指数関数的にふるまう。またユニタリ演算子であることから $|c_{\alpha}| = 1$ であるため、一般に $c_{\alpha} = \exp(i\epsilon_{\alpha}T/\hbar)$ と表せる。 \hat{U}_T の固有状態 $|v_{\alpha}\rangle$ の組で一般の量子状態を展開することが可能だが、この固有状態の組を時刻に合わせて

$$|v_{\alpha}(t)\rangle \equiv T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}(t') \right] |v_{\alpha}\rangle$$

というように時間発展させながら基底にとる²⁸⁾ことにすれば、

$$|\Psi(t)\rangle \equiv \sum_{\alpha} C_{\alpha} |v_{\alpha}(t)\rangle$$

で一般の $\hat{H}(t)$ に対する Schrödinger 方程式の解が表される。

$$|\Phi_{\alpha}(t)\rangle \equiv |v_{\alpha}(t)\rangle e^{i\epsilon_{\alpha}t}$$

とおくと (2.8.1) の式の形が得られるが、時間発展演算子でもある \hat{U}_T は一般の時間発展演算子と可換であるために、

$$|v_{\alpha}(t+T)\rangle = \hat{U}_T^{\dagger} |v_{\alpha}(t)\rangle = e^{-i\epsilon_{\alpha}T} |v_{\alpha}(t)\rangle$$

が成り立つことをふまえると、この $|\Phi(t)\rangle$ は確かに $|\Phi(t)\rangle = |\Phi(t+T)\rangle$ を満たしている。 ϵ_{α} には $2\pi\hbar/T = \hbar\Omega$ の整数倍を足し引きする自由度があるため、全ての固有値 ϵ_{α} を $0 < \epsilon_{\alpha} < \hbar\Omega$ の範囲に押し込めることが可能である。初期状態への依存性は、

$$C_{\alpha} = \langle v_{\alpha}(t) | \Psi(t) \rangle = \langle v_{\alpha} | \Psi(t=0) \rangle$$

として現れている。

マイクロモーションとキック演算子

Floquet の定理が成り立つ周期駆動ダイナミクスにおいて、周期 T 毎に運動を粗視化して見ると、

$$\hat{U}_T \equiv e^{i\hat{H}_F T/\hbar}$$

で定義されるハミルトニアン \hat{H}_F で記述されるダイナミクスに見える。当然のことながら、

$$T \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}(t') \right] \neq e^{i\hat{H}_F t/\hbar}$$

であるが、これは時間の粗視化が周波数 Ω 以上で振動する成分のダイナミクスを見逃しているからだとわかる。逆に言えば、何かしらの条件で速いダイナミクスの寄与が小さいと考えられたなら H_F は系の有効的なハミルトニアンとみなせることになる。

時間に依存したハミルトニアン演算子 $\hat{H}(t)$ による時間発展は一般に初期状態に依存しているため、上の H_F も粗視化の基準時刻の取り方で形が変わってしまう。以降では、

$$\hat{U}(t, t_0) = T \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right]$$

というように時間発展演算子に初期状態の時刻 t_0 を明示する。Schrödinger 方程式の解 $|\Psi(t)\rangle$ に対し、

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} |v_{\alpha}(t)\rangle \langle v_{\alpha}(t) | \Psi(t) \rangle = \sum_{\alpha} |v_{\alpha}(t)\rangle \langle v_{\alpha}(t_0) | \Psi(t_0) \rangle$$

が成り立つことから、 $\hat{U}(t, t_0)$ は

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{\alpha} |v_{\alpha}(t_0)\rangle \langle v_{\alpha}(t) | = \sum_{\alpha} e^{i\epsilon_{\alpha}(t-t_0)/\hbar} |\Phi_{\alpha}(t_0)\rangle \langle \Phi_{\alpha}(t) |$$

28) 時間発展はユニタリ的であるので固有状態の組の直交性は保たれる。

と表せることになる。この表示に対して、

$$V^\dagger(t)|\Phi_\alpha(t)\rangle = V^\dagger(t_0)|\Phi_\alpha(t_0)\rangle \equiv |\phi_\alpha\rangle$$

で定義されるユニタリ演算子 $V(t)$ を導入すると、

$$\begin{aligned}\hat{U}(t, t_0) &= V(t_0) \left(\sum_{\alpha} e^{i\epsilon_\alpha(t-t_0)/\hbar} |\phi_\alpha\rangle\langle\phi_\alpha| \right) V^\dagger(t_0) \\ &= V(t_0) e^{i\hat{H}_{\text{eff}}(t-t_0)/\hbar} V^\dagger(t)\end{aligned}$$

として、ハミルトニアン様の演算子

$$H_{\text{eff}} \equiv \sum_{\alpha} \epsilon_\alpha |\phi_\alpha\rangle\langle\phi_\alpha|$$

が定義される。この演算子は、

$$\hat{U}(t+T, t) = V(t) e^{i\hat{H}_{\text{eff}}T/\hbar} V^\dagger(t+T)$$

を満たし、 \hat{H}_F に代わる望みの有効ハミルトニアンになっている。なぜなら、

$$V(t)|\Phi_\alpha(t)\rangle = V(t+T)|\Phi_\alpha(t+T)\rangle = \hat{V}(t+T)|\Phi_\alpha(t)\rangle$$

から $\hat{V}(t) = \hat{V}(t+T)$ の周期性をもつことがわかるため、

$$V(t_0) e^{i\hat{H}_{\text{eff}}T/\hbar} V^\dagger(t_0+T) = \hat{U}_T = e^{i\hat{H}_FT/\hbar}$$

において、 $\hat{H}_F = \hat{V}(t_0)\hat{H}_{\text{eff}}\hat{V}^\dagger(t_0)$ というように H_F の原点依存性を $V(t)$ に押し付けられるからである。 $\hat{V}(t)$ および

$$V(t) = e^{i\hat{G}(t)}$$

で定義される Hermite 演算子 $\hat{G}(t)$ はキック演算子と呼ばれる。

拡大状態空間の方法

$\hat{H}(t)$ は Fourier 級数展開

$$\hat{H}(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\Omega t} \hat{H}_m, \quad \hat{H}_m = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{im\Omega t} \hat{H}(t)$$

が可能である。Floquet の定理から同様に式 (2.8.1) の $|\Phi_\alpha(t)\rangle$ も

$$|\Phi_\alpha(t)\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\Omega t} |\Phi_\alpha^m\rangle, \quad |\Phi_\alpha^m\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{im\Omega t} |\Phi_\alpha(t)\rangle$$

と Fourier 級数展開できる。 $|\Phi_\alpha(t)\rangle$ の Schrödinger 方程式にこれらの展開を適用すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-i\epsilon_\alpha t/\hbar} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\Omega t} |\Phi_\alpha^n\rangle \right) = \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\Omega t} \hat{H}_m \right) \left(e^{i\epsilon_\alpha t/\hbar} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} e^{-in'\Omega t} |\Phi_\alpha^{n'}\rangle \right)$$

$$\begin{aligned}
\therefore \sum_{n=-\infty}^{\infty} (n\hbar\Omega + \epsilon_\alpha) e^{-i\epsilon_\alpha t/\hbar} e^{-in\Omega t} |\Phi_\alpha^n\rangle &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} e^{-i\epsilon_\alpha t/\hbar} e^{-i(m+n')\Omega t} \hat{H}_m |\Phi_\alpha^{n'}\rangle \\
&= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n''=-\infty}^{\infty} e^{-i\epsilon_\alpha t/\hbar} e^{-in''\Omega t} \hat{H}_m |\Phi_\alpha^{n''-m}\rangle \quad (n'' \equiv n' + m) \\
&= \sum_{n''=-\infty}^{\infty} e^{-i\epsilon_\alpha t/\hbar} e^{-in''\Omega t} \left(\sum_{m'=-\infty}^{\infty} \hat{H}_{n''-m'} |\Phi_\alpha^{m'}\rangle \right) \quad (m' \equiv n'' - m)
\end{aligned}$$

となり、各 $e^{-in\Omega t}$ 成分の (複素関数としての) 直交性から次が成り立つとわかる。

$$\begin{aligned}
(n\hbar\Omega + \epsilon_\alpha) |\Phi_\alpha^n\rangle &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{H}_{n-m} |\Phi_\alpha^m\rangle \\
\therefore \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\hat{H}_{n-m} - m\hbar\Omega \delta_{mn}) |\Phi_\alpha^m\rangle &= \epsilon_\alpha |\Phi_\alpha^n\rangle \quad (2.8.2)
\end{aligned}$$

式 (2.8.2) は、 $|\Phi_\alpha(t)\rangle$ の Fourier 成分 $|\Phi_\alpha^n\rangle$ (Floquet モードという) を並べた無限次元ベクトルの固有値方程式になっており、行列形式で表すと次のようになる。

$$\begin{pmatrix}
\ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\cdots & \hat{H}_0 - 2\hbar\Omega & \hat{H}_{+1} & \hat{H}_{+2} & \hat{H}_{+3} & \hat{H}_{+4} & \cdots \\
\cdots & \hat{H}_{-1} & \hat{H}_0 - \hbar\Omega & \hat{H}_{+1} & \hat{H}_{+2} & \hat{H}_{+3} & \cdots \\
\cdots & \hat{H}_{-2} & \hat{H}_{-1} & \hat{H}_0 & \hat{H}_{+1} & \hat{H}_{+2} & \cdots \\
\cdots & \hat{H}_{-3} & \hat{H}_{-2} & \hat{H}_{-1} & \hat{H}_0 + \hbar\Omega & \hat{H}_{+1} & \cdots \\
\cdots & \hat{H}_{-4} & \hat{H}_{-3} & \hat{H}_{-2} & \hat{H}_{-1} & \hat{H}_0 + 2\hbar\Omega & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\vdots \\
|\Phi_\alpha^{+2}\rangle \\
|\Phi_\alpha^{+1}\rangle \\
|\Phi_\alpha^0\rangle \\
|\Phi_\alpha^{-1}\rangle \\
|\Phi_\alpha^{-2}\rangle \\
\vdots
\end{pmatrix}
= \epsilon_\alpha
\begin{pmatrix}
\vdots \\
|\Phi_\alpha^{+2}\rangle \\
|\Phi_\alpha^{+1}\rangle \\
|\Phi_\alpha^0\rangle \\
|\Phi_\alpha^{-1}\rangle \\
|\Phi_\alpha^{-2}\rangle \\
\vdots
\end{pmatrix} \quad (2.8.3)$$

このように時間周期性があるハミルトニアンでの時間発展は \hat{U}_T の固有状態を求める代わりに (2.8.2) の固有値問題を解くことでも求められる。 \hat{U}_T が解析的に求めにくいため有用である一方、この固有値問題は元の状態空間に Floquet モードの次元を追加した線形空間 (拡大状態空間、Sambe 空間と呼ぶこともある) 上での問題になっている。

(2.8.3) のハミルトニアン行列の非対角項に対して拡大状態空間上で RS 摂動論 (2.1 節参照) のアナロジーを考えることで、元のハミルトニアンの動的成分 \hat{H}_m ($m \neq 0$)、すなわち外場に対する摂動的なふるまいを考えることができる。 \hat{H}_0 の固有状態を $|n\rangle$ 、対応するエネルギー固有値を E_n で表すことにすると、

$$|\Phi_\alpha^m\rangle = \delta_{mm'} |n\rangle, \quad \epsilon_\alpha = E_n - m'\hbar\Omega$$

で無摂動ハミルトニアン行列の固有ベクトルが与えられる。摂動によりこれらのベクトルが交じり合う結果として、系は Ω の整数倍の成分が複数存在するダイナミクスをもつことになる。

Magnus 展開と高周波展開

SK 形式における Floquet の定理

2.9 行列積状態・テンソルネットワーク状態

第3章 量子多体系の応答現象

系のハミルトニアンに変調可能な係数がかかった項が存在するとき、その係数を外力という。定常状態の多体系に対して外力を変調させたとき、非常に大きい変調でない限りは（すなわち摂動論で扱える変化の範囲では）系の応答は変化前の定常状態の情報で記述することができる。

3.1 線形応答の現象論

定常系に外力 P を加えて応答としてある物理量 X を測定したときに、

$$\begin{aligned} & (\text{外力 } P_1 \text{ に対し応答 } X_1 \text{ が得られる}) \wedge (\text{外力 } P_2 \text{ に対し応答 } X_2 \text{ が得られる}) \\ & \implies \text{外力 } \alpha P_1 + \beta P_2 \text{ に対し応答 } \alpha X_1 + \beta X_2 \text{ が得られる} \end{aligned}$$

という重ね合わせの原理が成り立つ場合の理論は、線形応答理論として確立されている。この節ではその形式的な取り扱いについて説明する。

3.1.1 応答関数

外力および応答が時間的に変化させられる場合、撃力的な外力 $X(t) = \delta(t - t_0)$ に対する応答が $Y(t) = \phi(t, t_0)$ で与えられたなら、重ね合わせの原理から一般の外力 $X(t)$ に対する応答 $Y(t)$ は

$$Y(t) = \int_{-\infty}^t dt' X(t') \phi(t, t') \quad (3.1.1)$$

で表せることになる。外力と応答の関係を与える上で実関数 $\phi(t, t')$ は重要であり、応答関数と呼ばれる。ここで、 $t < t_0$ で $\phi(t, t_0) = 0$ であるという物理的に自然な条件を用いて積分範囲に制限をつけていることに注意する。この仮定は因果律と呼ばれる。

系が時間的に一様であれば、

$$\phi(t, t_0) = \phi(t - t_0)$$

というように応答は外力との相対的な時間にしか依存しなくなる。このとき (3.1.1) は、

$$\begin{aligned} Y(t) &= \int_{-\infty}^t dt' X(t') \phi(t - t') \\ &= \int_0^{\infty} dt' X(t - t') \phi(t') \end{aligned}$$

という畳み込み積分で表されているので、Fourier 級数展開

$$\begin{aligned} X(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{X}(\omega) e^{-i\omega t}, & Y(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{Y}(\omega) e^{-i\omega t}, \\ \tilde{X}(\omega) &\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt X(t) e^{i\omega t}, & \tilde{Y}(\omega) &\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt Y(t) e^{i\omega t} \end{aligned}$$

を考えると、

$$\begin{aligned}
\tilde{Y}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \tilde{X}(\omega') e^{-i\omega'(t-t')} \phi(t') e^{i\omega t} \\
&= \int_0^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \tilde{X}(\omega') e^{i\omega' t'} \phi(t') \delta(\omega - \omega') \\
&= \tilde{Y}(\omega) \int_0^{\infty} dt' \phi(t') e^{i\omega t'}
\end{aligned}$$

となることがわかる。

$$\chi(\omega) \equiv \int_0^{\infty} dt \phi(t) e^{i\omega t}$$

は複素アドミッタンスと呼ばれる。

3.1.2 因果律と Kramers-Kronig の関係式

撃力的な外力 $X(t) = \delta(t - t_0)$ の影響が十分先の未来には残らないとすると、 $\phi(t)$ から $t \rightarrow \infty$ で
の収束因子を引き出すことができ、 $\chi(\omega)$ は、

$$\chi(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_0^{\infty} dt \phi(t) e^{i\omega t} e^{-\delta t} \quad (3.1.2)$$

で与えられることになる。 $\chi(\omega)$ は $\phi(t)$ の Fourier 変換にもなっていることから、その逆変換

$$\phi(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \chi(\omega) e^{-i\omega t}$$

を (3.1.2) に代入すると、

$$\begin{aligned}
\chi(\omega) &= \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_0^{\infty} dt \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \chi(\omega') e^{-i\omega' t} \right) e^{i\omega t} e^{-\delta t} \\
&= \lim_{\delta \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \chi(\omega') \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega - \omega' + i\delta)t} \\
&= \lim_{\delta \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{\omega - \omega' + i\delta}
\end{aligned}$$

と表せることがわかる。主値 (principal value) を用いた公式 (付録 C.1 節参照)

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega \pm i\delta} = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega} \mp i\pi f(\omega) \quad (3.1.3)$$

を用いてさらに変形すると、

$$\chi(\omega) = -\frac{i}{2\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} + \frac{1}{2} \chi(\omega) \quad \therefore \chi(\omega) = -\frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega}$$

であることがわかる。 $\chi(\omega)$ の実部と虚部を $\chi'(\omega) \equiv \text{Re}\chi(\omega)$, $\chi''(\omega) \equiv \text{Im}\chi(\omega)$ と表すと、次の 2 式を得る。

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega}, \quad \chi''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (3.1.4)$$

この関係式は Kramers-Krönig の関係式と呼ばれる。このようにアドミッタンスは実部か虚部どちらかのみで完全に情報が尽きており、実際この関係式と (3.1.3) より、

$$\chi(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi''(\omega')}{\omega - \omega' - i\delta}$$

というようにして虚部 $\chi''(\omega)$ のみから $\chi(\omega)$ を復元できることもわかる。

緩和関数

応答関数 $\phi(t)$ から次のように定義される実関数 $\Phi(t)$ を緩和関数という。

$$\Phi(t) \equiv \int_t^\infty \phi(t') dt'$$

これは外力が $X(t) = \Theta(-t)$ で与えられるときの線形応答 $Y(t)$ に等しく、 $t = 0$ で外力を落とした後の応答の正に緩和を表している。定義から明らかに $\phi(t) = -d\Phi/dt$ であり、またアドミタンスとは (3.1.2) から次のように関係付けられる。

$$\begin{aligned} \chi(\omega) &= - \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_0^\infty dt \frac{d\Phi}{dt} e^{-i\omega t} e^{-\delta t} \\ &= - \lim_{\delta \rightarrow +0} [\Phi(t) e^{-i\omega t} e^{-\delta t}]_0^\infty - \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_0^\infty dt i(\omega + i\delta) \Phi(t) e^{-i\omega t} e^{-\delta t} \\ &= \Phi(0) - i\omega \int_0^\infty dt \Phi(t) e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

3.1.3 線形応答と熱力学

緩和の存在を仮定した時点で、線形応答理論が考えている系は外部と少なくとも熱的接触を持った系であったことになる。そのような系は熱力学の範疇であるので、定常応答 $\chi(0) = \Phi(0)$ が熱力学変数が適切に定められた下で対応する熱力学ポテンシャルから求まる感受率 $\partial Y / \partial X$ に一致するなどの形で熱力学との整合性を取る必要がある。

線形応答理論を熱力学と連立することは単に整合性のみならず、線形応答過程でのエネルギー収支を考える上でも重要である：微小な外力変化 ΔP に対する系の仕事は、熱力学ポテンシャル上で P に共役な示量変数 X を用いて

$$\Delta W = -X \Delta P$$

で与えられる。一方で線形応答では外力変化が時間に依存しているため、微小な外力変化に対して

$$\Delta P = \frac{dP}{dt} \Delta t$$

という形で微小時間 Δt を関係づけられる。よって微小時間における仕事、すなわち仕事率が線形応答では次のように定義できる：

$$\frac{dW}{dt} = -X(t) \frac{dP(t)}{dt} = - \int_0^\infty dt' \phi(t') P(t-t') \frac{dP(t)}{dt}$$

上式の Fourier 変換は、

$$\begin{aligned} S(\omega) &\equiv \int_{-\infty}^\infty dt \frac{dW}{dt} e^{i\omega t} = - \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \int_0^\infty dt' \phi(t') P(t-t') \frac{dP(t)}{dt} \\ &= - \int_0^\infty dt' \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega_1}{2\pi} \chi(\omega_1) e^{-i(\omega_1 - i\delta)t'} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega_2}{2\pi} \tilde{P}(\omega_2) e^{-i\omega_2(t-t')} \frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega_3}{2\pi} \tilde{P}(\omega_3) e^{-i\omega_3 t} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega_1 \int_{-\infty}^\infty d\omega_2 i\omega_2 \chi(\omega_1) \tilde{P}(\omega - \omega_2) \tilde{P}(\omega_2) \int_0^\infty dt e^{i(\omega - \omega_1 - \omega_2 + i\delta)t} \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega_1 \int_{-\infty}^\infty d\omega_2 \frac{\omega_2 \chi(\omega_1) \tilde{P}(\omega - \omega_2) \tilde{P}(\omega_2)}{\omega - \omega_1 - \omega_2 + i\delta} \end{aligned}$$

となり、 $\omega \rightarrow 0$ の極限をとると次のようになる¹⁾。

$$\begin{aligned}
\lim_{\omega \rightarrow 0} S(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \frac{\omega_2 \chi(\omega_1) |\tilde{P}(\omega_2)|^2}{\omega_1 + \omega_2 - i\delta} \\
&= \frac{1}{2\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \frac{\omega_2 \chi(\omega_1) |\tilde{P}(\omega_2)|^2}{\omega_1 + \omega_2} - \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \chi(\omega) |\tilde{P}(\omega)|^2 \\
&= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \text{Im} \chi(\omega) |\tilde{P}(\omega)|^2 + \int_0^{\infty} d\omega \omega \text{Im} \chi(\omega) |\tilde{P}(\omega)|^2 \\
&= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\omega \omega \text{Im} \chi(\omega) |\tilde{P}(\omega)|^2
\end{aligned}$$

線形応答理論では外力の影響が遠い未来に残らないことを仮定しているの、長周期では系の内部エネルギーは保存される。すなわち、この仕事率の定常成分は単位時間あたりに系が放出する熱、散逸エネルギーを与えている。複素アドミッタンスの虚部は外場 P に対する系の散逸を特徴付ける量になり、特に $\omega = 0$ で 1 位の極を持つ場合は定常応答が散逸を持つことになる。

3.2 量子系の線形応答

ハミルトニアン \hat{H}_0 で熱平衡状態にあった量子多体系を外力の項

$$\hat{H}_1(t) = -\hat{A}F(t)$$

を加えたハミルトニアンで時間発展させる場合を考えて、量子論的に線形応答理論を導出する。熱平衡状態にはグランドカノニカル分布 (1.4.3 項参照) を採り、外力項の \hat{A} および \hat{B} は過程の線形性のためどちらも 1 体演算子の形で表されるものとする。

相互作用描像 (2.3 節参照) は密度行列での記述においても、

$$\hat{\rho}_I(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{\rho}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

により導入することができて、このときの von Neumann 方程式 (1.4.5) は相互作用描像での Schrödinger 方程式 (2.3.1) より、

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_I(t) &= i\hbar \sum_i p_i \frac{d}{dt} \left(e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \right) \\
&= \sum_i p_i \left[\left(i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_i(t)\rangle \right)_I \langle \psi_i(t)| + |\psi_i(t)\rangle_I \left(i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_i(t)| \right) \right] \\
&= \hat{H}_1(t) \hat{\rho}_I(t) - \hat{\rho}_I(t) \hat{H}_1(t) = [\hat{H}_1(t), \hat{\rho}_I(t)]
\end{aligned} \tag{3.2.1}$$

となる (ただし、ここでの $\hat{H}_1(t)$ は相互作用描像の演算子である)。線形応答理論を導くにはさらに、

- 熱平衡状態 $\hat{\rho}_{\text{eq}}$ は始状態として $t = -\infty$ におく。
- 状態の変化 $\delta \hat{\rho}_I(t) \equiv \hat{\rho}_I(t) - \hat{\rho}_{\text{eq}}$ は $\hat{H}_1(t)$ の 1 次までの展開で近似する。

1) 2 つ目の等号では主値公式 (3.1.3) を用いた。また 3 つ目の等号では、第 1 項が ω_1, ω_2 の符号を反転させたときのふりまいから $\chi(\omega)$ は実部しか寄与をもたないことがわかるので、Kramers-Krönig の関係式 (3.1.4) を用いている。

ことを仮定する必要がある。 $\hat{\mathcal{H}}_1(t)\delta\hat{\rho}_I(t)$ は $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ の 2 次の項であるため、この仮定のもとでの von Neumann 方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \delta\hat{\rho}_I(t) = \hat{\mathcal{H}}_1(t)\hat{\rho}_{I,\text{eq}}(t) - \hat{\rho}_{I,\text{eq}}(t)\hat{\mathcal{H}}_1(t) = -e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} F(t)$$

となる。この解は

$$\delta\hat{\rho}_I(t) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t'/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t'/\hbar} F(t')$$

で与えられ、Schrödinger 描像に戻れば、系の密度行列は、

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{\text{eq}} - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0(t-t')/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{i\hat{\mathcal{H}}_0(t-t')/\hbar} F(t')$$

で与えられることになる。応答 $B(t)$ はその物理量を与える演算子 \hat{B} の期待値をこの $\hat{\rho}(t)$ を用いて計算すれば得られる。重ね合わせが成り立つために外力のない熱平衡状態での \hat{B} の期待値は 0 であるか、あるいは \hat{B} が熱平衡状態の期待値を差し引いて定義し直されていることに注意すると、

$$\begin{aligned} \langle B(t) \rangle &= \text{Tr} [\hat{B} \hat{\rho}(t)] \\ &= \text{Tr} [\hat{B} \hat{\rho}_{\text{eq}}] - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left\{ \hat{B} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0(t-t')/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{i\hat{\mathcal{H}}_0(t-t')/\hbar} F(t') \right\} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left[\hat{B}_I(t-t') (\hat{A} \hat{\rho}_{\text{eq}} - \hat{\rho}_{\text{eq}} \hat{A}) \right] F(t') \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left[(\hat{B}_I(t-t') \hat{A} - \hat{A} \hat{B}_I(t-t')) \hat{\rho}_{\text{eq}} \right] F(t') \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left\langle [\hat{B}_I(t-t'), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} F(t') \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

と計算でき、確かに線形応答の関係になっていることが確かめられる。

撃力的な外力に対する応答が応答関数を与えたから、(3.2.2) において $F(t) = \delta(t - t_0)$ とすれば $\langle B(t) \rangle$ は応答関数を与えるはずである。代入して計算すると、

$$\begin{aligned} \phi_{BA}(t - t_0) &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left\langle [\hat{B}_I(t-t'), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} \delta(t' - t_0) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left\langle [\hat{B}_I(t - t_0), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} \Theta(t - t_0) = -G_{BA}^{\text{R}}(t, t_0) \end{aligned}$$

というように A, B の遅延的な相関関数 (2.5.2 項参照) で表されることがわかる。相互作用描像であることを明記した演算子は、結局無摂動ハミルトニアンの下での熱平均としてしか計算しないため熱平衡状態での Heisenberg 描像演算子としてみなしてもよく、以降描像を明記しない。このようにして与えられる応答関数の量子論的表式は Green-久保の公式と呼ばれる。複素アドミッタンスの量子論的表式は

$$\chi_{BA}(\omega) = -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \left\langle [\hat{B}(t), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} = -\tilde{G}_{BA}^{\text{R}}(\omega)$$

で与えられ、 $\langle B(t) \rangle$ と $F(t)$ の Fourier 成分

$$\langle \tilde{B}(\omega) \rangle \equiv \int_{-\infty}^\infty dt \langle B(t) \rangle e^{i\omega t}, \quad \tilde{F}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^\infty dt F(t) e^{i\omega t}$$

との間で $\langle \tilde{B}(\omega) \rangle = \chi(\omega) \tilde{F}(\omega)$ を満たす。また、Kramers-Kronig の関係式 (3.1.4) を満たすことは $\tilde{G}_{BA}^{\text{R}}(\omega)$ の性質からもわかる。

BCH 公式から、次の等式が成り立つことがわかる²⁾。

$$[\hat{A}, e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0}] = e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0} \int_0^\beta du e^{u \hat{\mathcal{H}}_0} [\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{A}] e^{-u \hat{\mathcal{H}}_0} = e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0} \int_0^\beta du [\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{A}(-i\hbar u)]$$

熱平衡状態が $\hat{\rho}_{\text{eq}} = e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0} / \Xi$ であることから、この等式を用いて応答関数 $\phi_{BA}(t)$ を次のように表し直すことができる。

$$\begin{aligned} \phi_{BA}(t) &= -\frac{1}{i\hbar} \left\langle [\hat{B}(t), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} \Theta(t) = -\frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left\{ \hat{B}(t) [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] \right\} \Theta(t) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\beta du \text{Tr} \left\{ [\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{A}(-i\hbar u)] \hat{B}(t) \rho_{\text{eq}} \right\} \Theta(t) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\beta du \text{Tr} \left\{ \hat{A}(-i\hbar u) [\hat{B}(t), \hat{\mathcal{H}}_0] \rho_{\text{eq}} \right\} \Theta(t) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) [\hat{B}(t), \hat{\mathcal{H}}_0] \right\rangle_{\text{eq}} \Theta(t) \end{aligned}$$

最後の表式は、緩和関数 $\Phi_{BA}(t)$ の量子論での表式が次のようになることを示している。

$$\begin{aligned} \Phi_{BA}(t) &\equiv \int_t^\infty dt' \phi_{BA}(t') = - \int_t^\infty dt' \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \frac{d\hat{B}}{dt'} \right\rangle_{\text{eq}} \Theta(t') \\ &= \begin{cases} - \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_t^\infty dt' \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \frac{d\hat{B}}{dt'} \right\rangle_{\text{eq}} e^{-\delta t'} & (t > 0) \\ - \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_0^\infty dt' \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \frac{d\hat{B}}{dt'} \right\rangle_{\text{eq}} e^{-\delta t'} & (t < 0) \end{cases} \\ &= \begin{cases} \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \hat{B}(t) \right\rangle_{\text{eq}} & (t > 0) \\ \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \hat{B} \right\rangle_{\text{eq}} & (t < 0) \end{cases} \end{aligned}$$

なお、途中で Heisenberg 方程式 (1.3.7) と応答関数の収束性を用いた。この表式を用いると、

$$\Phi_{BA}(-t) \equiv \int_0^\beta du \text{Tr} [\hat{A}(-i\hbar u) \hat{B}(-t) \hat{\rho}_{\text{eq}}] = \int_0^\beta du \text{Tr} [\hat{B}(-i\hbar(\beta - u)) \hat{A}(t) \hat{\rho}_{\text{eq}}] = \Phi_{AB}(t)$$

という時間反転でのふるまいがわかる。また、複素アドミッタンスについては、

$$\begin{aligned} \chi_{BA}(\omega) &= \int_0^\infty dt \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \frac{d\hat{B}}{dt} \right\rangle_{\text{eq}} e^{-i\omega t} \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[- \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \hat{B}(t) \right\rangle_{\text{eq}} e^{-i(\omega - i\delta)t} \right]_0^\infty - i\omega \int_0^\infty dt \int_0^\beta du \left\langle \hat{A}(-i\hbar u) \hat{B}(t) \right\rangle_{\text{eq}} e^{-i\omega t} \\ &= \Phi_{BA}(0) - i\omega \int_0^\infty dt \Phi_{BA}(t) e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

というように、現象論と同じ $\Phi_{BA}(t)$ との関係式が成り立つことが確認できる。

2) 被積分関数について u のべきで展開してから各項を積分すると、BCH 公式に一致することがわかる。

緩和時間

応答関数 $\phi_{BA}(t)$ は $t \rightarrow +\infty$ での収束性のために $e^{-\delta t}$ という収束因子が引き出せなければならない。この因子は、von Neumann 方程式に次のような項を導入することでも導くことができる：

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}(t)] - \frac{i\hbar}{\tau} [\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}_{\text{eq}}]$$

この von Neumann 方程式に従って線形応答の時間発展を求めると、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \delta \hat{\rho}_I(t) = -e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} F(t) - \frac{i\hbar}{\tau} \delta \hat{\rho}_I(t)$$

となることがわかる。Green 関数法でこの微分方程式を解くために、

$$\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) g(t-t') = \delta(t-t')$$

を因果律 $g(t-t') = 0 (t < t')$ を仮定して解くと、 $g(t-t') = e^{-t/\tau} \Theta(t-t')$ と求まるので、

$$\delta \hat{\rho}_I(t) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t'/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t'/\hbar} F(t') e^{-(t-t')/\tau}$$

とわかる。よって物理量の線形応答は、

$$\langle B(t) \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left\langle [\hat{B}_I(t-t'), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} e^{-(t-t')/\tau} F(t')$$

となり、 τ の導入により応答関数に $e^{-t/\tau}$ の因子がかかることがわかる。 $\tau \rightarrow \infty$ で von Neumann 方程式に導入した項は 0 に収束して影響を持たなくなるが、この極限での $e^{-t/\tau}$ の因子のふるまいは収束因子 $e^{-\delta t}$ そのものである。

$\phi_{BA}(t)$ の収束性自体は本来期待値を計算した結果現れるべきものであるが、周波数のカットオフとして上述した方法で現象論的に導入することもあり、この場合は τ は緩和時間と呼ばれる。

Onsager の相反定理

時間反転対称性がない量子系では、ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_0$ が複素共役変換 $\hat{\Theta}$ に対して不変に保たれない (1.3.6 項参照)。すなわち、 $\hat{\mathcal{H}}_0 \neq \hat{\Theta} \hat{\mathcal{H}}_0 \hat{\Theta}^{-1} = \hat{\mathcal{H}}_0^*$ になっている。この時間反転での前後でのハミルトニアンの違いは、複素アドミッタンスの上では

$$\begin{aligned} \chi_{BA}^*(\omega) &\equiv -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt' \left\langle \hat{\Theta}^{-1} [e^{i\hat{\mathcal{H}}_0^* t'/\hbar} \hat{B} e^{i\hat{\mathcal{H}}_0^* t'/\hbar}, \hat{A}] \hat{\Theta} \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t'} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \left\langle \hat{\Theta}^{-1} [e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} \hat{B}^* e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar}, \hat{A}^*] \hat{\Theta} \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \left\langle [\hat{B}^*(-t), \hat{A}^*] \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \left\langle [\hat{A}^*(t), \hat{B}^*] \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} = \chi_{A^*B^*}(\omega) \end{aligned}$$

という形で現れる³⁾。 \hat{A}, \hat{B} がともに熱平衡で期待値が 0 になる場合には⁴⁾、 A, B の時間反転に対するふるまいが不変に保たれるか符号が反転するかで表せるため、

$$\hat{A}^* = \xi_A \hat{A}, \quad \hat{B}^* = \xi_B \hat{B} \quad (\xi_{A,B} = \pm 1)$$

3) $\chi_{BA}^*(\omega)$ のアスタリスクは時間反転したダイナミクスの応答であることを表すために付したもので、 $\chi_{BA}(\omega)$ の複素共役 ($= \chi_{BA}(-\omega)$) を意味するものではない。

4) $\phi_{BA}(t)$ の導出過程で \hat{A} を熱平衡での期待値を差し引いて再定義直しても結果に影響はない。

で定義された $\xi_{A,B}$ を用いて上の結果を表すと、

$$\chi_{BA}^*(\omega) = \xi_A \xi_B \chi_{AB}(\omega)$$

となる。また、同様にして応答関数 $\phi_{BA}(t)$ と緩和関数 $\Phi_{BA}(t)$ についても

$$\phi_{BA}^*(t) = \xi_A \xi_B \phi_{AB}(t), \quad \Phi_{BA}^*(t) = \xi_A \xi_B \Phi_{AB}(t)$$

となることが示される。これらの関係式は Onsager の相反定理として知られ、時間反転に対して符号を変えるような外場を印加している系での交差応答に制約を課している。

揺動散逸定理

線形応答の現象論を熱力学と接続したことで、外場に共役な示量変数の線形応答の複素アドミッタンスの虚部が応答の散逸を特徴付けることを見た。量子論では外場 F との結合項に含まれる演算子 \hat{A} が外場に共役な示量変数の演算子になるため⁵⁾、 $\text{Im}\chi_{AA}(\omega)$ が散逸を特徴付けることになる。ここで、

$$\text{Im}\chi_{AA}(\omega) = -\text{Im}\tilde{G}_{BA}^R(\omega) = \frac{1}{2\hbar}(1 - e^{-\beta\hbar\omega})J_{AA}(\omega)$$

で結び付けられるスペクトル関数 $J_{AA}(\omega)$ は定義式 (2.5.8) より、

$$\begin{aligned} J_{AA}(\omega) &\equiv \frac{1}{\Xi_V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \left| \langle n | \hat{A} | m \rangle \right|^2 e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} e^{i\omega t} \\ &= \frac{1}{\Xi_V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_{n,m} \langle n | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} | m \rangle \langle m | \hat{A} | n \rangle e^{i\omega t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \hat{A}(t) \hat{A} \rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t} \end{aligned}$$

というように \hat{A} の自己相関関数の Fourier 変換になっている⁶⁾。すなわち、

$$\omega \text{Im}\chi_{AA}(\omega) = \frac{\omega}{2\hbar}(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \hat{A}(t) \hat{A} \rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t}$$

というように外場応答の散逸はその外場と共役な示量変数の自己相関でも特徴付けられている。この関係は揺動散逸定理として非平衡過程で広く成り立つことが知られている。

3.3 量子系の非線形応答

前節で線形応答理論を量子論的に再定式化したが、この定式化は外力と応答が比例関係にない非線形応答が、密度行列 $\hat{\rho}(t)$ の時間発展において $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ の高次項の寄与を取り入れていくことで記述

5) 示量性から \hat{A} は 1 体演算子に限られるため、 \hat{A} は交換子で特徴付けられる演算子である。よって、相関関数の議論で現れた ζ はここでは全て 1 にとっている。

6) 注目する応答 A がその熱平衡での期待値を差し引いて定義しなおした量であった場合には、スペクトル関数が正確には再定義前と後の両方の \hat{A} を含むことになるが、

$$\langle (\hat{A}(t) - \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}}) \hat{A} \rangle = \langle (\hat{A}(t) - \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}}) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}}) \rangle$$

であることから、再定義された A の自己相関関数の Fourier 変換としてスペクトル関数が与えられることがわかる。「揺動」はこのゆらぎ相関のことを指している。

できることを示している。そこでここでは $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ の 2 次の寄与 $\delta\hat{\rho}^{(2)}(t)$ について調べてみる。相互作用描像の von Neumann 方程式 (3.2.1) において $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ の 2 次の項を両辺比較すると、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \delta\hat{\rho}_I^{(2)}(t) = \hat{\mathcal{H}}_1(t) \delta\hat{\rho}_I^{(1)}(t) - \delta\hat{\rho}_I^{(1)}(t) \hat{\mathcal{H}}_1(t) = - [\hat{A}_I(t), \delta\hat{\rho}_I(t)] F(t)$$

を得る。ここで $\delta\hat{\rho}_I^{(1)}(t)$ は前項で考えた $\hat{\rho}_I(t)$ の変化における $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ の 1 次の寄与 $\delta\hat{\rho}_I(t)$ であり、その表式は既に求まっているので代入すると、

$$i\hbar \frac{d}{dt} \delta\hat{\rho}_I^{(2)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \left(\int_{-\infty}^t dt' [\hat{A}_I(t), [\hat{A}_I(t'), \hat{\rho}_{\text{eq}}]] F(t') \right) F(t)$$

を得て、 $\delta\hat{\rho}^{(2)}(t)$ が次のように求まる。

$$\delta\hat{\rho}^{(2)}(t) = \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} [\hat{A}_I(t_1), [\hat{A}_I(t_2), \hat{\rho}_{\text{eq}}]] e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} F(t_1) F(t_2)$$

物理量 \hat{B} の 2 次の応答 $\delta B^{(2)}(t)$ は $\langle B(t) \rangle = \text{Tr}[\hat{B}\hat{\rho}(t)]$ における $\delta\hat{\rho}^{(2)}(t)$ の寄与で与えられるので、

$$\begin{aligned} \delta B^{(2)}(t) &= \text{Tr}[\hat{B} \delta\hat{\rho}^{(2)}(t)] \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \text{Tr} \left\{ \hat{B} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} [\hat{A}_I(t_1), [\hat{A}_I(t_2), \hat{\rho}_{\text{eq}}]] e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar} \right\} F(t_1) F(t_2) \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \text{Tr} \left[\hat{B}_I(t) (\hat{A}_I(t_1) \hat{A}_I(t_2) \hat{\rho}_{\text{eq}} - \hat{A}_I(t_1) \hat{\rho}_{\text{eq}} \hat{A}_I(t_2) \right. \\ &\quad \left. - \hat{A}_I(t_2) \hat{\rho}_{\text{eq}} \hat{A}_I(t_1) + \hat{\rho}_{\text{eq}} \hat{A}_I(t_2) \hat{A}_I(t_1)) \right] F(t_1) F(t_2) \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \text{Tr} \left[(\hat{B}_I(t) \hat{A}_I(t_1) \hat{A}_I(t_2) - \hat{A}_I(t_2) \hat{B}_I(t) \hat{A}_I(t_1) \right. \\ &\quad \left. - \hat{A}_I(t_1) \hat{B}_I(t) \hat{A}_I(t_2) + \hat{A}_I(t_2) \hat{A}_I(t_1) \hat{B}_I(t)) \hat{\rho}_{\text{eq}} \right] F(t_1) F(t_2) \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \left\langle [[\hat{B}_I(t), \hat{A}_I(t_1)], \hat{A}_I(t_2)] \right\rangle_{\text{eq}} F(t_1) F(t_2) \end{aligned}$$

で与えられる (4 つ目の等号では、トレース演算の線形性と可換性を用いた)。2 つの時刻における撃力 $F(t) = \delta(t - t_0) + \delta(t - t'_0)$ に対する応答として、次式で 2 次の非線形応答関数 $\phi^{(2)}(t, t_0, t'_0)$ を定義する。

$$\begin{aligned} \phi^{(2)}(t, t_0, t'_0) &\equiv \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \left\langle [[\hat{B}(t), \hat{A}(t_1)], \hat{A}(t_2)] \right\rangle_{\text{eq}} \delta(t_1 - t_0) \delta(t_2 - t'_0) \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \left\langle [[\hat{B}(t), \hat{A}(t_1)], \hat{A}(t'_0)] \right\rangle_{\text{eq}} \delta(t_1 - t_0) \Theta(t_1 - t'_0) \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \left\langle [e^{i\hat{\mathcal{H}}_0(t_0 - t'_0)/\hbar} [\hat{B}(t - t_0), \hat{A}] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0(t_0 - t'_0)/\hbar}, \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} \Theta(t - t_0) \Theta(t_0 - t'_0) \end{aligned}$$

周波数ごとの応答としては、

$$\begin{aligned} \delta B^{(2)}(t) &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^\infty dt_1 \int_{-\infty}^{t-t_1} dt_2 \left\langle [[\hat{B}_I(t), \hat{A}_I(t-t_1)], \hat{A}_I(t_2)] \right\rangle_{\text{eq}} F(t-t_1) F(t_2) \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \left\langle [[\hat{B}_I(t), \hat{A}_I(t-t_1)], \hat{A}_I(t-t_1-t_2)] \right\rangle_{\text{eq}} F(t-t_1) F(t-t_1-t_2) \\ &= \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \left\langle [e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t_2/\hbar} [\hat{B}_I(t_1), \hat{A}] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t_2/\hbar}, \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} F(t-t_1) F(t-t_1-t_2) \end{aligned}$$

に $F(t)$ の Fourier 変換を代入するとともに両辺ごと Fourier 変換を施すことで、

$$\begin{aligned}
\delta \tilde{B}^{(2)}(\omega) &= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \\
&\quad \times \left\langle \left[e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t_2/\hbar} \left[\hat{B}_I(t_1), \hat{A} \right] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t_2/\hbar}, \hat{A} \right] \right\rangle_{\text{eq}} \tilde{F}(\omega_1) \tilde{F}(\omega_2) e^{i[(\omega - \omega_1 - \omega_2)t - (\omega_1 + \omega_2)t_1 - \omega_2 t_2]} \\
&= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \tilde{F}(\omega_1) \tilde{F}(\omega_2) \delta(\omega - \omega_1 - \omega_2) \\
&\quad \times \int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt_2 \left\langle \left[e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t_2/\hbar} \left[\hat{B}_I(t_1), \hat{A} \right] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t_2/\hbar}, \hat{A} \right] \right\rangle_{\text{eq}} e^{-i[(\omega_1 + \omega_2)t_1 + \omega_2 t_2]}
\end{aligned}$$

というように2つの周波数への依存性が現れる。また応答の周波数 ω は外力の周波数 $\omega_1 + \omega_2$ の和に制限されることもわかる。現実的な $F(t)$ は必ず実関数であるため周波数 ω の外力であったとしても Fourier 成分は $\tilde{F}(\omega)$ と $\tilde{F}(-\omega)$ の2点で値をもつ。すなわち単色波の2次応答では 2ω で振動する成分と定常的な成分が現れる。線形応答における複素アドミッタンスにあたる量として、次を定義しておく。

$$\chi^{(2)}(\omega_1, \omega_2) \equiv \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt_2 \left\langle \left[e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t_2/\hbar} \left[\hat{B}(t_1), \hat{A} \right] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t_2/\hbar}, \hat{A} \right] \right\rangle_{\text{eq}} e^{-i[(\omega_1 + \omega_2)t_1 + \omega_2 t_2]}$$

第II部 量子多体系各論

第4章 電子相関の一般論

電磁場と結合した電子多体系について、2.6.5 項で見た処方にしたがって電磁場を介して生じた相互作用項を書き下すと、次のように表されることがわかる。

$$\begin{aligned}\hat{V} &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \left(\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}) \right) \left(\sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{x}') \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow} \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &\quad \times \left[\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{x}') \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}) + \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{x}') \right]\end{aligned}$$

この相互作用の形式は、2 つの荷電粒子間の Coulomb 相互作用を 2 体演算子の構成法 (1.3.4 項参照) で多粒子系の量子論に拡張したものと、自己相互作用項

$$\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}')$$

を除いて確かに一致している。この自己相互作用項は発散しているが、正電荷分布を系全体が電気的に中性になるよう背景に配置することで有限に抑えることができる (電荷中性条件)。以下ではこの条件は常に満たされているとする。

(1.3.4) を用いて、1 粒子の運動量固有状態 $|\mathbf{p}, \sigma\rangle$ に対応する生成消滅演算子 $\hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger$ で上記の相互作用項を表すと、次のようになる。

$$\begin{aligned}\hat{V} &= \frac{1}{2V} \frac{e^2 \hbar^2}{\epsilon_0} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}} \frac{1}{q^2} \left(\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} \right) \left(\sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p}',\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'-\mathbf{q},\sigma'} \right) \\ &= \frac{1}{2V} \frac{e^2 \hbar^2}{\epsilon_0} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q^2} \left[\sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \sigma, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}',\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{p}'-\mathbf{q},\sigma'} + \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma} \right]\end{aligned}$$

最右辺第 2 項が自己相互作用項である。

4.1 相互作用の遮蔽と集団励起

4.2 個別励起のくりこみ：Fermi 流体

4.3 超伝導相：BCS 基底状態

4.4 朝永-Luttinger 流体

第 5 章 固体結晶中の電子多体系

本章では、常に以下の 2 点を仮定する。

- 電子と原子核イオン、および電子同士の相互作用は電磁場が媒介するが、その変化は電子運動の時間スケールに比べて非常に早い。よって各相互作用は電子・イオンの位置にのみ依存したポテンシャルで表せる。
- 格子点上の原子核イオンは電子に比べて非常に重く、運動の時間スケールが長いため、イオンは格子点で静止しているとみなす。

5.1 固体電子の 1 粒子状態とバンド描像

まず磁場のない 3 次元固体結晶中の電子のハミルトニアンを、電磁場のダイナミクスおよび電子間相互作用を無視して書き下す：Coulomb ゲージで固定された Schrödinger 場の経路積分は、

$$\Xi_V = \int_{\nabla \cdot \mathbf{A}=0, \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} + \rho=0} \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \Delta_C \exp \left[- \int du \int_V d^3 \mathbf{x} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \left(\bar{\Psi}_\sigma \partial_u \Psi_\sigma + \frac{1}{2m} |(-i\hbar \nabla + e\mathbf{A}) \Psi_\sigma|^2 \right) \right]$$

で与えられる (1.5.2 項および B.3 節参照)。ただし Δ_C は Faddeev-Popov 行列式

$$\Delta_C \equiv \prod_t \det \{ \nabla \cdot \mathbf{A}, \nabla' \cdot \boldsymbol{\pi} + \rho \} = \prod_t -\det [\nabla^2 \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')]]$$

であり、 $\Psi_\sigma, \bar{\Psi}_\sigma$ に依存しない定数であるので以降無視する。Gauss 固定条件は

$$\int \mathcal{D}V \exp \left[- \int du \int_V d^3 \mathbf{x} V(\mathbf{x}) (\nabla \cdot \boldsymbol{\pi} + \rho) \right]$$

という経路積分を挿入することで未定乗数法の要領で外すことができ、 Ξ_V に実行すると

$$\begin{aligned} \Xi_V = & \int_{\nabla \cdot \mathbf{A}=0} \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \mathcal{D}V \\ & \times \exp \left\{ - \int du \int_V d^3 \mathbf{x} \left[\sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \left(\bar{\Psi}_\sigma \partial_u \Psi_\sigma + \frac{1}{2m} |(-i\hbar \nabla + e\mathbf{A}) \Psi_\sigma|^2 + V \bar{\Psi}_\sigma \Psi_\sigma \right) + V \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} \right] \right\} \end{aligned}$$

となる。すると今度は $V(u, \mathbf{x})$ に関する経路積分が (電磁場の運動項と合わせることで)

$$\boldsymbol{\pi} = \varepsilon_0 \left(\nabla V + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)$$

を課す拘束条件と見るができるようになる。

$V(u, \mathbf{x})$ の導入により拘束条件が生まれたため、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(u, \mathbf{x})$ と $V(u, \mathbf{x})$ の間ではゲージ自由度が復活している。このため、残ったゲージ固定条件 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ と磁場なし条件 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{0}$ により空間一様な関数形に限られる $\mathbf{A}(u, \mathbf{x})$ に電場の空間一様な成分を含めるか

(速度ゲージ)、逆に $V(u, \mathbf{x})$ に全ての電場成分を収めるか (長さゲージ) というゲージ固定条件をさらに課す必要がある。ここでは速度ゲージを採用する。

以上の経路積分での考察から、演算子形式での固体電子のハミルトニアンは

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_V d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) \left\{ \frac{1}{2m} [-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(t)]^2 + V(t, \mathbf{x}) \right\} \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}) \quad (5.1.1)$$

となることがわかる。以降は電磁場が完全に静的であるとし、 $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ とおく。このとき、 $V(\mathbf{x})$ は原子核イオンが形成するポテンシャルそのものに一致する。

格子上に配列した原子核イオンが形成するポテンシャル $V(\mathbf{x})$ は、

$$V(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{x}) \quad (\mathbf{R} \equiv n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, n_i \in \mathbb{Z})$$

という周期関数で表される。 \mathbf{R} は格子ベクトル、 $\mathbf{a}_i (i = 1, 2, 3)$ は基本格子ベクトルと呼ばれる。基本格子ベクトルに対しては

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

を満たす基本逆格子ベクトル $\mathbf{b}_i (i = 1, 2, 3)$ を次式のように与えることができる。

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}$$

\mathbf{b}_i から定義される逆格子ベクトル $\mathbf{G} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3 (m_i \in \mathbb{Z})$ は、任意の $n_i, m_i (i = 1, 2, 3)$ に対して

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(n_1m_1 + n_2m_2 + n_3m_3)$$

を満たす。この性質により、周期関数 $V(\mathbf{x})$ の Fourier 級数展開は逆格子ベクトル \mathbf{G} を用いて次のように表すことができる。

$$V(\mathbf{x}) = \sum_{m_1, m_2, m_3} \tilde{V}_{(m_1, m_2, m_3)} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}}, \quad \tilde{V}_{(m_1, m_2, m_3)} = \frac{1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \int_{\text{u.c.}} d^3\mathbf{x} V(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} \quad (5.1.2)$$

ただし u.c. は $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ が 3 辺をなす平行六面体内での積分を表し、この領域を基本格子という。

5.1.1 Bloch 状態

$V(\mathbf{x})$ の Fourier 級数展開 (5.1.2) と $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ の Fourier 級数展開 (1.3.4) を (5.1.1) に用いると、

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_V \frac{d^3\mathbf{x}}{V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \sum_{m_1, m_2, m_3} \tilde{V}_{(m_1, m_2, m_3)} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} \right) e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \cdot \mathbf{x} / \hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}', \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma} \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} + \sum_{m_1, m_2, m_3} \tilde{V}_{(m_1, m_2, m_3)} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'+\hbar\mathbf{G}} \right) \hat{a}_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}', \sigma} \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m_1, m_2, m_3} \sum_{m'_1, m'_2, m'_3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} \right) \\ &\quad \times \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}), \sigma}^\dagger \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}'), \sigma} \end{aligned}$$

とわかる。3 つ目の等号では、 \mathbf{p}, \mathbf{p}' が $\hbar\mathbf{G}$ だけずれる項のみ和の中で値をもつことに注目して、

$$\mathbf{p} \equiv \hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G}), \quad \mathbf{p}' \equiv \hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G}')$$

$$(\mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3, \mathbf{G}' = m'_1 \mathbf{b}_1 + m'_2 \mathbf{b}_2 + m'_3 \mathbf{b}_3)$$

というように和を走らせる添字を分離している¹⁾。 \mathbf{k} は系の体積 $V = L^3$ に対して

$$\mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{L} n_x, \frac{2\pi}{L} n_y, \frac{2\pi}{L} n_z \right)$$

を満たす波数で、その和の範囲は $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ で 3 辺が指定される平行六面体内 (基本逆格子) にとるのが自然だが、実用上 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 周りでの逆格子の Wigner-Seitz セルにとることがほとんどである。後者は (第 1) Brillouin ゾーンとも呼ばれ、体積は基本逆格子に等しい。よって Brillouin ゾーン内の \mathbf{k} の数は

$$\frac{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} (\equiv N)$$

というように系に含まれる基本格子数に等しい。

$\tilde{V}_{(m_1, m_2, m_3)}$ の定義から、

$$\tilde{V}_{(-m_1, -m_2, -m_3)} = \frac{1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \int_{\text{u.c.}} d^3 \mathbf{x} V(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} = \tilde{V}_{(m_1, m_2, m_3)}^*$$

であるので、

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + \tilde{V}_{(m_1 - m'_1, m_2 - m'_2, m_3 - m'_3)}$$

は、 $\mathbf{G} = (m_1, m_2, m_3)$ を行、 $\mathbf{G}' = (m'_1, m'_2, m'_3)$ を列のそれぞれ添字だと見れば Hermite 行列になっていて、スペクトル分解として

$$\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + \tilde{V}_{(m_1 - m'_1, m_2 - m'_2, m_3 - m'_3)} = \sum_n \epsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}'}^* \quad (5.1.3)$$

が成り立つ。このとき固有値 $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ は実数である。この分解を用いるとハミルトニアンが

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{m_1, m_2, m_3} \sum_{m'_1, m'_2, m'_3} \left(\sum_n \epsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}'}^* \right) \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}), \sigma}^\dagger \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}'), \sigma} \\ &\equiv \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k}, \sigma}) \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k}, \sigma}) \end{aligned}$$

と表せることがわかり、新たな生成消滅演算子

$$\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k}, \sigma}) \equiv \sum_{m_1, m_2, m_3} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}}^* \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}), \sigma}, \quad \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k}, \sigma}) \equiv \sum_{m_1, m_2, m_3} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}} \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}), \sigma}^\dagger \quad (5.1.4)$$

に対応する 1 粒子状態 $|\varphi_{n\mathbf{k}, \sigma}\rangle$ が系の 1 粒子固有状態になるとわかる。この 1 粒子状態は Bloch 状態と呼ばれる。

$u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}}$ は固有ベクトルの第 \mathbf{G} 成分として、次の直交関係を満たす。

$$\sum_{m_1, m_2, m_3} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k}, \mathbf{G}}^* = \delta_{nn'}$$

1) 等号の前後で $\mathbf{G} \rightarrow \mathbf{G} - \mathbf{G}'$ で取り直していることに注意。

この直交性を $\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$ に用いると、

$$\begin{aligned}\{\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma})\} &= \sum_{m_1, m_2, m_3} \sum_{m'_1, m'_2, m'_3} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'}^* \left\{ \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}'+\mathbf{G}'),\sigma}, \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}^\dagger \right\} \\ &= \sum_{m_1, m_2, m_3} \sum_{m'_1, m'_2, m'_3} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \quad \left(\because \left\{ \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{p}',\sigma}^\dagger \right\} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \right) \\ &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{nn'}\end{aligned}$$

というように、異なる n の間での Bloch 状態は \mathbf{k} が同じでも直交することがわかる。このように固体結晶中の電子は Brillouin ゾーン内で互いに直交する複数のエネルギー分散をもつ。各分散関係はエネルギー準位として帯をなすことから、固体結晶中の電子のエネルギー構造はバンド構造とも呼ばれる。

ポテンシャルがない自由電子系の場合にも Bloch 状態が

$$\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) = \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}, \quad \epsilon_{n\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \quad \left(\begin{array}{l} n = (m_1, m_2, m_3) \\ \mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \end{array} \right)$$

というように定義できるが、Brillouin ゾーン端や $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ では異なるバンドに属する Bloch 状態が縮退している。ポテンシャルがある場合にはこの縮退が解けることが RS 摂動論 (2.1 節参照) から予想されるため、一般にバンド構造にはエネルギーギャップが存在している。

種々の演算子の Bloch 基底表示

$u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}$ はまた固有ベクトルの完全性から n の和について

$$\sum_n u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}'}^* = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$$

が成り立つので、(5.1.4) は $\hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger$ について解くことができる。

$$\hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma} = \sum_n u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \quad \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}^\dagger = \sum_n u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$$

この表示を用いると、運動量演算子

$$\hat{\mathbf{p}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}$$

の $\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$ による表示

$$\hat{\mathbf{p}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{G}} \hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G}) u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k},\sigma})$$

が得られるが、 V が十分大きいことから \mathbf{k} を連続変数とみなして、 \mathbf{k} での微分ができるとすると、この表式は

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{m}{\hbar} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \left[\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} + (\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \right] \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k},\sigma})$$

と表せる：(5.1.3) に $u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}$ の n と \mathbf{G} についての直交性を用いると

$$\epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*$$

とわかるため、両辺 \mathbf{k} で微分すると、

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} &= \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*)\end{aligned}$$

が導かれる。右辺の第 1 項以外は、また (5.1.3) より

$$\begin{cases} \frac{\hbar}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}'} = \epsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} \\ \frac{\hbar}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m'_1-m_1, m'_2-m_2, m'_3-m_3)} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}'}^* = \epsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \end{cases}$$

が成り立つため、

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*) &+ \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*) \\ &= \sum_{\mathbf{G}} [\epsilon_{n\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}}) u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \epsilon_{n'\mathbf{k}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*] \\ &= (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \epsilon_{n\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \right) \\ &= (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*\end{aligned}$$

とまとめられる。よって右辺の第 1 項以外を左辺に移項することで望みの表式が得られる。

また、 $\hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}$ と $\hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{x})$ は (1.3.4) のように Fourier 変換の関係にあったので、 $\Psi_{\sigma}(\mathbf{x})$, $\hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x})$ についても $\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$, $\hat{a}^{\dagger}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$ による表示が得られる。

$$\begin{cases} \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{x}) = \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{m_1, m_2, m_3} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} \right] \\ \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) = \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{a}^{\dagger}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{m_1, m_2, m_3} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \right] \end{cases} \quad (5.1.5)$$

この表示を用いれば、(1.3.3) より位置演算子 $\hat{\mathbf{x}}$ が

$$\hat{\mathbf{x}} = \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \sum_{n, n'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \text{BZ}} \hat{a}^{\dagger}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma}) \left[\sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}}{V} \mathbf{x} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}') \cdot \mathbf{x}} \right]$$

と表されるとわかる。 \mathbf{k} を連続変数とみて \mathbf{k} での微分ができるとすると上式は、

$$\hat{\mathbf{x}} = \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \sum_{n, n'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \text{BZ}} \hat{a}^{\dagger}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma}) \left[\sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}}{V} i \nabla_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}') \cdot \mathbf{x}} \right]$$

と表せて、さらに \mathbf{k} の和を積分とみなして部分積分の要領で $\nabla_{\mathbf{k}}$ を \mathbf{x} の積分の外に移すと、

$$\begin{aligned} &-i \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \sum_{n, n'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \text{BZ}} \nabla_{\mathbf{k}} [\hat{a}^{\dagger}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})] \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma}) \left[\sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}}{V} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}') \cdot \mathbf{x}} \right] \\ &+ \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \sum_{n, n'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \text{BZ}} \hat{a}^{\dagger}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma}) \left[-i \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \int_V \frac{d^3 \mathbf{x}}{V} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}') \cdot \mathbf{x}} \right] \end{aligned}$$

という2つの項が生じる。どちらの項も \mathbf{x} の積分で $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{G\mathbf{G}'}$ が生じ、さらに第1項は $u_{n\mathbf{k},G}$ の直交性で $\delta_{nn'}$ も生じるので、最終的に次のようにまとめられる²⁾。

$$\hat{\mathbf{x}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \left(i \nabla_{\mathbf{k}} \delta_{nn'} - i \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},G} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},G}^* \right) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k},\sigma})$$

$\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}$ の表式に共通して現れた

$$\mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) \equiv -i \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},G} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},G}^*$$

という因子には、 $u_{n\mathbf{k},G}$ が固有ベクトルとして位相の自由度をもつことからファイバー束の構造を導入することができて、2.4節で見たような位相不変量を定義することができる (詳しくは第13章を参照)。

5.1.2 Wannier 状態

以降は Bloch 状態の生成消滅演算子を $\hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma} = \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$, $\hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$ と表すことにする。

$\hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ は定義域である Brillouin ゾーンにおいて周期境界条件を満たしているので、離散 Fourier 変換を $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ を用いて

$$\hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}, \quad \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger$$

で定義できる。生成消滅演算子 $\hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R}), \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R})$ に対応する1粒子状態 $|w_{n,\sigma}(\mathbf{R})\rangle$ を Wannier 状態という。

$\hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R})$ と $\hat{c}_{n',\sigma}^\dagger(\mathbf{R}')$ の反交換関係は、Bloch 状態の反交換関係から、

$$\left\{ \hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R}), \hat{c}_{n',\sigma}^\dagger(\mathbf{R}') \right\} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \text{BZ}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}')} \left\{ \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{n'\mathbf{k}',\sigma}^\dagger \right\} = \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$$

というように与えられるため、異なるバンド n および格子点 \mathbf{R} に依存する Wannier 状態は直交するとわかる。このことから Wannier 状態は各バンドで格子点周りに局在するような1粒子状態を表していると考えられる。

$\hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ によるハミルトニアン の表現

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}$$

に $\hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R}), \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R})$ の離散 Fourier 逆変換

$$\hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R} \in V} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R}), \quad \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R} \in V} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \quad (5.1.6)$$

2) $\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$ の Heisenberg 演算子が $e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} = \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) e^{-iE_{n\mathbf{k}} t/\hbar}$ となることを用いると、 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}$ の Heisenberg 演算子の間に次が成り立つことが確認できる。

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{x}}(t) = \frac{1}{m} \hat{\mathbf{p}}(t)$$

を用いると、

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \frac{1}{N} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}' \in V} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} (\epsilon_{n\mathbf{k}} - \mu) \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R}') \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{R} \in V} \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \left[\sum_{\boldsymbol{\delta}} \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \right) \hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}) \right]\end{aligned}$$

という表式が得られる ($\boldsymbol{\delta} = d_1 \mathbf{a}_1 + d_2 \mathbf{a}_2 + d_3 \mathbf{a}_3$, $d_1, d_2, d_3 \in \mathbb{Z}$)。 $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ が \mathbf{k} に依存しないときは、

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{R} \in V} \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \left[\epsilon_n \sum_{\boldsymbol{\delta}} \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} \right) \hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}) \right] \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{R} \in V} \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \left(\epsilon_n \sum_{\boldsymbol{\delta}} \delta_{\boldsymbol{\delta}0} \hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}) \right) \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{R} \in V} \epsilon_n \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R})\end{aligned}$$

というように各格子点に局在した状態が系の 1 粒子固有状態になり、電子が完全にポテンシャルに束縛されて原子系を形成していることを意味している³⁾。 $|\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}\rangle$ と同様に $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ も \mathbf{k} に関して周期境界条件を満たしているため、

$$t_n(\boldsymbol{\delta}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} \epsilon_{n\mathbf{k}}$$

はその離散 Fourier 成分になっているが、この量は電子が $\boldsymbol{\delta}$ 離れた格子点に飛び移る遷移確率に関係している⁴⁾。特に、最近接格子点のみに等確率で遷移が許されるような系

$$t_n(\boldsymbol{\delta}) = \begin{cases} \epsilon_n & (\boldsymbol{\delta} = \mathbf{0}) \\ t_n & (\boldsymbol{\delta} = \pm \mathbf{a}_j, j = 1, 2, 3) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

では、離散 Fourier 逆変換より

$$\epsilon_{n\mathbf{k}} = \epsilon_n + t_n \sum_j \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_j)$$

というようにエネルギー分散が \cos で表される。このような場合を強束縛模型という。

Bloch 基底表示の場の演算子 (5.1.1) に (5.1.5) を代入すれば、Wannier 表示の場の演算子が $\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x})$ が次のように得られる。

$$\begin{cases} \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \sum_{\mathbf{R} \in V} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{c}_{n,\sigma}(\mathbf{R}) \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{G}'} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{G} + \mathbf{G}') \cdot \mathbf{x}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}'} \right] \\ \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{m_1, m_2, m_3} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \right] \end{cases}$$

3) $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ を定義したスペクトル分解 (5.1.3) の左辺において \tilde{V} が大きくなると \mathbf{k} の寄与が小さくなることから、ポテンシャル振幅が大きいほど $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ の \mathbf{k} 依存性が弱まるとわかるので、確かに物理的描像にも符合する。

4) $t_n(\boldsymbol{\delta})$ を含む項を摂動として Fermi の黄金律 (2.3.3) を考えると、 $\boldsymbol{\delta}$ 離れた格子間での遷移率が $w(\boldsymbol{\delta}) = 2\pi |t_n(\boldsymbol{\delta})|^2 / \hbar$ で与えられることがわかる。

種々の演算子の Wannier 基底表示

位置・運動量演算子

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{x} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger [i\nabla_{\mathbf{k}} \delta_{nn'} + \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k})] \hat{a}_{n'\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{p} = \frac{m}{\hbar} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} [\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} + i(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k})] \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{n'\mathbf{k},\sigma} \end{array} \right.$$

を $c_{n,\sigma}(\mathbf{R})$, $c_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R})$ で表すことを考える。(5.1.5) を代入すると、

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{x} = \frac{1}{N} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} [\mathbf{R}' \delta_{nn'} + \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k})] \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \hat{c}_{n',\sigma}(\mathbf{R}') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \\ \hat{p} = \frac{1}{N} \frac{m}{\hbar} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} [\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} + i(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k})] \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \hat{c}_{n',\sigma}(\mathbf{R}') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \end{array} \right.$$

となる。

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} = \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$$

となることから、 $\boldsymbol{\delta} = \mathbf{R}' - \mathbf{R}$ において離散 Fourier 変換

$$\theta_{nn'}(\boldsymbol{\delta}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}},$$

を定義すると、 \hat{x} に対しては次の表式が得られる。

$$\hat{x} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}} [\mathbf{R} \delta_{nn'} \delta_{\boldsymbol{\delta} \mathbf{0}} + \theta_{nn'}(\boldsymbol{\delta})] \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \hat{c}_{n',\sigma}(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}) \quad (5.1.7)$$

Wannier 状態を 1 粒子状態の基底にとって表した位置演算子 (5.1.6) は、各 Wannier 状態が対応する格子点の位置ベクトルからなる部分とそれ以外に分かれていることが見て取れる。このうち後者は原子核ポテンシャル中の平衡位置からの電子のずれにあたると考えられて、電子系での (電気) 分極の直観的定義に沿うものになっている。よって固体結晶中では巨視的分極の演算子を、

$$\hat{P} = -e \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}} \theta_{nn'}(\boldsymbol{\delta}) \hat{c}_{n,\sigma}^\dagger(\mathbf{R}) \hat{c}_{n',\sigma}(\mathbf{R} + \boldsymbol{\delta}) = -e \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{n'\mathbf{k},\sigma}$$

で定義できることがわかる (2 つ目の等号は Bloch 基底から Wannier 基底に表示を移す過程から明らか)。

5.2 固体結晶中の電子相関

5.3 不純物ポテンシャルの効果

第 6 章 格子上的スピン多体系

6.1 固体結晶中の磁性イオン

6.1.1 多電子原子系の磁気モーメント

6.1.2 交換相互作用

6.1.3 スピン軌道相互作用

6.2 スピン波近似とマグノン

6.3 1 次元スピン鎖の厳密な結果

6.4 フラストレート系と量子スピン液体

第 7 章 格子振動の量子論

第 8 章 電磁場の量子論

第III部 多体系間の相互作用

第 9 章 電子-格子相互作用

第 10 章 固体結晶の光学応答

10.1 固体電子の光学応答

4 章で固体電子のハミルトニアン (5.1.1) を扱った際には $V(t, \mathbf{x})$ を完全に静的なものにとり $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ とおいていた。 $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$ の場合には空間一様な電場と結合した電子系を考えることになる (引き続き磁場なし条件は課すため \mathbf{A} の空間変調は考えない)。 (5.1.1) の $\hat{H}_0(\mathbf{A})$ を \mathbf{A} で微分すると、

$$\frac{\partial \hat{H}_0}{\partial \mathbf{A}} = \frac{e}{m} \sum_{\sigma} \int_V d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{e}{m} \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{m} \hat{N} \mathbf{A}$$

でなることから、 $\hat{H}_0(\mathbf{A}) = \hat{H}_0 + \frac{e}{m} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \frac{e^2}{2m} \hat{N} \mathbf{A}^2$ であることがわかる。 よって直ちに $\hat{H}_0(\mathbf{A})$ の Bloch 基底表示は次のようになるとわかる。

$$\begin{aligned} \hat{H}_0(\mathbf{A}) = & \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \left(\epsilon_{n\mathbf{k}} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right) \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma} \\ & + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \cdot \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} [\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} + i(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k})] \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{n'\mathbf{k},\sigma} \end{aligned}$$

また、ゲージ不変な電流演算子として次を得る (B.3 節参照)。

$$\hat{\mathbf{J}} \equiv -\frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \left[\left(\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} + \frac{e\hbar}{m} \mathbf{A} \right) \delta_{nn'} + i(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) \right] \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{n'\mathbf{k},\sigma}$$

この内 \mathbf{A} に依存しない項を常磁性電流 $\hat{\mathbf{J}}_{\text{para}}$ 、 \mathbf{A} の 1 次の項を反磁性電流 $\hat{\mathbf{J}}_{\text{dia}}$ と呼んで区別する：

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_{\text{para}} & \equiv -\frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} [\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} + i(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k})] \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{n'\mathbf{k},\sigma} \left(= -\frac{e}{m} \hat{\mathbf{p}} \right), \\ \hat{\mathbf{J}}_{\text{dia}} & \equiv -\frac{e^2}{m} \mathbf{A} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma} \end{aligned}$$

電流演算子を得たため、固体電子系の電流応答を考えることができる。 \mathbf{A} の 1 次の応答は、外場 $\delta \hat{H}(t) = -\hat{\mathbf{J}}_{\text{para}} \cdot \mathbf{A}$ に対する $\hat{\mathbf{J}}_{\text{para}}$ の線形応答 (3.2 節参照) に加えて $\hat{\mathbf{J}}_{\text{dia}}$ の平衡状態での期待値も含まれ、

$$\mathbf{J}^{(1)}(t) = -\frac{1}{i\hbar} \sum_{i=x,y,z} \int_{-\infty}^t dt' \left\langle \left[\hat{\mathbf{J}}_{\text{para}}(t), \hat{J}_{\text{para}}^i(t') \right] \right\rangle A^i(t') + \left\langle \hat{\mathbf{J}}_{\text{dia}}(t) \right\rangle$$

で与えられる。 $\hat{\mathbf{J}}_{\text{dia}}$ の平衡状態での期待値は、

$$\left\langle \hat{\mathbf{J}}_{\text{dia}}(t) \right\rangle = -\frac{e^2}{m} \left\langle \hat{N} \right\rangle \mathbf{A}(t) = -\frac{2e^2}{m} \mathbf{A}(t) \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n\mathbf{k}})$$

で与えられるので ($f_{\beta,\mu}(\epsilon) \equiv [e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1]^{-1}$ は Fermi-Dirac 分布関数)、この項の寄与は外場に追従して流れる電流にあたる。 $\mathbf{J}^{(1)}(t)$ 全体に時間についての Fourier 変換を行うと、

$$\tilde{\mathbf{J}}^{(1)}(\omega) = -\sum_{i=x,y,z} \tilde{A}^i(\omega) \left[\frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} dt \left\langle \left[\hat{\mathbf{J}}_{\text{para}}(t), \hat{J}_{\text{para}}^i(t) \right] \right\rangle e^{i\omega t} \right] + \frac{e^2}{m} \left\langle \hat{N} \right\rangle \tilde{\mathbf{A}}(\omega)$$

となる。相関関数の部分は、虚時間形式で対応するものを次のように求めることができる（詳しくは 2.5.4 項を参照）。

$$\begin{aligned}
\Pi^i(i\tilde{\omega}_l) &\equiv - \int_0^\beta du \left\langle \mathcal{T} \left[\hat{\mathbf{J}}_{\text{para}}(-i\hbar u), \hat{J}_{\text{para}}^i \right] \right\rangle e^{i\tilde{\omega}_l u} \\
&= \frac{2e^2}{\beta\hbar^2} \left[\sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{l'} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \frac{\partial \epsilon_{n\mathbf{k}}}{\partial k_i} \frac{1}{i\tilde{\omega}_{l'} - (\epsilon_{n\mathbf{k}} - \mu)} \frac{1}{i\tilde{\omega}_{l+l'} - (\epsilon_{n\mathbf{k}} - \mu)} \right. \\
&\quad \left. - \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{l'} (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}})^2 \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) a_{n'n}^i(\mathbf{k}) \frac{1}{i\tilde{\omega}_{l'} - (\epsilon_{n\mathbf{k}} - \mu)} \frac{1}{i\tilde{\omega}_{l+l'} - (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \mu)} \right] \\
&= - \frac{2e^2}{\hbar^2} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \frac{(\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}})^2 \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) a_{n'n}^i(\mathbf{k})}{i\tilde{\omega}_l - (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}})} [f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n\mathbf{k}}) - f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n'\mathbf{k}})]
\end{aligned}$$

よって、解析接続 $i\tilde{\omega}_l \rightarrow \hbar\omega + i\delta$ により、

$$\begin{aligned}
\Pi^i(\omega) &\equiv \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \left\langle \left[\hat{\mathbf{J}}_{\text{para}}(t), \hat{J}_{\text{para}}^i \right] \right\rangle e^{i\omega t} \\
&= - \frac{2e^2}{\hbar^2} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \frac{(\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}})^2 \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) a_{n'n}^i(\mathbf{k})}{\hbar\omega - (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}}) + i\delta} [f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n\mathbf{k}}) - f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n'\mathbf{k}})]
\end{aligned}$$

がわかるので、 $\tilde{\mathbf{J}}^{(1)}(\omega)$ 全体の表式は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{J}}^{(1)}(\omega) &= \frac{2e^2}{\hbar^2} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \frac{(\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}})^2 \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) [\mathbf{a}_{n'n}(\mathbf{k}) \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\omega)]}{\hbar\omega - (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}}) + i\delta} [f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n\mathbf{k}}) - f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n'\mathbf{k}})] \\
&\quad - \frac{2e^2}{m} \tilde{\mathbf{A}}(\omega) \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n\mathbf{k}}) \quad (10.1.1)
\end{aligned}$$

10.1.1 光学伝導度

光学伝導度 $\sigma(\omega)$ は一般に 2 階テンソルで、 $\tilde{\mathbf{J}}(\omega) = \sigma(\omega) \tilde{\mathbf{E}}(\omega)$ で定義されている。よって、実時間表示では次式を満たす（因果律に注意）。

$$\mathbf{J}(t) = \int_{-\infty}^t dt' \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sigma(\omega) e^{-i\omega(t-t')} \right] \mathbf{E}(t')$$

今、系に印加する電場は $\mathbf{E}(t) = -d\mathbf{A}/dt$ で与えられるので¹⁾、これを上式に代入して $\mathbf{J}(t)$ を $\mathbf{A}(t)$ に対する応答として表すと、

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}(t) &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sigma(\omega) e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega t'} \frac{d}{dt'} \mathbf{A}(t') \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sigma(\omega) e^{-i\omega t} \left(\left[\mathbf{A}(t') e^{i\omega t'} \right]_{-\infty}^t - \int_{-\infty}^t dt' \mathbf{A}(t') \frac{d}{dt'} e^{i\omega t'} \right) \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sigma(\omega) e^{-i\omega t} \left(\mathbf{A}(t) e^{i\omega t} - i\omega \int_0^\infty dt' \mathbf{A}(t-t') e^{i\omega(t-t')} \right) \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sigma(\omega) \left(\mathbf{A}(t) - i\omega \int_0^\infty dt' \mathbf{A}(t-t') e^{-i\omega t'} \right)
\end{aligned}$$

1) 速度ゲージでは $\mathbf{A}(t)$ のみが電場の時間依存成分を担っているため。

となり、周波数表示では次式のようになる。

$$\begin{aligned}
\tilde{J}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} i\omega' \sigma(\omega') \int_0^{\infty} dt \tilde{A}(\omega) e^{i\omega t} e^{-i\omega' t} - \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sigma(\omega') \right] \tilde{A}(\omega) \\
&= \left[\int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} i\omega' \sigma(\omega') e^{-i\omega' t} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sigma(\omega') \right] \tilde{A}(\omega) \\
&= \left[i\omega \sigma(\omega) - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \sigma(\omega') \right] \tilde{A}(\omega)
\end{aligned} \tag{10.1.2}$$

ただし、最後の等号には、部分積分

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} i\omega' \sigma(\omega') e^{-i\omega' t} \\
&= - \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sigma(\omega') e^{-i\omega' t} \right) \\
&= - \left[e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sigma(\omega') e^{-i\omega' t} \right]_0^{\infty} + \int_0^{\infty} dt \frac{d}{dt} (e^{i\omega t}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \sigma(\omega') e^{-i\omega' t}
\end{aligned}$$

に対して、

$$\Phi(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \sigma(\omega) e^{-i\omega t} \quad \left(\sigma(\omega) = \int_0^{\infty} dt \Phi(t) e^{i\omega t} \right)$$

が応答関数として $\Phi(t) \rightarrow 0$ ($t \rightarrow +\infty$) を満たすことを用いた²⁾。なお、熱力学において電流 J はベクトルポテンシャル A に共役な示量変数であり、感受率 dJ/dA は相転移点を除いて有限に収まるべきである。そのため (10.1.2) は $\sigma(\omega)$ が $\omega = 0$ で解析的な $\sigma^{\text{reg}}(\omega)$ だけでなく、

$$\sigma(\omega) = \frac{D}{i(\omega + i\delta)} + \sigma^{\text{reg}}(\omega) = D \left(\pi \delta(\omega) + \mathcal{P} \frac{1}{i\omega} \right) + \sigma^{\text{reg}}(\omega)$$

というように 1 位の極をもつことも許している ($i\delta$ の符号は $\Phi(t)$ の収束因子から定まる)。ここで導入したテンソル係数 D は Drude 重みと呼ばれる。

以下では、(10.1.2) を量子論的に導いた応答 (10.1.1) と比較して、微視的に定められる $\sigma(\omega)$ の性質を見る。

周波数総和則

$\omega \rightarrow 0$ の極限において (10.1.1) と (10.1.2) を比較する際、 $i\omega \sigma(\omega) \rightarrow 0$, $\text{Im}\sigma(-\omega) = -\text{Im}\sigma(\omega)$ および

$$\sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \text{Im} \frac{(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}})^2 a_{nn'}^i(\mathbf{k}) a_{n'n}^j(\mathbf{k})}{(\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) + i\delta} [f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n\mathbf{k}}) - f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n'\mathbf{k}})] = 0$$

から、アドミッタンスに虚部がないことが確かめられる。よって得られるのは実部同士の関係式

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Re} \sigma^{ij}(\omega) d\omega &= -\frac{2e^2}{m} \delta_{ij} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n\mathbf{k}}) \\
&\quad + \frac{2e^2}{\hbar^2} \sum_{\epsilon_{n\mathbf{k}} \neq \epsilon_{n'\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} (\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) a_{nn'}^i(\mathbf{k}) a_{n'n}^j(\mathbf{k}) [f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n\mathbf{k}}) - f_{\beta,\mu}(\epsilon_{n'\mathbf{k}})]
\end{aligned}$$

2) 厳密には $\Phi(t)$ は $A(t)$ に対する $J(t)$ の線形応答の緩和関数である。

である。右辺第2項は、

$$\begin{aligned} & \sum_{\epsilon_n \mathbf{k} \neq \epsilon_{n'} \mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \epsilon_n \mathbf{k} a_{nn'}^i(\mathbf{k}) a_{n'n}^j(\mathbf{k}) [f_{\beta, \mu}(\epsilon_n \mathbf{k}) - f_{\beta, \mu}(\epsilon_{n'} \mathbf{k})] \\ &= \sum_{\epsilon_n \mathbf{k} \neq \epsilon_{n'} \mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \epsilon_n \mathbf{k} \left(a_{nn'}^i(\mathbf{k}) a_{n'n}^j(\mathbf{k}) + a_{nn'}^j(\mathbf{k}) a_{n'n}^i(\mathbf{k}) \right) [f_{\beta, \mu}(\epsilon_n \mathbf{k}) - f_{\beta, \mu}(\epsilon_{n'} \mathbf{k})] \end{aligned}$$

Hall 伝導度

$\omega \ll 1$ において (10.1.1) と (10.1.2) の ω の1次の項に注目すると、

$$i\omega \sigma^{ij}(\omega) \simeq -\frac{2e^2}{\hbar} \omega \sum_{n \neq n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} a_{nn'}^i(\mathbf{k}) a_{n'n}^j(\mathbf{k}) [f_{\beta, \mu}(\epsilon_n \mathbf{k}) - f_{\beta, \mu}(\epsilon_{n'} \mathbf{k})]$$

が導かれる (ただし左辺の $\sigma(\omega)$ からは $\omega \rightarrow 0$ での極を取り除いている)。 $\omega \rightarrow 0$ で両係数は厳密に一致して、

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma^{ij}(\omega) = \frac{2ie^2}{\hbar} \sum_{n \neq n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} a_{nn'}^i(\mathbf{k}) a_{n'n}^j(\mathbf{k}) [f_{\beta, \mu}(\epsilon_n \mathbf{k}) - f_{\beta, \mu}(\epsilon_{n'} \mathbf{k})]$$

となることがわかる。左辺に虚部は存在しないが、

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{nn'}(\mathbf{k}) &\equiv -i \sum_{\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n'\mathbf{k}, \mathbf{G}}^* \\ &= -i \sum_{\mathbf{G}} [u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n'\mathbf{k}, \mathbf{G}}^* - \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k}, \mathbf{G}} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}}^*)] \\ &\quad \left(\because \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k}, \mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k}, \mathbf{G}}^* = \delta_{nn'} \right) \\ &= i \sum_{\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k}, \mathbf{G}}^* = \mathbf{a}_{n'n}^*(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

より $\mathbf{a}_{nn}(\mathbf{k})$ は実数値をとるため、

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma^{ij}(\omega) &= \frac{2ie^2}{\hbar} \sum_{n, n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} a_{nn'}^i(\mathbf{k}) [a_{nn'}^j(\mathbf{k})]^* [f_{\beta, \mu}(\epsilon_n \mathbf{k}) - f_{\beta, \mu}(\epsilon_{n'} \mathbf{k})] \\ &= \frac{2ie^2}{\hbar} \sum_{n, n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \left(a_{nn'}^i(\mathbf{k}) [a_{nn'}^j(\mathbf{k})]^* - a_{nn'}^j(\mathbf{k}) [a_{nn'}^i(\mathbf{k})]^* \right) f_{\beta, \mu}(\epsilon_n \mathbf{k}) \\ &= -\frac{2ie^2}{\hbar} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{G}} \left(\frac{\partial u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}}}{\partial k_i} \frac{\partial u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}}^*}{\partial k_j} - \frac{\partial u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}}}{\partial k_j} \frac{\partial u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}}^*}{\partial k_i} \right) f_{\beta, \mu}(\epsilon_n \mathbf{k}) \\ &\quad \left(\because \sum_n u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}} u_{n\mathbf{k}, \mathbf{G}}^* = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \right) \\ &= \frac{2e^2}{\hbar} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \left(\frac{\partial a_{nn}^j(\mathbf{k})}{\partial k_i} - \frac{\partial a_{nn}^i(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) f_{\beta, \mu}(\epsilon_n \mathbf{k}) \end{aligned}$$

は確かに虚部をもたない。

10.2 格子振動の光学応答

第 11 章 遍歴電子系

第 IV 部 量子多体系のトポロジカル 相

第 12 章 トポロジカル相の一般論

12.1 対称性とトポロジカル相

12.2 エッジ状態とバルクエッジ対応

12.3 トポロジカル秩序

第 13 章 電子系のトポロジー

13.1 量子 Hall 効果

13.2 トポロジカル絶縁体

13.3 トポロジカル超伝導体

第 14 章 スピン系のトポロジー

第Ⅴ部 非平衡ダイナミクス下の 量子多体系

第 15 章 周期駆動された量子多体系

第 16 章 クエンチ過程での量子多体系

第 17 章 散逸をもつ量子多体系

第Ⅵ部 付録

付録 A 1 粒子系の量子力学

A.1 角運動量代数

量子力学において角運動量は回転対称性の生成子として以下に示すような代数構造をもっている。

$$[\hat{J}^\alpha, \hat{J}^\beta] = i\hbar \sum_{\gamma=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}^\gamma \quad (\text{A.1.1})$$

ここで、 $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$ であり、 $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ は完全反対称テンソルで $\epsilon_{xyz} = 1$ である。以下ではこの代数構造に基づいた一般化角運動量の数理的扱いを見る。

A.1.1 一般化角運動量の代数

(A.1.1) から、

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^z]_{-1} &= \sum_{\alpha=x,y,z} [(\hat{J}^\alpha)^2, \hat{J}^z]_{-1} \\ &= \sum_{\alpha=x,y,z} \left(\hat{J}^\alpha [\hat{J}^\alpha, \hat{J}^z]_{-1} + [\hat{J}^\alpha, \hat{J}^z]_{-1} \hat{J}^\alpha \right) \\ &= i\hbar \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} \epsilon_{\alpha z \beta} (\hat{J}^\alpha \hat{J}^\beta + \hat{J}^\beta \hat{J}^\alpha) = 0 \end{aligned}$$

となり、 $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^z$ は同時固有状態をもつことがわかる。さらに、 $\hat{J}^\pm \equiv \hat{J}^x \pm i\hat{J}^y$ という演算子を定義すると、

$$[\hat{J}^z, \hat{J}^\pm]_{-1} = i\hbar (\hat{J}^y \mp i\hat{J}^x) = \pm\hbar \hat{J}^\pm$$

となるため、 \hat{J}^z が固有値 $\hbar m$ を持つ状態 $|m\rangle$ に対して、

$$\hat{J}^z (\hat{J}^\pm |m\rangle) = \hat{J}^\pm (\hat{J}^z \pm \hbar) |m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{J}^\pm |m\rangle$$

と、 \hat{J}^\pm は昇降演算子の役割を果たすことがわかる。また、 $\hat{\mathbf{J}}^2$ は \hat{J}^\pm を用いると、

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}^+ \hat{J}^- + \hat{J}^- \hat{J}^+) + (\hat{J}^z)^2$$

と表せる。 \hat{J}^\pm 同士の交換関係

$$[\hat{J}^+, \hat{J}^-]_{-1} = -2i [\hat{J}^x, \hat{J}^y]_{-1} = 2\hbar \hat{J}^z$$

とこのことを突き合わせて、 \hat{J}^z の固有値が最大値 j をとる固有状態 $|j\rangle$ を考えると、 $\hat{J}^+ |j\rangle = 0$ となるべきなので、

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |j\rangle = [(\hat{J}^z)^2 + \hbar \hat{J}^z + \hat{J}^- \hat{J}^+] |j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j\rangle$$

となることがわかる。 $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^\pm] = 0$ であること¹⁾から、 \hat{J}^\pm を作用させて移り変わることができる任意の \hat{J}^z の固有状態 $|m\rangle$ ($m = j, j-1, \dots$) も $\hat{\mathbf{J}}^2$ に対し同じ固有値を与えることがわかる。また、 \hat{J}^z の固有値が最小値 $-j'$ をとる固有状態 $|-j'\rangle$ を考えると、 $\hat{J}^- |-j'\rangle = 0$ となるべきなので、

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |-j'\rangle = [(\hat{J}^z)^2 - \hbar \hat{J}^z + \hat{J}^+ \hat{J}^-] |-j'\rangle = \hbar^2 j'(j' + 1) |-j'\rangle$$

となることがわかるから、 $\hat{\mathbf{J}}^2$ の固有値 $j(j+1)$ の固有状態は \hat{J}^z の固有値に関して $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ の $2j+1$ 重に縮退していることがわかる。また、 j は整数または半整数に限られることもわかる。まとめると、 $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^z$ の同時固有状態として、

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad \hat{J}^z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle, \\ j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \quad m = -j, -j+1, \dots, j \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

を満たす $|j, m\rangle$ がとれる。また、 $\hat{J}^\pm \hat{J}^\mp = \hat{\mathbf{J}}^2 - (\hat{J}^z)^2 \pm \hbar \hat{J}^z$ から、次が成り立つ。

$$\hat{J}^\pm |j, m\rangle = \sqrt{\hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)]} |j, m \pm 1\rangle = \sqrt{\hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (\text{A.1.3})$$

A.1.2 角運動量の合成

2つの系それぞれの角運動量 $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$ と全角運動量 $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ の関係を考える。全角運動量も角運動量代数を満たすべきなので、 $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$ に対して (A.1.2) を満たす固有状態 $|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle$ をとり、その合成系の状態として一般に

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, j_2, m_1, m_2} C_{j_1, j_2, m_1, m_2} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$$

をとると、 $\hat{J}^z \equiv \hat{J}_1^z + \hat{J}_2^z$ を作用させれば、

$$\begin{aligned} \hat{J}^z |\psi\rangle &= \sum_{j_1, j_2, m_1, m_2} C_{j_1, j_2, m_1, m_2} \hat{J}^z |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\ &= \sum_{j_1, j_2, m_1, m_2} C_{j_1, j_2, m_1, m_2} \hbar (m_1 + m_2) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \end{aligned}$$

を得る。よって \hat{J}^z に対する固有値 $\hbar m$ の状態は、 $m = m_1 + m_2$ を満たすように線形結合をとったものになる。 m としてとりうる最大値は $m = j_1 + j_2$ のときで、その状態は、

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle$$

で与えられて、これに対して $\hat{\mathbf{J}}^2 \equiv |\hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2|^2$ を作用させると、 $\hat{J}^\pm \equiv \hat{J}_1^\pm + \hat{J}_2^\pm$ とすると、

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= [(\hat{J}^z)^2 + \hbar \hat{J}^z + \hat{J}^- \hat{J}^+] |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle \\ &= [\hbar^2 (j_1 + j_2)^2 + \hbar^2 (j_1 + j_2)] |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle \\ &= \hbar^2 (j_1 + j_2) (j_1 + j_2 + 1) |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle \end{aligned}$$

1) $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^z] = 0$ と同様にして $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^x] = 0, [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^y] = 0$ が導かれる。

となるため、確かにこの状態は $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^z$ の同時固有状態 $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle$ であることがわかる。よって、

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar^2(j_1 + j_2)}} (\hat{J}_1^- + \hat{J}_2^-) |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle \\ &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle \end{aligned}$$

というように、 $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^z$ の $j = j_1 + j_2$ の固有状態を求めていくことができる。また、 \hat{J}^z の固有値として二番目に大きいのが $m = j_1 + j_2 - 1$ であり、以降 1 刻みで並んでいくことから、 m の最大値となりうる j も 1 刻みで小さくなっていき、 $j = j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots$ というように固有値をとると考えられる。そこで、 $j = m = j_1 + j_2 - 1$ の固有状態として、

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle &= C_{j_1, j_2, j_1 - 1, j_2} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + C_{j_1 - 1, j_2, j_1 - 1, j_2} |j_1 - 1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle \\ &\quad + C_{j_1, j_2, j_1, j_2 - 1} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle + C_{j_1, j_2 - 1, j_1, j_2 - 1} |j_1, j_1\rangle |j_2 - 1, j_2 - 1\rangle \end{aligned}$$

とおいて $\hat{\mathbf{J}}^2$ の $j = j_1 + j_2 - 1$ の固有状態となるように係数を定めれば、これに \hat{J}^- を作用させてすべての $j = j_1 + j_2 - 1$ の同時固有状態 $|j_1 + j_2 - 1, m\rangle$ を求めていくことができる。 $j = |j_1 - j_2|$ の固有状態として、 $m = j_1 - j_2$ となるものは、

$$||j_1 - j_2|, j_1 - j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, -j_2\rangle$$

としかとれず、これ以上小さい j で同様に状態を作ることはいできない。このようにして得られる

$$\begin{aligned} |j, m\rangle &= \sum_{j_1, j_2, m_1, m_2} C_{j_1, j_2, m_1, m_2} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\ (j &= |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2, \quad m = -j, \dots, j) \end{aligned}$$

の展開係数 C_{j_1, j_2, m_1, m_2} を Clebsch-Gordan 係数という。

A.2 Bloch の定理

A.3 Aharonov-Bohm 効果

付録 B 場の古典論

多体系が場を変数にもつ系に読み替えられたことに関連して、場の古典論について説明する。古典論から導かれるダイナミクスは経路積分の中で最も大きい寄与をもつ。

B.1 場の解析力学

場を変数にとる系の一般的な古典論として、解析力学の処方を説明する。

B.1.1 Lagrange 形式

実数 n 成分の場 $\varphi^a(t, \mathbf{x})$ ($a = 1, 2, \dots, n$) を自由度にもつ系に対して、作用汎関数

$$S[\varphi] \equiv \int dt L[\varphi, \dot{\varphi}] \quad \left(L[\varphi, \dot{\varphi}] \equiv \int d^3\mathbf{x} \mathcal{L}(\varphi, \nabla\varphi, \dot{\varphi}) \right)$$

についての最小作用の原理が要請される。この積分の境界で 0 になるような φ の変分 $\delta\varphi$ をとると、

$$\begin{aligned} \delta(\nabla\varphi^a) &\equiv \nabla(\varphi^a + \delta\varphi^a) - \nabla\varphi^a = \nabla(\delta\varphi^a) \\ \delta\dot{\varphi}^a &\equiv \frac{\partial}{\partial t}(\varphi^a + \delta\varphi^a) - \frac{\partial\varphi^a}{\partial t} = \frac{\partial(\delta\varphi^a)}{\partial t} \end{aligned}$$

より、作用の変分が

$$\begin{aligned} \delta S &\equiv S[\varphi + \delta\varphi] - S[\varphi] \\ &= \int dt d^3\mathbf{x} \sum_{a=1}^n \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^a} \delta\varphi^a + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\varphi^a)} \cdot \delta(\nabla\varphi^a) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}^a} \delta\dot{\varphi}^a \right] \\ &= \int dt d^3\mathbf{x} \sum_{a=1}^n \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^a} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\varphi^a)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}^a} \right) \right] \delta\varphi^a \end{aligned}$$

と表せて、任意の $\delta\varphi$ について $\delta S = 0$ でなければならないから、

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^a} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\varphi^a)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}^a} \right) = 0 \quad (a = 1, 2, \dots, n) \quad (\text{B.1.1})$$

が導かれる。ただし、

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\varphi^a)} = \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_x\varphi^a)}, \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_y\varphi^a)}, \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_z\varphi^a)} \right) \quad \left(\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i} \right)$$

である。(B.1.1) を場 $\varphi(t, \mathbf{x})$ の Euler-Lagrange 方程式といい、系が必ず満たす運動方程式となる。 \mathcal{L} はラグランジアン密度という¹⁾。本来のラグランジアン L は $\varphi, \dot{\varphi}$ の汎関数であり²⁾、それぞれ

-
- 1) 単にラグランジアンと呼ぶことも多いが、この節では呼び分ける。
 - 2) L は φ の全空間にわたる情報を積分により織り込むことで汎関数 $L[\varphi, \dot{\varphi}]$ となっているが、時間方向の積分は行っていないため同時に時間の関数 $L(t)$ にもなっている。よって、 L は汎関数として φ の時間変化の情報は持たないため $\dot{\varphi}$ が φ と独立な引関数となっている。

での汎関数微分 (C.5 節参照) を求めると、

$$\frac{\delta L}{\delta \varphi^a} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^a} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \varphi^a)} \right), \quad \frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}^a} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^a}$$

とわかる。EL 方程式 (B.1.1) はこの汎関数微分を用いて表すなら次のようになる。

$$\frac{\delta L}{\delta \varphi^a} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}^a} \right) = 0 \quad (a = 1, 2, \dots, n)$$

\mathcal{L} に任意の関数 $\mathcal{F}_i(\varphi(t, \mathbf{x}), t, \mathbf{x})$ を用いた

$$\sum_i \frac{d}{dx_i} \mathcal{F}_i(\varphi(t, \mathbf{x}), t, \mathbf{x}) = \sum_i \left(\sum_a \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \varphi^a} \partial_i \varphi^a + \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial x_i} \right) \quad (i = t, x, y, z) \quad (\text{B.1.2})$$

という項を付け加えても、作用汎関数 $S[\varphi]$ には境界での寄与の差ししか現れない。よって境界で固定した変分の停留条件から得られる EL 方程式は付け加える前と等価なものが得られる。この意味でラグランジアンには $\partial_\mu \mathcal{F}$ を付け加えられる不定性が存在している。

B.1.2 Hamilton 形式

最小作用の原理を満たす場 $\varphi^a(t, \mathbf{x})$ に対して、正準共役な運動量の場合 $\pi(t, \mathbf{x})$ を

$$\pi_a(t, \mathbf{x}) \equiv \frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}^a} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^a} \quad (a = 1, 2, \dots, n)$$

で定義する。上式右辺は元々 $\varphi, \dot{\varphi}$ の汎関数微分であったが、最小作用の原理を満たす $\varphi^a(t, \mathbf{x})$ ではこれを逆に解いて $\dot{\varphi}$ を $\pi_a(t, \mathbf{x}), \nabla \pi_a(t, \mathbf{x})$ ($a = 1, 2, \dots, n$) の関数として表すことができる。このとき、

$$\mathcal{H}(\varphi, \pi, \nabla \pi, \nabla \varphi) \equiv \sum_{a=1}^n \pi_a \dot{\varphi}^a(\pi, \nabla \pi) - \mathcal{L}(\varphi, \nabla \varphi, \dot{\varphi}(\pi, \nabla \pi)) \quad (\text{B.1.3})$$

に対して、次が成り立つ。

$$\dot{\varphi}^a(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_a} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi_a)} \right), \quad \dot{\pi}_a(t, \mathbf{x}) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi^a} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \varphi^a)} \right) \quad (\text{B.1.4})$$

(B.1.3) を Legendre 変換といい、この変換で導入された $\mathcal{H}(\varphi, \pi, \nabla \varphi, \nabla \pi)$ はハミルトニアン密度と呼ばれ³⁾、(B.1.4) はハミルトニアン密度を用いた定式化での運動方程式となっている (正準方程式と呼ばれる)。本来のハミルトニアンは

$$H[\varphi, \pi] \equiv \int d^3 \mathbf{x} \mathcal{H}(\varphi, \pi, \nabla \varphi, \nabla \pi) = \int d^3 \mathbf{x} \sum_{a=1}^n \pi_a \dot{\varphi}^a(\pi, \nabla \pi) - L[\varphi, \dot{\varphi}(\pi, \nabla \pi)]$$

で与えられ、この汎関数微分を用いると正準方程式 (B.1.4) は次のように表せる。

$$\dot{\varphi}^a(t, \mathbf{x}) = \frac{\delta H}{\delta \pi_a}, \quad \dot{\pi}_a(t, \mathbf{x}) = -\frac{\delta H}{\delta \varphi^a}$$

3) ラグランジアン密度同様、単にハミルトニアンと呼ばれることも多いが、この節では呼び分ける。

B.1.3 複素場の解析力学

複素数 1 成分の場合 $\psi(t, \mathbf{x}) = \psi^1(t, \mathbf{x}) + i\psi^2(t, \mathbf{x})$ を自由度にもつ系は、実数 2 成分の場合 (ψ^1, ψ^2) を自由度にもつ系として定式化すればよい。その結果、EL 方程式としては

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^1} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi^1)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^1} \right) = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^2} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi^2)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^2} \right) = 0 \quad (\text{B.1.5})$$

の 2 式が連立することになる。 $\psi = \psi^1 + i\psi^2$, $\nabla \psi = \nabla \psi^1 + i\nabla \psi^2$, $\dot{\psi} = \dot{\psi}^1 + i\dot{\psi}^2$ であるので、Leibniz 則から

$$\frac{\partial}{\partial \psi} = \frac{\partial \psi^1}{\partial \psi} \frac{\partial}{\partial \psi^1} + \frac{\partial \psi^2}{\partial \psi} \frac{\partial}{\partial \psi^2} = \frac{\partial}{\partial \psi^1} - i \frac{\partial}{\partial \psi^2}$$

同様に、

$$\frac{\partial}{\partial (\nabla \psi)} = \frac{\partial}{\partial (\nabla \psi^1)} - i \frac{\partial}{\partial (\nabla \psi^2)}, \quad \frac{\partial}{\partial \dot{\psi}} = \frac{\partial}{\partial \dot{\psi}^1} - i \frac{\partial}{\partial \dot{\psi}^2}$$

が成り立ち、また複素共役 $\bar{\psi} = \psi^1 - i\psi^2$ については、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \bar{\psi}} &= \frac{\partial \psi^1}{\partial \bar{\psi}} \frac{\partial}{\partial \psi^1} + \frac{\partial \psi^2}{\partial \bar{\psi}} \frac{\partial}{\partial \psi^2} = \frac{\partial}{\partial \psi^1} + i \frac{\partial}{\partial \psi^2} \\ \frac{\partial}{\partial (\nabla \bar{\psi})} &= \frac{\partial}{\partial (\nabla \psi^1)} + i \frac{\partial}{\partial (\nabla \psi^2)}, \quad \frac{\partial}{\partial \dot{\bar{\psi}}} = \frac{\partial}{\partial \dot{\psi}^1} + i \frac{\partial}{\partial \dot{\psi}^2} \end{aligned}$$

がまた成り立つ。これらの関係から、(B.1.5) と等価な運動方程式として

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} \right) = 0 \quad (\text{B.1.6})$$

が得られる。一方、変分可能な汎関数として作用は実数値しかとれず、ラグランジアンも実数値に限られるので、

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \right)^* = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^1} + i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^2} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}}$$

が導かれる。同様にして

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi)} \right)^* = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \bar{\psi})}, \quad \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right)^* = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}}$$

も成り立つと示せるため、2 式の一方は他方の複素共役であり、等価であるとわかる⁴⁾。

$\psi = \psi^1 + i\psi^2$ の実部と虚部それぞれに対する正準共役運動量の場合

$$\pi_1(t, \mathbf{x}) \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^1}, \quad \pi_2(t, \mathbf{x}) \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^2}$$

を用いて表される正準方程式

$$\begin{aligned} \dot{\psi}^1(t, \mathbf{x}) &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_1} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi_1)} \right), & \dot{\pi}_1(t, \mathbf{x}) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi^1} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \psi^1)} \right) \\ \dot{\psi}^2(t, \mathbf{x}) &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_2} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi_2)} \right), & \dot{\pi}_2(t, \mathbf{x}) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi^2} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \psi^2)} \right) \end{aligned}$$

4) ψ と $\bar{\psi}$ の入れ替えで方程式が不変であることから L が $\psi, \bar{\psi}$ の双線形形式で表されていることもわかるが、これはラグランジアンが実数値であることと等価である。

からも、 $\psi, \bar{\psi}$ を用いた等価な運動方程式を得ようとする、

$$\begin{aligned}\pi(t, \mathbf{x}) &\equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^1} - i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^2} = \pi_1(t, \mathbf{x}) - i\pi_2(t, \mathbf{x}) \\ \bar{\pi}(t, \mathbf{x}) &\equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}^1} + i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}^2} = \pi_1(t, \mathbf{x}) + i\pi_2(t, \mathbf{x})\end{aligned}$$

であるために⁵⁾、

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \pi} &= \frac{\partial}{\partial \pi_1} + i \frac{\partial}{\partial \pi_2}, & \frac{\partial}{\partial (\nabla \pi)} &= \frac{\partial}{\partial (\nabla \pi_1)} + i \frac{\partial}{\partial (\nabla \pi_2)} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{\pi}} &= \frac{\partial}{\partial \pi_1} - i \frac{\partial}{\partial \pi_2}, & \frac{\partial}{\partial (\nabla \bar{\pi})} &= \frac{\partial}{\partial (\nabla \pi_1)} - i \frac{\partial}{\partial (\nabla \pi_2)}\end{aligned}$$

となるため、

$$\begin{cases} \dot{\psi}(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\pi}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \bar{\pi})} \right), & \dot{\bar{\pi}}(t, \mathbf{x}) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\psi}} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) \\ \dot{\bar{\psi}}(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi)} \right), & \dot{\pi}(t, \mathbf{x}) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \psi)} \right) \end{cases} \quad (\text{B.1.7})$$

というふうに、 $(\psi, \pi)/(\bar{\psi}, \bar{\pi})$ ではなく、 $(\psi, \bar{\pi})/(\bar{\psi}, \pi)$ という組み合わせの表現になることがわかる。ハミルトニアンもまた必ず実数値をとるので、

$$\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi} \right)^* = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi^1} - i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi^2} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\psi}}, \quad \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\pi}} \right)^* = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_1} - i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_2} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi}$$

同様にして、

$$\left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \psi)} \right)^* = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \bar{\psi})}, \quad \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\pi}} \right)^* = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi)}$$

が導かれる。よって、(B.1.7) のうち、 $(\psi, \bar{\pi})$ の組の 2 式は両辺複素共役をとることで $(\bar{\psi}, \pi)$ の組の 2 式に帰着する。さらに、

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi}, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \psi)} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi)}$$

から、その内 1 式は EL 方程式 (B.1.6) と等価であることが直ちにわかる。

$$\dot{\bar{\pi}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\psi}} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) \iff \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} \right) = 0$$

よって、正準方程式で残る 1 式

$$\dot{\bar{\psi}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi)} \right)$$

が組を成すもう一方の式の定数倍か複素共役であれば Lagrange 形式での結果と同様に運動方程式が実質的に 1 つだけになる。この結果、 π は $\bar{\psi}$ の純虚数倍に限られるとわかる。

共役運動量 $\pi, \bar{\pi}$ に $\dot{\psi}, \dot{\bar{\psi}}$ が含まれないことがわかったため、複素場の場合にはラグランジアンから π を用いて $\dot{\psi}, \dot{\bar{\psi}}$ を消去することはできないことになる。すなわち、Legendre 変換の際にはラグランジアンに含まれる $\dot{\psi}, \dot{\bar{\psi}}$ の項が必ず $\pi_1 \dot{\psi}_1 + \pi_2 \dot{\psi}_2$ と打ち消し合わなければならなくなったので、

$$\pi = i\alpha \bar{\psi} = \alpha(\psi_2 + i\psi_1) \quad \therefore \begin{cases} \pi_1 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_1} = \alpha \psi_2 \\ \pi_2 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_2} = -\alpha \psi_1 \end{cases}$$

5) $\bar{\pi}$ は定義の時点 (1 番目の等号) では π の複素共役とは限らない。あくまで $\bar{\psi}$ の正準共役な運動量の場合であることを表すために先にこのように表記したに過ぎない。

とくと、複素場のラグランジアンに含まれる $\dot{\psi}, \dot{\bar{\psi}}$ の項が、

$$\alpha(\psi_2\dot{\psi}_1 - \psi_1\dot{\psi}_2) = \frac{i\alpha}{2}(\bar{\psi}\dot{\psi} - \dot{\bar{\psi}}\psi)$$

の形に制限されることになる。以上の要請から実数係数 α は作用次元の普遍定数となり、多体系の量子論と対応させる場合させることで Planck 定数 \hbar とわかる。

B.1.4 Noether カレント

系の作用汎関数を不変に保つ EL 方程式 (B.1.1) の解の変換 $\varphi(t, \mathbf{x}) \rightarrow \varphi'(t, \mathbf{x})$ があるとき、系はその変換に対して対称性をもつという。変換が連続的に行えるものであれば、微小量 $\varepsilon \ll 1$ を用いた無限小変換

$$\varphi(x_i) \longrightarrow \varphi'(x_i; \varepsilon) = \varphi(x_i) + \varepsilon \delta\varphi(x_i)$$

が変換の集合全体を定める ($x_0 = t, x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$) ので、対称性の性質を決めることになる。変換前後の作用の差 δS を計算すると、

$$\begin{aligned} \delta S &= \varepsilon \int dt d^3\mathbf{x} \sum_a \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi^a} \delta\varphi + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \frac{d}{dx_i} \delta\varphi^a \right\} \\ &= \varepsilon \int dt d^3\mathbf{x} \sum_i \frac{d}{dx_i} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \delta\varphi^a \right] \end{aligned}$$

となる (2 つ目の等号では EL 方程式を用いた)。この変換に対して系が対称性を持つということは δS が φ^a の配位によらない定数変化のみであることを意味する。よって、

$$\mathcal{J}_i(t, \mathbf{x}) \equiv - \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \delta\varphi^a + X_i(t, \mathbf{x})$$

について、

$$\sum_{i=0,1,2,3} \partial_i \mathcal{J}_i = 0$$

という連続の方程式が時空の各点 (t, \mathbf{x}) で成り立つような関数 $X_i(t, \mathbf{x})$ が存在する。これは粒子系の解析力学における Noether の定理に対応するもので、 $\mathcal{J}_i(t, \mathbf{x})$ を Noether カレントという。ラグランジアン密度に (B.1.2) を付け加えられる不定性を用いると、 $X_i(t, \mathbf{x})$ は

$$X_i(t, \mathbf{x}) \equiv - \sum_a \frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \varphi^a} \delta\varphi^a$$

を満たす $\mathcal{F}_i(\varphi, t, \mathbf{x})$ を用いてあらかじめ 0 にしておくこともできる。

粒子系において、時空の並進対称性からはエネルギー・運動量が保存量として得られていた。このため、時空の並進対称性から導かれる Noether カレントは場を変数にとる系のエネルギー・運動量に対応するものである。 x_j 成分での無限小並進変換

$$x_i \longrightarrow x'_i(\varepsilon) = x_i + \varepsilon \delta_{ij}$$

は場の変換として、

$$\varphi(x_i) \longrightarrow \varphi'(x_i; \varepsilon) \equiv \varphi(x_i - \varepsilon \delta_{ij}) = \varphi(x_i) - \varepsilon \partial_j \varphi$$

と表される。よって、時空の並進対称性から導かれる Noether カレントは次のようになる。

$$T_{ij}(t, \mathbf{x}) \equiv \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \partial_j \varphi^a - X_{ij}(t, \mathbf{x})$$

さらに、時空の並進変換に対しては作用の変化が、

$$\delta S = \varepsilon \int dt d^3 \mathbf{x} \frac{d}{dx^j} \mathcal{L}$$

と直接求められるので、 $X_{ij} = \delta_{ij} \mathcal{L}$ と定めることができる。 T_{ij} はエネルギー・運動量テンソルと呼ばれ、保存則は次で与えられる。

$$\sum_{i=0,1,2,3} \partial_i T_{ij} = 0$$

各時空成分での微分の物理的意味を考えると、 $T_{ij}(t, \mathbf{x})$ の各成分が次のように解釈できるとわかる。

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{00} = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^a} \dot{\varphi}^a - \mathcal{L} : \text{エネルギー密度} \\ T_{i0} = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \dot{\varphi}^a \ (i \neq 0) : \text{エネルギー流の } x_i \text{ 成分} \\ T_{0j} = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^a} \partial_j \varphi^a \ (j \neq 0) : \text{単位体積あたりの運動量の } x_j \text{ 成分} \\ T_{ij} \ (i, j \neq 0) : \text{単位体積あたりの運動量の } x_j \text{ 成分における } x_i \text{ 方向への移行} \end{array} \right.$$

特に T_{00} はハミルトニアン密度 \mathcal{H} に一致するため、粒子系でエネルギーがハミルトニアンで与えられることと確かに符合している。

同様に、粒子系においては空間回転対称性から角運動量が保存量として得られていたから、空間回転対称性から導かれる Noether カレントは場を変数にとる系の角運動量に対応すると考えられる。 $x_j \ (j \neq 0)$ 軸周りでの無限小回転変換

$$x_i \longrightarrow x'_i(\theta) = x_i - \sum_{k=1,2,3} \epsilon_{ijk} \theta x_k$$

$$(\epsilon_{ijk} \text{ は完全反対称テンソル、} \epsilon_{123} = 1)$$

において場の関数形が不変に保たれる (スカラー場である) なら、場の変換は

$$\varphi(x_i) \longrightarrow \varphi'(x_i; \theta) \equiv \varphi \left(x_i + \sum_{k=1,2,3} \epsilon_{ijk} \theta x_k \right) = \varphi(x_i) + \theta \sum_{k=1,2,3} \epsilon_{ijk} x_k \partial_i \varphi$$

と表される。空間回転対称性から導かれる Noether カレントは、

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{ij}(t, \mathbf{x}) &= - \sum_{k,l=1,2,3} \epsilon_{jkl} x_k \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \partial_l \varphi^a + X_{ij}(t, \mathbf{x}) \\ &= - \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} (\mathbf{x} \times \nabla \varphi^a)_j + X_{ij}(t, \mathbf{x}) \end{aligned}$$

で与えられ、その保存則は

$$\sum_i \partial_i \mathcal{J}_{ij} = 0$$

と表される。回転変換の場合も作用の変化が直接計算できて X_{ij} を定めることができるが、

$$\delta S = \theta \int dt d^3\mathbf{x} \sum_{k=1,2,3} \epsilon_{ijk} x_k \frac{d}{dx_i} \mathcal{L} = -\theta \int dt d^3\mathbf{x} \sum_{k=1,2,3} \epsilon_{ijk} \frac{\partial x_k}{\partial x_i} \mathcal{L} = 0$$

というように $X_{ij} = 0$ になることがわかる。各時空成分での微分の物理的意味を考えると、 $\mathcal{J}_{ij}(t, \mathbf{x})$ の各成分は次のように解釈される。

$$\begin{cases} \mathcal{J}_{0j} = -\sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^a} (\mathbf{x} \times \nabla \varphi^a)_j : \text{単位体積あたりの角運動量の } x_j \text{ 成分} \\ \mathcal{J}_{ij} (i \neq 0) : \text{単位体積あたりの角運動量の } x_j \text{ 成分における } x_i \text{ 方向への移行} \end{cases}$$

1 成分複素場 $\psi(t, \mathbf{x}) = \psi^1(t, \mathbf{x}) + i\psi^2(t, \mathbf{x})$ を変数に持つ系においては、ラグランジアンが必ず実数であることから偏角成分 (位相) に対する不定性がある。よって、無限小変換

$$\psi(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi'(t, \mathbf{x}; \theta) = (1 + i\theta)\psi(t, \mathbf{x}) \quad \therefore \begin{cases} \psi^1(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi^1(t, \mathbf{x}) - \theta\psi^2(t, \mathbf{x}) \\ \psi^2(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi^2(t, \mathbf{x}) + \theta\psi^1(t, \mathbf{x}) \end{cases}$$

に対する対称性が系に存在することになる。この対称性に対応する Noether カレントは、

$$\mathcal{J}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \psi^1)} \psi^2 - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \psi^2)} \psi^1 = \frac{i}{2} \left(\bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \bar{\psi})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \psi)} \psi \right)$$

で与えられて、次の保存則が成り立つ。

$$\sum_i \partial_i \left(\bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \bar{\psi})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \psi)} \psi \right) = 0$$

特に、上式を全空間にわたって積分することで、

$$\frac{d}{dt} \left[\int d^3\mathbf{x} \left(\bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \psi \right) \right] = 0$$

という保存量が得られる。複素場に特有の事情として、

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} = i\alpha \bar{\psi}, \quad \bar{\pi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = -i\alpha \psi$$

が成り立っていたことをふまえると、この保存量は次のように表されるとわかる。

$$N = \int d^3\mathbf{x} |\psi(t, \mathbf{x})|^2$$

B.2 Dirac 場

スピン $s = 1/2$ の粒子系は、Dirac のスピノル場を自由度にもつ系でスピン自由度の運動も含めて表すことができる。この節では Lorentz 対称性から導入して、スピノル場の導入および自由スピノル場のラグランジアンとスピン角運動量を導出する。

B.2.1 相対論的な系

4次元時空 $x^\mu = (ct, x, y, z)$ に対して⁶⁾、

$$\eta_{\rho\sigma}\Lambda^\rho{}_\mu\Lambda^\sigma{}_\nu = \eta_{\mu\nu} \quad (\eta = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)) \quad (\text{B.2.1})$$

で定まる $(1,1)$ -階テンソル $\Lambda^\mu{}_\nu$ で与えられる座標変換 $x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ に対して系が対称性をもつとき、その系は相対論的であるという。ここで c は光速で、添字の上下は (n, m) -階テンソル $T^{\mu_1\mu_2\cdots\mu_n}{}_{\nu_1\nu_2\cdots\nu_m}$ に対して

$$\begin{aligned} T^{\mu_1\cdots\mu_{i-1}}{}_{\mu_i}{}^{\mu_{i+1}\cdots\mu_n}{}_{\nu_1\cdots\nu_n} &\equiv \eta_{\mu_i\rho} T^{\mu_1,\cdots,\mu_{i-1}\rho\mu_{i+1}\mu_n}{}_{\nu_1\cdots\nu_n}, \\ T^{\mu_1\cdots\mu_n}{}_{\nu_1\cdots\nu_{i-1}}{}^{\nu_i}{}_{\nu_{i+1}\cdots\nu_n} &\equiv \eta^{\nu_i\rho} T^{\mu_1,\cdots,\mu_n}{}_{\nu_1\cdots\nu_{i-1}\rho\nu_{i+1}\nu_n} \end{aligned}$$

となるように定義されている。 $\eta^{\mu\nu}$, $\eta_{\mu\nu}$ はどちらも η の (μ, ν) 成分で与えるため、 $\eta^\mu{}_\nu = \eta_\mu{}^\nu = \delta^\mu_\nu$ である ($\delta = \text{diag}(1, 1, 1, 1)$)。

$$dx^\mu dx_\mu = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = -(cdt)^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2$$

を必ず保存するこの座標変換は Lorentz 変換と呼ばれ、空間回転に加えて Lorentz ブースト変換と呼ばれる時間と空間を混合する変換およびこれらの組み合わせからなる⁷⁾。例えば、

$$\begin{pmatrix} cdt' \\ dx' \\ dy' \\ dz' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \begin{pmatrix} 1 & -\beta & & \\ -\beta & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} cdt \\ dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} \quad \left(\beta = \frac{v}{c}, v < c\right)$$

という変換は Lorentz ブースト変換の代表例である。Lorentz ブースト変換は $v \ll c$ の極限で Galilei 変換に一致するため、Lorentz 対称性は空間回転対称性と Galilei 対称性を合わせて高エネルギー系に拡張したものになっていて、物理的な系は必ず Lorentz 対称性を満たすべきである。また、Galilei 変換において v は座標系間の相対速度であったため、Lorentz 対称性は相対速度 c 以上で移動する座標系間での変換を許していない。このことを相対論的因果律という。

無限小 Lorentz 変換は、次のように表すことができる。

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu_\nu - \frac{i}{2}\omega_{\alpha\beta}(\mathcal{J}^{\alpha\beta})^\mu{}_\nu, \quad (\mathcal{J}^{\alpha\beta})^\mu{}_\nu \equiv i(\eta^{\alpha\mu}\delta^\beta_\nu - \delta^\alpha_\nu\eta^{\beta\mu}) \quad (\omega_{\alpha\beta} \ll 1) \quad (\text{B.2.2})$$

この表式は確かに (B.2.1) を満たす Lorentz 変換であり、例えば $\omega_{0i} = -\omega_{i0} = v/c$ ($i = 1, 2, 3$) では、

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu_\nu - \frac{v}{c}(\delta_0^\mu\delta_\nu^i + \delta_i^\mu\delta_\nu^0)$$

となって Galilei 変換 $cdt' = cdt - (v/c)dx_i$, $dx'_i = dx_i - vdt$ に、 $\omega_{12} = -\omega_{21} = \theta$ では、

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu_\nu + \theta(\delta_1^\mu\delta_\nu^2 - \delta_2^\mu\delta_\nu^1)$$

6) この節でのみ、Einstein の縮約記法と「ギリシャ文字の添字 $\mu, \nu, \rho, \sigma, \dots$ は $0, 1, 2, 3$ のいずれか」「アルファベットの添字 i, j, k, \dots は $1, 2, 3$ のいずれか」という表記の使い分けを行う。前後の節との記法の違いに注意せよ。

7) なお、 $dx^\mu dx_\mu$ を保存する座標変換には時空の並進変換も含まれる。時空の並進変換と Lorentz 変換、時空の反転変換を含めた変換全体の集合は Poincare 変換と呼ばれる。

となって z 軸周りの無限小空間回転変換 (B.1.4 項参照) に一致している。無限小変換における恒等変換からの差分は生成子と呼ばれ、連続変換全体を定める役割をもっている。Lorentz 変換の場合には、

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \exp \left[-\frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} (\mathcal{J}^{\alpha\beta})^\mu{}_\nu \right]$$

で任意の変換をあらわすことができる。

B.2.2 Dirac のスピノル場

自由場の運動方程式は重ね合わせの原理を満たすものでなくてはならない。系の自由度が複素場 $\psi(t, \mathbf{x}), \bar{\psi}(t, \mathbf{x})$ であった場合には、

$$i\hbar\dot{\psi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} \quad (\text{B.2.3})$$

が要請されていた (付録 B.1.3 項参照) から、運動方程式を与える Euler-Lagrange 方程式は、

$$i\hbar\dot{\psi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right)$$

となる。ラグランジアンが実数であることも加味すると、自由複素場のラグランジアン密度 \mathcal{L} は $\psi, \bar{\psi}$ をそれぞれ 1 乗ずつ含む 2 次形式に制限されなければならないとわかる。ここに Lorentz 対称性を課して、さらに \mathcal{L} の形を制限することを考える。

Lorentz 対称性を課す前の自由複素場のラグランジアン密度には ψ の微分 $\partial_\mu \psi$ も含まれているが、時間微分 $\partial_0 \psi = \dot{\psi}$ に関しては $i\bar{\psi}\dot{\psi}$ というように 1 階の微分が 1 つしか含まれないことが (B.2.3) から要請されている。Lorentz 変換 $\Lambda^\mu{}_\nu$ とそれに付随する複素場 ψ の線形変換 $M(\Lambda)$ に対して、

$$\partial_\mu \psi(x^\mu) \longrightarrow \partial_\mu \psi'(\Lambda^\mu{}_\nu x^\nu) \equiv \Lambda_\mu{}^\nu \partial_\nu M(\Lambda) \psi(x^\mu)$$

と微分項が変換する中でラグランジアンを Lorentz 不変に保つために、ここでは

$$M^\dagger(\Lambda) \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu M(\Lambda) = \gamma^\mu \quad (\text{B.2.4})$$

を満たすような γ^μ を用いて $\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi$ という形で微分項を \mathcal{L} に収めることを考える。

γ^μ は単なるスカラー係数としてではなく、 $M(\Lambda)$ と同様の線形変換として代数的性質を考える必要がある。ここでは運動方程式に注目してその代数を定める： $M^\dagger(\Lambda)M(\Lambda) = 1$ を仮定して、微分を含まない Lorentz 不変な 2 次形式が $\bar{\psi}\psi$ の形で表せるとすると、現時点で許される全ての項を含んだラグランジアン密度は、

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar c}{2} [\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi - (\gamma^\mu\partial_\mu\bar{\psi})\psi] - mc^2\bar{\psi}\psi$$

で与えられる (m は質量次元の実数) ので、Euler-Lagrange 方程式は次のようになる。

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi = \left(-\frac{i\hbar}{c}\gamma^\mu\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - mc \right) \psi = 0 \quad (\boldsymbol{\gamma} \equiv (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)) \quad (\text{B.2.5})$$

ここで時間微分の項を移行すると、

$$\frac{i\hbar}{c}\gamma^0\frac{\partial\psi}{\partial t} = (i\hbar\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - mc)\psi$$

を得るため、時間の 2 階微分に対して、

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{c^2}(\gamma^0)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= \gamma^0 (i\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - mc) (\gamma^0)^{-1} (i\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - mc) \psi \\ &= (\gamma^0)^2 \left[i\hbar (\gamma^0)^{-1} \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - mc (\gamma^0)^{-1} \right]^2 \psi \end{aligned}$$

が成り立つとわかる。この方程式自体がまた Lorentz 対称性を持つべきであるが、時間・空間の 2 階微分を用いた Lorentz 不変な要素に $\partial^\mu \partial_\nu = -c^{-2} \partial_t^2 + \nabla^2$ があることをふまえ、上式最右辺が

$$\left[\partial^\mu \partial_\mu - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = \left[-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2 - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi$$

に帰着できると仮定する。 $(\gamma^0)^{-1} \gamma^i \equiv \alpha^i$ ($i = 1, 2, 3$), $(\gamma^0)^{-1} \equiv \beta$ とおくと、この仮定から α^i, β の積 (合成写像) について次が成り立つことがわかる。

$$(\alpha^i)^2 = -1, \quad \alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = -2\delta^{ij}, \quad \alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0, \quad \beta^2 = 1$$

これらの関係式は γ^μ の積について、

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = -2\eta^{\mu\nu} \quad (\text{B.2.6})$$

が成り立つことを示している。このような積による代数構造は Clifford 代数の一種であり、

$$1, \gamma^\mu, \gamma^\mu \gamma^\nu (\mu < \nu), \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho (\mu < \nu < \rho), \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3$$

の 16 個の独立な元で張られる Clifford 代数は 4×4 の (反)Hermite 行列による表現をもつことが知られている⁸⁾。このことは物理的には、 ψ が時空の座標とは別の内部自由度を 4 つ有していることを意味している。

以上のようにして得られた 4 つの内部自由度をもつ複素場 ψ を (Dirac の) スピノル場という。スピノル場を自由度にもつ Lorentz 不変なラグランジアンに従う系を Dirac 場と呼び、自由 Dirac 場の運動方程式は (B.2.5) で与えられる。Lorentz 変換に伴うスピノル場の変換 $M(\Lambda)$ は、(B.2.4) に無限小の Lorentz 変換 (B.2.2) を用いた

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} S^{\alpha\beta} \right) \gamma^\mu &= \left[\delta^\mu_\nu - \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} (\mathcal{J}^{\alpha\beta})^\mu{}_\nu \right] \gamma^\nu \left(1 - \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} S^{\alpha\beta} \right) \\ &= \gamma^\mu - \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} \left[(\mathcal{J}^{\alpha\beta})^\mu{}_\nu \gamma^\nu + \gamma^\mu S^{\alpha\beta} \right] \end{aligned}$$

から無限小変換を定めることができ、生成子 $S^{\mu\nu}$ が

$$[S^{\mu\nu}, \gamma^\rho] = i(\eta^{\mu\rho} \gamma^\nu - \eta^{\nu\rho} \gamma^\mu)$$

を満たす反対称テンソルとわかる。このような $S^{\mu\nu}$ は $\gamma^{\mu\nu}$ を用いて次のように与えられる。

$$S^{\mu\nu} = \frac{i}{4} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \equiv \frac{i}{4} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu)$$

よって、一般の $M(\Lambda)$ は次で与えられる。

$$M(\Lambda) = \exp \left(-\frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} S^{\alpha\beta} \right)$$

8) $\gamma^i, \gamma^0 \gamma^i, \gamma^i \gamma^j \gamma^k, \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3$ の 8 つは (B.2.6) から自乗が -1 になるため、固有値が $\pm i$ で反 Hermite とわかる。

スピノル場の積については $\bar{\psi}\psi$ の Lorentz 不変性を先に仮定したことから、 γ^μ の行列表現に合わせて $\psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)$ とベクトル表示した際に $\bar{\psi}\psi$ が Lorentz 変換に対して不変に保たれるためには、

$$\bar{\psi}\psi \equiv \psi^\dagger \gamma^0 \psi$$

としなければいけない。このことは、 $[S^{\mu\nu}, \gamma^0] = 0$ を踏まえて無限小変換の $M(\Lambda)$ で考えたときに、

$$\psi^\dagger M^\dagger(\Lambda) \gamma^0 M(\Lambda) \psi = \psi^\dagger \gamma^0 \psi$$

が成り立つことから確かめられる。この積の性質においてスピノルとベクトルは区別されるべきである。

以降では γ^μ の表現行列として、

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -I_{2 \times 2} \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ -\sigma^j & 0 \end{pmatrix}$$

$$\left(\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$$

を採用する (Dirac-Pauli 表示)。

自由 Dirac 場の平面波解

自由 Dirac 場の平面波解 ψ は次のように求められる：Dirac-Pauli 表示の自由 Dirac 場の運動方程式 (B.2.5) は、

$$\psi_R \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_L \equiv \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

というようにスピノルを分離することで、

$$\left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} + mc \right) \psi_R + i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi_L = 0, \quad \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - mc \right) \psi_L + i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi_R = 0$$

という連立微分方程式に帰着できる。平面波解を $\psi \propto e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}$ の形で仮定すると、上の連立微分方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar\omega}{c} + mc \right) \psi_R - \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \psi_L = 0, \quad \left(\frac{\hbar\omega}{c} + mc \right) \psi_L + \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \psi_R = 0$$

という連立行列方程式に帰着されるので、 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$ の固有値と固有ベクトル

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}) u_+(\mathbf{k}) = |\mathbf{k}| u_+(\mathbf{k}), \quad (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}) u_-(\mathbf{k}) = -|\mathbf{k}| u_-(\mathbf{k})$$

で ψ_R, ψ_L の基底を取り直してこれを解いて波数 \mathbf{k} ごとに 4 つの独立な解を求めればよい。結果として次の 4 つが求まる：

$$\begin{pmatrix} u_+(\mathbf{k}) \\ -\frac{\omega(\mathbf{k}) - (mc^2/\hbar)}{c|\mathbf{k}|} u_+(\mathbf{k}) \end{pmatrix} e^{i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad \begin{pmatrix} u_-(\mathbf{k}) \\ \frac{\omega(\mathbf{k}) - (mc^2/\hbar)}{c|\mathbf{k}|} u_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} e^{i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}},$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\omega(\mathbf{k}) - (mc^2/\hbar)}{c|\mathbf{k}|} u_+(\mathbf{k}) \\ u_+(\mathbf{k}) \end{pmatrix} e^{-i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad \begin{pmatrix} -\frac{\omega(\mathbf{k}) - (mc^2/\hbar)}{c|\mathbf{k}|} u_-(\mathbf{k}) \\ u_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix} e^{-i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (\text{B.2.7})$$

ここで、分散関係 $\omega(\mathbf{k})$ は次のようになっている。

$$\omega(\mathbf{k}) \equiv \sqrt{\left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2 + c^2 \mathbf{k}^2}$$

$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ の極限では、

$$\omega(\mathbf{k}) \simeq \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{\hbar}{2m} \mathbf{k}^2 \quad (\text{B.2.8})$$

となることをふまえると上記の平面波解はそれぞれ、

$$\begin{pmatrix} u_+(\mathbf{0}) \\ 0 \end{pmatrix} e^{imc^2 t/\hbar}, \quad \begin{pmatrix} u_-(\mathbf{0}) \\ 0 \end{pmatrix} e^{imc^2 t/\hbar}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ u_+(\mathbf{0}) \end{pmatrix} e^{-imc^2 t/\hbar}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ u_-(\mathbf{0}) \end{pmatrix} e^{-imc^2 t/\hbar} \quad (\text{B.2.9})$$

に帰着する。 $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ においては $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$ の固有値は縮退するため、 $u_{\pm}(\mathbf{0})$ は任意の直交するベクトルにとってよい。

B.2.3 Dirac 場の Noether カレント

B.1.4 項の議論に従い、Dirac 場の Noether カレントについて求めてみる。

空間並進対称性に対して Dirac 場の関数形は不変に保たれるので、対応する Noether カレントとしてエネルギー・運動量テンソル $T_{\mu\nu}$ が次のように定義される；

$$T^{\mu}_{\nu} \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_{\mu}\psi)} \partial_{\nu}\psi + \partial_{\nu}\bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_{\mu}\bar{\psi})} - \delta^{\mu}_{\nu} \mathcal{L}$$

特に、自由 Dirac 場の場合についてエネルギー密度 T^0_0 の表式を求めてみると、

$$T^0_0 = -\frac{i\hbar c}{2} [\bar{\psi}(\gamma^i \partial_i \psi) - (\gamma^i \partial_i \bar{\psi})\psi] + mc^2 \bar{\psi}\psi$$

となる。この T^0_0 について各平面波解 (B.2.7) を代入すると、位相が $e^{i\omega(\mathbf{k})t}$ で回る解は正、 $e^{-i\omega(\mathbf{k})t}$ で回る解は負のエネルギー寄与を与えることがわかる。負のエネルギー寄与をもち振幅が大きくなるほど系のエネルギーを下げるモードは反粒子解と呼ばれる。また、同じく自由 Dirac 場の場合についての運動量密度 T^0_i は、

$$T^0_i = \frac{i\hbar}{2} [\bar{\psi}\gamma^0 \partial_i \psi - \partial_i \bar{\psi}\gamma^0 \psi]$$

で与えられ、各平面波解 (B.2.7) をそれぞれ代入すると、どれも $\hbar \mathbf{k}$ に比例した運動量をもつことがわかる。

空間回転対称性は Lorentz 対称性の中に含まれているので、空間回転対称性に対する Noether の定理を Dirac 場について考えることができる。Dirac 場は空間回転に伴って関数形も変化することに注意すると、 z 軸周りの無限小空間回転変換に対する Dirac 場の変換は、

$$\begin{aligned} \psi(x^{\mu}) &\longrightarrow \psi'(x^{\mu}; \theta) \equiv \left[1 - \frac{i\theta}{2} (\mathcal{S}^{12} - \mathcal{S}^{21})\right] [\psi(x^{\mu}) - \theta(x^2 \partial^1 \psi - x^1 \partial^2 \psi)] \\ &= \left[\psi(x^{\mu}) + \theta(x^1 \partial^2 \psi - x^2 \partial^1 \psi) + \frac{\theta}{2} \gamma^1 \gamma^2 \psi\right] \end{aligned}$$

また、その共役スピノルの変換は、

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(x^{\mu}) &\longrightarrow \bar{\psi}'(x^{\mu}; \theta) \equiv [\psi(x^{\mu}) - \theta(x^2 \partial^1 \psi - x^1 \partial^2 \psi)] \left[1 + \frac{i\theta}{2} (\mathcal{S}^{12} - \mathcal{S}^{21})\right] \\ &= \left[\bar{\psi}(x^{\mu}) + \theta(x^1 \partial^2 \bar{\psi} - x^2 \partial^1 \bar{\psi}) + \frac{\theta}{2} \bar{\psi} \gamma^2 \gamma^1\right] \end{aligned}$$

と表される。よって、 z 軸周りの空間回転対称性から導かれる Dirac 場の Noether カレントは、

$$\mathcal{J}^{\mu 3} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \left[(x^1 \partial^2 \psi - x^2 \partial^1 \psi) + \frac{1}{2} \gamma^1 \gamma^2 \psi \right] - \left[(x^1 \partial^2 \bar{\psi} - x^2 \partial^1 \bar{\psi}) + \frac{1}{2} \bar{\psi} \gamma^2 \gamma^1 \right] \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \bar{\psi})}$$

であり、保存則は $\partial_\mu \mathcal{J}^{\mu 3} = 0$ で与えられる。 \mathcal{J}^{03} が Dirac 場の単位体積当たりの全角運動量の z 成分を与えることになるが、自由 Dirac 場の場合に具体的に表式を求めてみると、

$$\mathcal{J}^{03} = -\frac{i\hbar}{2} [\bar{\psi}(x^1 \partial^2 \psi - x^2 \partial^1 \psi) - (x^1 \partial^2 \bar{\psi} - x^2 \partial^1 \bar{\psi})\psi] - \hbar \bar{\psi} \mathcal{S}^{12} \psi$$

となり、スカラー場で導いた結果 (B.1.4 項参照) にはなかった項が現れている。 x 軸周り、 y 軸周りの回転対称性についても同様の議論ができて、Dirac 場の全角運動量は次で与えられることがわかる ($\mathcal{S} \equiv (\mathcal{S}^{23}, \mathcal{S}^{31}, \mathcal{S}^{12})$)。

$$\mathbf{J} = -\frac{i\hbar}{2} [\bar{\psi}(\mathbf{x} \times \nabla \psi) - (\mathbf{x} \times \nabla \bar{\psi})\psi] - \hbar \bar{\psi} \mathbf{S} \psi$$

新たに現れた項は Dirac 場が空間的に一様な配位の場合でも角運動量を有限の値に残しうするため、Dirac 場で記述される物質が固有にもつ角運動量、すなわちスピン角運動量に対応していると考えられる。Dirac-Pauli 表示では、

$$\mathbf{S} \equiv -\hbar \psi^\dagger \boldsymbol{\gamma}^0 \mathbf{S} \psi = \frac{\hbar}{2} \psi^\dagger \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \psi$$

は対角行列になっているため、スピン角運動量が $\hbar/2$ 単位で増減することが見てとれる。厳密には Dirac 場を量子化して初めて正当化されることだが、この点で Dirac 場は Fermi 粒子を表す場である。また、前項の各平面波解 (B.2.9) についてスピン角運動量の項を計算すると、 $u_+(u_-)$ で記述されるスピノルをもつ平面波解は \mathbf{k} と同じ方向 (反対方向) のスピンをもつことが、また同じ u_\pm で記述されるスピノルの粒子解と反粒子解同士では反対向きのスピンを有することがわかる。

B.2.4 非相対論極限

最小単位 of the length scale l について $l \gg \hbar/mc$ ⁹⁾ が成り立つような系では、 $|\mathbf{k}| \ll mc/\hbar$ を満たす平面波解のみが運動に寄与する。この仮定の下で $\psi' \equiv \psi e^{-imc^2 t/\hbar}$ と新しく定義しなおした Dirac 場での反粒子解は (群速度に比べて) 非常に速い位相速度をもつため、時間平均して振幅を 0 とみなせる¹⁰⁾、すなわち反粒子解の寄与を無視できると考えられる。 ψ' の運動方程式は、

$$\begin{cases} \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} + mc \right) (e^{imc^2 t/\hbar} \psi'_R) + i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (e^{imc^2 t/\hbar} \psi'_L) = 0 \\ \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - mc \right) (e^{imc^2 t/\hbar} \psi'_L) + i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (e^{imc^2 t/\hbar} \psi'_R) = 0 \end{cases}$$

$$\therefore \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi'_R + i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi'_L = 0, \quad \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - 2mc \right) \psi'_L + i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi'_R = 0$$

で与えられるので、Fourier 変換を行うと、

$$-\frac{\hbar\omega}{c} \psi'_R + \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \psi'_L = 0, \quad \left(\frac{\hbar\omega}{c} - 2mc \right) \psi'_L - \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \psi'_R = 0$$

9) $\lambda \equiv \hbar/mc$ は Compton 波長と呼ばれる。

10) $\Delta t \sim \hbar/mc^2$ 程度の時間スケールの物理を見逃すことにはあたりますが、空間スケールが $l \gg \hbar/mc$ の状況でこの物理は伝播速度が光速 c を大きく上回るようになるためありえない。よって妥当な近似である。

となり、上の第2式を第1式に用いると、

$$-\frac{\omega}{c}\psi'_R - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2mc} \left(1 - \frac{\hbar\omega}{mc^2}\right)^{-1} \psi'_R = 0$$

を得る。反粒子解を無視する仮定から ψ' の平面波解の分散関係は $\omega(\mathbf{k}) - mc^2/\hbar$ に一致し、さらに (B.2.8) の近似式が成り立つため $\omega \simeq \hbar \mathbf{k}^2/2m \ll mc^2/\hbar$ と見積もられる。よって上式は、今の近似の範囲では

$$-\frac{\omega}{c}\psi'_R - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2mc} \psi'_R = 0$$

とみなすべきである。これを Fourier 逆変換することで得られる近似的な運動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'_R = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi'_R$$

というように、自由 Schrödinger 場の運動方程式になる。すなわち、以上の近似は Dirac 場の上2成分 ψ_R^{Dirac} が $s = 1/2$ の Schrödinger 場 ($\psi_{\uparrow}^{\text{Sch}}, \psi_{\downarrow}^{\text{Sch}}$) に帰着するような非相対論極限を与える近似だったことになる。Dirac 場の m はそのまま Schrödinger 場の m 、すなわち多粒子系の量子論における粒子質量である。

B.3 ゲージ場

振幅に関係する量のみが物理量を与える複素場においては、その位相成分 (ゲージという) に不定性があるべきである。しかし、局所的なゲージ変換

$$\psi(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi'(t, \mathbf{x}) = e^{i\alpha(t, \mathbf{x})/\hbar} \psi(t, \mathbf{x})$$

に対する対称性を複素場が持つためには、ゲージ場と呼ばれる新たな自由度を付け加える必要がある。

B.3.1 Schrödinger 場に付随するゲージ場

スピン s の自由 Schrödinger 場

$$L_{\text{Sch}} \equiv \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{x} \left[i\hbar \bar{\psi}_{\sigma}(t, \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\sigma}(t, \mathbf{x}) - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi_{\sigma}(t, \mathbf{x})|^2 \right]$$

に対して、各スピン準位 $\sigma = -s, -s+1, \dots, s$ の場に一樣な局所ゲージ変換

$$\psi_{\sigma}(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi'_{\sigma}(t, \mathbf{x}) = e^{i\alpha(t, \mathbf{x})/\hbar} \psi_{\sigma}(t, \mathbf{x})$$

を施す。このとき、 $\bar{\psi}_{\sigma}(t, \mathbf{x}) = \psi_{-\sigma}(-t, \mathbf{x})$ が必ず成り立つため (1.3.6 項参照)、 $\alpha(t, \mathbf{x})$ は、

$$\alpha(-t, \mathbf{x}) = -\alpha(t, \mathbf{x})$$

を満たさなければならない。この局所ゲージ変換により L_{Sch} は、

$$\begin{aligned} L_{\text{Sch}} \longrightarrow L'_{\text{Sch}} &\equiv \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{x} \left[i\hbar \bar{\psi}'_{\sigma}(t, \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial t} \psi'_{\sigma}(t, \mathbf{x}) - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi'_{\sigma}(t, \mathbf{x})|^2 \right] \\ &= L_{\text{Sch}} - \int d^3\mathbf{x} \left\{ \left[\frac{1}{2m} |\nabla \alpha|^2 - \dot{\alpha} \right] \bar{\psi}_{\sigma} \psi_{\sigma} + \frac{i\hbar}{2m} [\bar{\psi}_{\sigma} (\nabla \alpha \cdot \nabla \psi_{\sigma}) - (\nabla \alpha \cdot \nabla \bar{\psi}_{\sigma}) \psi_{\sigma}] \right\} \end{aligned}$$

と変換されて、一般に局所ゲージ対称性が満たされることがわかる。しかし、 ψ_σ に局所ゲージ変換を行う際に同じ $\alpha(t, \mathbf{x})$ に対して、

$$\varphi(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \varphi(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{q} \dot{\alpha}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \mathbf{A}'(t, \mathbf{x}) = \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{q} \nabla \alpha(t, \mathbf{x}) \quad (\text{B.3.1})$$

と変換するような場を用いて ($q \neq 0$)、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi(t, \mathbf{x}), \quad i\hbar \nabla \longrightarrow i\hbar \nabla + q\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \quad (\text{B.3.2})$$

と置き換えたラグランジアン

$$L = \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{x} \left\{ \bar{\psi}_{\sigma}(t, \mathbf{x}) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi(t, \mathbf{x}) \right] \psi_{\sigma}(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{2m} |[-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}(t, \mathbf{x})] \psi_{\sigma}(t, \mathbf{x})|^2 \right\}$$

は、局所ゲージ変換のもとで $\psi_{\sigma}(t, \mathbf{x})$ と $\varphi(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ それぞれで生じる変化分がちょうど打ち消し合い、不変に保たれる。局所ゲージ対称性を要請するとこのようにして導入しなければならない場 $\varphi(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ のことをゲージ場という。

ゲージ場 φ, \mathbf{A} の導入は任意の座標系において (B.3.2) の形式で行われるべきなので、 φ, \mathbf{A} の座標変換に対するふるまいは $\partial/\partial t, \nabla$ のそれに一致しなければならない。特に、空間回転 $\mathbf{x} \rightarrow R\mathbf{x}$ に対しては $\mathbf{A} \rightarrow R^{-1}\mathbf{A}$ とふるまい、 φ は不変に保たれることがわかる。ここで R は 3×3 の回転行列で、 ${}^tR = R^{-1}$ を満たす。このため、

$$\varphi, \quad (\nabla\varphi)^2, \quad \nabla\varphi \cdot \mathbf{A}, \quad \mathbf{A}^2, \quad \nabla \cdot \mathbf{A}, \quad \nabla \times \mathbf{A}$$

などが空間回転に対して不変に保たれる。また、(B.3.1) が $\alpha(-t, \mathbf{x}) = -\alpha(t, \mathbf{x})$ を満たす任意の $\alpha(t, \mathbf{x})$ で成り立つことからゲージ場の時間反転変換に対するふるまいも定められて、

$$\varphi(-t, \mathbf{x}) = \varphi(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{A}(-t, \mathbf{x}) = -\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$$

となる。この変換性は、 $\mathbf{A} \neq 0$ である場合には系が時間反転対称性を破ることを示唆している。

$\psi = 0$ であっても位相の自由度は残っていてゲージ場が存在するため、ゲージ場 φ, \mathbf{A} は物質場 ψ と独立に運動することができる。よって、上のラグランジアン L にはゲージ場の自由度のみで表された運動項を付け加える必要がある。ゲージ場の運動項は次の条件を満たす必要がある：

- 運動方程式が重ね合わせの原理を満たすように、 φ, \mathbf{A} の 2 次形式で表される
- 運動方程式が局所性を持つように、時間・空間の 3 階以上の微分を含まない
- 系の対称性である空間回転対称性と局所ゲージ対称性を満たす

以上を満たす運動項として、次のようなものが考えられる。

$$L_{\text{EM}} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3\mathbf{x} \left[\left(\nabla\varphi + \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right]$$

この運動項を採用すると、ゲージ場 φ, \mathbf{A} と結合した Schrödinger 場 ψ_{σ} の Euler-Lagrange 方程式は

次で与えられる¹¹⁾:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_\sigma}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})^2 + q\varphi \right] \psi_\sigma, \quad \varepsilon_0 \nabla \cdot \left(\nabla \varphi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) + q \sum_\sigma |\psi_\sigma|^2 = 0$$

$$\varepsilon_0 \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \varphi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) + c^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right] - \frac{q\hbar}{2mi} \sum_\sigma [\bar{\psi}_\sigma (\nabla \psi_\sigma) - (\nabla \bar{\psi}_\sigma) \psi_\sigma] + \frac{q^2}{m} \sum_\sigma |\psi_\sigma|^2 \mathbf{A} = 0$$

$\psi_\sigma(t, \mathbf{x})$ に関する量を

$$\rho(t, \mathbf{x}) \equiv q \sum_\sigma |\psi_\sigma|^2, \quad \mathbf{j}(t, \mathbf{x}) \equiv \frac{q\hbar}{2mi} \sum_\sigma [\bar{\psi}_\sigma (\nabla \psi_\sigma) - (\nabla \bar{\psi}_\sigma) \psi_\sigma] - \frac{q}{m} \rho \mathbf{A}$$

とおき¹²⁾、ゲージ不変な場

$$\mathbf{E} \equiv -\nabla \varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} \equiv \nabla \times \mathbf{A}$$

および $\mu_0 \equiv (\varepsilon_0 c^2)^{-1}$ を定義すると、 φ, \mathbf{A} に対する EL 方程式は次のように表し直せる。

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)$$

ベクトル解析の恒等式 $\nabla \times \nabla \varphi = \mathbf{0}$, $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0$ より自然に導かれる、

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mathbf{0}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

と合わせたこの 4 式は Maxwell 方程式そのものであり、ゲージ不変な場 (\mathbf{E}, \mathbf{B}) は電磁場、 ε_0, μ_0 は真空の誘電率と透磁率、 c は光速に他ならないことがわかる。

B.3.2 Dirac 場に伴随するゲージ場

今度は自由 Dirac 場に対して局所ゲージ対称性を要請してゲージ場を導入する。

$$L_{\text{Dirac}} = \int d^3\mathbf{x} \bar{\psi} (i\hbar c \gamma^\mu \partial_\mu - mc^2) \psi \longrightarrow L'_{\text{Dirac}} = \int d^3\mathbf{x} \bar{\psi} [c \gamma^\mu (i\hbar \partial_\mu + q A_\mu) - mc^2] \psi$$

ここでの 4 元ゲージ場 A_μ は局所ゲージ変換 $\psi \rightarrow e^{i\alpha/\hbar} \psi$ に対して、

$$A_\mu \longrightarrow A_\mu + \frac{1}{q} \partial_\mu \alpha$$

と変換されるため、Lorentz 変換のもとで 4 元ベクトル ∂_μ と同じ変換性をもつべきである。よって、Lorentz 変換の下では

$$A_\mu(x^\mu) \longrightarrow A'_\mu(\Lambda^\mu{}_\nu x^\nu) = \Lambda_\mu{}^\nu A_\nu(x)$$

というように変換される。

ラグランジアンに A_μ のみで表される項を付け足すことで、最小作用の原理から A_μ の運動方程式も得られるようにする¹³⁾。2 階反対称テンソルのゲージ不変量

$$F_{\mu\nu}(t, \mathbf{x}) = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

11) $j = x, y, z$ に対して、

$$\sum_{i=x,y,z} \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{EM}}}{\partial (\partial_i A_j)} = \sum_i \left(\frac{\partial^2 A_i}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\partial^2 A_j}{\partial x_i^2} \right) = [\nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}]_j = [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A})]_j$$

となることに注意する。

12) これらは局所ゲージ変換に対し不変な量になっている。

13) 以降では単にゲージ不変と言った場合には、局所ゲージ変換に対して不変であることを意味する。

は Lorentz 変換に対して、

$$F_{\mu\nu}(x^\mu) \longrightarrow F'_{\mu\nu}(\Lambda^\mu{}_\nu x^\nu) = \Lambda_\mu{}^\rho \Lambda_\nu{}^\sigma F_{\rho\sigma}(x)$$

と変換するため、 $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ がゲージ不変かつ Lorentz 不変とわかる。自由ゲージ場の運動方程式が A_μ について重ね合わせが成り立つものになるためには、付け足す項は A_μ の 2 次で表されていないなければならない (このことを踏まえて運動項ともいう)。よって、やはり

$$L_{\text{EM}} = \alpha \int d^3\mathbf{x} F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$$

のみを付け足せばよいとわかる¹⁴⁾。

ゲージ場と結合した Dirac 場の Euler-Lagrange 方程式は次で与えられる：

$$c [\gamma^\mu (i\hbar\partial_\mu + qA_\mu) - mc^2] \psi = 0, \quad -4\alpha\partial_\nu F^{\mu\nu} + cq\bar{\psi}\gamma^\mu\psi = 0$$

第 2 式が Lorentz 共変な Maxwell 方程式

$$\partial_\nu F^{\mu\nu} = \frac{j^\mu}{\epsilon_0 c}$$

と一致するためには、 $\psi_\sigma(t, \mathbf{x})$ に関する量を $j^\mu \equiv q\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ とおいて、 $\alpha = \epsilon_0 c^2/4$ とすればよい。このように定められた Dirac 場に付随するゲージ場のラグランジアン L_{EM} は、前項で見た Schrödinger 場に付随するゲージ場のラグランジアンに一致している。

非相対論極限

B.2.4 項で見た Dirac 場の非相対論極限をゲージ場を導入した状況で考えてみる。まずゲージ場と結合した Dirac 場の運動方程式に反粒子解を打ち消す位相変換 $\psi \rightarrow \psi e^{ime^2 t/\hbar}$ を行くと、

$$\left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{q\varphi}{c} \right) \psi_R + \boldsymbol{\sigma} \cdot (i\hbar\nabla + q\mathbf{A}) \psi_L = 0, \quad \left(\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{q\varphi}{c} - 2mc \right) \psi_L + \boldsymbol{\sigma} \cdot (i\hbar\nabla + q\mathbf{A}) \psi_R = 0$$

を得る。ゲージ場を導入した段階で重ね合わせの原理が成り立たなくなっているため平面波解を仮定することはもはやできないが、ここでは B.2.4 項で $\omega \ll mc^2/\hbar$ としたことに対応して上の第 2 式の時間微分を無視し、さらに $\varphi \ll 2mc^2$ も仮定する近似を行う。すると、

$$\psi_L = \frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot (i\hbar\nabla + q\mathbf{A}) \psi_R$$

を得るから、近似的な運動方程式として次が得られる。

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi - \frac{1}{2m} [\boldsymbol{\sigma} \cdot (i\hbar\nabla + q\mathbf{A})]^2 \right\} \psi_R = 0$$

14) Lorentz 不変だがゲージ不変でない A_μ の 2 次の量として、 $A_\mu A^\mu = \phi^2 - \mathbf{A}^2$ がある。また、Lorentz 不変かつゲージ不変だが空間反転対称性を破る項として、擬スカラー $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}$ ($\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ は 4 階完全反対称テンソル、 $\epsilon^{0123} = 1$) もある。

行列の 2 乗の部分を実算すると、

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{\sigma} \cdot (i\hbar \nabla + q\mathbf{A})]^2 &= \begin{pmatrix} i\hbar \partial_z + qA_z & i\hbar(\partial_x - i\partial_y) + q(A_x - iA_y) \\ i\hbar(\partial_x + i\partial_y) + q(A_x + iA_y) & -i\hbar \partial_z - qA_z \end{pmatrix}^2 \\
&= \begin{pmatrix} -\hbar^2 \nabla^2 + i\hbar q(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \hbar(\nabla \times \mathbf{A})_z + q^2 \mathbf{A}^2 & -\hbar q[(\nabla \times \mathbf{A})_x - i(\nabla \times \mathbf{A})_y] \\ -\hbar q[(\nabla \times \mathbf{A})_x + i(\nabla \times \mathbf{A})_y] & -\hbar^2 \nabla^2 + i\hbar q(\nabla \cdot \mathbf{A}) + \hbar(\nabla \times \mathbf{A})_z + q^2 \mathbf{A}^2 \end{pmatrix} \\
&= (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})^2 - q\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}
\end{aligned}$$

となっていることから、この運動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_R = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})^2 + q\varphi - \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \psi_R \quad (\text{B.3.3})$$

というように $s = 1/2$ の Schrödinger 場 $\psi^{\text{Sch}} = (\psi_\uparrow, \psi_\downarrow)$ の運動方程式に新たな項が付け加わった形をしている。このような運動方程式に対応するラグランジアンは次のようになる。

$$L_{\text{Pauli}} = \int d^3\mathbf{x} \left\{ \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[\bar{\psi}_\sigma \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi \right) \psi_\sigma - \frac{1}{2m} |(-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}) \psi_\sigma|^2 \right] - \frac{q}{m} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \right\}$$

ただし、 \mathbf{S} は

$$\mathbf{S} \equiv \frac{\hbar}{2} \bar{\boldsymbol{\psi}} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\psi} = \frac{\hbar}{2} \left(\bar{\psi}_\uparrow \psi_\downarrow + \bar{\psi}_\downarrow \psi_\uparrow, i(\bar{\psi}_\downarrow \psi_\uparrow - \bar{\psi}_\uparrow \psi_\downarrow), |\psi_\uparrow|^2 - |\psi_\downarrow|^2 \right)$$

で与えられており、これは元の Dirac 場で Noether カレントとして得られたスピン角運動量 \mathbf{S} に (非相対論極限で) 等しいことがわかる。このようにして導入されたスピン角運動量とゲージ場の結合は Zeeman 相互作用と呼ばれ、この項により Maxwell 方程式は、Maxwell-Ampère の式のみが

$$\nabla \times \left(\mathbf{B} + \frac{q\mu_0}{m} \mathbf{S} \right) = \mu_0 \left[\mathbf{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right]$$

と変更を受ける。また、(B.3.3) は Pauli 方程式とも呼ばれる。

B.3.3 ゲージ場の解析力学

Schrödinger 場とゲージ場の結合項を (ρ, \mathbf{j}) で表したとき、ゲージ場のラグランジアンは次で与えられることになる。

$$L_{\text{EM}} = \int d^3\mathbf{x} \left\{ \frac{\varepsilon_0}{2} \left[\left(\nabla \varphi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] - \rho \varphi + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} + \frac{q}{2m} \rho \mathbf{A}^2 \right\}$$

このラグランジアンに対して、B.1 節で見た解析力学の処方を適用する。

ゲージ場の Hamilton 形式

ゲージ場の変数 (φ, \mathbf{A}) に対して、共役運動量を考えると、ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ に対しては、

$$\pi_i(t, \mathbf{x}) \equiv \frac{\delta L_{\text{EM}}}{\delta \dot{A}_i} = \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) = -\varepsilon_0 E_i(t, \mathbf{x})$$

という形でゲージ不変に定義できるのに対して、スカラーポテンシャル $\varphi(t, \mathbf{x})$ の共役運動量は L_{EM} に $\dot{\varphi}$ が含まれないために、

$$\pi_0(t, \mathbf{x}) \equiv \frac{\delta L_{\text{EM}}}{\delta \dot{\varphi}} = 0$$

と恒等的に 0 になることがわかる。このように全ての変数に対して共役運動量が定義できない系を特異系という。特異系には運動の自由度を下げる拘束条件があることになり、ゲージ場の場合その条件とは局所ゲージ対称性に他ならない。Lagrange 形式ではこのように拘束条件が陽に現れなかったため未定乗数法を使わずに運動方程式を導くことができたが、Hamilton 形式ではそれらの内的拘束条件を手で課してから最小作用の原理を適用する必要がある。

拘束条件 $\pi_0 = 0$ はその時間微分も当然恒等的に 0 であるが、このことが新たな拘束条件を課すことがある。Hamilton 形式での時間発展はハミルトニアンに対する Poisson 括弧で記述されるため、 $\pi_0 = 0$ を用いたハミルトニアン

$$\begin{aligned} H &\equiv H_{\text{Sch}} + \int d^3\mathbf{x} \, \boldsymbol{\pi}(t, \mathbf{x}) \cdot \dot{\mathbf{A}}(t, \mathbf{x}) - L_{\text{EM}} \\ &= H_{\text{Sch}} + \int d^3\mathbf{x} \left\{ \boldsymbol{\pi} \cdot \left(\frac{\boldsymbol{\pi}}{2\varepsilon_0} - \nabla\varphi \right) + \frac{\varepsilon_0 c^2}{2} (\nabla \times \mathbf{A})^2 + \rho\varphi - \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} - \frac{q}{2m} \rho \mathbf{A}^2 \right\} \end{aligned}$$

(ただし $\boldsymbol{\pi} \equiv (\pi_x, \pi_y, \pi_z)$) に対してこれを確かめると、

$$\begin{aligned} \{\pi_0(t, \mathbf{x}), H\}_{\text{P}} &= \int d^3\mathbf{x}' [-\boldsymbol{\pi}(t, \mathbf{x}') \cdot \nabla' \{\pi_0(t, \mathbf{x}), \varphi(t, \mathbf{x}')\}_{\text{P}} + \rho(t, \mathbf{x}') \{\pi_0(t, \mathbf{x}), \varphi(t, \mathbf{x}')\}_{\text{P}}] \\ &= \nabla \cdot \boldsymbol{\pi}(t, \mathbf{x}) + \rho(t, \mathbf{x}) \end{aligned}$$

より、 $\pi = 0$ とは異なる拘束条件が得られることがわかる。 $\boldsymbol{\pi} = -\varepsilon_0 \mathbf{E}$ であったことからこれは Gauss の法則にほかならず、Gauss 拘束条件とも呼ばれる。Gauss 拘束条件の時間微分からも新たな拘束条件が導かれると期待するのは自然であるが、同様に Poisson 括弧で時間発展を計算すると以下のように恒等的に 0 であるとわかるため、拘束条件は以上の 2 つで尽きている。

$$\begin{aligned} &\{\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}(t, \mathbf{x}) + \rho(t, \mathbf{x}), H\}_{\text{P}} \\ &= \int d^3\mathbf{x}' [\varepsilon_0 c^2 (\nabla \times \mathbf{A}(t, \mathbf{x}')) \cdot \nabla' \times \{\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}(t, \mathbf{x}), \mathbf{A}(t, \mathbf{x}')\}_{\text{P}} \\ &\quad - \{\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}(t, \mathbf{x}), \mathbf{j}(t, \mathbf{x}') \cdot \mathbf{A}(t, \mathbf{x}')\}_{\text{P}} - \frac{q}{2m} \{\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}(t, \mathbf{x}), \rho(t, \mathbf{x}') \mathbf{A}^2(t, \mathbf{x}')\}_{\text{P}}] + \{\rho(t, \mathbf{x}), H\}_{\text{P}} \\ &= \nabla \cdot \mathbf{j}(t, \mathbf{x}) - \frac{q}{m} \nabla \cdot [\rho(t, \mathbf{x}) \mathbf{A}(t, \mathbf{x})] + \left\{ \rho(t, \mathbf{x}), H_{\text{Sch}} + \int d^3\mathbf{x}' \mathbf{j}(t, \mathbf{x}') \cdot \mathbf{A}(t, \mathbf{x}') \right\}_{\text{P}} = 0 \end{aligned}$$

以上の拘束条件を未定乗数法で加えて再度定義しなおしたハミルトニアン \tilde{H} に対して最小作用の原理を適用し、得られた運動方程式から未定乗数を消去することで運動が定まるはずだが、

$$\{\pi_0, (\nabla \cdot \boldsymbol{\pi} + \rho)\}_{\text{P}} = 0$$

が成り立つ今の場合には、得られた運動方程式から未定乗数を定めることができない。実際、 $\{\pi_0, \tilde{H}\}_{\text{P}}$ は初期状態が拘束条件を満たしていれば恒等的に 0 になってしまい、 \tilde{H} に加え入れる際の π_0 の未定乗数が定められない。このような場合には、

$$\{\pi_0(t, \mathbf{x}), \chi_1(t, \mathbf{x}')\}_{\text{P}} \neq 0, \quad \{\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}(t, \mathbf{x}) + \rho(t, \mathbf{x}), \chi_2(t, \mathbf{x}')\}_{\text{P}} \neq 0$$

を満たす余分な拘束条件 χ_1, χ_2 をさらに課すことで (また新たに加わったものも含めて) 未定乗数が定まることが知られている。すなわち、 $\pi_0 = 0, \nabla \cdot \boldsymbol{\pi} + \rho = 0$ に対応する未定乗数こそがゲージ

自由度であり、 χ_1, χ_2 はゲージ固定条件に他ならない¹⁵⁾。Coulomb ゲージ固定条件は、

$$\chi_1(t, \mathbf{x}) = \varphi(t, \mathbf{x}), \quad \chi_2(t, \mathbf{x}) = \nabla \cdot \mathbf{A}(t, \mathbf{x})$$

というようにこの形式では表される。Coulomb ゲージ固定条件の内 $\pi_0 = 0, \varphi = 0$ のみを課した系のハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{Sch}} + \int d^3\mathbf{x} \left[\frac{\pi^2}{2\varepsilon_0} + \frac{\varepsilon_0 c^2}{2} (\nabla \times \mathbf{A})^2 - \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} - \frac{q}{2m} \rho \mathbf{A}^2 \right] \\ &= \int d^3\mathbf{x} \left[\frac{1}{2m} \sum_{\sigma} |(-i\hbar \nabla - q\mathbf{A})\psi_{\sigma}|^2 + \frac{\pi^2}{2\varepsilon_0} + \frac{\varepsilon_0 c^2}{2} (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] \end{aligned}$$

Noether カレント

B.1.4 項の議論に従い、物質場と結合していない自由ゲージ場

$$\mathcal{L}_{\text{EM}} = \frac{\varepsilon_0}{2} \left[\left(\nabla \varphi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 - c^2 (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] = \frac{\varepsilon_0}{2} (\mathbf{E}^2 - c^2 \mathbf{B}^2)$$

の Noether カレントを求めてみる。

時空並進対称性に対応した Noether カレントであるエネルギー・運動量テンソル T^{μ}_{ν} を考える際には、時空並進変換をゲージ不変なものに制限しなければならないことに注意する。すなわち、 x^{μ} 成分での無限小変換

$$x^{\mu} \longrightarrow x'^{\mu}(\varepsilon) \equiv x^{\mu} + \varepsilon$$

に対して、 A_{ν} は次のように変換する。

$$A_{\nu} \longrightarrow A_{\nu} - \varepsilon(\partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu})$$

よって、自由ゲージ場のエネルギー・運動量テンソル T^{μ}_{ν} は次のように与えられる。

$$T^{\mu}_{\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_{\mu} A_{\rho})} (\partial_{\nu} A_{\rho} - \partial_{\rho} A_{\nu}) - \delta^{\mu}_{\nu} \mathcal{L}$$

特に、エネルギー密度 T^0_0 および運動量密度 T^0_i の表式を求めると、

$$T^0_0 = \frac{\varepsilon_0}{2} (\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2), \quad T^0_i = -\varepsilon_0 (\mathbf{E} \times \mathbf{B})_i$$

となり、ゲージ不変な形になっていることがわかる。また、自由ゲージ場の場合は $T^i_0 = -c^2 T^0_i$ が成り立っており、Noether の定理から、

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2}{2} \right) + c^2 \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = 0$$

が成り立つことになる¹⁶⁾。自由ゲージ場のエネルギー流密度

$$\mathbf{S} \equiv (T^1_0, T^2_0, T^3_0) = \varepsilon_0 c^2 \mathbf{E} \times \mathbf{B} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

は Poynting ベクトルとも呼ばれる。

15) Lorenz ゲージ固定条件

$$\chi_1 = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$$

はゲージ固定としては不十分であり、実際 $\partial^{\mu} \partial_{\mu} \alpha = 0$ を満たす任意のスカラー関数 $\alpha(t, \mathbf{x})$ によるゲージ変換 (B.3.1) を許している。Coulomb ゲージも $\chi_2 = 0$ のみを課した場合は $\nabla^2 \alpha = 0$ を満たすゲージ変換を許すことになる。

16) ベクトル恒等式 $\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) - \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{B})$ に Maxwell 方程式を用いることでこの式は確かめられる。

電荷保存則

Maxwell 方程式のうち、Maxwell-Ampère の法則

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)$$

の両辺に対して発散をとり、電場に対する Gauss の法則

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

を代入すると、 $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = 0$ であるから、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

が導かれる。この連続の式は電荷保存則と呼ばれ、物質場 ψ の大域的な偏角不定性に対する Noether の定理をゲージ場と結合した状況で適用することでも導かれる：

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_0(t, \mathbf{x}) &\equiv \frac{i}{2} \left(\bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} \psi \right) = \frac{\hbar}{2} \rho(t, \mathbf{x}) \\ \mathcal{J}_i(t, \mathbf{x}) &\equiv \frac{i}{2} \left(\bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \bar{\psi})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \psi)} \psi \right) = -\frac{\hbar}{2} j_i(t, \mathbf{x}) \end{aligned}$$

B.4 物質中の電磁場

物質中では複数の物質場が同じゲージ場と前節で見た形式で結合していて、それらの相互作用の結果が身近なマクロスケールでの電磁気現象として現れている。物質場の変調をミクロとマクロなものに分離して Maxwell 方程式を書くと、

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) &= \rho_{\text{macro}}(t, \mathbf{x}) + \rho_{\text{micro}}(t, \mathbf{x}) \\ \nabla \times \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) &= \mu_0 \left(\mathbf{j}_{\text{macro}}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{j}_{\text{micro}}(t, \mathbf{x}) + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

となる (物質場が関与しない 2 式は省いた)。ここで、

$$\rho_{\text{micro}}(t, \mathbf{x}) \equiv -\nabla \cdot \mathbf{P}(t, \mathbf{x})$$

を満たす場 $\mathbf{P}(t, \mathbf{x})$ を導入し、さらにミクロとマクロそれぞれのスケールで電荷保存則

$$\frac{\partial \rho_{\text{micro}}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_{\text{micro}}(t, \mathbf{x}) = 0, \quad \frac{\partial \rho_{\text{macro}}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_{\text{macro}}(t, \mathbf{x}) = 0$$

が成り立つとする。

$$\mathbf{j}_{\text{micro}}(t, \mathbf{x}) \equiv \mathbf{j}_{\text{micro}}^t(t, \mathbf{x}) + \mathbf{j}_{\text{micro}}^l(t, \mathbf{x}), \quad \nabla \cdot \mathbf{j}_{\text{micro}}^t = 0, \quad \nabla \times \mathbf{j}_{\text{micro}}^l = 0$$

というように $\mathbf{j}_{\text{micro}}(t, \mathbf{x})$ を回転が 0 になる成分と発散が 0 になる成分に分離すると、実際に成り立つミクロスケールの電荷保存則は

$$\frac{\partial \rho_{\text{micro}}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_{\text{micro}}^l = 0$$

であるため、

$$\mathbf{j}_{\text{micro}}^l = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}$$

とわかる。発散なしの \mathbf{j}^t は別のベクトル場の回転として表すことができるため、

$$\mathbf{j}_{\text{micro}}^t(t, \mathbf{x}) \equiv \nabla \times \mathbf{M}(t, \mathbf{x})$$

とおくと、

$$\nabla \cdot (\varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) = \rho_{\text{macro}}, \quad \nabla \times (\mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{M}) = \mu_0 \left[\mathbf{j}_{\text{macro}} + \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) \right]$$

と前述の Maxwell 方程式の 2 式を書き直すことができる¹⁷⁾。さらに、

$$\mathbf{D}(t, \mathbf{x}) \equiv \varepsilon_0 \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{P}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) \equiv \mu_0 [\mathbf{H}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{M}(t, \mathbf{x})]$$

で新たな場 $\mathbf{D}(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{H}(t, \mathbf{x})$ を定義すれば、上の 2 式は次のようにも表せる。

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_{\text{macro}}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}_{\text{macro}} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

物質のミクロな構造による寄与を \mathbf{P} や \mathbf{M} に押し込めてマクロな電荷・電流分布による電磁場の運動を考えたい場合には、このように補助場 \mathbf{D} , \mathbf{H} を用いて記述する必要がある。物質場の電荷分布から定義された \mathbf{P} は分極、電流分布の発散なし成分から定義された \mathbf{M} は磁化と呼ばれる。 \mathbf{P} , \mathbf{M} と \mathbf{E} , \mathbf{B} の結合形式は、ラグランジアン中の物質場とゲージ場の相互作用項から、

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{x} (-\rho_{\text{micro}}\varphi + \mathbf{j}_{\text{micro}} \cdot \mathbf{A}) &= \int d^3\mathbf{x} \left[(\nabla \cdot \mathbf{P})\varphi + (\nabla \times \mathbf{M}) \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \cdot \mathbf{A} \right] \\ &= \int d^3\mathbf{x} \left[-\mathbf{P} \cdot \left(\nabla \varphi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) + \mathbf{M} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) \right] \\ &= \int d^3\mathbf{x} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}) \end{aligned}$$

という形で導かれる。

B.5 Ginzburg-Landau 理論

Ginzburg-Landau 理論は、場を自由度にもつ系について、系の対称性から自由エネルギーの表式を秩序変数による展開で仮定する熱力学の理論である。系のハミルトニアンから統計力学的に GL 理論を導出するには、秩序変数を与える微視的変数に拘束条件を加えた上で分配関数の計算を行う。

17) Dirac 場の非相対論極限では Zeeman 相互作用の導入で Maxwell-Ampère の式が変更を受けたが、その寄与は \mathbf{M} に押し込められることになる。

$$\mathbf{M} = -\frac{q}{m} \mathbf{S}$$

付録 C 数学的補足

ここまでの計算のいくつかや用いられてきた数学の知識について、最小限ではあるが説明する。

C.1 積分公式

C.2 Fourier 変換

C.2.1 Fourier 級数展開

$f(x)$ が周期 $2L$ の周期関数 $f(x+2L) = f(x)$ であるとき、次の Fourier 級数展開が可能である。

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right)$$

ここで、 a_n, b_n は次の積分で定義される。

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx, \quad b_n = \frac{1}{L} \int_0^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx$$

Euler の公式 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ を用いれば、この展開は次のようにまとめられる。

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/L}, \quad c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) e^{-in\pi x/L} dx \quad (\text{C.2.1})$$

C.2.2 Fourier 変換

(C.2.1) について、 $L \rightarrow \infty$ として $n\pi/L$ を連続変数 k にする極限操作を考えると、

$$\tilde{c}_n = \int_{-L}^L f(x) e^{-in\pi x/L} dx, \quad f(x) = \frac{1}{2L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{c}_n e^{in\pi x/L}$$

であるから、連続極限において

$$\frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \longrightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk$$

と無限和が積分に置き換えて、 \tilde{c}_n を連続関数 $\tilde{f}(k)$ と置きなおすと、

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx, \quad f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{-ikx} dk$$

が成り立つとわかる。前者を Fourier 変換、後者を Fourier 逆変換という。

デルタ関数 $\delta(x)$ は次で定義され、厳密には関数ではなく超関数である。

$$f(a) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx$$

特に、 $f(x) = e^{-ikx}$, $a = 0$ であるときには、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx = 1$$

である。これを $\delta(x)$ の Fourier 変換とみなすと、その Fourier 逆変換から、

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk$$

が成り立つことがわかる。

C.2.3 離散 Fourier 変換

次の成分 U_{nm} をもつ N 次正方形行列 U はユニタリ行列である。

$$U_{nm} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i(2\pi nm/N)}$$

実際、 $U^\dagger U$ を各成分ごとに計算してみると、

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^N U_{ln}^* U_{lm} &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N e^{i\frac{2\pi l}{N}(n-m)} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{N} \frac{1 - e^{2\pi i(n-m)}}{1 - e^{i\frac{2\pi}{N}(n-m)}} & (n-m \neq 0) \\ 1 & (n-m = 0) \end{cases} \\ &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

となるため、 $U^\dagger U = I$ である。

N 次元複素ベクトル $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_N) \in \mathbb{C}^N$ に対して、 $\tilde{\mathbf{f}} \equiv U\mathbf{f}$ の各成分は

$$\tilde{f}_n = \sum_{m=1}^N U_{nm} f_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^N f_m e^{-i(2\pi nm/N)} \quad (\text{C.2.2})$$

で与えられる。また、 U がユニタリ演算子であることから $\mathbf{f} = U^\dagger \tilde{\mathbf{f}}$ であるので、

$$f_m = \sum_{n=1}^N U_{mn}^* \tilde{f}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \tilde{f}_n e^{i(2\pi mn/N)} \quad (\text{C.2.3})$$

が成り立つとわかる。

ここで、 $x = (2L/N)m$ を連続変数にとって $f_m \rightarrow f(x)$ とする極限を考えると、和は積分に置き換わり、

$$\frac{\tilde{f}_n}{\sqrt{N}} = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N f_m e^{-i(2\pi nm/N)} \longrightarrow \frac{1}{2L} \int_0^{2L} f(x) e^{-in\pi x/L} dx$$

で Fourier 級数展開の成分 \tilde{c}_n を与える表式になる。(C.2.3) は $e^{-i\frac{2\pi mn}{N}}$ の $n = 1, 2, \dots, N$ での周期性から、 N が偶数なら $N/2$ 、奇数なら $(N-1)/2$ だけ和をとる添え字をずらしてもよいので、

$$f_m \rightarrow f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{f}_n}{\sqrt{N}} e^{in\pi x/L}$$

が成り立つ。 $\tilde{c}_n = \tilde{f}_n/\sqrt{N}$ であることからこれは Fourier 級数展開 (C.2.1) そのものである。また、前節で見たようにここから $L \rightarrow \infty$ とする極限をとれば Fourier 変換に帰着する。ベクトルからベクトルに変換する点が、関数から関数への変換である Fourier 変換と形式的に似ているため、(C.2.2) は離散 Fourier 変換、(C.2.3) は離散 Fourier 逆変換という。

C.3 Baker-Campbell-Hausdorff の公式・Trotter 積公式

任意の演算子 \hat{A}, \hat{B} に対して、次の関数 $f(t)$ を定義する。

$$f(t) \equiv e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} \equiv \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (t\hat{A})^n \right] \hat{B} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-t\hat{A})^n \right]$$

t に対して微分すると、

$$\begin{aligned} f^{(1)}(t) &= e^{t\hat{A}}[\hat{A}, \hat{B}]e^{-t\hat{A}}, \quad f^{(2)}(t) = e^{t\hat{A}}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]e^{-t\hat{A}}, \\ f^{(3)}(t) &= e^{t\hat{A}}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]e^{-t\hat{A}}, \\ &\vdots \end{aligned}$$

となるため、 $f(t)$ の $t=0$ 周りでの Taylor 展開を考えると、

$$e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} = \hat{B} + t[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{t^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{t^3}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

となることがわかる。この展開を Baker-Campbell-Hausdorff の公式という。

任意の演算子 \hat{A}, \hat{B} に対して今度は、

$$\exp[\hat{g}(t)] = e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}}$$

とにおいて $\hat{g}(t)$ を定義する。両辺の t 微分を考えると、

$$\begin{aligned} e^{\hat{g}(t)}\hat{g}^{(1)}(t) &= e^{t\hat{A}}(\hat{A} + \hat{B})e^{t\hat{B}}, \quad e^{\hat{g}(t)}\left[\hat{g}^{(2)}(t) + \left(\hat{g}^{(1)}(t)\right)^2\right] = e^{t\hat{A}}\left\{(\hat{A} + \hat{B})^2 + [\hat{A}, \hat{B}]\right\}e^{t\hat{B}}, \\ &\vdots \end{aligned}$$

というように $\hat{g}(t)$ の微分に対する関係式が得られる。 $t=0$ においてこれらは順に解くことができて、

$$\hat{g}^{(1)}(0) = \hat{A} + \hat{B}, \quad \hat{g}^{(2)}(0) = [\hat{A}, \hat{B}], \dots$$

と求まっていく。定義より $\hat{g}(0) = 0$ であることをふまえると、これらの $t=0$ での微分から $\hat{g}(t)$ の $t=0$ 周りでの Taylor 展開

$$\hat{g}(t) = t(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{t^2}{2!}[\hat{A}, \hat{B}] + \dots$$

が得られる。この結果は直ちに、

$$e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}} = \exp\left\{t(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{t^2}{2!}[\hat{A}, \hat{B}] + \dots\right\}$$

を与えて、 $t = n^{-1}$ とおくと

$$\begin{aligned} e^{\hat{A}/n}e^{\hat{B}/n} &= \exp\left\{\frac{1}{n}(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{1}{2!}\left(\frac{1}{n}\right)^2[\hat{A}, \hat{B}] + \mathcal{O}(n^{-3})\right\} \\ \therefore \left(e^{\hat{A}/n}e^{\hat{B}/n}\right)^n &= \exp\left\{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2!}\frac{1}{n}[\hat{A}, \hat{B}] + \mathcal{O}(n^{-2})\right\} \longrightarrow e^{\hat{A} + \hat{B}} \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

となることを導く。この公式は Trotter 積公式と呼ばれる。

鈴木フラクタル分解

Trotter 積公式は、 n が十分大きい極限で $e^{\hat{A}+\hat{B}} \simeq (e^{\hat{A}/n} e^{\hat{B}/n})^n$ となることを示唆しているが、

$$\begin{aligned} \exp\left\{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2!} \frac{1}{n} [\hat{A}, \hat{B}] + \mathcal{O}(n^{-2})\right\} &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left\{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2!} \frac{1}{n} [\hat{A}, \hat{B}] + \mathcal{O}(n^{-2})\right\}^m \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (\hat{A} + \hat{B})^m + \mathcal{O}(n^{-1}) = e^{\hat{A}+\hat{B}} + \mathcal{O}(n^{-1}) \end{aligned}$$

からわかるように、この近似精度は n^{-1} のオーダーである。

一般に、 $e^{t(\hat{A}+\hat{B})}$ を t^{m+1} のオーダーで近似する多項式

$$f_m(t; \hat{A}, \hat{B}) = \exp\left[t(\hat{A} + \hat{B})\right] + \mathcal{O}(t^{m+1})$$

が与えられている場合には、

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = \left[f_m(n^{-1}; \hat{A}, \hat{B})\right]^n + \mathcal{O}(n^{-m})$$

で $e^{\hat{A}+\hat{B}}$ の m 次の近似式が得られる。近似する $e^{\hat{A}+\hat{B}}$ が \hat{A} と \hat{B} に対して対称的であるから f_m も \hat{A} と \hat{B} に対して対称的でなければならない。この上で、Trotter 積公式のように \hat{A}, \hat{B} それぞれの指数関数の積で表された f_m を考える：

$$f_m(t; \hat{A}, \hat{B}) = e^{\tau_1 \hat{A}} e^{\tau_2 \hat{B}} \dots e^{\tau_2 \hat{B}} e^{\tau_1 \hat{A}}$$

f_2 に関しては次で与えられることが知られている。

$$f_2(t; \hat{A}, \hat{B}) = e^{(t/2)\hat{A}} e^{t\hat{B}} e^{(t/2)\hat{A}}$$

このことを示すために、

$$\exp[g_2(t)] \equiv e^{(t/2)\hat{A}} e^{t\hat{B}} e^{(t/2)\hat{A}}$$

で $\hat{g}_2(t)$ を定義して、先ほどと同様に両辺の t 微分を考えて $\hat{g}_2(t)$ の $t = 0$ での微係数を求め、 $\hat{g}_2(t)$ の Taylor 展開を得ることを考える。

$$\begin{aligned} e^{\hat{g}_2(t)} \hat{g}_2^{(1)}(t) &= e^{\frac{t}{2}\hat{A}} \left(\frac{1}{2}\hat{A} + \hat{B}\right) e^{t\hat{B}} e^{\frac{t}{2}\hat{A}} + \frac{1}{2} e^{\frac{t}{2}\hat{A}} e^{t\hat{B}} \hat{A} e^{\frac{t}{2}\hat{A}}, \\ e^{\hat{g}_2(t)} \left[\hat{g}_2^{(2)}(t) + \left(\hat{g}_2^{(1)}(t)\right)^2\right] &= e^{\frac{t}{2}\hat{A}} \left\{\left(\frac{1}{2}\hat{A} + \hat{B}\right)^2 + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}]\right\} e^{t\hat{B}} e^{\frac{t}{2}\hat{A}} + e^{\frac{t}{2}\hat{A}} \left(\frac{1}{2}\hat{A} + \hat{B}\right) e^{t\hat{B}} \hat{A} e^{\frac{t}{2}\hat{A}} \\ &\quad + \frac{1}{4} e^{\frac{t}{2}\hat{A}} e^{t\hat{B}} \hat{A}^2 e^{\frac{t}{2}\hat{A}} \end{aligned}$$

以上から $\hat{g}_2(t)$ の $t = 0$ での微係数は

$$\hat{g}_2^{(1)}(0) = \hat{A} + \hat{B}, \quad \hat{g}_2^{(2)}(0) = 0$$

とわかり、 $\hat{g}_2(t)$ の $t = 0$ 周りでの Taylor 展開には t^2 の項が現れない。よって、

$$e^{(t/2)\hat{A}} e^{t\hat{B}} e^{(t/2)\hat{A}} = \exp\left[t(\hat{A} + \hat{B}) + \mathcal{O}(t^3)\right] = \exp\left[t(\hat{A} + \hat{B})\right] + \mathcal{O}(t^3)$$

となり、確かに f_2 は望みの近似式であったとわかる。

さらに高次の f_m は、

$$\exp[\hat{g}_m(t)] \equiv f_m(t; \hat{A}, \hat{B})$$

で定義される $\hat{g}_m(t)$ を $t = 0$ まわりで展開した際に、 t^m までの微係数が 0 にならない。このような f_m を体系的に求める方法は [7] で鈴木により与えられており、今日では上記のような指数積分分解は鈴木-Trotter 分解、あるいは分解がもつフラクタル的な特徴に注目してフラクタル分解などと呼ばれる。

C.4 キュムラント展開

C.5 特異値分解

C.6 汎関数解析

参考文献

- [1] A. Altland, B. Simons. Condensed Matter Field Theory. 2nd ed., Cambridge University Press, 2010.
- [2] R. P. Feynman. Statistical Mechanics: A Set Of Lectures. CRC Press, 1998.
- [3] R. Kubo. J. Phys. Soc. Jpn. **12**(6), pp.570-586, 1957.
- [4] W. Nolting, A. Ramakanth. Quantum Theory of Magnetism. Springer-Verlag, 2009.
- [5] M. E. Peskin, D. V. Schroeder. An Introduction to Quantum Field Theory. CRC Press, 1995.
- [6] P. Phillips. Advanced Solid State Physics. 2nd ed., Cambridge University Press, 2012.
- [7] M. Suzuki. Phys. Lett. A **146**(6), pp.319-323, 1990.
- [8] D. Vanderbilt. Berry Phases in Electronic Structure Theory. Cambridge University Press, 2018.
- [9] D. Xiao, M. C. Chang, Q. Niu. Rev. Mod. Phys. **82**, pp.1959-2007, 2010.
- [10] 阿部龍蔵. 統計力学 (第 2 版). 東京大学出版, 1992.
- [11] 井田大輔. 現代解析力学入門. 朝倉書店, 2020.
- [12] 江藤幹雄. 量子力学 I. 丸善出版, 2013.
- [13] 小形正男. 物性物理のための場の理論・グリーン関数 [第 2 版](SGC ライブラリ 193). サイエンス社, 2024.
- [14] 川村嘉春. 基礎物理から理解するゲージ理論 (臨時別冊・数理科学 SGC ライブラリ 138). サイエンス社, 2017.
- [15] 北村想太. 周期駆動量子系の物理. 物性若手夏の学校テキスト, 第 67 回物性若手夏の学校, pp.81-151, 2022.
- [16] 坂井典佑. 場の量子論. 裳華房, 2007.
- [17] 清水明. 統計力学特論・量子力学特論. 東大相関基礎科学系・統合自然科学科, 2016. 板書

- [18] 清水明. 非平衡熱統計力学・量子力学特論. 東大相関基礎科学系・統合自然科学科, 2017. 板書
- [19] 高橋和孝, 西森秀稔. 相転移・臨界現象とくりこみ群. 丸善出版, 2017.
- [20] 田崎晴明. 統計力学 I, II. 培風館, 2008.
- [21] 永長直人. 物性論における場の量子論. 岩波書店, 2014.
- [22] ランダウ, リフシッツ (著), 恒藤敏彦, 広重徹 (訳). 場の古典論 (原著第 6 版). 東京図書, 1978.