多体系の量子力学

LouiS*

概要

主に物性理論のための多体系の量子力学を扱う。

* https://pr440.github.io

目次

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　同種粒子の不可弁別性

1 粒子状態 $|\psi_i\rangle$ を持つ粒子が $i = 1, 2, \ldots, N$ 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

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

で表されるべきである。ここで P は $\{1, 2, \ldots, N\}$ 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、

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

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、その間で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。

(1.1.1) 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、

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

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。

で与えられる。ここで、P, Q, R は $\{1, 2, \ldots, N\}$ 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

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

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、

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

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

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

となることから、完全性関係

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

が導かれる ($\hat{I}^{(N)}$ は N 粒子状態に対する恒等演算子)。$\{|\alpha_{i_1}, \alpha_{i_2}, \cdots, \alpha_{i_N}\rangle\}$ は、Fermi 粒子の場合には $i_1 < i_2 < \cdots < i_N$ 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 $i_1 \leq i_2 \leq \cdots \leq i_N$ 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

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

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。

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。

1 粒子系の量子力学において状態は Hilbert 空間 $\mathfrak{H}$ 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 $\mathfrak{H}^{\otimes N}$ の元となる。多体系の量子状態はそれの N に対する直和の元となるが、この空間は 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 $|\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_N\rangle$ 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 $|\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_N,\phi\rangle$ に対し、次のような作用をもつ演算子 $\hat{a}^\dagger(\phi)$ を考える。

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

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

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

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

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

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。

このようにして系に粒子を追加・減少させる演算子 $\hat{a}^\dagger(\phi),\hat{a}(\phi)$ を構成できた。これらの演算子を生成消滅演算子という。

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

となることから、

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

が成り立つことがわかる。$[\hat{A},\hat{B}]_{-\zeta}$ 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、

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

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

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

なので、

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

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、

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

となり、$\hat{n}_i\equiv\hat{a}_i^\dagger\hat{a}$ に対して $|\alpha_{i_1},\alpha_{i_2},\cdots,\alpha_{i_N}\rangle$ 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 $|\alpha_{i_1},\alpha_{i_2},\cdots,\alpha_{i_N}\rangle$ に含まれる 1 粒子状態 $|\alpha_i\rangle$ の粒子数である。すなわち、$\hat{n}_i$ の固有値は Bose 粒子系では $n_i=0,1,2,\ldots$ 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 $\hat{n}_i$ の組があれば、

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

は系の総粒子数を与える演算子になることもわかる。

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

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

で与えられることもわかる。

1.3 量子多体系のダイナミクス

真空 $|0\rangle$ に生成演算子 $\hat{a}^\dagger(\psi)$ を 1 つ作用させてできる状態 $|\psi\rangle\equiv\hat{a}^\dagger(\psi)\,|0\rangle$ は 1 粒子状態そのものであるので、Schrödinger 方程式

$$
i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\psi\rangle=\hat{H}^{(1)}\,|\psi\rangle \tag{1.3.1}
$$

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。

を満たす。$\hat{H}^{(1)}$ のエネルギー固有値 E_i に対する固有状態 $|i\rangle$ について生成消滅演算子 $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ を作ると、

$$\hat{H} = \sum_i E_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

とおけば Schrödinger 方程式 (1.3.1) および 1 粒子系の量子力学での記述が保たれる。Schrödinger 方程式 (1.3.1) は多粒子系の状態 $|\psi\rangle$ についても成り立ち、このハミルトニアンの定義はそのまま、相互作用のない多粒子系のハミルトニアンとして用いることができる。

1.3.1 多粒子系の 1 体演算子

一般に、1 粒子系の量子力学で定義された 1 体演算子 $\hat{A}^{(1)}$ 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。これも、$|\alpha_i\rangle$ に対応する生成消滅演算子 $\hat{a}^\dagger(a_i), \hat{a}(a_i)$ を用いて、

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

とすることで多粒子系に定義を拡張して用いることができる。固有状態の全体は直交系かつ完全系であるので、先のハミルトニアンの多粒子系へ拡張した定義も上式を満たしている。

まず、1 粒子の位置演算子 $\hat{\boldsymbol{x}}$ と運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ を多粒子系に拡張する。$\hat{\boldsymbol{x}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$ の間の正準交換関係

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

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

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

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、$|\boldsymbol{x}\rangle$ の完全性関係

$$\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}| = \hat{I} \tag{1.3.2}$$

に基づき、規格化条件

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

により定まる。また、$\boldsymbol{p}$ は系の周期境界条件[5)]により

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

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

$$|\boldsymbol{p}\rangle = \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}|\boldsymbol{x}\rangle\,, \quad |\boldsymbol{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}} e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\,|\boldsymbol{p}\rangle \tag{1.3.3}$$

が成り立つので、$\hat{\boldsymbol{p}}$ の作用が

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

5) 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ても物理的結果に影響は生じない。

と表され、完全性関係 (1.3.2) により $\hat{\boldsymbol{p}}$ 自体は

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

と表されることがわかる。また、同じく完全性関係から

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|$$

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 $|\boldsymbol{x}\rangle$ に対応する生成消滅演算子 $\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ を用いて多粒子系に拡張されて、

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\boldsymbol{x}\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \quad \hat{\boldsymbol{p}} = \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\frac{\hbar}{i}\nabla\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) \tag{1.3.4}$$

となる。なお、(1.3.3) からすぐわかるように、$|\boldsymbol{p}\rangle$ に対応する生成消滅演算子 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}}$ と $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ は次の関係を満たす。

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\boldsymbol{p}} &= \frac{1}{\sqrt{V}}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \quad \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\hat{a}_{\boldsymbol{p}} \\
\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}} &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}), \quad \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}} e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}}
\end{aligned} \tag{1.3.5}$$

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

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

と表せるとわかる。

質量 $m(\neq 0)$ の 1 粒子系の $\hat{H}$ は一般に $\hat{\boldsymbol{x}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$、ポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ を用いて、

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(t, \hat{\boldsymbol{x}})$$

と表される[6)]。$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ 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、

$$\begin{aligned}
\hat{H}(t) &= \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,\langle\boldsymbol{x}|\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(t,\hat{\boldsymbol{x}})\right)|\boldsymbol{x}'\rangle\,\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}') \\
&= \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(t,\boldsymbol{x})\right)\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}') \\
&= -\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(t,\boldsymbol{x})\right)\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}') \\
&= -\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(t,\boldsymbol{x})\right)\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\right]\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) \\
&= \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(t,\boldsymbol{x})\right)\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})
\end{aligned} \tag{1.3.6}$$

6） ゲージ場がない場合。

となる。ただし、これは相互作用のない多粒子系のハミルトニアンである。

最後に、多粒子系に定義を拡張した 1 体演算子の間にはもはや 1 粒子系の量子力学のときの代数構造は一般に成り立たないことを注意しておく。上で得た多粒子系での $\hat{\boldsymbol{L}}$ や $\hat{H}$ を見るとわかるように、

$$\hat{\boldsymbol{L}} \neq \hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}}, \quad \hat{H} \neq \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(t, \hat{\boldsymbol{x}})$$

である。また、正準交換関係や角運動量演算子の代数構造も破綻する。

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] \neq i\hbar\delta_{ij}, \quad \left[\hat{L}^\alpha, \hat{L}^\beta\right] \neq i\hbar \sum_{\gamma=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}^\gamma$$

ただし 1 粒子状態に作用させた場合には、1 粒子系の量子力学での結果と矛盾しないように、代数構造が成り立つ結果が得られる。

1.3.2 演算子の時間発展

Schrödinger 方程式から、時間発展演算子 $\hat{U}(t;t_0)$ ($\hat{U}(t_0;t_0) = \hat{I}$) に対して、

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^\dagger(t;t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}^\dagger(t;t_0) \qquad \therefore\ \hat{U}^\dagger(t;t_0) = T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\,\hat{H}(t')\right]$$

が直ちに導かれるので、Schrödinger 描像から Heisenberg 描像に移り、時間発展を押し付けた演算子を

$$\hat{A}_{\mathrm{H}}(t;t_0) \equiv \hat{U}(t;t_0)\hat{A}\hat{U}^\dagger(t;t_0)$$

で定義すると、Heisenberg 方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}_{\mathrm{H}}(t;t_0) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_{\mathrm{H}}(t;t_0), \hat{H}_{\mathrm{H}}(t;t_0)\right]$$

を得る。以降では時間軸の原点 $t = t_0$ を明示しない。

固有状態は時間に依存しないため、$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ 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 $\hat{H}(t)$ が (1.3.6) で与えられる相互作用のない多粒子系での $\hat{\Psi}(t, \boldsymbol{x})$ の Heisenberg 方程式を考えると、

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\Psi}_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}) &= \left[\hat{\Psi}_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}), \hat{H}_{\mathrm{H}}(t)\right] \\
&= \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \left[\hat{\Psi}_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + V(t,\boldsymbol{x}')\right)\hat{\Psi}_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}')\right] \\
&= \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \left[\hat{\Psi}_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + V(t,\boldsymbol{x}')\right)\hat{\Psi}_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}')\right]_{-\zeta} \\
&\qquad \left(\because \zeta = -1\,\text{のとき、}\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})^2 = \left[\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\right]^2 = 0\right) \\
&= \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 + V(t,\boldsymbol{x}')\right)\hat{\Psi}_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x}') \\
&\left(\because \begin{cases} \left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right] \\ \left[\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\right]_{-\zeta} = \delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'), \quad \left[\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')\right]_{-\zeta} = 0 \end{cases}\right) \\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(t,\boldsymbol{x})\right)\hat{\Psi}_{\mathrm{H}}(t,\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

と、(Schrödinger 表示での)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 $\langle 0|$ 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、この方程式は演算子 $\hat{\Psi}(t,\boldsymbol{x})$ が対応する物理量 $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ について

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,\boldsymbol{x})=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(t,\boldsymbol{x})\right)\Psi(t,\boldsymbol{x}) \tag{1.3.7}$$

で運動方程式が与えられることを示唆している。このように多体系を複素場 $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ を変数にもつ系とみなすと、$\hat{H}$ は系のハミルトニアン密度を

$$\mathscr{H}=\bar{\Psi}(t,\boldsymbol{x})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(t,\boldsymbol{x})\right)\Psi(t,\boldsymbol{x})$$

で与える。このハミルトニアン密度に対して場の解析力学の処方 (B.1 節参照) を用いると、$\Psi(t,\boldsymbol{x})$ とその正準共役運動量の場 $\pi(t,\boldsymbol{x})\equiv i\hbar\bar{\Psi}(t,\boldsymbol{x})$ の正準方程式として確かに Schrödinger 方程式 (1.3.7)(およびその複素共役) が導かれる。

1.3.3 2 体演算子

ここまでは、多粒子系における粒子の相互作用はまったく考えていない。なぜなら、考えてきたハミルトニアンが 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ためである。

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

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

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。

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

$$\hat{V}^{(2)}=V(\hat{\boldsymbol{x}}_1,\hat{\boldsymbol{x}}_2)\qquad(V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)=V(\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_1))$$

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

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

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

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

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\Psi}(t,\boldsymbol{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x})\right)\hat{\Psi}(t,\boldsymbol{x}) + \left(\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\, V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}^\dagger(t,\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(t,\boldsymbol{x}')\right)\Psi(t,\boldsymbol{x})$$

というように、非線形な項が現れることがわかる。なお、2 体相互作用をもつ場合でも $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ に対応する場 $\Psi(\boldsymbol{x})$ の正準共役な運動量の場は $\pi(\boldsymbol{x}) = i\hbar\bar{\Psi}(\boldsymbol{x})$ である (B.1 節参照)。

1.3.4 量子状態の変換則 I ：並進・回転変換

Heisenberg 方程式から、量子力学において系の保存量は系のハミルトニアン演算子と可換な演算子で与えられることがわかる。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。確率および物理量の保存からそのような変換はユニタリ変換で表されて、

$$|\psi'\rangle = \hat{U}^\dagger |\psi\rangle\,, \quad \hat{A}' = \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}$$

と作用する。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ことから、物理量 $\hat{A}$ を保存する対称変換は

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

で与えられる (α は実数)。このように定義すると、例えばエネルギーを保存する対称変換 $\hat{U} = e^{-i\alpha\hat{H}}$ は時間発展演算子そのものであり、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という古典論の結果に符合する。

運動量 $\boldsymbol{p}$ を保存するユニタリ変換を場の演算子 $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ に対して施してみる。$\hat{\boldsymbol{p}}$ と $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ の間の交換関係は、

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

であるので、BCH 公式 (D.3 節参照) より、

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

とわかる。よって、確かに $\hat{\boldsymbol{p}}$ 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て、古典論で空間並進対称性に対する Noether の定理から運動量保存則が導かれることに対応している。

角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{L}}$ を生成子にもつユニタリ変換についても、古典論で角運動量保存則が空間回転対称性によることから、空間回転変換を行う演算子になっていると考えられるので、実際に $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ に対する $\hat{L}^z$ 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

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

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、

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

と交換関係が計算されるため、BCH 公式 (D.3 節参照) より、

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

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。

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

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

を生成子にもつユニタリ変換を考えてみると、

$$\begin{aligned}e^{-i\phi\hat{N}}\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})e^{i\phi\hat{N}}&=e^{-i\phi\hat{N}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\left(i\phi\hat{N}\right)^n\\&=e^{-i\phi\hat{N}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,i\phi\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')\left(i\phi\hat{N}\right)^{n-1}\\&=e^{-i\phi\hat{N}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,i\phi\left[\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})+\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')\right]\left(i\phi\hat{N}\right)^{n-1}\\&=e^{-i\phi\hat{N}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\left(i\phi\hat{N}\right)+i\phi\right]\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\left(i\phi\hat{N}\right)^{n-1}\\&=e^{-i\phi\hat{N}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\left(i\phi\hat{N}\right)+i\phi\right]^n\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\\&=e^{-i\phi\hat{N}}e^{i\phi\hat{N}}e^{i\phi}\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})=e^{i\phi}\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\end{aligned}$$

というように、複素場 $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ の位相部分に対する変換であることがわかる。複素場の位相自由度のことをゲージ、その変換に対する対称性をゲージ対称性と呼ぶことがあるが、$\hat{N}$ を生成子にもつ変換がゲージ変換であるということはゲージ対称性から粒子数保存則が導かれるということを意味している[7)]。

7) 場の古典論において、複素場のゲージ変換に対する Noether チャージは確かに

$$N\equiv\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\bar{\Psi}(t,\boldsymbol{x})\Psi(t,\boldsymbol{x})$$

である (付録 B.1 節参照)。

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 $\boldsymbol{S} = (S^x, S^y, S^z)$ という 3 成分の自由度をもっていることが知られている。それらの演算子 $\hat{\boldsymbol{S}} = (\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z)$ は角運動量と同じ代数をもち、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 $\sigma = -s, -s+1, \ldots, s$ で 1 粒子のスピン準位の状態[8]を指定すると、対応した生成消滅演算子 $\hat{a}_{i,\sigma}, \hat{a}^\dagger_{i,\sigma}$ 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

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

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

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

で定義される[9]。よって、$\hat{S}^x_i, \hat{S}^y_i$ は、

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

と表されることがわかる。また、s は固有であるから、

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

である。

前節の議論から、スピン演算子を生成子にと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。

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

---

8) 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。

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

同様にして、

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

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

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

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

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

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、

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

より、

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

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

ここまでは連続パラメータを用いて表される変換について考えてきたが、それ以外にもパリティ・時間反転変換といった離散変換が存在する。多体系の量子力学の枠組みでこれらの変換も定式化していく。

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 の固有状態のいずれか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は熱力学極限である。典型的な量子状態の集団とそれが表す熱平衡状態の関係は、固有状態の数 $W_{V,N}(E)$ と系の熱力学ポテンシャルであるエントロピー $S(E,V,N)$ の関係式

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

で与えられる (k_B は Boltzmann 定数)[10]。これを Boltzmann の原理という。

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 $\beta \equiv (k_{\mathrm{B}}T)^{-1}$ 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

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

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[11]。この式の両辺を $-\beta$ 倍して指数関数の肩にのせると、

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

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

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

は $E = E^*$ で極大となり、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、

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

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、

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

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。

エネルギーに加えて粒子数のゆらぎも許す環境では 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、

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

---

10) 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。

11) $S(E,V,N)$ 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。

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

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

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、

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

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 $Z_{V,N}$ を大分配関数という。

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どのエネルギー固有値 E の固有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[12)]。

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

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、

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

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 $V_{\mathrm{tot}}-V(\equiv V_{\mathrm{R}})$、粒子数 $N_{\mathrm{tot}}-N(\equiv N_{\mathrm{R}})$ で状態が指定される。E はいろいろな値をとりうるが、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

$$S_{\mathrm{tot}}(U,V_{\mathrm{tot}})\geq S(E,V,N)+S_{\mathrm{R}}(U-E,V_{\mathrm{R}},N_{\mathrm{R}})$$

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、

$$S_{\mathrm{tot}}(U,V_{\mathrm{tot}},N_{\mathrm{tot}})=k_{\mathrm{B}}\ln W_{\mathrm{tot}}(U),\quad S(E,V,N)=k_{\mathrm{B}}\ln W_{V,N}(E),\quad S_{\mathrm{R}}(U-E,V_{\mathrm{R}},N_{\mathrm{R}})=k_{\mathrm{B}}\ln W_{\mathrm{R}}(U-E)$$

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

$$W_{\mathrm{tot}}(U)\gg W_{V,N}(E)W_{\mathrm{R}}(U-E)$$

が成り立ち、ある E でのみ

$$W_{\mathrm{tot}}(U)\simeq W_{V,N}(E)W_{\mathrm{R}}(U-E)$$

12)　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。

が成り立つことを示している。すなわち、

$$W_{\mathrm{tot}}(U) = \sum_{E} W_{V,N}(E) W_{\mathrm{tot}}(U - E)$$

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。式では

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

と表され、(1.4.4) は 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、

$$e^{-\beta E} \propto W_{\mathrm{R}}(U - E)$$

という比例性を上式に適用したものである。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、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 量子論におけ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、

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

で表される。実際、ある演算子 $\hat{A}$ に対する期待値 $\langle A\rangle$ は、考えている状態空間の正規直交基底 $|\alpha_i\rangle$ を用いた

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

という演算により

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

で与えられるが、これは確かに量子状態 $\{|\psi_i\rangle\}$ が古典的確率 $\{p_i\}$ で混合された状態での期待値を与えている。演算子に対するこの演算はトレースという[13)]。

$\hat{\rho}$ の性質を一般化すると、まずトレース演算に対して

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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あり、このような一般の量子状態も表せる、

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

を満たす演算子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 (1.3.1) から、

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

で与えられるとわかる。この方程式は von Neumann 方程式と呼ばれる[14)]。

13) 以降、特別な表記がない限りトレース演算は Fock 空間の正規直交基底を用いて行うものとするが、このノートでは常に系の大きさを V で指定し続けるため、Fock 空間の正規直交基底は常に V に依存している。グランドカノニカル分布での計算でのみこのことを明示的にして Fock 空間の正規直交基底を用いたトレース演算を行う。

14) 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。

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

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

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、

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

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

カノニカル分布の密度行列による表現は、

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

である。この $\hat{\rho}_{\mathrm{c}}$ 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、

$$F(T;V,N) = \mathrm{Tr}_{(V,N)}\left[\hat{\rho}_{\mathrm{c}}\hat{H}\right] + k_{\mathrm{B}}T\,\mathrm{Tr}_{(V,N)}[\hat{\rho}_{\mathrm{c}} \ln \hat{\rho}_{\mathrm{c}}]$$

で与えられる。実際、

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

および

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

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

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

となり、この $\hat{\rho}_{\mathrm{gc}}$ 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、

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

で与えられる。実際、

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

および

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

から表式が従う。また、$\Xi_V=\mathrm{Tr}_V[e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}]$ である。ここで、$\hat{\mathcal{H}}\equiv\hat{H}-\mu\hat{N}$ は生成消滅演算子を用いると

$$\hat{H}=\sum_i\epsilon_i\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i+\hat{V},\quad \hat{N}=\sum_i\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i$$

と表されることから、元のハミルトニアン $\hat{H}$ において 1 粒子状態のエネルギー準位 ϵ_i を μ だけずらしたものである。このため、T,μ が与えられた系では $\hat{H}$ の代わりに $\hat{\mathcal{H}}$ をハミルトニアンとみなすこともある。

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、

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

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

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

も、Bose 粒子系か Fermi 粒子系かによって

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

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、$\epsilon_{\mathrm{F}}=\mu$ 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。$\mu = \epsilon_0$ に近づくにつれて、

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

で与えられる系の粒子数の内、第 1 項が表す 1 粒子基底状態を占める粒子数は大きくなっていき、やがて巨視的量になる。状態密度 $D(\epsilon)$ が一般的に ϵ のべき乗であり、$\epsilon = \epsilon_0$ 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。

1.4.5 熱的純粋量子状態による熱平衡状態の表現

1.4.6 熱ゆらぎと非平衡過程

1.5 径路積分

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、ここで導入する径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径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 粒子系の径路積分 (導入)

1 粒子の位置 $\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{x}'$ への遷移振幅 $U(t,\boldsymbol{x};t'\boldsymbol{x}') \equiv \langle\boldsymbol{x}|e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar}|\boldsymbol{x}'\rangle$ は、$|\boldsymbol{x}\rangle$ の完全性関係 (1.3.2) を用いることで、

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

と表せ ($\Delta t \equiv (t-t')/N$)、さらに $|\boldsymbol{x}\rangle$ の完全性関係 (1.3.2) に (1.3.3) を用いることで得られる $|\boldsymbol{p}\rangle$ の完全性関係

$$\sum_{\boldsymbol{p}} |\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}| = \hat{I} \tag{1.5.1}$$

を用いることで、

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

と表せる。ここで、積分は $\boldsymbol{x}_0 \equiv \boldsymbol{x}'$, $\boldsymbol{x}_N \equiv \boldsymbol{x}$ 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、$\hat{H} = H(\hat{\boldsymbol{x}},\hat{\boldsymbol{p}})$ なら

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

となるので、

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

と表されるようになる。V が十分大きいとして、

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

と連続化すると、次のようにも表せる。

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

これの $N\to\infty$ 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

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

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

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

と表される。

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

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

というように Gauss 積分として実行できる。その結果、

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

と表せて、$N\to\infty$ の極限をとって径路積分として表すと、

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

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、

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

である[15)]。作用 S を用いたことにより、この遷移振幅で最大の寄与を与える積分因子が S が停留する経路 $\boldsymbol{x}(t)$ のものとわかるため、最小作用の原理の量子論的拡張となっている。

15） 径路積分が有限に収まるようにこの定数が満たすべき条件が、正準量子化に代わる径路積分を用いた量子化の条件だと考えることもできる。

径路積分による定式化の応用例の一つに、前節における分配関数 Z_V を表現できることが挙げられる。1 粒子状態のみで張られる状態空間上のトレース演算は、$|\boldsymbol{x}\rangle$ の完全性関係 (1.3.2) から

$$Z_V \equiv \mathrm{Tr}_V\left[e^{-\beta\hat{H}}\right] = \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\langle\boldsymbol{x}|e^{-\beta\hat{H}}|\boldsymbol{x}\rangle$$

と表せることから、対角成分を $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{x}_N = \boldsymbol{x}$ への周回路上の径路積分として表せ、分配関数自体は任意の周回路に対する径路積分となるからである。実際に遷移振幅の場合と同様に、$|\boldsymbol{x}\rangle$ と $|\boldsymbol{p}\rangle$ の完全性関係 (1.3.2),(1.5.1) を用いた計算を行うと、

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

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

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

となるので、分配関数 Z_V は

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

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

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

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

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

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 $\boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}(\beta)$ を満たす任意の径路である。

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

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

というように Gauss 積分として実行できて、その結果、

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

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

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

という形になる。ここで、

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

である。

1.5.2 Bose 粒子系の径路積分

多粒子系における径路積分による表現は、場の演算子 $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ が与える量 $\Psi(\boldsymbol{x}), \bar{\Psi}(\boldsymbol{x})$ に着目して構成するのが良い。実際、多粒子系でのハミルトニアンは、1.3 節の議論から

$$H = \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, \mathscr{H}(\Psi(t,\boldsymbol{x}), \bar{\Psi}(t,\boldsymbol{x}))$$

と表せて、$\Psi(t,\boldsymbol{x})$ の共役運動量として $i\hbar\bar{\Psi}(t,\boldsymbol{x})$ を必ずとることができる。よって、1 粒子系での分配関数 Z_V を径路積分で表した (1.5.2) における $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}$ にそれぞれ $\Psi(t,\boldsymbol{x}), \bar{\Psi}(t,\boldsymbol{x})$ を対応させて、

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

で大分配関数を与えることができると考えられる。このとき、Ξ_V の積分径路には 4 次元時空の無限遠での境界条件が課されることになる。

この表式を導くため、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が

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu\hat{N} = H\big(\hat{a},\hat{a}^\dagger\big) - \mu\hat{a}^\dagger\hat{a} \qquad \left(\big[\hat{a},\hat{a}^\dagger\big] = \hat{I}\right)$$

と表されるような系である。$\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ に対して次式を満たす状態 $|\alpha\rangle$ をコヒーレント状態という。

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

コヒーレント状態は生成消滅演算子 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ の固有状態であり、1 粒子系での導入の際の $|\boldsymbol{x}\rangle$ にあたる。$|\alpha\rangle$ の完全性関係を求めるために、まずコヒーレント状態の表現を考える。生成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、

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

と $|\alpha\rangle$ が展開できる。すると、

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

となって、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

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

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

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

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

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

をこの $|\alpha\rangle$ で表すことを考えると、

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

に対して、複素平面全体での積分公式

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

が成り立つ (付録 C.1 節参照) ため、

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

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、

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

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、

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

となり ($\Delta u = \beta/N$)、$N \gg 1$ で $e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\Delta u} \simeq \hat{I} - (\hat{H}-\mu\hat{N})\Delta u$ の近似を行う際には、$H(\hat{a},\hat{a}^\dagger)$ の関数形が正規順序をとっていれば、

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

となるので、

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

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

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

と表すことにすると、

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

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

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

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、

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

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

$$\hat{a}_i|\alpha_1,\alpha_2,\ldots\rangle = \alpha_i|\alpha_1,\alpha_2,\ldots\rangle, \qquad |\alpha_1,\alpha_2,\ldots\rangle = \mathrm{exp}\left(\sum_i \bar{\alpha}_i\alpha_i\right)\prod_i\sum_{n_i\geq 0}\frac{{\alpha_i}^{n_i}}{n_i!}\left(\hat{a}_i^\dagger\right)^{n_i}|0\rangle$$

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 の径路積分表示は

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

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。

1.5.3 Fermi 粒子系の径路積分

しかし上の議論が成り立つのは、場の演算子が交換する Bose 粒子系のときのみである。場の演算子が反交換する Fermi 粒子系での径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[16]を考える。このとき系のハミルトニアンは、

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu\hat{N} = H\left(\hat{a},\hat{a}^\dagger\right) - \mu\hat{a}^\dagger\hat{a} \qquad \left(\left\{\hat{a},\hat{a}^\dagger\right\} = \hat{I}\right)$$

というように反交換する生成消滅演算子 $\hat{a},\hat{a}^\dagger$ で表される。先のコヒーレント状態を用いた導出そのものは Fermi 系の場合でも有効だが、問題となるのはそのコヒーレント状態の性質である。

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

16) 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)。

Fermi 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

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

となり、Bose 系のときと同様に上式両辺に $\hat{a}$ を作用させると、

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

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 が積について反交換する数であることためである。このような数は Grassmann 数と呼ばれる。$|\alpha\rangle$ に規格化条件 $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ を課すと、

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

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、

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

で与えられることになる。

今考えている系の完全性関係

$$|0\rangle\langle 0| + \hat{a}^\dagger|0\rangle\langle 0|\hat{a} = \hat{I}$$

をコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ で表すには、Grassmann 数を変数とする微積分演算を定義する必要がある。積分演算は積で定義されるため反交換すべきで、α と独立な Grassmann 数 β に対し、

$$\int \mathrm{d}\alpha\,\alpha\beta = -\int \mathrm{d}\alpha\,\beta\alpha = \beta\int \mathrm{d}\alpha\,\alpha \tag{1.5.5}$$

が満たされるはずである。また、微分演算子も反交換性を満たすべきであるため、

$$\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\alpha\right)\beta = -\frac{\partial}{\partial\alpha}(\beta\alpha) = \beta\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\alpha\right) \tag{1.5.6}$$

となる。一般に 2 つの Grassmann 数の積は他の Grassmann 数に対し符号を変えず交換し、代数的に普通の数として扱える。微積分演算の結果も同じように普通の数として扱えるわけだが、(1.5.5),(1.5.6) は

$$\int \mathrm{d}\alpha\,\alpha, \qquad \frac{\partial}{\partial\alpha}\alpha$$

がともに Grassmann 代数の乗法単位元 1 を与えることを示している。また、乗法単位元 1 の積分は

$$\int \mathrm{d}\alpha\,1 = \int \mathrm{d}\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}\alpha = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\int \mathrm{d}\alpha\,\alpha = -\frac{\partial}{\partial\alpha}1 = 0$$

より加法単位元 0 を与える。最後の式は微分として自然な計算であり、

$$\int \mathrm{d}\alpha\,\beta = -\beta\int \mathrm{d}\alpha = 0$$

という自然な積分演算を与えるようになっている。

以上を踏まえて、$|\alpha\rangle$ の完全性関係を導く。Grassmann 数と生成消滅演算子も反交換することと、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、

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

とわかり、これに対して複素平面全体での積分

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

が成り立つことから (付録 C.1 節参照)、

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

で完全性関係が与えられるとわかる。大分配関数 Ξ_V を計算する際には、トレース演算の可換性を用いるときに、

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

というように Grassmann 数の反可換性が効くことに注意すると、

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

となり ($\Delta u = \beta/N$)、$N \gg 1$ で $e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\Delta u} \simeq \hat{I} - (\hat{H} - \mu\hat{N})\Delta u$ 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、$\hat{H}(\hat{a},\hat{a}^\dagger)$ の関数形が正規順序をとっていれば 1.5.2 項と同様に、

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

$N \to \infty$ の極限をとって u を連続変数化し、

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

と表すことにすると、

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

と径路積分で表されることがわかる。積分範囲は、反周期境界条件 $\alpha_0 = -\alpha(\beta)$, $\bar{\alpha}_0 = -\bar{\alpha}(\beta)$ 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

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

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、

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

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

$$\hat{a}_i|\alpha_1,\alpha_2,\ldots\rangle = \alpha_i|\alpha_1,\alpha_2,\ldots\rangle\,, \qquad |\alpha_1,\alpha_2,\ldots\rangle = \exp\left(\sum_i \bar{\alpha}_i\alpha_i\right)\prod_i\left(\hat{I} + \alpha_i\hat{a}_i^\dagger\right)|0\rangle$$

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 粒子系のものと同じ形式になる。しかし、Bose 粒子系の場合と違って Fermi 粒子系の場 $\Psi(u,\boldsymbol{x}),\bar{\Psi}(u,\boldsymbol{x})$ は Grassmann 数である。

1.5.4 スピン系の径路積分

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、

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

と λ のべきで展開されるとして、

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

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

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

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、

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

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、

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

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)。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。$|n_1\rangle, |n_2\rangle, \ldots$ 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と、λ の 1 次項の係数比較の結果 (2.1.1) からは

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

が結論づけられる ($E^{(0)} = E_n$ は同じ)。1 次の係数比較 (2.1.2) では、$|n_i\rangle$ との内積から

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

が得られる。この固有値方程式を解いて得られる固有ベクトル $(c_1, c_2, \ldots)$ に対応した $|\psi^{(0)}\rangle$ ごとに、系は縮退が解ける。

2.2 Fermi の黄金律

この節では、いわゆる「時間に依存する摂動論」と呼ばれる手法の中で、相互作用描像に移る方法を扱う。

時間に依存する外場を摂動的に加える系を考え、そのハミルトニアンを $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ とする。無摂動項 $\hat{H}_0$ については固有状態と対応するエネルギー固有値 $|n\rangle$, E_n がわかっている。Schrödinger 描像の任意の状態 $|\psi(t)\rangle$ および任意の演算子 $\hat{A}$ に対して次のように変換することで新たな描像へ移る。

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(0)\rangle, \qquad \hat{A}_{\mathrm{I}}(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

この描像を相互作用描像[1)]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、

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

より、

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} = \hat{V}_{\mathrm{I}}(t) |\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} \tag{2.2.1}$$

が従う。Heisenberg 方程式は次で与えられる。

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \hat{A}_{\mathrm{I}}(t) = \left[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t), \hat{H}_0 \right]$$

Schrödinger 方程式 (2.2.1) の解は、

$$|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}} = T\exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathrm{d}t'\, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') \right] |\psi(0)\rangle_{\mathrm{I}}$$

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

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

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

で与えられるから、この級数展開を打ち切ることで摂動論が導かれる。

時間に依存しない外場を加えた場合を摂動論で考える。始状態が $|\psi(0)\rangle = |n\rangle$ のときに $|\psi(t)\rangle = |j\rangle$ となる確率 $P_{n\to j}(t)$ は、

$$\begin{aligned} P_{n\to j}(t) \equiv \left|{}_{\mathrm{I}}\langle j(t)|\psi(t)\rangle_{\mathrm{I}}\right|^2 &= \left|\langle j|\, T\mathrm{exp}\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right]|n\rangle\right|^2 \\ &= \left|\delta_{jn} + \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n\, \langle j|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_2)\cdots\hat{V}_{\mathrm{I}}(t_n)|n\rangle\right|^2 \end{aligned}$$

で与えられる。$\hat{V}$ の 3 次以上を無視して $j \neq n$ の場合の遷移確率 $P_{n\to j}(t)$ を計算すると、

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

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 $P_{n\to\{j\}}(t)$ を考えたい場合には、系の状態密度 $\rho(E)$ を用いて

$$P_{n\to\{j\}}(t) \simeq \int \frac{4\left|V_{jn}(E_j)\right|^2}{(E_j-E_n)^2}\sin^2\frac{(E_j-E_n)t}{2\hbar}\rho(E_j)\mathrm{d}E_j \tag{2.2.2}$$

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[2)]。

次の関数 $f(x)$ は、$\alpha\to\infty$ でデルタ関数 $\delta(x)$ のようにふるまう。

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

また、x 全域でこの $f(x)$ を積分すると、

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

となる (Jordan の補題と留数定理を用いた) から、$\alpha\to\infty$ での $f(x)$ より正確なふるまいは $f(x)\simeq\pi\alpha\delta(x)$ と表される。(2.2.2) の $P_{n\to\{j\}}(t)$ には $\alpha = t$ とした $f((E_j-E_n)/2\hbar)$ が含まれているから、十分大きい t では

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

2) 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。$P_{n\to j}(t)$ を時間で微分して単位時間あたりの遷移率 $w_{n\to j}(t)$ を求めると、

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

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

$$w_{n\to j}(t) = \frac{2\pi\left|V_{jn}\right|^2}{\hbar}\delta(E_j - E_n) \tag{2.2.3}$$

は Fermi の黄金律と呼ばれる。

実際には $t \to \infty$ とすることは不可能であるため、Fermi の黄金律 (2.2.3) 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。$f(0) = \alpha^2$ より、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も実際には

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

の幅が $x = 0$ にある。よって、Fermi の黄金律 (2.2.3) 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

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

の幅が存在している。

2.3 線形応答理論

定常系に物理量 X で表される外力を加えたとき、応答としてある物理量 y が変化する、という関係が成り立っているときを考える。線形応答理論はこのような関係のうち、

(外力 X_1 に対し応答 Y_1 が得られる) $\wedge$ (外力 X_2 に対し応答 y_2 が得られる)

$\Longrightarrow$ 外力 $\alpha X_1 + \beta X_2$ に対し応答 $\alpha y_1 + \beta y_2$ が得られる

という重ね合わせの原理が成り立つものを扱うものである。

2.3.1 応答関数

外力および応答が時間的および空間的に変化させられる場合、撃力的な外力 $X(t,\boldsymbol{x}) = \delta(t-t_0)\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)$ に対する応答が $Y(t,\boldsymbol{x}) = \phi_{YX}(t,\boldsymbol{x};t_0,\boldsymbol{x}_0)$ で与えられたなら、重ね合わせの原理から一般の外力 $X(t,\boldsymbol{x})$ に対する応答 $Y(t,\boldsymbol{x})$ は

$$Y(t,\boldsymbol{x}) = \int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' X(t',\boldsymbol{x}')\phi_{YX}(t,\boldsymbol{x};t',\boldsymbol{x}') \tag{2.3.1}$$

で表せることになる。外力と応答の関係を与える上で $\phi_{YX}(t,\boldsymbol{x})$ は重要であり、応答関数と呼ばれる。ここで、$t < t_0$ で $\phi_{YX}(t,\boldsymbol{x};t_0,\boldsymbol{x}_0) = 0$ 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・空間的に一様であれば、

$$\phi_{YX}(t,\boldsymbol{x};t_0,\boldsymbol{x}_0) = \phi_{YX}(t-t_0,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)$$

というように応答は外力との相対座標・時刻にしか依存しなくなる。このとき (2.3.1) は、

$$
\begin{aligned}
Y(t,\boldsymbol{x}) &= \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' X(t',\boldsymbol{x}')\phi_{YX}(t-t',\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\
&= \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t' \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' X(t-t',\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\phi_{YX}(t',\boldsymbol{x}')
\end{aligned}
$$

という畳み込み積分で表されているので、Fourier 級数展開

$$
X(t,\boldsymbol{x}) = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{q}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\,\tilde{X}(\boldsymbol{q},\omega)e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)},\quad Y(t,\boldsymbol{x}) = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{q}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\,\tilde{Y}(\boldsymbol{q},\omega)e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)},
$$

$$
\tilde{X}(\boldsymbol{q},\omega) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} X(t,\boldsymbol{x})e^{-i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)},\quad \tilde{Y}(\boldsymbol{q},\omega) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, Y(t,\boldsymbol{x})e^{-i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}
$$

を考えると、

$$
\begin{aligned}
&\tilde{Y}(\boldsymbol{q},\omega) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{q}'}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\,\tilde{X}(\boldsymbol{q}',\omega')e^{i\boldsymbol{q}'\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}e^{-i\omega'(t-t')}\phi_{YX}(t',\boldsymbol{x}')e^{-i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)} \\
&= \int_0^{\infty}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\sum_{\boldsymbol{q}'}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\,\tilde{X}(\boldsymbol{q}',\omega')e^{-i(\boldsymbol{q}'\cdot\boldsymbol{x}'-\omega' t')}\phi_{YX}(t',\boldsymbol{x}')\delta_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'}\delta(\omega-\omega') \\
&= \tilde{X}(\boldsymbol{q},\omega)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,\phi_{YX}(t',\boldsymbol{x}')e^{-i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}'-\omega t')}
\end{aligned}
$$

となることがわかる。

$$
\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) \equiv \int_0^{\infty}\mathrm{d}t\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\phi_{YX}(t,\boldsymbol{x})e^{-i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}
$$

は複素アドミッタンスと呼ばれ、$t\to\infty$ での収束因子を顕わにすると[3)]

$$
\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) = \lim_{\delta\to+0}\int_0^{\infty}\chi_{YX}(\boldsymbol{q},t)e^{-i\omega t}e^{-\delta t}\mathrm{d}t \tag{2.3.2}
$$

で与えられる。$\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega)$ から $\chi_{YX}(\boldsymbol{q},t)$ への Fourier 逆変換

$$
\chi_{YX}(\boldsymbol{q},t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega)e^{i\omega t}\mathrm{d}\omega
$$

を (2.3.2) に代入すると、

$$
\begin{aligned}
\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) &= \lim_{\delta\to+0}\int_0^{\infty}\left(\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\chi_{YX}(\omega')e^{i\omega' t}\mathrm{d}\omega'\right)e^{-i\omega t}e^{-\delta t}\mathrm{d}t \\
&= \lim_{\delta\to+0}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\,\chi_{YX}(\omega')e^{i(\omega'-\omega+i\delta)t} \\
&= -\lim_{\delta\to+0}\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\,\chi_{YX}(\omega')\frac{1}{\omega'-\omega+i\delta}
\end{aligned}
$$

と表せることがわかる。主値 (principal value) を用いた公式 (付録 D.1 節参照)

$$
\lim_{\delta\to+0}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\frac{f(\omega')}{\omega'-\omega+i\delta} = \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\frac{f(\omega')}{\omega-\omega'} - i\pi f(\omega)
$$

を用いてさらに変形すると、

$$
\begin{aligned}
\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) &= -\frac{i}{2\pi}\,\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\,\frac{\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega')}{\omega'-\omega} + \frac{1}{2}\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) \\
\therefore\ \chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) &= -\frac{i}{\pi}\,\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega'\,\frac{\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega')}{\omega'-\omega}
\end{aligned}
$$

3） 収束因子 δ は、撃力的な外力 $A(t,\boldsymbol{x}) = \delta(t-t_0)\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)$ の影響が十分先の未来に残らないことを表したものである。

であることがわかる。$\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega)$ の実部と虚部を

$$\chi'_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) \equiv \mathrm{Re}\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega), \quad \chi''_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) \equiv \mathrm{Im}\chi_{YX}(\boldsymbol{q},\omega)$$

と表すと、

$$\chi'_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\!\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\chi''_{YX}(\boldsymbol{q},\omega')}{\omega'-\omega}, \quad \chi''_{YX}(\boldsymbol{q},\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\!\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\chi'_{YX}(\boldsymbol{q},\omega')}{\omega'-\omega}$$

を得る。この関係式は Kramers-Krönig の関係式と呼ばれる。

2.3.2 量子系の線形応答と Green-久保の公式

量子多体系に線形応答理論を適用する際には、ハミルトニアン $\hat{H}_0$ で熱平衡状態にあった系を外力の項

$$\hat{H}_1(t) = -\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, \hat{A}(\boldsymbol{x})F(t,\boldsymbol{x})$$

を加えたハミルトニアンで時間発展させる場合を考えることが多い。密度行列での記述でも

$$\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{\rho}(t)e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

により相互作用描像に移行することができ、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 (2.2.1) より、

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) &= i\hbar\sum_i p_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\left|\psi_i(t)\right\rangle\!\left\langle\psi_i(t)\right| e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\right) \\
&= \sum_i p_i \left[\left(i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_i(t)\rangle_{\mathrm{I}}\right){}_{\mathrm{I}}\langle\psi_i(t)| + |\psi_i(t)\rangle_{\mathrm{I}}\left(i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}{}_{\mathrm{I}}\langle\psi_i(t)|\right)\right] \\
&= \hat{H}_1(t)\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) - \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\hat{H}_1(t) = \left[\hat{H}_1(t), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\right]
\end{aligned}$$

となる。線形応答理論を適用するにはさらに

- 始状態である熱平衡状態 $\hat{\rho}_{\mathrm{eq}}$ は $t = -\infty$ におく。
- 状態の変化 $\delta\hat{\rho}(t) \equiv \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) - \hat{\rho}_{\mathrm{eq}}$ は $\hat{H}_1(t)$ の 1 次までの展開で近似する。

ことを仮定する必要がある。$\hat{H}_1(t)\delta\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)$ は $\hat{H}_{\mathrm{I}}(t)$ 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

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = \hat{H}_1(t)\hat{\rho}_{\mathrm{I,eq}}(t) - \hat{\rho}_{\mathrm{I,eq}}(t)\hat{H}_1(t) = -\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\left[\hat{A}(\boldsymbol{x}), \hat{\rho}_{\mathrm{eq}}\right] e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}F(t,\boldsymbol{x})$$

となる。$\hat{\rho}_{\mathrm{eq}}$ は $\hat{H}_0$ での時間発展のもとで定常的であるから $[\hat{\rho}_{\mathrm{eq}}, \hat{H}_0] = 0$ であることに注意すると、この解は

$$\delta\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, \left[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}), \hat{\rho}_{\mathrm{eq}}\right] F(t')$$

で与えられ、Schrödinger 描像に戻れば、系の密度行列は、

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{\mathrm{eq}} - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\left[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}), \hat{\rho}_{\mathrm{eq}}\right] e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}F(t',\boldsymbol{x})$$

で与えられることになる。応答 $B(t,\boldsymbol{x})$ はその物理量を与える演算子 $\hat{B}(\boldsymbol{x})$ 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 であることに

注意すると、

$$\begin{aligned}
\langle B(t,\boldsymbol{x})\rangle &= \mathrm{Tr}\Big[\hat{B}(\boldsymbol{x})\hat{\rho}(t)\Big] \\
&= \mathrm{Tr}\Big[\hat{B}(\boldsymbol{x})\hat{\rho}_{\mathrm{eq}}\Big] - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,\mathrm{Tr}\Big\{\hat{B}(\boldsymbol{x})e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}\Big[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}'),\hat{\rho}_{\mathrm{eq}}\Big]e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\Big\}F(t',\boldsymbol{x}') \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,\mathrm{Tr}\Big[\hat{B}_{\mathrm{I}}(t,\boldsymbol{x})\Big(\hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}')\hat{\rho}_{\mathrm{eq}} - \hat{\rho}_{\mathrm{eq}}\hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}')\Big)\Big]F(t',\boldsymbol{x}') \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,\mathrm{Tr}\Big[\Big(\hat{B}_{\mathrm{I}}(t,\boldsymbol{x})\hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}') - \hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}')\hat{B}_{\mathrm{I}}(t,\boldsymbol{x})\Big)\hat{\rho}_{\mathrm{eq}}\Big]F(t',\boldsymbol{x}') \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,\Big\langle\Big[\hat{B}_{\mathrm{I}}(t,\boldsymbol{x}),\hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}')\Big]\Big\rangle_{\mathrm{eq}}F(t',\boldsymbol{x}') \qquad (2.3.3)
\end{aligned}$$

となる。

撃力的な外力に対する応答が応答関数を与えたから、(2.3.3) において

$$F(t,\boldsymbol{x}) = \delta(t-t_0)\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)$$

とすれば $\langle B(t,\boldsymbol{x})\rangle$ は応答関数 $\phi(t;\boldsymbol{x};t_0,\boldsymbol{x}_0)$ を与えるはずである。代入して計算すると、

$$\begin{aligned}
\phi(t,\boldsymbol{x};t_0,\boldsymbol{x}_0) &= -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t'\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,\Big\langle\Big[\hat{B}_{\mathrm{I}}(t,\boldsymbol{x}),\hat{A}_{\mathrm{I}}(t',\boldsymbol{x}')\Big]\Big\rangle_{\mathrm{eq}}\delta(t'-t_0)\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}_0) \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\Big\langle\Big[\hat{B}_{\mathrm{I}}(t,\boldsymbol{x}),\hat{A}_{\mathrm{I}}(t_0,\boldsymbol{x}_0)\Big]\Big\rangle_{\mathrm{eq}}\Theta(t-t_0)
\end{aligned}$$

となることがわかる。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。また、$\hat{H}_0$ は時間に依存しないため系は時間的に一様で、$t_0 = 0$ としてよい。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。

2.3.3 Onsager の相反定理

2.4 Berry の位相

n 個のパラメータ $R = \{R^i\,|i = 1,2,\ldots,m\}$ を含むハミルトニアン $\hat{H}(R)$ で表される系を考える。R を固定して与えた系の固有状態を $|\phi_n(R)\rangle$、そのエネルギー固有値を $E_n(R)$ で表す。始状態を固有状態

$$|\psi(t=0)\rangle = |\phi_n(R(t=0))\rangle$$

にとって、別の固有状態に遷移せずにエネルギー固有値 $E_n(R(t))$ の固有状態 $|\phi_n(R(t))\rangle$ にあり続けるように $R(t)$ を非常にゆっくりと変化させて系を時間発展させたとき、状態の時間発展は次のような表式で与えられる (断熱近似)。

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)}\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\,E_n(R(t))\Big]|\phi_n(R(t))\rangle$$

ここで、$\gamma_n(t)$ ($\gamma_n(0) = 0$) による位相の変化も考えていることに注意する。このように導入した $\gamma_n(t)$ は、Schrödinger 方程式

$$0 = \Big[i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} - \hat{H}(R(t))\Big]|\psi(t)\rangle = i\hbar e^{i\gamma_n(t)}\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\,E_n(R(t))\Big]\left(i\dot{\gamma}_n(t) + \sum_i \dot{R}^i(t)\frac{\partial}{\partial R^i}\right)|\phi_n(R(t))\rangle$$

から、次のように期待値として与えられることがわかる。

$$\begin{aligned}\dot{\gamma}_n(t) &= i\sum_i \dot{R}^i(t)\langle\phi_n(R(t))|\partial_i\phi_n(R(t))\rangle \quad \left(\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial R^i}\right)\\ \therefore\ \gamma_n(t) &= i\int_{C(t;0)}\sum_i \mathrm{d}R^i\langle\phi_n(R)|\partial_i\phi_n(R)\rangle\end{aligned} \tag{2.4.1}$$

$C(t;0)$ はパラメータ R の空間上で $R(t')$ の $t'=0\sim t$ の変化を辿る曲線で、$\gamma_n(t)$ はパラメータ空間上の線積分として表されている。

C が周回路、すなわち始状態と終状態が一致する断熱変化を行った際に γ_n が 0 でない値をもつと、パラメータ空間の位相多様体としての構造が非自明であり、対応して特異な現象が現れることがある。Berry らにより重要性が指摘されたこの $\gamma_n(t)$ をはじめとする幾何学的位相の性質について、この節ではパラメータ R^i の空間が 2〜3 次元の場合に限って説明する。

(2.4.1) で γ_n を与える被積分ベクトル場

$$\boldsymbol{A}_n(R) \equiv i\,\langle\phi_n(R)|\nabla\phi_n(R)\rangle$$

はパラメータ空間の接続と呼ばれる。パラメータ空間が 2〜3 次元で積分経路 C が閉経路であった場合には (2.4.1) に Stokes の定理を適用することができて、C が囲む曲面 S に対して、

$$\gamma_n = \int_S \mathrm{d}^2R\,(\nabla\times\boldsymbol{A}_n(R))_\perp$$

が成り立つとわかる ($\perp$ は各点での曲面に対する法線を意味する)。このとき、

$$\boldsymbol{b}_n(R) \equiv \nabla\times\boldsymbol{A}_n(R) = i\nabla\times\langle\phi_n(R)|\nabla\phi_n(R)\rangle$$

をパラメータ空間の曲率と呼ぶ。位相 γ_n には経路 C への依存性があったが、$\boldsymbol{A}_n(R)$, $\boldsymbol{b}_n(\boldsymbol{R})$ は経路によらない一般的表式で、ハミルトニアン $\hat{R}$ のパラメータ依存性から定まる。

2.5 Green 関数の方法

量子論を通して多体系を場 $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ を変数にもつ系に読み替えることができるとわかった。古典論における $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ の運動方程式は

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V(t,\boldsymbol{x})\right)\Psi(t,\boldsymbol{x}) = \chi(t,\boldsymbol{x}) \tag{2.5.1}$$

で与えられ、$\chi(t,\boldsymbol{x})$ が $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ の関数形に依存するために一般には $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ について非線形な偏微分方程式になっている。

線形演算子 $\mathcal{L}$ を用いた非斉次線形偏微分方程式

$$\mathcal{L}u(x) = f(x) \tag{2.5.2}$$

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 (2.5.2) の解が

$$u(x) = \int \mathrm{d}^n x'\,f(x')G(x,x')$$

で与えられる。偏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。また、非斉次方程式

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

の解 $u(x)$ に対して、

$$u(x) = \int \mathrm{d}^n x' \, G(x, x') u(x')$$

を満たすことも Green 関数の特徴である。この関係は $u(x)$ がある種の確率分布を成しているときには $G(x, x')$ が x' から x への遷移確率を与えていると解釈できて、この側面を強調して $G(x, x')$ を伝播関数 (プロパゲーター) と呼ぶこともある。

先も述べたように (2.5.1) の $\chi(t, \boldsymbol{x})$ には $\Psi(t, \boldsymbol{x})$ に対する非線形性があるが、

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V(t, \boldsymbol{x}) \right) G(t, \boldsymbol{x};\, t', \boldsymbol{x}') = \delta(t - t') \delta^{(3)}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \tag{2.5.3}$$

で定義された Green 関数は、(2.5.1) の解を、

$$\Psi(t, \boldsymbol{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' \int_V \mathrm{d}^3 \boldsymbol{x}' \, \chi(t', \boldsymbol{x}') G(t, \boldsymbol{x}; t', \boldsymbol{x}')$$

に対し、右辺の $\chi(t, \boldsymbol{x})$ の定義での $\Psi(t, \boldsymbol{x})$ に右辺全体を逐次代入することで無限級数の形で与える。

2.5.1 実時間 Green 関数

場 $\Psi(t, \boldsymbol{x})$ を与える要素になる Green 関数 $G(t, \boldsymbol{x}; t', \boldsymbol{x}')$ も物理量として扱えるので、量子論で対応する演算子の期待値として与えることができる。そのような Green 関数の内、次の 3 つが解析的に重要である。

$$\text{遅延 Green 関数}：G^{\mathrm{R}}(t, \boldsymbol{x}; t', \boldsymbol{x}') \equiv \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{\Psi}(t, \boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(t', \boldsymbol{x}') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t - t')$$

$$\text{先進 Green 関数}：G^{\mathrm{A}}(t, \boldsymbol{x}; t', \boldsymbol{x}') \equiv -\frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{\Psi}(t, \boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(t', \boldsymbol{x}') \right]_{-\zeta} \right\rangle \Theta(t' - t)$$

$$\text{因果 Green 関数}：G^{\mathrm{C}}(t, \boldsymbol{x}; t', \boldsymbol{x}') \equiv -\frac{1}{i\hbar} \left\langle T \left[\hat{\Psi}(t, \boldsymbol{x}) \hat{\Psi}^\dagger(t', \boldsymbol{x}') \right] \right\rangle$$

ここでの $\hat{\Psi}(t, \boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(t, \boldsymbol{x})$ は

$$\hat{H}(t) = \int_V \mathrm{d}^3 \boldsymbol{x} \, \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(t, \boldsymbol{x}) \right) \hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$$

に対する Heisenberg 描像の演算子

$$\hat{\Psi}(t, \boldsymbol{x}) = \hat{U}(t; t_0) \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) \hat{U}^\dagger(t; t_0), \quad \hat{\Psi}^\dagger(t, \boldsymbol{x}) = \hat{U}(t; t_0) \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) \hat{U}^\dagger(t; t_0) \quad \left(\hat{U}(t; t_0) = T \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \, \hat{H}(t') \right] \right)$$

で、期待値は考えている系の時刻 $t = t_0$ での状態に対してとられている。また、時間順序積 T は

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

として定義されている。Heisenberg 方程式 (1.3.7) から確かにこれらの $G(t, \boldsymbol{x}; t', \boldsymbol{x}')$ が (2.5.3) を満たすことが確認できる。また、プロパゲーターとしても定義が正当なものになっている。

自由粒子系の実時間 Green 関数

$V(t,\boldsymbol{x})=0$、すなわち自由粒子系であるときには、Green 関数は定義式 (2.5.3) から時刻・座標の原点に依らなくなる。これは考えている系の状態を定常状態に絞ったことに対応している。そのため、

$$G(t,\boldsymbol{x};t',\boldsymbol{x}')=G(t-t',\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

という関数形で表されるようになるので、次のように Fourier 成分を定義することができる。

$$\tilde{G}(\boldsymbol{k},\omega)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,G(t,\boldsymbol{x})e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}$$

(1.3.5) からこの場合の系のハミルトニアン $\hat{H}$ は

$$\begin{aligned}\hat{H}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_V\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\nabla^2\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_V\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}\left(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{\hbar^2}\right)^2\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}'}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}}\\&=\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}\qquad\left(\because\ \frac{1}{V}\int_V\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}}=\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\right)\end{aligned}$$

と表されるようになり[4)]、

$$\left[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}\right]=\sum_{\boldsymbol{p}'}\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}\left[\hat{a}_{\boldsymbol{p}},\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}'}\hat{a}_{\boldsymbol{p}'}\right]=\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$$

と交換関係がわかるので、$\epsilon_{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{p}^2/2m$ とおくと Heisenberg 描像での $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$ が

$$\hat{a}_{\boldsymbol{p}}(t)=e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{-i\hat{H}t/\hbar}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_{\boldsymbol{p}}t\right)^n\hat{a}_{\boldsymbol{p}}=\hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{-i\epsilon_{\boldsymbol{p}}t/\hbar}$$

と表されるとわかる (BCH 公式を用いた。C.3 節参照)。また、同様にして

$$\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}}(t)=\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{i\epsilon_{\boldsymbol{p}}t/\hbar}$$

であることもわかるので、Heisenberg 描像での場の演算子が

$$\hat{\Psi}(t,\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\epsilon_{\boldsymbol{p}}t)/\hbar},\qquad\hat{\Psi}^\dagger(t,\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{p}}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}}e^{-i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\epsilon_{\boldsymbol{p}}t)/\hbar}$$

と展開されると示される。上の Green 関数の内 $G^{\mathrm{R}},G^{\mathrm{A}}$ にこれらの場の演算子の展開を用いると、

$$\begin{aligned}G^{\mathrm{R}}(t-t',\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')&=\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}\left\langle\left[\hat{a}_{\boldsymbol{p}},\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}'}\right]_{-\zeta}\right\rangle e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}')/\hbar}e^{-i(\epsilon_{\boldsymbol{p}}t-\epsilon_{\boldsymbol{p}'}t')\hbar}e^{-\delta t}\Theta(t-t')\\&=\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')/\hbar}e^{-i\epsilon_{\boldsymbol{p}}(t-t')\hbar}e^{-\delta t}\Theta(t-t')\qquad\left(\because\ \left[\hat{a}_{\boldsymbol{p}},\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}'}\right]_{-\zeta}=\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\right)\end{aligned}$$

同様にして、

$$G^{\mathrm{A}}(t,\boldsymbol{x})=\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}e^{-i\epsilon_{\boldsymbol{p}}t\hbar}e^{\delta t}\Theta(-t)$$

とわかる ($t\to\pm\infty$ で $G(t,\boldsymbol{x})\to 0$ となるのが物理的に自然であるため収束因子 $e^{\mp\delta t}$ をかけている)。以上から、Fourier 変換の結果は

$$\tilde{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\,e^{-i(\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}/\hbar-\omega-i\delta)t}=\frac{1}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}+i\delta},\quad\tilde{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}-i\delta}$$

4) $\hat{H}^{(1)}=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2m$ の表式から 1.3.1 項の処方で多粒子系に定義域を拡張することでも得られる。

で与えられるとわかる。またこれらの表式からは

$$(\hbar\omega - \epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}} + i\delta)\,\tilde{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega) = 1, \quad (\hbar\omega - \epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}} - i\delta)\,\tilde{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega) = 1$$

が得られ、両辺 Fourier 逆変換を行うことでこの Green 関数の定義式 (2.5.3) が確かに導かれる。

$G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x})$ についても同様に上の手順で Fourier 成分の計算を試みると、

$$\begin{aligned} G^{\mathrm{C}}(t-t',\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}\Big(&\left\langle \hat{a}_{\boldsymbol{p}}\hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}'}\right\rangle e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}')/\hbar}e^{i(\epsilon_{\boldsymbol{p}}t-\epsilon_{\boldsymbol{p}'}t')/\hbar}e^{-\delta(t-t')}\Theta(t-t') \\ &+\zeta\left\langle \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}'}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}\right\rangle e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}')/\hbar}e^{i(\epsilon_{\boldsymbol{p}}t-\epsilon_{\boldsymbol{p}'}t')/\hbar}e^{\delta(t-t')}\Theta(t'-t)\Big) \end{aligned}$$

となり、期待値を熱平衡状態に対してとるならば、この系は相互作用のない系であるので、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

$$\left\langle \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}'}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}\right\rangle = f_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}, \quad \left\langle \hat{a}_{\boldsymbol{p}}\hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}'}\right\rangle = [1-f_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})]\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}$$

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

$$\left\langle \hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}'}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}\right\rangle = b_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}, \quad \left\langle \hat{a}_{\boldsymbol{p}}\hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}'}\right\rangle = [1+b_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})]\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}$$

と期待値部分を表せる (1.4.4 項参照)。よって $G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x})$ は、Fermi 粒子系の場合、

$$G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}e^{-i\epsilon_{\boldsymbol{p}}t/\hbar}\left\{[1-f_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})]\,e^{-\delta t}\Theta(t) - f_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})e^{\delta t}\Theta(-t)\right\}$$

Bose 粒子系の場合は、

$$G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}e^{-i\epsilon_{\boldsymbol{p}}t/\hbar}\left\{[1+b_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})]\,e^{-\delta t}\Theta(t) + b_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})e^{\delta t}\Theta(-t)\right\}$$

と表せる。特に $T=0$ のときには Fermi 分布関数は階段関数 $\Theta(\epsilon_{\mathrm{F}}-\epsilon)$ になるため、

$$\epsilon_{\mathrm{F}} \equiv \frac{{p_{\mathrm{F}}}^2}{2m}$$

で定義される Fermi 運動量 p_{F} により G^{C} を次のように表すことができる。

$$G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x}) = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}e^{-i\epsilon_{\boldsymbol{p}}t/\hbar}\left[\Theta(|\boldsymbol{p}|-p_{\mathrm{F}})e^{-\delta t}\Theta(t) - \Theta(p_{\mathrm{F}}-|\boldsymbol{p}|)e^{\delta t}\Theta(-t)\right]$$

以上から $\tilde{G}^{\mathrm{C}}(\boldsymbol{k},\omega)$ は

$$\tilde{G}^{\mathrm{C}}(\boldsymbol{k},\omega) = \begin{cases} \dfrac{1-f_{\beta,\mu}(\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}})}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}+i\delta} + \dfrac{f_{\beta,\mu}(\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}})}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}-i\delta} & (\text{Fermi 粒子系}) \\ \dfrac{1+b_{\beta,\mu}(\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}})}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}+i\delta} - \dfrac{b_{\beta,\mu}(\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}})}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}-i\delta} & (\text{Bose 粒子系}) \end{cases}$$

と表されることがわかる。特に $T=0$ での Fermi 粒子系であれば、$p_{\mathrm{F}} \equiv \hbar k_{\mathrm{F}}$ で定義される Fermi 波数 k_{F} を用いて $\tilde{G}^{\mathrm{C}}(\boldsymbol{k},\omega)$ は

$$\tilde{G}^{\mathrm{C}}(\boldsymbol{k},\omega) = \frac{\Theta(\hbar|\boldsymbol{k}|-p_{\mathrm{F}})}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}+i\delta} + \frac{\Theta(p_{\mathrm{F}}-\hbar|\boldsymbol{k}|)}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}-i\delta} = \frac{1}{\hbar\omega-\epsilon_{\hbar\boldsymbol{k}}+i\delta\,\mathrm{sgn}(k-k_{\mathrm{F}})}$$

と表せるようになり、

$$\mathrm{Re}\tilde{G}^{\mathrm{C}}(\boldsymbol{k},\omega) = \mathrm{Re}\tilde{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega) = \mathrm{Re}\tilde{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega), \qquad \mathrm{Im}\tilde{G}^{\mathrm{C}}(\boldsymbol{k},\omega) = \begin{cases} \mathrm{Im}\tilde{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega) & (k>k_{\mathrm{F}}) \\ \mathrm{Im}\tilde{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega) & (k<k_{\mathrm{F}}) \end{cases}$$

というように定義域の一部で $\tilde{G}^{\mathrm{R}},\tilde{G}^{\mathrm{A}}$ と一致し、複素関数として $\tilde{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega), G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)$ と解析接続するとわかる (C.1 節参照)。よって、$T=0$ の Fermi 粒子系の場合のみ G^{C} を求めるだけで他の Green 関数も求まることになる。

実時間 Green 関数を与える演算子

$V(t, \boldsymbol{x})$ に空間の依存性が残っている場合にも

$$G(t, \boldsymbol{x}; t', \boldsymbol{x}') = G(t - t'; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$$

という関数形になって、$t - t'$ についての Fourier 成分が定義可能である。しかしこの場合には、

$$\hat{H} = \sum_n \epsilon_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n$$

とハミルトニアンを対角化するような 1 粒子状態基底 $\hat{a}_n = \hat{a}(\alpha_n)$ ($\langle \alpha_n | \alpha_m \rangle = \delta_{nm}$) に移った方が見通しが良い。1 粒子系での完全性関係

$$|\boldsymbol{x}\rangle = \sum_j |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|\boldsymbol{x}\rangle$$

から、$\varphi_n(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{x} | \alpha_n \rangle$ とおくと、

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) = \sum_n \varphi_n(\boldsymbol{x})\hat{a}_n, \quad \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \sum_n \varphi_n^*(\boldsymbol{x})\hat{a}_n^\dagger$$

と展開できるほか、交換関係

$$\left[\hat{H}, \hat{a}_n\right] = \epsilon_n \hat{a}_n$$

と BCH 公式 (C.3 節参照) から

$$\hat{a}_n(t) \equiv e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}_n e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{a}_e^{-i\epsilon_n t/\hbar}$$

と Heisenberg 描像での $\hat{a}_n$ も表せるとわかるので、

$$G^{\mathrm{R}}(t; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \frac{1}{i\hbar}\sum_n \varphi_n(\boldsymbol{x})\varphi_n^*(\boldsymbol{x}')e^{-i\epsilon_n t/\hbar}\Theta(t)$$

$$G^{\mathrm{A}}(t; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = -\frac{1}{i\hbar}\sum_n \varphi_n(\boldsymbol{x})\varphi_n^*(\boldsymbol{x}')e^{i\epsilon_n t/\hbar}\Theta(-t)$$

$$G^{\mathrm{C}}(t; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \begin{cases} -\dfrac{1}{i\hbar}\displaystyle\sum_n \varphi_n(\boldsymbol{x})\varphi_n^*(\boldsymbol{x}')e^{-i\epsilon_n t/\hbar} \\ \qquad\qquad \times \left\{[1 - f_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})]e^{-\delta t}\Theta(t) - f_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})e^{\delta t}\Theta(-t)\right\} & (\text{Fermi 粒子系}) \\ -\dfrac{1}{i\hbar}\displaystyle\sum_n \varphi_n(\boldsymbol{x})\varphi_n^*(\boldsymbol{x}')e^{-i\epsilon_n t/\hbar} \\ \qquad\qquad \times \left\{[1 + b_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})]e^{-\delta t}\Theta(t) + b_{\beta,\mu}(\epsilon_{\boldsymbol{p}})e^{\delta t}\Theta(-t)\right\} & (\text{Bose 粒子系}) \end{cases}$$

と表式が得られる (ただし G^{C} の表式は熱平衡状態 $(T, \mu; V)$ のものである)。G^{R} については $t \to +\infty$、G^{A} については $t \to -\infty$ で $G = 0$ となるように、

$$\tilde{G}^{\mathrm{R}}(\omega; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, G^{\mathrm{R}}(t; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')e^{i\omega t}e^{-\delta t}, \quad \tilde{G}^{\mathrm{A}}(\omega; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, G^{\mathrm{A}}(t; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')e^{i\omega t}e^{\delta t}$$

というように収束因子があることを踏まえて Fourier 成分 $\tilde{G}(\omega; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ を計算すると、

$$\tilde{G}^{\mathrm{R}}(\omega; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \sum_n \frac{\varphi_n(\boldsymbol{x})\varphi_n^*(\boldsymbol{x}')}{\hbar\omega - \epsilon_n + i\delta} = \sum_n \frac{\langle \boldsymbol{x}|\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|\boldsymbol{x}'\rangle}{\hbar\omega - \epsilon_n + i\delta}$$

$$\tilde{G}^{\mathrm{A}}(\omega; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \sum_n \frac{\varphi_n(\boldsymbol{x})\varphi_n^*(\boldsymbol{x}')}{\hbar\omega - \epsilon_n - i\delta} = \sum_n \frac{\langle \boldsymbol{x}|\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|\boldsymbol{x}'\rangle}{\hbar\omega - \epsilon_n - i\delta}$$

となる。同様に G^{C} についても収束因子を踏まえて熱平衡状態 $(T,\mu;V)$ のものについて計算すると、

$$\tilde{G}^{\mathrm{C}}(\omega;\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\begin{cases}\displaystyle\sum_n\left(\frac{1-f_{\beta,\mu}(\epsilon_n)}{\hbar\omega-\epsilon_n+i\delta}+\frac{f_{\beta,\mu}(\epsilon_n)}{\hbar\omega-\epsilon_n-i\delta}\right)\varphi_n(\boldsymbol{x})\varphi_n^*(\boldsymbol{x}') & (\text{Fermi 粒子系})\\ \displaystyle\sum_n\left(\frac{1+b_{\beta,\mu}(\epsilon_n)}{\hbar\omega-\epsilon_n+i\delta}-\frac{b_{\beta,\mu}(\epsilon_n)}{\hbar\omega-\epsilon_n-i\delta}\right)\varphi_n(\boldsymbol{x})\varphi_n^*(\boldsymbol{x}') & (\text{Bose 粒子系})\end{cases}$$

と導かれる。この表式から、Green 関数を与える 1 体演算子として、

$$\hat{G}^{\mathrm{R}}(E)=\sum_n\frac{\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n}{E-\epsilon_n+i\delta},\quad \hat{G}^{\mathrm{A}}(E)=\sum_n\frac{\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n}{E-\epsilon_n-i\delta},$$

$$\hat{G}^{\mathrm{C}}(E)=\begin{cases}\displaystyle\sum_n\left(\frac{1-f_{\beta,\mu}(\epsilon_n)}{E-\epsilon_n+i\delta}+\frac{f_{\beta,\mu}(\epsilon_n)}{E-\epsilon_n-i\delta}\right)\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n & (\text{Fermi 粒子系})\\ \displaystyle\sum_n\left(\frac{1-b_{\beta,\mu}(\epsilon_n)}{E-\epsilon_n+i\delta}-\frac{b_{\beta,\mu}(\epsilon_n)}{E-\epsilon_n-i\delta}\right)\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n & (\text{Bose 粒子系})\end{cases}$$

を定義できる。

$\hat{G}^{\mathrm{R}}(E)$ と $\hat{G}^{\mathrm{A}}(E)$ については、Green 関数の定義式 (2.5.3) を両辺 Fourier 変換すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,e^{i\omega t}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-V(\boldsymbol{x})\right)G(t;\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

$$\therefore\begin{cases}\left[\hbar\omega+i\delta-\left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right)\right]\tilde{G}^{\mathrm{R}}(\omega;\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\\ \left[\hbar\omega-i\delta-\left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right)\right]\tilde{G}^{\mathrm{A}}(\omega;\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\end{cases}$$

となっているので、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right)\langle\boldsymbol{x}|=\langle\boldsymbol{x}|\hat{H}$$

であることと $\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle$ を用いると、

$$\left(E-\hat{H}+i\delta\right)\hat{G}^{\mathrm{R}}(E)=\hat{I},\qquad\left(E-\hat{H}-i\delta\right)\hat{G}^{\mathrm{A}}(E)=\hat{I}$$

が成り立っているとわかる。

1 体演算子として表せる摂動項 $\hat{V}$ が加わった系 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ と非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ のそれぞれで Green 関数を与える演算子を考えると、

$$\left(E-\hat{H}+i\delta\right)G^{\mathrm{R}}(E)=\hat{I},\qquad\left(E-\hat{H}_0+i\delta\right)\hat{G}_0^{\mathrm{R}}(E)=\hat{I}$$

$$\therefore\ \hat{G}^{\mathrm{R}}(E)=\hat{G}_0^{\mathrm{R}}\left(E-\hat{H}_0+i\delta\right)G^{\mathrm{R}}=\hat{G}_0^{\mathrm{R}}\left(\hat{I}+\hat{V}\hat{G}^{\mathrm{R}}\right)=\hat{G}_0^{\mathrm{R}}\hat{V}\hat{G}^{\mathrm{R}}$$

という関係式が成り立つことがわかる。この関係式は Dyson 方程式といい、

$$\hat{G}^{\mathrm{R}}=\hat{G}_0^{\mathrm{R}}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\hat{V}\hat{G}_0^{\mathrm{R}}\right)$$

という級数で解が与えられる。

径路積分による実時間 Green 関数の表現

系の状態が純粋状態 $|\Phi_0\rangle$ の場合には、$G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x};t',\boldsymbol{x}')$ を径路積分の形式で与えることができる。実際 $G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x};t',\boldsymbol{x}')$ の定義から、

$$
\begin{aligned}
G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x};t',\boldsymbol{x}') &\equiv -\frac{1}{i\hbar}\langle\Phi_0|\,T\Big[\hat{\Psi}(t,\boldsymbol{x})\hat{\Psi}^\dagger(t',\boldsymbol{x}')\Big]|\Phi_0\rangle \\
&= \begin{cases} -\dfrac{1}{i\hbar}\langle\Phi_0|\hat{U}(t;t_0)\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\hat{U}^\dagger(t;t_0)\hat{U}(t';t_0)\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\hat{U}^\dagger(t';t_0)|\Phi_0\rangle & (t>t') \\ -\dfrac{1}{i\hbar}\langle\Phi_0|\hat{U}(t';t_0)\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\hat{U}^\dagger(t';t_0)\hat{U}(t;t_0)\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\hat{U}^\dagger(t;t_0)|\Phi_0\rangle & (t<t') \end{cases} \\
&= \begin{cases} -\dfrac{1}{i\hbar}\langle\Phi_0|\hat{U}^\dagger(t_0;t)\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\hat{U}^\dagger(t;t')\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\hat{U}^\dagger(t';t_0)|\Phi_0\rangle & (t>t') \\ -\dfrac{1}{i\hbar}\langle\Phi_0|\hat{U}^\dagger(t_0;t')\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\hat{U}^\dagger(t';t)\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\hat{U}^\dagger(t;t_0)|\Phi_0\rangle & (t<t') \end{cases}
\end{aligned}
$$

というように時間発展演算子 $\hat{U}^\dagger(t;t')$ を挟んだ期待値になっている ($\hat{U}(t;t')=\hat{U}^\dagger(t';t)$, $\hat{U}^\dagger(t_1;t_2)\hat{U}^\dagger(t_2;t_3)=\hat{U}^\dagger(t_1;t_3)$ を用いた) ので、1.5.2〜3 項で行ったように時間発展を細分化して、

$$
\hat{U}^\dagger(t+\Delta t;t)=e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}\simeq\hat{I}-\frac{i}{\hbar}H(\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}),\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}),t)\Delta t \quad (\Delta t\ll 1)
$$

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、

$$
\begin{aligned}
&\langle\Psi_{k+1}|\hat{U}^\dagger(t_{k+1};t_k)|\Psi_k\rangle\simeq\langle\Psi_{k+1}|\Psi_k\rangle\Big(1-\frac{i}{\hbar}H(\Psi_k(\boldsymbol{x}),\bar{\Psi}_{k+1}(\boldsymbol{x}),t_k)\Delta t\Big) \\
&\simeq\exp\Bigg[\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\Bigg(-\bar{\Psi}_{k+1}(\boldsymbol{x})\frac{\Psi_{k+1}(\boldsymbol{x})-\Psi_k(\boldsymbol{x})}{2\Delta t}+\frac{\bar{\Psi}_{k+1}(\boldsymbol{x})-\bar{\Psi}_k(\boldsymbol{x})}{2\Delta t}\Psi_k(\boldsymbol{x})-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}(\Psi_k(\boldsymbol{x}),\bar{\Psi}_{k+1}(\boldsymbol{x}),t_k,\boldsymbol{x})\Bigg)\Delta t\Bigg]
\end{aligned}
$$

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 $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}),\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')$ はそれぞれ $\Psi(t,\boldsymbol{x}),\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')$ のコヒーレント状態に作用して c 数を与える。積分径路は、時刻 t_0 で状態 $|\Phi_0\rangle$ から出発して時刻 t,t' を早い方から順に通過したのち再び時刻 t_0 で状態 $|\Phi_0\rangle$ に戻るような任意の閉経路になるが、径路積分の定義から

$$
\begin{aligned}
&\oint\mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\,\Big(\hat{U}^\dagger(t_0;t)\text{の c 数}\Big)\Psi(t,\boldsymbol{x})\Big(\hat{U}^\dagger(t;t')\text{の c 数}\Big)\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')\,\Big(\hat{U}^\dagger(t';t_0)\text{の c 数}\Big)= \\
&\Big[\int\mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\,\Big(\hat{U}^\dagger(t_0;t)\text{の c 数}\Big)\Big]\Big[\int\mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\Psi(t,\boldsymbol{x})\Big(\hat{U}^\dagger(t;t')\text{の c 数}\Big)\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')\Big]\Big[\int\mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\,\Big(\hat{U}^\dagger(t';t_0)\text{の c 数}\Big)\Big] \\
&\qquad\qquad (t>t'\text{の場合、}t<t'\text{でも同様})
\end{aligned}
$$

と径路を分割してそれぞれで計算した後にかけ合わせてもよいので、

$$
\begin{aligned}
\Big(\hat{U}^\dagger(t;t')\text{の c 数}\Big)&=\exp\Bigg\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t''\int_V\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\Bigg[\frac{i\hbar}{2}\left(\bar{\Psi}\partial_t\Psi-\partial_t\bar{\Psi}\Psi\right)-\mathscr{H}(\Psi,\bar{\Psi},t,\boldsymbol{x})\Bigg]\Bigg\} \\
&=\exp\Bigg\{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t''\int_V\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\left[i\hbar\bar{\Psi}\partial_t\Psi-\mathscr{H}(\Psi,\bar{\Psi},t'',\boldsymbol{x})\right]\Bigg\}\exp\Bigg[\frac{i}{\hbar}\int_V\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\Big(|\Psi(t,\boldsymbol{x})|^2-|\Psi(t',\boldsymbol{x})|^2\Big)\Bigg]
\end{aligned}
$$

より、

$$
S(t;t')\equiv\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t''\int_V\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\left[i\hbar\bar{\Psi}\partial_t\Psi-\mathscr{H}(\Psi,\bar{\Psi},t,\boldsymbol{x})\right]
$$

とおくと、これが作用汎関数であるとともに、$S(t';t) = -S(t';t)$ であるから、

$$G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x};t',\boldsymbol{x}') = \begin{cases} -\dfrac{1}{i\hbar}\left(\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t_0;t)/\hbar}\right)\left(\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\Psi(t,\boldsymbol{x})\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')e^{iS(t;t')/\hbar}\right) \\ \qquad\qquad \times\left(\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t';t_0)/\hbar}\right) & (t > t') \\ -\dfrac{\zeta}{i\hbar}\left(\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t_0;t')/\hbar}\right)\left(\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')\Psi(t,\boldsymbol{x})e^{iS(t';t)/\hbar}\right) \\ \qquad\qquad \times\left(\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t;t_0)/\hbar}\right) & (t < t') \end{cases}$$

$$= \begin{cases} -\dfrac{1}{i\hbar}\dfrac{\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\,\Psi(t,\boldsymbol{x})\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')e^{iS(t;t')/\hbar}}{\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t;t_0)/\hbar}\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t_0;t')/\hbar}} & (t > t') \\ -\dfrac{1}{i\hbar}\dfrac{\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\,\Psi(t,\boldsymbol{x})\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')e^{iS(t';t)/\hbar}}{\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t';t_0)/\hbar}\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t_0;t)/\hbar}} & (t < t') \end{cases}$$

と G^{C} が径路積分で表せることがわかる。さらに、分母と分子の作用汎関数および径路積分の時間方向の積分範囲は、$\min(t,t') \to -\infty$, $\max(t,t') \to +\infty$ まで広げても加わる因子が分母と分子で相殺しあって値に影響を及ぼさないため、結局、

$$G^{\mathrm{C}}(t,\boldsymbol{x};t',\boldsymbol{x}') = -\frac{1}{i\hbar}\frac{\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\,\Psi(t,\boldsymbol{x})\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')e^{iS(+\infty;-\infty)/\hbar}}{\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(+\infty;t_0)/\hbar}\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(t_0;-\infty)/\hbar}}$$

というように $t > t'$ と $t < t'$ の表式が一致するとわかる。特にハミルトニアンが時間に依存しない場合には時間軸の原点 t_0 を自由にとってよいので、$t_0 \to \pm\infty$ どちらかの極限をとることで

$$G^{\mathrm{C}}(t-t';\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = -\frac{1}{i\hbar}\frac{\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})\,\Psi(t,\boldsymbol{x})\bar{\Psi}(t',\boldsymbol{x}')e^{iS(+\infty;-\infty)/\hbar}}{\displaystyle\int \mathcal{D}(\Psi,\bar{\Psi})e^{iS(+\infty;-\infty)/\hbar}}$$

と表せるようになる。また、ここまでの議論でハミルトニアン $\hat{H}$ の Ψ の関数としての形には正規順序以外の制限がつかないことにも注意する。すなわち、相互作用のない系に対して定義した Green 関数を径路積分で表したことで相互作用をもつ系に定義を拡張して与えられるようになっている[5)]。

因果 Green 関数の摂動展開

物理量の相関関数と Green 関数

2.5.2 温度 Green 関数

前節で導入した Green 関数は、G^{R} が物理量の相関関数と密接に関連しているものの、G^{R} を求めるためには G^{C} の摂動展開と解析接続が成り立つ $T=0$ の基底状態で考えなければならず、有限温度での計算ができない。しかし、因果 Green 関数の代わりに有限温度の系での G^{R} と解析接続し、摂動展開も可能な Green 関数を考えることでこの困難が回避される。その Green 関数が温度 Green 関数

$$\mathcal{G}(u,\boldsymbol{x};u',\boldsymbol{x}') \equiv -\frac{1}{i\hbar}\left\langle \mathcal{T}\left[\hat{\Psi}(u,\boldsymbol{x})\hat{\Psi}^{\dagger}(u',\boldsymbol{x}')\right]\right\rangle$$

5）一方で、(2.5.3) による定義を一般には満たさなくなることにも注意する。このように定義を拡張した Green 関数はもはやプロパゲーターとしてしか解釈できない。

である。

自由粒子系での温度 Green 関数

温度 Green 関数の摂動展開

2.5.3 Keldysh の Green 関数

2.6 スケーリング理論・くりこみ群

2.7 Floquet 理論

2.8 行列積状態・テンソルネットワーク状態

第 3 章　量子多体系としての固体結晶 I ：バンド描像での電子相関

固体結晶中の電子多体系は量子多体系の代表例と言ってよい。特に電子相関を取り扱う際には多体系の量子力学の方法が不可欠である。この章ではまず固体結晶中の 1 粒子状態について述べてバンド描像を確立した後、電子間相互作用の取り扱いとその影響を見る。また、バンド描像をとることで系に導入できるようになる幾何学的位相についても考える。

3.1　固体電子の 1 粒子状態とバンド描像

固体結晶中の電子のハミルトニアンは、電子間相互作用を無視した場合には、

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \hat{\Psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x}) \right) \hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{x}) \tag{3.1.1}$$

で与えられる。結晶中で電子が感じるポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ は周期的に配列する原子核によるもので、

$$V(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{R}) = V(\boldsymbol{x})$$
$$(\boldsymbol{R} \equiv n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3,\ n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z})$$

というように周期関数で表される。$\boldsymbol{R}$ は格子ベクトル、$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ は基本格子ベクトルと呼ばれる。原子核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、この章ではポテンシャルの変動は考えない。

3.1.1　Bloch 状態

基本格子ベクトル $\boldsymbol{a}_,\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ に対して基本逆格子ベクトル

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}, \quad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_2\cdot(\boldsymbol{a}_3\times\boldsymbol{a}_1)}, \quad \boldsymbol{b}_3 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_3\cdot(\boldsymbol{a}_1\times\boldsymbol{a}_2)}$$

を定義し、逆格子ベクトルを $\boldsymbol{G} = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3\,(m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z})$ で定義すると、$V(\boldsymbol{x})$ の Fourier 級数展開を次のように表せる (u.c. は $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ が 3 辺をなす平行六面体内での積分を表す。この領域は基本格子という)。

$$V(\boldsymbol{x}) = \sum_{m_1,m_2,m_3} \tilde{V}_{(m_1,m_2,m_3)} e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}}, \qquad \tilde{V}_{(m_1,m_2,m_3)} = \frac{1}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)} \int_{\mathrm{u.c.}} \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, V(\boldsymbol{x}) e^{-i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}}$$

この表式と $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ の Fourier 級数展開 (1.3.5) を (3.1.1) に用いると、

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_V \frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}}{V} \sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'} \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \sum_{m_1,m_2,m_3} \tilde{V}_{(m_1,m_2,m_3)} e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}} \right) e^{-i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}/\hbar} \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}',\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{p},\sigma} \\
&= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'} \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'} + \sum_{m_1,m_2,m_3} \tilde{V}_{(m_1,m_2,m_3)} \delta_{\boldsymbol{p}+\hbar\boldsymbol{G},\boldsymbol{p}'} \right) \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p},\sigma} \hat{a}_{\boldsymbol{p}',\sigma} \\
&= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{m_1,m_2,m_3} \sum_{m_1',m_2',m_3'} \left(\frac{\hbar}{2m} \left|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}\right|^2 \delta_{\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}'} + \tilde{V}_{(m_1-m_1',m_2-m_2',m_3-m_3')} \right) \hat{a}^\dagger_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}),\sigma} \hat{a}_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}'),\sigma}
\end{aligned}$$

とハミルトニアンが表せるとわかる。ここで、$\boldsymbol{k}$ は

$$\boldsymbol{k} = \left(\frac{2\pi}{L}n_x, \frac{2\pi}{L}n_y, \frac{2\pi}{L}n_z \right)$$

であり、和の範囲は $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ で 3 辺が指定される平行六面体にとってもよいが、実用上 $\boldsymbol{k} = (0,0,0)$ 周りの Wigner-Seitz セルにとることがほとんどである。この領域は (第 1)Brillouin ゾーンとも呼ばれ、その体積は平行六面体で和の範囲をとった場合と等しいので、領域内の $\boldsymbol{k}$ の数は

$$\frac{\boldsymbol{b}_1 \cdot (\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3)}{(2\pi/L)^3} = \frac{V}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{a}_3)} \ (\equiv N)$$

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、

$$\begin{aligned}
\tilde{V}_{(-m_1,-m_2,-m_3)} &= \frac{1}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \int_{\mathrm{u.c.}} \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, V(\boldsymbol{x}) e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}} \\
&= \frac{1}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \int_{\mathrm{u.c.}} \mathrm{d}^3(-\boldsymbol{x})\, V(-\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3) e^{-i\boldsymbol{G}\cdot(-\boldsymbol{x})} \\
&= \frac{1}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \int_{\mathrm{u.c.}} \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, V(\boldsymbol{x}) e^{-i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}} \\
&= \tilde{V}_{(m_1,m_2,m_3)}
\end{aligned}$$

であるので、

$$\frac{\hbar}{2m} |\boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}|^2 \delta_{\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}'} + \tilde{V}_{(m_1-m_1',m_2-m_2',m_3-m_3')}$$

は、$\boldsymbol{G} = (m_1, m_2, m_3)$ を行、$\boldsymbol{G}' = (m_1', m_2', m_3')$ を列のそれぞれ添字だと見れば実対称行列になっていて、スペクトル分解

$$\frac{\hbar}{2m} |\boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}|^2 \delta_{\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}'} + \tilde{V}_{(m_1-m_1',m_2-m_2',m_3-m_3')} = \sum_n \epsilon_{n,\boldsymbol{k}} c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} c^*_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}'}$$

が可能である ($\epsilon_{n,\boldsymbol{k}}$ は実数)。この分解を用いると、ハミルトニアンが

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{m_1',m_2',m_3'} \sum_{m_1,m_2,m_3} \left(\sum_n \epsilon_{n,\boldsymbol{k}} c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} c^*_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}'} \right) \hat{a}^\dagger_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}'),\sigma} \hat{a}_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}),\sigma} \\
&= \sum_{n,\boldsymbol{k}} \epsilon_{n,\boldsymbol{k}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma})
\end{aligned}$$

と表せることがわかる。ここで定義された生成消滅演算子

$$\hat{a}(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}) \equiv \sum_{m_1,m_2,m_3} c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} \hat{a}_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}),\sigma}, \quad \hat{a}^\dagger(\varphi_{\boldsymbol{k},\sigma;\sigma}) \equiv \sum_{m_1,m_2,m_3} c^*_{n,\boldsymbol{k},\boldsymbol{G}} \hat{a}^\dagger_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}),\sigma}$$

に対応する 1 粒子状態 $|\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}\rangle$ は Bloch 状態と呼ばれる。$\hat{a}^\dagger(u_{n,\boldsymbol{k};\sigma})$ と場の演算子 $\hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{x})$ との反交換関係は 1 粒子状態の波動関数 $\varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{x} | \varphi_{n,\boldsymbol{k}} \rangle$ を与えるが、

$$\begin{aligned}
\left\{ \hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{x}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}) \right\} &= \sum_{m_1,m_2,m_3} c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} \left\{ \hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{x}), \hat{a}_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}),\sigma} \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{m_1,m_2,m_3} e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{x}} c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} \qquad \left(\because \left\{ \hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{x}), \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p},\sigma} \right\} = \langle \boldsymbol{x} | \boldsymbol{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar} \right)
\end{aligned}$$

より、$\varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$ は次のように表されることがわかる。

$$\varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) \qquad \left(u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{m_1,m_2,m_3} e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}} c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} \right)$$

ここで、$e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{R}} = 1$ より $u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{R}) = u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$ が成り立つことに注意する。このため、

$$\varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{R}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} \varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$$

というように波動関数はポテンシャルの周期性を反映しながら位相の変化を許すものになっている。

対角化の過程から、$c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}}$ は固有値 $\epsilon_{n,\boldsymbol{k}}$ の固有ベクトルの第 $\boldsymbol{G}$ 成分なので、

$$\sum_{m_1,m_2,m_3} c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} c^*_{n',\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} = \delta_{nn'}$$

が成り立つ。すなわち、

$$\left\{\hat{a}(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n',\boldsymbol{k};\sigma})\right\} = \sum_{m_1,m_2,m_3}\sum_{m_1',m_2',m_3'} c_{n,\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}} c^*_{n',\boldsymbol{k};\boldsymbol{G}'} \left\{\hat{a}_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}),\sigma}, \hat{a}^\dagger_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}'),\sigma}\right\} = \delta_{nn'}$$

というように異なる n の間での Bloch 状態は $\boldsymbol{k}$ が同じでも直交する。このような、Brillouin ゾーン内で互いに直交する複数のエネルギー分散が存在するような固体電子の 1 粒子固有状態の構造をバンド構造といい、n をバンド指標と呼ぶ。

対角化の過程からわかるように、Bloch 状態を指定する添え字 $n, \boldsymbol{k}$ の内 n は $\boldsymbol{k}$ 空間内の基本逆格子の数だけ添字が走るので、以降 n の代わりに $(m_1, m_2, m_3) \in \mathbb{Z}^3$ で指定することがある。ポテンシャルがない自由電子系の場合には、Bloch 状態が

$$\hat{a}(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}) = \hat{a}_{\hbar(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}),\sigma}, \quad \epsilon_{n,\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}|^2 \qquad (\boldsymbol{G} = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3)$$

というように定義できて、Brillouin ゾーン端や $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ で異なるバンドに属する Bloch 状態が縮退しうる。一般にポテンシャルがある場合には RS 摂動論 (2.1 節参照) で見たようにこの縮退が解ける (一部は系の対称性により縮退が解けないことがある。詳しくは 3.4 節参照) ため、バンド構造にはエネルギーギャップが存在している。

$|\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}\rangle$ が 1 粒子状態空間上での正規直交系をなすことから、完全性関係

$$\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n,\boldsymbol{k}} |\varphi_{n,\boldsymbol{k},\sigma}\rangle\langle\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}| = \hat{I}$$

が成り立つので、$\varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{R}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$ を満たす $\varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$ を用いて、

$$\hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{x}) = \sum_{n,\boldsymbol{k}} \varphi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})\hat{a}(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma}), \qquad \hat{\Psi}^\dagger_\sigma(\boldsymbol{x}) = \sum_{n,\boldsymbol{k}} \varphi^*_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})\hat{a}^\dagger(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma})$$

と場の演算子を表せるとわかる。(1.3.4) にこれらの関係を用いることで位置演算子 $\hat{\boldsymbol{x}}$、運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ は次のように表せるとわかる。

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{x}} &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n,\boldsymbol{k}}\sum_{n',\boldsymbol{k}'} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma})\hat{a}(\varphi_{n',\boldsymbol{k}';\sigma}) \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, \boldsymbol{x}\varphi^*_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})\varphi_{n',\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{x}) \\
\hat{\boldsymbol{p}} &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n,\boldsymbol{k}}\sum_{n',\boldsymbol{k}'} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma})\hat{a}(\varphi_{n',\boldsymbol{k}';\sigma}) \int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, \varphi^*_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})\frac{\hbar}{i}\nabla\varphi_{n',\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

3.1.2 Wannier 状態

以降は Bloch 状態の生成消滅演算子を $\hat{a}_{n\boldsymbol{k},\sigma} = \hat{a}(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma})$, $\hat{a}^\dagger_{n\boldsymbol{k},\sigma} = \hat{a}^\dagger(\varphi_{n,\boldsymbol{k};\sigma})$ と表すことにする。

$\hat{a}_{n\boldsymbol{k},\sigma}$, $\hat{a}^\dagger_{n\boldsymbol{k},\sigma}$ 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 $\boldsymbol{R} = n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3$ を用いて

$$\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\hat{a}_{n\boldsymbol{k},\sigma}, \quad \hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\hat{a}^\dagger_{n\boldsymbol{k},\sigma}$$

で定義できる。生成消滅演算子 $\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}), \hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})$ に対応する 1 粒子状態 $|w_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})\rangle$ を Wannier 状態という。

$\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})$ と $\hat{c}^\dagger_{n',\sigma}(\boldsymbol{R}')$ の反交換関係は、Bloch 状態の反交換関係から、

$$\left\{\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}), \hat{c}^\dagger_{n',\sigma}(\boldsymbol{R}')\right\} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'\in \mathrm{BZ}} e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R})}\left\{\hat{a}_{n\boldsymbol{k},\sigma}, \hat{a}^\dagger_{n'\boldsymbol{k}',\sigma}\right\} = \delta_{nn'}\delta_{\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}'}$$

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 $\boldsymbol{R}$ 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状態を表していると考えられる。

$\hat{a}_{n\boldsymbol{k},\sigma}, \hat{a}^\dagger_{n\boldsymbol{k},\sigma}$ によるハミルトニアンの表現

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n\boldsymbol{k}} \epsilon_{n\boldsymbol{k}}\hat{a}^\dagger_{n\boldsymbol{k},\sigma}\hat{a}_{n\boldsymbol{k},\sigma}$$

に $\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}), \hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})$ の離散 Fourier 逆変換

$$\hat{a}_{n\boldsymbol{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}\in V} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}), \quad \hat{a}^\dagger_{n\boldsymbol{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}\in V} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})$$

を用いると、

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \frac{1}{N}\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{R},\boldsymbol{R}'\in V} e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}')}\epsilon_{n\boldsymbol{k}}\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}') \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n}\sum_{\boldsymbol{R}\in V}\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})\left[\sum_{\boldsymbol{\delta}}\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}\epsilon_{n\boldsymbol{k}}\right)\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{\delta})\right]\end{aligned}$$

という表式が得られる ($\boldsymbol{\delta} = d_1\boldsymbol{a}_1 + d_2\boldsymbol{a}_2 + d_3\boldsymbol{a}_3,\ d_1, d_2, d_3 \in \mathrm{Z}$)。$\epsilon_{n\boldsymbol{k}}$ が $\boldsymbol{k}$ に依存しないときは、

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n}\sum_{\boldsymbol{R}\in V}\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})\left[\epsilon_n\sum_{\boldsymbol{\delta}}\left(\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}\right)\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{\delta})\right] \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n}\sum_{\boldsymbol{R}\in V}\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})\left(\epsilon_n\sum_{\boldsymbol{\delta}}\delta_{\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{0}}\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{\delta})\right) \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{n}\sum_{\boldsymbol{R}\in V}\epsilon_n\hat{c}^\dagger_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})\hat{c}_{n,\sigma}(\boldsymbol{R})\end{aligned}$$

というように各格子点に局在した状態が系の固有状態になる。この状態は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。$|\varphi_{n\boldsymbol{k},\sigma}\rangle$ と同様に $\epsilon_{n\boldsymbol{k}}$ も周期境界条件を満たしていて、

$$t_n(\boldsymbol{\delta}) \equiv -\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\in\mathrm{BZ}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}\epsilon_{n\boldsymbol{k}}$$

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 (2.2 節で関連する議論を行っている)。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では、

$$t_n(\pm\boldsymbol{a}_1) = t_n(\pm\boldsymbol{a}_2) = t_n(\pm\boldsymbol{a}_3)(\equiv t_n), \qquad t_n(\boldsymbol{\delta}) = 0 \quad (\boldsymbol{\delta} \neq \pm\boldsymbol{a}_j)$$

とすると、離散 Fourier 逆変換より

$$\epsilon_{n\boldsymbol{k}} = \epsilon_n - t_n\sum_j \cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}_j)$$

というようにバンド分散が cos で表される。このような場合を強束縛模型という。

3.2 電子間 Coulomb 相互作用の効果

電子間にはたらく Coulomb 相互作用は、次のような 2 体ポテンシャルで表される。

$$V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|}$$

Coulomb 相互作用は電磁場を通じてはたらくが、その変化は電子運動の時間スケールに対して非常に素早く起こるので、常にこの形のポテンシャルであるとしてよい。Coulomb 相互作用を 2 体演算子として場の演算子を用いて表すと、

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\int_V \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|}\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$$

となる。

3.2.1 Hartree-Fock 近似

3.2.2 高次の相関エネルギー

3.3 相互作用の遮蔽

3.3.1 誘電関数と動的構造因子

3.3.2 乱雑位相近似

3.3.3 プラズマ振動・Friedel 振動

3.4 バンド空間のトポロジーと量子 Hall 効果

第 4 章　量子多体系としての固体結晶 II：BCS 理論

Bardeen, Cooper, Schriffer により提唱された BCS 理論は超伝導状態の金属電子のふるまいを説明する。この章では BCS 理論の仮定から議論を始めて、導かれる電子状態が超伝導の性質を示すことを見る。

4.1　BCS ハミルトニアン

4.2　Cooper の不安定性

4.3　BCS 基底状態とギャップ方程式

4.4　BCS 基底状態の熱力学的性質

4.5　BCS 基底状態と超伝導

4.6　超伝導転移における対称性の自発的破れ

第 5 章　量子多体系としての固体結晶 III：電子-格子相互作用

前節において固体結晶の格子点をなす原子核は Born-Oppenheimer 近似によりその運動を無視していた。しかし実際には原子核も運動しており、さらにその運動はポテンシャルの変化として電子多体系に影響を及ぼす。この章では原子核の運動の取り扱いとその影響を考える。

5.1　格子振動の量子化

5.2　電子-格子相互作用の定式化

5.3　電子-格子相互作用の物性

5.3.1　電気伝導率への寄与

5.3.2　熱伝導率への寄与

第 6 章　量子多体系としての固体結晶IV：電子系の光学応答

この章では外部から光を照射されたときの固体電子のふるまいを考える。光の影響は、固体電子ではポテンシャルの変化として取り入れ、さらに固体の分極・電流を用いた Maxwell 方程式を連立することで光自体への影響も古典論で取り入れる。

6.1　自由電子系に対する定式化

6.2　古典論的モデルとの対応

6.3　ポラリトン

6.4　局所場の補正

6.5　レーザー発振

第 7 章　量子多体系としての固体結晶Ⅴ：固体結晶中の磁性イオン

7.1　スピン間相互作用

7.2　スピン軌道相互作用

7.3　電子系の磁場応答

7.4　磁性不純物と近藤効果

第 8 章　量子多体系としての磁性体 I：局在電子モデル

8.1　スピンハミルトニアン

8.2　スピン波近似とマグノン

8.3　1 次元スピン鎖の厳密な結果

8.4　対称性に保護されたトポロジカル相

第 9 章　量子多体系としての磁性体 II：遍歴電子モデル

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。

$$\left[\hat{J}^{\alpha}, \hat{J}^{\beta}\right] = i\hbar \sum_{\gamma=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}^{\gamma} \tag{A.1.1}$$

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、

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}^z\right]_{-1} &= \sum_{\alpha=x,y,z} \left[(\hat{J}^{\alpha})^2, \hat{J}^z\right]_{-1} \\
&= \sum_{\alpha=x,y,z} \left(\hat{J}^{\alpha}\left[\hat{J}^{\alpha}, \hat{J}^z\right]_{-1} + \left[\hat{J}^{\alpha}, \hat{J}^z\right]_{-1}\hat{J}^{\alpha}\right) \\
&= i\hbar \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} \epsilon_{\alpha z\beta}\left(\hat{J}^{\alpha}\hat{J}^{\beta} + \hat{J}^{\beta}\hat{J}^{\alpha}\right) = 0
\end{aligned}$$

となり、$\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}^z$ 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、

$$\left[\hat{J}^z, \hat{J}^{\pm}\right]_{-1} = i\hbar\left(\hat{J}^y \mp i\hat{J}^x\right) = \pm\hbar\hat{J}^{\pm}$$

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、

$$\hat{J}^z\left(\hat{J}^{\pm}|m\rangle\right) = \hat{J}^{\pm}\left(\hat{J}^z \pm \hbar\right)|m\rangle = \hbar(m \pm 1)\hat{J}^{\pm}|m\rangle$$

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、$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ は $\hat{J}^{\pm}$ を用いると、

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{J}^+\hat{J}^- + \hat{J}^-\hat{J}^+\right) + (\hat{J}^z)^2$$

と表せる。$\hat{J}^{\pm}$ 同士の交換関係

$$\left[\hat{J}^+, \hat{J}^-\right]_{-1} = -2i\left[\hat{J}^x, \hat{J}^y\right]_{-1} = 2\hbar\hat{J}^z$$

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、

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j\rangle = \left[(\hat{J}^z)^2 + \hbar\hat{J}^z + \hat{J}^-\hat{J}^+\right]|j\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j\rangle$$

となることがわかる。$[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}^{\pm}] = 0$ 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 $|m\rangle\,(m = j, j-1, \ldots)$ も $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ 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、

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|-j'\rangle = \left[(\hat{J}^z)^2 - \hbar\hat{J}^z + \hat{J}^+\hat{J}^-\right]|-j'\rangle = \hbar^2 j'(j'+1)|-j'\rangle$$

1)　$[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}^z] = 0$ と同様にして $[\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}^x] = 0, [\hat{\boldsymbol{J}}^2, \hat{J}^y] = 0$ が導かれる。

となることがわかるから、$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ 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、$\hat{\boldsymbol{J}}^2,\hat{J}^z$ の同時固有状態として、

$$\begin{gathered}\hat{\boldsymbol{J}}^2\left|j,m\right\rangle=\hbar^2 j(j+1)\left|j,m\right\rangle,\quad \hat{J}^z\left|j,m\right\rangle=\hbar m\left|j,m\right\rangle,\\ j=0,\,\frac{1}{2},\,1,\,\frac{3}{2},\dots,\quad m=-j,-j+1,\dots,j\end{gathered}\tag{A.1.2}$$

を満たす $\left|j,m\right\rangle$ がとれる。また、$\hat{J}^{\pm}\hat{J}^{\mp}=\hat{\boldsymbol{J}}^2-(\hat{J})^z\pm\hbar\hat{J}^z$ から、次が成り立つ。

$$\hat{J}^{\pm}\left|j,m\right\rangle=\sqrt{\hbar^2[j(j+1)-m(m\pm1)]}\left|j,m\pm1\right\rangle=\sqrt{\hbar^2(j\mp m)(j\pm m+1)}\left|j,m\pm1\right\rangle\tag{A.1.3}$$

A.1.2 角運動量の合成

2 つの系それぞれの角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}_1,\hat{\boldsymbol{J}}_2$ と全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{J}}_1+\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 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、$\hat{\boldsymbol{J}}_1,\hat{\boldsymbol{J}}_2$ に対して (A.1.2) を満たす固有状態 $\left|j_1,m_1\right\rangle,\left|j_2,m_2\right\rangle$ をとり、その合成系の状態として一般に

$$\left|\psi\right\rangle=\sum_{j_1,j_2,m_1,m_2}C_{j_1,j_2,m_1,m_2}\left|j_1,m_1\right\rangle\left|j_2,m_2\right\rangle$$

をとると、$\hat{J}^z\equiv\hat{J}_1^z+\hat{J}_2^z$ を作用させれば、

$$\begin{aligned}\hat{J}^z\left|\psi\right\rangle&=\sum_{j_1,j_2,m_1,m_2}C_{j_1,j_2,m_1,m_2}\hat{J}^z\left|j_1,m_1\right\rangle\left|j_2,m_2\right\rangle\\&=\sum_{j_1,j_2,m_1,m_2}C_{j_1,j_2,m_1,m_2}\hbar\left(m_1+m_2\right)\left|j_1,m_1\right\rangle\left|j_2,m_2\right\rangle\end{aligned}$$

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、

$$\left|j_1+j_2,j_1+j_2\right\rangle=\left|j_1,j_1\right\rangle\left|j_2,j_2\right\rangle$$

で与えられて、これに対して $\hat{\boldsymbol{J}}^2\equiv|\hat{\boldsymbol{J}}_1+\hat{\boldsymbol{J}}_2|^2$ を作用させると、$\hat{J}^{\pm}\equiv\hat{J}_1^{\pm}+\hat{J}_2^{\pm}$ とすると、

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{J}}^2\left|j_1+j_2,j_1+j_2\right\rangle&=\left[(\hat{J}^z)^2+\hbar\hat{J}^z+\hat{J}^-\hat{J}^+\right]\left|j_1,j_1\right\rangle\left|j_2,j_2\right\rangle\\&=\left[\hbar^2(j_1+j_2)^2+\hbar^2\left(j_1+j_2\right)\right]\left|j_1,j_1\right\rangle\left|j_2,j_2\right\rangle\\&=\hbar^2(j_1+j_2)\left(j_1+j_2+1\right)\left|j_1,j_1\right\rangle\left|j_2,j_2\right\rangle\end{aligned}$$

となるため、確かにこの状態は $\hat{\boldsymbol{J}}^2,\hat{J}^z$ の同時固有状態 $\left|j_1+j_2,j_1+j_2\right\rangle$ であることがわかる。よって、

$$\begin{aligned}\left|j_1+j_2,j_1+j_2-1\right\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2\hbar^2(j_1+j_2)}}\left(\hat{J}_1^-+\hat{J}_2^-\right)\left|j_1,j_1\right\rangle\left|j_2,j_2\right\rangle\\&=\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\left|j_1,j_1-1\right\rangle\left|j_2,j_2\right\rangle+\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\left|j_1,j_1\right\rangle\left|j_2,j_2-1\right\rangle\end{aligned}$$

というように、$\hat{\boldsymbol{J}}^2,\hat{J}^z$ 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、

$$\begin{aligned}\left|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\right\rangle=&\,C_{j_1,j_2,j_1-1,j_2}\left|j_1,j_1-1\right\rangle\left|j_2,j_2\right\rangle+C_{j_1-1,j_2,j_1-1,j_2}\left|j_1-1,j_1-1\right\rangle\left|j_2,j_2\right\rangle\\&+C_{j_1,j_2,j_1,j_2-1}\left|j_1,j_1\right\rangle\left|j_2,j_2-1\right\rangle+C_{j_1,j_2-1,j_1,j_2-1}\left|j_1,j_1\right\rangle\left|j_2-1,j_2-1\right\rangle\end{aligned}$$

とおいて $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ 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、

$$\left||j_1 - j_2|, j_1 - j_2\right\rangle = |j_1, j_1\rangle\, |j_2, -j_2\rangle$$

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できない。このようにして得られる

$$|j, m\rangle = \sum_{j_1, j_2, m_1, m_2} C_{j_1, j_2, m_1, m_2}\, |j_1, m_1\rangle\, |j_2, m_2\rangle$$
$$(j = |j_1 - j_2|, \ldots, j_1 + j_2, \quad m = -j, \ldots, j)$$

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 Aharanov-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。

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 $\varphi^a(t,\boldsymbol{x})$ $(a=1,2,\dots,n)$ を自由度にもつ系に対して、作用汎関数

$$S[\varphi]\equiv\int\mathrm{d}t\,L[\varphi,\dot\varphi]\qquad\left(L[\varphi,\dot\varphi]\equiv\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\,\mathscr{L}(\varphi,\nabla\varphi,\dot\varphi)\right)$$

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

$$\begin{aligned}\delta S&\equiv S[\varphi+\delta\varphi]-S[\varphi]\\ &=\int\mathrm{d}t\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\sum_{a=1}^n\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi^a}\delta\varphi^a+\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\nabla\varphi^a)}\cdot\delta(\nabla\varphi^a)+\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot\varphi^a}\delta\dot\varphi^a\right]\\ &=\int\mathrm{d}t\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\sum_{a=1}^n\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi^a}-\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\nabla\varphi^a)}\right)-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot\varphi^a}\right)\right]\delta\varphi^a\end{aligned}$$

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、

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi^a}-\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\nabla\varphi^a)}\right)-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot\varphi^a}\right)=0\quad(a=1,2,\dots,n)\tag{B.1.1}$$

が導かれる。ただし、

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\left(\nabla\varphi^a\right)}=\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\left(\partial_x\varphi^a\right)},\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\left(\partial_y\varphi^a\right)},\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\left(\partial_z\varphi^a\right)}\right)\qquad\left(\partial_i\equiv\frac{\partial}{\partial x_i}\right)$$

である。(B.1.1) を場 $\varphi(t,\boldsymbol{x})$ の Euler-Lagrange 方程式といい、系が必ず満たす運動方程式となる。$\mathscr{L}$ 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)]、それぞれでの汎関数微分 (C.6 節参照) を求めると、

$$\frac{\delta L}{\delta\varphi^a}=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi^a}-\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\nabla\varphi^a)}\right),\quad\frac{\delta L}{\delta\dot\varphi^a}=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot\varphi^a}$$

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。

$$\frac{\delta L}{\delta\varphi^a}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\delta L}{\delta\dot\varphi^a}\right)=0\quad(a=1,2,\dots,n)$$

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。

$\mathscr{L}$ に任意の関数 $\mathscr{J}(\varphi(t,\boldsymbol{x}),t,\boldsymbol{x})$ の時間または空間の 1 階微分 $\partial_\mu \mathscr{F}\ (\mu = t,x,y,z)$ を付け加えても、作用汎関数 $S[\varphi]$ には定数の差しか現れず、最小作用の原理から要請される 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 $\partial_\mu \mathscr{F}$ 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 $\varphi^a(t,\boldsymbol{x})$ に対して、正準共役な運動量の場 $\pi(t,\boldsymbol{x})$ を

$$\pi_a(t,\boldsymbol{x}) \equiv \frac{\delta L}{\delta \dot\varphi^a} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot\varphi^a} \quad (a = 1,2,\ldots,n)$$

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 $\varphi^a(t,\boldsymbol{x})$ ではこれを逆に解いて $\dot\varphi$ を $\pi_a(t,\boldsymbol{x}), \nabla\pi_a(t,\boldsymbol{x})\ (a = 1,2,\ldots,n)$ の関数として表すことができる。このとき、

$$\mathscr{H}(\varphi,\pi,\nabla\pi,\nabla\varphi) \equiv \sum_{a=1}^{n} \pi_a \dot\varphi^a(\pi,\nabla\pi) - \mathscr{L}(\varphi,\nabla\varphi,\dot\varphi(\pi,\nabla\pi)) \tag{B.1.2}$$

に対して、次が成り立つ。

$$\dot\varphi^a(t,\boldsymbol{x}) = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \pi_a} - \nabla\cdot\left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial(\nabla\pi_a)}\right), \qquad \dot\pi_a(t,\boldsymbol{x}) = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \varphi^a} + \nabla\cdot\left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial(\nabla\varphi^a)}\right) \tag{B.1.3}$$

(B.1.2) を Legendre 変換といい、この変換で導入された $\mathscr{H}(\varphi,\pi,\nabla\varphi,\nabla\pi)$ はハミルトニアン密度と呼ばれ3)、(B.1.3) 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

$$H[\varphi,\pi] \equiv \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\, \mathscr{H}(\varphi,\pi,\nabla\varphi,\nabla\pi) = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \sum_{a=1}^{n} \pi_a \dot\varphi^a(\pi,\nabla\pi) - L[\varphi,\dot\varphi(\pi,\nabla\pi)]$$

で与えられ、この汎関数微分を用いると正準方程式 (B.1.3) は次のように表せる。

$$\dot\varphi^a(t,\boldsymbol{x}) = \frac{\delta H}{\delta \pi_a}, \quad \dot\pi_a(t,\boldsymbol{x}) = -\frac{\delta H}{\delta \varphi^a}$$

B.1.3 複素場の解析力学

複素数 1 成分の場 $\psi(t,\boldsymbol{x}) = \psi^1(t,\boldsymbol{x}) + i\psi^2(t,\boldsymbol{x})$ を自由度にもつ系は、実数 2 成分の場 (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

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \psi^1} - \nabla\cdot\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\nabla\psi^1)}\right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot\psi^1}\right) = 0, \quad \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \psi^2} - \nabla\cdot\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\nabla\psi^2)}\right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot\psi^2}\right) = 0 \tag{B.1.4}$$

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、

$$\frac{\partial}{\partial \bar\psi} = \frac{\partial \psi^1}{\partial \bar\psi}\frac{\partial}{\partial \psi^1} + \frac{\partial \psi^2}{\partial \bar\psi}\frac{\partial}{\partial \psi^2} = \frac{\partial}{\partial \psi^1} + i\frac{\partial}{\partial \psi^2}$$
$$\frac{\partial}{\partial(\nabla\bar\psi)} = \frac{\partial}{\partial(\nabla\psi^1)} + i\frac{\partial}{\partial(\nabla\psi^2)}, \quad \frac{\partial}{\partial \dot{\bar\psi}} = \frac{\partial}{\partial \dot\psi^1} + i\frac{\partial}{\partial \dot\psi^2}$$

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。

がまた成り立つ。これらの関係から、(B.1.4) と等価な運動方程式として

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi}-\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\nabla\psi)}\right)-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}\right)=0,\quad \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\bar{\psi}}-\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\nabla\bar{\psi})}\right)-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\bar{\psi}}}\right)=0 \tag{B.1.5}$$

が得られる。最小作用の原理から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、、

$$\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi}\right)^*=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi^1}+i\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\psi^2}=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\bar{\psi}}$$

が導かれる。同様にして

$$\left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\nabla\psi)}\right)^*=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\nabla\bar{\psi})},\quad \left(\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}\right)^*=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\bar{\psi}}}$$

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

$$\pi_1(t,\boldsymbol{x})\equiv\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}^1},\quad \pi_2(t,\boldsymbol{x})\equiv\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}^2}$$

を用いて表される正準方程式

$$\begin{aligned}
\dot{\psi}^1(t,\boldsymbol{x})&=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\pi_1}-\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\pi_1)}\right), &\quad \dot{\pi}_1(t,\boldsymbol{x})&=-\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\psi^1}+\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\psi^1)}\right)\\
\dot{\psi}^2(t,\boldsymbol{x})&=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\pi_2}-\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\pi_1)}\right), &\quad \dot{\pi}_2(t,\boldsymbol{x})&=-\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\psi^2}+\nabla\cdot\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\psi^2)}\right)
\end{aligned}$$

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と、

$$\begin{aligned}
\pi(t,\boldsymbol{x})&\equiv\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}}=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}^1}-i\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}^2}=\pi_1(t,\boldsymbol{x})-i\pi_2(t,\boldsymbol{x})\\
\bar{\pi}(t,\boldsymbol{x})&\equiv\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\bar{\psi}}}=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}^1}+i\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\psi}^2}=\pi_1(t,\boldsymbol{x})+i\pi_2(t,\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

であるために[5)]、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\pi}&=\frac{\partial}{\partial\pi_1}+i\frac{\partial}{\partial\pi_2}, &\quad \frac{\partial}{\partial(\nabla\pi)}&=\frac{\partial}{\partial\left(\nabla\pi_1\right)}+i\frac{\partial}{\partial\left(\nabla\pi_2\right)}\\
\frac{\partial}{\partial\bar{\pi}}&=\frac{\partial}{\partial\pi_1}-i\frac{\partial}{\partial\pi_2}, &\quad \frac{\partial}{\partial(\nabla\bar{\pi})}&=\frac{\partial}{\partial\left(\nabla\pi_1\right)}-i\frac{\partial}{\partial\left(\nabla\pi_2\right)}
\end{aligned}$$

となるため、

$$\begin{cases}
\dot{\psi}(t,\boldsymbol{x})=\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial\bar{\pi}}-\nabla\cdot\left(\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\bar{\pi})}\right), &\quad \dot{\pi}(t,\boldsymbol{x})=-\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial\bar{\psi}}+\nabla\cdot\left(\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\bar{\psi})}\right)\\
\dot{\bar{\psi}}(t,\boldsymbol{x})=\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial\pi}-\nabla\cdot\left(\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\pi)}\right), &\quad \dot{\bar{\pi}}(t,\boldsymbol{x})=-\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial\psi}+\nabla\cdot\left(\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\psi)}\right)
\end{cases} \tag{B.1.6}$$

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、

$$\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\psi}\right)^*=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\psi^1}-i\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\psi^2}=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\bar{\psi}},\quad \left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\bar{\pi}}\right)^*=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\pi_1}-i\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\pi_2}=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\pi}$$

同様にして、

$$\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\psi)}\right)^*=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\bar{\psi})},\quad \left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\bar{\pi}}\right)^*=\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial(\nabla\bar{\pi})}$$

---

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 2 次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。なお、ψ が Grassmann 数であった場合には ψ と $\bar{\psi}$ の入れ替えで L の符号が反転することになるが、EL 方程式は定数倍してもよいので問題ない。

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。

が導かれる。よって、(B.1.6) 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。加えて、正準方程式 (B.1.6) と EL 方程式 (B.1.5) は等価であるが、

$$\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \psi} = -\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \psi}, \quad \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial (\nabla \psi)} = -\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial (\nabla \psi)}$$

から、

$$\dot{\pi} = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \bar{\psi}} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \bar{\psi}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} \right) = 0$$

であることは容易にわかる。よって、正準方程式側で残る 1 式

$$\dot{\bar{\psi}} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \pi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial (\nabla \pi)} \right)$$

は、本来 2 本連立する EL 方程式が互いに複素共役の関係となって等価だったように、正準方程式側のもう一方の式とも等価であることになる。符号の差異を考えるとこれは $\pi = i\alpha\bar{\psi}$ であることを示している (α は実定数、ψ の規格化条件で決まる)。

B.1.4 Noether カレント

ある座標変換 $(t, \boldsymbol{x}) \to (t', \boldsymbol{x}')$ および場の変換 $\varphi(t, \boldsymbol{x}) \to \varphi'(t', \boldsymbol{x}')$ に対して系の作用汎関数が不変に保たれるとき、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 $\epsilon \ll 1$ を用いた無限小変換

$$x_i \longrightarrow x'_i(\epsilon) = x_i + \varepsilon X_i(x), \qquad \varphi(x_i) \longrightarrow \varphi(x'_i) + \varepsilon \delta\varphi(x'_i)$$

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、この変換が対称性の性質を決めることになる。この変換は同時刻・同地点での φ の変換として

$$\varphi \longrightarrow \varphi + \varepsilon \left(\delta\varphi - \sum_i X_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right)$$

というように表し直せるので、この表式を用いて変換前後の作用の差 δS を計算すると、

$$\delta S = \varepsilon \int \mathrm{d}t \mathrm{d}^3 \boldsymbol{x} \sum_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i} \left[\sum_a \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \left(\delta\varphi^a - \sum_j X_j \frac{\partial \varphi^a}{\partial x_j} \right) + \mathscr{L} X_i \right]$$

で与えられる。これが任意の ε について 0 となることから、

$$\mathscr{J}_i(t, \boldsymbol{x}) \equiv \sum_j \left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \partial_j \varphi^a - \delta_{ij} \mathscr{L} \right] X_j - \sum_a \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \delta\varphi^a$$

について、

$$\sum_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i} \mathscr{J}_i = 0$$

という連続の方程式が成り立つことがわかる。$\mathscr{J}_i(t, \boldsymbol{x})$ を Noether カレントという。

B.2 相対論的な場とその非相対論極限

相対論的な系とは、4 次元時空 $x^\mu = (ct, x, y, z)$ に対して

$$\eta_{\rho\sigma} \Lambda^\rho{}_\mu \Lambda^\sigma{}_\nu = \eta_{\mu\nu} \qquad (\eta = \mathrm{diag}(-1, 1, 1, 1))$$

で定まる $(1,1)$-階テンソル $\Lambda^\mu{}_\nu$ で与えられる変換 $x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ に対して対称性をもつような系である。ここで、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

$$T^{\mu_1\cdots\mu_{i-1}}{}_{\mu_i}{}^{\mu_{i+1}\cdots\mu_n}{}_{\nu_1\cdots\nu_n} \equiv \eta_{\mu_i\rho} T^{\mu_1,\cdots\mu_{i-1}\rho\mu_{i+1}\mu_n}{}_{\nu_1\cdots\nu_m},$$
$$T^{\mu_1\cdots\mu_n}{}_{\nu_1\cdots\nu_{i-1}}{}^{\nu_i}{}_{\nu_{i+1}\cdots\nu_n} \equiv \eta^{\nu_i\rho} T^{\mu_1,\cdots\mu_n}{}_{\nu_1\cdots\nu_{i-i}\rho\nu_{i+1}\nu_m}$$

となるように定義されている。

$$x^\mu x_\mu = \eta_{\mu\nu} x^\mu x^\nu = -(ct)^2 + x^2 + y^2 + z^2$$

を必ず保存するこの変換は Lorentz 変換と呼ばれ[6]、空間回転に加えて Lorentz ブースト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。例えば、

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \begin{pmatrix} 1 & -\beta & & \\ -\beta & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \qquad \left(\beta = \frac{v}{c}\right)$$

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 Galilei 対称性を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。本節では Lorentz 対称性を満たすことが知られている系を 3 つ挙げる。

非相対論極限で考えていた 1 章では、Fermi/Bose 粒子のどちらの多体系であるかによらず、系のハミルトニアンが

$$\mathscr{H} = \sum_{\sigma=-s}^{s} \bar{\Psi}_\sigma(t,\boldsymbol{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x})\right] \Psi_\sigma(t,\boldsymbol{x})$$

で与えられることをみた。本節ではこのことが相対論的な場の古典論において非相対論極限をとることで (より正確な形で) 導出されることも見る。

B.2.1 Klein-Gordon 場

複素数 1 成分の場 $\phi(x^\mu)$ で、Lorentz 変換 Λ^μ_ν に対して $\Lambda_0\phi(x^\mu) = \phi\big((\Lambda^{-1})^\mu{}_\nu x^\nu\big)$ と変換されるものを考える。次の Klein-Gordon 方程式は Lorentz 対称性を満たす[7]。

$$\left[\partial^\mu\partial_\mu - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\phi(x^\mu) = 0 \qquad \left(\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu}\right)$$

場 $\phi(x^\mu)$ の次元が (長さ)$^{-3/2}$ であるとき、この方程式を導くラグランジアンとして、

$$\mathscr{L} = \frac{(c\hbar)^2}{2}\left[(\partial^\mu\phi)\left(\partial_\mu\bar{\phi}\right) - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2|\phi|^2\right]$$

をとることができる。ハミルトニアンは、

$$\mathscr{H} = \frac{(c\hbar)^2}{2}\left[\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2|\phi|^2 - \frac{1}{c^2}\left|\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|^2 - |\nabla\phi|^2\right]$$

6) 一般には SO(1, 3) 変換と呼ばれる。

7) $x'^\mu \equiv \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ について ∂_μ の変換性は次のように示される：

$$\eta^{\mu\nu}\eta_{\nu\rho} = \delta^\mu{}_\rho = \begin{cases} 1 & (\mu = \rho) \\ 0 & (\mu \neq \rho) \end{cases}, \qquad \Lambda_\rho{}^\mu \Lambda^\rho{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu$$

$$\therefore\ x^\mu = \Lambda_\nu{}^\mu x'^\nu, \quad \partial'_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x'^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\frac{\partial}{\partial x^\nu} = \Lambda_\mu{}^\nu\partial_\nu$$

KL 方程式は、

$$\left[\frac{i}{c}\frac{\partial}{\partial t}+\sqrt{\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2-\nabla^2}\right]\left[\frac{i}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\sqrt{\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2-\nabla^2}\right]\phi=0$$

と因数分解ができて、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi=\pm mc^2\left[1-\left(\frac{\hbar}{mc}\right)\nabla^2\right]^{1/2}\phi$$

も満たすことがわかる (複号はどちらか一方のみ成立すればよい)。$|\nabla\phi|\ll(mc/\hbar)\phi$ ならこの式は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi=\pm\left[mc^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right]\phi$$

となり、複号が正の場合は静止エネルギー mc^2 を除いて自由粒子の Schrödinger 方程式に帰着する。また、複号が負の場合は負のエネルギーもつ反粒子の解を与える方程式になっている。

B.2.2 Dirac 場

B.2.3 電磁場

B.3 ゲージ理論

B.4 物質中の電磁場

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。

付録 C　数学の補足

定式化に伴う純粋数学的な事項について、必要最小限をまとめて以下に示す。

C.1　複素解析の基礎

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。

$$a_n=\frac{1}{L}\int_{-L}^{L}f(x)\cos\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x,\qquad b_n=\frac{1}{L}\int_{0}^{L}f(x)\sin\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x$$

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。

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}c_n e^{in\pi x/L},\qquad c_n=\frac{1}{2L}\int_{-L}^{L}f(x)e^{-in\pi x/L}\mathrm{d}x \tag{C.2.1}$$

C.2.2　Fourier 変換

(C.2.1) について、$L\to\infty$ として $n\pi/L$ を連続変数 k にする極限操作を考えると、

$$\tilde{c}_n=\int_{-L}^{L}f(x)e^{-in\pi x/L}\mathrm{d}x,\qquad f(x)=\frac{1}{2L}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\tilde{c}_n e^{in\pi x/L}$$

であるから、連続極限において

$$\frac{1}{L}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\quad\longrightarrow\quad\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k$$

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、

$$\tilde{f}(k)=\int_{-\infty}^{\infty}f(x)e^{-ikx}\mathrm{d}x,\qquad f(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{f}(k)e^{-ikx}\mathrm{d}k$$

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。

$$f(a)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta(x-a)\mathrm{d}x$$

特に、$f(x)=e^{-ikx}$, $a=0$ であるときには、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)e^{-ikx}\mathrm{d}x=1$$

である。これを $\delta(x)$ の Fourier 変換とみなすと、その Fouier 逆変換から、

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\mathrm{d}k$$

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、

$$\begin{aligned}
\sum_{l=1}^{N} U_{ln}^* U_{lm} &= \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N} e^{i\frac{2\pi l}{N}(n-m)} \\
&= \begin{cases} \dfrac{1}{N}\dfrac{1-e^{2\pi i(n-m)}}{1-e^{i\frac{2\pi}{N}(n-m)}} & (n-m\neq 0) \\ 1 & (n-m=0) \end{cases} \\
&= \delta_{nm}
\end{aligned}$$

となるため、$U^\dagger U = I$ である。

N 次元複素ベクトル $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, \ldots, f_N) \in \mathbb{C}^N$ に対して、$\tilde{\boldsymbol{f}} \equiv U\boldsymbol{f}$ の各成分は

$$\tilde{f}_n = \sum_{m=1}^{N} U_{nm} f_m = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{m=1}^{N} f_l e^{-i(2\pi nm/N)} \tag{C.2.2}$$

で与えられる。また、U がユニタリ演算子であることから $\boldsymbol{f} = U^\dagger \tilde{\boldsymbol{f}}$ であるので、

$$f_m = \sum_{n=1}^{N} U_{mn}^* \tilde{f}_n = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} \tilde{f}_l e^{i(2\pi mn/N)} \tag{C.2.3}$$

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 $f_m \to f(x)$ とする極限を考えると、和は積分に置き換わり、

$$\frac{\tilde{f}_n}{\sqrt{N}} = \frac{1}{N}\sum_{m=1}^{N} f_m e^{-i(2\pi nm/N)} \longrightarrow \frac{1}{2L}\int_0^{2L} f(x)e^{-in\pi x/L}\mathrm{d}x$$

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 $n = 1, 2, \ldots, N$ 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、

$$f_m \to f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{f}_n}{\sqrt{N}} e^{in\pi x/L}$$

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 $L \to \infty$ 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。

$$f(t) \equiv e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} \equiv \left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(t\hat{A}\right)^n\right]\hat{B}\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-t\hat{A}\right)^n\right]$$

t に対して微分すると、

$$f^{(1)}(t) = e^{t\hat{A}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]e^{-t\hat{A}}, \quad f^{(2)}(t) = e^{t\hat{A}}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]e^{-t\hat{A}}, \quad f^{(3)}(t) = e^{t\hat{A}}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]\right]e^{-t\hat{A}}, \ldots$$

となるため、$f(t)$ の $t=0$ 周りでの Taylor 展開を考えると、

$$e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} = \hat{B} + t\left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{t}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \frac{t^3}{3!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]\right] + \cdots$$

となることがわかる。この展開で、特に $t=1$ としたものを Baker-Campbell-Hausdorff の公式という。

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] R.P. Feynman. Statistical Mechanics: A Set Of Lectures. CRC Press, 1998.

[2] P. Phillips. Advanced Solid State Physics. 2nd ed., Cambridge University Press, 2012.

[3] 阿部龍蔵. 統計力学 (第 2 版). 東京大学出版, 1992.

[4] 永長直人. 物性論における場の量子論. 岩波書店, 2014.

[5] 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.

[6] 江藤幹雄. 量子力学 I . 丸善出版, 2013.

[7] 田崎晴明. 統計力学 I , II . 培風館, 2008.

[8] 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.

[9] 井田大輔. 現代解析力学入門. 朝倉書店, 2020.

[10] 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：`https://as2.c.u-tokyo.ac.jp/lecture_note/noneq2017/` (2024-04-08 参照)

[11] 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：`https://as2.c.u-tokyo.ac.jp/lecture_note/qsm2016/` (2024-04-08 参照)