

多体系の量子力学

LouiG*

2024/06/28

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

目次

第 I 部	量子多体系の一般的な取扱い	5
第 1 章	量子多体系の記述	6
1.1	多体量子状態	6
1.2	生成消滅演算子	8
1.3	量子多体系の力学	10
1.3.1	多粒子系の 1 体演算子	10
1.3.2	量子状態の変換則 I : 連続変換	12
1.3.3	量子多体系のダイナミクス	14
1.3.4	2 体演算子	16
1.3.5	スピン	17
1.3.6	量子状態の変換則 II : 離散変換	19
1.4	熱力学極限での多体量子状態	19
1.4.1	正準典型性と熱力学ポテンシャルの微視的表式	19
1.4.2	アンサンブル形式による熱平衡状態の表現	20
1.4.3	密度行列によるアンサンブル形式の表現	22
1.4.4	同種粒子系の統計性	25
1.4.5	熱的純粋量子状態による熱平衡状態の表現	26
1.4.6	熱ゆらぎと非平衡過程	26
1.5	経路積分	26
1.5.1	1 粒子系の経路積分 (導入)	26
1.5.2	多粒子系の経路積分	30
1.5.3	スピン系の経路積分	35
第 2 章	量子多体系の解析手法	36
2.1	Rayleigh-Schrödinger の摂動論	36
2.2	時間に依存する摂動論	37
2.2.1	相互作用描像	37
2.2.2	Fermi の黄金律	38
2.2.3	調和摂動	40
2.3	線形応答理論	41
2.3.1	応答関数	41
2.3.2	量子系の線形応答と Green-久保の公式	42
2.3.3	Onsager の相反定理	44
2.4	位相幾何・多様体論的な解析手法	44
2.4.1	Chern の定理	44
2.4.2	Berry 接続・曲率	44

2.5	Green 関数の方法	47
2.5.1	実時間 Green 関数	47
2.5.2	相関関数のスペクトル表示	52
2.5.3	因果 Green 関数による摂動展開	55
2.5.4	温度 Green 関数：虚時間形式	63
2.5.5	Keldysh の Green 関数	68
2.6	スケーリング理論・くりこみ群	68
2.7	Floquet 理論	68
2.8	行列積状態・テンソルネットワーク状態	68
第 II 部	量子多体系各論 I：電子多体系	69
第 3 章	Fermi 流体論	70
第 4 章	固体結晶中の電子多体系	71
4.1	固体電子の 1 粒子状態とバンド描像	71
4.1.1	Bloch 状態	71
4.1.2	Wannier 状態	75
4.1.3	電子間の Coulomb 相互作用	77
第 5 章	電子-格子相互作用	78
第 6 章	電子系の光学応答	79
第 III 部	量子多体系各論 II：スピン多体系	81
付録 A	1 粒子系の量子力学	82
A.1	角運動量代数	82
A.1.1	一般化角運動量の代数	82
A.1.2	角運動量の合成	83
A.2	Bloch の定理	84
A.3	Aharonov-Bohm 効果	84
付録 B	場の古典論	85
B.1	場の解析力学	85
B.1.1	Lagrange 形式	85
B.1.2	Hamilton 形式	86
B.1.3	複素場の解析力学	86
B.1.4	Noether カレント	88
B.2	相対論的な場	91
B.2.1	Dirac 場	91
B.2.2	電磁場	91
B.3	ゲージ理論	91
B.4	物質中の電磁場	92
B.5	Ginzburg-Landau 理論	92
付録 C	数学の補足	93
C.1	複素解析の基礎	93
C.2	Fourier 変換	93

C.2.1	Fourier 級数展開	93
C.2.2	Fourier 変換	93
C.2.3	離散 Fourier 変換	94
C.3	Baker-Campbell-Hausdorff の公式・Trotter 積公式	95
C.4	多様体・トポロジーの基礎	95
C.5	キュムラント展開	95
C.6	特異値分解	95
C.7	汎関数解析	95

第I部 量子多体系の一般的な取扱い

第 1 章 量子多体系の記述

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

1.1 多体量子状態

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

というように行列式で表される。また、同様にしてケット-ブラの積も

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

で与えられることがわかる。

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

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

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

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

となることから、完全性関係

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

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

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

となることが導かれる。

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

1 粒子系の量子力学において状態は Hilbert 空間 \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。多体量子状態が張る空間はこれら $\mathfrak{H}^{\otimes N}$ から構成される線形空間で、Fock 空間と呼ばれる。

1.2 生成消滅演算子

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

となることから、

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

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

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

および

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

より、

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

となる⁴⁾。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

で与えられることもわかる。

1.3 量子多体系の力学

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

1.3.1 多粒子系の 1 体演算子

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

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

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

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

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

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

であるので、このように構成される 1 体演算子はすべて粒子数演算子 \hat{N} と可換になる。

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

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

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

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

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

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

に基づき、規格化条件

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

により定まる。また、 p は系の周期境界条件⁵⁾により

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

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

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

が成り立つので、 \hat{p} の作用が

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

と表され、完全性関係 (1.3.1) により \hat{p} 自体は

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

と表されることがわかる⁶⁾。また、同じく完全性関係から

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

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

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

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

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

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。

6) 3 つ目の等号では部分積分を行っている。このとき生じた境界項は周期境界条件により境界面上で向かい合う \mathbf{x} 同士の寄与が打ち消し合って 0 になる。以降の $\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})$ の積分でも同様の理由で部分積分の境界項は 0 になる。

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

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

と表せるとわかる。

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

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

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

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

となる。ただし、これは相互作用のない多粒子系のハミルトニアンである。

1.3.2 量子状態の変換則Ⅰ：連続変換

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

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

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

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

で与えられるべきと考えられる。

空間並進・回転変換

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

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

であるので、BCH 公式 (C.3 節参照) より、

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

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

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

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

で定めると、

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

であることから、

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

と交換関係が計算されるため、BCH 公式 (C.3 節参照) より、

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

とわかり、確かに z 軸周りでの回転変換であることが確かめられる。

場の位相変換：大域的ゲージ対称性と粒子数保存則

1 粒子系の量子力学では考えられなかった変換として、粒子数演算子

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

を生成子にもつユニタリ変換を考えてみると、

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

であることから、BCH 公式 (C.3 節参照) より、

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

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

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

の保存則を導くことに対応している (B.1.4 節参照)。複素場の位相自由度はゲージ自由度とも呼ばれ、空間的に一様なゲージ変換に対する対称性を大域的ゲージ対称性という。

1.3.3 量子多体系のダイナミクス

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

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

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

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

および Heisenberg 描像の演算子

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

に対する Heisenberg 方程式

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

が多体系においても成り立つことが直ちに導かれる。

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x}) = [\hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x}), \hat{H}_H(t)]$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x}' \hat{U}(t) \left[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \nabla'^2 \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \right] \hat{U}^\dagger(t) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x}' \hat{U}(t) \left(\left[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \right]_\zeta \nabla'^2 \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \right. \\
&\quad \left. + \zeta \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \nabla'^2 \left[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \right]_{-\zeta} \right) \hat{U}^\dagger(t) \\
&\quad \left(\because \left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C} \right] = \left[\hat{A}, \hat{B} \right]_{-\zeta} \hat{C} + \zeta \hat{B} \left[\hat{A}, \hat{C} \right]_{-\zeta} \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_V d^3\mathbf{x}' \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla'^2 \hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x}') \\
&\quad \left(\because \left[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') \right]_{-\zeta} = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \left[\hat{\Psi}(\mathbf{x}), \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \right]_{-\zeta} = 0 \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x}) \tag{1.3.7}
\end{aligned}$$

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

一方、(1.3.7) は $\hat{\Psi}_H(t, \mathbf{x})$ が対応する物理量 $\Psi(t, \mathbf{x})$ について

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(t, \mathbf{x}) \tag{1.3.8}$$

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

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

が古典論でのハミルトニアンになると考えられる。複素場の性質として $\Psi(t, \mathbf{x})$ の共役運動量の場合は $i\bar{\Psi}(t, \mathbf{x})$ の定数倍となることが知られており (B.1.3 項参照)、実際 (1.3.8) は $\Psi(t, \mathbf{x})$ と $i\hbar\bar{\Psi}(t, \mathbf{x})$ の正準方程式となっている。また、 $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ の周期境界条件を $\Psi(t, \mathbf{x})$ も引き継ぐため、このハミルトニアンは

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

と表し直せる。ラグランジアンは

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

で与えられ⁷⁾、この Euler-Lagrange 方程式はまた (1.3.8) を与える。なお、後述するように Fermi 粒子系では $\hat{\Psi}(t, \mathbf{x})$ は積に対して反可換な Grassmann 数を値にとるため、以上の表式はこの積の順でのみ正しい。

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

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

1.3.4 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

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

となることに注意する (1.1 節参照)。ここから2粒子系での2体演算子は

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

と表されると考えられるので、一般の多粒子系については、

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

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

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

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

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

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

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

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

となる。

このような2体相互作用を含む系のハミルトニアン

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

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

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

というように、非線形な項が現れることがわかる。

1.3.5 スピン

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

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

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

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

1 粒子の運動状態 i に加えて $\sigma = -s, -s + 1, \dots, s$ で 1 粒子のスピン準位の状態⁸⁾を指定すると、対応した生成消滅演算子 $\hat{a}_{i,\sigma}, \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger$ をとることができる。すると運動状態 i の粒子のスピン演算子を、1 体演算子として

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

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

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

で定義される⁹⁾。よって、 \hat{S}_i^x, \hat{S}_i^y は、

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

と表されることがわかる。また、 s は固有であるから、

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

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。

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。(1.2.1) より、

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

となることから、

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

同様にして、

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

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

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

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

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

とわかるので、確かにスピン自由度に対する z 軸周りの回転変換である。

生成消滅演算子に対してスピン自由度の回転変換を行うと、

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

より、

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

というように、生成消滅するスピン準位 σ に応じた位相変換が現れる。注目すべきは、 σ が半奇数値しかとらない Fermi 粒子が奇数個存在する系では $\Delta\varphi = 2\pi$ 、すなわち系を 1 回転させると、スピン自由度自体は元通りに戻るはずなのに量子状態には必ず $e^{\pm i\pi} = -1$ の位相差が現れることである。これは同じ角運動量でも軌道角運動量を生成子とす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

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。

典型性を満たす系には、固有状態の数 $W_{V,N}(E)$ に対して

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

で系の熱力学ポテンシャルであるエントロピー $S(E, V, N)$ が与えられ (k_B は Boltzmann 定数)¹⁰⁾、表す熱平衡状態に結び付けられるとするのが Boltzmann の原理である。

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

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

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、

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

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

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

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。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

という等式が得られて、カノニカル分布のときと同様にこの右辺は

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

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

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

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

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。

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。

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

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

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

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

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

$$S_{\text{tot}}(U, V_{\text{tot}}, N_{\text{tot}}) = k_B \ln W_{\text{tot}}(U)$$

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

$$S_R(U - E, V_R, N_R) = k_B \ln W_R(U - E)$$

で与えられるので、この不等式はほとんどの E で、各系の固有状態数に対して

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

が成り立ち、ある E でのみ

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

が成り立つことを示している。すなわち、

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

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

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

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、

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

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 密度行列によるアンサンブル形式の表現

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

が成り立つため、対応して一般の $\hat{\rho}$ には

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

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

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

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

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

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

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

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

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

で記述できるとわかる。この方程式は von Neumann 方程式と呼ばれる¹⁴⁾。

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

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

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

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

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。

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

カノニカル分布の密度行列による表現は、

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

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

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

で与えられる。実際、

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

および

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

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

グランドカノニカル分布に対応する密度行列は、

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

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

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

で与えられる。実際、

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

および

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

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

1.3 節の構成法で導入したハミルトニアン演算子 \hat{H} に対し、化学ポテンシャルの項を差し引いた $\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu \hat{N}$ は、 $[\hat{H}, \hat{N}] = 0$ から \hat{H}, \hat{N} との同時固有状態をとるため、 $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ の代わりに $e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}$ を時間発展演算子としてもダイナミクスの記述は変わらないことがわかる。以降、粒子系を扱う際には $\mathcal{H} = H - \mu N$ をハミルトニアンとして扱い、ハミルトニアン密度 \mathcal{H} からは化学ポテンシャルの項として $\mu \bar{\Psi}(t, \mathbf{x}) \Psi(t, \mathbf{x})$ が初めから差し引かれているものとする。

1.4.4 同種粒子系の統計性

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

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

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

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

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

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

も、Bose 粒子系か Fermi 粒子系かによって

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

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、 $\epsilon_F = \mu$ を Fermi エネルギーという。

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

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

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

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

というように 1 粒子基底状態をとる粒子数が巨視的量となるような状態が実現する。状態密度 $D(\epsilon)$ は $(\epsilon - \epsilon_0)^\alpha$ ($\alpha > 0$) の形で表され¹⁵⁾、 $\epsilon = \epsilon_0$ 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 経路積分

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

1.5.1 1 粒子系の経路積分 (導入)

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

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

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

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

15) 3 次元系の場合。2 次元以下の系では $\alpha \leq 0$ となり、積分が収束しない (C.1 節参照)。

を用いることで、

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

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

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

となるので、

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

と表されるようになる。 V が十分大きいとして、

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

と連続化すると、次のようにも表せる。

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

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

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

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

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

と表される。

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

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

というように Gauss 積分として実行できる。その結果、

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

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

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

というふうに作用 S を用いて遷移確率を表現できるようになる。ここで、

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

である¹⁶⁾。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 $\mathbf{x}(t)$ 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。

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、 $|\mathbf{x}\rangle$ の完全性関係 (1.3.1) から

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

と表せることから、対角成分を $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}$ から $\mathbf{x}_N = \mathbf{x}$ への周回路上の径路積分として表せ、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、 $|\mathbf{x}\rangle$ と $|\mathbf{p}\rangle$ の完全性関係 (1.3.1), (1.5.1) を用いた計算を行うと、

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

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

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

16) 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。

となるので、分配関数 Z_V は

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

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

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

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

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

と径路積分で表されることがわかる。積分範囲は、周期境界条件 $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\beta)$ を満たす任意の径路である。

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

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

というように Gauss 積分として実行できて、その結果、

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

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

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

という形になる。ここで、

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

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

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

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

1.5.2 多粒子系の経路積分

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

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

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

Bose 粒子系の場合

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

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

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

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

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

と $|\alpha\rangle$ が展開できる。すると、

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

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

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

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

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

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

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

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

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

をこの $|\alpha\rangle$ で表すことを考えると、

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

に対して、複素平面全体での積分公式

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

が成り立つ (付録 C.1 節参照) ため、

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

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

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

で与えられることを注意しておく。さて、大分配関数 Ξ_V の計算に移ると、

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

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

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

となるので、

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

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

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

と表すことにすると、

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

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

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

と変形できることもわかる。よって Ξ_V の径路積分はさらに簡略化できて、

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

となる。

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

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

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

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

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

Fermi 粒子系の場合

しかし上の議論が成り立つのは、 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ が交換する Bose 粒子系のときのみである。 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ が反交換する Fermi 粒子系での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¹⁷⁾を考える。このとき系のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ は反交換関係 $\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = \hat{I}$ を満たす 1 組の生成消滅演算子 \hat{a}, \hat{a}^\dagger の関数 $\mathcal{H}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ で与えられる。

先ほどと同様にコヒーレント状態

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

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

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

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

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

17) 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)。

となって、 $c_1 = \alpha$ とともに $\alpha^2 = 0$ という結果が導かれる。これは反交換する消滅演算子の固有値として α が自身との積について反交換する数であるためである。このような反交換な積をもつ数は Grassmann 数と呼ばれる。状態ベクトルと α の積は反交換しないとする¹⁸⁾が、 $\bar{\alpha}$ と \hat{a}, \hat{a}^\dagger の積は必ず反交換しなければならない¹⁹⁾。よって、

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

となることに注意する。コヒーレント状態のブラベクトル

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

の展開表式は、ケットベクトルと同様にして次のように求まる。

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

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

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

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、

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

で与えられることになる。

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

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

とわかり、これに対して複素平面全体での積分

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

が成り立つことから (付録 C.1 節参照)、

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

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

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

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、トレース演算が

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

となることに注意すると、

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

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

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

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

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

と表すことにすると、

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

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

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

と変形できることもわかる。よって Ξ_V の経路積分はさらに簡略化できて、

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

となる。

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

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

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

1.5.3 スピン系の経路積分

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 $\hat{H}(\lambda)$ の固有状態およびエネルギー固有値を展開する。すなわち、 $\hat{H}(\lambda)$ の固有値方程式 $\hat{H}(\lambda)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ について、

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

と λ のべきで展開されるとして、

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

の両辺の λ の同次項の係数を比較して各展開係数を求める。

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

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

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

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

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

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

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

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

を得る (C は適当な複素数)。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。 $|n_1\rangle, |n_2\rangle, \dots$ が全てエネルギー固有値 E_n で縮退していて、また全て直交しているとする、 λ の 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, \dots) に対応した $|\psi^{(0)}\rangle$ ごとに、系は縮退が解ける。

2.2 時間に依存する摂動論

この節では、相互作用描像に移ることで、時間変化する系に対して摂動論が展開できることを説明する。

2.2.1 相互作用描像

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

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

この時間発展の描像は相互作用描像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、

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

より、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \quad (2.2.1)$$

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。

が従う。Heisenberg 方程式は次で与えられる。

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

Schrödinger 方程式 (2.2.1) の解は、

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

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

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

で与えられるから、この級数展開を打ち切ることによって摂動論が導かれる。

2.2.2 Fermi の黄金律

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

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

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

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

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

$$P_{n \rightarrow \{j\}}(t) \simeq \int \frac{4|V_{jn}(E_j)|^2}{(E_j - E_n)^2} \sin^2 \frac{(E_j - E_n)t}{2\hbar} \rho(E_j) dE_j \quad (2.2.2)$$

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、 $\alpha \rightarrow \infty$ 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、

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

となる (Jordan の補題と留数定理を用いた) から、 $\alpha \rightarrow \infty$ 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 $P_{n \rightarrow \{j\}}(t)$ には $\alpha = t$ とした $f\left(\frac{E_j - E_n}{2\hbar}\right)$ が含まれているから、十分大きい t では

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

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

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

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

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

は Fermi の黄金律と呼ばれる。

実際には $t \rightarrow \infty$ とすることは不可能であるため、Fermi の黄金律 (2.2.3) 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。 α を十分に大きくして $f(x) \sim \pi\alpha\delta(x)$ とみなせるようになって、 $f(0) = \alpha^2$ より実際には

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

のピーク幅が $x = 0$ 周りにある。よって、Fermi の黄金律 (2.2.3) 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

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

のピーク幅が存在している。

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。

2.2.3 調和摂動

摂動項 $\hat{V}(t)$ が

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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、

$$\begin{aligned} & (\text{外力 } X_1 \text{ に対し応答 } Y_1 \text{ が得られる}) \wedge (\text{外力 } X_2 \text{ に対し応答 } Y_2 \text{ が得られる}) \\ & \implies \text{外力 } \alpha X_1 + \beta X_2 \text{ に対し応答 } \alpha Y_1 + \beta Y_2 \text{ が得られる} \end{aligned}$$

という重ね合わせの原理が成り立つ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に変化させられる場合、撃力的な外力 $X(t) = \delta(t - t_0)$ に対する応答が $Y(t) = \phi_{YX}(t, t_0)$ で与えられたなら、重ね合わせの原理から一般の外力 $X(t)$ に対する応答 $Y(t)$ は

$$Y(t) = \int_{-\infty}^t dt' X(t') \phi_{YX}(t, t') \quad (2.3.1)$$

で表せることになる。外力と応答の関係を与える上で $\phi_{YX}(t, t')$ は重要であり、応答関数と呼ばれる。ここで、 $t < t_0$ で $\phi_{YX}(t, t_0) = 0$ であるという物理的に自然な条件を用いて積分範囲に制限をつけていることに注意する。この仮定は因果律と呼ばれる。

系が時間的に一様であれば、

$$\phi_{YX}(t, t_0) = \phi_{YX}(t - t_0)$$

というように応答は外力との相対的な時間にしか依存しなくなる。このとき (2.3.1) は、

$$\begin{aligned} Y(t) &= \int_{-\infty}^t dt' X(t') \phi_{YX}(t - t') \\ &= \int_0^{\infty} dt' X(t - t') \phi_{YX}(t') \end{aligned}$$

という畳み込み積分で表されているので、Fourier 級数展開

$$\begin{aligned} X(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{X}(\omega) e^{-i\omega t}, & Y(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{Y}(\omega) e^{-i\omega t}, \\ \tilde{X}(\omega) &\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt X(t) e^{i\omega t}, & \tilde{Y}(\omega) &\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt Y(t) e^{i\omega t} \end{aligned}$$

を考えると、

$$\begin{aligned} \tilde{Y}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \tilde{X}(\omega') e^{-i\omega'(t-t')} \phi_{YX}(t') e^{i\omega t} \\ &= \int_0^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \tilde{X}(\omega') e^{i\omega' t'} \phi_{YX}(t') \delta(\omega - \omega') \\ &= \tilde{X}(\omega) \int_0^{\infty} dt' \phi_{YX}(t') e^{i\omega t'} \end{aligned}$$

となることがわかる。

$$\chi_{YX}(\omega) \equiv \int_0^{\infty} dt \phi_{YX}(t) e^{i\omega t}$$

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

$$\chi_{YX}(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_0^\infty dt \phi_{YX}(t) e^{-i\omega t} e^{-\delta t} \quad (2.3.2)$$

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

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

を (2.3.2) に代入すると、

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

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

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} \int_{-\infty}^\infty d\omega' \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega + i\delta} = \mathcal{P} \int_{-\infty}^\infty d\omega' \frac{f(\omega')}{\omega' - \omega} - i\pi f(\omega) \quad (2.3.3)$$

を用いてさらに変形すると、

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

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

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

と表すと、

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

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

$$\hat{H}_1(t) = -AF(t)$$

を加えたハミルトニアンで時間発展させる場合を考えることが多い。相互作用描像 (2.2.1 項参照) は密度行列での記述においても

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

3) 収束因子 δ は、撃力的な外力 $A(t, \mathbf{x}) = \delta(t - t_0) \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ 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。

により導入することができて、このときの von Neumann 方程式 (1.4.5) は相互作用描像での Schrödinger 方程式 (2.2.1) より、

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

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 $\hat{\rho}_{\text{eq}}$ は $t = -\infty$ におく。
- ・ 状態の変化 $\delta\hat{\rho}(t) \equiv \hat{\rho}_I(t) - \hat{\rho}_{\text{eq}}$ は $\hat{H}_1(t)$ の 1 次までの展開で近似する。

ことを仮定する必要がある。 $\hat{H}_1(t)\delta\hat{\rho}_I(t)$ は $\hat{H}_1(t)$ の 2 次の項であるため、この仮定のもとでの von Neumann 方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \delta\hat{\rho}_I(t) = \hat{H}_1(t) \hat{\rho}_{\text{I,eq}}(t) - \hat{\rho}_{\text{I,eq}}(t) \hat{H}_1(t) = -e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} F(t)$$

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

$$\delta\hat{\rho}_I(t) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\hat{H}_0 t'/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar} F(t')$$

で与えられ、Schrödinger 描像に戻れば、系の密度行列は、

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{\text{eq}} - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\hat{H}_0(t-t')/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{i\hat{H}_0(t-t')/\hbar} F(t')$$

で与えられることになる。応答 $B(t)$ はその物理量を与える演算子 \hat{B} の期待値をこの $\hat{\rho}(t)$ を用いて計算すれば得られる。重ね合わせが成り立つために外力のない熱平衡状態での \hat{B} の期待値は 0 であることに注意すると、

$$\begin{aligned} \langle B(t) \rangle &= \text{Tr} [\hat{B} \hat{\rho}(t)] \\ &= \text{Tr} [\hat{B} \hat{\rho}_{\text{eq}}] - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left\{ \hat{B} e^{-i\hat{H}_0(t-t')/\hbar} [\hat{A}, \hat{\rho}_{\text{eq}}] e^{i\hat{H}_0(t-t')/\hbar} \right\} F(t') \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left[\hat{B}_I(t-t') (\hat{A} \hat{\rho}_{\text{eq}} - \hat{\rho}_{\text{eq}} \hat{A}) \right] F(t') \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left[(\hat{B}_I(t-t') \hat{A} - \hat{A} \hat{B}_I(t-t')) \hat{\rho}_{\text{eq}} \right] F(t') \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left\langle [\hat{B}_I(t-t'), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} F(t') \end{aligned} \tag{2.3.4}$$

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、(2.3.4) において $F(t) = \delta(t - t_0)$ とすれば $\langle B(t) \rangle$ は応答関数を与えるはずである。代入して計算すると、

$$\begin{aligned} \phi(t - t_0) &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left\langle [\hat{B}_I(t-t'), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} \delta(t' - t_0) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left\langle [\hat{B}_I(t - t_0), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} \Theta(t - t_0) \end{aligned}$$

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。このようにして与えられる応答関数の量子論的表式は Green-久保の公式と呼ばれる。複素アドミッタンスの量子論的表式は

$$\chi(\omega) = -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \left\langle [\hat{B}(t), \hat{A}] \right\rangle_{\text{eq}} e^{i\omega t}$$

で与えられ、 $\langle B(t) \rangle$ と $F(t)$ の Fourier 成分

$$\langle \tilde{B}(\omega) \rangle \equiv \int_{-\infty}^\infty dt \langle B(t) \rangle e^{i\omega t}, \quad \tilde{F}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^\infty dt F(t) e^{i\omega t}$$

との間で $\langle \tilde{B}(\omega) \rangle = \chi(\omega) \tilde{F}(\omega)$ を満たす。

2.3.3 Onsager の相反定理

2.4 位相幾何・多様体論的な解析手法

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

2.4.1 Chern の定理

2.4.2 Berry 接続・曲率

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

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

1 次元軌道 C をなすように点列を連続化した際にこの量は、

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

というように線積分で表せるようになり、被積分ベクトル場

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

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

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

より、

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

である。またこれを積分した ϕ も純虚数である。

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

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

が成り立つとわかる (微分形式については C.4 節参照)。

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

も $A^\mu(R)$ と同様に $|\varphi(R)\rangle$ の局所的なパラメータ依存性のみから定まる、幾何学的位相を反映した量である。また、 $\Omega^{\mu\nu}$ の反対称成分は

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

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

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

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

幾何学的位相と物理量

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

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

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

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

Berry 接続 $A^\mu(R)$ の変換は次のとおりである。

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

$\Omega^{\mu\nu}(R)$ は次のように変換される。

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

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

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

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

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

という量は、パラメータに依存した位相変換の下では $A^\mu, \Omega^{\mu\nu}$ の変化が相殺し合うことで不変に保たれるため可観測量になりうる。 $\sigma^{\mu\nu}(R)$ および $Q^{\mu\nu}(R)$ は⁴⁾、 $|\phi(R)\rangle$ の局所的なパラメータ依存性のみから定まり、かつ物理量として観測できる可能性があるため重要である。

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

2.5 Green 関数の方法

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

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

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

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

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

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

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

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

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

の $x \neq x'$ での解 $u(x)$ となっている。また、 $g(x-x')$ は $I' \subset I$ で定義された解 $u(x)$ に対して、

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

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

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

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

2.5.1 実時間 Green 関数

一般的な自由粒子系のハミルトニアン

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

に対し、 \hat{a}_j の Heisenberg 方程式は⁵⁾、

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

5) 1.4.3 項の最後で述べたように、本節では化学ポテンシャルの項を差し引いたハミルトニアンで系の時間発展を考える。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

を用いると、

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

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

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

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

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

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

となっている。Green 関数の性質から $t \rightarrow \pm\infty$ で $G(t) \rightarrow 0$ に必ず収束しなければならない⁶⁾ ことも合わせると、 $G(t, t')$ には次のように Fourier 成分を定義することができる。

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

(2.5.2) の両辺を素朴に Fourier 変換すると、

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

となるため、

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

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

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

と表せるようになるため、 $\hat{a}_k(t)$ の時間発展は

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

とわかり、(2.5.3) に代入すると、

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

また、(2.5.4) に代入すると、

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

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

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

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

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

という逆行列で与えられることを表している。1 粒子状態の基底 $\{|j\rangle\}$ を取り直すことは両辺をユニタリ変換することにあたるので、上の逆行列による表式は任意の 1 粒子状態基底において成り立つ。

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

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

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

で与えられるため、 $g_{kk'}^R(t, t')$ は $t - t' < 0$ で、 $g_{kk'}^A(t, t')$ は $t - t' > 0$ で値を持たない (詳しくは付録 C.1 節参照)。

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

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

と表せる。期待値を熱平衡状態 $(T, \mu; V)$ に対してとるならば、この系は相互作用のない自由粒子系であるので、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

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

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

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

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

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

Bose 粒子系の場合は、

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

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

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

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

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

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

相互作用がある系への Green 関数の拡張

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

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

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

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

と変わるので⁷⁾、遅延 Green 関数は次式を満たすようになる。

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

右辺第 2 項の内、

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

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

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

で 2 体 Green 関数が定義され、

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

を満たす (和の記号を省略した。2 回登場する添字は全て和をとっている)。

量子論的に相互作用系へ定義を拡張した $g_{jj'}(t, t')$ は、相互作用のない系の運動方程式から導かれる (2.5.2) の Green 関数として適切ではない。しかし演算子での定義を見る限り、物理的に伝播

7) 3 番目の等号で用いた次の関係式は、2 体相互作用は必ず 2 粒子に対称的に作用するという自然な仮定の帰結である。

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

関数としての性質が失われているとは考えられない。また、 $g_{jj'}(t, t')$ と $g_{j_1 j_2 j_3 j'}(t, t')$ に対して

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

を満たす $\Sigma_{jj'}(t, t')$ を導入できた場合には、(2.5.6) は、

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

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

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

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

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

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

2.5.2 相関関数のスペクトル表示

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

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

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

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

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

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

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

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

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

となる。ここで、

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

を定義し、この Fourier 変換が

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

を与えること、および $J_{AB}(\omega)$ の積分を実行すると、

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

となるため、

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

が成り立つことを利用すると、

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

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

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

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

$\tilde{G}_{AB}(\omega)$ のスペクトル表示は主値公式 (2.3.3) が適用できる形をしており、

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

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

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

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

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

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

$$\operatorname{Re}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im}\tilde{G}_{AB}^R(\omega')}{\omega' - \omega}, \quad \operatorname{Im}\tilde{G}_{AB}^R(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Re}\tilde{G}_{AB}^R(\omega')}{\omega' - \omega}$$

も成り立つので、実質的にはいずれか一つの $G_{AB}(\omega)$ の実部か虚部さえ求まればよい。

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

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

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

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

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

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

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

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

2.5.3 因果 Green 関数による摂動展開

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

経路積分表示の因果 Green 関数・相関関数

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

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

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

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

を満たす時刻であり、式変形中では

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

および

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

を用いた。このため、時間発展を細分化して、

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

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

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

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

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

であるので、

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

とにおいて g^C を経路積分で表すと、次のようになる。

$$\begin{aligned} g_{jj'}^C(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}') &= \begin{cases} \frac{1}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha_j(t) \bar{\alpha}_{j'}(t') e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}} & (t > t') \\ \frac{\zeta}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha_{j'}(t') \alpha_j(t) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}} & (t < t') \end{cases} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) \alpha_j(t) \bar{\alpha}_{j'}(t') e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\alpha, \bar{\alpha}) e^{iS(t_f; t_i)/\hbar}} \end{aligned} \quad (2.5.8)$$

分母と分子の積分経路はともに $t = t_i, t_f$ で $|n\rangle$ がとるべき場の配位 $\Psi(t, \mathbf{x})$ になっているような任意の経路である⁸⁾。実用上は任意の t, t' で定義できるよう $t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow +\infty$ とすることが多い。

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

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

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

生成汎関数による摂動展開公式

以下では次の汎関数微分の恒等式を多用する (式の詳細は C.5 節参照)⁹⁾。

$$\frac{\delta^n}{\delta\phi(x_1)\delta\phi(x_2)\cdots\delta\phi(x_n)} \exp \left[\int dx \phi(x) J(x) \right] = J(x_1) J(x_2) \cdots J(x_n) \exp \left[\int dx \phi(x) J(x) \right] \quad (2.5.9)$$

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

9) ϕ, J が Grassmann 数を値にとる場合には積の順序を考慮する必要がある。すなわち (2.5.9) はこの順序でのみ成立し、適用する際には必ずこの順に並び替える必要がある。(2.5.10) や (2.5.12) で乗じられている ζ はその並べ替えにより生じる因子の補正である。

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

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

で与えられる汎関数により、

$$g_{jj'}^C(t, t') = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{\Xi[\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0]} \zeta \frac{\delta^2 \Xi}{\delta \bar{\boldsymbol{\eta}}_j(t) \delta \boldsymbol{\eta}_{j'}(t')} \Big|_{\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0} \quad (2.5.10)$$

と表すことができる。 $\Xi[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}]$ は生成汎関数と呼ばれ、この (2.5.10) から $G^C(t, t')$ を用いて

$$\Xi[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}] = \Xi[\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0] \exp \left[i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \bar{\boldsymbol{\eta}}^T(t) G^C(t, t') \boldsymbol{\eta}(t') \right] \quad (2.5.11)$$

と表せることもわかる。

ハミルトニアンが $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(\boldsymbol{\alpha}, \bar{\boldsymbol{\alpha}})$ と分けられ、 \mathcal{H}_0 に対する生成汎関数 $\Xi_0[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}]$ および因果 Green 関数 $G_0^C(t, t')$ のみがわかっているとき、(2.5.9) より \mathcal{H} に対する生成汎関数 $\Xi[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}]$ は、

$$\begin{aligned} \Xi[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}] &= \int \mathcal{D}(\boldsymbol{\alpha}, \bar{\boldsymbol{\alpha}}) \exp \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\frac{i}{\hbar} (i\hbar \bar{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \partial_t \boldsymbol{\alpha} - \mathcal{H}_0 - \mathcal{H}_1) + \bar{\boldsymbol{\eta}}^T \boldsymbol{\alpha} + \bar{\boldsymbol{\alpha}}^T \boldsymbol{\eta} \right] \right\} \\ &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{H}_1 \left(\frac{\delta}{\delta \bar{\boldsymbol{\eta}}(t)}, \zeta \frac{\delta}{\delta \boldsymbol{\eta}(t)} \right) \right] \Xi_0[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}] \end{aligned} \quad (2.5.12)$$

で与えられると期待される。この表式に、(2.5.11) にまた (2.5.9) を用いた

$$\begin{aligned} \Xi_0[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}] &= \Xi_0[\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0] \exp \left[i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \bar{\boldsymbol{\eta}}^T(t) G_0^C(t, t') \boldsymbol{\eta}(t') \right] \\ &= \Xi_0[\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0] \exp \left[i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \boldsymbol{\alpha}(t)} \right)^T G_0^C(t, t') \frac{\delta}{\delta \bar{\boldsymbol{\alpha}}(t')} \right] \\ &\quad \times \exp \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt'' [\bar{\boldsymbol{\eta}}^T(t'') \boldsymbol{\alpha}(t'') + \bar{\boldsymbol{\alpha}}^T(t'') \boldsymbol{\eta}(t'')] \right] \Big|_{\boldsymbol{\alpha} = \bar{\boldsymbol{\alpha}} = 0} \end{aligned}$$

を代入し、 $\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}$ の汎関数微分を先に実行すると、

$$\begin{aligned} \Xi[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}] &= \Xi_0[\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{H}_1 \left(\frac{\delta}{\delta \bar{\boldsymbol{\eta}}(t)}, \zeta \frac{\delta}{\delta \boldsymbol{\eta}(t)} \right) \right] \\ &\quad \times \exp \left[i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \boldsymbol{\alpha}(t_1)} \right)^T G_0^C(t_1, t_2) \frac{\delta}{\delta \bar{\boldsymbol{\alpha}}(t_2)} \right] \\ &\quad \times \exp \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 [\bar{\boldsymbol{\eta}}^T(t_3) \boldsymbol{\alpha}(t_3) + \bar{\boldsymbol{\alpha}}^T(t_3) \boldsymbol{\eta}(t_3)] \right\} \Big|_{\boldsymbol{\alpha} = \bar{\boldsymbol{\alpha}} = 0} \\ &= \Xi_0[\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0] \exp \left[i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \boldsymbol{\alpha}(t)} \right)^T G_0^C(t, t') \frac{\delta}{\delta \bar{\boldsymbol{\alpha}}(t')} \right] \\ &\quad \times \exp \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \left[-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_1(\boldsymbol{\alpha}(t''), \bar{\boldsymbol{\alpha}}(t'')) + \bar{\boldsymbol{\eta}}^T(t'') \boldsymbol{\alpha}(t'') + \bar{\boldsymbol{\alpha}}^T(t'') \boldsymbol{\eta}(t'') \right] \right\} \Big|_{\boldsymbol{\alpha} = \bar{\boldsymbol{\alpha}} = 0} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \Xi_0[\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0] \exp \left[i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \boldsymbol{\alpha}(t)} \right)^T G_0^C(t, t') \frac{\delta}{\delta \bar{\boldsymbol{\alpha}}(t')} \right] \\ &\quad \times \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \mathcal{H}_1(\boldsymbol{\alpha}(t''), \bar{\boldsymbol{\alpha}}(t'')) \right]^n \exp \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt'' (\bar{\boldsymbol{\eta}}^T(t'') \boldsymbol{\alpha}(t'') + \bar{\boldsymbol{\alpha}}^T(t'') \boldsymbol{\eta}(t'')) \right] \Big|_{\boldsymbol{\alpha} = \bar{\boldsymbol{\alpha}} = 0} \end{aligned} \quad (2.5.13)$$

という表式が得られるため、 \mathcal{H}_1 の摂動展開を行うことで $\Xi[\boldsymbol{\eta}, \bar{\boldsymbol{\eta}}]$ が計算できると考えられる。

経路積分による Green 関数および生成汎関数の定義では、積分経路の $t = \pm\infty$ において設定する状態は系の固有状態および熱平衡状態に限られていた。よって (2.5.12) の最左辺と最右辺において $\Xi_0[\eta, \bar{\eta}]$ と $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ の各積分経路において設定する $t = \pm\infty$ の状態は一般には一致しない。そこで、摂動展開を目的とするような今回の状況では \mathcal{H}_0 と $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ の基底状態がほとんど変わらないという仮定 (断熱仮定) をおいて、 $T = 0$ での熱平衡状態に限って議論を進める。

Wick の定理

ベクトル $\alpha(t_1), \bar{\alpha}(t_2)$ から作られるテンソル $\alpha(t_1) \otimes \bar{\alpha}(t_2)$ に対して、

$$\langle \alpha(t_1) \otimes \bar{\alpha}(t_2) \rangle \equiv \exp \left[i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \alpha(t)} \right)^T G_0^C(t, t') \frac{\delta}{\delta \bar{\alpha}(t')} \right] \alpha(t_1) \otimes \bar{\alpha}(t_2) \Big|_{\alpha=\bar{\alpha}=0}$$

を考えると、特に Grassmann 数の関数の場合を念頭に、

$$\frac{\delta}{\delta \phi(x)} \phi(x') \chi(x') = \chi(x') \delta(x - x')$$

で汎関数微分が定義されていることに注意する¹⁰⁾と、

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \alpha(t)} \right)^T G_0^C(t, t') \frac{\delta}{\delta \bar{\alpha}(t')} \right] \alpha(t_1) \otimes \bar{\alpha}(t_2) = G_0^C(t_1; t_2)$$

から、指数関数型の演算子を展開してそれぞれ計算すると 1 次項以外は 0 となるとわかる。すなわち $\langle \alpha(t_1) \otimes \bar{\alpha}(t_2) \rangle$ は、

$$\langle \alpha(t_1) \otimes \bar{\alpha}(t_2) \rangle = i\hbar G_0^C(t_1, t_2)$$

というように G_0^C を与える。

$\phi(x)$ の変分に対しては一般に、

$$\begin{aligned} \delta [\phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \phi(x_n)] \\ &= \phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \delta \phi(x_n) + \cdots + \phi(x_1) \delta \phi(x_2) \cdots \phi(x_n) + \delta \phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \phi(x_n) \\ &= \zeta^{n-1} \delta \phi(x_n) \phi(x_1) \cdots \phi(x_{n-1}) + \cdots + \zeta \delta \phi(x_2) \phi(x_1) \phi(x_3) \cdots \phi(x_n) + \delta \phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \phi(x_n) \end{aligned}$$

となるため $\phi(x)$ が通常の数を与える場合は $\zeta = 1$ 、Grassmann 数を与える場合は $\zeta = -1$ 、

$$\frac{\delta}{\delta \phi(x)} [\phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \phi(x_n)] = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} [\cdots \phi(x_{k-1}) \phi(x_{k+1}) \cdots] \delta(x - x_k)$$

およびこれを帰納的に用いた

$$\begin{aligned} \frac{\delta^n}{\delta \phi(y_1) \cdots \delta \phi(y_n)} [\phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \phi(x_n)] \\ &= \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \frac{\delta^{n-1}}{\delta \phi(y_1) \cdots \delta \phi(y_{n-1})} [\cdots \phi(x_{k-1}) \phi(x_{k+1}) \cdots] \delta(y_n - x_k) \\ &= \cdots \\ &= \sum_P \zeta^P \delta(y_1 - x_{P(1)}) \delta(y_2 - x_{P(2)}) \cdots \delta(y_n - x_{P(n)}) \end{aligned}$$

10) 注釈 9) も参照。定義における積の順序について注意している。

が成り立つことがわかる。ここで P は $\{1, 2, \dots, n\}$ の置換であり、

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

となる。このことを用いると、次のような $2n$ 階のテンソル

$$\alpha(t_1) \otimes \bar{\alpha}(t_1) \otimes \alpha(t_2) \otimes \bar{\alpha}(t_2) \otimes \cdots \otimes \alpha(t_n) \otimes \bar{\alpha}(t_n)$$

に対して、

$$\begin{aligned} & \langle \alpha(t_1) \otimes \bar{\alpha}(t_1) \otimes \alpha(t_2) \otimes \bar{\alpha}(t_2) \otimes \cdots \otimes \alpha(t_n) \otimes \bar{\alpha}(t_n) \rangle \\ &= (i\hbar)^n \sum_P \zeta^P G_0^C(P(1); 1) \otimes G_0^C(P(2); 2) \otimes \cdots \otimes G_0^C(P(n); n) \quad (2.5.14) \end{aligned}$$

が成り立つことが導かれる。ただし、 $G_0^C(n; n') \equiv G_0^C(t_n; t_{n'})$ は引数に持つ時刻 $t_n, t_{n'}$ に対応した $\alpha(t_n), \bar{\alpha}(t_{n'})$ のベクトルの足をそれぞれ引き継いだ 2 階のテンソルになっている。これは演算子形式において Wick の定理と呼ばれる結果の対応物である (以降では (2.5.14) を Wick の定理と呼ぶ)。

Feynman 図による生成汎関数の摂動展開

$\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ を摂動展開公式 (2.5.13) を用いて計算するには、

$$\frac{1}{n!} \left[i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \alpha(t)} \right)^T G_0^C(t, t') \frac{\delta}{\delta \bar{\alpha}(t')} \right] \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \mathcal{H}_1(\alpha(t''), \bar{\alpha}(t'')) \right]^n \quad (2.5.15)$$

を計算する必要がある。ここで \mathcal{H}_1 として一般的な 2 体相互作用

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1(\alpha, \bar{\alpha}) &= \frac{1}{4} \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} \langle j_1, j_2 | \hat{V} | j_3, j_4 \rangle \bar{\alpha}_{j_1} \bar{\alpha}_{j_2} \alpha_{j_4} \alpha_{j_3} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{j_1, j_2, j_3, j_4} \langle j_1, j_2 | \hat{V} | j_3, j_4 \rangle \alpha_{j_3} \bar{\alpha}_{j_1} \alpha_{j_4} \bar{\alpha}_{j_2} \end{aligned}$$

を考えると、(2.5.15) は Wick の定理 (2.5.14) を適用できて、 $V_{j_1 j_2; j_3 j_4} \equiv \langle j_1, j_2 | \hat{V} | j_3, j_4 \rangle$ と G_0^C の縮約として表せることがわかる。このとき、

t -表示での Feynman 則

- (i) $-\frac{i}{\hbar} \int dt_n \frac{1}{4} V$: 2 つの足をもつ頂点を結ぶ点線
- (ii) $i\hbar G_0^C(t_n; t_{n'})$: 頂点の対応する足をつなぐ実線
- (iii) 実線がつながってできたループが奇数個なら、 ζ が乗じられる。

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

生成汎関数の摂動展開における Feynman 図の描き方

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

の手順で描いた Feynman 図の内、回転や連続変形で一致するものを除く全てが摂動展開 (2.5.13) の各項と一対一に対応する。摂動展開項のダイアグラムの例を図 2.1 に示す。

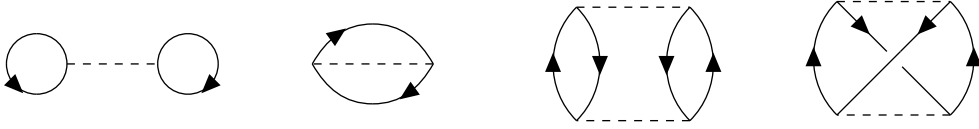


図 2.1 生成汎関数の摂動展開項を表す Feynman 図の例

$G_0^C(t, \mathbf{x}; t', \mathbf{x}')$ は Fourier 逆変換

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

が可能である。摂動展開した各項にこれらの展開を代入して t_n の積分を先に実行してしまうと、4 つの G_0^C が共通の t_n を持つため、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4)t_1} = 2\pi \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4)$$

というデルタ関数が生じ、摂動展開の各項はこのデルタ関数の制約に則って $\tilde{G}_0^C(\omega), V_{j_1 j_2; j_3 j_4}$ の縮約を各 ω で積分したものになる。すなわち、先と同じ Feynman 図に対して、

(\mathbf{k}, ω) 表示での Feynman 則

- (i) 点線：頂点の足に対応したデルタ関数をもつ $-\frac{i}{\hbar} \frac{1}{4} V \frac{1}{2\pi} \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4)$
- (ii) 実線： $i\hbar \int d\omega \tilde{G}_0^C(\omega)$
- (iii) 実線がつながってできたループが奇数個なら、 ζ が乗じられる。

という対応関係の規則を与えることで、摂動展開項の ω -表示が得られる¹¹⁾。

Feynman 図による因果 Green 関数の摂動展開

生成汎関数を用いた G^C の表式 (2.5.10) に生成汎関数の摂動展開公式 (2.5.13) を代入し $\eta, \bar{\eta}$ の汎関数微分を先に実行すると、 $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ で考えた摂動展開項に $\alpha(t) \otimes \bar{\alpha}(t')$ を左から乗じたものが G^C の摂動展開項になることがわかる。

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

11) (iv) は、 \tilde{G}_0^C の Fourier 変換で生じる $(2\pi)^{-1}$ の因子と、頂点での周波数の和則で生じる 2π の因子の差し引きで発生する。

t -表示での Feynman 則 (続き)

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

また、 G^C の摂動展開に G_0^C の Fourier 逆変換を代入して t_n の積分を実行して ω -表示に移った場合には、外の頂点につながる実線に対応した \tilde{G}_0^C は引数 ω が必ずそろふことになる。この ω が \tilde{G}^C の引数となるので、 ω -表示での Feynman 則 (vii) は次のようになる：

ω -表示での Feynman 則 (続き)

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

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

因果 Green 関数の摂動展開における Feynman 図の描き方

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

G^C の摂動展開項を表すダイアグラムの例を図 2.2 に示す。

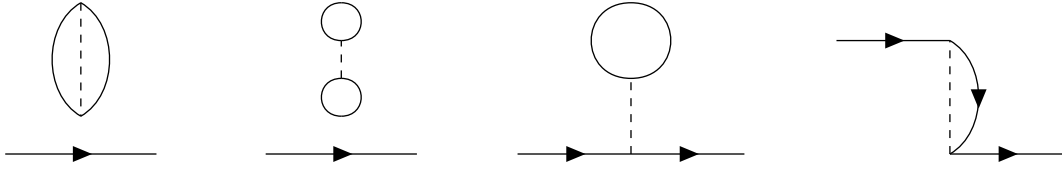


図 2.2 $G^C(\omega)$ の摂動展開項を表す Feynman 図の例

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

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

となることを意味する重要な性質である。すなわち、最右辺の第 2 因子は $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ に他ならず、(2.5.10) を見ると G^C は上式を $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ で約分して与えられることから、因果 Green 関数の摂動展開項を Feynman 図で書き下す場合には、

3. 独立した部分のない、既約な図形となるもののみ描く。

だけでよいのである。図 2.2 の例では、後ろ 2 つのみを計算することになる。

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

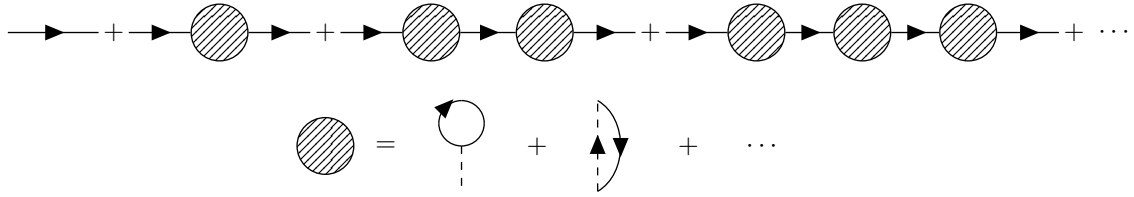


図 2.3 g_σ^C の摂動展開を固有ダイアグラムをまとめた形で表した Feynman 図

$$\begin{aligned}
 \tilde{G}^C(\omega) &= \tilde{G}_0^C(\omega) + \tilde{G}_0^C(\omega) \tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \\
 &\quad + \tilde{G}_0^C(\omega) \tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \\
 &\quad + \tilde{G}_0^C(\omega) \tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) + \cdots \\
 &= \tilde{G}_0^C(\omega) \sum_{n=0}^{\infty} [\tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega)]^n \\
 &= \tilde{G}_0^C(\omega) + \tilde{G}_0^C(\omega) \tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega) \sum_{n=0}^{\infty} [\tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}_0^C(\omega)]^n \\
 &= \tilde{G}_0^C(\omega) + \tilde{G}_0^C(\omega) \tilde{\Sigma}(\omega) \tilde{G}^C(\omega)
 \end{aligned} \tag{2.5.16}$$

というように式でも表せる。(2.5.16) は Dyson 方程式と呼ばれ、その形式解は

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

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

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

であるなら、

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

であるので、

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

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

2.5.4 温度 Green 関数：虚時間形式

ここまで扱ってきた実時間 Green 関数は物理量の相関関数と密接に関連しているものの、 G^R を求められるのは G^C の解析接続が成り立つ $T = 0$ の基底状態の場合のみで、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、摂動展開も可能な温度 Green 関数

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{jj'}^\beta(u, u') &\equiv -\left\langle \mathcal{T}[\hat{a}_j(u)\hat{a}_{j'}^\dagger(u')] \right\rangle_{\text{eq}} \\ &= -\frac{1}{\Xi_V} \text{Tr}_V \left\{ \mathcal{T}[\hat{a}_j(u)\hat{a}_{j'}^\dagger(u')] e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \right\}\end{aligned}$$

を考えることでこの困難が回避される。ここで、 $\hat{a}_j(u), \hat{a}_j^\dagger(u)$ は、

$$\hat{a}_j(u) = e^{u\hat{\mathcal{H}}} \hat{a}_j e^{-u\hat{\mathcal{H}}}, \quad \hat{a}_j^\dagger(u) = e^{u\hat{\mathcal{H}}} \hat{a}_j^\dagger e^{-u\hat{\mathcal{H}}}$$

で定義される Heisenberg 演算子で、時間順序積は

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

で定義されている。熱平均は同じ $\hat{\mathcal{H}}$ に対する熱平衡状態 $(T, \mu; V)$ に対してとっている。

温度 Green 関数を導入する動機として、生成汎関数 $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ と分配関数 $\Xi_V(\beta, \mu)$ の経路積分表示での類似性に注目する：

$$\begin{cases} \Xi[\eta = \bar{\eta} = 0] = \int \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_V d^3\mathbf{x} [i\hbar \bar{\Psi} \partial_t \Psi - \mathcal{H}(\Psi, \bar{\Psi})] \right\} \\ \Xi_V(\beta, \mu) = \int \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du \int_V d^3\mathbf{x} [\bar{\Psi} \partial_u \Psi + \mathcal{H}(\Psi, \bar{\Psi})] \right\} \end{cases}$$

後者について $t' = -i\hbar u$ と変数変換を行うと、

$$\Xi_V(\beta, \mu) = \int \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{-i\hbar\beta} dt' \int_V d^3\mathbf{x} [-i\hbar \bar{\Psi} \partial_{t'} \Psi - \mathcal{H}(\Psi, \bar{\Psi})] \right\}$$

と表せるので、生成汎関数 $\Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ が実軸に沿って時間積分した作用

$$S(\infty; -\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_V d^3\mathbf{x} [i\hbar \bar{\Psi} \partial_t \Psi - \mathcal{H}(\Psi, \bar{\Psi})]$$

を肩にもつ指数関数を足し上げているのに対し、分配関数 Ξ_V は虚軸に沿った時間積分により与えられる、

$$\begin{aligned}S(\beta) &= \int_0^{-i\hbar\beta} dt \int_V d^3\mathbf{x} [i\hbar \bar{\Psi} \partial_t \Psi - \mathcal{H}(\Psi, \bar{\Psi})] \\ &= i\hbar \int_0^\beta du \int_V d^3\mathbf{x} [\bar{\Psi} \partial_u \Psi + \mathcal{H}(\Psi, \bar{\Psi})]\end{aligned}$$

を肩にもつ指数関数を足し上げていることがわかる。このため一般の生成汎関数 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ に対応して

$$\Xi^\beta[\eta, \bar{\eta}] \equiv \int \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \exp \left\{ - \int_0^\beta du \int_V d^3\mathbf{x} [\bar{\Psi} \partial_u \Psi + \mathcal{H}(\Psi, \bar{\Psi}) + \bar{\eta} \Psi + \bar{\Psi} \eta] \right\}$$

を導入できて、

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^\beta(u, \mathbf{x}; u', \mathbf{x}') &\equiv -\frac{1}{\Xi_V} \zeta \frac{\delta^2 \Xi^\beta}{\delta \bar{\eta}(u, \mathbf{x}) \delta \eta(u', \mathbf{x}')} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0} \\ &= -\frac{\int \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \Psi(u, \mathbf{x}) \bar{\Psi}(u', \mathbf{x}') e^{i\mathcal{S}(\beta)/\hbar}}{\int \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) e^{i\mathcal{S}(\beta)/\hbar}}\end{aligned}$$

という因果 Green 関数に似た関数を、 $0 < u, u' < \beta$ の範囲で導入できるが、これは先に導入した温度 Green 関数に他ならない。この意味で \mathcal{G}^β は虚時間 Green 関数とも呼ばれる。

松原周波数

Ξ_V の経路積分表示において、その積分経路は $\Psi(0, \mathbf{x}) = \zeta \Psi(\beta, \mathbf{x})$, $\bar{\Psi}(0, \mathbf{x}) = \zeta \bar{\Psi}(\beta, \mathbf{x})$ を満たしていたので、

$$\mathcal{G}^\beta(u, \mathbf{x}; \beta, \mathbf{x}') = \zeta \mathcal{G}^\beta(u, \mathbf{x}; 0, \mathbf{x}')$$

が成り立つ。一方、定義から \mathcal{G}^β は実際には $u - u'$ にのみ依存する関数 $\mathcal{G}^\beta(u - u'; \mathbf{x}, \mathbf{x}')$ ($-\beta < u - u' < \beta$) になっているので、この条件は

$$\mathcal{G}^\beta(u - \beta; \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \zeta \mathcal{G}^\beta(u; \mathbf{x}, \mathbf{x}')$$

となる。このため周期境界条件

$$\mathcal{G}^\beta(-\beta; \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \zeta \mathcal{G}^\beta(0; \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathcal{G}^\beta(\beta; \mathbf{x}, \mathbf{x}')$$

から導かれる Fourier 級数展開

$$\begin{cases} \tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\omega_n; \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int_{-\beta}^{\beta} du \mathcal{G}^\beta(u; \mathbf{x}, \mathbf{x}') e^{i\omega_n u} \\ \mathcal{G}^\beta(u; \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{2\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\omega_n; \mathbf{x}, \mathbf{x}') e^{-i\omega_n u} \end{cases} \quad \left(\omega_n = \frac{n\pi}{\beta} \right)$$

は、 $\mathcal{G}^\beta(u; \mathbf{x}, \mathbf{x}')$ は ζ の符号、すなわち Fermi 粒子系か Bose 粒子系かによって、

$$\tilde{\omega}_l = \begin{cases} \omega_{2l+1} = \frac{(2l+1)\pi}{\beta} & (\text{Fermi 粒子系}) \\ \omega_{2l} = \frac{2l\pi}{\beta} & (\text{Bose 粒子系}) \end{cases}$$

の周波数のみでしか $\tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\omega_n; \mathbf{x}, \mathbf{x}')$ が値を残さないという違いが現れる。このことを踏まえて上の Fourier 級数展開を次のように表し直しておく。

$$\tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\tilde{\omega}_l; \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int_0^\beta du \mathcal{G}^\beta(u; \mathbf{x}, \mathbf{x}') e^{i\tilde{\omega}_l u}, \quad \mathcal{G}^\beta(u; \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{\beta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \tilde{\mathcal{G}}^\beta(i\tilde{\omega}_l; \mathbf{x}, \mathbf{x}') e^{-i\tilde{\omega}_l u} \quad (2.5.17)$$

粒子の種類ごとに $\tilde{\omega}_l$ の定義を取り換えれば (2.5.17) はそのまま成り立つ。 $\tilde{\omega}_l$ は松原振動数と呼ばれる。

自由粒子系での温度 Green 関数

自由粒子系での温度 Green 関数 $\mathcal{G}_0^\beta(u; \mathbf{x}, \mathbf{x}')$ は、 $g_0(t, t'; \mathbf{x}, \mathbf{x}')$ と同様に、

$$\mathcal{G}_0^\beta(u; \mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

という関数形になるため、座標に関しても Fourier 成分を定義することができる。

$$\tilde{\mathcal{G}}_0^\beta(\mathbf{k}, i\omega_l) \equiv \int_0^\beta du \int_V d^3\mathbf{x} \mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega_l u)}$$

$[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{H}_0] = (\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)\hat{a}_{\mathbf{p}}$ だったので、BCH 公式 (C.3 節参照) より、

$$\hat{a}_{\mathbf{p}}(u) \equiv e^{u\hat{H}_0}\hat{a}_{\mathbf{p}}e^{-u\hat{H}_0} = \hat{a}_{\mathbf{p}}e^{-(\epsilon_{\mathbf{p}}-\mu)u}, \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger(u) = \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{(\epsilon_{\mathbf{p}}-\mu)u},$$

が成り立ち、(1.3.4) から $\hat{\Psi}(u, \mathbf{x}), \hat{\Psi}^\dagger(u, \mathbf{x})$ が、

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

と表されるとわかる。 $\mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}; u', \mathbf{x}')$ にこれらの場の演算子の展開を代入すると、

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0^\beta(u - u', \mathbf{x} - \mathbf{x}') &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left(\left\langle \hat{a}_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger \right\rangle e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}') / \hbar} e^{(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)u - (\epsilon_{\mathbf{p}'} - \mu)u'} \Theta(u - u') \right. \\ &\quad \left. + \zeta \left\langle \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} \right\rangle e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}') / \hbar} e^{(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)u - (\epsilon_{\mathbf{p}'} - \mu)u'} \Theta(u' - u) \right) \end{aligned}$$

となる。期待値は熱平衡状態 $(T, \mu; V)$ に対してとられているので、Fermi 粒子系の場合には、

$$\mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar} e^{-(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)u} \left[\frac{\Theta(u)}{1 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}} - \frac{\Theta(-u)}{1 + e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}} \right]$$

Bose 粒子系の場合は、

$$\mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar} e^{-(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)u} \left[\frac{\Theta(u)}{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}} - \frac{\Theta(-u)}{1 - e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}} \right]$$

である。よって、 $\tilde{\mathcal{G}}_0^\beta(\mathbf{k}, i\omega_l)$ は次のように求まる。

$$\tilde{\mathcal{G}}_0^\beta(\mathbf{k}, i\omega_l) = \frac{1}{i\omega_l - (\epsilon_{\hbar\mathbf{k}} - \mu)}$$

この表式は Fermi・Bose どちらの粒子系でも共通であり、次式が形式上成り立つ。

$$\tilde{\mathcal{G}}_0^\beta(\mathbf{k}, \hbar\omega + i\delta) = \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_{\hbar\mathbf{k}} - \mu) + i\delta} = \tilde{g}_0^{\text{R}}(\mathbf{k}, \omega)$$

虚時間形式のスペクトル表示

温度 Green 関数による摂動展開

生成汎関数 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ と $\Xi^\beta[\eta, \bar{\eta}]$ の類似性から、 $\Xi[\eta, \bar{\eta}]$ における (2.5.12) に対応した式として、

$$\begin{aligned} \Xi^\beta[\eta, \bar{\eta}] &= \int \mathcal{D}(\Psi, \bar{\Psi}) \exp \left\{ - \int du d^3\mathbf{x} [\bar{\Psi} \partial_u \Psi + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \bar{\eta} \Psi + \bar{\Psi} \eta] \right\} \\ &= \exp \left[- \int_{-\infty}^{\infty} du \int_V d^3\mathbf{x} \mathcal{H}_1 \left(\zeta \frac{\delta}{\delta \bar{\eta}(u, \mathbf{x})}, \frac{\delta}{\delta \eta(u, \mathbf{x})} \right) \right] \Xi_0^\beta[\eta, \bar{\eta}] \end{aligned}$$

が成り立ち、また (2.5.13) に対応した式として、

$$\begin{aligned} \Xi^\beta[\eta, \bar{\eta}] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \Xi_{0;V} \exp \left[- \int_0^\beta du \int_V d^3\mathbf{x} \int_0^\beta du' \int_V d^3\mathbf{x}' \frac{\delta}{\delta\Psi(u, \mathbf{x})} \mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}; u', \mathbf{x}') \frac{\delta}{\delta\bar{\Psi}(u', \mathbf{x}')} \right] \\ \times \left[- \int_0^\beta du'' \int_V d^3\mathbf{x}'' \mathcal{H}_1(\Psi, \bar{\Psi}) \right]^n \exp \left[\int_0^\beta du'' \int_V d^3\mathbf{x}'' (\bar{\eta}\Psi + \bar{\Psi}\eta) \right] \Big|_{\Psi=\bar{\Psi}=0} \end{aligned} \quad (2.5.18)$$

という摂動展開公式が成り立つ ($\Xi_{0;V}, \mathcal{G}_0^\beta$ はそれぞれ $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$ に対して定義された大分配関数と温度 Green 関数)。ここで、生成汎関数の場合と違って分配関数の径路積分はどのような \mathcal{H} に対しても (反) 周期境界条件を満たす任意の径路にわたって足し上げられているため、分配関数の摂動展開時に断熱仮定の必要はないことに注意する。

$Z[\eta, \bar{\eta}]$ の摂動展開の際と同様に、同じ引数の $\Psi, \bar{\Psi}$ が正規順序に並んだ積 $\mathcal{O}^{2n}[\Psi, \bar{\Psi}]$ に対して、

$$\left\langle \mathcal{O}^{(2n)}[\Psi, \bar{\Psi}] \right\rangle_\beta \equiv \exp \left[- \int du d^3\mathbf{x} \int du' d^3\mathbf{x}' \frac{\delta}{\delta\Psi(u, \mathbf{x})} \mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}; u', \mathbf{x}') \frac{\delta}{\delta\bar{\Psi}(u', \mathbf{x}')} \right] \mathcal{O}[\Psi, \bar{\Psi}] \Big|_{\Psi=\bar{\Psi}=0}$$

を (2.5.9) を用いて求めておく。と Ξ_V の摂動展開が体系的に行えるわけだが、生成汎関数からの類推で $\mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}; u', \mathbf{x}')$ の積に分解されることが期待される。実際この予想は正しく、積の分解について Wick の定理と同様の規則性が成り立つことが Bloch-de Dominicis の定理として知られる。このため大分配関数 $\Xi_V = \Xi[\eta = \bar{\eta} = 0]$ の摂動展開にも Feynman 図を用いた手法が適用できる。ただし、

大分配関数の摂動展開における Feynman 図の書き方

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

の手順でダイアグラムを書くことは全く変わらないが、Feynman 則が

(u, \mathbf{x}) 表示での Feynman 則

- (i) 引数 (u_n, \mathbf{x}_n) : 頂点
- (ii) $-\mathcal{G}_0^\beta(n; n') : (u_n, \mathbf{x}_n)$ から $(u_{n'}, \mathbf{x}_{n'})$ へ対応した頂点を結ぶ実線。 $n = n'$ の場合は (u_n, \mathbf{x}_n) の頂点を通るループ
- (iii) 実線がつながってできたループが奇数個なら、 ζ が乗じられる。
- (iv) $-v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots) \delta(u_1, u_2, \dots) : (u_j, \mathbf{x}_j)$ に対応した頂点を v の引数の順に結ぶ点線
- (v) 積分 $\int du_n d^3\mathbf{x}_n$: 点線で結ばれた頂点ごとに行う

というように少し変更される。

系の相互作用が空間並進対称性をもつような 2 体相互作用のみであれば、 $\mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}; u', \mathbf{x}')$ に対する Fourier 級数展開

$$\mathcal{G}_0^\beta(u - u', \mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{\beta V} \sum_{l, \mathbf{k}} \tilde{\mathcal{G}}_0^\beta(\mathbf{k}, \tilde{\omega}_l) e^{i[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \tilde{\omega}_l(u - u')]}$$

のように v にも Fourier 級数展開を定義できて $(\mathbf{k}, \tilde{\omega}_l)$ 表示に移ることができる。

$$v(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(u - u') = \frac{1}{\beta V} \sum_{l, \mathbf{q}} \tilde{v}(\mathbf{q}) e^{i[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \tilde{\omega}_l(u - u')]}$$

これらの展開を代入した摂動展開の各項について、Feynman 図の点線の両端の頂点に対応する $(u_1, \mathbf{x}_2), (u_2, \mathbf{x}_2)$ を先に積分した際に生じるデルタ関数は、

$$\int_0^\beta du_1 e^{-i(\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_2 + \tilde{\omega}_l)u_1} \int_V d^3 \mathbf{x}_1 e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}_1} = \beta V \delta_{l_1+l, l_2} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \mathbf{k}_2}$$

$$\int_0^\beta du_2 e^{-i(\tilde{\omega}_3 - \tilde{\omega}_4 - \tilde{\omega}_l)u_2} \int_V d^3 \mathbf{x}_2 e^{i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4 - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}_2} = \beta V \delta_{l_3, l_4+l} \delta_{\mathbf{k}_3-\mathbf{q}, \mathbf{k}_4}$$

というようになる¹²⁾ので、 $(\mathbf{k}, \tilde{\omega}_l)$ 表示での Feynman 則もまた変更が必要で、次のようになる。

$(\mathbf{k}, \tilde{\omega}_l)$ 表示での Feynman 則

- (i) 頂点：つながった実線と点線に対応した $\tilde{\mathcal{G}}_0^\beta(\mathbf{k}, \tilde{\omega}_l), \tilde{v}(\mathbf{q}, \tilde{\omega}_l)$ について、線種を問わず入る線と出ていく線ごとで波数・松原周波数の和をとると両者が等しくなるように引数の値を制限する。
- (ii) 実線： $-\tilde{\mathcal{G}}_0^\beta(\mathbf{k}, \tilde{\omega}_l)$
- (iii) 実線がつながってできたループが奇数個なら、 ζ が乗じられる。
- (iv) 点線： $-\tilde{v}(\mathbf{q})$
- (v) つながった実線・点線：対応する因子を掛け合わせて、それぞれの因子の引数について (i) の条件を満たす範囲で) 和をとる。
- (vi) 点線の本数 n ： $(\beta V)^{-n}$

大分配関数は (1.4.3) によりグランドポテンシャル $J(T, \mu; V)$ と関係づけられるため、(2.5.18) から、

$$e^{-\beta(J-J_0)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \exp \left[- \int du d^3 \mathbf{x} \int du' d^3 \mathbf{x}' \frac{\delta}{\delta \Psi(u, \mathbf{x})} \mathcal{G}_0^\beta(u, \mathbf{x}; u', \mathbf{x}') \frac{\delta}{\delta \bar{\Psi}(u', \mathbf{x}')} \right]$$

$$\times \left[- \int du'' d^3 \mathbf{x}'' \mathcal{H}_1(\Psi, \bar{\Psi}) \right]^n \exp \left[\int_0^\beta du'' \int_V d^3 \mathbf{x}'' (\bar{\eta} \Psi + \bar{\Psi} \eta) \right] \Bigg|_{\Psi=\bar{\Psi}=\eta=\bar{\eta}=0}$$

という $J(T, \mu; V)$ に対する摂動展開公式が得られる ($J_0(T, \mu; V)$ は相互作用がない系のグランドポテンシャル)。一方、右辺をダイアグラム展開した際には、既約部分をもつ Feynman 図の性質から

$$(\text{右辺}) = \left(\begin{array}{c} \text{可能な全ての} \\ \text{Feynman 図} \end{array} \right) = \sum_n \frac{1}{n!} \left(\begin{array}{c} \text{可能な全ての} \\ \text{既約な Feynman 図} \end{array} \right)^n = \exp \left(\begin{array}{c} \text{可能な全ての} \\ \text{既約な Feynman 図} \end{array} \right)$$

となっているため、グランドポテンシャルの摂動展開の際には、

グランドポテンシャルの摂動展開における Feynman 図の書き方 (1., 2. は大分配関数と同じ)

3'. 独立した部分のない、既約な図形となるもののみ描く。

が成り立つ。

12) 表記の規則は以下の通り：

- $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, l_1, l_2$ は (u_1, \mathbf{x}_1) に、 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, l_3, l_4$ は (u_2, \mathbf{x}_2) にそれぞれつながる \mathcal{G}_0^β の Fourier 成分の波数および松原周波数の添字
- \mathbf{q}, l は注目した点線に対応する v の Fourier 成分 $\tilde{v}(\mathbf{q})$ の波数および松原周波数の添字
- $i = 1, 2, 3, 4$ に対して、 $\tilde{\omega}_i$ は添字 l_i で指定される松原周波数 $\tilde{\omega}_{l_i}$

(2.5.18) を用いることで温度 Green 関数の摂動展開公式も導かれ、因果 Green 関数の場合とほぼ同様に Feynman 図を描いて Feynman 則で式と対応させることができる。

(u, \boldsymbol{x}) 表示での Feynman 則 (続き) —

(vi) 元の \mathcal{G}_0^β の引数 $(u, \boldsymbol{x}), (u', \boldsymbol{x}')$: 実線が 1 本しかつながらない頂点。 (u, \boldsymbol{x}) に対応する頂点に入る向き、 (u', \boldsymbol{x}') に対応する頂点が出ていく向きの実線とつながる。

($\boldsymbol{k}, \tilde{\omega}_l$) 表示での Feynman 則 (続き) —

(vii) 外の頂点にのびる実線 (外線) : 元の $\tilde{\mathcal{G}}^\beta$ の引数 $(\boldsymbol{k}, \tilde{\omega}_l)$ をもった $\tilde{\mathcal{G}}_0^\beta$

温度 Green 関数の摂動展開における Feynman 図の書き方 —

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

2.5.5 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II部 量子多体系各論 I：電子多 体系

第 3 章 Fermi 流体論

第 4 章 固体結晶中の電子多体系

本章では、常に以下の 2 点を仮定する。

- 電子と原子核イオン、および電子同士の相互作用は電磁場が媒介するが、その変化は電子運動の時間スケールに比べて非常に早い。よって各相互作用は電子・イオンの位置にのみ依存したポテンシャルで表せる。
- 格子点上の原子核イオンは電子に比べて非常に重く、運動の時間スケールが長いため、イオンは格子点で静止しているとみなす。

4.1 固体電子の 1 粒子状態とバンド描像

磁場のない 3 次元固体結晶中の電子のハミルトニアンを、電子間相互作用を無視して書き下すと次のようになる¹⁾。

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_V d^3\mathbf{x} \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}) \quad (4.1.1)$$

ポテンシャル $V(\mathbf{x})$ を形成する原子核イオンは格子上に配列しており、

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

という周期関数で表される。 \mathbf{R} は格子ベクトル、 \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, 3$) は基本格子ベクトルと呼ばれる。基本格子ベクトルに対しては

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

を満たす基本逆格子ベクトル \mathbf{b}_i ($i = 1, 2, 3$) を次式のように与えることができる。

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

\mathbf{b}_i から定義される逆格子ベクトル $\mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3$ ($m_i \in \mathbb{Z}$) は、任意の n_i, m_i ($i = 1, 2, 3$) に対して

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(n_1 m_1 + n_2 m_2 + n_3 m_3)$$

を満たす。

4.1.1 Bloch 状態

逆格子ベクトル \mathbf{G} により、周期関数 $V(\mathbf{x})$ の Fourier 級数展開を次のように表せる。

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

1) Coulomb ゲージ $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ を課している。磁場なしの条件 $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ と合わせると $\mathbf{A} = 0$ が導かれる。

ただし u.c. は $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ が 3 辺をなす平行六面体内での積分を表し、この領域を基本格子という。
この展開表式と $\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ の Fourier 級数展開 (1.3.4) を (4.1.1) に用いると、

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_V \frac{d^3\mathbf{x}}{V} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \sum_{m_1,m_2,m_3} \tilde{V}_{(m_1,m_2,m_3)} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} \right) e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{x}/\hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}',\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma} \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} + \sum_{m_1,m_2,m_3} \tilde{V}_{(m_1,m_2,m_3)} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{p}'+\hbar\mathbf{G}} \right) \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}',\sigma} \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m_1,m_2,m_3} \sum_{m'_1,m'_2,m'_3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + \tilde{V}_{(m_1-m'_1,m_2-m'_2,m_3-m'_3)} \right) \\ &\quad \times \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}^\dagger \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}'),\sigma}\end{aligned}$$

とわかる。3 つ目の等号では、 \mathbf{p}, \mathbf{p}' が $\hbar\mathbf{G}$ だけずれる項のみ和の中で値をもつことに注目して、

$$\begin{aligned}\mathbf{p} &\equiv \hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G}), \quad \mathbf{p}' \equiv \hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \\ (\mathbf{G} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3, \mathbf{G}' = m'_1\mathbf{b}_1 + m'_2\mathbf{b}_2 + m'_3\mathbf{b}_3)\end{aligned}$$

というように和を走らせる添字を分離している²⁾。 \mathbf{k} は系の体積 $V = L^3$ に対して

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

を満たす波数で、その和の範囲は $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ で 3 辺が指定される平行六面体内 (基本逆格子) にとるのが自然だが、実用上 $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 周りでの逆格子の Wigner-Seitz セルにとることがほとんどである。後者は (第 1) Brillouin ゾーンとも呼ばれ、体積は基本逆格子に等しい。よって Brillouin ゾーン内の \mathbf{k} の数は

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

というように系に含まれる基本格子数に等しい。

$\tilde{V}_{(m_1,m_2,m_3)}$ の定義から、

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

であるので、

$$\frac{\hbar}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + \tilde{V}_{(m_1-m'_1,m_2-m'_2,m_3-m'_3)}$$

は、 $\mathbf{G} = (m_1, m_2, m_3)$ を行、 $\mathbf{G}' = (m'_1, m'_2, m'_3)$ を列のそれぞれ添字だと見れば Hermite 行列になっていて、スペクトル分解

$$\frac{\hbar}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + \tilde{V}_{(m_1-m'_1,m_2-m'_2,m_3-m'_3)} = \sum_n \epsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}'}^* \quad (4.1.2)$$

が可能である。また固有値 $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ は実数である。この分解を用いるとハミルトニアンが

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{m_1,m_2,m_3} \sum_{m'_1,m'_2,m'_3} \left(\sum_n \epsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}'}^* \right) \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}^\dagger \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}'),\sigma} \\ &\equiv \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})\end{aligned}$$

2) 等号の前後で $\mathbf{G} \rightarrow \mathbf{G} - \mathbf{G}'$ で取り直していることに注意。

と表せることがわかり、新たな生成消滅演算子

$$\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \equiv \sum_{m_1, m_2, m_3} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}, \quad \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \equiv \sum_{m_1, m_2, m_3} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}^\dagger \quad (4.1.3)$$

に対応する 1 粒子状態 $|\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}\rangle$ が系の 1 粒子固有状態になるとわかる。この 1 粒子状態は Bloch 状態と呼ばれる。

$u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}$ は固有ベクトルの第 \mathbf{G} 成分として、次の直交関係を満たす。

$$\sum_{m_1, m_2, m_3} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}}^* = \delta_{nn'}$$

この直交性を $\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma})$ に用いると、

$$\begin{aligned} \{\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma})\} &= \sum_{m_1, m_2, m_3} \sum_{m'_1, m'_2, m'_3} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'}^* \left\{ \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}'+\mathbf{G}'),\sigma}, \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}^\dagger \right\} \\ &= \sum_{m_1, m_2, m_3} \sum_{m'_1, m'_2, m'_3} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'}^* \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \quad \left(\because \left\{ \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{p}',\sigma}^\dagger \right\} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \right) \\ &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{nn'} \end{aligned}$$

というように、異なる n の間での Bloch 状態は \mathbf{k} が同じでも直交することがわかる。このように固体結晶中の電子は Brillouin ゾーン内で互いに直交する複数のエネルギー分散をもつ。各分散関係はエネルギー準位として帯をなすことから、固体結晶中の電子のエネルギー構造はバンド構造とも呼ばれる。

ポテンシャルがない自由電子系の場合にも Bloch 状態が

$$\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) = \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}, \quad \epsilon_{n\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \quad \left(\begin{array}{l} n = (m_1, m_2, m_3) \\ \mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \end{array} \right)$$

というように定義できるが、Brillouin ゾーン端や $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ では異なるバンドに属する Bloch 状態が縮退している。ポテンシャルがある場合には RS 摂動論 (2.1 節参照) で見たようにこの縮退が解けるため、バンド構造にはエネルギーギャップが存在している。

種々の演算子の Bloch 基底表示

$u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}$ はまた固有ベクトルの完全性から n の和について

$$\sum_n u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}}^* = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$$

が成り立つので、(4.1.3) は $\hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger$ について解くことができる。

$$\hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma} = \sum_n u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \quad \hat{a}_{\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{G}),\sigma}^\dagger = \sum_n u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$$

この表示を用いると、運動量演算子

$$\hat{\mathbf{p}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}$$

の $\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$ による表示

$$\hat{\mathbf{p}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \sum_{\mathbf{G}} \hbar(\mathbf{k} + \mathbf{G}) u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k},\sigma})$$

が得られるが、 V が十分大きいことから \mathbf{k} を連続変数とみなして、 \mathbf{k} での微分ができるとすると、この表式は

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{m}{\hbar} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \left[\nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} + (\epsilon_{n\mathbf{k}} - \epsilon_{n'\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \right] \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k},\sigma})$$

と表せる：(4.1.2) に $u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}$ の n と \mathbf{G} についての直交性を用いると

$$\epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*$$

とわかるため、両辺 \mathbf{k} で微分すると、

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \delta_{nn'} &= \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*) \end{aligned}$$

が導かれる。右辺の第1項以外は、また (4.1.2) より

$$\begin{cases} \frac{\hbar}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}'} = \epsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} \\ \frac{\hbar}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m'_1-m_1, m'_2-m_2, m'_3-m_3)} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}'}^* = \epsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \end{cases}$$

が成り立つため、

$$\begin{aligned} &\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*) + \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} \tilde{V}_{(m_1-m'_1, m_2-m'_2, m_3-m'_3)} \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*) \\ &= \sum_{\mathbf{G}} [\epsilon_{n\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} (u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*) + \epsilon_{n'\mathbf{k}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*] \\ &= (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* + \epsilon_{n\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \right) \\ &= (\epsilon_{n'\mathbf{k}} - \epsilon_{n\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \end{aligned}$$

とまとめられる。よって右辺の第1項以外を左辺に移項することで望みの表式が得られる。

また、 $\hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{p},\sigma}$ と $\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x})$ は (1.3.4) のように Fourier 変換の関係にあったので、 $\Psi_\sigma(\mathbf{x}), \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x})$ についても $\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}), \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$ による表示が得られる。

$$\begin{cases} \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}) = \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{m_1, m_2, m_3} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}} \right] \\ \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{m_1, m_2, m_3} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \right] \end{cases}$$

この表示を用いれば、(1.3.3) より位置演算子 \hat{x} が

$$\hat{x} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}' \in \text{BZ}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma}) \left[\sum_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \int_V \frac{d^3\mathbf{x}}{V} \mathbf{x} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{x}} \right]$$

と表されるとわかる。 \mathbf{k} を連続変数とみて \mathbf{k} での微分ができるとすると上式は、

$$\hat{x} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}' \in \text{BZ}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma}) \left[\sum_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \int_V \frac{d^3\mathbf{x}}{V} i \nabla_{\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{x}} \right]$$

と表せて、さらに \mathbf{k} の和を積分とみなして部分積分の要領で $\nabla_{\mathbf{k}}$ を \mathbf{x} の積分の外に移すと、

$$\begin{aligned} & -i \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}' \in \text{BZ}} \nabla_{\mathbf{k}} [\hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})] \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma}) \left[\sum_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \int_V \frac{d^3\mathbf{x}}{V} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{x}} \right] \\ & + \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}' \in \text{BZ}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k}',\sigma}) \left[-i \sum_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} u_{n'\mathbf{k}',\mathbf{G}'} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \int_V \frac{d^3\mathbf{x}}{V} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{x}} \right] \end{aligned}$$

という 2 つの項が生じる。どちらの項も \mathbf{x} の積分で $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ が生じ、さらに第 1 項は $u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}$ の直交性で $\delta_{nn'}$ も生じるので、最終的に次のようにまとめられる³⁾。

$$\hat{x} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{n,n'} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{a}^\dagger(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) \left(i \nabla_{\mathbf{k}} \delta_{nn'} - i \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^* \right) \hat{a}(\varphi_{n'\mathbf{k},\sigma})$$

\hat{x}, \hat{p} の表式に共通して現れた

$$A_{nn'}(\mathbf{k}) \equiv -i \sum_{\mathbf{G}} u_{n'\mathbf{k},\mathbf{G}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}^*$$

という因子には、 $u_{n\mathbf{k},\mathbf{G}}$ が固有ベクトルとして位相の自由度をもつことからゲージ変換を定義することができて、2.4 節の位相幾何・多様体論的な解析手法を適用することができる。

4.1.2 Wannier 状態

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

$\hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}$, $\hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ は定義域である Brillouin ゾーンにおいて周期境界条件を満たしているので、離散 Fourier 変換を $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ を用いて

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

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

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

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

3) $\hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma})$ の Heisenberg 演算子が $e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} = \hat{a}(\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}) e^{-iE_{n\mathbf{k}} t/\hbar}$ となることを用いると、 \hat{x}, \hat{p} の Heisenberg 演算子の間に次が成り立つことが確認できる。

$$\frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \frac{1}{m} \hat{p}(t)$$

というように与えられるため、異なるバンド n および格子点 \mathbf{R} に依存する Wannier 状態は直交するとわかる。このことから Wannier 状態は各バンドで格子点周りに局在するような 1 粒子状態を表していると考えられる。

$\hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ によるハミルトニアン表現

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_n \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \epsilon_{n\mathbf{k}} \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{n\mathbf{k},\sigma}$$

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

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

を用いると、

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

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

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

というように各格子点に局在した状態が系の 1 粒子固有状態になり、電子が完全にポテンシャルに束縛されて原子系を形成していることを意味している⁴⁾。 $|\varphi_{n\mathbf{k},\sigma}\rangle$ と同様に $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ も \mathbf{k} に関して周期境界条件を満たしているため、

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

はその離散 Fourier 成分になっているが、この量は電子が $\boldsymbol{\delta}$ 離れた格子点に飛び移る遷移確率に関係している (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

$$t_n(\boldsymbol{\delta}) = \begin{cases} \epsilon_n & (\boldsymbol{\delta} = \mathbf{0}) \\ t_n & (\boldsymbol{\delta} = \pm \mathbf{a}_j, j = 1, 2, 3) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

では、離散 Fourier 逆変換より

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

というようにエネルギー分散が \cos で表される。このような場合を強束縛模型という。

4) $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ を定義したスペクトル分解 (4.1.2) の左辺において \tilde{V} が大きくなると \mathbf{k} の寄与が小さくなることから、ポテンシャル振幅が大きいほど $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ の \mathbf{k} 依存性が弱まるとわかるので、確かに物理的描像にも符合する。

種々の演算子の Wannier 基底表示

4.1.3 電子間の Coulomb 相互作用

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。

$$V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}$$

この相互作用を 2 体演算子として場の演算子を用いて表すと、

$$\begin{aligned} \hat{V} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\sigma, \sigma'=\uparrow, \downarrow} \int_V d^3\mathbf{x} \int_V d^3\mathbf{x}' \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ \times \left[\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{x}') \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}) - \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{x}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{x}) \right] \end{aligned}$$

となる。

第 5 章 電子-格子相互作用

原子核の運動はポテンシャルの変化として電子多体系と相互作用をもつ。この章ではその取扱いと効果を考える。

第 6 章 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電子多体系のふるまいを考える。光の影響は、電子多体系ではポテンシャルの変化として取り入れられるが、さらに電子多体系の分極・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。

第III部 量子多体系各論II：スピン 多体系

付録 A 1 粒子系の量子力学

A.1 角運動量代数

量子力学において角運動量は回転対称性の生成子として以下に示すような代数構造をもっている。

$$[\hat{J}^\alpha, \hat{J}^\beta] = i\hbar \sum_{\gamma=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}^\gamma \quad (\text{A.1.1})$$

ここで、 $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$ であり、 $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ は完全反対称テンソルで $\epsilon_{xyz} = 1$ である。以下ではこの代数構造に基づいた一般化角運動量の数理的扱いを見る。

A.1.1 一般化角運動量の代数

(A.1.1) から、

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

となり、 \hat{J}^2, \hat{J}^z は同時固有状態をもつことがわかる。さらに、 $\hat{J}^\pm \equiv \hat{J}^x \pm i\hat{J}^y$ という演算子を定義すると、

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

となるため、 \hat{J}^z が固有値 $\hbar m$ を持つ状態 $|m\rangle$ に対して、

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

と、 \hat{J}^\pm は昇降演算子の役割を果たすことがわかる。また、 \hat{J}^2 は \hat{J}^\pm を用いると、

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

と表せる。 \hat{J}^\pm 同士の交換関係

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

とこのことを突き合わせて、 \hat{J}^z の固有値が最大値 j をとる固有状態 $|j\rangle$ を考えると、 $\hat{J}^+ |j\rangle = 0$ となるべきなので、

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

となることがわかる。 $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^\pm] = 0$ であること¹⁾から、 \hat{J}^\pm を作用させて移り変わることができる任意の \hat{J}^z の固有状態 $|m\rangle$ ($m = j, j-1, \dots$) も $\hat{\mathbf{J}}^2$ に対し同じ固有値を与えることがわかる。また、 \hat{J}^z の固有値が最小値 $-j'$ をとる固有状態 $|-j'\rangle$ を考えると、 $\hat{J}^- |-j'\rangle = 0$ となるべきなので、

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

となることがわかるから、 $\hat{\mathbf{J}}^2$ の固有値 $j(j+1)$ の固有状態は \hat{J}^z の固有値に関して $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ の $2j+1$ 重に縮退していることがわかる。また、 j は整数または半整数に限られることもわかる。まとめると、 $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^z$ の同時固有状態として、

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad \hat{J}^z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle, \\ j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \quad m = -j, -j+1, \dots, j \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

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

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

A.1.2 角運動量の合成

2つの系それぞれの角運動量 $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$ と全角運動量 $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ の関係を考える。全角運動量も角運動量代数を満たすべきなので、 $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$ に対して (A.1.2) を満たす固有状態 $|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle$ をとり、その合成系の状態として一般に

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

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

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

を得る。よって \hat{J}^z に対する固有値 $\hbar m$ の状態は、 $m = m_1 + m_2$ を満たすように線形結合をとったものになる。 m としてとりうる最大値は $m = j_1 + j_2$ のときで、その状態は、

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

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

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

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

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

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

というように、 $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}^z$ の $j = j_1 + j_2$ の固有状態を求めていくことができる。また、 \hat{J}^z の固有値として二番目に大きいのが $m = j_1 + j_2 - 1$ であり、以降 1 刻みで並んでいくことから、 m の最大値となりうる j も 1 刻みで小さくなっていき、 $j = j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots$ というように固有値をとると考えられる。そこで、 $j = m = j_1 + j_2 - 1$ の固有状態として、

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

とにおいて $\hat{\mathbf{J}}^2$ の $j = j_1 + j_2 - 1$ の固有状態となるように係数を定めれば、これに \hat{J}^- を作用させてすべての $j = j_1 + j_2 - 1$ の同時固有状態 $|j_1 + j_2 - 1, m\rangle$ を求めていくことができる。 $j = |j_1 - j_2|$ の固有状態として、 $m = j_1 - j_2$ となるものは、

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

としかとれず、これ以上小さい j で同様に状態を作ることはいできない。このようにして得られる

$$\begin{aligned} |j, m\rangle &= \sum_{j_1, j_2, m_1, m_2} C_{j_1, j_2, m_1, m_2} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\ (j &= |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2, \quad m = -j, \dots, j) \end{aligned}$$

の展開係数 C_{j_1, j_2, m_1, m_2} を Clebsch-Gordan 係数という。

A.2 Bloch の定理

A.3 Aharonov-Bohm 効果

付録 B 場の古典論

多体系が場を変数にもつ系に読み替えられたことに関連して、場の古典論について説明する。

B.1 場の解析力学

場を変数にとる系の一般的な古典論として、解析力学の処方を説明する。

B.1.1 Lagrange 形式

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

$$S[\varphi] \equiv \int dt L[\varphi, \dot{\varphi}] \quad \left(L[\varphi, \dot{\varphi}] \equiv \int d^3\mathbf{x} \mathcal{L}(\varphi, \nabla\varphi, \dot{\varphi}) \right)$$

についての最小作用の原理が要請される。この積分の境界で 0 になるような φ の変分 $\delta\varphi$ をとると、

$$\begin{aligned} \delta(\nabla\varphi^a) &\equiv \nabla(\varphi^a + \delta\varphi^a) - \nabla\varphi^a = \nabla(\delta\varphi^a) \\ \delta\dot{\varphi}^a &\equiv \frac{\partial}{\partial t}(\varphi^a + \delta\varphi^a) - \frac{\partial\varphi^a}{\partial t} = \frac{\partial(\delta\varphi^a)}{\partial t} \end{aligned}$$

より、作用の変分が

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

と表せて、任意の $\delta\varphi$ について $\delta S = 0$ でなければならないから、

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

が導かれる。ただし、

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

である。(B.1.1) を場 $\varphi(t, \mathbf{x})$ の Euler-Lagrange 方程式といい、系が必ず満たす運動方程式となる。 \mathcal{L} はラグランジアン密度という¹⁾。本来のラグランジアン L は $\varphi, \dot{\varphi}$ の汎関数であり²⁾、それぞれ

-
- 1) 単にラグランジアンと呼ぶことも多いが、この節では呼び分ける。
 - 2) L は φ の全空間にわたる情報を積分により織り込むことで汎関数 $L[\varphi, \dot{\varphi}]$ となっているが、時間方向の積分は行っていないため同時に時間の関数 $L(t)$ にもなっている。よって、 L は汎関数として φ の時間変化の情報は持たないため $\dot{\varphi}$ が φ と独立な引関数となっている。

での汎関数微分 (C.5 節参照) を求めると、

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

とわかる。EL 方程式 (B.1.1) はこの汎関数微分を用いて表すなら次のようになる。

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

\mathcal{L} に任意の関数 $\mathcal{F}(\varphi(t, \mathbf{x}), t, \mathbf{x})$ の時間または空間の 1 階微分 $\partial_\mu \mathcal{F}$ ($\mu = t, x, y, z$) 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 $\partial_\mu \mathcal{F}$ を付け加えられる不定性が存在している。

B.1.2 Hamilton 形式

最小作用の原理を満たす場 $\varphi^a(t, \mathbf{x})$ に対して、正準共役な運動量の場合 $\pi(t, \mathbf{x})$ を

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

で定義する。上式右辺は元々 $\varphi, \dot{\varphi}$ の汎関数微分であったが、最小作用の原理を満たす $\varphi^a(t, \mathbf{x})$ ではこれを逆に解いて $\dot{\varphi}$ を $\pi_a(t, \mathbf{x}), \nabla \pi_a(t, \mathbf{x})$ ($a = 1, 2, \dots, n$) の関数として表すことができる。このとき、

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

に対して、次が成り立つ。

$$\dot{\varphi}^a(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_a} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi_a)} \right), \quad \dot{\pi}_a(t, \mathbf{x}) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi^a} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \varphi^a)} \right) \quad (\text{B.1.3})$$

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

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

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

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

B.1.3 複素場の解析力学

複素数 1 成分の場合 $\psi(t, \mathbf{x}) = \psi^1(t, \mathbf{x}) + i\psi^2(t, \mathbf{x})$ を自由度にもつ系は、実数 2 成分の場合 (ψ^1, ψ^2) を自由度にもつ系として定式化すればよい。その結果、EL 方程式としては

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^1} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi^1)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^1} \right) = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^2} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi^2)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^2} \right) = 0 \quad (\text{B.1.4})$$

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。

の2式が連立することになる。 $\psi = \psi^1 + i\psi^2$, $\nabla\psi = \nabla\psi^1 + i\nabla\psi^2$, $\dot{\psi} = \dot{\psi}^1 + i\dot{\psi}^2$ であるので、Leibniz 則から

$$\frac{\partial}{\partial\psi} = \frac{\partial\psi^1}{\partial\psi} \frac{\partial}{\partial\psi^1} + \frac{\partial\psi^2}{\partial\psi} \frac{\partial}{\partial\psi^2} = \frac{\partial}{\partial\psi^1} - i \frac{\partial}{\partial\psi^2}$$

同様に、

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

が成り立ち、また複素共役 $\bar{\psi} = \psi^1 - i\psi^2$ については、

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

がまた成り立つ。これらの関係から、(B.1.4) と等価な運動方程式として

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\psi)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}} \right) = 0, \quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\bar{\psi}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\bar{\psi})} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\bar{\psi}}} \right) = 0 \quad (\text{B.1.5})$$

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、

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

が導かれる。同様にして

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

も成り立つと示せるため、2式的一方は他方の複素共役であり、等価であるとわかる⁴⁾。

$\psi = \psi^1 + i\psi^2$ の実部と虚部それぞれに対する正準共役運動量の場合

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

を用いて表される正準方程式

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

からも、 $\psi, \bar{\psi}$ を用いた等価な運動方程式を得ようとする、

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

4) ψ と $\bar{\psi}$ の入れ替えで方程式が不変であることから L が $\psi, \bar{\psi}$ の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。

であるために⁵⁾、

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

となるため、

$$\begin{cases} \dot{\psi}(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\pi}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \bar{\pi})} \right), & \dot{\pi}(t, \mathbf{x}) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\psi}} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) \\ \dot{\bar{\psi}}(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \pi)} \right), & \dot{\bar{\pi}}(t, \mathbf{x}) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \psi)} \right) \end{cases} \quad (\text{B.1.6})$$

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、

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

同様にして、

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

が導かれる。よって、(B.1.6)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。さらに、

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

から、その内1式はEL方程式(B.1.5)は等価である。

$$\dot{\pi} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\psi}} + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) \iff \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \bar{\psi})} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} \right) = 0$$

よって正準方程式側で残る1式

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

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。

B.1.4 Noether カレント

ある座標変換 $(t, \mathbf{x}) \rightarrow (t', \mathbf{x}')$ および場の変換 $\varphi(t, \mathbf{x}) \rightarrow \varphi'(t', \mathbf{x}')$ 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

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

5) $\bar{\pi}$ は定義の時点(1番目の等号)では π の複素共役とは限らない。あくまで $\bar{\psi}$ の正準共役な運動量の場合であることを表すために先にこのように表記したに過ぎない。

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、

$$\delta S = \varepsilon \int dt d^3\mathbf{x} \sum_i \frac{d}{dx_i} \left[\sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \varphi^a)} \left(\delta\varphi^a - \sum_j X_j \frac{\partial\varphi^a}{\partial x_j} \right) + \mathcal{L} X_i \right]$$

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、

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

について、

$$\sum_i \partial_i \mathcal{J}_i = 0$$

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

粒子系において、時空の並進対称性からはエネルギー・運動量が保存量として得られていた。このため、時空の並進対称性から導かれる Noether カレントは場を変数にとる系のエネルギー・運動量に対応するものである。 x_j 成分での無限小並進変換

$$x_i \longrightarrow x'_i(\varepsilon) = x_i + \varepsilon \delta_{ij}$$

から導かれる Noether カレント

$$T_{ij}(t, \mathbf{x}) \equiv \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \varphi^a)} \partial_j \varphi^a - \delta_{ij} \mathcal{L}$$

をエネルギー・運動量テンソルといい、保存則は

$$\sum_i \partial_i T_{ij} = 0$$

と表される。各時空成分での微分の物理的意味を考えると、 $T_{ij}(t, \mathbf{x})$ の各成分が次のように解釈できるとわかる。

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{00} = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^a} \dot{\varphi}^a - \mathcal{L} : \text{エネルギー密度} \\ T_{i0} = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \varphi^a)} \dot{\varphi}^a \ (i \neq 0) : \text{エネルギー流の } x_i \text{ 成分} \\ T_{0j} = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^a} \partial_j \varphi^a \ (j \neq 0) : \text{単位体積あたりの運動量の } x_j \text{ 成分} \\ T_{ij} \ (i, j \neq 0) : \text{単位体積あたりの運動量の } x_j \text{ 成分における } x_i \text{ 方向への移行} \end{array} \right.$$

特に T_{00} はハミルトニアン密度 \mathcal{H} に一致するため、粒子系でエネルギーがハミルトニアンで与えられることと確かに符合している。

同様に、粒子系においては空間回転対称性から角運動量が保存量として得られていたから、空間回転対称性から導かれる Noether カレントは場を変数にとる系の角運動量に対応すると考えられる。 x_j ($j \neq 0$) 軸周りでの無限小回転変換

$$x_i \longrightarrow x'_i(\theta) = x_i + \sum_{k=1,2,3} \epsilon_{ijk} \theta x_k$$

(ϵ_{ijk} は完全反対称テンソル、 $\epsilon_{123} = 1$)

から導かれる Noether カレントは

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{ij}(t, \mathbf{x}) &= \sum_{k,l=1,2,3} \epsilon_{jkl} x_k \left[\sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} \partial_l \varphi^a - \delta_{il} \mathcal{L} \right] \\ &= \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi^a)} (\mathbf{x} \times \nabla \varphi^a)_j - \mathcal{L} \sum_{k=1,2,3} \epsilon_{ijk} x_k \end{aligned}$$

で与えられ、その保存則は

$$\sum_i \partial_i \mathcal{J}_{ij} = 0$$

と表される。各時空成分での微分の物理的意味を考えると、 $\mathcal{J}_{ij}(t, \mathbf{x})$ の各成分は次のように解釈される。

$$\begin{cases} \mathcal{J}_{0j} = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}^a} (\mathbf{x} \times \nabla \varphi^a)_j : \text{単位体積あたりの角運動量の } x_j \text{ 成分} \\ \mathcal{J}_{ij} (i \neq 0) : \text{単位体積あたりの角運動量の } x_j \text{ 成分における } x_i \text{ 方向への移行} \end{cases}$$

1 成分複素場 $\psi(t, \mathbf{x}) = \psi^1(t, \mathbf{x}) + \psi^2(t, \mathbf{x})$ を変数に持つ系において偏角成分 (位相) に対する不定性があると仮定すると、無限小変換

$$\psi(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi'(t, \mathbf{x}; \theta) = (1 + i\theta)\psi(t, \mathbf{x}) \quad \therefore \begin{cases} \psi^1(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi^1(t, \mathbf{x}) - \theta \psi^2(t, \mathbf{x}) \\ \psi^2(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi^2(t, \mathbf{x}) + \theta \psi^1(t, \mathbf{x}) \end{cases}$$

に対する対称性が系に存在することになる。この対称性に対応する Noether カレントは、

$$\mathcal{J}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \psi^1)} \psi^2 - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \psi^2)} \psi^1$$

で与えられるので、次の保存則が成り立つとわかる。

$$\sum_i \partial_i \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \psi^1)} \psi^2 - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \psi^2)} \psi^1 \right) = 0$$

特に、上式を全空間にわたって積分することで、

$$\frac{d}{dt} \left[\int d^3 \mathbf{x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^1} \psi^2 - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^2} \psi^1 \right) \right] = 0$$

という保存量が得られる。複素場に特有の事情として、

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\alpha \bar{\psi} \quad \therefore \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^1} = \alpha \psi^2, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^2} = -\alpha \psi^1$$

が成り立っていたので、この保存量は、

$$\int d^3 \mathbf{x} \left[(\psi^1(t, \mathbf{x}))^2 + (\psi^2(t, \mathbf{x}))^2 \right] = \int d^3 \mathbf{x} |\psi(t, \mathbf{x})|^2$$

であることがわかる。

B.2 相対論的な場

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

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

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

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

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、

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

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。

B.2.1 Dirac 場

B.2.2 電磁場

B.3 ゲージ理論

振幅に関係する量のみが物理量を与える複素場においては、その位相成分 (ゲージという) に不定性がある。実際、粒子数保存則には 1 成分複素場の座標 (t, \mathbf{x}) に依存しない大域的なゲージ変換に対する対称性が対応していたのだった。このゲージ不定性を局所的なゲージ変換

$$\psi(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \psi'(t, \mathbf{x}) = e^{i\alpha(t, \mathbf{x})/\hbar} \psi(t, \mathbf{x})$$

に対する対称性にも適用することを考える。

6) 一般には $\text{SO}(1, 3)$ 変換と呼ばれる。

自由 Schrödinger 場に対して局所ゲージ変換を施すと、

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{\text{Sch}} &\longrightarrow \mathcal{L}'_{\text{Sch}} \equiv i\hbar\bar{\Psi}'(t, \mathbf{x})\dot{\Psi}'(t, \mathbf{x}) + \frac{\hbar^2}{2m}\bar{\Psi}'(t, \mathbf{x})\nabla^2\Psi'(t, \mathbf{x}) \\ &= \mathcal{L}_{\text{Sch}} - \left[\dot{\alpha} + \frac{1}{2m}(|\nabla\alpha|^2 - i\hbar\nabla^2\alpha) \right] \bar{\Psi}\Psi + \frac{i\hbar}{m}\bar{\Psi}(\nabla\alpha \cdot \nabla\Psi)\end{aligned}$$

となり、一般に局所ゲージ対称性が満たされないことがわかる。しかし、同じ $\alpha(t, \mathbf{x})$ に対して

$$\varphi(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \varphi'(t, \mathbf{x}) = \varphi(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{e}\dot{\alpha}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \mathbf{A}'(t, \mathbf{x}) = \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{e}\nabla\alpha(t, \mathbf{x})$$

と変換するような場を用いて、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi(t, \mathbf{x}), \quad i\hbar\nabla \longrightarrow i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$$

と置き換えたラグランジアン

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(t, \mathbf{x}) \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{2m}|i\hbar\nabla + e\mathbf{A}(t, \mathbf{x})|^2 \right] \Psi(t, \mathbf{x})$$

は、局所ゲージ変換のもとで Ψ と φ, \mathbf{A} それぞれで生じる変化分がちょうど打ち消し合い、不変に保たれる。この結果を逆に用いて、局所ゲージ対称性の帰結としてゲージ場 $A_\mu = (\varphi, \mathbf{A})$ を導入し、さらにそれらとの相互作用を定めるのがゲージ原理である。実ベクトル場であるゲージ場に Lorentz 対称性を課すと自由ゲージ場のラグランジアンを得ることができるが、 $A_\mu A^\mu = \varphi^2 - |\mathbf{A}|^2$ はゲージ不変でないため、 $m = 0$ としなければならない (B.2.3 項参照)。このような場は電磁場に限らない。

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。

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx, \quad b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx$$

Euler の公式 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ を用いれば、この展開は次のようにまとめられる。

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

C.2.2 Fourier 変換

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

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

であるから、連続極限において

$$\frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \longrightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk$$

と無限和が積分に置き換えて、 \tilde{c}_n を連続関数 $\tilde{f}(k)$ と置きなおすと、

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx, \quad f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{-ikx} dk$$

が成り立つとわかる。前者を Fourier 変換、後者を Fourier 逆変換という。

デルタ関数 $\delta(x)$ は次で定義され、厳密には関数ではなく超関数である。

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

特に、 $f(x) = e^{-ikx}$, $a = 0$ であるときには、

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

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

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

が成り立つことがわかる。

C.2.3 離散 Fourier 変換

次の成分 U_{nm} をもつ N 次正方形行列 U はユニタリ行列である。

$$U_{nm} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i(2\pi nm/N)}$$

実際、 $U^\dagger U$ を各成分ごとに計算してみると、

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

となるため、 $U^\dagger U = I$ である。

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

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

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

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

が成り立つとわかる。

ここで、 $x = (2L/N)m$ を連続変数にとって $f_m \rightarrow f(x)$ とする極限を考えると、和は積分に置き換わり、

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

で Fourier 級数展開の成分 \tilde{c}_n を与える表式になる。(C.2.3) は $e^{-i\frac{2\pi mn}{N}}$ の $n = 1, 2, \dots, N$ での周期性から、 N が偶数なら $N/2$ 、奇数なら $(N-1)/2$ だけ和をとる添え字をずらしてもよいので、

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

が成り立つ。 $\tilde{c}_n = \tilde{f}_n/\sqrt{N}$ であることからこれは Fourier 級数展開 (C.2.1) そのものである。また、前節で見たようにここから $L \rightarrow \infty$ とする極限をとれば Fourier 変換に帰着する。ベクトルからベクトルに変換する点が、関数から関数への変換である Fourier 変換と形式的に似ているため、(C.2.2) は離散 Fourier 変換、(C.2.3) は離散 Fourier 逆変換という。

C.3 Baker-Campbell-Hausdorff の公式・Trotter 積公式

任意の演算子 \hat{A}, \hat{B} に対して、次の関数 $f(t)$ を定義する。

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

t に対して微分すると、

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

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

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

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

C.4 多様体・トポロジーの基礎

C.5 キュムラント展開

C.6 特異値分解

C.7 汎関数解析

参考文献

- [1] A. Altland, B. Simons. Condensed Matter Field Theory. 2nd ed., Cambridge University Press, 2010.
- [2] R. P. Feynman. Statistical Mechanics: A Set Of Lectures. CRC Press, 1998.
- [3] M. E. Peskin, D. V. Schroeder. An Introduction to Quantum Field Theory. CRC Press, 1995.
- [4] P. Phillips. Advanced Solid State Physics. 2nd ed., Cambridge University Press, 2012.
- [5] D. Vanderbilt. Berry Phases in Electronic Structure Theory. Cambridge University Press, 2018.
- [6] 阿部龍蔵. 統計力学 (第2版). 東京大学出版, 1992.
- [7] 井田大輔. 現代解析力学入門. 朝倉書店, 2020.
- [8] 江藤幹雄. 量子力学 I. 丸善出版, 2013.

- [9] 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.
- [10] 坂井典佑. 場の量子論. 裳華房, 2007.
- [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)
- [12] 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)
- [13] 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.
- [14] 田崎晴明. 統計力学 I, II. 培風館, 2008.
- [15] 永長直人. 物性論における場の量子論. 岩波書店, 2014.