断熱定理の証明

永井佑紀

平成 19 年 1 月 23 日

非平衡 Green 関数を求めるための下準備として、相互作用のある系を扱う際に重要な定理である断熱定理[1]について考える。以前のノートでは、相互作用表示と時間発展演算子を概観した。このノートでは、実際に断熱定理を証明する。無限の過去と未来で相互作用のない系を考え、そのハミルトニアンを用いた時間発展演算子が実際の S 行列と関連がつくことによって断熱定理のありがたみがわかってくるようだ。今後、非平衡定常状態と平衡状態の違いを考えるための布石となればよいと考えている。また、このノートでは $\hbar = k_{\mathrm{B}} = 1$ という単位系を用いる。

1 断熱定理

固有値、固有関数がわかっているハミルトニアン H_0 を用いて、ハミルトニアンを

$$H = H_0 + H_1 \tag{1}$$

と表すことができる系の H の固有値、固有関数を求める方法として、断熱定理（adiabatic theorem）がある。

無限の過去 $(t \to -\infty)$ において、ハミルトニアンは H_0 であったとし、相互作用 H_1 を極めてゆっくりと（断熱的に）入れて、現在 $(t = 0)$ にはちょうど強さが H_1 となり、その後時間がたつとだんだん弱くなり、無限の未来 $(t \to 0)$ にはハミルトニアンが再び H_0 になる系

$$H = H_0 + H_1 e^{-\epsilon|t|} \tag{2}$$

を考える。いま、

$$H_0|\bar{0}\rangle = E_0|\bar{0}\rangle \tag{3}$$

、つまり、H_0 の固有関数が $|\bar{0}\rangle$、その固有値が E_0 であり、既知とする[2]。このとき、$U(t, t_0)$ を t_0 から t への時間発展演算子であるとし、

$$\lim_{\epsilon \to 0+} \frac{U_\epsilon(0, -\infty)|\bar{0}\rangle}{\langle\bar{0}|U_\epsilon(0, -\infty)|\bar{0}\rangle} \equiv |0\rangle \tag{4}$$

が存在するならば、

$$H|0\rangle = E|0\rangle \tag{5}$$

が満たされる。つまり、$|0\rangle$ は $H = H_0 + H_1$ の固有関数である。同様に、

$$\lim_{\epsilon \to 0+} \frac{\langle\bar{0}|U_\epsilon(\infty, 0)}{\langle\bar{0}|U_\epsilon(0, \infty)|\bar{0}\rangle} \equiv \langle 0| \tag{6}$$

が存在するならば、$\langle 0|$ は $H = H_0 + H_1$ の固有関数である。なお、$|0\rangle$ という表記は、$|\bar{0}\rangle$ が H_0 の基底状態であったとき $|0\rangle$ は H の基底状態であることから「本来の真空」という意味で用いた。ここで、$|\bar{0}\rangle$ は「自由真空」と呼ばれる。

[1] Gell-Mann-Low（ゲルマン・ロウ）の定理とも呼ばれる。
[2] 実際は固有関数ではなく固有ケットベクトルであるが、ここでは便宜上固有関数という言葉を使っている。

ここで用いた時間発展演算子 U は相互作用表示の演算子である。なお、時間発展演算子の性質:

$$U^\dagger(t,t_0)=U(t_0,t) \tag{7}$$

を用いれば、

$$\langle\bar{0}|U(\infty,0)\to U(0,\infty)|\bar{0}\rangle \tag{8}$$

となるので、

$$U(0,-\infty)|\bar{0}\rangle=U(0,\infty)|\bar{0}\rangle \tag{9}$$

となることが示される。

1.1 断熱定理の証明

まず、無限の過去 $|\bar{0}\rangle$ であった波動関数が $t=0$ で $|\bar{0},\epsilon\rangle_g$ になったとすると、

$$|\bar{0},\epsilon\rangle_g=U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle \tag{10}$$

と書ける。ここで、$U_\epsilon(0,-\infty)$ は時間発展演算子であり

$$\begin{aligned} U_\epsilon(0,-\infty) &= 1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i)^n\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] && (11)\\ &\equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i)^n\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] && (12)\end{aligned}$$

である[3]。また、相互作用のハミルトニアン H_1 は g に比例するとした。ここで、

$$\begin{aligned} U_\epsilon(0,-\infty) &= 1+F_\epsilon(0,-\infty) && (13)\\ F_\epsilon(0,-\infty) &\equiv \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i)^n\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] && (14)\end{aligned}$$

を定義しておく。式 (3) より

$$\begin{aligned} E_0|\bar{0},\epsilon\rangle_g &= U_\epsilon(0,-\infty)E_0|\bar{0}\rangle=U_\epsilon(0,-\infty)H_0|\bar{0}\rangle && (15)\\ H_0|\bar{0},\epsilon\rangle_g &= H_0U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle && (16)\end{aligned}$$

であるから、

$$(H_0-E_0)|\bar{0},\epsilon\rangle_g=[H_0,U_\epsilon(0,-\infty)]|\bar{0},\epsilon\rangle_g \tag{17}$$

という関係式が成り立つ。ここで、

$$\begin{aligned} [H_0,U_\epsilon(0,-\infty)] &= [H_0,1+F_\epsilon(0,-\infty)] && (18)\\ &= [H_0,F_\epsilon(0,-\infty)] && (19)\end{aligned}$$

であることを利用し、

$$[H_0,U_\epsilon(0,-\infty)] = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i)^n\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[[H_0,H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)]] \tag{20}$$

を計算する。相互作用表示の物理量の運動方程式は

$$[H_0,A_\mathrm{I}(t)]=-i\frac{\partial A_\mathrm{I}(t)}{\partial t} \tag{21}$$

[3] $t_i<0$ が常に成り立つので、$-\epsilon|t_i|=\epsilon t_i$ が成り立つ。

であるから、

$$
\begin{aligned}
[H_0, H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] &= [H_0, H_1(t_1)]H_1(t_2)\cdots H_1(t_n) + H_1(t_1)[H_0, H_1(t_2)\cdots H_1(t_n)] \quad (22)\\
&= -i\frac{\partial H_1(t_1)}{\partial t_1}H_1(t_2)\cdots H_1(t_n)\\
&\quad +H_1(t_1)\left([H_0, H_1(t_2)]H_1(t_3)\cdots H_1(t_n) + H_1(t_2)[H_0, H_1(t_3)\cdots H_1(t_n)]\right) \quad (23)
\end{aligned}
$$

のように

$$
[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (24)
$$

を繰り返し使うと

$$
[H_0, U_\epsilon(0, -\infty)] = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i)^n\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}(-i)\mathrm{T}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\{H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\} \quad (25)
$$

が得られる。また、上式において、T 積を和の外側に出すことが可能である。つまり、

$$
\mathrm{T}\left[\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\{H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\}\right] = \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\mathrm{T}\left[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\right] \quad (26)
$$

が成り立つ。これは、微分演算子 $\partial/\partial t_i$ が、ある時間 t_i を含む演算子と T 積に含まれるステップ関数にのみ作用することを注意すれば示すことができる。つまり、

$$
\left(\frac{\partial}{\partial t_i} + \frac{\partial}{\partial t_j}\right)\theta(t_i - t_j) = 0 \quad (27)
$$

が常に成り立つことと、あるステップ関数は必ず二変数 t_i, t_j によって構成されているために $\partial/\partial t_i$,$\partial/\partial t_j$ によって微分されることから、T 積に含まれるステップ関数はすべてキャンセルすることがわかる。よって T 積を和の外側に出すことが可能である。この関係式と、t_i についての微分はすべて同じ結果を与えることを利用すれば、

$$
\begin{aligned}
[H_0, U_\epsilon(0, -\infty)] &= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i)^n\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}(i)^{-1}n\frac{\partial}{\partial t_1}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \quad (28)\\
&= -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\frac{\partial}{\partial t_1}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \quad (29)
\end{aligned}
$$

となる。上式を眺めると、部分積分を実行することができることがわかる。つまり、

$$
\begin{aligned}
[H_0, U_\epsilon(0, -\infty)] &= -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[\frac{\partial H_1(t_1)}{\partial t_1}H_1(t_2)\cdots H_1(t_n)]\\
&= -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}\left[\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_2\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)]\right]_{-\infty}^{0}\\
&\quad +\epsilon\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \quad (30)\\
&= -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_2\cdots dt_n e^{\epsilon(t_2+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(0)H_1(t_2)\cdots H_1(t_n)]\\
&\quad +\epsilon\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \quad (31)\\
&= -H_1(0) - \sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_2\cdots dt_n e^{\epsilon(t_2+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(0)H_1(t_2)\cdots H_1(t_n)]\\
&\quad +\epsilon\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \quad (32)
\end{aligned}
$$

となる。ここで、第一項で $n \to n+1$ という置き換えを行えば

$$\begin{aligned}
[H_0, U_\epsilon(0,-\infty)] &= -H_1(0) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}(-i)^n \int_{-\infty}^{0} \cdots \int_{-\infty}^{0} dt_1 \cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)} \mathrm{T}[H_1(0)H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \\
&\quad + \epsilon \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1} \int_{-\infty}^{0} \cdots \int_{-\infty}^{0} dt_1 \cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)} \mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \qquad (33) \\
&= -H_1(0) - H_1(0)F_\epsilon(0,-\infty) \\
&\quad + \epsilon \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1} \int_{-\infty}^{0} \cdots \int_{-\infty}^{0} dt_1 \cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)} \mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \qquad (34)
\end{aligned}$$

となる。ところで、H_1 がある定数 g に比例している ($H_1 = gK_1$) としたので、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U_\epsilon(0,-\infty)}{\partial g} &= \frac{\partial F_\epsilon(0,-\infty)}{\partial g} \qquad (35) \\
&= \frac{\partial}{\partial g} \sum_{n=1}^{\infty} g^n \frac{1}{n!}(-i)^n \int_{-\infty}^{0} \cdots \int_{-\infty}^{0} dt_1 \cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)} \mathrm{T}[K_1(t_1)\cdots K_1(t_n)] \qquad (36) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} n g^{n-1} \frac{1}{n!}(-i)^n \int_{-\infty}^{0} \cdots \int_{-\infty}^{0} dt_1 \cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)} \mathrm{T}[K_1(t_1)\cdots K_1(t_n)] \qquad (37) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} n g^{-1} \frac{1}{n!}(-i)^n \int_{-\infty}^{0} \cdots \int_{-\infty}^{0} dt_1 \cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)} \mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \qquad (38) \\
&= g^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1}(-i) \int_{-\infty}^{0} \cdots \int_{-\infty}^{0} dt_1 \cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)} \mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \qquad (39) \\
&= -ig^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!}(-i)^{n-1} \int_{-\infty}^{0} \cdots \int_{-\infty}^{0} dt_1 \cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)} \mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \qquad (40)
\end{aligned}$$

であるから、式 (34) の第二項は

$$i\epsilon g \frac{\partial U_\epsilon(0,-\infty)}{\partial g} \qquad (41)$$

に等しい。よって、式 (17) は

$$(H - E_0)|\bar{0}, \epsilon\rangle_g = i\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} |\bar{0}, \epsilon\rangle_g \qquad (42)$$

となる。したがって、

$$|X_\epsilon\rangle = \frac{U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle}{\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle} = \frac{1}{\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle} |\bar{0}, \epsilon\rangle_g \qquad (43)$$

に対しては式 (42) の両辺に $1/\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle$ をかけて

$$\begin{aligned}
(H - E_0)|X_\epsilon\rangle &= i\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} |\bar{0}, \epsilon\rangle_g \frac{1}{\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle} \qquad (44) \\
&= i\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} |X_\epsilon\rangle + i\epsilon g |\bar{0}, \epsilon\rangle_g \frac{\frac{\partial}{\partial g}\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle}{(\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle)^2} \qquad (45) \\
&= i\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} |X_\epsilon\rangle + |X_\epsilon\rangle \left(i\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} \log\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle \right) \qquad (46) \\
H|X_\epsilon\rangle &= i\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} |X_\epsilon\rangle + \left(E_0 + i\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} \log\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle \right) |X_\epsilon\rangle \qquad (47)
\end{aligned}$$

となる。また、式 (42) の左から $\langle\bar{0}|$ をかけ、

$$\langle\bar{0}|(H - E_0)|\bar{0}, \epsilon\rangle_g = i\epsilon g \frac{\partial}{\partial g} \langle\bar{0}|\bar{0}, \epsilon\rangle_g \qquad (48)$$

とし[4]、$\langle\bar{0}|\bar{0},\epsilon\rangle_g$ で割ると

$$\langle\bar{0}|(H-E_0)|X_\epsilon\rangle = i\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}\ln\langle\bar{0}|\bar{0},\epsilon\rangle_g \tag{49}$$

となるので、式 (47) に代入すると

$$H|X_\epsilon\rangle = i\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}|X_\epsilon\rangle + \left(E_0 + \langle\bar{0}|(H-E_0)|X_\epsilon\rangle\right)|X_\epsilon\rangle \tag{50}$$

となる。ここで、式 (4) が存在するとして、$\epsilon \to 0$ という極限をとると、右辺第一項は零となり、

$$H|0\rangle = \left(E_0 + \langle\bar{0}|(H-E_0)|0\rangle\right)|0\rangle \tag{51}$$

となるので、$|0\rangle = \lim_{\epsilon\to 0}|\bar{0},\epsilon\rangle_g/\langle\bar{0}|\bar{0},\epsilon\rangle_g$ は H の固有関数であり、

$$E = E_0 + \langle\bar{0}|(H-E_0)|0\rangle \tag{52}$$

となる（証明終わり）。

式 (9) を示すためには、式 (6) が固有関数であることを示せばよいが、以上の議論とほとんど同様の議論で示すことができる。なお、この断熱定理で用いた「自由真空」の存在する系は非現実的な系であり、現実的な状況において問題を処理できるかという問題は別にある。この問題は、実際の系における物理量の期待値が「自由真空」を用いて表現できることを示すことで解決される。つまり、$t \to \pm\infty$ でゼロとなる相互作用項が存在する際の時間発展演算子 U によって表される物理量の期待値が、実際の系における S 行列を用いた物理量の期待値が等しくなることを示せばよく、実際には $U(\infty,-\infty)$ が S 行列に等しいことを示せばよい。

参考文献

高野文彦、「多体問題」新物理学シリーズ　（培風館）

ザイマン、「現代量子論の基礎」（丸善プラネット）

大貫義郎、「場の量子論」　岩波講座　現代の物理学　（岩波書店）

M. Gell-Mann and F. Low: Phys. Rev. **84** (1951) 350-354.

[4] $\langle\bar{0}|$ は g に依らないので微分の中に入れられる。