相互作用表示と時間発展演算子

永井佑紀

平成 19 年 1 月 15 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]について考えたい。しかしその前に、このノートでは相互作用表示と時間発展演算子について考える。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 相互作用表示

Schrodinger 表示、Heisenberg 表示のほかにも便利な表示として相互作用表示というものがある。

1.1 Schrodinger 表示

Schrodinger 表示では、波動関数は

$$i\frac{\partial|\phi\rangle}{\partial t} = H|\phi\rangle \tag{1}$$

に従って変化する。簡単のため H が時間に依存しないとし、時刻 t_0 の波動関数 $|\phi(t_0)\rangle$ を初期条件とすれば、時刻 t の波動関数は $|\phi(t)\rangle$ は

$$|\phi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)}|\phi(t_0)\rangle \tag{2}$$

となる。この表示における任意の物理量の時刻 t での期待値は、物理量の演算子を A とすると

$$\langle\phi(t)|A|\phi(t)\rangle = \langle\phi(t_0)|e^{iH(t-t_0)}Ae^{-iH(t-t_0)}|\phi(t_0)\rangle \tag{3}$$

となる。Schrodinger 表示では波動関数が時間に依存し、演算子は時間に依存しない。

1.2 Heisenberg 表示

式 (3) は、演算子 A が時間発展しているとも考えることができる。そのような考え方による表示法を Heisenberg 表示と呼ぶ。Heisenberg 表示では、波動関数と演算子は

$$|\phi_{\mathrm{H}}\rangle = e^{iHt}|\phi\rangle \tag{4}$$

$$A_{\mathrm{H}} = e^{iHt}Ae^{-iHt} \tag{5}$$

と書くことができる。ここで $t_0 = 0$ において両方の表示が一致するものとした。上式より、Heisenberg 表示では波動関数は時間変化せず、演算子 A_{H} が

$$i\frac{\partial A_{\mathrm{H}}}{\partial t} = [A_{\mathrm{H}}, H] \tag{6}$$

という時間発展することがわかる。

[1] Gell-Mann-Low（ゲルマン・ロウ）の定理とも呼ばれる。

1.3　相互作用表示

次に、

$$H = H_0 + H_1 \tag{7}$$

と置いて $t_0 = 0$ として式 (3) を書き直すと

$$\begin{aligned} \langle\phi(t)|A|\phi(t)\rangle &= \langle\phi(0)|e^{iH_1 t}e^{iH_0 t}Ae^{-iH_0 t}e^{-iH_1 t}|\phi(0)\rangle && (8)\\ &\equiv \langle\phi_{\mathrm{I}}(t)|A_{\mathrm{I}}(t)|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle && (9)\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} |\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle &= e^{iH_0 t}|\phi(t)\rangle = e^{iH_0 t}e^{-iHt}|\phi_{\mathrm{H}}\rangle && (10)\\ A_{\mathrm{I}}(t) &= e^{iH_0 t}Ae^{-iH_0 t} = e^{iH_0 t}e^{-iHt}A_{\mathrm{H}}e^{iHt}e^{-iH_0 t} && (11)\end{aligned}$$

と定義した。このような波動関数と演算子の表示を相互作用表示と呼ぶ。ここで、相互作用表示の波動関数 ϕ_{I} を時間で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle}{\partial t} &= iH_0 e^{iH_0 t}|\phi(t)\rangle + e^{iH_0 t}(-iH)|\phi(t)\rangle && (12)\\ &= -ie^{iH_0 t}H_1 e^{-iH_0 t}|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle && (13)\\ &= -i(H_1)_{\mathrm{I}}(t)|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle && (14)\end{aligned}$$

となり、演算子を時間微分すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_{\mathrm{i}}(t)}{\partial t} &= iH_0 e^{iH_0 t}Ae^{-iH_0 t} + e^{iH_0 t}A(-iH_0)e^{-iH_0 t} && (15)\\ &= iH_0 e^{iH_0 t}Ae^{-iH_0 t} - e^{iH_0 t}Ae^{-iH_0 t}iH_0 && (16)\\ &= -i[A_{\mathrm{I}}(t), H_0] && (17)\end{aligned}$$

となるので、波動関数と演算子は

$$\begin{aligned} i\frac{\partial|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle}{\partial t} &= (H_1)_{\mathrm{I}}(t)|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle && (18)\\ i\frac{\partial A_{\mathrm{I}}(t)}{\partial t} &= [A_{\mathrm{I}}(t), H_0] && (19)\end{aligned}$$

という時間発展に従うことがわかる。

相互作用表示の特徴は、波動関数が H_1 に従って変化し、演算子が H_0 に従って変化するということである。H_1、つまり相互作用が存在しないとき相互作用表示は Heisenberg 表示と等しくなる。また、H_0 が仮に存在しないとすれば相互作用表示は Schrodinger 表示と等しくなる。つまり、相互作用表示の考え方は、ニュートン力学において二体の運動を重心を基準とする系を用いて考えることができるように、H_0 を基準とする系を用いて考えることを意味している[2]。

2　時間発展演算子について

2.1　定義と性質

次に、二つの時刻 t_0 と t における波動関数の関係ついて議論する。時刻 t での波動関数 $|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle$ は式 (2) と式 (10) を用いると

$$\begin{aligned} |\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle &= e^{iH_0 t}e^{-iH(t-t_0)}|\phi(t_0)\rangle && (20)\\ &= e^{iH_0 t}e^{-iH(t-t_0)}e^{-iH_0 t_0}|\phi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle && (21)\\ &= U(t, t_0)|\phi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle && (22)\end{aligned}$$

[2]もちろん、ある空間座標を用いてある慣性系に乗ったということではなく、より一般的な意味での基準系から見たという意味である。

となる。ここで、「時間発展演算子」$U(t,t_0)$ を

$$U(t,t_0) \equiv e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0} \tag{23}$$

と定義した[3]。この演算子は

$$U(t_0,t_0) = 1 \tag{24}$$

を満たし、複素共役をとれば

$$\begin{aligned} U^\dagger(t,t_0) &= (e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0})^\dagger & (25)\\ &= (e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0})^\dagger e^{-iH_0 t} & (26)\\ &= e^{iH_0 t_0} e^{iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t} & (27)\\ &= U(t_0,t) & (28)\end{aligned}$$

であり、

$$U^\dagger(t,t_0)U(t,t_0) = 1 \tag{29}$$

となるので、$U(t,t_0)$ はユニタリー演算子である。また、

$$\begin{aligned} U(t_1,t_3)U(t_3,t_2) &= e^{iH_0 t_1} e^{-iH(t_1-t_3)} e^{-iH_0 t_3} e^{iH_0 t_3} e^{-iH(t_3-t_2)} e^{-iH_0 t_2} & (30)\\ &= e^{iH_0 t_1} e^{-iH(t_1-t_2)} e^{-iH_0 t_2} & (31)\\ &= U(t_1,t_2) & (32)\end{aligned}$$

という性質を持つ。式 (22) と式 (18) より、

$$\begin{aligned} i\frac{\partial|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle}{\partial t} &= i\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t}|\phi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle & (33)\\ &= (H_1)_{\mathrm{I}}(t)|\phi_{\mathrm{I}}(t)\rangle & (34)\\ &= (H_1)_{\mathrm{I}}(t)U(t,t_0)|\phi_{\mathrm{I}}(t_0)\rangle & (35)\end{aligned}$$

となるから、$U(t,t_0)$ は

$$i\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t} = H_1(t)U(t,t_0) \tag{36}$$

という方程式を満たす。ただし、これから先は $(H_1)_{\mathrm{I}}(t)$ を単に $H_1(t)$ と書くことにする。

2.2 逐次近似

両辺を t で積分し、式 (24) を初期条件とすれば

$$U(t,t_0) = 1 - i\int_{t_0}^{t} dt' H_1(t')U(t',t_0) \tag{37}$$

という積分方程式が得られる。この方程式の解は逐次近似によって得ることができる。つまり、左辺を右辺の被積分関数に代入し、

$$\begin{aligned} U(t,t_0) &= 1 - i\int_{t_0}^{t} dt' H_1(t')\left(1 - i\int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t'')U(t'',t_0)\right) & (38)\\ &= 1 - i\int_{t_0}^{t} dt' H_1(t') + (-i)^2\int_{t_0}^{t} dt' H_1(t')\int_{t_0}^{t'} dt'' H_1(t'')U(t'',t_0) & (39)\\ &= 1 - i\int_{t_0}^{t} dt_1 H_1(t_1) + (-i)^2\int_{t_0}^{t} dt_1 H_1(t_1)\int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1(t_2) + \cdots & \\ &\quad \cdots + (-i)^n\int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_1(t_1)\cdots H_1(t_n) + \cdots & (40)\end{aligned}$$

[3]変換関数とも呼ばれる。

とすることで解を $H_1(t)$ のべき級数の形で書くことができる。ここで、積分範囲は

$$t > t_1 > t_2 > t_3 > \cdots > t_{n-1} > t_n > t_0 \tag{41}$$

となっていることと、$H_1(t)$ と $H_1(t')$ は $t \neq t'$ のとき必ずしも可換ではないことに注意する。これらの積分範囲を二次元と三次元の場合を図. 1 に示す。さて、式 (40) の積分範囲は積分の上端に変数が入っているため非常に扱いづ

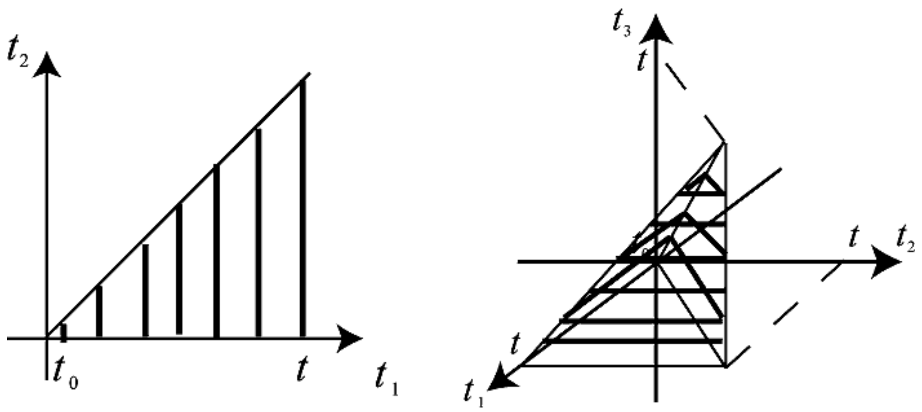

図 1: $U(t, t_0)$ の積分範囲。左：二次元、右：三次元。

らい。そこで、より簡単化した形式で式 (40) を表現することを考える。簡単のため、二変数の積分 t_1, t_2 の場合を考える。積分範囲は図. 1 左であるが、t_2 の積分における t_1 を消去することを考える。被積分関数は $H_1(t_1)H_1(t_2)$ である。ここで、t_1 と t_2 を入れ替えた $H_1(t_2)H_1(t_1)$ を $t_2 > t_1$ である領域で積分した値は、

$$\int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H_1(t_2)H_1(t_1) = \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1(t_1)H_1(t_2) \tag{42}$$

となる[4]。よって、

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1(t_1)H_1(t_2) + \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H_1(t_2)H_1(t_1) = 2\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1(t_1)H_1(t_2) \tag{43}$$

が満たされる。ここでステップ関数 $\theta(x)$ を用いて新しい関数 (T 積):

$$T[H_1(t_1)H_1(t_2)] \equiv H_1(t_1)H_1(t_2)\theta(t_1 - t_2) + H_1(t_2)H_1(t_1)\theta(t_2 - t_1) \tag{44}$$

を用意すれば、式 (43) は

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 T[H_1(t_1)H_1(t_2)] = 2\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1(t_1)H_1(t_2) \tag{45}$$

と積分範囲を変更することができる。三変数の積分の場合も同様に、図 .1 右の斜線領域と同等な 6 つの積分範囲を用意して T 積を用いれば

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_0}^{t} dt_3 T[H_1(t_1)H_1(t_2)H_1(t_3)] = 6\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 H_1(t_1)H_1(t_2)H_1(t_3) \tag{46}$$

が成り立つ。以上から、n 変数積分においては

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n T[H_1(t_1)H_1(t_2)\cdots H_1(t_n)] = n!\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_1(t_1)H_1(t_2)\cdots H_1(t_n) \tag{47}$$

[4]積分変数は任意にとれるため。

が成り立つことがわかる。ゆえに、式 (40) は

$$U(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}(-i)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t} dt_n T[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \tag{48}$$

と書くことができる。この式は積の順序を指定してある以外は普通の exp と同じで、これを「順序をつけた exp」とよぶことがある。そして、

$$U(t,t_0) = T\left[\exp\left\{-i\int_{t_0}^{t} dt' H_1(t')\right\}\right] \tag{49}$$

と書くこともある。

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）