物理量の計算と摂動展開

永井佑紀

平成 19 年 1 月 24 日

以前までのノートで、$H = H_0 + H_1$ の基底状態である「本物の真空」$|0\rangle$ と H_0 の基底状態である「自由真空」$|\bar{0}\rangle$ の関連がつけられることを示した。その結果、物理量の期待値を「自由真空」を用いて計算することが可能となる。物理量の期待値は S 行列によって表され、S 行列を用いて表すことでファインマン・ダイアグラムを用いた摂動展開が可能となる。また、Green 関数も同様に「自由真空」を用いて表すことができるので、同様にファインマン・ダイアグラムを用いることが可能となる。このノートでは基底状態以外に有限温度における物理量の期待値の計算も行う。この場合物理量の期待値は密度行列演算子のトレースを用いて書き表される。有限温度においては、H の系での密度行列演算子 ρ のトレースが H_0 の系での密度行列演算子 ρ_0 のトレースで表されることを示し、Green 関数がファインマン・ダイアグラムによって摂動展開可能となることを示す。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 絶対零度の場合

1.1 物理量の計算

相互作用のある系 ($H = H_0 + H_1$) の基底状態 $|0\rangle$ における物理量 A の期待値は

$$\frac{\langle 0|A_{\mathrm{H}}|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} \tag{1}$$

で与えられる。ここで A_{H} は Heisenberg 表示の演算子である。とくに、ある時刻 t における期待値は

$$\frac{\langle 0|A_{\mathrm{H}}(t)|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} \tag{2}$$

と書ける。この値の計算方法を考える[1]。以前のノートによれば、$|0\rangle$ は H_0 の基底状態である「自由真空」$|\bar{0}\rangle$ で書くことができて

$$|0\rangle = \lim_{\epsilon\to 0} \frac{U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle}{\langle\bar{0}|U_\epsilon(0,-\infty)|\bar{0}\rangle} \tag{3}$$

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

と書ける。なお、表記の簡単化のため、以後 U_ϵ は U と書き、常に $\lim_{\epsilon\to 0}$ を取るものとして約束しておく。上式を式 (2) に代入する。まず分母は

$$\langle 0|0\rangle = \frac{\langle\bar{0}|U(\infty,0)}{\langle\bar{0}|U(0,-\infty)|\bar{0}\rangle}\frac{U(0,-\infty)|\bar{0}\rangle}{\langle\bar{0}|U(0,-\infty)|\bar{0}\rangle} \tag{5}$$

$$= \frac{\langle\bar{0}|U(\infty,-\infty)|\bar{0}\rangle}{|\langle\bar{0}|U(0,-\infty)|\bar{0}\rangle|^2} \tag{6}$$

[1] $A_{\mathrm{H}}(t)$ の基底状態 $|0\rangle$ での期待値は実は t に依らないが、便宜上 t を入れておくとする。

となる。ここで、時間発展演算子の性質 $U(t_1,t_3)U(t_3,t_2)=U(t_1,t_2)$ を用いた。次に分子であるが、相互作用表示 A_{I} と Heisenberg 表示 A_{H} との関係式（$t=0$ で両者が一致する時）

$$A_{\mathrm{I}}(t)=e^{iH_0t}e^{-iHt}A_{\mathrm{H}}(t)e^{iHt}e^{-iH_0t} \tag{7}$$

を時間発展演算子

$$U(t_1,t_2)=e^{iH_0t_1}e^{-H(t_1-t_2)}e^{-iH_0t_2} \tag{8}$$

で書き表すと

$$A_{\mathrm{I}}(t) = U(t,0)A_{\mathrm{H}}(t)U(0,t) \tag{9}$$

$$A_{\mathrm{H}}(t) = U(0,t)A_{\mathrm{I}}(t)U(t,0) \tag{10}$$

となるので、式 (2) の分子を相互作用表示で書くことができる。したがって、分子は

$$\langle 0|A_{\mathrm{H}}(t)|0\rangle = \frac{\langle\bar{0}|U(\infty,0)U(0,t)A_{\mathrm{I}}(t)U(t,0)U(0,-\infty)|\bar{0}\rangle}{|\langle\bar{0}|U(0,-\infty)|\bar{0}\rangle|^2} \tag{11}$$

$$= \frac{\langle\bar{0}|U(\infty,t)A_{\mathrm{I}}(t)U(t,-\infty)|\bar{0}\rangle}{|\langle\bar{0}|U(0,-\infty)|\bar{0}\rangle|^2} \tag{12}$$

となり、結局、物理量 $A_{\mathrm{H}}(t)$ の期待値 (2) は

$$\frac{\langle 0|A_{\mathrm{H}}(t)|0\rangle}{\langle 0|0\rangle}=\frac{\langle\bar{0}|U(\infty,t)A_{\mathrm{I}}(t)U(t,-\infty)|\bar{0}\rangle}{\langle\bar{0}|U(\infty,-\infty)|\bar{0}\rangle} \tag{13}$$

となり、「自由真空」における期待値を計算すればよいことがわかる。ここで

$$S\equiv U(\infty,-\infty) \tag{14}$$

と定義し、必ず $-\infty<t<\infty$ が成り立つことを利用すれば、

$$\frac{\langle 0|A_{\mathrm{H}}(t)|0\rangle}{\langle 0|0\rangle}=\frac{\langle\bar{0}|\mathrm{T}[A_{\mathrm{I}}(t)S]|\bar{0}\rangle}{\langle\bar{0}|S|\bar{0}\rangle} \tag{15}$$

のように T 積を用いて書くことができる。このように書くことで、ファインマン・ダイアグラムを用いて摂動展開を行うことが可能になる。

1.2 Green 関数

Green 関数 $G(x,x')$ ($x=\mathbf{r},t,\ x'=\mathbf{r}',t'$) は定義により

$$G(x,x')=-i\langle\mathrm{T}[\phi(x)\phi^\dagger(x')]\rangle \tag{16}$$

で与えられる。このときの場の演算子 $\phi(x)$ は Heisenberg 表示である。また、$\langle\cdots\rangle=\langle 0|\cdots|0\rangle$ である。これを相互作用表示を用いて書き直すことで、相互作用のないときの基底状態での期待値を用いて書き表すことを考える。前節と比較すると、$A_{\mathrm{H}}(t)$ の代わりに $\mathrm{T}[\phi(x)\phi^\dagger(x')]$ が入っている。$\phi(x)$ と $\phi^\dagger(x')$ は相互作用表示 $\phi_{\mathrm{I}}(x)$、$\phi_{\mathrm{I}}^\dagger(x')$ を用いるとはそれぞれ

$$\phi(x) = U(0,t)\phi_{\mathrm{I}}(x)U(t,0) \tag{17}$$

$$\phi^\dagger(x') = U(0,t')\phi_{\mathrm{I}}^\dagger(x')U(t',0) \tag{18}$$

と書ける。また、前節の議論より

$$\langle\cdots\rangle = \frac{\langle\bar{0}|U(\infty,t)\cdots U(t,-\infty)|\bar{0}\rangle}{\langle\bar{0}|U(\infty,-\infty)|\bar{0}\rangle} \tag{19}$$

$$= \frac{\langle U(\infty,t)\cdots U(t,-\infty)\rangle_0}{\langle S\rangle_0} \tag{20}$$

である。ここで $\langle\cdots\rangle_0$ は H_0 の基底状態である「自由真空」の期待値 $\langle\bar{0}|\cdots|\bar{0}\rangle$ とした。以上から、

$$
\begin{aligned}
G(x,x') &= -i\frac{\langle U(\infty,0)\mathrm{T}[U(0,t)\phi_\mathrm{I}(x)U(t,0)U(0,t')\phi_\mathrm{I}^\dagger(x')U(t',0)]U(0,-\infty)\rangle_0}{\langle S\rangle_0} && (21)\\
&= -i\frac{\langle U(\infty,0)\mathrm{T}[U(0,t)\phi_\mathrm{I}(x)U(t,t')\phi_\mathrm{I}^\dagger(x')U(t',0)]U(0,-\infty)\rangle_0}{\langle S\rangle_0} && (22)\\
&= -i\frac{\langle \mathrm{T}[S\mathrm{T}[U(0,t)\phi_\mathrm{I}(x)U(t,t')\phi_\mathrm{I}^\dagger(x')U(t',0)]]\rangle_0}{\langle S\rangle_0} && (23)\\
&= -i\frac{\langle \mathrm{T}[S\phi_\mathrm{I}(x)\phi_\mathrm{I}^\dagger(x')]\rangle_0}{\langle S\rangle_0} && (24)
\end{aligned}
$$

となる。このような表記ができるために、Wick の定理が使え、ファインマン・ダイアグラムによる摂動展開が可能になるのである。

ここで、式 (22) の物理的意味について考えてみることで式 (24) への変形の理解が容易となる。式 (22) は、$|\bar{0}\rangle$ が時間発展すると考えることで理解できる。つまり、系は $t\to-\infty$ において基底状態が「自由真空」である。時間軸を t_a とし、その後の時間発展を追ってみる。t と t' の大小関係によって時間発展が異なるので、わけて考える。

まず、$t>t'$ のとき。

1. 基底状態は $U(0,-\infty)$ によって $t_a=0$ まで時間発展する。
2. $t_a=0$ での状態は $U(t',0)$ によって $t_a=t'$ へと時間発展し、「測定」$\phi_\mathrm{I}^\dagger(x')$ が行われる。
3. $U(t,t')$ によって $t_a=t'$ から $t_a=t$ まで時間発展し、「測定」$\phi_\mathrm{I}(x)$ が行われる。
4. $U(0,t)$ により $t_a=t$ から $t_a=0$ へと時間発展する。
5. $U(\infty,0)$ により $t_a=0$ から $t_a\to\infty$ へと時間発展し基底状態へと戻る。最後の $U(\infty,0)$ は $U(-\infty,0)$ でのどちらでも構わず、同じ状態へ戻ることが本質である。

次に、$t<t'$ のとき。

1. 基底状態は $U(0,-\infty)$ によって $t_a=0$ まで時間発展する。
2. $t_a=0$ での状態は $U(t,0)$ によって $t_a=t$ へと時間発展し、「測定」$\phi_\mathrm{I}(x)$ が行われる。
3. $U(t',t)$ によって $t_a=t$ から $t_a=t'$ まで時間発展し、「測定」$\phi_\mathrm{I}^\dagger(x')$ が行われる。
4. $U(0,t')$ により $t_a=t'$ から $t_a=0$ へと時間発展する。
5. $U(\infty,0)$ により $t_a=0$ から $t_a\to\infty$ へと時間発展し基底状態へと戻る。最後の $U(\infty,0)$ は $U(-\infty,0)$ でのどちらでも構わず、同じ状態へ戻ることが本質である。

これらの両方ともに言えることは、$-\infty\to\infty$ への時間発展の合間に測定が行われているということである。したがって、T 積の中に $U(\infty,-\infty)$ を入れることで、上記二つの手順を表記したことになり、式 (24) が得られる。$t>t'$ のときの発展を数直線上で示したのは図. 1(a) である。また、$U(-\infty,0)=U(-\infty,\infty)U(\infty,0)$ と書くこともでき、このときは図. 1(b) となり、これらは等価である。

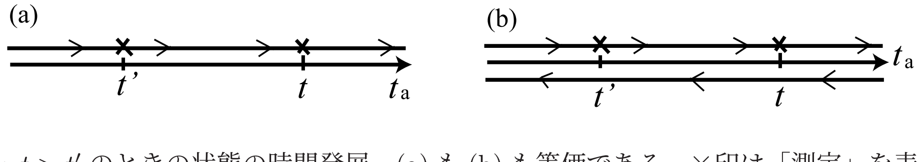

図 1: $t>t'$ のときの状態の時間発展。(a) も (b) も等価である。×印は「測定」を表す。

2　有限温度の場合

2.1　物理量の計算

有限温度においては密度行列演算子 ρ を用いると便利である。つまり、ある物理量 A の期待値は

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\,[\rho A_{\mathrm{H}}] \tag{25}$$

と表すことができる。ここで、

$$\begin{aligned}\rho &\equiv \frac{\exp\{-\beta(H-\mu N)\}}{\Xi} &(26)\\ \Xi &\equiv \mathrm{Tr}\,[\exp\{-\beta(H-\mu N)\}] &(27)\\ \beta &= 1/k_{\mathrm{B}}T &(28)\end{aligned}$$

と置いた。この Ξ は大きな状態和と呼ばれるが、

$$H-\mu N = H_0 + H_1 \tag{29}$$

のとき、H_1 について摂動展開することを考える。まず、時間発展演算子 U を

$$\begin{aligned}U(t,t_0) &= e^{iH_0t}e^{-iH(t-t_0)}e^{-iH_0t_0} &(30)\\ &= e^{H_0\tau}e^{-H(\tau-\tau_0)}e^{-H_0\tau_0} &(31)\\ &\equiv U_\tau(\tau,\tau_0) &(32)\end{aligned}$$

と書き、$\tau = it$ という虚時間を導入する。このとき、

$$\exp\{-\beta(H_0+H_1)\} = e^{-\beta H_0}U_\tau(\beta,0) \tag{33}$$

とおき、

$$\begin{aligned}\Xi_0 &\equiv \mathrm{Tr}\,[\exp(-\beta H_0)] &(34)\\ \langle\cdots\rangle_0 &\equiv \frac{\mathrm{Tr}\,[\exp(-\beta H_0)\cdots]}{\Xi_0} &(35)\end{aligned}$$

と定義すると、式 (27) の Ξ は

$$\Xi = \Xi_0\langle U_\tau(\beta,0)\rangle_0 \tag{36}$$

と書ける。この $U_\tau(\beta,0)$ は $U(t,t_0)$ において $t_0=0$、$t=-i\beta$ とおいたものなので、

$$U_\tau(\beta,0) = 1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta\cdots\int_0^\beta \mathrm{T}_\tau[H_1(\tau_1)\cdots H_1(\tau_n)]d\tau_1\ldots d\tau_n \tag{37}$$

となる[2]。ただし、

$$H_1(\tau) = e^{\tau H_0}H_1e^{-\tau H_0} \tag{38}$$

であり、T_τ は $H_1(\tau_1)\cdots H_1(\tau_n)$ を τ_1, τ_2, $\cdots$, τ_n の大きな順に左から並べる演算子であり、T 積の時間変数が τ に置き換わったようなものに等しい。また、Heisenberg 表示の物理量 A_{H} を虚時間 τ で表すと

$$\begin{aligned}A_{\mathrm{H}} &= U_\tau(0,\tau)A_{\mathrm{I}}(\tau)U_\tau(\tau,0) &(39)\\ A_{\mathrm{I}} &= e^{\tau H_0}Ae^{-\tau H_0} &(40)\end{aligned}$$

である。

[2] $t=i\tau$ という変数変換を行っただけである。

よって、物理量 A の期待値は

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \frac{\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta(H_0+H_1)}A_{\mathrm{H}}(\tau)]}{\Xi} && (41)\\ &= \frac{\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_0}U_\tau(\beta,0)U_\tau^\dagger(0,\tau)A_{\mathrm{I}}(\tau)U_\tau(\tau,0)]}{\Xi_0\langle U_\tau(\beta,0)\rangle_0} && (42)\\ &= \frac{\langle U_\tau(\beta,\tau)A_{\mathrm{I}}(\tau)U_\tau(\tau,0)\rangle_0}{\langle U_\tau(\beta,0)\rangle_0} && (43)\\ &= \frac{\langle \mathrm{T}_\tau[U_\tau(\beta,0)A_{\mathrm{I}}(\tau)]\rangle_0}{\langle U_\tau(\beta,0)\rangle_0} && (44)\end{aligned}$$

となる。これで、相互作用のない系の密度行列演算子 ρ_0 によって、相互作用のある系の物理量の期待値が表せたことになる。よって、有限温度の Wick の定理を用いて期待値を計算することができる[3]。絶対零度における期待値の表式 (15) と見比べると、形式的には $U(\infty,-\infty)$ が $U_\tau(\beta,0)$ へと置き換わっているとみなすことができる。

2.2 温度 Green 関数

温度 Green 関数は場の演算子 $\phi(x)$ を用いて

$$\mathcal{G}(x,x') \equiv -\langle \mathrm{T}_\tau[\phi(x)\phi^\dagger(x')]\rangle \tag{45}$$

と定義されている。絶対零度のときと同様に場の演算子を相互作用表示を用いて表すことで、$\langle\cdots\rangle_0$ という相互作用のない系での期待値として表記したい。前節の議論より、

$$\langle\cdots\rangle = \frac{\langle U_\tau(\beta,0)\cdots\rangle_0}{\langle U_\tau(\beta,0)\rangle_0} \tag{46}$$

である。ここで、

$$\begin{aligned}\phi_{\mathrm{I}}(x) &= e^{\tau K_0}\phi(\mathbf{r})e^{-\tau K_0} && (47)\\ &= e^{\tau K_0}e^{-\tau K}\phi(x)e^{\tau K}e^{-\tau K_0} && (48)\\ &= e^{\tau H_0}e^{-\tau H}\phi(x)e^{\tau H}e^{-\tau H_0} && (49)\\ &= U_\tau(\tau,0)\phi(x)U_\tau(0,\tau) && (50)\\ \phi_{\mathrm{I}}^\dagger(x') &= e^{\tau' K_0}\phi(\mathbf{r}')e^{-\tau' K_0} && (51)\\ &= U_\tau(\tau',0)\phi^\dagger(x')U_\tau(0,\tau') && (52)\\ K_0 &= H_0-\mu N && (53)\end{aligned}$$

である。したがって、前節の $A_{\mathrm{H}}(\tau)$ を $\mathrm{T}_\tau[\phi(x)\phi^\dagger(x')]$ によって置き換えればよいことがわかる。ゆえに、

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(x,x') &= -\frac{\langle U_\tau(\beta,0)\mathrm{T}_\tau[U_\tau(0,\tau)\phi_{\mathrm{I}}(x)U_\tau(\tau,0)U_\tau(0,\tau')\phi_{\mathrm{I}}^\dagger(x')U_\tau(\tau',0)]\rangle_0}{\langle U_\tau(\beta,0)\rangle_0} && (54)\\ &= -\frac{\langle U_\tau(\beta,\tau)\mathrm{T}_\tau[U(0,\tau)\phi_{\mathrm{I}}(x)U_\tau(\tau,\tau')\phi_{\mathrm{I}}^\dagger(x')U_\tau(\tau',0)]\rangle_0}{\langle U_\tau(\beta,0)\rangle_0} && (55)\\ &= -\frac{\langle \mathrm{T}_\tau[U(\beta,0)\phi_{\mathrm{I}}(x)\phi_{\mathrm{I}}^\dagger(x')]\rangle_0}{\langle U_\tau(\beta,0)\rangle_0} && (56)\end{aligned}$$

となり、ファインマン・ダイアグラムを用いた摂動展開が可能となる。

なお、時間発展は、時間軸の虚軸である τ を用いることで表現できる。つまり、$\tau=0$ から $\tau=\beta$ までの時間発展の間に「測定」が行われている。

[3]前のノートにあるように、Wick の定理は相互作用のない系での n 体の T 積をばらすことのできる定理である。

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）

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.