

密度行列演算子の時間発展と物理量の期待値

永井佑紀

平成 19 年 1 月 24 日*

以前のノートにおいて、相互作用のある系での有限温度における物理量の期待値を、相互作用のない系の期待値で表せることを示した。その際、虚時間 $\tau = it$ を導入することで温度 Green 関数の摂動展開の理解を深めた。このノートでは、虚時間を使わない摂動展開の方法をまとめる。具体的には、相互作用表示の密度行列演算子の時間発展によって、相互作用のある系と相互作用のない系のそれぞれの期待値に関係をつける。

1 密度行列演算子の時間発展と運動方程式

まず、密度行列演算子の時間発展について考える。密度行列演算子は、ディラックの表記法のもとでは

$$\rho = \sum_{mn} |m\rangle \rho_{mn} \langle n| \quad (1)$$

と書かれる。ある状態 $|m\rangle$ がハミルトニアン $H = H_0 + H_1$ 時間発展演算子 U_S によって変化すると考えると、

$$|m, t\rangle = U(t, t_0)|m, t_0\rangle \quad (2)$$

$$U_S(t, t_0) \equiv e^{-iH(t-t_0)} \quad (3)$$

となる¹。このとき、Schrodinger 表示では密度行列演算子は時間に依存し

$$\rho(t) = \sum_{mn} |m, t\rangle \rho_{mn} \langle n, t_0| \quad (4)$$

$$= \sum_{mn} U_S(t, t_0)|m, t_0\rangle \rho_{mn} \langle n, t_0| U_S(t_0, t) \quad (5)$$

$$= U_S(t, t_0)\rho(t_0)U_S(t_0, t) \quad (6)$$

となる。なお、Heisenberg 表示においては波動関数が時間に依存しないため密度行列演算子も時間に依存しない。ゆえに、Schrodinger 表示の密度行列演算子は

$$i\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)] \quad (7)$$

という運動方程式に従う²。

ここで、密度行列演算子の相互作用表示について考える。つまり、

$$\rho_I(t) = e^{iH_0 t} \rho(t) e^{-iH_0 t} \quad (8)$$

$$(H_1)_I(t) = e^{iH_0 t} H_1 e^{-iH_0 t} \quad (9)$$

*平成 19 年 6 月 5 日、考え違いをしていたところを大幅修正。

¹以前までのノートで出てきた時間発展演算子 U は相互作用表示であり、間違えないように注意しなければならない。

²ただし、物理量の集団平均をとる際に用いた ρ の定義から運動方程式の厳密な導出を行うためには、ランダムフェーズ仮定や集団平均に関する注意深い議論が必要らしい。

を用いることにする。以後は $(H_1)_I$ は $H_1(t)$ と書くことにする。式 (7) を相互作用表示に変形すると、

$$i \frac{\partial (e^{-iH_0 t} \rho_I(t) e^{iH_0 t})}{\partial t} = [H_0 + e^{-iH_0 t} H_1(t) e^{iH_0 t}, e^{-iH_0 t} \rho_I(t) e^{iH_0 t}] \quad (10)$$

$$ie^{-iH_0 t} (-i[H_0, \rho_I] + \frac{\partial \rho_I}{\partial t}) e^{iH_0 t} = (H_0 + e^{-iH_0 t} H_1(t) e^{iH_0 t}) e^{-iH_0 t} \rho_I(t) e^{iH_0 t} - e^{-iH_0 t} \rho_I(t) e^{iH_0 t} (H_0 + e^{-iH_0 t} H_1(t) e^{iH_0 t}) \quad (11)$$

$$ie^{-iH_0 t} \frac{\partial \rho_I}{\partial t} e^{iH_0 t} = e^{-iH_0 t} H_1(t) \rho_I(t) e^{iH_0 t} - e^{-iH_0 t} \rho_I(t) H_1(t) e^{iH_0 t} \quad (12)$$

$$i \frac{\partial \rho_I(t)}{\partial t} = [H_1(t), \rho_I] \quad (13)$$

という運動方程式を得る。この方程式の解は

$$\rho_I(t) = U(t, t_0) \rho_I(t_0) U(t_0, t) \quad (14)$$

である。これは、この解を式 (13) に代入し、以前のノートで導出した時間発展演算子の運動方程式

$$i \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H_1(t) U(t, t_0) \quad (15)$$

$$-i \frac{\partial U^\dagger(t, t_0)}{\partial t} = U^\dagger(t, t_0) H_1(t) \quad (16)$$

を用いることで

$$i \frac{\partial \rho_I(t)}{\partial t} = i \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} \rho_I(t_0) U(t_0, t) + i U(t, t_0) \rho_I(t_0) \frac{\partial U(t_0, t)}{\partial t} \quad (17)$$

$$= H_1(t) U(t, t_0) \rho_I(t_0) U(t_0, t) - U(t, t_0) \rho_I(t_0) U(t_0, t) H_1(t) \quad (18)$$

$$= [H_1(t), \rho_I(t)] \quad (19)$$

となり式 (13) の解であることが確かめられる。

また、Heisenberg 表示と相互作用表示の関係は、 $t = 0$ において両者が一致する状況では

$$\rho_H = \rho_I(0) = U(0, t_0) \rho_I(t_0) U(t_0, 0) \quad (20)$$

となる。

2 物理量の計算

有限温度において物理量 A の期待値は

$$\langle A_H(t) \rangle = \text{Tr} [\rho_H A_H(t)] \quad (21)$$

で書けるのは、以前のノートの通りである。このノートでは、上式の密度行列演算子を相互作用表示にすることで、相互作用のある系の期待値 $\langle \dots \rangle$ を $\langle \dots \rangle_0$ つまり相互作用のない系における期待値を使って表す。式 (20) を上式に代入し、物理量 A の演算子も相互作用表示すると

$$\langle A_H(t) \rangle = \text{Tr} [U(0, -\infty) \rho_I(-\infty) U(-\infty, 0) U(0, t) A_I(t) U(t, 0)] \quad (22)$$

$$= \text{Tr} [U(0, -\infty) \rho_I(-\infty) U(-\infty, t) A_I(t) U(t, 0)] \quad (23)$$

$$= \text{Tr} [\rho_I(-\infty) U(-\infty, t) A_I(t) U(t, 0) U(0, -\infty)] \quad (24)$$

$$= \langle U(-\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (25)$$

となる。ここで、

$$\text{Tr} [ABC] = \text{Tr} [CAB] = \text{Tr} [BCA] \quad (26)$$

が成り立つことを用いた。

これで、絶対零度のときの物理量の期待値と非常によく似た形式が得られた。絶対零度においては、

$$\langle A_H \rangle = \frac{\langle U(\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0}{\langle U(-\infty, \infty) \rangle_0} \quad (27)$$

は

$$\langle A_H \rangle = \frac{\langle U(-\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0}{\langle U(-\infty, \infty) \rangle_0} \quad (28)$$

と等しかった。

注意。以下の記述は正確ではない。誤植訂正のために以前のまま残しておく。

誤:もし、系が無限の過去と無限の未来において同じ熱平衡状態となっているのならば、つまり、相互作用のない系の熱平衡状態となっていれば、 $t_0 \rightarrow \pm\infty$ から時間発展してきた波動関数は式 (2) より同じ状態となっており、 $U(t, -\infty) = U(t, \infty)$ が言える。すなわち、有限温度の物理量 A の期待値は

$$\langle A_H(t) \rangle = \langle U(-\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (29)$$

$$= \langle U(\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (30)$$

と書くことができる。 $U(-\infty, t) = U(-\infty, \infty)U(\infty, t)$ を用いれば

$$\langle A_H(t) \rangle = \langle U(-\infty, \infty)U(\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (31)$$

$$= \langle U(\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (32)$$

となる。つまり、時間軸を t_a と置くと、熱平衡状態であれば、

1. 相互作用のない系の熱平衡状態が $U(t, -\infty)$ により $t_a \rightarrow -\infty$ から $t_a = t$ へ時間発展し、「測定」 $A_I(t)$ を行う。
2. $U(\infty, t)$ により $t_a = t$ から $t_a \rightarrow \infty$ へ時間発展し、相互作用のない系の熱平衡状態に達する。
3. $U(-\infty, \infty)$ により $t_a \rightarrow \infty$ から $t_a \rightarrow -\infty$ へ時間発展し、最初の熱平衡状態へ戻る。

と、

1. 相互作用のない系の熱平衡状態が $U(t, -\infty)$ により $t_a \rightarrow -\infty$ から $t_a = t$ へ時間発展し、「測定」 $A_I(t)$ を行う。
2. $U(\infty, t)$ により $t_a = t$ から $t_a \rightarrow \infty$ へ時間発展し、相互作用のない系の熱平衡状態に達する。

が等しい。これは、熱平衡状態を考えているかぎり 3. という手順を無視することができることを意味する。

以上以前の記述。

正:絶対零度においては、相互作用の無い無限の過去に縮退の無い状態であれば、相互作用の無い無限の未来では位相因子だけ異なる状態に戻る³。つまり、無限の過去での状態を $|\Psi_0\rangle$ とすると

$$U(\infty, -\infty)|\Psi_0\rangle = e^{iL}|\Psi_0\rangle \quad (33)$$

であれば

$$\langle \Psi_0 | U(\infty, -\infty) | \Psi_0 \rangle = e^{iL} \quad (34)$$

³有限温度ではこのことは言えない。したがって、虚時間を導入し松原 Green 関数を用いて摂動展開できる形にしたのである。

であるから

$$\langle A_H(t) \rangle = \langle U(-\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (35)$$

$$= \langle U(-\infty, \infty) U(\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (36)$$

$$= \langle e^{-iL} U(\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (37)$$

$$= \frac{1}{e^{iL}} \langle U(\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (38)$$

$$= \frac{1}{\langle U(\infty, -\infty) \rangle_0} \langle U(\infty, t) A_I(t) U(t, -\infty) \rangle_0 \quad (39)$$

$$= \frac{\langle T[U(\infty, -\infty) A_I(t)] \rangle_0}{\langle U(\infty, -\infty) \rangle_0} \quad (40)$$

となり摂動展開できる形式に書ける。これは物理的には、時間軸を t_a と置くと、絶対零度であれば、

1. 相互作用のない系の状態が $U(t, -\infty)$ により $t_a \rightarrow -\infty$ から $t_a = t$ へ時間発展し、「測定」 $A_I(t)$ を行う。
2. $U(\infty, t)$ により $t_a = t$ から $t_a \rightarrow \infty$ へ時間発展し、相互作用のない系の状態に達する。
3. $U(-\infty, \infty)$ により $t_a \rightarrow \infty$ から $t_a \rightarrow -\infty$ へ時間発展し、最初の状態へ戻る。

と、

1. 相互作用のない系の状態が $U(t, -\infty)$ により $t_a \rightarrow -\infty$ から $t_a = t$ へ時間発展し、「測定」 $A_I(t)$ を行う。
2. $U(\infty, t)$ により $t_a = t$ から $t_a \rightarrow \infty$ へ時間発展し、相互作用のない系の状態に達する。

が位相因子を除いて等しい。これは、絶対零度を考えているかぎり 3. という手順を無視することができることを意味する。つまり、「逆方向の時間発展」という奇妙な概念を使うことなく通常の T 積を用いても構わないことを意味している。なお、非平衡定常状態においては、この「逆方向の時間発展」が重要となり、T 積 (time-ordering) ではなく contour ordering というものが用いられることになる。

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)

L. V. Keldysh: JETP 20 (1965) 1018.

小栗章、「微小な系の電気伝導：多体効果と非平衡電流に関する理論」ノート 物性若手夏の学校テキスト『物性論研究』 vol.71, pp.449-462 (1998).」