Bussei Kenkyu

物性研究　90－1（2008－4）

講義ノート

量子輸送方程式と非平衡エントロピー[1]

— 場の量子論による非平衡統計力学 —

北海道大学 理学部　北 孝文[2]

(2007年12月31日受理)

場の量子論を用いた非平衡統計力学について解説する。具体的に扱う系は二体相互作用するBose/Fermi粒子系で、松原グリーン関数とそのDyson方程式に関する知識を仮定する。まず、Keldyshグリーン関数を用いた非平衡摂動展開とそのFeynman則について簡潔に説明する。次に、Keldyshグリーン関数のDyson方程式を出発点とし、Wigner表示を用いて量子輸送方程式を導出する。この量子輸送方程式は、スペクトル関数Aと分布関数ϕについての閉じた方程式をなしており、量子非平衡系における確率分布の時間発展を追跡することができる。また、希薄高温極限でBoltzmann方程式になり、ϕをBose/Fermi分布関数で置き換えると平衡状態の遅延/先進グリーン関数に対するDyson方程式に帰着する。つまり、非平衡状態の時間発展を決める方程式が、平衡統計力学を内包する形で得られたことになる。さらに、ϕについての方程式からは、非平衡状態のエントロピー密度に対する連続の方程式も導くことができる。これは、BoltzmannがH定理を証明する際に用いた手法を、量子効果と高次散乱を取り込むように一般化したことになっている。熱力学や平衡統計力学では、「エントロピー増大則」を非平衡な「経路」で直接確認できず、平衡状態の「経路」で迂回してその変化を追認できるのみである。対照的に、ここでは非平衡状態におけるエントロピーの微視的表式が平衡統計力学と矛盾なく得られ、その時々刻々の変化を追跡できるようになった。その他の話題として、荷電系における量子輸送方程式、多体相関の計算法、動的保存則、および輸送方程式と流体力学の関連についても解説する。

1　はじめに

Boltzmannは、1872年、後に彼の名を冠することになる輸送方程式を提出し、さらに、この方程式を用いて、エントロピー増大則に微視的な基礎を与えるH定理を証明した[1]。この方程式は、統計力学建設の突破口を与えたのみならず、非平衡系における確率分布の時間発展を直接追うことができる点できわめて独創的かつユニークで、現代においてもその有用性は失われていない。しかし、その後の統計力学発展の本流は、Boltzmannの原理(1877年)[2]とGibbsによる精密な定式化(1902年)[3]に基づく静的な平衡統計力学に移ったように思える。実際、揺らぎや相

[1]本稿は、北海道大学・名古屋大学・京都大学基礎物理学研究所で行った講義録に手を加えたものである。

[2]E-mail: kita@phys.sci.hokudai.ac.jp

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

転移におけるその後の大きな展開に較べ、非平衡統計力学の発展ははるかに地味であり、「非平衡統計力学は未確立である」と一般に思われているようである。本稿では、「輸送方程式で非平衡系がどこまで記述可能か」という問題意識の下に、輸送方程式論の最近の発展について解説する。

Boltzmann 方程式などの輸送方程式を線型応答理論 [4] と較べるとき、その明らかな利点として、非平衡系における確率分布の時間発展を記述できることが挙げられる。線型応答理論では、微小な外場 (＝平衡状態からのずれの原因) に対する大域的平衡状態の応答を計算する。従って、外場の大きさそのものを決めることは不可能であり、この目的のためには、線型応答理論で計算された輸送係数 (例：粘性係数) を持つような非線形方程式 (例：Navier-Stokes 方程式) を外から持ちこむ必要がある。一方、Boltzmann 方程式は、衝突項の存在により、確率分布関数 f に関する非線型方程式となっており、初期値と境界条件を与えれば原理的に f の時間発展を記述できる。このことは、熱伝導系などの典型的な非平衡系についてもあてはまる。

1970 年代以降に盛んになった非平衡パターン形成の研究 [5] との関連についても言及しておく。この手法の本質は、Navier-Stokes 方程式など保存則に関連した非線形な決定論的方程式を数値的・解析的に解くことにあり、統計力学の本質である確率概念がその時間発展過程において欠如している。一方、Boltzmann 方程式は確率分布 f の時間発展方程式であり、f を求めることにより揺らぎなどの高次相関も原理的に計算可能なのである (以下の第 6 章参照)。このことに関連して、希薄古典気体に関する連続の方程式や Navier-Stokes 方程式および熱伝導方程式は、Boltzmann 方程式から、局所平衡からの 1 次のずれまでを考慮する近似で導出できることを指摘しておく (以下の第 8 章参照)。つまり、Boltzmann 方程式という確率分布 f の発展方程式は、Navier-Stokes 方程式などの非線形な決定論的方程式も内包しており、後者を越えた非平衡系の微視的・統計力学的な記述を可能にする。例えば、流体力学は統計力学と独立した一分野と一般に思われているが、Boltzmann 方程式を用いることで、流体中の揺らぎなどを理論的・統計力学的に考察することもできる。

しかし、Boltzmann 方程式は希薄高温極限という限られた適用範囲でのみ成り立つ方程式であり、Boltzmann によるその導出 [1] も物理的直観に依存する所が多い。この Boltzmann 方程式を量子効果や多体散乱を取り込むように一般化し微視的に確固と基礎づけることで、非平衡系の理論的記述に大きな進展がもたらされると期待してもよいであろう。

この方向における一つの突破口を切り開いたのが、1962 年の Kadanoff と Baym の研究 [6] であると筆者は考える。彼らは、輸送方程式の研究に、グリーン関数 G を用いる場の量子論的手法を持ち込んだ。松原 [7] により統計力学への応用が始められた場の量子論は、摂動展開の系統的な実行とその一般的構造の深い理解を可能にし、蓄積された豊富な研究成果をもつ [8]。Kadanoff と Baym は、この手法を用いて、おおよそ下記の手順により Bose/Fermi 分布関数に対する Boltzmann 方程式を微視的に導出した (詳細は以下の第 3 章を参照)。(i) 左 Dyson 方程式 $G^{-1}G = 1$ と右 Dyson 方程式 $GG^{-1} = 1$ を Wigner 表示に変換する (G はグリーン関数の行列表現、1 は単位行列); (ii) 重心座標について 1 次の勾配展開を行う; (iii) 右 Dyson 方程式を左 Dyson 方程式から差し引く ($G^{-1}G - GG^{-1} = 0$); (iv) 準粒子近似を採用して Wigner 変換の際に現れる変数一つを積分によ

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

り消去する。

しかし、彼らの導出法は、虚時間を変数とする平衡松原グリーン関数を実時間へ解析接続するもので、「非平衡系の発展方程式を得る」という観点からはいささか冗長で難解である。また、左Dyson方程式と右Dyson方程式という全く等価な二つの方程式を差し引き、かつ変数を一つ消去するという手続きに関しても、近似の構造が不明確であるという不満が残る。一体この手続きで失われた情報は何であろうか？また、得られた方程式は閉じた方程式なのであろうか？しかし、輸送方程式の導出にグリーン関数Gを用いる着想はすばらしい。古典Boltzmann方程式の微視的導出としては、Liouville方程式に基づくBogoliubovのものが有名であり[9, 10]、量子系への拡張もBogoliubov, Landau, Vlasov, Silinなどのロシア学派により既に始められていた[10]。KadanoffとBaymの功績は、グリーン関数Gを用いることで、より系統的かつ明瞭な導出を行ったことにあると筆者は考える。一般に、量子統計は、準位の離散化や同種粒子の同等性が自然に導入されるという点で古典統計よりも論理が明快で、かつ、古典統計を高温極限として含む。また、グリーン関数を用いることで、厳密な議論や系統的な近似が可能になる。後にBaymは、Kadanoff-Baymの研究を拡張し、保存則を自動的に満たす近似法(いわゆるΦ微分近似もしくは保存近似)を開発しているが[11]、このようなことも、グリーン関数を使ってこそ可能であったと思われる。ちなみに、物性論のコミュニティで広く知られた(しかし必ずしもよく理解されているとは限らない)このKadanoff-Baymによる量子輸送方程式の導出は、その難解さにも原因があるのであろうが、古典Boltzmann方程式の教科書ではほとんど言及されていないように思われる[12]。

さて、上に述べたKadanoff-Baym理論の第一の欠点は、1964年にKeldyshにより取り除かれた[13]。彼は、2行2列の行列グリーン関数、すなわちKeldyshグリーン関数を用いた実時間摂動展開法を開発した。また、対応するDyson方程式にKeldysh変換を施してその構造を明確にし、さらに、その一成分から上記(i)-(iv)の手続きにより荷電系のBoltzmann方程式を導出している。この摂動展開理論は非平衡系の動的記述に大きな可能性を開くものであったと筆者は考える。しかし、この手法は現在でもその真価に値するほど充分には普及していない。最近では量子ドット系や接合系に良く用いられているが、バルクの非平衡系への適用例は、松原グリーン関数を用いた平衡状態の研究に較べはるかに少ない。この理由としては、摂動展開の具体的な計算法やFeynman則を明快に解説した教科書・レビュー記事があまり無いことが影響しているかもしれない。例えば比較的初期の1976年にLangrethが書いたレビュー記事[14]では、非平衡摂動展開のFeynman則について、ただ一言 "use your own rules; they will work here as well!" としか述べていない。その後最近までいくつかのレビュー記事や教科書が出ている[15, 16, 17]。しかし、そこでも、摂動展開の経路(いわゆるKeldysh経路)やKeldyshグリーン関数およびDyson方程式に関する記述に較べ、Feynman則など摂動展開の実用ツールに関する説明は見劣りする。

Kadanoff-Baym理論の第二の欠点すなわち近似の構造を明確にすることは、近年、Ivanovら[18]により、二体接触相互作用の場合について行われた。左Dyson方程式と右Dyson方程式は本来等価であるが、Wigner表示に移って勾配展開を実行すると見かけ上異なる表現を持つ。そして、このことが$G^{-1}G - GG^{-1} = 0$による輸送方程式導出を可能にした。つまり、勾配展開を有限項で打

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ち切った場合には、初期の等価性が必ずしも保障されないことになる。これは深刻な問題を含んでいる。すなわち、系の時間発展は、本来、左 Dyson 方程式もしくは右 Dyson 方程式のいずれを用いても同じであるが、1 次の勾配展開を行うと、どちらを使うかで時間発展が異なってくる可能性があるのである。Ivanov らは、Kadanoff-Baym による上記の手続き (iii) に関連し、1 次の勾配展開の範囲内で左 Dyson 方程式と右 Dyson 方程式が等価になるような近似法 (Botermans-Malfliet 近似 [19]) を持ち込んだ。そして、(iv) の積分による変数消去の手続きを行わずに、量子効果を残した輸送方程式を導出した。この輸送方程式は、スペクトル関数 A と分布関数 ϕ についての閉じた方程式系をなしており、希薄高温極限で Boltzmann 方程式になり、また、ϕ を Bose/Fermi 分布関数で置き換えると平衡状態の遅延/先進グリーン関数に対する Dyson 方程式に帰着する。これにより、Kadanoff-Baym による手続き (iv) が、状態密度に関連する A の自由度を消去することに等しいことも明らかになった。Botermans-Malfliet 近似はもうひとつの大きな御利益をもたらす。Ivanov らは [18]、このようにして得られた分布関数 ϕ についての方程式から、Boltzmann が H 定理を証明したのと同様の手続きを経て [12]、非平衡系におけるエントロピーの表式とその時間発展方程式を導出した。

しかし、Ivanov らの輸送方程式は衝突積分に「記憶効果」と呼ばれる時空微分項を含んでおり、そこから得られたエントロピーの表式は筆者が得た熱平衡状態におけるエントロピーの厳密な表現 [20] と矛盾する。このことは、彼らの動力学を孤立系という典型例に適用した場合、真の熱平衡状態に漸近して行かないことを意味する。そこで、筆者は Ivanov らの考察を一般の二体相互作用に拡張し、詳細な検討を加えた [21]。そして、衝突積分の「記憶効果」項を取り除くことで、エントロピーの微視的表式が平衡統計力学と矛盾のない形で得られることを示した。また、非平衡系における二体相関の計算法と保存則についても詳細な考察を行った。

これらの研究により、平衡状態と非平衡状態に対する場の量子論を用いた理論的枠組みの関連と違いが明快になった。平衡状態では、Luttinger-Ward による熱力学関数の表現からも明らかなように [22]、すべての熱力学量や一粒子期待値および多体相関が原理的に松原グリーン関数を用いて表現できる。一方、その松原グリーン関数は、Lehmann 表示によりスペクトル関数 A のみの汎関数として表される [8]。つまり、多粒子系の平衡統計力学の課題は、スペクトル関数 A ($\approx$ 状態密度) を決めることにあり、粒子の分布そのものは Bose/Fermi 分布に従う。例えば、近藤効果の本質は、多体相関により低温で Fermi 準位近傍に発達する状態密度のピーク (近藤共鳴ピーク) をいかに記述するかにあった [23]。一方、非平衡状態においては、スペクトル関数 A だけではなく、分布関数 ϕ も自己無撞着に決めなければならない。対応する ϕ についての方程式は、非平衡状態におけるエントロピーの流れの式も内包し、平衡状態において Bose/Fermi 分布関数に帰着する。

統計力学を熱力学に矛盾の無いように構成することで、我々は、熱力学では不可能な状態方程式や輸送係数等の微視的計算法を獲得した。これと同様に、非平衡統計力学を平衡統計力学を内包するように構成することで、非平衡系の微視的扱いが可能になると期待してもよいであろう。新たに得られた A と ϕ についての方程式は、平衡統計力学と矛盾の無いように拡張されており、非平衡系における確率分布の時間発展を記述できる閉じた方程式系をなしている。また、そこからは

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

非平衡エントロピーの微視的表現も得られる。エントロピーは、エネルギーや体積および粒子数などの力学変数とは異なり、熱力学と統計力学を特徴づける唯一の本質的な変数である [24]。「孤立系のエントロピーは増大する」とよく言われる。しかし、熱力学や平衡統計力学では、時々刻々変化する非平衡状態のエントロピーを計算できず、局所平衡系を仮定してそれらを連結させることで近似的に見積もることができるのみである。また、非平衡熱力学でも、エントロピーを現象論的に導入せざるを得ない [25]。上記の研究により、非平衡系におけるエントロピーの微視的表現が得られ、また、それがどのような粗視化の下で定義できるかを明らかにできたと考えている。

本稿では、上記の研究成果を、理論系の修士課程大学院生を念頭において初歩から解説する。具体的に考察するのは二体相互作用する Bose/Fermi 粒子系である。前提とする知識は、松原グリーン関数を用いた平衡状態の摂動展開と Dyson 方程式であるが、その要点は Appendix にまとめておく。非平衡摂動展開は、平衡状態の摂動展開に習熟していれば、ほんの少しの努力で理解可能であると筆者は考える。まず、第 2 章で、Keldysh グリーン関数を用いた非平衡摂動展開とその Feynman 則について簡潔に説明を行う。第 3 章では、Keldysh グリーン関数の Dyson 方程式を出発点として量子輸送方程式を導出し、さらにエントロピーの流れの式を導く。H 定理と平衡状態への漸近についても言及する。第 4 章では、導出した量子輸送方程式をさらに簡略化するための二つの近似法、すなわち準粒子近似と準古典近似について説明する。量子輸送方程式と Boltzmann 方程式との関連もここで明らかになる。以上で本稿は一区切りをなし、第 5 章からは個別に関連する話題を扱う。第 5 章では、電磁場中の荷電粒子系を考察し、ゲージ不変な量子輸送方程式の導出を行う。第 6 章では二体相関の計算法を議論する。第 7 章「Φ 微分近似と保存則」では、動的現象を扱う際に重要となる様々な保存則を、Baym の Φ 微分近似に基づいて考察する。第 8 章では、量子輸送方程式と流体力学との関連について、希薄古典気体を例にとって説明する。第 9 章はまとめと今後の展望および課題について言及する。

Appendix では、初学者を念頭において場の量子論の基本的事項について解説した。まず、Appendix A では、「多粒子系に対する第一量子化法と等価な記述法」としての第二量子化法について説明する。Appendix B では、統計力学で重要となる密度行列の概念を導入し、平衡状態に対してその具体形を求め、さらに第二量子化での表現を与える。Appendix C では、Bloch-de Domimicis の定理の証明を与える。この証明により、定理の成立には大正準集団との仮定は不要であることが明らかになる。Appendix D と F では、松原グリーン関数を用いた熱平衡状態の摂動論を解説した。Appendix D は熱力学ポテンシャルに対する摂動展開とその Feynman 則を扱う。Appendix E では、松原グリーン関数に対する摂動展開を考察し、その一般的性質を明らかにする。Appendix F では、繰り込まれた摂動展開 (あるいは自己無撞着摂動展開) を扱う。具体的には、Luttinger-Ward による熱力学関数の表現 [22] を導出し、系の熱力学ポテンシャルが、松原グリーン関数の汎関数として書き下せることを示す。最後に、Appendix G では、Luttinger-Ward の汎関数を用いて、熱平衡状態におけるエントロピーの表式を導出する。

本稿を読んだ読者に、一般には未だ充分に認識されているとは言い難い「量子輸送方程式を用いた非平衡統計力学」の大きな可能性を感じ取っていただければ幸いである。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

2　非平衡摂動展開

この章では非平衡摂動展開の基礎的事項について説明する。特に、Feynman 則や Dyson 方程式について、松原グリーン関数を用いる平衡系の場合と比較しながら解説する。

2.1　Schrödinger 表示と Heisenberg 表示

通常、Schrödinger 表示と Heisenberg 表示は、時間依存のないハミルトニアンを使って議論される [8]。しかし、本稿で考察するのは時間発展のある系である。そこで、まず、ハミルトニアンも時間変化するような場合について、Schrödinger 表示と Heisenberg 表示をきちんと定義しておくことにする。

ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}(t)$ で記述される系を考える。第二量子化の表示を採用すると、その Schrödinger 方程式は次のようになる。

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{\mathcal{H}}(t)|\Psi(t)\rangle. \tag{1}$$

第二量子化について不慣れな読者は、Appendix A、特に (223) 式を参照されたい。この方程式は次の形式解を持つ。

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{U}}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \tag{2}$$

ただし、t_0 は初期時刻であり、また、$\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)$ は次式で定義されている。

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{U}}(t,t_0) &\equiv 1+\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\hat{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\mathcal{H}}(t_2)\cdots\hat{\mathcal{H}}(t_n)\\ &= T\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{\mathcal{H}}(t_1)\,\mathrm{d}t_1\right].\end{aligned} \tag{3a}$$

最後の表式に現れる T は、置換対称性を考慮して左から時間の大きい順に場の演算子を並べ変えるいわゆる T 演算子である [8]。この $\hat{\mathcal{U}}$ が実際に Heisenberg の運動方程式 $i\hbar\mathrm{d}\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)/\mathrm{d}t = \hat{\mathcal{H}}(t)\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)$ を満たすことは、(3a) 式の第一番目の表式を微分することで簡単に示せる。一方、$\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)$ のエルミート共役演算子を $\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,t_0)$ と表すと、その具体的表式は次のようになる。

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,t_0) &\equiv 1+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\hat{\mathcal{H}}(t_n)\cdots\hat{\mathcal{H}}(t_2)\hat{\mathcal{H}}(t_1)\\ &= T^a\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t}^{t_0}\hat{\mathcal{H}}(t_1)\,\mathrm{d}t_1\right].\end{aligned} \tag{3b}$$

ここで T^a は、右から時間の大きい順に場の演算子を並べ変える操作を行う。$\hat{\mathcal{U}}^\dagger$ が Heisenberg の運動方程式 $-i\hbar\mathrm{d}\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,t_0)/\mathrm{d}t = \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,t_0)\hat{\mathcal{H}}(t)$ を満たすことは、第一番目の表式を微分すれば納得できる。$\hat{\mathcal{U}}$ と $\hat{\mathcal{U}}^\dagger$ は以下の性質を持つ。

$$\hat{\mathcal{U}}(t_0,t_0) = \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t_0,t_0) = 1, \tag{4a}$$

$$\hat{\mathcal{U}}(t,t_1)\hat{\mathcal{U}}(t_1,t_0) = \hat{\mathcal{U}}(t,t_0), \tag{4b}$$

$$\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,t_0)\hat{\mathcal{U}}(t,t_0) = 1. \tag{4c}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

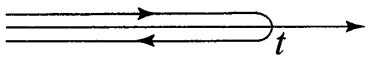


図 1: 演算子の期待値の評価に現れる経路

(4b) 式が成立することは、両辺が $t = t_1$ で同じ値を持ち、かつ、t についての同じ一階微分方程式を満たすことから分かる。一方、(4c) 式は、等式が $t = t_0$ で成立し、かつ、両辺の t 微分が共に 0 となることから明らかである。(4c) 式より $\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,t_0) = [\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)]^{-1}$ がわかる。従って、$\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)\hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,t_0) = 1$ も成立することになる。

(2) 式で初期時刻を $t_0 = -\infty$ と選ぶと、演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ の $|\Psi(t)\rangle$ についての期待値 $\mathcal{O}(t)$ が、$\hat{\mathcal{U}}$ を用いて以下のように表せる。

$$\mathcal{O}(t) = \langle\Psi(t)|\hat{\mathcal{O}}|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(-\infty)|\hat{\mathcal{O}}_{\rm H}(t)|\Psi(-\infty)\rangle, \tag{5}$$

$$\hat{\mathcal{O}}_{\rm H}(t) \equiv \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,-\infty)\hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{U}}(t,-\infty). \tag{6}$$

(5) 式の最後の表式を右から左に見ていくと、次のように解釈できる。まず、$-\infty$ から t まで波動関数を $\hat{\mathcal{U}}$ で時間発展させ、演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ を作用させた後、t から $-\infty$ まで $\hat{\mathcal{U}}^\dagger = \hat{\mathcal{U}}^{-1}$ で (逆) 時間発展させ、$t = -\infty$ での波動関数との内積を取る。この時間発展の経路は図 1 のようにあらわすことができる。ここで、行きと帰りの経路がそれぞれ時間軸の上下にあるのは、両者を明確に区別するという便宜上の理由からであり、実際の変化は実の時間軸上で行われることに注意しておく。

2.2 相互作用表示と Keldysh 経路

ハミルトニアンが $\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0(t) + \hat{\mathcal{H}}'(t)$ と二つの部分に分割できる場合を考える。そして、$\hat{\mathcal{H}}_0(t)$ に対応する時間発展演算子を

$$\hat{\mathcal{U}}_0(t,t_0) \equiv 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} {\rm d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} {\rm d}t_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} {\rm d}t_n \hat{\mathcal{H}}_0(t_1)\hat{\mathcal{H}}_0(t_2)\cdots\hat{\mathcal{H}}_0(t_n), \tag{7}$$

で導入する。$\hat{\mathcal{U}}_0$ は運動方程式 $i\hbar{\rm d}\hat{\mathcal{U}}_0(t,t_0)/{\rm d}t = \hat{\mathcal{H}}_0(t)\hat{\mathcal{U}}_0(t,t_0)$ を満たす。次に、$\hat{\mathcal{U}}_0^\dagger$ と $\hat{\mathcal{U}}$ を用いて、演算子 $\hat{\mathcal{S}}$ を次式で定義する。

$$\hat{\mathcal{S}}(t,t_0) \equiv \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t,t_0)\hat{\mathcal{U}}(t,t_0). \tag{8}$$

この両辺に $i\hbar{\rm d}/{\rm d}t$ を作用させ、$\hat{\mathcal{U}}_0^\dagger$ と $\hat{\mathcal{U}}$ の運動方程式および $\hat{\mathcal{U}}_0(t,t_0)\hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t,t_0) = 1$ を用いると、$\hat{\mathcal{S}}$ が次の微分方程式を満たすことを確認できる。

$$i\hbar\frac{{\rm d}\hat{\mathcal{S}}(t,t_0)}{{\rm d}t} = \hat{\mathcal{H}}'_{\rm I}(t)\hat{\mathcal{S}}(t,t_0). \tag{9}$$

ここで、$\hat{\mathcal{H}}'_{\rm I}(t)$ は $\hat{\mathcal{H}}'(t)$ の相互作用表示を意味し、具体的に次式で定義されている。

$$\hat{\mathcal{H}}'_{\rm I}(t) \equiv \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t,t_0)\hat{\mathcal{H}}'(t)\hat{\mathcal{U}}_0(t,t_0). \tag{10}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

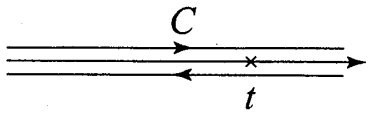


図 2: Keldysh 経路

(9) 式は次の形式解を持つ。

$$\hat{\mathcal{S}}(t,t_0) \equiv 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}t_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n \hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{I}}(t_1)\hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{I}}(t_2)\cdots\hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{I}}(t_n). \tag{11}$$

$\hat{\mathcal{U}}_0$ と $\hat{\mathcal{S}}$ が (4) 式の $\hat{\mathcal{U}}$ と同じ性質を持つことは明らかである。

(8) 式と $\hat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t,t_0) = \hat{\mathcal{U}}^{-1}(t,t_0)$ より、$\hat{\mathcal{U}}(t,t_0) = \hat{\mathcal{U}}_0(t,t_0)\hat{\mathcal{S}}(t,t_0)$ がわかる。この式を (5) 式に代入し、$\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(t_2,t_1)\hat{\mathcal{S}}(t_2,t_1) = 1$ と $\langle\Psi(-\infty)|\Psi(-\infty)\rangle = 1$ を用いると、$\mathcal{O}(t)$ が次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}(t) &= \langle\Psi(-\infty)|\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(t,-\infty)\hat{\mathcal{O}}_{\mathrm{I}}(t)\hat{\mathcal{S}}(t,-\infty)|\Psi(-\infty)\rangle \\
&= \frac{\langle\Psi(-\infty)|\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(\infty,-\infty)\hat{\mathcal{S}}(\infty,t)\hat{\mathcal{O}}_{\mathrm{I}}(t)\hat{\mathcal{S}}(t,-\infty)|\Psi(-\infty)\rangle}{\langle\Psi(-\infty)|\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(\infty,-\infty)\hat{\mathcal{S}}(\infty,-\infty)|\Psi(-\infty)\rangle} \\
&= \frac{\langle\Psi(-\infty)|\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(t,-\infty)\hat{\mathcal{O}}_{\mathrm{I}}(t)\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(\infty,t)\hat{\mathcal{S}}(\infty,-\infty)|\Psi(-\infty)\rangle}{\langle\Psi(-\infty)|\hat{\mathcal{S}}^{\dagger}(\infty,-\infty)\hat{\mathcal{S}}(\infty,-\infty)|\Psi(-\infty)\rangle}.
\end{aligned}$$

ここで、$\hat{\mathcal{O}}_{\mathrm{I}}(t) \equiv \hat{\mathcal{U}}_0^{\dagger}(t,-\infty)\hat{\mathcal{O}}\hat{\mathcal{U}}_0(t,-\infty)$ である。第 2 番目と 3 番目の表式における時間発展は、共に、$t = -\infty$ から ∞ に行って戻ってくる図 2 の経路 C (Keldysh 経路) 上で行われている。そして、$\hat{\mathcal{O}}$ を作用させる時刻 t は、第 2 番目の式では往路にあるのに対し、3 番目の式では復路にある。しかし、どちらの表式を使っても同じ結果が得られる。従って、$\mathcal{O}(t)$ は次のようにも書ける。

$$\mathcal{O}(t) = \frac{\langle\Psi(-\infty)|T_C\hat{\mathcal{S}}_C\hat{\mathcal{O}}_{\mathrm{I}}(t)|\Psi(-\infty)\rangle}{\langle\Psi(-\infty)|T_C\hat{\mathcal{S}}_C|\Psi(-\infty)\rangle}. \tag{12}$$

ただし、T_C、置換対称性を考慮して右から経路 C 上の行程順に場の演算子を並べ替える演算子であり、$\hat{\mathcal{O}}_{\mathrm{I}}(t)$ の時刻 t は往路と復路のどちらにあってもよく、また、$\hat{\mathcal{S}}_C$ は次式で定義されている。

$$\hat{\mathcal{S}}_C \equiv T_C \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_C \hat{\mathcal{H}}'_{\mathrm{I}}(t^C)\,\mathrm{d}t^C\right]. \tag{13}$$

このようにして、平衡状態の松原グリーン関数を用いた摂動展開法 (Appendix D 参照) で、積分経路を虚時間上の区間 $[0,-i\hbar\beta]$ ($\beta \equiv 1/k_{\mathrm{B}}T$; T は温度) から実時間上の往復経路 C に変えることにより、実時間摂動展開法が得られることが分かった。

2.3　ハミルトニアン

$t_0 = -\infty$ において相互作用のない同種 Bose/Fermi 粒子の集団を考える。そして、$t > -\infty$ において外場 U を印加すると共に相互作用を断熱的に加え、系を力学的に時間発展させる。時刻 t

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

におけるハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0(t) + \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}a(t). \tag{14}$$

ここで、$\hat{\mathcal{H}}_0$ は外場 U を含む相互作用のないハミルトニアン、$\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ は二体の粒子間相互作用、また、$a(t)$ は断熱因子であり、例えば階段関数 $\theta(t)$ を用いて $a(t) \equiv \theta(-t)\mathrm{e}^{0+t} + \theta(t)$ で与えられる。スピンの自由度は当面無視する。$\hat{\mathcal{H}}_0$ および $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ の具体形は、場の演算子 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ を用いる第二量子化法で次のように表せる。

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}t) - \mu \right] \hat{\psi}(\mathbf{r})\, \mathrm{d}^3 r, \tag{15a}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\rm int} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3 r_1 \int \mathrm{d}^3 r_1'\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1')V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')\hat{\psi}(\mathbf{r}_1')\hat{\psi}(\mathbf{r}_1). \tag{15b}$$

ただし、$\hat{\mathbf{p}}$、m、μ は、それぞれ運動量演算子、粒子の質量、および化学ポテンシャルである。また、$V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')$ は相互作用ポテンシャルで、$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1'|$ のみに依存し次のように Fourier 変換できるものとする。

$$V(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} V_{\mathbf{p}}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \tag{16}$$

2.4 密度行列と演算子の期待値

系は $t_0 = -\infty$ において大正準集団で表される温度 T の熱平衡状態にあったとする。その密度行列 $\hat{\rho}_0$ は、$\hat{\mathcal{H}}_0(-\infty)$ の固有値 E_ν と固有ベクトル $|\Psi_\nu(-\infty)\rangle$ を用いて次のように表せる。

$$\hat{\rho}_0 = Z^{-1} \sum_\nu \mathrm{e}^{-E_\nu/k_{\rm B}T} |\Psi_\nu(-\infty)\rangle\langle\Psi_\nu(-\infty)|, \qquad Z \equiv \sum_\nu \mathrm{e}^{-E_\nu/k_{\rm B}T}. \tag{17}$$

この表現に不慣れな方は Appendix B の (251) 式を参照されたい。ただし、ここでのハミルトニアン (14) は最初から大正準集団を扱っていることに注意しておく。

時刻 $t > -\infty$ における演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ の期待値 $\mathcal{O}(t)$ は、(12) 式を初期の確率分布で平均することにより、次のように表せる。

$$\mathcal{O}(t) = \langle \hat{\mathcal{O}}_{\rm H}(t) \rangle = \frac{\langle T_C \hat{\mathcal{S}}_C \hat{\mathcal{O}}_{\rm I}(t) \rangle}{\langle T_C \hat{\mathcal{S}}_C \rangle}. \tag{18}$$

ただし、$\langle \cdots \rangle$ は $\hat{\rho}_0$ での期待値を意味する。初期状態が相互作用のない大正準集団であることから、この期待値の計算には Bloch-de Dominicis の定理 [26] が適用できる (Bloch-de Dominicis の定理については Appendix C 参照)。従って、$\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ の効果が (18) 式の第二の表式を用いて摂動論的に評価でき、$\hat{\mathcal{O}}_{\rm I}(t)$ とつながった Feynman 図形のみが期待値に寄与することになる。

本筋からは逸れるが、ここで次のことを指摘しておくのも有益であろう。Bloch-de Dominicis の定理は、元来、相互作用のない大正準集団の期待値について証明された [26]。しかし、この前提条件は緩和させることができる (詳しくは Appendix C 参照)。このことを見るために、$\hat{\mathcal{H}}_0(-\infty)$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を対角化する表示 $\hat{\mathcal{H}}_0(-\infty)=\sum_k \xi_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$ (ξ_k は μ から測った一粒子固有エネルギー) を用いて、$\hat{\rho}_0$ を次のように書き換える。

$$\hat{\rho}_0=\prod_k \frac{\sum_{n_k} |n_k\rangle p_k^{n_k}\langle n_k|}{\sum_{n_k} p_k^{n_k}}, \qquad |n_k\rangle=\frac{(\hat{c}_k^\dagger)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}}|0\rangle. \tag{19}$$

ここに、$p_k=\mathrm{e}^{-\xi_k/k_\mathrm{B}T}$ は、量子数 k で指定される一粒子状態に一個の粒子が存在する相対確率である。次の恒等式が証明できる。

$$\hat{c}\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle p^n\langle n|=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\hat{c}^\dagger)^{n-1}}{(n-1)!}|0\rangle p^n\langle 0|\hat{c}^n=p\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\hat{c}^\dagger)^n}{n!}|0\rangle p^n\langle 0|\hat{c}^{n+1}=p\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle p^n\langle n|\hat{c}.$$

この恒等式とそのエルミート共役な式を用いると、(19) 式の密度行列に対して

$$\hat{c}_k\hat{\rho}_0=p_k\hat{\rho}_0\hat{c}_k, \qquad \hat{c}_k^\dagger\hat{\rho}_0=\frac{1}{p_k}\hat{\rho}_0\hat{c}_k^\dagger, \tag{20}$$

が成り立つことを示せる。これらの $p\neq \mathrm{e}^{-\xi_k/k_\mathrm{B}T}$ についても成立する恒等式を用いると、p_k が正値である任意の $\hat{\rho}_0$ に関して Bloch-de Dominicis の定理を証明できる [26]。従って、この定式化においては、相互作用のない一般の非平衡初期分布から系を発展させることが可能である。

$t>-\infty$ に生じる二体相互作用による粒子間の散乱は、外場のない孤立系においては、ほとんどすべての初期分布について、平均衝突時間程度の時間が経った後に熱平衡状態をもたらすと期待される。このことは、Orban と Bellemans [27] による古典的な分子動力学シミュレーションの結果からも明らかであり、また実際にも、原子気体を用いた Bose-Einstein 凝縮の実験における蒸発冷却の過程など [28]、広範囲に用いられている。そして、Boltzmann の観点では、多粒子系の純力学的な時間発展において「圧倒的多数の初期状態が系に熱平衡分布をもたらす」というこの事実こそが、時間の非可逆性の起源に他ならない [29]。また、この多粒子系における「圧倒的多数の初期状態が巨視的に同じ時間発展をする」という事実は、孤立系の場合だけではなく、系が熱浴と相互作用する場合にも成り立つであろう。

以下ではグリーン関数を用いた力学的な非平衡統計力学の定式化を行ってゆくが、そこでは、初期条件の与えられた単一の力学系ではなく、分布関数と期待値を扱うことになる。そして、この分布関数と期待値は、初期状態に関して平均操作を行った結果を表す、言い換えると、上記の圧倒的多数の初期状態に関するものである、と理解するのが妥当であると筆者は考える。従って、この定式化においては、系を純力学的に時間発展させるにも関わらず、必然的に「時間の矢」すなわち「非可逆性」が現れる。また、温度の概念は定式化に不要で、それは、系が熱平衡状態に至ったときの分布関数の特徴として現れてくるのみである。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

2.5 グリーン関数と Dyson 方程式

以上の準備のもとに、(14) 式の $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}a(t) \equiv \hat{\mathcal{H}}'(t)$ を摂動として系の時間発展を追う。そして、(18) 式を評価するために次のグリーン関数を導入する。

$$G(1^C,2^C) \equiv -\frac{i}{\hbar}\langle T_C \hat{\psi}_{\rm H}(1^C)\hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(2^C)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle T_C \hat{\mathcal{S}}_C \hat{\psi}_{\rm I}(1^C)\hat{\psi}^\dagger_{\rm I}(2^C)\rangle_{\rm c}. \tag{21}$$

ここで、$1^C \equiv \mathbf{r}_1 t_1^C$ の上つき添え字 C は、演算子 $\hat{\psi}_{\rm H}(1^C) \equiv \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t_1^C,-\infty)\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)\hat{\mathcal{U}}(t_1^C,-\infty)$ と $\hat{\psi}_{\rm I}(1^C) \equiv \hat{\mathcal{U}}_0^\dagger(t_1^C,-\infty)\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)\hat{\mathcal{U}}_0(t_1^C,-\infty)$ の $\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)$ が往路と復路のいずれにあるかを区別する必要から生じた。また、最後の式における下つき添え字 c は、外線とつながった Feynman 図形のみからの寄与を意味する。以下では $\hat{\psi}_{\rm I}$ と $\hat{\psi}^\dagger_{\rm I}$ の添え字 I を省略する。

C 上の摂動展開は平衡状態の場合と同様に実行でき、ただ経路を松原形式の $[0,-i\hbar\beta]$ から C に変化させれば良いだけである。従って、このグリーン関数は次の Dyson 方程式を満たす。

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1^C} - \hat{H}_1^{(0)}\right) G(1^C,2^C) - \int \Sigma(1^C,3^C)G(3^C,2^C)\,{\rm d}3^C = \delta(1^C,2^C). \tag{22}$$

ただし、

$$\hat{H}_1^{(0)} \equiv \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(1) - \mu \tag{23}$$

は (15a) 式に現れる一体のハミルトニアンを表し、また、Σ は自己エネルギーである。平衡状態の摂動展開と Dyson 方程式については Appendix D から F を参照されたい。

2.6 Keldysh グリーン関数

次に、C 上で定義されたグリーン関数を、通常の時刻 $-\infty < t < \infty$ を用いた形式に書き換える。そのために、まず、経路 C を往路 C_1 と復路 C_2 にわけ、C 上での積分を次のように表す。

$$\int_C {\rm d}t^C = \int_{C_1} {\rm d}t^1 + \int_{C_2} {\rm d}t^2 = \int_{-\infty(C_1)}^{\infty} {\rm d}t^1 - \int_{-\infty(C_2)}^{\infty} {\rm d}t^2. \tag{24}$$

つぎに、$1^i \equiv \mathbf{r}_1 t_1^i$ $(i=1,2)$ を導入して C_1 上と C_2 上の座標を区別し、$G^{ij}(1,2) \equiv G(1^i,2^j)$ を導入する。そして、これらのグリーン関数を以下のように行列表示する。

$$\check{G}(1,2) \equiv \begin{bmatrix} G^{11}(1,2) & G^{12}(1,2) \\ G^{21}(1,2) & G^{22}(1,2) \end{bmatrix}. \tag{25}$$

本稿では、二つの経路 C_1 と C_2 の自由度に由来する 2×2 行列を、一般に $\check{}$ をつけて表すことにする。$\check{G}$ の各成分の具体形は下記の通りである。

$$G^{21}(1,2) = -\frac{i}{\hbar}\langle \hat{\psi}_{\rm H}(1)\hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(2)\rangle, \tag{26a}$$

$$G^{12}(1,2) = -\sigma\frac{i}{\hbar}\langle \hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(2)\hat{\psi}_{\rm H}(1)\rangle, \qquad \sigma = \begin{cases} +1 & : \text{Bose 粒子} \\ -1 & : \text{Fermi 粒子} \end{cases}, \tag{26b}$$

$$\begin{aligned} G^{11}(1,2) &= -\frac{i}{\hbar}\left[\theta(t_1-t_2)\langle \hat{\psi}_{\rm H}(1)\hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(2)\rangle + \theta(t_2-t_1)\sigma\langle \hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(2)\hat{\psi}_{\rm H}(1)\rangle\right] \\ &= \theta(t_1-t_2)G^{21}(1,2) + \theta(t_2-t_1)G^{12}(1,2), \end{aligned} \tag{26c}$$

$$G^{22}(1,2) = \theta(t_2-t_1)G^{21}(1,2) + \theta(t_1-t_2)G^{12}(1,2). \tag{26d}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ただし、θは引数が負のときは0で正のときは1の値をとるいわゆる階段関数である。Kadanoff-Baymの表記では、G^{12}とG^{21}はそれぞれ$G^<$および$G^>$と表される[6]。各成分には次の性質がある。

$$[G^{12}(1,2)]^* = -G^{12}(2,1), \quad [G^{21}(1,2)]^* = -G^{21}(2,1), \quad [G^{11}(1,2)]^* = -G^{22}(2,1), \tag{27a}$$

$$G^{11}(1,2) + G^{22}(1,2) = G^{12}(1,2) + G^{21}(1,2). \tag{27b}$$

(27)式の対称性は、$\check{G}$を用いて次のように簡潔に表すことができる。

$$\check{G}(1,2) = -\check{\tau}_1 \check{G}^\dagger(2,1)\check{\tau}_1, \qquad \mathrm{Tr}\,\check{G}(1,2) = \mathrm{Tr}\,\check{\tau}_1\check{G}(1,2). \tag{28}$$

ただし、$\check{\tau}_i$ $(i=1,2,3)$はPauli行列である。同様に、$\Sigma^{ij}(1,2) \equiv \Sigma(1^i,2^j)$から次の自己エネルギー行列を構成できる。

$$\check{\Sigma}(1,2) \equiv \begin{bmatrix} \Sigma^{11}(1,2) & \Sigma^{12}(1,2) \\ \Sigma^{21}(1,2) & \Sigma^{22}(1,2) \end{bmatrix}. \tag{29}$$

$\check{G}$および$\check{\Sigma}$を用いてDyson方程式(22)を書き換えると以下のようになる。

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_1^{(0)}\right)\check{G}(1,2) - \int \check{\Sigma}(1,3)\check{\tau}_3\check{G}(3,2)\,\mathrm{d}3 = \check{\tau}_3\delta(1,2). \tag{30}$$

ここで、$\check{G}$と$\check{\Sigma}$の間の$\check{\tau}_3$は次の変形から出てくる。

$$\int_C \Sigma(1^i,3^C)G(3^C,2^j)\,\mathrm{d}3^C = \int \mathrm{d}^3r_3 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t_3 \left[\Sigma^{i1}(1,3)G^{1j}(3,2) - \Sigma^{i2}(1,3)G^{2j}(3,2)\right].$$

また、(30)式右辺の$\check{\tau}_3$は、(26c)式と(26d)式で階段関数の引数が逆符号であることに由来する。

(30)式を積分形で表すと次のようになる。

$$\check{G}(1,2) = \check{G}^{(0)}(1,2) + \int \mathrm{d}3 \int \mathrm{d}4\, \check{G}^{(0)}(1,3)\check{\tau}_3\check{\Sigma}(3,4)\check{\tau}_3\check{G}(4,2). \tag{31}$$

ただし、$\check{G}^{(0)}$は次式で定義されている。

$$\check{G}^{(0)}(1,2) \equiv \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} - \hat{H}_1^{(0)}\right)^{-1}\delta(1,2)\check{\tau}_3. \tag{32}$$

2.7　摂動展開のFeynman則

次に、摂動展開のFeynman則を具体的に書き下す。そのために、(24)式の変形を用いて、(13)式の$\hat{S}_C$を下記のように表す。

$$\begin{aligned}\hat{S}_C &= T_C \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{2}(-1)^{i-1}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1^i\,\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{I}}'(t_1^i)\right] \\ &= T_C \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}\int \mathrm{d}1\int \mathrm{d}2\sum_{i=1}^{2}(-1)^{i-1}\bar{V}(1-2)\hat{\psi}^\dagger(1^i)\hat{\psi}^\dagger(2^i)\hat{\psi}(2^i)\hat{\psi}(1^i)\right].\end{aligned} \tag{33}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

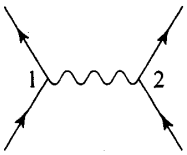


図 3: 二体相互作用を表す Feynman 図形

第二の表式に現れる $\bar{V}$ は

$$\bar{V}(1-2) \equiv \delta(t_1 - t_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \tag{34}$$

で定義されている。また、場の演算子以外の引数については、往路と復路を区別する上付き添え字 $i = 1, 2$ が不要であるので省略している。この相互作用は図 3 の Feynman 図形で視覚的に表すことができる。ここで、波線は $\bar{V}$ に対応し、また入ってくる（出てゆく）直線は $\hat{\psi}$ ($\hat{\psi}^\dagger$) を表す。

(33) の表式を、熱力学的摂動論に現れる次の S 行列 [6, 26] と比較する (Appendix D 参照)。

$$\hat{\mathcal{S}}_{\mathrm{M}}(\beta, 0) \equiv T_\tau \exp\left[-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}1 \int \mathrm{d}2\, \bar{V}(1-2)\hat{\psi}^\dagger(1)\hat{\psi}^\dagger(2)\hat{\psi}(2)\hat{\psi}(1)\right], \quad 1 \equiv \mathbf{r}_1\tau_1 \quad (0 \le \tau_1 \le \beta).$$

すると、本質的な違いは、相互作用ポテンシャル $-\bar{V}(1-2)$ を持つ経路 C_2 からの余分の寄与であることに気づく。従って、この経路からの寄与をつけ加えるという変更のみで実時間上の摂動展開が実行できる。以上の考察により、グリーン関数に対する n 次摂動 ($n = 1, 2, \cdots$) の Feynman 則は、下記のようにまとめることができる。

(a) 外線とつながった n 次の図形をすべて描く。

(b) 各々の図形に次の因子を関連づける。

$$\frac{(i\hbar)^n \sigma^{n_\ell}}{2^n n!}. \tag{35}$$

ここで n_ℓ は閉じた粒子線の数を表す。また、因子 $(i\hbar)^n$ は、(33) 式の展開による $(-i/\hbar)^n$ に、n 次摂動項を $2n$ 個のグリーン関数で表す際に現れる (21) 式の $-i/\hbar$ を打ち消すための因子 $(i\hbar)^{2n}$ を掛けることで生じた。

(c) 1^i に 2^j から到着する粒子線に $G^{ij(0)}(1,2)$ を対応づける。

(d) もし $G^{ii(0)}$ における二つの時刻が等しければ、$i = 1, 2$ の場合に対し、それぞれ $G^{11(0)}(1, 1_+)$ と $G^{22(0)}(1_+, 1)$ を対応づける。ここで 1_+ の添え字 $+$ は、1_+ の時刻 t_{1+} が t_1 より無限小だけ大きいことを意味する。この規則は、(15b) 式の $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$ において、$\hat{\psi}^\dagger$ が $\hat{\psi}$ の左に位置することに由来する [26]。

(e) すべての内部変数について積分もしくは和を実行する。その際、ポテンシャル $-\bar{V}$ をもつ経路 C_2 からの寄与も考慮する。

(f) スピン自由度の影響は、スピンの大きさを S として、個々の閉じた粒子線の寄与を $2S+1$ 倍することで取り入れることができる。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

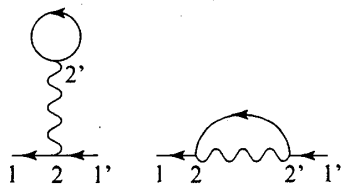


図 4: $\check{G}$ に寄与する 1 次の Feynman 図形

なお、(35) 式における因子 $\frac{1}{2^n n!}$ は、グリーン関数の場合、トポロジー的に同等な図形の数の全部あるいは一部と相殺して消えることに注意しておく。

例を挙げよう。$G^{ii'}(1,1')$ に寄与する 1 次の Feynman 図形でトポロジー的に異なるものを描くと図 4 のようになる。内部変数 $2 \leftrightarrow 2'$ の置き換えをしたものも同じ寄与を与え、上記 Feynman 則 (b) から生じる因子 $1/2^1$ を相殺する。また、摂動に C_j $(j=1,2)$ という二つの経路からの寄与があることを考慮すると、対応する解析的表現が次式のように得られる。

$$G^{ii'(1)}(1,1') = i\hbar \sum_{j=1}^{2} \int \mathrm{d}2 \int \mathrm{d}2' \, (-1)^{j-1} \bar{V}(2-2') \big\{ \sigma G^{ij(0)}(1,2) G^{jj(0)}(2',2') G^{ji'(0)}(2,1') + G^{ij(0)}(1,2) G^{jj(0)}(2,2') G^{ji'(0)}(2',1') \big\}. \tag{36}$$

(36) 式と (31) 式を比較すると、1 次の自己エネルギーの表式が次のように得られる。

$$\Sigma^{jj'(1)}(1,1') = \delta_{jj'}(-1)^{j-1} i\hbar \left[\delta(1,1') \int \mathrm{d}2 \, \bar{V}(1-2) \sigma G^{jj(0)}(2,2) + \bar{V}(1-1') G^{jj(0)}(1,1') \right]. \tag{37a}$$

このように 1 次の自己エネルギーは対角行列である。さらに、上記の Feynman 則 (d) を考慮して $G^{11}(1,1') \to G^{11}(1,1'_+) = G^{12}(1,1')$ および $G^{22}(1,1') \to G^{22}(1_+,1') = G^{12}(1,1')$ の置き換えを行うと、1 次の自己エネルギー行列 $\check{\Sigma}^{(1)}$ が最終的に次のように書けることが分かる。

$$\check{\Sigma}^{(1)}(1,1') = \check{\tau}_3 \Sigma^{\mathrm{HF}(1)}(1,1'), \tag{37b}$$

$$\Sigma^{\mathrm{HF}(1)}(1,1') \equiv \sigma\delta(1,1') \int \mathrm{d}2 \, \bar{V}(1-2) i\hbar G^{12(0)}(2,2) + \bar{V}(1-1') i\hbar G^{12(0)}(1,1'). \tag{38}$$

Feynman 則を用いた摂動展開のもう一つの例は次節で扱う。

2.8　Φ 微分近似 (保存近似)

グリーン関数を用いた摂動展開では様々な近似法が考案されている。ここではその中から特に、Baym により導入された Φ 微分近似 (保存近似) [11] について説明し、Feynman 図形を使った摂動展開のさらなる例も示すことにする。

まず、G^{ij} の汎関数 Φ を、(33) 式を用いて以下のように定義する。

$$\Phi \equiv \left[\langle \hat{\mathcal{S}}_C \rangle_{\mathrm{c}} - 1 \right]_{\mathrm{skeleton}, G^{ij(0)} \to G^{ij}}. \tag{39}$$

ここで、添え字 c と skeleton は、つながった Feynman 図形のなかで更に自己エネルギー補正のない骨格 Feynman 図形のみを考慮することを意味し、また、$G^{ij(0)} \to G^{ij}$ は、摂動展開を行った後

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

の表式において、非摂動グリーン関数 $G^{ij(0)}$ を繰り込まれたグリーン関数 G^{ij} で置き換えることを表す。平衡状態における繰り込まれた摂動展開に関しては、Appendix F を参照されたい。摂動展開の Feynman 則はグリーン関数の場合と全く同じである。この汎関数 Φ は、平衡状態において、Luttinger と Ward により最初に導入された [22] (Luttinger-Ward 汎関数の詳細と導出についても Appendix F 参照)。ただし、ここでの表式は、彼らのものと較べ、積分経路と定数係数に違いがあることに注意しておく。Luttinger と Ward は、平衡状態の熱力学関数を繰り込まれたグリーン関数の汎関数として表すことを目指して研究し、その中でこの汎関数に行き着いたのである。正確な自己エネルギーは、この Φ と次の関係式で結ばれている。

$$\Sigma^{ii'}(1,1') = \sigma(-1)^{i+i'}\frac{\delta\Phi}{\delta G^{i'i}(1',1)}. \tag{40}$$

右辺に係数 σ があるのは、$\Sigma^{ii'}$ における閉じた粒子線の数が Φ と較べて一つ減ることによる。また、因子 $(-1)^{i+i'}$ は、(31) 式の $\check{\Sigma}$ の左右に $\check{\tau}_3$ があることに由来する。(28) 式と (40) 式から、$\check{\Sigma}$ が次の対称性を持つことがわかる。

$$\check{\Sigma}(1,2) = -\check{\tau}_1\check{\Sigma}^{\dagger}(2,1)\check{\tau}_1. \tag{41}$$

さて、Φ 微分近似あるいは保存近似とは、Φ の摂動展開に現れる無限個の Feynman 図形から一部のみを残して近似し、その Φ を用いて (30) 式と (40) 式でグリーン関数と自己エネルギーを自己無撞着に決める近似のことをいう。この近似の利点は下記の通りである。

(a) Feynman 図形をすべて考慮すると正確になる。従って、厳密な理論と同じ構造を持つ。

(b) 様々な動的保存則を自動的に満足する (以下の第 7 章参照)。

(c) vertex corrections も自動的に入ってくる。

(d) この近似で二粒子相関やより高次の相関も計算できる (以下の第 6 章参照)。

以下、Φ に対する低次の寄与と、それから得られる $\check{\Sigma}$ の表式を書き下す。Feynman 則はグリーン関数の場合と全く同じである。まず、Φ に対する 1 次の Feynman 図形の中で、トポロジー的に異なるものは図 5 の二つである。ただし、ここでは座標変数と矢印を省略し、また、繰り込まれたグリーン関数 $\check{G}$ を太い実線で表した。対応する Φ の解析的表現は次式で与えられる。

$$\Phi^{(1)} = \frac{i\hbar}{2}\sum_{i=1}^{2}(-1)^{i-1}\int \mathrm{d}1\int \mathrm{d}1'\,\bar{V}(1-1')\left[G^{ii}(1,1)G^{ii}(1',1') + \sigma G^{ii}(1,1')G^{ii}(1',1)\right]. \tag{42}$$

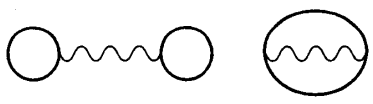


図 5: Φ に寄与する 1 次の骨格 Feynman 図形

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

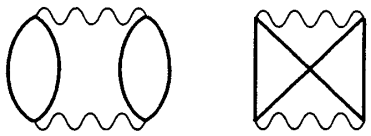


図 6: Φ に寄与する 2 次の骨格 Feynman 図形

この表式をグリーン関数の 1 次摂動である (36) 式と較べると、その特徴の一つとして、係数に因子 $1/2$ があることが挙げられる。一般に、Φ の n 次摂動項では、因子 $1/2n$ あるいはその一部が相殺されずに残ってくる。この $\Phi^{(1)}$ から (40) 式の操作により 1 次の自己エネルギーが得られる。その表式は、(37a) 式の右辺で $G^{jj(0)} \to G^{jj}$ としたものに一致することが容易に確かめられる。

次に、Φ に対する 2 次の寄与を考察しよう。トポロジー的に異なる Feynman 図形として図 6 の二つがある。対応する Φ の解析的表現は次式で与えられる。

$$\Phi^{(2)} = \frac{(i\hbar)^2}{4}\sum_{i,j=1}^{2}(-1)^{i+j-2}\int \mathrm{d}1\int \mathrm{d}1'\int \mathrm{d}2\int \mathrm{d}2'\,\bar{V}(1{-}1')\bar{V}(2{-}2') \times\big[G^{ij}(1,2)G^{ji}(2,1)G^{ij}(1',2')G^{ji}(2',1') + \sigma G^{ij}(1,2)G^{ji}(2,1')G^{ij}(1',2')G^{ji}(2',1)\big]. \quad (43)$$

2 次の自己エネルギーは、この $\Phi^{(2)}$ から、(40) 式の操作により次のように得られる。

$$\Sigma^{ij(2)}(1,2) = \sigma(i\hbar)^2\int \mathrm{d}1'\int \mathrm{d}2'\,\bar{V}(1{-}1')\bar{V}(2{-}2')\big[G^{ij}(1,2)G^{ij}(1',2')G^{ji}(2',1') + \sigma G^{ij}(1,2')G^{ji}(2',1')G^{ij}(1',2)\big]. \quad (44)$$

この自己エネルギーの対角成分 $\Sigma^{11(2)}$ と $\Sigma^{22(2)}$ の右辺に (26c) 式と (26d) 式を代入し、結果を $\Sigma^{12(2)}$ と $\Sigma^{21(2)}$ の表式と比較しよう。すると、グリーン関数の成分間の関係式である (26c) 式および (26d) 式が、2 次の自己エネルギーの成分間においても成立することが簡単に示せる。この $\check{\Sigma}^{(2)}$ の対称性は高次項まで成立する一般的性質である。従って、Φ 微分近似 (および厳密な理論) における自己エネルギーの対角成分は、非対角成分を用いて以下のように表せる。

$$\Sigma^{11}(1,1') = \Sigma^{\mathrm{HF}}(1,1') + \theta(t_1'{-}t_1)\Sigma^{12}(1,1') + \theta(t_1{-}t_1')\Sigma^{21}(1,1'), \quad (45a)$$

$$\Sigma^{22}(1,1') = -\Sigma^{\mathrm{HF}}(1,1') + \theta(t_1{-}t_1')\Sigma^{12}(1,1') + \theta(t_1'{-}t_1)\Sigma^{21}(1,1'). \quad (45b)$$

ここで Σ^{HF} は、(38) 式で $G^{jj(0)} \to G^{jj}$ の置き換えを行ったもの、すなわち繰り込まれた Hartree-Fock の自己エネルギーで、具体的に次式で与えられる。

$$\Sigma^{\mathrm{HF}}(1,1') \equiv \sigma\delta(1,1')\int \mathrm{d}2\,\bar{V}(1{-}2)i\hbar G^{12}(2,2) + \bar{V}(1{-}1')i\hbar G^{12}(1,1'). \quad (46)$$

2.9 Keldysh 変換

行列グリーン関数 (25) や Dyson 方程式 (30) の構造を明瞭にするには、$\check{G}$ に次の Keldysh 変換を施すと良い [13, 15, 30]。

$$\check{G}^{\mathrm{K}}(1,2) \equiv \check{L}\check{\tau}_3\check{G}(1,2)\check{L}^{\dagger} = \begin{bmatrix} G^{\mathrm{R}} & G^{\mathrm{K}} \\ 0 & G^{\mathrm{A}} \end{bmatrix}, \qquad \check{L} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{1} - i\check{\tau}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (47)$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ここで $\check{1}$ は 2×2 の単位行列である。変形の際には (27b) 式を使った。$G^{\mathrm{R,K,A}}$ は次式で定義されている。

$$G^{\mathrm{R}}(1,2)\equiv G^{11}(1,2)-G^{12}(1,2)=\theta(t_1-t_2)\big[G^{21}(1,2)-G^{12}(1,2)\big], \tag{48a}$$

$$G^{\mathrm{A}}(1,2)\equiv -\big[G^{22}(1,2)-G^{12}(1,2)\big]=-\theta(t_2-t_1)\big[G^{21}(1,2)-G^{12}(1,2)\big], \tag{48b}$$

$$G^{\mathrm{K}}(1,2)\equiv G^{12}(1,2)+G^{21}(1,2)=-\frac{i}{\hbar}\langle\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1)\hat{\psi}^{\dagger}_{\mathrm{H}}(2)+\sigma\hat{\psi}^{\dagger}_{\mathrm{H}}(2)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1)\rangle. \tag{48c}$$

G^{R} と G^{A} は、それぞれ、遅延グリーン関数と先進グリーン関数に他ならない [8, 26]。(27a) 式を用いると、$G^{\mathrm{R,K,A}}$ が次の対称性を持つことを示せる。

$$[G^{\mathrm{R}}(1,2)]^{*}=G^{\mathrm{A}}(2,1),\qquad [G^{\mathrm{K}}(1,2)]^{*}=-G^{\mathrm{K}}(2,1). \tag{49}$$

この対称性は $\check{G}^{\mathrm{K}}$ を用いて次のようにも表せる。

$$\check{G}^{\mathrm{K}}(1,2)=\check{\tau}_2\check{G}^{\mathrm{K}\dagger}(2,1)\check{\tau}_2. \tag{50}$$

(29) 式の自己エネルギー行列にも同じ変換を施しておくと便利である。

$$\check{\Sigma}^{\mathrm{K}}(1,2)\equiv\check{L}\check{\tau}_3\check{\Sigma}(1,2)\check{L}^{\dagger}=\begin{bmatrix}\Sigma^{\mathrm{R}}(1,2) & \Sigma^{\mathrm{K}}(1,2)\\ 0 & \Sigma^{\mathrm{A}}(1,2)\end{bmatrix}. \tag{51}$$

ここで、変換後の成分 $\Sigma^{\mathrm{R,A,K}}$ は、(45) 式より次のように得られる。

$$\Sigma^{\mathrm{R}}(1,2)=\Sigma^{11}(1,2)-\Sigma^{12}(1,2)=\Sigma^{\mathrm{HF}}(1,2)+\theta(t_1-t_2)\big[\Sigma^{21}(1,2)-\Sigma^{12}(1,2)\big], \tag{52a}$$

$$\Sigma^{\mathrm{A}}(1,2)=-\big[\Sigma^{22}(1,2)-\Sigma^{12}(1,2)\big]=\Sigma^{\mathrm{HF}}(1,2)-\theta(t_2-t_1)\big[\Sigma^{21}(1,2)-\Sigma^{12}(1,2)\big], \tag{52b}$$

$$\Sigma^{\mathrm{K}}(1,2)=\Sigma^{12}(1,2)+\Sigma^{21}(1,2). \tag{52c}$$

(41) 式より、$\check{\Sigma}^{\mathrm{K}}$ も次の関係式を満たすことが分かる。

$$\check{\Sigma}^{\mathrm{K}}(1,2)=\check{\tau}_2\check{\Sigma}^{\mathrm{K}\dagger}(2,1)\check{\tau}_2. \tag{53}$$

以上で準備が整ったので、(30) 式の Dyson 方程式を Keldysh 変換を用いて書き換える。(30) 式の左右からそれぞれ $\check{L}\check{\tau}_3$ と $\check{L}^{\dagger}$ を掛け、$\check{L}\check{L}^{\dagger}=\check{1}$ を用いる。すると、$\check{G}^{\mathrm{K}}$ についての Dyson 方程式が次式のように得られる。

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\hat{H}_1^{(0)}\right)\check{G}^{\mathrm{K}}(1,2)-\int\check{\Sigma}^{\mathrm{K}}(1,3)\check{G}^{\mathrm{K}}(3,2)\,\mathrm{d}3=\check{1}\delta(1,2). \tag{54}$$

(47) 式と (51) 式より明らかなように、この方程式は上三角行列の形をしており、また、(50) 式と (53) 式に対応した対称性を持つ。このように、Keldysh 変換は Dyson 方程式を見通しよくする。しかし、摂動計算はあくまで (25) 式のグリーン関数を用いて行う必要があることに注意しておく。

最後に、ここで用いた変換 (47) は Larkin と Ovchinnikov が 1975 年に用いたものであり [30]、Keldysh の原論文 [13] のものとは異なることを指摘しておく。しかし、物理的内容は当然両者で同じである。また、Larkin-Ovchinnikov による変換のほうがより簡便でよく使われている [15]。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

3　量子輸送方程式と非平衡エントロピー

自己エネルギーの式 (40) と Dyson 方程式 (54) は $\check{G}$ に対する閉じた方程式系を構成している。そして、これらを自己無撞着に解くことで、系の時間発展を記述することが原理的に可能である。しかし、量子ドット系や接合系などの有限系を除くと、これらの方程式を一般の非平衡系に適用して解くことは最新の計算機をもってしても不可能であろうし、また、たとえそのような解が求まったとしても、非平衡系に対する物理的理解が深まるとは限らない。

そこで、Dyson 方程式 (54) をより簡略化し、バルクの非平衡系に適用できるようにすることを考える。このための標準的な処方箋は、Dyson 方程式を Wigner 表示に変換し、その際に現れる重心座標に関する勾配展開を低次で打ち切る近似を採用することである。このようにして導かれた量子輸送方程式は、希薄高温極限で Boltzmann 方程式に簡略化され、また、平衡状態において遅延グリーン関数に対する Dyson 方程式に帰着する。つまり、静的な平衡統計力学を時間発展のある非平衡系に拡張したものになっている。さらに、この量子輸送方程式はエントロピーの流れも内包し、非平衡系におけるエントロピーの微視的表式を得ることも可能になる。つまり、エントロピーの概念がどのような条件下・粗視化のもとで成立するかも明らかになるのである。以下ではこの事情を文献 [18, 21] に従って具体的に見てゆく。

3.1　Wigner 表示

Wigner 表示は、古典統計力学への量子補正を考察するために、Wigner により 1932 年に導入された [31, 33]。この表示は、古典統計力学における位相空間の概念を量子力学に拡張したものとみなすことができ、Weyl の量子化手続き [32] とも深い関連を持つ。さらに、1949 年 Moyal は、Wigner 表示を用いて、量子力学の位相空間における確率論的な定式化を行っている [34]。このように、Wigner 表示は量子力学の基礎づけや古典力学との関連の解明に大きな役割を果たしてきた。それだけでなく、以下に見るように、輸送方程式の微視的導出の際にも必要不可欠な手段となっている。

具体的にグリーン関数 $\check{G}(1,2)$ を例にとると、その Wigner 表示 $\check{G}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)$ は次式で定義される。

$$\check{G}(1,2)=\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\,\check{G}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}_{12}t_{12})\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12}-\varepsilon\bar{t}_{12})/\hbar}. \tag{55}$$

ここで $\mathbf{r}_{12}\equiv(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)/2$、$t_{12}\equiv(t_1+t_2)/2$、$\bar{\mathbf{r}}_{12}\equiv\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$、および $\bar{t}_{12}\equiv t_1-t_2$ である。便宜上、同じ記号 $\check{G}$ を用いたが、$\check{G}(1,2)$ と $\check{G}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}_{12}t_{12})$ は関数形が異なることに注意しておく。以下では、引数のない $\check{G}$ は $\check{G}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)$ を表すものとする。なお、Wigner が 1932 年に導入した関数は、この表式で左辺に t 依存性がない場合であり、$\mathbf{p}$ と $\mathbf{r}$ を引数として持つその場合の Wigner 表示は、Wigner 準確率分布 (Wigner quasi-probability distribution) と呼ばれる。

さて、(26) 式からも明らかなように、$\check{G}(1,2)$ の独立成分は $G^{12}(1,2)$ と $G^{21}(1,2)$ である。ここで、それらの Wigner 表示を、別の二つの独立関数を用いて書き換えておくと便利である。まず、

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

スペクトル関数 A を次式で導入する。

$$A(1,2) \equiv i\left[G^{21}(1,2) - G^{12}(1,2)\right] = \frac{1}{\hbar}\langle \hat{\psi}_{\rm H}(1)\hat{\psi}^{\dagger}_{\rm H}(2) - \sigma\hat{\psi}^{\dagger}_{\rm H}(2)\hat{\psi}_{\rm H}(1)\rangle. \tag{56}$$

対称性 $A^*(1,2) = A(2,1)$ と生成消滅演算子の交換関係から、$A(1,2)$ の Wigner 表示 $A(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)$ が次の性質を持つことがわかる。

$$A^*(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = A(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t), \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{{\rm d}\varepsilon}{2\pi} A(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = 1. \tag{57}$$

この A は、松原グリーン関数の Lehmann 表示に現れるスペクトル関数 [8, 26] (Appendix E.2 参照) を、非平衡系に一般化したものになっている。次に、分布関数 ϕ を Wigner 表示で以下のように定義する。

$$\phi(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}_{12}t_{12}) \equiv \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} {\rm d}\bar{t}_{12} \int {\rm d}^3\bar{r}_{12}\, \frac{1}{\hbar}\langle \hat{\psi}^{\dagger}_{\rm H}(2)\hat{\psi}_{\rm H}(1)\rangle {\rm e}^{-i(\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12} - \varepsilon\bar{t}_{12})/\hbar}}{A(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}_{12}t_{12})} = \phi^*(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}_{12}t_{12}). \tag{58}$$

後に見るように、平衡状態においては、$\phi(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)$ は Bose/Fermi 分布関数 $f(\varepsilon) = ({\rm e}^{\varepsilon/k_{\rm B}T} - \sigma)^{-1}$ に移行する。A と ϕ は、G^{12} と G^{21} に代わる $\check{G}$ の独立関数とみなせる。Kadanoff-Baym に始まる従来の輸送方程式の研究では、準粒子近似等を採用して A の自由度を積分し、ϕ のみの方程式が導出された。しかし、準粒子近似が成り立たない系も多い。また、上記の積分操作により、エネルギー準位の離散化や状態密度の変化に付随する効果が記述できなくなる。ここでの輸送方程式導出では、A の自由度もそのまま残すことにする。このことは、解くべき方程式の構造や平衡状態の定式化との関連を明確にするのにも役立つ。

A と ϕ により $\check{G}$ は完全に記述できる。実際、(26b) 式と (56) 式および (58) 式より、G^{12} と G^{21} が次のように表せることがわかる。

$$G^{12}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = -i\sigma A(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t), \tag{59a}$$

$$G^{21}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = -iA(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)[1 + \sigma\phi(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)]. \tag{59b}$$

また、(48) 式の Wigner 表示も、A と ϕ を用いて以下のように表現できる。

$$G^{\rm R}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = [G^{\rm A}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)]^* = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{{\rm d}\varepsilon'}{2\pi} \frac{A(\mathbf{p}\varepsilon', \mathbf{r}t)}{\varepsilon_+ - \varepsilon'}, \tag{60a}$$

$$G^{\rm K}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = -iA(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)[1 + 2\sigma\phi(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)]. \tag{60b}$$

ただし $\varepsilon_+ \equiv \varepsilon + i0_+$。このように、$G^{\rm R}$ と $G^{\rm A}$ がスペクトル関数のみで表現されるのに対し、$\check{G}^{\rm K}$ には分布関数 ϕ の情報も含まれる。

自己エネルギーに関しても同様の書き換えが可能である。$\check{\Sigma}(1,2)$ の独立成分は $\Sigma^{12}(1,2)$ と $\Sigma^{21}(1,2)$ である。実際、対角成分 $\Sigma^{11}(1,2)$ と $\Sigma^{22}(1,2)$ は (45) 式のように書くことができる。そこで、$\Sigma^{12}(1,2)$ と $\Sigma^{21}(1,2)$ の Wigner 表示を、$\check{G}$ に倣って以下のように表すことにする。

$$\Sigma^{12}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = -i\sigma A_{\Sigma}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)\phi_{\Sigma}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t), \tag{61a}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

$$\Sigma^{21}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t) = -iA_\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)[1+\sigma\phi_\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)]. \tag{61b}$$

ここで A_Σ と ϕ_Σ は二つの独立関数である。すると、(52) 式と (46) 式より、Keldysh 変換後の $\check{\Sigma}^{\mathrm{K}}$ の成分が、次のように表現できることがわかる。

$$\Sigma^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t) = [\Sigma^{\mathrm{A}}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)]^* = \Sigma^{\mathrm{HF}}(\mathbf{p},\mathbf{r}t) + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon'}{2\pi}\frac{A_\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon',\mathbf{r}t)}{\varepsilon_+-\varepsilon'}, \tag{62a}$$

$$\Sigma^{\mathrm{K}}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t) = -iA_\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)[1+2\sigma\phi_\Sigma(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)]. \tag{62b}$$

最後に、(54) 式の微分演算子も、右から $\delta(1,3)$ をかけることで行列 $G_0^{-1}(1,3)\equiv(i\hbar\partial_{t_1}-\hat{H}_1^{(0)})\delta(1,3)$ と見なすことができる。その Wigner 表示は次の表現を持つ。

$$G_0^{-1}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t) \equiv \varepsilon - \frac{p^2}{2m} - U(\mathbf{r}t) + \mu. \tag{63}$$

3.2　Moyal 積と勾配展開

前節で (55) 式により Wigner 表示を導入した。その左辺の関数 $\check{G}(1,2)$ は 1 と 2 を足とする行列とも見なせる。この観点からは、Dyson 方程式 (54) における自己エネルギー項が、行列の積に他ならないことに気づく。そこで、Dyson 方程式を Wigner 表示に変換する際に、「行列の積の Wigner 表示がどのような表現をもつか」という問題が生じる。その解答は、$C(1,2)$ と $D(1,2)$ を二つの任意行列として、下記のように与えられる。

$$\int C(1,3)D(3,2)\,\mathrm{d}3 = \int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}C(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}_{12}t_{12})*D(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}_{12}t_{12})\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12}-\varepsilon\bar{t}_{12})/\hbar}. \tag{64}$$

ここで、演算子 $*$ は、$\boldsymbol{\partial}_{\mathbf{r}}\equiv\partial/\partial\mathbf{r}$ や $\partial_t\equiv\partial/\partial t$ 等を用いて次式で定義されている。

$$C(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)*D(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t) \equiv C(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\exp\left[\frac{i\hbar}{2}\left(\overleftarrow{\boldsymbol{\partial}}_{\mathbf{r}}\cdot\overrightarrow{\boldsymbol{\partial}}_{\mathbf{p}} - \overleftarrow{\partial}_t\overrightarrow{\partial}_\varepsilon - \overleftarrow{\boldsymbol{\partial}}_{\mathbf{p}}\cdot\overrightarrow{\boldsymbol{\partial}}_{\mathbf{r}} + \overleftarrow{\partial}_\varepsilon\overrightarrow{\partial}_t\right)\right]D(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t). \tag{65}$$

ただし、微分演算子上の左右の矢印は、それぞれ左および右の関数に作用することを意味している。(64) 式は Groenewold (1946 年) と Moyal (1949 年) により独立に導出された [35, 34]。Groenewold の導出が先であるが、(65) 式は一般に Moyal 積の名前で呼ばれている。

恒等式 (64) は次のように証明できる。まず、左辺の $C(1,3)$ と $D(3,2)$ を Wigner 表示で表現し、重心座標 $\mathbf{r}_{13}t_{13}$ と $\mathbf{r}_{32}t_{32}$ を、$f(\mathbf{r}_{13}) = f(\mathbf{r}_{12}+\frac{1}{2}\bar{\mathbf{r}}_{32}) = \exp\left[\frac{1}{2}\bar{\mathbf{r}}_{32}\cdot\boldsymbol{\partial}_{\mathbf{r}_{12}}\right]f(\mathbf{r}_{12})$ のように $\mathbf{r}_{12}t_{12}$ から Taylor 展開する。その結果現れる相対座標 $\bar{\mathbf{r}}_{32}\bar{t}_{32}$ と $\bar{\mathbf{r}}_{13}\bar{t}_{13}$ を、$\bar{\mathbf{r}}_{13}\,\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{13}/\hbar} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{13}/\hbar}$ 等を用いて消去したのち、$\mathbf{p}\varepsilon$ に関する部分積分を実行する。最後に変数 3 についての積分を行う。

(65) 式の指数関数を展開して 1 次まで残すと、Moyal 積に対する次の近似式を得る。

$$C*D \approx CD + \frac{i\hbar}{2}\{C,D\}. \tag{66}$$

ただし、$\{C,D\}$ は、次の一般化された Poisson 括弧式である。

$$\{C,D\} \equiv \frac{\partial C}{\partial\mathbf{r}}\cdot\frac{\partial D}{\partial\mathbf{p}} - \frac{\partial C}{\partial t}\frac{\partial D}{\partial\varepsilon} - \frac{\partial C}{\partial\mathbf{p}}\cdot\frac{\partial D}{\partial\mathbf{r}} + \frac{\partial C}{\partial\varepsilon}\frac{\partial D}{\partial t}. \tag{67}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

この近似は1次の勾配展開とも呼ばれる。それが良い精度で成り立つのは、系に特有の微視的な長さ $l_{\rm m}$ と時間 $t_{\rm m}$ が、系の不均一性を特徴づける巨視的な長さ $l_{\rm M}$ と時間 $t_{\rm M}$ に較べて小さい場合である。例えば、Fermi 波数 $k_{\rm F}$ と Fermi エネルギー $\varepsilon_{\rm F}$ をもつ低温の Fermi 粒子系の場合、微視的な長さと時間はそれぞれ $l_m \sim 1/k_{\rm F}$ および $t_m \sim \hbar/\varepsilon_{\rm F}$ で与えられる。また、古典気体の場合にそれらに相当するものは、それぞれ粒子間の平均距離および $\hbar/k_{\rm B}T$ となるであろう。これらのスケールと較べてゆっくりとした時空変化の場合には、(67) 式が良い近似となる。そして、この条件は、非常に広範囲の非平衡系において満たされている。

3.3 量子輸送方程式

以上の準備に基づいて、いよいよ量子輸送方程式を導くことにする。まず、Dyson 方程式 (54) を Wigner 表示に変換しよう。その際、(54) 式の第一項を、(63) 式の上で述べたようにして、行列の積に書き換えておくと便利である。すると、方程式の左辺全体に (66) 式が適用でき、Wigner 表示の Dyson 方程式が

$$(G_0^{-1}\check{1} - \check{\Sigma}^{\rm K}) * \check{G}^{\rm K} = \check{1}, \tag{68}$$

と得られる。ここで、G_0^{-1} は (63) 式で定義されている。

次に、(68) 式に (66) 式の近似を適用する。(47) 式と (51) 式を考慮し、その 11 成分を具体的に書き下すと、次のようになる。

$$(G_0^{-1} - \Sigma^{\rm R})G^{\rm R} + \frac{i\hbar}{2}\{G_0^{-1} - \Sigma^{\rm R}, G^{\rm R}\} = 1. \tag{69a}$$

この式で添え字の置き換え R→A を行ったものは、(68) 式の 22 成分に他ならない。その複素共役をとり、$G^{\rm A*} = G^{\rm R}$ の関係に注意すると、上式は以下のようにも書き換えられる。

$$(G_0^{-1} - \Sigma^{\rm R})G^{\rm R} - \frac{i\hbar}{2}\{G_0^{-1} - \Sigma^{\rm R}, G^{\rm R}\} = 1. \tag{69b}$$

この方程式は、右 Dyson 方程式 $\check{G}^{\rm K} * (G_0^{-1}\check{1} - \check{\Sigma}^{\rm K}) = \check{1}$ の 11 成分からも直接導かれる。ここで上の二式を加え合わせると、以下の方程式を得る。

$$G^{\rm R} = (G_0^{-1} - \Sigma^{\rm R})^{-1}. \tag{70}$$

(60a) 式を思い起こすと、この式が、与えられた $\Sigma^{\rm R}$ に対し、スペクトル関数 A を決定する方程式であることがわかる。

(70) 式は (69a) 式と (69b) 式を加え合わせることにより得られた。しかし、(69a) 式と (69b) 式のおおもとである (54) 式の 11 成分と 22 成分は、複素共役の関係にあり、数学的に全く同等である。そこで、この同等性が、1次の勾配展開後の結果である (69a) 式と (69b) 式においても保たれているか否かが問題になる。Ivanov ら [18] により提起されたこの問いに答えるために、(69a) 式と (69b) 式の差をとって (70) 式を代入すると、次のようになる。

$$0 = \{(G^{\rm R})^{-1}, G^{\rm R}\} = -(G^{\rm R})^{-2}\{G^{\rm R}, G^{\rm R}\}.$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

この式は $\{G^{\mathrm{R}}, G^{\mathrm{R}}\} = 0$ の恒等式である。従って (69a) 式と (69b) 式は確かに同等であることがチェックできた。また、以上の考察により、(70) 式で決まる G^{R} が、勾配展開の 1 次までのオーダーで正しい表式であることが分かった。

次に (68) 式の 12 成分に注目し、1 次の勾配展開を行うと、次の方程式を得る。

$$(G_0^{-1} - \Sigma^{\mathrm{R}})G^{\mathrm{K}} - \Sigma^{\mathrm{K}}G^{\mathrm{A}} + \frac{i\hbar}{2}\{G_0^{-1} - \Sigma^{\mathrm{R}}, G^{\mathrm{K}}\} - \frac{i\hbar}{2}\{\Sigma^{\mathrm{K}}, G^{\mathrm{A}}\} = 0. \tag{71a}$$

その複素共役をとり、(60) 式と (62) 式を考慮すると、上式が次のようにも表せることがわかる。

$$-(G_0^{-1} - \Sigma^{\mathrm{A}})G^{\mathrm{K}} + \Sigma^{\mathrm{K}}G^{\mathrm{R}} + \frac{i\hbar}{2}\{G_0^{-1} - \Sigma^{\mathrm{A}}, G^{\mathrm{K}}\} - \frac{i\hbar}{2}\{\Sigma^{\mathrm{K}}, G^{\mathrm{R}}\} = 0. \tag{71b}$$

この方程式は、また、右 Dyson 方程式 $\check{G}^{\mathrm{K}} * (G_0^{-1}\check{1} - \check{\Sigma}^{\mathrm{K}}) = \check{1}$ の 12 成分からも直接導かれる。上の二式の和をとり、(60) 式と (62) 式を考慮し、最後に $\mathrm{Im}\{G_0^{-1} - \Sigma^{\mathrm{R}}, G^{\mathrm{R}}\} = 0$ を用いる。すると、以下の方程式が得られる。

$$\{G_0^{-1} - \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}, A\phi\} - \{A_\Sigma\phi_\Sigma, \mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}\} = \frac{AA_\Sigma(\phi_\Sigma - \phi)}{\hbar}.$$

この式の左辺はすべて時空微分項で、勾配展開において 1 次のオーダーである。従って、右辺の $\phi_\Sigma - \phi$ も 1 次のオーダーの微小量である。この右辺は、後に見るように衝突積分とみなすことができ、平衡状態では 0 となることを示せる (3.6 節参照)。以上の考察から、勾配展開の 1 次のオーダーでは、左辺の ϕ_Σ を ϕ で置き換えるのが妥当であることが分かる (Botermans-Malfliet 近似 [19])。この置き換えにより、上式は次のようになる。

$$\{G_0^{-1} - \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}, A\phi\} - \{A_\Sigma\phi, \mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}\} = \mathcal{C}. \tag{72}$$

ただし、$\mathcal{C}$ は以下のように定義された衝突積分である。

$$\mathcal{C} \equiv \frac{AA_\Sigma(\phi_\Sigma - \phi)}{\hbar} = -\sigma\frac{G^{21}\Sigma^{12} - G^{12}\Sigma^{21}}{\hbar}. \tag{73}$$

方程式 (72) は、与えられた A と自己エネルギーに対し、ϕ を決める方程式とみなせる。

最後に、(71a) 式と (71b) 式の同等性をチェックするため、それらの差をとる。すると、(72) 式を導いたのと同じ手続きにより、次式が得られる。

$$\frac{\{A_\Sigma\phi, A\} - \{A_\Sigma, A\phi\}}{4} = \frac{A_\Sigma\phi_\Sigma\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}} - (G_0^{-1} - \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}})A\phi}{\hbar}.$$

この方程式は (72) 式と等価である。実際、この式に $A_\Sigma/(G_0^{-1} - \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}})$ をかけることにより (72) 式が得られる。これを見るためには、(70) 式を用いて $\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}$ と $A = -2\mathrm{Im}G^{\mathrm{R}}$ を $M \equiv G_0^{-1} - \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}$ と $A_\Sigma \equiv -2\mathrm{Im}\Sigma^{\mathrm{R}}$ で表し、見かけが異なる二つの方程式に代入すればよい。このようにして、微分項において $\phi_\Sigma \to \phi$ の置き換えを行う操作により、(71a) 式と (71b) 式の同等性が回復されることがわかった。

(70) 式と (72) 式は、二つの未知関数 A と ϕ を決定する閉じた方程式系を構成する。これらの方程式で $\phi \to f(\varepsilon) \equiv (\mathrm{e}^{\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T} - \sigma)^{-1}$ の操作を行うと、分布関数の時空微分項がなくなると共に衝突

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

積分が消えて (3.6 節参照)、(72) 式が $0=0$ の自明な式となる。また、(70) 式は熱平衡状態の遅延グリーン関数に対する Dyson 方程式に移行する。このように、(70) 式と (72) 式は平衡統計力学の非平衡系への自然な拡張になっており、一粒子分布関数 ϕ を決める方程式が新たにつけ加わった。これらの方程式を解くことにより、非平衡系の時間発展を記述することが可能である。

3.4 自己エネルギーに対する近似法

1 次の勾配展開に現れる自己エネルギーは、時空微分項を無視するいわゆる局所近似で評価するのが妥当である。実際、局所近似の $\Sigma^{\rm R}$ を用いた (70) 式は、勾配展開の 1 次のオーダーまで正しい表式である。また、(72) 式は、それ自体が勾配展開で 1 次のオーダーの方程式であり、そこに現れる自己エネルギーは、局所近似で評価すべきである。

局所近似での自己エネルギーの表式を、2 次摂動までの Φ 微分近似で書き下しておく。(16) 式を用いると、Hartree-Fock 近似の自己エネルギー (46) が、以下のように Wigner 表示に変換できる。

$$\Sigma^{\rm HF}(\mathbf{p},\mathbf{r}t)=i\hbar\sigma\int\frac{{\rm d}^3p'{\rm d}\varepsilon'}{(2\pi\hbar)^4}(V_{\mathbf{0}}+\sigma V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'})G^{12}(\mathbf{p}'\varepsilon',\mathbf{r}t). \tag{74}$$

また、(44) 式の Wigner 表示に局所近似を施すと、次式が得られる。

$$\begin{aligned}\Sigma^{ij(2)}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)=-\sigma(\hbar)^2\int\left[\prod_{k=2}^{4}\frac{{\rm d}^3p_k{\rm d}\varepsilon_k}{(2\pi\hbar)^4}\right]\frac{1}{2}|V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3}+\sigma V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_4}|^2(2\pi\hbar)^4\delta(\mathbf{p}+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)\\ \times\delta(\varepsilon+\varepsilon_2-\varepsilon_3-\varepsilon_4)G^{ji}(\mathbf{p}_2\varepsilon_2,\mathbf{r}t)G^{ij}(\mathbf{p}_3\varepsilon_3,\mathbf{r}t)G^{ij}(\mathbf{p}_4\varepsilon_4,\mathbf{r}t).\end{aligned} \tag{75}$$

ここで $G^{12}=-i\sigma G^<$, $G^{21}=-iG^>$, $\Sigma^{12}=-i\sigma\Sigma^<$, および $\Sigma^{21}=-i\Sigma^>$ と書き換えると、(75) 式は Kadanoff-Baym の教科書 [6] における (4-16) 式に一致する。

以上により、(70) 式と (72) 式を自己無撞着に時間発展させることが可能になった。その手順は次の通りである。(i) ある時刻 t において分布関数 $\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)$ が与えられたとき、スペクトル関数 $A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)$ を (70) 式と局所近似の $\Sigma^{\rm R}=\Sigma^{\rm R}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t;A)$ を用いて自己無撞着に決める; (ii) 次に、時刻 $t+{\rm d}t$ における分布関数 ϕ を (72) 式により決定する。このように、この時間発展におけるあらわな時間変化は、分布関数 ϕ を通して生じることになる。

3.5 エントロピー密度の表式

分布関数の時間発展を記述する (72) 式は、熱流の効果も内包しているものと期待できる。実際、そこからは、非平衡系におけるエントロピー密度の微視的表式とその流れの式を導くことが可能である。このことを見るために、(72) 式に $\frac{\hbar k_{\rm B}}{(2\pi\hbar)^4}\ln\frac{1+\sigma\phi}{\phi}$ をかけ、$\mathbf{p}\varepsilon$ 積分を実行する。そして、

$$\ln[(1+\sigma\phi)/\phi]{\rm d}\phi={\rm d}[-\phi\ln\phi+\sigma(1+\sigma\phi)\ln(1+\sigma\phi)],$$

および ${\rm Im}\{G_0^{-1}-\Sigma^{\rm R},G^{\rm R}\}=0$ に注意すると、次の方程式が得られる。

$$\frac{\partial s}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j}_s=\frac{\partial s_{\rm col}}{\partial t}. \tag{76}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ここで、$s=s(\mathbf{r}t)$、$\mathbf{j}_s=\mathbf{j}_s(\mathbf{r}t)$ および $\partial s_{\rm col}/\partial t$ は、以下のように定義されている。

$$s \equiv \hbar k_{\rm B} \int \frac{{\rm d}^3p\,{\rm d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4} \left[-\phi\ln\phi+\sigma(1+\sigma\phi)\ln(1+\sigma\phi)\right]\left[A\frac{\partial(G_0^{-1}-{\rm Re}\Sigma^{\rm R})}{\partial\varepsilon}+A_\Sigma\frac{\partial{\rm Re}G^{\rm R}}{\partial\varepsilon}\right], \quad (77)$$

$$\mathbf{j}_s \equiv \hbar k_{\rm B} \int \frac{{\rm d}^3p\,{\rm d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4} \left[-\phi\ln\phi+\sigma(1+\sigma\phi)\ln(1+\sigma\phi)\right]\left[-A\frac{\partial(G_0^{-1}-{\rm Re}\Sigma^{\rm R})}{\partial\mathbf{p}}-A_\Sigma\frac{\partial{\rm Re}G^{\rm R}}{\partial\mathbf{p}}\right], \quad (78)$$

$$\frac{\partial s_{\rm col}}{\partial t} \equiv \hbar k_{\rm B} \int \frac{{\rm d}^3p\,{\rm d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4} C\ln\frac{1+\sigma\phi}{\phi}. \quad (79)$$

(77) 式と (78) 式は、それぞれエントロピー密度およびエントロピー流束密度とみなすことができる。実際、(77) 式で $\phi\to f(\varepsilon)\equiv({\rm e}^{\varepsilon/k_{\rm B}T}-\sigma)^{-1}$ と置き換えた後に空間積分すると、文献 [20] で導出された熱平衡状態におけるエントロピーの表式が得られる (Appendix G 参照)。また、(79) 式は、次の 3.6 節に示すように、衝突による単位時間・単位体積辺りのエントロピー生成を表すと理解できる。このようにして、平衡統計力学と矛盾のない形で、すなわち、平衡統計力学を包含する形で、非平衡系のエントロピーを定義することができた。4.1 節で見るように、このエントロピー密度の表式は、また、希薄高温極限において、Boltzmann が 1872 年に提出したエントロピー密度の表式に移行する。

ここで、Ivanov らの得たエントロピー密度 [18] と上記のエントロピー密度との違いについて言及しておく。Ivanov らは、前節における自己エネルギーの評価において、「記憶項」すなわち 1 次のオーダーの時空微分項まで取り込むべきであると主張した。しかし、その動力学から得られるエントロピー密度の表式は、上記のものとは異なり、また熱平衡状態におけるエントロピーの表式 [20] とも矛盾する。このことは、彼らの動力学が、孤立系という典型例に適用した場合、真の熱平衡状態に漸近して行かないことを意味する。実際、Ivanov らのエントロピー密度の表式は、Carneiro と Pethick による熱平衡状態のエントロピー [36] と無矛盾になるように構成された。しかし、文献 [21] に詳しく述べたように、Carneiro-Pethick のエントロピーは、Goldstone による絶対零度の摂動展開法 [37] を用いて導出され、その際のエネルギー分母の扱いが不適切で正しくない。従って、Ivanov らの動力学は、平衡統計力学と矛盾することになる。

3.6　H 定理と熱平衡

(75) 式を (73) 式に代入し、得られた表式を (79) 式に代入する。そして、その結果を (59) 式を用いて A と ϕ で表し、かつ、積分変数に関する対称化を行う。すると、$\partial s_{\rm col}/\partial t$ が、2 次摂動までの範囲で以下のように表せる。

$$\frac{\partial s_{\rm col}^{(2)}}{\partial t} = \frac{k_{\rm B}\hbar^2}{8}\prod_{j=1}^{4}\int\frac{{\rm d}^3p_j\,{\rm d}\varepsilon_j}{(2\pi\hbar)^4}|V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_3}+\sigma V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_4}|^2(2\pi\hbar)^4\delta(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)\delta(\varepsilon_1+\varepsilon_2-\varepsilon_3-\varepsilon_4)$$
$$\times A_1A_2A_3A_4\left[(1+\sigma\phi_1)(1+\sigma\phi_2)\phi_3\phi_4-\phi_1\phi_2(1+\sigma\phi_3)(1+\sigma\phi_4)\right]\ln\frac{(1+\sigma\phi_1)(1+\sigma\phi_2)\phi_3\phi_4}{\phi_1\phi_2(1+\sigma\phi_3)(1+\sigma\phi_4)}. \quad (80)$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ただし、$A_j = A(\mathbf{p}_j\varepsilon_j, \mathbf{r}t)$ 等の簡略化を用いた。ここで、任意の $x, y > 0$ に対し $(x-y)\ln(x/y) \geq 0$ が成立することに注意すると、$\partial s^{(2)}_{\rm col}/\partial t \geq 0$ が結論できる。これは、Boltzmann の H 定理に他ならない。より正確には、量子効果を取り込んだ H 定理である。さらに、等号が成立するのは、対数関数が 0 となる

$$\ln\frac{1+\sigma\phi_1}{\phi_1} + \ln\frac{1+\sigma\phi_2}{\phi_2} - \ln\frac{1+\sigma\phi_3}{\phi_3} - \ln\frac{1+\sigma\phi_4}{\phi_4} = 0$$

の場合である。この条件と (80) 式における二つの δ 関数を考慮すると、$\ln[(1+\sigma\phi_1)/\phi_1]$ が $\mathbf{p}_1$ と ε_1 に関する 1 次関数でなければならないこと、すなわち、

$$\ln\frac{1+\sigma\phi_1}{\phi_1} = \alpha + \beta(\varepsilon_1 - \mathbf{v}\cdot\mathbf{p}_1) \tag{81}$$

が結論できる。ここで α、β および $\mathbf{v}$ は、$\mathbf{r}t$ の任意関数である。この条件を用いると、衝突積分を 0 とする分布関数 $\phi = \phi^{(\rm le)}$ として次式を得る。

$$\phi^{(\rm le)}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = \frac{1}{{\rm e}^{\beta(\mathbf{r}t)[\varepsilon - \mathbf{v}(\mathbf{r}t)\cdot\mathbf{p}]+\alpha(\mathbf{r}t)} - \sigma}. \tag{82}$$

これは、局所平衡分布に他ならない。

このようにして、摂動の 2 次までの範囲内で H 定理の成立を証明でき、さらに、エントロピー生成をゼロにする分布関数 $\phi^{(\rm le)}$ の形も決定できた。2 次摂動を用いた全く同じ議論により、この $\phi^{(\rm le)}$ が、(73) 式の衝突積分そのものをゼロにすることも簡単に示せる。

不等式 $\partial s_{\rm col}/\partial t \geq 0$ が摂動の無限次まで成立するか否かは重要な問題である。しかし、その一般的証明はまだ無い。一方で、相互作用の強さに拠らず衝突によりエントロピーが増大すると期待することは、物理的・直観的にきわめて自然である。

4 準粒子近似と準古典近似

(70) 式と (72) 式の量子輸送方程式は、非常に多くの場合、状態密度に関連したスペクトル関数 A の情報を消去し、分布関数のみの方程式に簡略化して用いられる。この情報消去の手法として準粒子近似と準古典近似という二つの近似法が存在する。ここでは、これら二つの近似法を、2 次摂動の自己エネルギー (75) を採用して説明する。これにより、Boltzmann 方程式が、上述の量子輸送方程式の一つの極限として導かれることも明らかになる。また、輸送方程式論でしばしば説明なしに導入される「位相空間の分布関数」という概念 [12] が、どのような条件下で正当化されるのかも明確になるであろう。

4.1 準粒子近似

まず準粒子近似について考察する。この近似は、スペクトル関数に δ 関数的なピークが存在する場合に非常に良い近似となる。ここでは典型例として相互作用が小さい場合を考え、まず、(70)

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

式において自己エネルギー項を無視する。対応するスペクトル関数 $A=-2\mathrm{Im}G^{\mathrm{R}}$ は、(63) 式より

$$A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\approx 2\pi\delta\left(\varepsilon-\xi_{\mathbf{p}}\right),\qquad \xi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}t)\equiv\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+U(\mathbf{r}t)-\mu, \tag{83}$$

と得られる。同じ近似の精度で、(72) 式の左辺において $\mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}$ および $A_\Sigma=-2\mathrm{Im}\Sigma^{\mathrm{R}}$ が関与する項を落とすことができる。その方程式を (63) 式と (67) 式を用いてあらわに書き下すと、次のようになる。

$$\frac{\partial(A\phi)}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\frac{\partial(A\phi)}{\partial\mathbf{r}}+\frac{\partial U}{\partial t}\frac{\partial(A\phi)}{\partial\varepsilon}-\frac{\partial U}{\partial\mathbf{r}}\cdot\frac{\partial(A\phi)}{\partial\mathbf{p}}=\mathcal{C}. \tag{84}$$

この式に $(2\pi)^{-1}$ をかけて ε についての積分を実行する。そしてその結果を

$$f(\mathbf{p},\mathbf{r},t)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)=\phi(\mathbf{p}\xi_{\mathbf{p}},\mathbf{r}t) \tag{85}$$

で定義された分布関数で表すと、以下のようになる。

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\frac{\partial f}{\partial\mathbf{r}}-\frac{\partial U}{\partial\mathbf{r}}\cdot\frac{\partial f}{\partial\mathbf{p}}=I_{\mathbf{p}}[f]. \tag{86a}$$

ここで $I_{\mathbf{p}}[f]$ は衝突積分で、(73) 式に (59), (75), (83) 式を代入して ε 積分を実行することにより、分布関数 f の汎関数として次のように得られる。

$$\begin{aligned}I_{\mathbf{p}}[f]\equiv\frac{\hbar^2}{2}\prod_{j=2}^{4}\int\frac{\mathrm{d}^3p_j}{(2\pi\hbar)^3}&|V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3}+\sigma V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_4}|^2(2\pi)^4\delta(\mathbf{p}+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)\delta(\xi_{\mathbf{p}}+\xi_{\mathbf{p}_2}-\xi_{\mathbf{p}_3}-\xi_{\mathbf{p}_4})\\&\times\left[(1+\sigma f)(1+\sigma f_2)f_3f_4-ff_2(1+\sigma f_3)(1+\sigma f_4)\right].\end{aligned} \tag{86b}$$

ここで $f_j=f(\mathbf{p}_j,\mathbf{r},t)$ 等と略記した。(86) 式は量子効果を取り込んだ Boltzmann 方程式に他ならない。実際、(86b) 式で交換効果を無視する近似 $\sigma V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3}V^*_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_4}\to 0$ を採用し、さらに $(1+\sigma f)\to 1$ により高温極限をとると、二体散乱に対する通常の Boltzmann 方程式が得られる [12]。ただし、ここでの f は無次元量で、平衡状態で $(\mathrm{e}^{\beta\xi_{\mathbf{p}}}-\sigma)^{-1}$ に一致するように規格化されている。

(86) 式に対応するエントロピー密度、エントロピー流束密度およびエントロピー生成密度の表式は、(77), (78), (80) 式に同じ近似を採用することにより、それぞれ下記のように得られる。

$$s\equiv k_{\mathrm{B}}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\left[-f\ln f+\sigma(1+\sigma f)\ln(1+\sigma f)\right], \tag{87}$$

$$\mathbf{j}_s\equiv k_{\mathrm{B}}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\left[-f\ln f+\sigma(1+\sigma f)\ln(1+\sigma f)\right]\frac{\mathbf{p}}{m}, \tag{88}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial s^{(2)}_{\mathrm{col}}}{\partial t}=\frac{k_{\mathrm{B}}\hbar^2}{8}\prod_{j=1}^{4}\int\frac{\mathrm{d}^3p_j}{(2\pi\hbar)^3}&|V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_3}+\sigma V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_4}|^2(2\pi)^4\delta(\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)\delta(\xi_{\mathbf{p}}+\xi_{\mathbf{p}_2}-\xi_{\mathbf{p}_3}-\xi_{\mathbf{p}_4})\\&\times\left[(1+\sigma f_1)(1+\sigma f_2)f_3f_4-f_1f_2(1+\sigma f_3)(1+\sigma f_4)\right]\ln\frac{(1+\sigma f_1)(1+\sigma f_2)f_3f_4}{f_1f_2(1+\sigma f_3)(1+\sigma f_4)}.\end{aligned} \tag{89}$$

(87) 式は相互作用のない系に対するエントロピー密度の表式に他ならない。これらの表式は、また、(86) 式に $k_{\mathrm{B}}\ln\frac{1+\sigma f}{f}$ をかけて ε 積分することによっても得られる。Boltzmann のエントロピーとそ

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

の H 定理は、これらの表式で高温極限をとる操作、すなわち $\sigma V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3} V^*_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_4} \to 0$ および $1+\sigma f \to 1$ により再現される。

以上のように、希薄気体に準粒子近似を適用することにより、位相空間で定義された分布関数 f に対する輸送方程式が導出できた。しかし、準粒子近似が良い精度で成り立つには、相互作用が弱いことは本質ではなく、ただ自己エネルギー Σ^{R} の虚部が十分小さいければよい。言い換えると、準粒子の寿命が十分長ければ成立する近似である。従って、準粒子間の散乱がゼロに近づく低温の Fermi 液体 [8] についても適用可能である。このことを具体的に見てゆこう。まず、(72) 式の左辺で A_Σ に比例する項を落とし、また $G_0^{-1} - \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}$ を $\varepsilon = 0$ および Fermi 運動量 $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{\mathrm{F}}$ から 1 次まで展開し、

$$G_0^{-1} - \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}} \approx \frac{\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}}}{a}, \tag{90}$$

と近似する。ここで a と $\xi_{\mathbf{p}}$ は、それぞれ繰り込み因子および準粒子エネルギーと呼ばれ、以下のように定義されている。

$$\frac{1}{a} \equiv 1 - \left.\frac{\partial \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0,\mathbf{p}=\mathbf{p}_{\mathrm{F}}}, \tag{91a}$$

$$\xi_{\mathbf{p}} \equiv a\left[\frac{\mathbf{p}_{\mathrm{F}}^2}{2m} + U + \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}(\mathbf{0},0) - \mu\right] + \mathbf{v}_{\mathrm{F}} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}_{\mathrm{F}}). \tag{91b}$$

ただし、(91b) 式の右辺に現れる $\mathbf{v}_{\mathrm{F}}$ は Fermi 速度であり、次式により導入された。

$$\frac{\mathbf{v}_{\mathrm{F}}}{a} \equiv \frac{\mathbf{p}_{\mathrm{F}}}{m} + \left.\frac{\partial \mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}}{\partial \mathbf{p}}\right|_{\varepsilon=0,\mathbf{p}=\mathbf{p}_{\mathrm{F}}}. \tag{91c}$$

この近似の下でのスペクトル関数 $A = -2\mathrm{Im}G^{\mathrm{R}}$ は、(70) 式より $A(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) \approx 2\pi a \delta(\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}})$ と求まる。そこで、分布関数を

$$f(\mathbf{p},\mathbf{r},t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi a} A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t) \tag{92}$$

で定義すると、(72) 式より (86) 式が得られる。ただし、ここでは詳細は省略するが、その場合における (86b) 式の右辺の $V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3} + \sigma V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_4}$ は準粒子間の有効相互作用に置き換わる [8]。

4.2 準古典近似

Fermi 粒子系において、準粒子近似に代わるより適用範囲の広い近似法として、準古典近似がある。例えば、金属中の電子において不純物散乱や電子格子相互作用が強い場合には、準粒子の寿命は有限となり、自己エネルギー Σ^{R} の虚部も無視できない大きさを持つ。準古典近似はこのような場合にも有効である。この近似は Prange と Kadanoff により電子格子相互作用が大きい場合に対して初めて導入された [38]。その後、超伝導や超流動にも適用され、第二種超伝導体の平衡状態 [39]、非平衡状態 [40, 41]、および超流動 ^{3}He の動力学 [42] を記述する「準古典方程式」が導かれた。例えば、第二種超伝導体においては、不純物散乱が大きな役割を果たし、準粒子近似が不適当な場合が多い。Eilenberger は、このような場合について、超伝導の Gor'kov 方程式を簡

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

略化するために準古典近似を採用し、Ginzburg-Landau 方程式を全温度・磁場領域に拡張するいわゆる Eilenberger 方程式を導出した [39]。これらの方程式群は、超伝導・超流動状態の理論的解明に広く用いられ、大きな成果を挙げている。

このように、準粒子近似よりも広い適用領域をもつ準古典近似は、準粒子近似の ε 積分の代わりに、(91b) 式の $\xi_{\mathbf{p}}$ についての積分を行って A の自由度を消去する。具体的に Fermi 粒子系を考えると、導出の詳細は下記の通りである。まず、(67) 式と (90) 式および (91b) 式を用いて (72) 式を具体的に書き下すと、以下のようになる。

$$\frac{1}{a}\frac{\partial(A\phi)}{\partial t}+\frac{\mathbf{v}_{\mathrm{F}}}{a}\cdot\frac{\partial(A\phi)}{\partial \mathbf{r}}+\frac{\partial(U+\mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}})}{\partial t}\frac{\partial(A\phi)}{\partial\varepsilon}-\frac{\partial(U+\mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}})}{\partial \mathbf{r}}\cdot\frac{\partial(A\phi)}{\partial \mathbf{p}}-i\sigma\{\Sigma^{12},\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}\}=\mathcal{C}. \quad (93)$$

ここで左辺において $A_\Sigma\phi\approx i\sigma\Sigma^{12}$ を用いた。この式に現れる自己エネルギーの $\mathbf{p}$ 微分の絶対値 $|\partial\check{\Sigma}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)/\partial\mathbf{p}|$ は、準粒子散乱が大きい場合でも $|\check{\Sigma}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)|/p_{\mathrm{F}}$ の程度であると期待できる。従って、$\check{\Sigma}$ の $|\mathbf{p}|$ 依存性を無視し、

$$\check{\Sigma}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\approx\check{\Sigma}(\mathbf{p}_{\mathrm{F}}\varepsilon,\mathbf{r}t) \quad (94)$$

とする近似が良い精度で成り立つであろう。この場合のスペクトル関数 $A=-2\mathrm{Im}G^{\mathrm{R}}$ の表式は、$\mathrm{Im}\Sigma^{\mathrm{R}}=-\frac{1}{2}A_\Sigma$ の関係と (90) 式より、

$$A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\approx\frac{a^2A_\Sigma(\mathbf{p}_{\mathrm{F}}\varepsilon,\mathbf{r}t)}{(\varepsilon-\xi_{\mathbf{p}})^2+\left[\frac{1}{2}aA_\Sigma(\mathbf{p}_{\mathrm{F}}\varepsilon,\mathbf{r}t)\right]^2} \quad (95)$$

で与えられる。その $|\mathbf{p}|$ 依存性は $\xi_{\mathbf{p}}$ のみに現れ、$\xi_{\mathbf{p}}$ を変数とし幅 $\frac{1}{2}aA_\Sigma$ と面積 $2\pi a$ をもつ Lorentz 型の関数とみなせる。そこで、準古典近似における分布関数を以下のように定義する。

$$f^{\mathrm{qc}}(\mathbf{p}_{\mathrm{F}}\varepsilon,\mathbf{r}t)\equiv\lim_{\xi_{\mathrm{c}}\to\infty}\int_{-\xi_{\mathrm{c}}}^{\xi_{\mathrm{c}}}\frac{\mathrm{d}\xi_{\mathbf{p}}}{2\pi a}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t). \quad (96)$$

このように、ここでの分布関数は、準粒子近似における $|\mathbf{p}|$ の代わりに ε を引数とし、運動量は角度依存性のみをもつ変数となる。次に、(93) 式において $\xi_{\mathbf{p}}$ 積分を (96) 式のように実行する。すると、左辺第 4 項は積分により消える。また、第 5 項に現れる $\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}$ の $\xi_{\mathbf{p}}$ 積分は、(60a) 式と (95) 式より

$$\lim_{\xi_{\mathrm{c}}\to\infty}\int_{-\xi_{\mathrm{c}}}^{\xi_{\mathrm{c}}}\frac{\mathrm{d}\xi_{\mathbf{p}}}{2\pi a}\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)=\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon'}{2\pi}\frac{1}{\varepsilon-\varepsilon'} \quad (97)$$

と評価できる。従って、$\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}$ の微分が関与する第 5 項も $\xi_{\mathbf{p}}$ 積分により消えることが分かる。一方、(73) 式に (59) 式と (75) 式を代入して得られる衝突積分 $\mathcal{C}$ に関しては、状態密度 $N(\xi)\equiv\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\delta(\xi-\xi_{\mathbf{p}})$ を導入し、$N(\xi)\approx N(0)$ と近似して ξ 積分を同様に実行する。このようにして、(93) 式より、準古典近似における輸送方程式が最終的に以下のように得られる。

$$\frac{\partial f^{\mathrm{qc}}}{\partial t}+\mathbf{v}_{\mathrm{F}}\cdot\frac{\partial f^{\mathrm{qc}}}{\partial \mathbf{r}}+a\frac{\partial(U+\mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}})}{\partial t}\frac{\partial f^{\mathrm{qc}}}{\partial\varepsilon}=I_{\mathbf{p}}^{\mathrm{qc}}[f^{\mathrm{qc}}], \quad (98)$$

$$I_{\mathbf{p}}^{\mathrm{qc}}[f^{\mathrm{qc}}]\equiv\frac{\hbar^2}{2}[N(0)]^3(2\pi a)^4\prod_{j=2}^{4}\int\frac{\mathrm{d}\varepsilon_j\mathrm{d}\Omega_j}{4\pi}|V_{\mathbf{p}_{\mathrm{F}}-\mathbf{p}_{\mathrm{F}3}}+\sigma V_{\mathbf{p}_{\mathrm{F}}-\mathbf{p}_{\mathrm{F}4}}|^2\delta(\mathbf{p}_{\mathrm{F}}+\mathbf{p}_{\mathrm{F}2}-\mathbf{p}_{\mathrm{F}3}-\mathbf{p}_{\mathrm{F}4})$$
$$\times\delta(\varepsilon+\varepsilon_2-\varepsilon_3-\varepsilon_4)\left[(1+\sigma f^{\mathrm{qc}})(1+\sigma f_2^{\mathrm{qc}})f_3^{\mathrm{qc}}f_4^{\mathrm{qc}}-f^{\mathrm{qc}}f_2^{\mathrm{qc}}(1+\sigma f_3^{\mathrm{qc}})(1+\sigma f_4^{\mathrm{qc}})\right]. \quad (99)$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ただし、$\mathrm{d}\Omega_j$ は $\mathbf{p}_j$ 方向の微小立体角を表す。

このようにして準古典近似の輸送方程式が得られた。この節の最初にも述べたように、この方程式は準粒子の寿命が短い場合にも適用できるという大きな利点がある。ここでの導出は、(75) 式の自己エネルギーを採用して相互作用が弱い場合に対して行った。しかし、相互作用の効果が無視できない低温の Fermi 液体にも適用でき、また、超伝導・超流動状態への拡張も可能である。詳細は文献 [42] を参照されたい。

5 荷電系の量子輸送方程式

電磁場中の荷電粒子の運動を記述する量子輸送方程式を導出するには、方程式のゲージ不変性に関連した特別の配慮が必要である。より具体的には、(55) 式を変更してゲージ不変な Wiger 変換を導入し、それに対応する Moyal 積の表式を用いて勾配展開を行わなければならない。以下では文献 [41] に従ってこのことをより詳しく見てゆこう。

$\hat{\mathcal{H}}_0$ として (15a) 式の代わりに次のハミルトニアンを考える。

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1)\hat{H}_1^{(0)}\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)\,\mathrm{d}^3r_1, \qquad \hat{H}_1^{(0)} \equiv \frac{1}{2m}\left[\hat{\mathbf{p}}_1 - \frac{e}{c}\mathbf{A}(1)\right]^2 + eA_4(1) - \mu. \tag{100}$$

ここで、$\mathbf{A}(1)$ と $A_4(1)$ は、それぞれ電磁場のベクトル・ポテンシャルとスカラー・ポテンシャルである。この $\hat{H}_1^{(0)}$ に対する Dyson 方程式も (54) 式で与えられ、以下のゲージ変換に対して不変である。

$$\mathbf{A}(1) \to \mathbf{A}(1) + \boldsymbol{\nabla}_1\chi(1), \quad A_4(1) \to A_4(1) - \frac{1}{c}\frac{\partial\chi(1)}{\partial t_1}, \tag{101a}$$

$$\check{G}(1,2) \to \exp\left\{i\frac{e}{\hbar c}[\chi(1) - \chi(2)]\right\}\check{G}(1,2). \tag{101b}$$

さて、標準的な処方箋に従って (54) 式に Wigner 変換を施し、勾配展開を行うことを考える。しかし、通常の Wigner 変換 (55) を用いると、(a) 方程式のゲージ不変性が破れる、(b) ホール効果が記述できない、などの問題が生じる。これは、変換 (55) が重心座標に関するゲージ不変性を破るためである。

この点を改善するために、1956 年に Stratonovich [43] によって導入された「ゲージ不変な Wigner 変換」を採用する。この Wigner 変換は、(55) 式の代わりに以下のように定義されている。

$$\check{G}(1,2) = \mathrm{e}^{iI(1,2)}\int \frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\,\check{G}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}_{12}t_{12})\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12} - \varepsilon\bar{t}_{12})/\hbar}. \tag{102}$$

ここに現れる位相因子 $I(1,2)$ は、4 元ベクトル $\vec{A} \equiv (\boldsymbol{A}, -cA_4)$ および $\vec{r}_1 = (\mathbf{r}_1, t_1)$ を用いて、

$$I(1,2) \equiv \frac{e}{\hbar c}\int_{\vec{r}_2}^{\vec{r}_1} \vec{A}(\vec{s})\cdot\mathrm{d}\vec{s}, \tag{103}$$

で与えられる。ただし積分経路は直線である。この位相因子は、ゲージ変換 (101a) に際して

$$\mathrm{e}^{iI(1,2)} \longrightarrow \exp\left\{i\frac{e}{\hbar c}[\chi(1) - \chi(2)]\right\}\mathrm{e}^{iI(1,2)} \tag{104}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

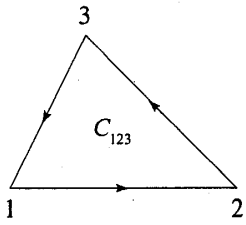


図 7: 閉曲線 C_{123}

と変換され、(101b) 式の $\check{G}$ と全く同じ位相変化をする。言い換えると、(102) 式における Fourier 変換前の関数 $\mathrm{e}^{-iI(1,2)}\check{G}(1,2)$ をゲージ不変にする。実際、(101b) 式で $2=1$ と置くとわかるように、$\check{G}(1,2)$ は重心座標に関してゲージ不変な関数である。因子 $\mathrm{e}^{-iI(1,2)}$ は、$\check{G}(1,2)$ のゲージ変換における相対座標依存性を消し去り、重心座標のみの変換性に帰着する効果がある。

(102) 式は、藤田により、Weyl 変換を用いて優美に再導出された [44]。そのポイントは、「相対座標に関するゲージ依存性を無くした後にその Fourier 変換を実行する」ことであり、対応する Wigner 表示 $\check{G}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)$ は必然的にゲージ不変となる。そして、この変換は電磁場に時間・空間依存性がある場合にも有効である [41]。また、その基本思想は超伝導状態にも拡張可能であり [41]、ペア・ポテンシャルが電荷 $2e$ を持つ有効波動関数のようにふるまうという事実がきちんと導出できる。

Wigner 変換 (102) を用いると、「行列の積」の Wigner 変換である (64) 式も変更を受け、(65) 式の Moyal 積に電磁場がゲージ不変な形で現れる。ここでは、簡単のため一様電磁場の場合を考察し、このことを見てゆこう [41]。(64) 式左辺の $C(1,3)$ と $D(3,2)$ に (102) 式の変換を施すと、位相因子 $\mathrm{e}^{iI(1,3)+iI(3,2)}$ が現れる。この位相因子を、$\mathrm{e}^{iI(1,2)}$ とそれ以外の寄与の積として、以下のように表す。

$$\mathrm{e}^{iI(1,3)+iI(3,2)}=\mathrm{e}^{iI(1,2)+i\phi_{123}},\qquad \phi_{123}\equiv\frac{e}{\hbar c}\oint_{C_{123}}\vec{A}(\vec{s})\cdot\mathrm{d}\vec{s}. \tag{105}$$

ただし位相 ϕ_{123} の定義に現れる閉曲線 C_{123} は、上図のように定義されている。さらに Stokes の定理を用いると、この位相因子が、電場 $\mathbf{E}\equiv-\boldsymbol{\nabla}A_4-\frac{1}{c}\partial_t\mathbf{A}$ および磁場 $\mathbf{B}\equiv\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}$ を用いて、以下のように表せることがわかる。

$$\phi_{123}=\frac{e}{2\hbar c}\big[-c\mathbf{E}\cdot(\bar{\mathbf{r}}_{13}\bar{t}_{32}-\bar{t}_{13}\bar{\mathbf{r}}_{32})-\mathbf{B}\cdot(\bar{\mathbf{r}}_{13}\times\bar{\mathbf{r}}_{32})\big]. \tag{106}$$

(105) 式の位相因子を考慮すると、(64) 式が次のように変更される。

$$\int C(1,3)D(3,2)\,\mathrm{d}3=\mathrm{e}^{iI(1,2)}\int\frac{\mathrm{d}^3p\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\,C(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}_{12}t_{12})*D(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}_{12}t_{12})\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12}-\varepsilon\bar{t}_{12})/\hbar}. \tag{107}$$

ただし、ここでの Moyal 積は以下のように定義されている。

$$\begin{aligned}C(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)*D(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\equiv{}&C(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\exp\left[\frac{i\hbar}{2}\left(\overleftarrow{\partial}_{\mathbf{r}}\cdot\overrightarrow{\partial}_{\mathbf{p}}-\overleftarrow{\partial}_t\overrightarrow{\partial}_\varepsilon-\overleftarrow{\partial}_{\mathbf{p}}\cdot\overrightarrow{\partial}_{\mathbf{r}}+\overleftarrow{\partial}_\varepsilon\overrightarrow{\partial}_t\right)\right]\\&\times\exp\left\{\frac{i\hbar}{2}\left[-e\mathbf{E}\cdot\left(\overleftarrow{\partial}_{\mathbf{p}}\overrightarrow{\partial}_\varepsilon-\overleftarrow{\partial}_\varepsilon\overrightarrow{\partial}_{\mathbf{p}}\right)+\frac{e}{c}\mathbf{B}\cdot\left(\overleftarrow{\partial}_{\mathbf{p}}\times\overrightarrow{\partial}_{\mathbf{p}}\right)\right]\right\}D(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t).\end{aligned} \tag{108}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

この Moyal 積の導出は、1956 年の Stratonovich による研究から時代が下って、2001 年のことである [41, 45]。(108) 式を微分演算子に関して 1 次まで展開すると、再び (67) 式のように表すことでき、対応する Poisson 括弧式は

$$\begin{aligned}&\{C,D\}\\&\equiv \frac{\partial C}{\partial \mathbf{r}}\cdot\frac{\partial D}{\partial \mathbf{p}}-\frac{\partial C}{\partial t}\frac{\partial D}{\partial \varepsilon}-\frac{\partial C}{\partial \mathbf{p}}\cdot\frac{\partial D}{\partial \mathbf{r}}+\frac{\partial C}{\partial \varepsilon}\frac{\partial D}{\partial t}-e\mathbf{E}\cdot\left(\frac{\partial C}{\partial \mathbf{p}}\frac{\partial D}{\partial \varepsilon}-\frac{\partial C}{\partial \varepsilon}\frac{\partial D}{\partial \mathbf{p}}\right)+\frac{e}{c}\mathbf{B}\cdot\left(\frac{\partial C}{\partial \mathbf{p}}\times\frac{\partial D}{\partial \mathbf{p}}\right),\end{aligned} \tag{109}$$

で与えられる。

以上で準備が整ったので、(100) 式の $\hat{H}_1^{(0)}$ に対する Dyson 方程式 (54) を Wigner 表示に変換する。(102) 式を (54) 式に代入すると、左辺には位相因子 $I(1,2)$ の微分項が現れる。それらを計算するために、まず、(103) 式の積分経路を $\vec{R}\equiv\frac{1}{2}(\vec{r}_1+\vec{r}_2)$ と $\vec{r}\equiv\vec{r}_1-\vec{r}_2$ を用いて $\vec{s}=\vec{R}+\eta\vec{r}$ $(-\frac{1}{2}\le\eta\le\frac{1}{2})$ と表す。次いで、被積分関数 $\vec{A}(\vec{s})$ を $\vec{s}=\vec{R}$ から Taylor 展開し、各次数について個別に η 積分を行う。すると $I(1,2)$ が以下のように表せることがわかる。

$$I(1,2)=\frac{e}{\hbar c}g\big(\vec{r}\cdot\vec{\partial}_{\vec{R}}\big)\,\vec{r}\cdot\vec{A}(\vec{R}),\qquad g(x)\equiv\frac{\tanh(x/2)}{x/2}. \tag{110}$$

この表式に演算子 $\partial_{\vec{r}_1}=\partial_{\vec{r}}+\frac{1}{2}\partial_{\vec{R}}$ を作用して微分を実行する。その際、$r_\nu\partial_\mu A_\nu=r_\nu\partial_\nu A_\mu+r_\nu(\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu)$ の書き換えを行い $(\mu,\nu=1,2,3,4)$、また、等式 $g(x)+[g'(x)+\frac{1}{2}g(x)]x=\mathrm{e}^{x/2}$ に注意する。すると、$\partial I(1,2)/\partial r_{1\mu}$ が次のように計算できる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial I(1,2)}{\partial r_{1\mu}}&=\frac{e}{\hbar c}\left\{A_\mu(1)+\left[g'(\vec{r}\cdot\vec{\partial}_{\vec{R}})+\frac{1}{2}g(\vec{r}\cdot\vec{\partial}_{\vec{R}})\right]\sum_\nu r_\nu\left[\frac{\partial A_\nu(\vec{R})}{\partial R_\mu}-\frac{\partial A_\mu(\vec{R})}{\partial R_\nu}\right]\right\}\\&=\begin{cases}\dfrac{e}{\hbar c}\left[\mathbf{A}(1)+\dfrac{1}{2}(c\bar{t}_{12}\mathbf{E}+\bar{\mathbf{r}}_{12}\times\mathbf{B})\right]_\mu & :\mu=1,2,3\\ -\dfrac{e}{\hbar}\left[A_4(1)+\dfrac{1}{2}\bar{\mathbf{r}}_{12}\cdot\mathbf{E}\right] & :\mu=4\end{cases}.\end{aligned} \tag{111}$$

ここで第一の等式は恒等式であり、また第二の等式においては一様静電磁場の条件を用いた。この表式を用いて、(54) 式における $\check{G}^{\mathrm{K}}$ のゲージ不変な時間・空間微分項を、(64) 式を導出したのと同様の手続きにより変形する。その結果得られた表式を (108) 式における $*$ 積の定義と見較べると、以下の簡潔な表式を得る。

$$\left[\hat{\mathbf{p}}_1-\frac{e}{c}\mathbf{A}(1)\right]\check{G}^{\mathrm{K}}(1,2)=\mathrm{e}^{iI(1,2)}\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\,\mathbf{p}*\check{G}^{\mathrm{K}}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}_{12}t_{12})\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12}-\varepsilon\bar{t}_{12})/\hbar}, \tag{112a}$$

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-eA_4(1)\right]\check{G}^{\mathrm{K}}(1,2)=\mathrm{e}^{iI(1,2)}\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\,\varepsilon*\check{G}^{\mathrm{K}}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}_{12}t_{12})\,\mathrm{e}^{i(\mathbf{p}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12}-\varepsilon\bar{t}_{12})/\hbar}. \tag{112b}$$

これらの表式は、$\hat{\mathbf{p}}_1-\frac{e}{c}\mathbf{A}(1)$ および $i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-eA_4(1)$ のゲージ不変な Wigner 表示が、それぞれ $\mathbf{p}$ および ε であることを示している。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

(107) 式および (112) 式を用いると、(54) 式の Wigner 表示が、(108) 式の Moyal 積を用いて以下のように簡潔に表現できることがわかる。

$$\left[\left(\varepsilon - \frac{p^2}{2m} + \mu\right)\check{1} - \check{\Sigma}^{\mathrm{K}}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)\right] * \check{G}^{\mathrm{K}}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t) = \check{1}. \tag{113}$$

この式より、3.3 節の手続きを経て、電磁場中の荷電粒子に対する量子輸送方程式を導くことができる。特に希薄気体の場合には、4.1 節と同様にして、(85) 式の分布関数 f に対する次の Boltzmann 方程式を得る。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{B}\right)\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I_{\mathbf{p}}[f]. \tag{114}$$

ここで $\mathbf{v} \equiv \mathbf{p}/m$ である。電気抵抗を論じるには二体相互作用のみでは不十分で、ハミルトニアンに不純物散乱やフォノン散乱等の効果を取り入れ、そこから導かれる $I_{\mathbf{p}}[f]$ を用いる必要があることに注意しておく。

最後に、電磁場中におけるゲージ不変な輸送方程式を得るためにしばしば使われるもう一つの方法について言及しておく。その要点は、通常の Wigner 変換 (55) を行った後に次の変数変換を施すことにある。

$$\mathbf{p} \longrightarrow \boldsymbol{\pi} \equiv \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \qquad \varepsilon \longrightarrow \pi_4 \equiv \varepsilon - eA_4. \tag{115}$$

この方法は Keldysh [13] や久保 [46] らにより用いられた。また、そこから得られる Moyal 積は、一様静電磁場の場合において、(108) 式に一致することが示されている [47]。

しかし、この「変数変換」の方法には以下のような問題点がある。まず第一に、Wigner 表示のゲージ不変性が破れる点が挙げられる。実際、変数変換 (115) に対応する Wigner 表示 $\check{G}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)$ をあらわに書き下すと、以下のようになる。

$$\check{G}(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}_{12}t_{12}) = \int \mathrm{d}^3\bar{r}_{12}\mathrm{d}\bar{t}_{12}\,\check{G}(1,2)\,\mathrm{e}^{i\{[\mathbf{p}-(e/c)\mathbf{A}]\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12}-(\varepsilon-eA_4)\bar{t}_{12}\}/\hbar}. \tag{116}$$

この表式を (102) 式の逆変換と比較すると、(102) 式の位相因子 $I(1,2)$ が $(e/c)\mathbf{A}\cdot\bar{\mathbf{r}}_{12} - eA_4\bar{t}_{12}$ で置き換わっていることに気づく。この Wigner 変換は、ゲージ変換 (101) における関数 χ が時間・空間座標の 1 次関数である場合を除き、一般にゲージ不変性を破る。また、(116) 式に現れる電磁ポテンシャルとしてどの点の値を採用すべきかにも不定性が生じる。例外として、一様静電磁場の場合には、(116) 式が (102) 式と同じ結果を与える。「変数変換」の方法におけるこの第一の問題点は、Stratonovich により既に指摘され [43]、また Serimaa らによって詳しく論じられた [48]。

第二の問題点として、「変数変換」の方法は超伝導状態に適用できない。超伝導状態においては、ペア・ポテンシャル $\Delta(1,2)$ や異常グリーン関数 $F(1,2)$ のように、正常状態のグリーン関数とは異なるゲージ変換性を示す関数が現れる [8]。例えば、ペア・ポテンシャルは、(101) 式に対応して $\Delta(1,2) \rightarrow \exp\{i\frac{e}{\hbar c}[\chi(1)+\chi(2)]\}\Delta(1,2)$ と変換され、$2 = 1$ とおいた場合に電荷 $2e$ をもつ波動関数として振舞うことがわかる。もし、これらの積 $\Delta(1,3)F^*(3,2)$ の Wigner 変換を「変数変換」の方法で導出すると、$\Delta(\mathbf{p}\varepsilon, \mathbf{r}t)$ に対して通常の微分演算子 $\partial/\partial\mathbf{r}$ および $\partial/\partial t$ が作用する結果となり、「ペア・ポテンシャルが電荷 $2e$ を持つ有効波動関数として振舞う」と

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

いう事実が出てこない。一方、(102) 式の変換は超伝導状態に拡張でき、ただ右辺の位相因子を $\exp[iI(\vec{r}_1,\vec{R})+iI(\vec{r}_2,\vec{R})]$ で置き換えればよい $[\vec{R}\equiv\frac{1}{2}(\vec{r}_1+\vec{r}_2)]$。対応する Wigner 表示 $\Delta(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)$ はゲージ変換に際して $\Delta(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\to\exp\left[i\frac{2e}{\hbar c}\chi(\mathbf{r}t)\right]\Delta(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)$ と変化し、また、それに作用する微分演算子として $\partial/\partial\mathbf{r}-i(2e/\hbar c)\mathbf{A}(\mathbf{r}t)$ および $\partial/\partial t+i(2e/\hbar)A_4(\mathbf{r}t)$ が自然に現れる [41]。

以上のように、「変数変換」の方法には基本的な問題があるように思われる。

6 二体相関

2.8 節で考察した Φ 微分近似では、Φ を与えることにより高次の相関関数を計算することが原理的に可能である。ここでは揺らぎとも関連が深い二体相関関数を取り上げ、文献 [21] に従ってこのことを見てゆこう。

考察するのは次の二体相関関数である。

$$\mathcal{K}^{ij,kl}(12,34)\equiv\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\langle T_C\hat{\psi}_{\rm H}(1^i)\hat{\psi}_{\rm H}(3^k)\hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(4^l)\hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(2^j)\rangle-G^{ij}(1,2)G^{kl}(3,4). \tag{117}$$

この相関関数が従う方程式を求めるため、Keldysh 経路上で仮想的な摂動ポテンシャル $W(1^C,2^C)$ を余分に加える。そして、$W(1^C,2^C)$ の効果を除いた全ハミルトニアン $\mathcal{H}(t)$ による相互作用表示を採用すると、(33) 式に代わって、C 上での摂動が次の演算子で記述されることになる。

$$\hat{\mathcal{S}}'_C\equiv T_C\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{i,j=1}^{2}(-1)^{i+j}\int{\rm d}1\int{\rm d}2\,\hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(1^i)W^{ij}(1,2)\hat{\psi}_{\rm H}(2^j)\right]. \tag{118}$$

ここで $(-1)^{i+j}$ は (24) 式の変形に由来し、また場の演算子の添え字 H は $\mathcal{H}(t)$ の Heisenberg 表示を意味する。$W^{ij}(1,2)\equiv W(1^i,2^j)$ を加えたときのグリーン関数は次式で与えられる。

$$G^{ij}(1,2;\check{W})=-\frac{i}{\hbar}\langle T_C\hat{\mathcal{S}}'_C\hat{\psi}_{\rm H}(1^i)\hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(2^j)\rangle/\langle T_C\hat{\mathcal{S}}'_C\rangle. \tag{119}$$

(117) 式の二体相関関数 $\mathcal{K}$ は、このグリーン関数から、

$$\mathcal{K}^{ii',jj'}(11',22')=(-1)^{j+j'}\sigma\frac{\delta G^{ii'}(1,1';\check{W})}{\delta W^{j'j}(2',2)}\bigg|_{\check{W}=\check{0}}, \tag{120}$$

の変分操作により得られることが簡単な計算で分かる。ここで σ は生成消滅演算子の交換関係に由来し、また $(-1)^{j+j'}$ は (118) 式の $(-1)^{i+j}$ の効果を消すために必要である。この式は簡略化して $\check{\check{\mathcal{K}}}=\sigma\delta\check{G}/\delta(\check{\tau}_3\check{W}\check{\tau}_3)$ と書けることに注意しておく。この関係を用いると、$\check{\check{\mathcal{K}}}$ を自己無撞着に決める方程式が以下のように導出できる。まず (119) 式の $\check{G}$ に対する Dyson 方程式は、(30) 式の $\hat{H}_1^{(0)}$ に $\check{W}$ の効果を付け加えることにより得られ、簡略化して次のように書ける。

$$\check{G}^{-1}\check{G}=\check{1},\qquad \check{G}^{-1}\equiv\check{\tau}_3\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}-U+\mu\right)-\check{\tau}_3(\check{W}+\check{\Sigma})\check{\tau}_3. \tag{121}$$

従って、$\check{G}$ の 1 次の微小変化 $\delta\check{G}$ は、$\check{G}^{-1}\delta\check{G}+\delta\check{G}^{-1}\check{G}=\check{0}$、すなわち

$$\sigma\delta\check{G}=\sigma\check{G}(-\delta\check{G}^{-1})\check{G}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を満たす。この式に

$$-\delta\check{G}^{-1}=\check{\tau}_3(\delta\check{W}+\delta\check{\Sigma})\check{\tau}_3=\delta(\check{\tau}_3\check{W}\check{\tau}_3)+\frac{\delta(\check{\tau}_3\check{\Sigma}\check{\tau}_3)}{\delta\check{G}}\frac{\delta\check{G}}{\delta(\check{\tau}_3\check{W}\check{\tau}_3)}\delta(\check{\tau}_3\check{W}\check{\tau}_3)$$

を代入して $\delta(\check{\tau}_3\check{W}\check{\tau}_3)$ で変分をとった後、$\check{W}=\check{0}$ と置く。その結果を (120) 式と次式で定義される結節関数

$$\Gamma^{ii',jj'}(11',22')\equiv-\sigma\frac{i}{\hbar}(-1)^{i+i'}\frac{\delta\Sigma^{i'i}(1',1)}{\delta G^{jj'}(2,2')}=-\frac{i}{\hbar}\frac{\delta^2\Phi}{\delta G^{ii'}(1,1')\delta G^{jj'}(2,2')},\tag{122}$$

を用いて書き換える。ただし (122) 式の第二の等式では (40) 式を用いた。すると $\check{\check{\mathcal{K}}}$ に対する次の積分方程式、すなわち Bethe-Salpeter 方程式を得る。

$$\mathcal{K}^{ii',jj'}(11',22')=\sigma G^{ij'}(1,2')G^{ji'}(2,1')+i\hbar\sigma\sum_{kk'll'}\int\mathrm{d}3\int\mathrm{d}3'\int\mathrm{d}4\int\mathrm{d}4'\,G^{ik'}(1,3')G^{ki'}(3,1')\times\Gamma^{kk',ll'}(33',44')\mathcal{K}^{ll',jj'}(44',22').\tag{123}$$

これは与えられた $\check{G}$ と $\check{\check{\Gamma}}$ に対し $\check{\check{\mathcal{K}}}$ を決定する方程式である。ここで (122) 式の関係に注意すると、汎関数 Φ が与えられれば二体相関関数も原理的に計算可能であることが理解できる。

積分方程式 (123) は形式的に解くことができ、$\check{\check{\mathcal{K}}}$ に対する次の表式を得る。

$$\check{\check{\mathcal{K}}}=\left(\check{\check{1}}-i\hbar\sigma\check{G}\check{G}\check{\check{\Gamma}}\right)^{-1}\sigma\check{G}\check{G}.\tag{124}$$

ここで $\check{\check{1}}$ と $\check{G}\check{G}$ は以下で定義された行列である。

$$(\check{\check{1}})^{ii',jj'}(11',22')=\delta_{ij}\delta_{i'j'}\delta(1,2)\delta(1',2'),\tag{125a}$$

$$(\check{G}\check{G})^{ii',jj'}(11',22')=G^{ij'}(1,2')G^{ji'}(2,1').\tag{125b}$$

(122) 式より、結節関数 $\check{\check{\Gamma}}$ が次の対称性を持つことは明らかである。

$$\Gamma^{ii',jj'}(11',22')=\Gamma^{jj',ii'}(22',11').\tag{126a}$$

また (28) 式の対称性に由来する以下の関係式も満たす。

$$\Gamma^{ii',jj'}(11',22')=-\sum_{kk'll'}(\check{\tau}_1)_{ik}(\check{\tau}_1)_{k'i'}(\check{\tau}_1)_{jl}(\check{\tau}_1)_{l'j'}[\Gamma^{k'k,l'l}(1'1,2'2)]^*.\tag{126b}$$

これらの対称性は Bethe-Salpeter 方程式を解く際に有益である。

3.4 節では自己エネルギーに対して局所近似を採用した。この局所近似は二体相関関数を計算する際にもしばしば有効である。そこで局所近似の Bethe-Salpeter 方程式を書き下しておく。その構造はエネルギー・運動量保存則の成立する一様系の場合と同じになり、まず結節関数は以下のように展開できる。

$$\Gamma^{ii',jj'}(11',22')=\int\frac{\mathrm{d}^3p_1\mathrm{d}\varepsilon_1}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{\mathrm{d}^3p_2\mathrm{d}\varepsilon_2}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{\mathrm{d}^3q\,\mathrm{d}\omega}{(2\pi\hbar)^4}\,\Gamma^{ii',jj'}(\mathbf{p}_1\varepsilon_1,\mathbf{p}_2\varepsilon_2;\mathbf{q}\omega,\mathbf{r}t)\times\mathrm{e}^{i[-(\mathbf{p}_{1+}\cdot\mathbf{r}_1-\varepsilon_{1+}t_1)+(\mathbf{p}_{1-}\cdot\mathbf{r}_1'-\varepsilon_{1-}t_1')-(\mathbf{p}_{2-}\cdot\mathbf{r}_2-\varepsilon_{2-}t_2)+(\mathbf{p}_{2+}\cdot\mathbf{r}_2'-\varepsilon_{2+}t_2')]/\hbar}.\tag{127}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ただし $\mathrm{p}_{j\pm}\equiv\mathrm{p}_j\pm\mathrm{q}/2$ および $\varepsilon_{j\pm}\equiv\varepsilon_j\pm\omega/2$ であり、また $\mathrm{r}t$ は $1,1',2,2'$ 近傍の局所座標である。この式と (55) 式を (123) 式に代入すると、$\check{\mathcal{K}}$ も局所近似で以下のように展開できることがわかる。

$$\mathcal{K}^{ii',jj'}(11',22')=\int\frac{\mathrm{d}^3p_1\mathrm{d}\varepsilon_1}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{\mathrm{d}^3p_2\mathrm{d}\varepsilon_2}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{\mathrm{d}^3q\,\mathrm{d}\omega}{(2\pi\hbar)^4}\,\mathcal{K}^{ii',jj'}(\mathrm{p}_1\varepsilon_1,\mathrm{p}_2\varepsilon_2;\mathrm{q}\omega,\mathrm{r}t)$$
$$\times\mathrm{e}^{i[(\mathrm{p}_{1-}\cdot\mathrm{r}_1-\varepsilon_{1-}t_1)-(\mathrm{p}_{1+}\cdot\mathrm{r}'_1-\varepsilon_{1+}t'_1)+(\mathrm{p}_{2+}\cdot\mathrm{r}_2-\varepsilon_{2+}t_2)-(\mathrm{p}_{2-}\cdot\mathrm{r}'_2-\varepsilon_{2-}t'_2)]/\hbar}. \tag{128}$$

ここに現れる Fourier 係数 $\mathcal{K}^{ii',jj'}(\mathrm{p}_1\varepsilon_1,\mathrm{p}_2\varepsilon_2;\mathrm{q}\omega,\mathrm{r}t)$ も方程式 (124) を満足する。ただし、$\check{\mathcal{K}}$ 等は $\mathrm{p}_1\varepsilon_1$-$\mathrm{p}_2\varepsilon_2$ を足とする行列で、内部変数に関する和は $\int\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon/(2\pi\hbar)^4$ と理解すべきである。また $\check{\mathrm{I}}$ と $\check{G}\check{G}$ は次式で定義されている。

$$(\check{\mathrm{I}})^{ii',jj'}(\mathrm{p}\varepsilon,\mathrm{p}'\varepsilon')=(2\pi\hbar)^4\delta(\mathrm{p}-\mathrm{p}')\delta(\varepsilon-\varepsilon')\delta_{ij}\delta_{i'j'}, \tag{129a}$$

$$(\check{G}\check{G})^{ii',jj'}(\mathrm{p}\varepsilon,\mathrm{p}'\varepsilon';\mathrm{q}\omega,\mathrm{r}t)=(2\pi\hbar)^4\delta(\mathrm{p}-\mathrm{p}')\delta(\varepsilon-\varepsilon')G^{ij'}(\mathrm{p}_-\varepsilon_-,\mathrm{r}t)G^{ji'}(\mathrm{p}_+\varepsilon_+,\mathrm{r}t). \tag{129b}$$

7 Φ 微分近似と保存則

動的な問題を扱う場合には、保存則に関して細心の注意が必要である。例えば、粒子数が一定の系の時間発展を考察する場合において、使った近似が粒子数保存則を満たさない場合、得られる結果は全くナンセンスなものになるであろう。従って、「どのような近似を採用すれば保存則が満たされるか？」という問いが極めて重要な意味を持ってくる。この問いに対する一つの十分条件を与えたのが、1962 年の Baym による研究である [11]。その近似法は Φ 微分近似あるいは保存近似と呼ばれ、2.8 節でその内容と利点に関して言及した。

この章では、Φ 微分近似を採用すると様々な保存則が自動的に満たされることを見てゆく。証明の基本は Baym が松原グリーン関数について与えた [11]。実時間 Keldysh グリーン関数を用いるここでの手法は文献 [21] による。

7.1 恒等式

まず準備として、Φ 微分近似が満たす様々な恒等式を導出する。Φ 微分近似は、(39) 式の展開に現れる Feynman 図形を無限次まですべて取り込むと正確な理論になる。従って、それらの恒等式は、また、厳密な理論が従う恒等式でもある。

第一に、次のゲージ変換を考える。

$$\check{G}(2,1)\longrightarrow\mathrm{e}^{i\check{\chi}(2)}\check{G}(2,1)\mathrm{e}^{-i\check{\chi}(1)},\qquad\check{\chi}(1)\equiv\begin{bmatrix}\chi(1)&0\\0&0\end{bmatrix}. \tag{130}$$

(39) 式で定義された汎関数 Φ（およびその部分和近似）は、明らかにこの変換 (130) の前後で不変である。従って、1 次のオーダーでも $\delta\Phi=0$ が成立する。ここで、Φ が $\check{G}$ の汎関数であり (40) 式が成立することに注意すると、この条件 $\delta\Phi=0$ は次のように書けることがわかる。

$$\int\mathrm{d}1\int\mathrm{d}2\,\mathrm{Tr}\check{\tau}_3\check{\Sigma}(1,2)\check{\tau}_3\delta\check{G}(2,1)=0. \tag{131}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

一方、$\delta\check{G}$ は (130) 式より以下のように評価できる。

$$\delta\check{G}(2,1) = i\left[\check{\chi}(2)\check{G}(2,1) - \check{G}(2,1)\check{\chi}(1)\right]. \tag{132}$$

この式を (131) 式に代入し、$\chi(1)$ が任意関数であることを考慮すると、次式を得る。

$$\int \mathrm{d}2\,\mathrm{Tr}\,\frac{\check{1}+\check{\tau}_3}{2}\left[\check{\tau}_3\check{\Sigma}(1,2)\check{\tau}_3\check{G}(2,1) - \check{G}(1,2)\check{\tau}_3\check{\Sigma}(2,1)\check{\tau}_3\right] = 0. \tag{133a}$$

さらに、(25)、(26)、(48) 式などを用いて変形すると、この恒等式は以下のようにも表せる。

$$\int \mathrm{d}2\left[\Sigma^{\mathrm{R}}(1,2)G^{12}(2,1)+\Sigma^{12}(1,2)G^{\mathrm{A}}(2,1)-G^{\mathrm{R}}(1,2)\Sigma^{12}(2,1)-G^{12}(1,2)\Sigma^{\mathrm{A}}(2,1)\right] = 0. \tag{133b}$$

これがゲージ変換の自由度から帰結される恒等式である。

第二に、次の Galilei 変換を考える。

$$\check{G}(2,1) \longrightarrow \exp\left[\check{\mathbf{R}}(t_2)\cdot\overrightarrow{\boldsymbol{\nabla}}_2\right]\check{G}(2,1)\exp\left[\overleftarrow{\boldsymbol{\nabla}}_1\cdot\check{\mathbf{R}}(t_1)\right], \qquad \check{\mathbf{R}}(t) \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{R}(t) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}. \tag{134}$$

しかし、この変換 (134) により Φ は不変であり、(131) 式は今の場合も成立する。ここでの $\check{G}$ の 1 次の変化は

$$\delta\check{G}(2,1) = \check{\mathbf{R}}(t_2)\cdot\boldsymbol{\nabla}_2\check{G}(2,1) + \check{\mathbf{R}}(t_1)\cdot\boldsymbol{\nabla}_1\check{G}(2,1) \tag{135}$$

と評価できる。そこで、(135) 式を (131) 式に代入し、$\mathbf{R}(t)$ が任意関数であることを用いると、以下の恒等式を得る。

$$\int \mathbf{Q}(1)\,\mathrm{d}^3r_1 = \mathbf{0}. \tag{136}$$

ただし $\mathbf{Q}(1)$ は

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}(1) \equiv -i\hbar\sigma\frac{\boldsymbol{\nabla}_1-\boldsymbol{\nabla}_{1'}}{2}\int \mathrm{d}2\,\big[&\Sigma^{\mathrm{R}}(1,2)G^{12}(2,1') + \Sigma^{12}(1,2)G^{\mathrm{A}}(2,1') \\ &-G^{\mathrm{R}}(1,2)\Sigma^{12}(2,1') - G^{12}(1,2)\Sigma^{\mathrm{A}}(2,1')\big]_{1'=1},\end{aligned} \tag{137}$$

で定義されている。Σ の微分項は部分積分により生じた。

第三に、C_1 上での変数変換 $t \to \theta(t) \equiv t + \varphi(t)$ を考える。それに応じて $\check{G}$ を次のように変化させることにする。

$$\check{G}(2,1) \longrightarrow \check{U}(t_2)\check{G}(\mathbf{r}_2\theta_2, \mathbf{r}_1\theta_1)\check{U}(t_1), \qquad \check{U}(t) \equiv \begin{bmatrix} (\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}t)^{1/4} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{138}$$

ここでの因子 $(\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}t)^{1/4}$ は、変換 $t \to \theta$ によって (33) 式に現れるヤコビアンを相殺し、Φ の形を不変に保つ役割を果たす。従って、(131) 式は今の場合にも成立する。変換による $\check{G}$ の 1 次の変化をあらわに書き下すと以下のようになる。

$$\delta G^{ji}(2,1) = \left\{\delta_{j1}\left[\frac{\varphi'(t_2)}{4}+\varphi(t_2)\frac{\partial}{\partial t_2}\right] + \delta_{i1}\left[\frac{\varphi'(t_1)}{4}+\varphi(t_1)\frac{\partial}{\partial t_1}\right]\right\}G^{ji}(2,1). \tag{139}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

この式を (131) 式に代入し、$\varphi(t)$ が任意関数であることを用いると、次の恒等式を得る。

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t_1)\rangle}{\mathrm{d}t_1} = -\int Q_\varepsilon(1)\,\mathrm{d}^3r_1. \tag{140}$$

ここで、$\langle\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t_1)\rangle$ と $Q_\varepsilon(1)$ は、以下のように定義されている。

$$\langle\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t_1)\rangle = \frac{i\hbar\sigma}{4}\int \mathrm{d}^3r_1 \int \mathrm{d}2\,\big[\Sigma^{\mathrm{R}}(1,2)G^{12}(2,1) + \Sigma^{12}(1,2)G^{\mathrm{A}}(2,1) + G^{\mathrm{R}}(1,2)\Sigma^{12}(2,1) + G^{12}(1,2)\Sigma^{\mathrm{A}}(2,1)\big], \tag{141}$$

$$Q_\varepsilon(1) \equiv -i\hbar\sigma\frac{\partial}{\partial t_1}\int \mathrm{d}2\,\big[\Sigma^{\mathrm{R}}(1',2)G^{12}(2,1) + \Sigma^{12}(1',2)G^{\mathrm{A}}(2,1) + G^{\mathrm{R}}(1,2)\Sigma^{12}(2,1') + G^{12}(1,2)\Sigma^{\mathrm{A}}(2,1')\big]_{1'=1}. \tag{142}$$

これが変換 (138) から得られる恒等式である。

(141) 式で導入された $\langle\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t_1)\rangle$ は系の相互作用エネルギーに他ならない。このことを確かめるために、(30) 式の 12 成分を書き下すと以下のようになる。

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} - U(1) + \mu\right]G^{12}(1,2) - \int\left[\Sigma^{\mathrm{R}}(1,3)G^{12}(3,2) + \Sigma^{12}(1,3)G^{\mathrm{A}}(3,2)\right]\mathrm{d}3 = 0. \tag{143}$$

ここで、自己エネルギー項の変形には、再び (25)、(26)、(48) 式などを用いた。一方、G^{12} の方程式は、(3) 式から導かれる $\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1) \equiv \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t_1,-\infty)\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)\hat{\mathcal{U}}(t_1,-\infty)$ に対する運動方程式 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1) = \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t_1,-\infty)[\hat{\psi}(\mathbf{r}_1),\hat{\mathcal{H}}(t)]\hat{\mathcal{U}}(t_1,-\infty)$、すなわち次式からも得られる。

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} - U(1) + \mu\right]\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1) - \int \bar{V}(1-1')\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1) = 0. \tag{144}$$

実際、(144) 式の左から $-\sigma(i/\hbar)\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(2)$ を掛け、密度行列 (19) で平均操作を行えばよい。そのようにして得られた表式を (143) 式と比較すると、次の恒等式を得る。

$$\frac{1}{2}\int \mathrm{d}1'\,\bar{V}(1-1')\langle\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(2)\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1)\rangle = \frac{i\hbar\sigma}{2}\int\left[\Sigma^{\mathrm{R}}(1,3)G^{12}(3,2) + \Sigma^{12}(1,3)G^{\mathrm{A}}(3,2)\right]\mathrm{d}3. \tag{145}$$

この式で 2=1 と置くと、相互作用エネルギーの期待値を自己エネルギーで表す式が得られる。その複素共役をとって元の式と足して 2 で割り、(27a) 式および (49) 式を考慮すると、(141) 式が相互作用エネルギーに他ならないことがわかる。

7.2 保存則

以上の準備の下に、Φ 微分近似において保存則が満たされることを証明する。まず、(143) 式の複素共役をとり、(27a) 式および (49) 式等の対称性を用いると、次式が得られる。

$$\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\hbar^2\nabla_2^2}{2m} - U(2) + \mu\right]G^{12}(1,2) - \int\left[G^{\mathrm{R}}(1,3)\Sigma^{12}(3,2) + G^{12}(1,3)\Sigma^{\mathrm{A}}(3,2)\right]\mathrm{d}3 = 0. \tag{146}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

次いで、(143) 式と (146) 式の差を取り、2=1 と置き、(133b) の恒等式を用いる。すると、次の粒子数保存則を得る。

$$\frac{\partial n(1)}{\partial t_1}+\nabla_1\cdot\mathbf{j}(1)=0. \tag{147}$$

ここで、$n(1)$ と $\mathbf{j}(1)$ はそれぞれ粒子密度および流束密度で、以下のように定義されている。

$$n(1)\equiv i\hbar\sigma G^{12}(1,1), \tag{148a}$$

$$\mathbf{j}(1)\equiv\sigma\hbar^2\frac{\nabla_1-\nabla_2}{2m}G^{12}(1,2)\bigg|_{2=1}. \tag{148b}$$

ついで、(143) 式と (146) 式に $-i\hbar\sigma(\nabla_1-\nabla_2)/2m$ を作用した後、両者を差し引き、さらに 2=1 と置く。すると、流束密度 $\mathbf{j}(1)$ が次の保存則を満たすことがわかる。

$$\frac{\partial}{\partial t_1}\mathbf{j}(1)+\frac{1}{m}\nabla_1\underline{\Theta}^K(1)+\frac{n(1)}{m}\nabla_1U(1)=\frac{1}{m}\mathbf{Q}(1). \tag{149}$$

ここで、$\mathbf{Q}(1)$ は (137) 式で与えられ、また、テンソル $\underline{\Theta}^K(1)$ は次式で定義されている。

$$\Theta^K_{ij}(1)=-\frac{i\hbar^3\sigma}{4m}(\nabla_{1i}-\nabla_{2i})(\nabla_{1j}-\nabla_{2j})G^{12}(1,2)\big|_{2=1}. \tag{150}$$

さらに、(149) 式を系の全空間にわたって積分し、(136) 式を用いると、全運動量に関する次の保存則を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t_1}\int\mathbf{j}(1)\,\mathrm{d}^3r_1=-\int\frac{n(1)}{m}\nabla_1U(1)\,\mathrm{d}^3r_1. \tag{151}$$

最後にエネルギー保存則を考察する。演算子 $-i\hbar\sigma\frac{\partial}{\partial t_2}$ と $-i\hbar\sigma\frac{\partial}{\partial t_1}$ をそれぞれ (143) 式と (146) 式に作用し、両者を加え、さらに 2=1 と置く。すると次式をえる。

$$\frac{\partial\mathcal{E}^K(1)}{\partial t_1}+\nabla_1\cdot\mathbf{j}'_\varepsilon(1)+U(1)\frac{\partial n(1)}{\partial t_1}=Q_\varepsilon(1). \tag{152}$$

ここで、$Q_\varepsilon(1)$ は (142) 式で与えられ、また、$\mathcal{E}^K(1)$ と $\mathbf{j}'_\varepsilon(1)$ は以下のように定義されている。

$$\mathcal{E}^K(1)\equiv\frac{i\hbar^3\sigma}{2m}\nabla_1\cdot\nabla_2G^{12}(1,2)\bigg|_{2=1}, \tag{153}$$

$$\mathbf{j}'_\varepsilon(1)=-\frac{i\hbar^3\sigma}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial t_1}\nabla_2+\frac{\partial}{\partial t_2}\nabla_1\right)G^{12}(1,2)\bigg|_{2=1}. \tag{154}$$

この $\mathcal{E}^K(1)$ は運動エネルギー密度に他ならない。さらに、(152) 式を空間積分し、(140) 式と (147) 式を用いると、次の全エネルギー保存則を得る。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_1}\left[\int\mathcal{E}^K(1)\,\mathrm{d}^3r_1+\langle\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t_1)\rangle\right]=-\int\mathbf{j}(1)\cdot\nabla_1U(1)\,\mathrm{d}^3r_1. \tag{155}$$

(147), (151), (155) 式がこの節での主な結果である。それらは Φ 微分近似において保存則が満たされていることを表している。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

7.3 Wigner 表示での保存則

前節で得た (147), (149), (152) 式は、粒子と運動量およびエネルギーの流れの時間発展を記述し、基本的重要性を持つ。ここでは、これらの保存則を (70) 式と (72) 式の解と関連づけ、Wigner 表示で表すことにする。

(55) 式と (59a) 式を (148) 式に代入すると、$n(\mathbf{r}t)$ と $\mathbf{j}(\mathbf{r}t)$ を A と ϕ を用いて表現できる。それらは近似なしの厳密な表式であり、(147) 式を満足する。より具体的に、粒子密度 $n(\mathbf{r}t)$ と速度 $\mathbf{v}(\mathbf{r}t)\equiv\mathbf{j}(\mathbf{r}t)/n(\mathbf{r}t)$ は次のように与えられる。

$$n(\mathbf{r}t)=\hbar\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t), \tag{156a}$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}t)=\frac{\hbar}{n(\mathbf{r}t)}\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\frac{\mathbf{p}}{m}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t). \tag{156b}$$

また $\mathbf{v}$ を用いると、(147) 式は

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}(n\mathbf{v})=0, \tag{157}$$

と書き換えられる。

(149) 式に移ろう。まず (150) 式の Θ^K_{ij} は、(55) 式と (59a) 式を代入することにより、A と ϕ を用いて下記のように表せる。

$$\Theta^K_{ij}(\mathbf{r}t)=\hbar\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\frac{p_ip_j}{m}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)=mn(\mathbf{r}t)v_i(\mathbf{r}t)v_j(\mathbf{r}t)+\Pi^K_{ij}(\mathbf{r}t). \tag{158}$$

ただし、第二の等式に現れる $\Pi^K_{ij}(\mathbf{r}t)$ は

$$\Pi^K_{ij}(\mathbf{r}t)\equiv\hbar\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\frac{\bar{p}_i\bar{p}_j}{m}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t),\qquad\bar{\mathbf{p}}\equiv\mathbf{p}-m\mathbf{v}, \tag{159}$$

で定義され、流体と共に動く局所座標でみた運動量流束密度テンソルという意味を持つ。次に、(149) 式の $\mathbf{Q}(1)$ を書き換えよう。(145) 式とその複素共役を (137) 式に代入すると、$\mathbf{Q}(1)$ に対する次の表現が得られる。

$$\mathbf{Q}(1)=-\int\mathrm{d}^3r_1'\frac{\partial V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1')}{\partial\mathbf{r}_1}\langle\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(1)\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1)\rangle.$$

ただし、この表現においては $1'=\mathbf{r}_1't_1$ であり、4 つの場の演算子の時刻は同じである。さらに、$\langle\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(1)\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1)\rangle=\rho_2\bigl(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1',\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_1'}{2},t_1\bigr)$ と書き換え、$\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_1'}{2}$ を $\mathbf{r}_1$ から 1 次まで展開すると、次式が得られる。

$$\mathbf{Q}(1)=-\boldsymbol{\nabla}_1\underline{\Pi}^V(1). \tag{160}$$

ただし、$\Pi^V_{ij}(1)$ は、$1_\pm\equiv(\mathbf{r}_1\pm\bar{\mathbf{r}}/2,t_1)$ を用いて以下のように定義されている。

$$\Pi^V_{ij}(1)\equiv-\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3\bar{r}\,\bar{r}_i\frac{\partial V(\bar{\mathbf{r}})}{\partial\bar{r}_j}\langle\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(1_+)\hat{\psi}^\dagger_{\mathrm{H}}(1_-)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1_-)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1_+)\rangle. \tag{161}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

(160) 式の関係に注意すると、Π_{ij}^V の評価には局所近似を用いるのが妥当であることが理解できる。そこで、この Π_{ij}^V を (117) 式の $\check{\mathcal{K}}$ を用いて表し、その結果に (16) 式と (55) 式および (128) 式を代入し、最後に $\bar{\mathbf{r}}$ に関する部分積分を実行する。すると、Π_{ij}^V に対する以下の表式が得られる。

$$\Pi_{ij}^V(\mathbf{r}t) = \frac{(i\hbar)^2}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3q\,\mathrm{d}\omega}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{\mathrm{d}^3p'\mathrm{d}\varepsilon'}{(2\pi\hbar)^4}\left(V_q\delta_{ij}+\frac{q_iq_j}{q}\frac{\mathrm{d}V_q}{\mathrm{d}q}\right)$$
$$\times\left[\mathcal{K}^{12,12}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{p}'\varepsilon';\mathbf{q}\omega,\mathbf{r}t)+(2\pi\hbar)^4\delta(\mathbf{q})\delta(\omega)G^{12}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)G^{12}(\mathbf{p}'\varepsilon',\mathbf{r}t)\right]. \qquad (162)$$

以上で準備が整った。そこで、$\mathbf{j}=n\mathbf{v}$ の関係と (158) 式および (160) 式を (149) 式に代入し、(157) 式を用いると、運動量保存則を表す次の方程式を得る。

$$\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}+\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}+\frac{1}{mn}\boldsymbol{\nabla}\underline{\Pi}+\frac{\boldsymbol{\nabla}U}{m}=0. \qquad (163)$$

ここで、テンソル Π_{ij} は $\Pi_{ij}\equiv\Pi_{ij}^K+\Pi_{ij}^V$ で定義され、(159) 式と (162) 式を用いてあらわに書き下すと、下記のようになる。

$$\Pi_{ij}(\mathbf{r}t)\equiv\hbar\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\frac{\bar{p}_i\bar{p}_j}{m}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)$$
$$+\frac{(i\hbar)^2}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3q\,\mathrm{d}\omega}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{\mathrm{d}^3p\,\mathrm{d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{\mathrm{d}^3p'\mathrm{d}\varepsilon'}{(2\pi\hbar)^4}\left(V_q\delta_{ij}+\frac{q_iq_j}{q}\frac{\mathrm{d}V_q}{\mathrm{d}q}\right)$$
$$\times\left[\mathcal{K}^{12,12}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{p}'\varepsilon';\mathbf{q}\omega,\mathbf{r}t)+(2\pi\hbar)^4\delta(\mathbf{q})\delta(\omega)G^{12}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)G^{12}(\mathbf{p}'\varepsilon',\mathbf{r}t)\right]. \qquad (164)$$

ただし、$\bar{\mathbf{p}}=\mathbf{p}-m\mathbf{v}$ であり、G^{12} は (59a) 式で与えられ、また、$\check{\mathcal{K}}$ は局所近似の結節関数 (127) と (129) 式を用いた Bethe-Salpeter 方程式の解 (124) である。この $\underline{\Pi}$ は明らかに対称テンソルである。

最後に、微分形式のエネルギー保存則を導出する。この目的のためには、(152) 式の代わりに、次式で定義されるエネルギー密度の表式から出発するのが便利である。

$$\mathcal{E}(1)\equiv\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}_1'\cdot\boldsymbol{\nabla}_1\langle\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^\dagger(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1)\rangle\big|_{1'=1}+\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3r_1'\,V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1')\langle\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^\dagger(1)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^\dagger(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(1)\rangle. \qquad (165)$$

ただし、この表式に関しては $t_1'=t_1$ である。(165) 式を時間について微分し、その結果現れる場の演算子の時間微分を (144) 式を用いて消去し、さらに、相互作用項に関する 1 次の勾配展開を (160) 式の導出と同じ手続きで行う。このようにして、微分形式で表された次のエネルギー保存則を得る。

$$\frac{\partial\mathcal{E}(\mathbf{r}t)}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j}_\varepsilon(\mathbf{r}t)=-\mathbf{j}(\mathbf{r}t)\cdot\boldsymbol{\nabla}U(\mathbf{r}t). \qquad (166)$$

ここで、$\mathbf{j}_\varepsilon$ はエネルギー流束密度を表し、演算子

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}t)\equiv\frac{\hbar}{2mi}(\boldsymbol{\nabla}-\boldsymbol{\nabla}')\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^\dagger(\mathbf{r}'t)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(\mathbf{r}t)\big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}}, \qquad (167)$$

を用いて以下のように定義されている。

$$\mathbf{j}_\varepsilon(\mathbf{r}t)\equiv\frac{\hbar^4\sigma}{4m^2}(\boldsymbol{\nabla}-\boldsymbol{\nabla}')\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}'G^{12}(\mathbf{r}t,\mathbf{r}'t)\Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}}+\frac{1}{2}\int\mathrm{d}\bar{\mathbf{r}}\,V(\bar{\mathbf{r}})\langle\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^\dagger(\mathbf{r}_-t)\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}_+t)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(\mathbf{r}_-t)\rangle$$
$$-\frac{1}{4}\int\mathrm{d}^3\bar{r}\,\bar{\mathbf{r}}\,\frac{\partial V(\bar{\mathbf{r}})}{\partial\bar{\mathbf{r}}}\cdot\left[\langle\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^\dagger(\mathbf{r}_-t)\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}_+t)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(\mathbf{r}_-t)\rangle+\langle\hat{\psi}_{\mathrm{H}}^\dagger(\mathbf{r}_+t)\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}_-t)\hat{\psi}_{\mathrm{H}}(\mathbf{r}_+t)\rangle\right]. \qquad (168)$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

(166) 式における $\mathcal{E}$ と $\mathbf{j}_\varepsilon$ には微分演算子がかかっているので、(165) 式と (168) 式は局所近似で評価するのが妥当である。それは、(158) 式と (162) 式の導出と同じ手続きにより実行でき、以下の表式を得る。

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}mnv^2 + \mathcal{E}_{\rm i}, \tag{169a}$$

$$\mathbf{j}_\varepsilon = \frac{1}{2}mnv^2\mathbf{v} + \mathcal{E}_{\rm i}\mathbf{v} + \underline{\Pi}\mathbf{v} + \mathbf{j}_Q. \tag{169b}$$

ただし、$\underline{\Pi}$ は (164) 式で与えられ、また $\mathcal{E}_{\rm i}$ と $\mathbf{j}_Q$ は局所運動量 $\bar{\mathbf{p}}=\mathbf{p}-m\mathbf{v}$ を用いて次式で定義されている。

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{\rm i}(\mathbf{r}t) \equiv{}& \hbar\int\frac{{\rm d}^3p\,{\rm d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\frac{\bar{p}^2}{2m}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\\ &+\frac{i\hbar\sigma}{2}\int\frac{{\rm d}^3p\,{\rm d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}[\Sigma^{\rm R}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)G^{12}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)+\Sigma^{12}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)G^{\rm A}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)],\end{aligned} \tag{170a}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_Q(\mathbf{r}t) \equiv{}& \hbar\int\frac{{\rm d}^3p\,{\rm d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\frac{\bar{p}^2}{2m^2}\bar{\mathbf{p}}A(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\phi(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)\\ &+\frac{(i\hbar)^2}{2}\int\frac{{\rm d}^3q\,{\rm d}\omega}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{{\rm d}^3p\,{\rm d}\varepsilon}{(2\pi\hbar)^4}\int\frac{{\rm d}^3p'{\rm d}\varepsilon'}{(2\pi\hbar)^4}\frac{1}{m}\left(2\bar{\mathbf{p}}V_q+\mathbf{q}\frac{\mathbf{q}\cdot\bar{\mathbf{p}}}{q}\frac{dV_q}{dq}\right)\\ &\times\left[\mathcal{K}^{12,12}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{p}'\varepsilon';\mathbf{q}\omega,\mathbf{r}t)+(2\pi\hbar)^4\delta(\mathbf{q})\delta(\omega)G^{12}(\mathbf{p}\varepsilon,\mathbf{r}t)G^{12}(\mathbf{p}'\varepsilon',\mathbf{r}t)\right].\end{aligned} \tag{170b}$$

ここで、(170a) 式の導出には (145) 式を用いた。$\mathcal{E}_{\rm i}$ は流体と共に動く局所座標におけるエネルギー密度、すなわち内部エネルギー密度を表し、また、$\mathbf{j}_Q$ は熱流束密度ベクトルである。

(169) 式を (166) 式に代入し、(157) 式と (163) 式を用いて変形すると、エネルギー保存則を表す以下の方程式を得る。

$$\frac{\partial\mathcal{E}_{\rm i}}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot(\mathcal{E}_{\rm i}\mathbf{v}+\mathbf{j}_Q)+\sum_{ij}\Pi_{ij}\frac{\partial v_j}{\partial r_i}=0. \tag{171}$$

$\mathbf{v}=\mathbf{0}$ のとき、この方程式は熱伝導方程式に簡略化される。

(157) 式と (163) 式および (171) 式は、それぞれ、微分形式の粒子数と運動量およびエネルギーの保存則であり、そこに現れる物理量は (156) 式と (164) 式および (170) 式で定義されている。これらの物理量は、(70) 式と (72) 式および局所近似の (124) 式を解くことで、全て微視的に計算可能である。

8 輸送方程式と流体力学

流体力学は、通常、統計力学とは無関係に、局所的な粒子数・運動量・エネルギー保存則に基づいて、力学的・決定論的に構成される [49]。そのようにして得られる Navier-Stokes 方程式は、非線形発展方程式の典型例となっており、また、乱流・カオス・パターン形成など非平衡系に特有な現象を内包している。しかし流体力学は、本来、多粒子系の平均的な運動を記述する学問分野であり、統計力学と密接な関連があるはずである。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ここでは、単原子分子からなる古典希薄気体を例に取り、流体力学の方程式が輸送方程式から導出できることを見てゆく。具体的には、Boltzmann 方程式を出発点とし、Enskog による「局所平衡からの展開」[50, 51] を用いて流体力学の方程式を導く。この考察は、流体力学的方程式の微視的基礎づけを与えるだけでなく、流体における確率分布関数の形を決定することも可能にする。そして、この確率分布関数を用いて 6 章の考察を行えば、流体中の二体相関関数や揺らぎの計算も実行できる。すなわち、流体という典型的非線形非平衡系に対して、平衡系と同様の扱いが可能になるのである。このように、非平衡系は神秘的でも何でもなく、統計力学の射程内にあり、輸送方程式はその解明に対する基礎を提供している。この考察を通して、パターン形成や乱流など非平衡現象の宝庫である流体力学も、実際は熱平衡状態に近いということを感じて頂ければ幸いである。

ここで扱う主題は古典的な内容で、例えば Chapman と Cowling による教科書 [50] や Hirschfelder らによる著書 [51] に詳述されている。あえてここで取り上げるのは、希薄古典気体に限定されたそれらの内容が、場の量子論による量子輸送方程式を用いることで、強相関効果・量子効果・揺らぎの効果等に関連して、今後さらに理解が深まると期待されるからである。また Chapman-Cowling や Hirschfelder らによる考察においては粘性係数などの輸送係数を求めることが主目的なのに対し、ここでの考察は、将来における揺らぎの計算等も視野に入れ、「流体中の分布関数を求める近似法」との視点に立って流体力学の方程式を導出する。導出の詳細は文献 [52] による。

考察の出発点は (86) 式の Boltzmann 方程式で、改めて書き下すと次のようになる。

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}}-\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}=I_{\mathbf{p}}[f]. \tag{172}$$

右辺の $I_{\mathbf{p}}[f]$ は衝突積分で、古典希薄気体に対する表式は、(86b) 式で交換効果を無視する近似 $\sigma V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_3}V^*_{\mathbf{p}-\mathbf{p}_4}\to 0$ を採用し、さらに高温極限 $(1+\sigma f)\to 1$ をとることで得られる。さらに変数変換 $\mathbf{p}_2=\mathbf{p}+\mathbf{q}$、$\mathbf{p}_3=\mathbf{P}-\mathbf{q}'/2$、$\mathbf{p}_4=\mathbf{P}+\mathbf{q}'/2$ を行うと、$I_{\mathbf{p}}[f]$ が以下のように表現できる。

$$I_{\mathbf{p}}[f]=\int\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi\hbar)^3}\frac{q}{m}\int\mathrm{d}\sigma\,[f_{\mathbf{p}+(\mathbf{q}-\mathbf{q}')/2}f_{\mathbf{p}+(\mathbf{q}+\mathbf{q}')/2}-f_{\mathbf{p}}f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}]. \tag{173}$$

ただし、$\mathrm{d}\sigma=\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{q}'}\int\mathrm{d}q'\delta(q'-q)\left[m|V_{(\mathbf{q}'-\mathbf{q})/2}|/4\pi\hbar^2\right]^2$ は散乱の重心座標での微分散乱断面積であり [53]、また、$\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{q}'}$ は $\mathbf{q}'$ 方向の微小立体角を表す。特に、「$V_{\mathbf{q}}=$ 一定」である接触相互作用の微分散乱断面積は、$a\equiv m|V|/4\pi\hbar^2$ で定義される散乱長を用いて、

$$\mathrm{d}\sigma=a^2\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{q}'}\int\mathrm{d}q'\delta(q'-q), \tag{174}$$

と表される。この表式は、半径 a を持つ剛体球の二体散乱による微分散乱断面積の表式に他ならない [53]。以下では、簡単のため、この接触相互作用の場合を考えることにする。

次に、Boltzmann 方程式から得られる粒子数・運動量・エネルギー保存則を書き下す。それらに関与する基本的物理量は、粒子密度 $n(\mathbf{r},t)$、速度 $\mathbf{v}(\mathbf{r},t)$、温度 $T(\mathbf{r},t)$、流体と共に動く局所座標系でみた運動量流束密度テンソル $\underline{\Pi}(\mathbf{r},t)$、および熱流束密度ベクトル $\mathbf{j}_Q(\mathbf{r},t)$ で、局所運動量

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

$\bar{\mathbf{p}} \equiv \mathbf{p} - m\mathbf{v}$ を用いて以下のように定義されている。

$$n(\mathbf{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t), \tag{175a}$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{n(\mathbf{r},t)} \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\mathbf{p}}{m} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t), \tag{175b}$$

$$T(\mathbf{r},t) = \frac{2}{3k_{\mathrm{B}} n(\mathbf{r},t)} \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\bar{p}^2}{2m} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t), \tag{175c}$$

$$\underline{\Pi}(\mathbf{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{p}}}{m} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t), \tag{175d}$$

$$\mathbf{j}_Q(\mathbf{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\bar{p}^2}{2m} \frac{\bar{\mathbf{p}}}{m} f(\mathbf{p},\mathbf{r},t). \tag{175e}$$

これらの表現は、また、一般的な表式である (156a) 式、(156b) 式、(170a) 式、(164) 式および (170b) 式から、次の操作によっても得られる。すなわち、相互作用項を無視し、(85) 式で定義された分布関数 f を用いて書き換え、さらに内部エネルギー密度 $\mathcal{E}_{\mathrm{i}}$ を単原子理想気体の表式 $\mathcal{E}_{\mathrm{i}} = \frac{3}{2} n k_{\mathrm{B}} T$ で近似する。

以上の準備の下で、粒子数・運動量・エネルギー保存則を導出する。具体的には、(172) 式にそれぞれ 1、$\mathbf{p}/m$ および $\bar{p}^2/2m$ を掛け、$\mathbf{p}$ に関する 3 次元積分を実行する。すると、(173) 式の衝突積分からの寄与は消えることが確認できる。これは、二体衝突に際して全粒子数・運動量・エネルギーが変化しないためである。対応する保存則は、(175) 式の物理量を用いて以下のように表現できる。

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}(n\mathbf{v}) = 0, \tag{176a}$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v} + \frac{1}{mn}\boldsymbol{\nabla}\underline{\Pi} + \frac{\boldsymbol{\nabla} U}{m} = \mathbf{0}, \tag{176b}$$

$$\frac{3}{2} n k_{\mathrm{B}} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla T \right) + \nabla\cdot\mathbf{j}_Q + \underline{\Pi} : \boldsymbol{\nabla}\mathbf{v} = 0. \tag{176c}$$

ただし、$\underline{A}:\underline{B}$ はテンソル積 $\underline{A}:\underline{B} \equiv \sum_{ij} A_{ij} B_{ji}$ を表す。これらの式は、一般の場合の保存則である (157) 式、(163) 式および (171) 式の古典希薄気体版である。実際、(176a) 式と (176b) 式はそれぞれ (157) 式と (163) 式に見かけ上同じであり、また (176c) 式は (171) 式で $\mathcal{E}_{\mathrm{i}} = \frac{3}{2} n k_{\mathrm{B}} T$ と置くことにより得られる。

さて、Boltzmann 方程式 (172) は、$(\mathbf{p},\mathbf{r},t)$ を変数とする非線形偏微分方程式である。この問題を、$(\mathbf{r},t)$ を変数とする連立偏微分方程式 (176) を解く問題に簡略化することを考える。このための標準的手法は、Enskog による「局所平衡からの展開」[50, 51] を採用することである。まず、分布関数 f を次のように展開する。

$$f(\mathbf{p},\mathbf{r},t) = f^{(\mathrm{le})}(\mathbf{p},\mathbf{r},t) \left[1 + \varphi^{(1)}(\mathbf{p},\mathbf{r},t) + \cdots \right]. \tag{177}$$

ここで、$f^{(\mathrm{le})}$ は、$\bar{\mathbf{p}} \equiv \mathbf{p} - m\mathbf{v}$ を変数とする局所平衡分布

$$f^{(\mathrm{le})} = \frac{(2\pi\hbar)^3 n}{(2\pi m k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\bar{p}^2}{2m k_{\mathrm{B}} T} \right), \tag{178}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を表す。この $f^{(\mathrm{le})}$ は、次の二つの条件を満足するように選んだ [50, 51]： (i) $I_{\mathbf{p}}[f]$ が消えるという局所平衡の条件； (ii) (175a)-(175c) 式をそれ自体で満足する。それゆえ、(177) 式における高次の補正項 $\varphi^{(j)}$ $(j=1,2,\cdots)$ は、以下の条件を満たす必要がある。

$$\int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\bar{\mathbf{p}}^n f^{(\mathrm{le})}\varphi^{(j)} = 0 \quad (n=0,1,2). \tag{179}$$

局所平衡分布 $f^{(\mathrm{le})}$ には 5 つの未知関数 $(n,\mathbf{v},T)$ が挿入されており、その数は保存則を表す発展方程式 (176) の数と一致する。残された問題は、それらの方程式におけるその他の未知関数 $\underline{\Pi}$ と $\mathbf{j}_Q$ を、$(n,\mathbf{v},T)$ とそれらの導関数を用いて表現することである。それにより、(176) 式が $(n,\mathbf{v},T)$ に対する閉じた方程式となる。ちなみに、$f^{(\mathrm{le})}$ は、また、(82) 式と (83) 式を用いた分布関数 (85) の高温極限としても得られることに注意しておく。

展開 (177) を Boltzmann 方程式 (172) に代入し、左辺の微分演算子を局所平衡からの展開における 1 次のオーダーの微小量とみなす。また、$I_{\mathbf{p}}[f^{(\mathrm{le})}]=0$ に注意すると、1 次のオーダーに関して次の方程式を得る。

$$\frac{\partial f^{(\mathrm{le})}}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\frac{\partial f^{(\mathrm{le})}}{\partial \mathbf{r}} + \boldsymbol{\nabla}U\cdot\frac{\bar{\mathbf{p}}}{mk_{\mathrm{B}}T}f^{(\mathrm{le})} = I^{(1)}_{\mathbf{p}}[f]. \tag{180}$$

ここで、右辺の $I^{(1)}_{\mathbf{p}}[f]$ は、(173) 式と (177) 式より以下のように与えられる。

$$I^{(1)}_{\mathbf{p}}[f] = \int \frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi\hbar)^3}\frac{q}{m}\int \mathrm{d}\sigma\, f^{(\mathrm{le})}_{\mathbf{p}} f^{(\mathrm{le})}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}\left(\varphi^{(1)}_{\mathbf{p}+(\mathbf{q}-\mathbf{q}')/2} + \varphi^{(1)}_{\mathbf{p}+(\mathbf{q}+\mathbf{q}')/2} - \varphi^{(1)}_{\mathbf{p}} - \varphi^{(1)}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}\right). \tag{181}$$

次に、(180) 式における $f^{(\mathrm{le})}$ の微分項を、(178) 式を用いて $(n,\mathbf{v},T)$ の導関数で表現する。さらに、その結果現れる時間微分項を、局所平衡近似での保存則 (176) を用いて消去する。その際、(175) 式に $f=f^{(\mathrm{le})}$ を代入して得られる次の関係式を考慮する。

$$\underline{\Pi}^{(\mathrm{le})} = P\underline{1}, \qquad \mathbf{j}_Q^{(\mathrm{le})} = \mathbf{0}. \tag{182}$$

ただし、$P\equiv nk_{\mathrm{B}}T$ は局所平衡系の圧力を表し、また、$\underline{1}$ は単位テンソルである。このようにして、(180) 式の左辺が以下のように変形できる。

$$\frac{\partial f^{(\mathrm{le})}}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\frac{\partial f^{(\mathrm{le})}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\bar{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\nabla}U}{mk_{\mathrm{B}}T}f^{(\mathrm{le})} = f^{(\mathrm{le})}\left[2\left(\mathbf{kk}-\frac{k^2}{3}\underline{1}\right):\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v} + \left(k^2-\frac{5}{2}\right)\frac{\bar{\mathbf{p}}}{m}\cdot\boldsymbol{\nabla}\ln T\right]. \tag{183}$$

ただし、$\mathbf{k}$ は以下で定義された無次元ベクトルである。

$$\mathbf{k}\equiv\bar{\mathbf{p}}/\sqrt{2mk_{\mathrm{B}}T}. \tag{184a}$$

これに加えて、次の二つの無次元量

$$\hat{\mathbf{v}}\equiv\sqrt{\frac{2k_{\mathrm{B}}T}{m}}\mathbf{v}, \qquad \hat{\mathbf{r}}\equiv n^{-1/3}\mathbf{r}, \tag{184b}$$

および平均自由行程

$$l\equiv\frac{1}{4\sqrt{2}\pi a^2 n}, \tag{185}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を導入しておく。これらを用いて (174) 式と (178) 式を書き換えた後、(181) 式に代入して運動量積分を無次元化し、その結果と (183) 式を (180) 式のそれぞれ右辺と左辺に代入する。すると、以下の無次元の方程式が得られる。

$$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}ln^{1/3}}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{4\pi}\int\frac{\mathrm{d}^3q'}{4\pi}\frac{\delta(q'-q)}{q}\mathrm{e}^{-k^2-(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}\left[\varphi^{(1)}_{\mathbf{k}+(\mathbf{q}-\mathbf{q}')/2}+\varphi^{(1)}_{\mathbf{k}+(\mathbf{q}+\mathbf{q}')/2}-\varphi^{(1)}_{\mathbf{k}}-\varphi^{(1)}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\right]$$
$$=\mathrm{e}^{-k^2}\left[2\left(\mathbf{kk}-\frac{k^2}{3}\underline{1}\right):\hat{\nabla}\hat{\mathbf{v}}+\left(k^2-\frac{5}{2}\right)\mathbf{k}\cdot\hat{\nabla}\ln T\right]. \tag{186}$$

ただし、$\hat{\nabla}\equiv\partial/\partial\hat{\mathbf{r}}$ を導入し、また、$\varphi^{(1)}$ を $\mathbf{k}\equiv\tilde{\mathbf{p}}/\sqrt{2mk_{\mathrm{B}}T}$ の関数として再定義した。同様にして、(179) 式は

$$\int\mathrm{d}^3k\,\mathrm{e}^{-k^2}\mathbf{k}^n\varphi^{(1)}_{\mathbf{k}}=0\quad(n=0,1,2), \tag{187}$$

と書き換えられる。(186) 式は、(187) 式を補助条件とする $\varphi^{(1)}_{\mathbf{k}}$ の線型積分方程式とみなせる。

(186) 式の右辺の形より、解として次の形を採用する [50, 51]。

$$\varphi^{(1)}_{\mathbf{k}}=-ln^{1/3}\left[A^{5/2}(k^2)\left(\mathbf{kk}-\frac{k^2}{3}\underline{1}\right):\hat{\nabla}\hat{\mathbf{v}}+A^{3/2}(k^2)\,\mathbf{k}\cdot\hat{\nabla}\ln T\right]. \tag{188}$$

ここで $A^{5/2}$ と $A^{3/2}$ は二つの未知関数で、それらを指数 $\alpha=5/2,3/2$ で区別する理由は以下で明らかになる。(188) 式を (186) 式に代入すると、A^α に対する分離した二つの方程式

$$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\int\frac{\mathrm{d}^3q}{4\pi}\int\frac{\mathrm{d}^3q'}{4\pi}\frac{\delta(q'-q)}{q}\mathrm{e}^{-k^2-(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}\left[\mathcal{T}^\alpha_{\mathbf{k}}+\mathcal{T}^\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\mathcal{T}^\alpha_{\mathbf{k}+(\mathbf{q}-\mathbf{q}')/2}-\mathcal{T}^\alpha_{\mathbf{k}+(\mathbf{q}+\mathbf{q}')/2}\right]=\mathrm{e}^{-k^2}\mathcal{R}^\alpha_{\mathbf{k}} \tag{189}$$

が得られる。ここで、$\mathcal{R}^\alpha_{\mathbf{k}}$ と $\mathcal{T}^\alpha_{\mathbf{k}}$ はテンソルで、その具体形は、表 1 に基本テンソル $\mathcal{W}^\alpha_{\mathbf{k}}$ を用いて与えられている。右辺の因子 e^{-k^2} は、k^2 を変数とみなすとき、Sonine の多項式 [50, 51] の直交関係に現れる重み関数に一致する。そこで、(189) 式を効率よく解くために、$A^\alpha(\varepsilon)$ を Sonine の多項式 $S^\alpha_\ell(\varepsilon)$ を用いて以下のように展開する。

$$A^\alpha(\varepsilon)=\sum_{\ell=0}^{\infty}a^\alpha_\ell S^\alpha_\ell(\varepsilon). \tag{190}$$

二つの方程式に対して異なる指数 $\alpha=5/2,3/2$ を持つ Sonine の多項式用いたのは、(189) 式の右辺を単一成分のみが有限の値を持つベクトルに変換し、方程式を効率よく解くという便宜上の理由からである。(188) 式、(190) 式および $S^\alpha_\ell(\varepsilon)$ の直交性を用いると、補助条件 (187) は、次の一つの条件に簡略化される。

$$a^{3/2}_0=0. \tag{191}$$

α	$\mathcal{W}^\alpha_{\mathbf{k}}$	$\mathcal{R}^\alpha_{\mathbf{k}}$	$\mathcal{T}^\alpha_{\mathbf{k}}$
5/2	$\mathbf{kk}-(k^2/3)\underline{1}$	$2S^\alpha_0(k^2)\mathcal{W}^\alpha_{\mathbf{k}}$	$A^\alpha(k^2)\mathcal{W}^\alpha_{\mathbf{k}}$
3/2	$\mathbf{k}$	$-S^\alpha_1(k^2)\mathcal{W}^\alpha_{\mathbf{k}}$	$A^\alpha(k^2)\mathcal{W}^\alpha_{\mathbf{k}}$

表 1: (189) 式に現れるテンソルの定義式。$S^\alpha_0(\varepsilon)=1$ と $S^\alpha_1(\varepsilon)=1+\alpha-\varepsilon$ は Sonine の多項式。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

α	a_0^α	a_1^α	a_2^α	a_3^α	a_4^α
5/2	2.2511	0.1390	0.0233	0.0058	0.0018
3/2	0	−1.7036	−0.1626	−0.0371	−0.0117

表 2: (192) 式を数値的に解くことにより得られた a_ℓ^α の値。

それゆえ、以下では、$\alpha=3/2$ に対する (190) 式の展開から $\ell=0$ の項を除くことにする。次に、(189) 式と $S_\ell^\alpha(k^2)\mathcal{W}_{\mathbf{k}}^\alpha/4\pi$ のテンソル積 ($\alpha=5/2$) あるいはベクトル積 ($\alpha=3/2$) をとり、続けて $\mathbf{k}$ に関する 3 次元積分を実行する。すると、(189) 式は、a_ℓ^α に関する次の線型連立代数方程式に変換される。

$$\sum_{\ell'}\mathcal{T}_{\ell\ell'}^\alpha a_{\ell'}^\alpha=\mathcal{R}_\ell^\alpha. \tag{192}$$

ここで、$\mathcal{R}_\ell^\alpha$ の定義とその具体形は下記の通りである。

$$\mathcal{R}_\ell^\alpha\equiv\int\frac{\mathrm{d}^3k}{4\pi}\mathrm{e}^{-k^2}S_\ell^\alpha(k^2)\,(\mathcal{W}_{\mathbf{k}}^\alpha,\mathcal{R}_{\mathbf{k}}^\alpha)=\begin{cases}\dfrac{5}{4}\sqrt{\pi}\,\delta_{\ell0} & :\alpha=5/2\\ -\dfrac{15}{16}\sqrt{\pi}\,\delta_{\ell1} & :\alpha=3/2\end{cases}. \tag{193}$$

ただし、$(\mathcal{W},\mathcal{R})$ は、$\alpha=5/2$ と $3/2$ について、それぞれテンソル積 $\mathcal{W}:\mathcal{R}\equiv\sum_{ij}\mathcal{W}_{ij}\mathcal{R}_{ji}$ とベクトル積 $\mathcal{W}\cdot\mathcal{R}\equiv\sum_i\mathcal{W}_i\mathcal{R}_i$ を表すものとする。また、(192) 式の $\mathcal{T}_{\ell\ell'}^\alpha$ は、$\mathbf{k}$ 積分における変数変換 $\mathbf{k}\to\mathbf{k}-\mathbf{q}/2$ により、以下のように表せる。

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{\ell\ell'}^\alpha=\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\mathrm{d}k\,\mathrm{e}^{-2k^2}k^2\int_0^\infty\mathrm{d}q\,\mathrm{e}^{-q^2/2}q^3\int_0^\infty\mathrm{d}q'\,\delta(q'-q)\\ \times\left[I_{\ell\ell'}^\alpha(k,q,q)+I_{\ell\ell'}^\alpha(k,q,-q)-2I_{\ell\ell'}^\alpha(k,q,q')\right].\end{aligned} \tag{194}$$

ここで、$I_{\ell\ell'}^\alpha(k,q,q')$ は、

$$I_{\ell\ell'}^\alpha(k,q,q')\equiv\int\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{q}}}{4\pi}\int\frac{\mathrm{d}\Omega_{\mathbf{q}'}}{4\pi}S_\ell^\alpha((\mathbf{k}-\mathbf{q}/2)^2)S_{\ell'}^\alpha((\mathbf{k}-\mathbf{q}'/2)^2)(\mathcal{W}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^\alpha,\mathcal{W}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'/2}^\alpha), \tag{195}$$

で定義され、また、$I_{\ell\ell'}^\alpha(k,q,q)$ と $I_{\ell\ell'}^\alpha(k,q,-q)$ は、(195) 式でそれぞれ $\mathbf{k}-\mathbf{q}'/2\to\mathbf{k}-\mathbf{q}/2$ および $\mathbf{k}+\mathbf{q}/2$ と置くことにより得られる。

(194) 式の行列要素の最初の数項は、解析的に容易に計算でき、$\mathcal{T}_{00}^{5/2}=\mathcal{T}_{11}^{3/2}=1$、$\mathcal{T}_{01}^{5/2}=\mathcal{T}_{12}^{3/2}=-1/4$、$\mathcal{T}_{11}^{5/2}=205/48$ および $\mathcal{T}_{22}^{3/2}=45/16$ と求まる。また、一般の $\ell\ell'$ に関する行列要素も数値的に簡単に評価できる。そのようにして計算された $\mathcal{T}_{\ell\ell'}^\alpha$ を用い、かつ、無限次元行列 $(\mathcal{T}_{\ell\ell'}^\alpha)$ を有限の ℓ_c で打ち切る近似を採用すると、(192) 式は数値的に容易に解くことができ、その際の誤差も ℓ_c を変化させることで見積もることができる。表 2 には、そのようにして得られた a_ℓ^α の収束値を示した。例えば、$a_0^{5/2}$ と $a_1^{3/2}$ の値は、それぞれ $\ell_\mathrm{c}=0$ および 1 として得られる $5\sqrt{\pi}/4$ と $-15\sqrt{\pi}/16$ よりも絶対値にしてわずか 2%大きいだけである。このように、Sonine 多項式展開による有限項近似は、極めて速い収束をもたらす。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

(175d) 式と (175e) 式に (177)、(178)、(188) 式を代入すると、運動量流束密度テンソルと熱流束密度ベクトルの表式が、展開の 1 次までのオーダーで以下のように得られる。

$$\Pi_{ij} = P\delta_{ij} - mn\nu\left(\frac{\partial v_i}{\partial r_j} + \frac{\partial v_j}{\partial r_i} - \delta_{ij}\frac{2}{3}\nabla\cdot\mathbf{v}\right), \tag{196a}$$

$$\mathbf{j}_Q = -C_p\kappa\frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}}. \tag{196b}$$

ここで、$P = nk_{\mathrm{B}}T$ は単原子理想気体の圧力を表し、$C_p = \frac{5}{2}nk_{\mathrm{B}}$ は定圧比熱である。また、ν と κ はそれぞれ動粘性係数および熱拡散係数と呼ばれ、(185) 式の平均自由行程 l と表 2 に与えた係数 $a_0^{5/2}$ および $a_1^{3/2}$ を用いて以下のように定義されている。

$$\nu = \frac{1}{4}l\sqrt{\frac{2k_{\mathrm{B}}T}{m}}a_0^{5/2}, \tag{197a}$$

$$\kappa = -\frac{1}{2}l\sqrt{\frac{2k_{\mathrm{B}}T}{m}}a_1^{3/2}. \tag{197b}$$

これらの係数は明らかに同じ次元を持つ。それらの比 $P_r \equiv \nu/\kappa$ は Prandtl 数と呼ばれ [50]、流体を特徴づける基本的無次元量の一つとなっている。表 2 と (197) 式を用いて得られる理論値 $P_r = 0.66$ は、1 気圧 273K の Ar における値 0.67 など、多くの単原子気体の値ときわめて良い一致を示す [51]。

以上のように $(n, \mathbf{v}, T)$ およびそれらの導関数を用いて、未知関数 $\underline{\Pi}$ と $\mathbf{j}_Q$ を (196) 式のように表現できた。これらを代入した (176) 式は、$(n, \mathbf{v}, T)$ を決める閉じた方程式系を構成する。特に、(176b) 式は Navier-Stokes 方程式に他ならず [49]、また、(176c) 式で $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ と置くと熱伝導方程式に帰着する。これらの方程式が「局所平衡からの 1 次までの展開」を用いて導出されたことを改めて強調しておく。従って、その正当な適用範囲内で (176) 式と (196) 式を解いて得られる $(n, \mathbf{v}, T)$ に対しては、f の熱平衡分布からのずれは小さく、(178), (188), (190) 式および表 2 の係数を用いて、(177) 式のように表せる。このように、乱流やパターン形成など様々な非平衡現象の宝庫である流体力学の対象も、そのエネルギーのほとんどは、平衡統計力学で記述できる熱で占められているのである。得られた分布関数 (177) を用いると、流体中の揺らぎが第 6 章の方法で計算可能であることを再度指摘しておく。

9 まとめと展望・課題

非平衡多体系の力学的な時間発展を記述する量子輸送方程式について解説した。用いた手法は Keldysh グリーン関数法による非平衡多体摂動展開で、その積分経路と Feynman 則は、熱平衡状態のものに多少の変更を加えることで得られる (第 2 章参照)。熱平衡状態の松原グリーン関数がスペクトル関数 A により完全に決定されるのに対し、非平衡 Keldysh グリーン関数には一粒子分布関数 ϕ が余分の未知関数としてつけ加わる (3.1 節参照)。それら二つの関数に対する自己無撞着非線形発展方程式が Dyson 方程式 (54) に他ならない。量子輸送方程式は、その Dyson 方程式を Moyal 積を用いて Wigner 表示に変換した後、勾配展開を 1 次で打ち切る近似により導出され、時

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

間・空間について一階の非線形偏微分方程式である (第 3 章参照)。それは、遅延グリーン関数に対する Dyson 方程式 (70) および分布関数に対する (72) 式で与えられ、A と ϕ に対する閉じた方程式系を構成する。そこに現れる自己エネルギーは局所近似で評価するのが妥当である (3.4 節参照)。この量子輸送方程式においてスペクトル関数 A の情報を積分で消去すると、通常の Boltzmann 方程式や準古典方程式が得られる (第 4 章参照)。

勾配展開を 1 次で打ち切る近似が正当化されるのは、系の微視的な長さと時間のスケールである粒子間の平均間隔および $\hbar/\varepsilon_0$ (ε_0 : 系の特徴的エネルギー) に較べ、系の巨視的な空間・時間変化が緩やかな場合であり、この条件は多くの非平衡系に当てはまる。この近似あるいは「粗視化」のもとで得られた分布関数に対する輸送方程式 (72) からは、また、非平衡状態におけるエントロピーの情報を取り出せることも明らかになった (3.5 節参照)。その時間発展は、一階偏微分方程式である連続の式 (76) で与えられる。そして、孤立系における分布関数 ϕ は Bose/Fermi 分布に漸近して衝突積分がゼロとなり、また、エントロピーの増大もなくなって平衡状態の値に落ち着く (3.6 節参照)。以上のように、非平衡系における「エントロピー」の微視的表現が得られ、また、それがどのような条件下あるいは粗視化の下で定義できるかを明らかにできた。系を純粋に力学的に扱うにも関わらず、なぜエントロピーの概念が現れ、また「非可逆性」が生じたのかという疑問が湧くかもしれない。しかし、ここでの取り扱いは、確率概念である「分布関数」の時間変化を純力学的に追うという手法を用いている。そして、この分布関数の時間発展は、系の「乱雑さ」が増大する圧倒的多数の初期分布を反映する。これが、ここでの扱いで「非可逆性」あるいは「時間の矢」が生じる理由であると考えられる [29]。

ここで得られた方程式は、また、平衡状態において遅延グリーン関数に対する Dyson 方程式に帰着し、松原グリーン関数を用いた平衡統計力学を包含する。つまり、平衡統計力学の自然な拡張としての非平衡動力学である。非平衡動力学としては Langevin 方程式などの確率微分方程式に基づくものもある。しかし、これらの方程式は、一般に確率変数を用いて、定常状態としての熱平衡状態を再現するように人工的に構成されている [4]。従って、純非平衡系への適用に疑問が残る。一方、ここでの手法は分布関数を純力学的に発展させるものであり、そのような問題はないと考えられる。また、ハミルトニアン (14) を用いたここでの考察は、表面における熱浴との相互作用を力学的に取り込むことにより、熱流や運動量流のある場合にも適用可能であろう。さらに、二体相関や揺らぎも第 6 章の手法で計算できる。この意味で、場の量子論を用いた非平衡統計力学は「確立」しており、そこに原理的問題はないと考えている。

松原グリーン関数を用いた場の量子論の手法は、電子系や ^{3}He などに適用され、その物性の理論的解明に大きな役割を果たしてきた。それは、今や、物性理論における必須の道具となっている [8]。その自然な拡張として得られた量子輸送方程式は、非平衡系の理論的解明に大きく役立つと期待できるであろう。平衡系と非平衡系とはいったい何が異なるのであろうか？ 平衡系の Gibbs 分布などに相当する非平衡定常系における普遍的な分布あるいはポテンシャルは存在するであろうか？ 輸送方程式を用いて非平衡系を扱うことで、このような問いにも一定の答えが得られると考えている。例えば、後者の問いに関しては、輸送方程式を解くことで非平衡系の時間発展を追

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

うことが可能であり、その到達点としての非平衡定常状態の性質を調べればよいことになる。非平衡系は、これまで一般に、決定論的な非線形発展方程式に基づいて解析されてきた [5]。第 8 章の考察からは、それらが系の平均的挙動のみを記述し、揺らぎの効果を無視していることがわかる。また、それら非線形偏微分方程式の正当な適用範囲においては、平衡状態からの逸脱の程度は小さい。ここから一歩下がってより微視的な視点に立ち、分布関数の発展方程式、すなわち、輸送方程式から出発することで、非平衡系における揺らぎや様々な「非平衡相転移」の性質についても解明が進むものと思われる。

輸送方程式そのものに関しても未だに数多くの問題が残されている。そのいくつかを挙げると以下のようになる。(i) 3.6 節における 2 次摂動での H 定理を高次まで拡張して一般的証明にすること。(ii) ここでの輸送方程式の導出は、Moyal 展開を 1 次で打ち切り、次いで左 Dyson 方程式と右 Dyson 方程式が等価になるような近似を用いて行った。一般に、ある次数で Moyal 展開を打ち切ったとき、どのような近似の下で左 Dyson 方程式と右 Dyson 方程式が等価になるかを明らかにすること。(iii) 結晶中の電子に対して、周期ポテンシャルによるバンド間散乱の効果を含む輸送方程式を導出すること。(iv) 超伝導・超流動状態への適用。

量子輸送方程式を用いた非平衡統計力学は、未開拓の魅力的な分野である。本稿を読んだ読者に、この分野への興味を持って頂いたとしたら、筆者にとって望外の喜びである。

Appendix A. 第二量子化

第二量子化は、多粒子系を簡便に記述するために必要不可欠な数学的手法であり、学部レベルの量子力学できちんと学んでおくべき主題である。それにもかかわらず、基礎からしっかりと学べる教科書が少ないように感じる。私自身も第二量子化で躓いた覚えがある。

ここでは、まず、同種多粒子系が持つ置換についての対称性から説き起こし、その置換対称性を表現する便利な手法として第二量子化を導入する。

A.1 置換

まず、置換についての基礎的事項を説明する。数学的な証明は文献 [54] を参照されたい。置換 (permutation) は、N 個の席に座っている N 人の人が互いに席を入れ替える操作を意味し、その演算子 $\hat{P}$ は以下のように表すことができる。

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ p_1 & p_2 & p_3 & \cdots & p_N \end{pmatrix}. \tag{198}$$

ここで、第二行の p_i は、i に座っていた人が p_i に席を移したことを表す。従って、各 p_i は 1 から N までの中の一つの値をとり、それらの間に重複はない。相異なる $\hat{P}$ の数は $N!$ である。置換の中で、特に、円状に配置された席に座った人が次々と隣の席に移動するような置換を巡回置換 (cyclic

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

permutation) と呼ぶ。それは以下の演算子で表すことができる。

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & k-1 & k \\ 2 & 3 & 4 & \cdots & k & 1 \end{pmatrix} \equiv (1\,2\,3\cdots k). \tag{199}$$

さらに、置換の中で特別なものとして、二人の人が互いに席を入れ替える「互換」があり、

$$\hat{P}_{12} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \equiv (1\,2), \tag{200}$$

と表すことができる。

任意の置換は巡回置換の積として表せる。例を一つ挙げよう。

$$\hat{P}_a \equiv \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 5 & 6 & 4 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (4)\,(3\,6)\,(1\,2\,5) \equiv (3\,6)\,(1\,2\,5). \tag{201}$$

このように恒等置換 (4) は書くのを省くことにする。さらに、巡回置換は互換の積に書くことができ、具体的に以下のように確かめることができる。

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & k-2 & k-1 & k \\ 2 & 3 & \cdots & k-1 & k & 1 \end{pmatrix} = (1\,2)\,(1\,3)\cdots(1\,k-1)(1\,k).$$

ここで、右辺における演算は、右から左へと順に行うものとする。以上の二つの事実から、「任意の置換は互換の積に書くことができる」ことが結論される。例えば、(201) 式の置換 $\hat{P}_a$ は、

$$\hat{P}_a = (3\,6)\,(1\,2)\,(1\,5)$$

と表すことができる。例をもう一つ挙げる。

$$\hat{P}_b \equiv \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 5 & 6 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = (3\,6\,4)\,(1\,2\,5) = (3\,6)\,(3\,4)\,(1\,2)\,(1\,5).$$

各々の置換を互換の積で表したとき、互換の数が偶数であるか奇数であるかは、互換の仕方によらない。例えば、上の $\hat{P}_a$ は奇数個の互換の積として、また、$\hat{P}_b$ は偶数個の互換の積として表されている。そこで、ある置換を互換の積で表したとき、その数が奇数個の置換を「奇置換」、偶数個の置換を「偶置換」と呼ぶことにする。特に「互換」は「奇置換」であることに注意しておく。

A.2　同種多粒子系の置換対称性

同種粒子からなる多粒子系においては、質量などの粒子の属性が同じであるために、置換に関連した特別の対称性が備わっている。典型例として、N 粒子系に対する次のハミルトニアンを考えよう。

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + U(\mathbf{r}_j)\right] + \sum_{i<j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \equiv \sum_{j=1}^{N} \hat{h}_j^{(1)} + \sum_{i<j} \hat{h}_{ij}^{(2)}. \tag{202}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ここで、U と V は、それぞれ 1 体ポテンシャルと相互作用ポテンシャルである。このハミルトニアンは任意の置換 $\hat{P}$ と可換であり、

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1} = \hat{H} \tag{203}$$

を満たす。例えば $N = 2$ の 2 粒子系を考えると、上式は次のように証明できる。

$$\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}^{-1} = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_2) + U(\mathbf{r}_1) + V(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)\right]\hat{P}_{12}\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{H}.$$

このように、置換は、ハミルトニアンにおける和の順序を変えるのみであり、ハミルトニアンそのものを不変に保つ。(203) 式より、$\hat{P}$ と $\hat{H}$ は同時対角化可能であり、また、$\hat{H}$ に時間依存性がない場合には、$\hat{P}$ の期待値も時間変化しないことがわかる。

そこで、まず、互換 $\hat{P}_{12}$ の固有値を求める。$\hat{P}_{12}^2$ は明らかに恒等演算子である。従って、$\hat{P}_{12}$ の固有値を σ とすると、それは $\sigma^2 = 1$ を満たすことがわかる。これより $\sigma = \pm 1$ が結論される。すなわち、同種粒子系の波動関数は、互換により不変であるか符号を変えるかのいずれかである。固有値 σ と粒子の持つスピンの大きさとの関連が Pauli により明らかにされた (Pauli, 1940 年)。それによると、以下の対応関係がある。

$$\sigma = \begin{cases} +1 & (\text{Bose 粒子}) \\ -1 & (\text{Fermi 粒子}) \end{cases} \quad \longleftrightarrow \quad \text{スピンは} \begin{cases} 0, 1, 2, \cdots & (\text{整数}) \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \cdots & (\text{半整数}) \end{cases}.$$

例えば、電子、陽子、中性子などはいずれもスピン 1/2 を持つ Fermi 粒子であり、光子はスピン 1 を持つ Bose 粒子である。また、複合粒子である水素原子は、陽子 1 個と電子 1 個からなっており、その全スピンは 0 あるいは 1 の整数値をとるため、全体として Bose 粒子の振舞いをする

以上は互換についての考察であるが、任意の置換 $\hat{P}$ への一般化も容易である。それには、「任意の置換が互換の積として表すことができ、その互換の数の偶奇はその置換に固有である」という上記の定理を思い起こせばよい。従って、$\hat{P}$ の固有値として

$$\sigma^P \equiv \begin{cases} 1 & : \text{偶置換} \\ \sigma & : \text{奇置換} \end{cases} \tag{204}$$

を得る。

最後に、$\hat{P}$ の波動関数への作用をあらわに書き下しておく。N 粒子系の波動関数を

$$\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \tag{205}$$

と書くことにする。ここで、ν は N 粒子系の波動関数を指定する量子数であり、また、$x_j \equiv \mathbf{r}_j\alpha_j$ は空間座標 $\mathbf{r}_j$ とスピン座標 α_j を一まとめに表すものとする。(198) 式の置換 $\hat{P}$ を Ψ_ν に作用させるということは、定義として次の操作を意味する。

$$\hat{P}\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \equiv \Psi_\nu(x_{p_1}, x_{p_2}, \cdots, x_{p_N}). \tag{206a}$$

一方、Ψ_ν は $\hat{P}$ の固有関数であり、その固有値は σ^P である。このことを具体的に表現すると、以下のようになる。

$$\hat{P}\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \sigma^P\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N). \tag{206b}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

A.3 $\hat{P}$ の固有空間の構成

(206) 式は、同種多粒子系の波動関数が $\hat{P}$ の固有状態であり、対称化 (Bose 粒子) あるいは反対称化 (Fermi 粒子) されていなければならないことを表している。以下では、この同種粒子が棲む特殊な空間を、場の演算子を用いて簡便に構成する。

まず、調和振動子の生成消滅演算子 [55] に倣って、場の演算子 $\hat{\psi}$ と $\hat{\psi}^\dagger$ を、次の交換関係を満たすものとして数学的に導入する。

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')]_\sigma \equiv \hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(x') - \sigma\hat{\psi}^\dagger(x')\hat{\psi}(x) = \delta(x, x'), \tag{207a}$$

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')]_\sigma = [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(x')]_\sigma = 0. \tag{207b}$$

ここで、$\delta(x, x') \equiv \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta_{\alpha\alpha'}$ である。次に、真空ケット $|0\rangle$ と真空ブラ $\langle 0|$ を次式により定義する。

$$\hat{\psi}(x)|0\rangle = 0, \qquad 0 = (\hat{\psi}(x)|0\rangle)^\dagger = \langle 0|\hat{\psi}^\dagger(x), \qquad \langle 0|0\rangle = 1. \tag{208}$$

以上が $\hat{P}$ の固有空間を構成するための基本的演算子と状態ベクトルである。

上記の演算子と真空ブラケットを用いて、状態ベクトル $|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ とそのエルミート共役を以下のように導入する。

$$|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N)|0\rangle, \tag{209a}$$

$$\langle x_1 x_2 \cdots x_N| \equiv |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\hat{\psi}(x_N)\cdots\hat{\psi}(x_2)\cdots\hat{\psi}(x_1). \tag{209b}$$

この状態空間 $|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ は、場の演算子の交換関係により、自動的に $\hat{P}$ の固有空間となっている。実際、交換関係 $\hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{\psi}^\dagger(x_1) = \sigma\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)$ を用いて、$|x_2 x_1 x_3 \cdots x_N\rangle = \sigma|x_1 x_2 x_3 \cdots x_N\rangle$ を示すことができる。また、一般の $\hat{P}$ についても

$$|x_{p_1} x_{p_2} \cdots x_{p_N}\rangle = \sigma^P |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle \tag{210}$$

が成立する。

状態ベクトル $|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ は次の規格直交条件を満たす。

$$\langle y_1 y_2 \cdots y_M | x_1 x_2 \cdots x_N\rangle = \frac{\delta_{MN}}{N!}\sum_{\hat{P}} \sigma^P \delta(y_1, x_{p_1})\delta(y_2, x_{p_2})\cdots\delta(y_N, x_{p_N}). \tag{211}$$

これは、恒等式

$$\begin{aligned}
&\hat{\psi}(y_1)\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N) \\
&= \delta(y_1, x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N) + \sigma\delta(y_1, x_2)\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_3)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N) + \cdots \\
&\quad + \sigma^{N-1}\delta(y_1, x_N)\hat{\psi}^\dagger(x_1)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_{N-1}) + \sigma^N\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(x_N)\hat{\psi}(y_1)
\end{aligned} \tag{212}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を用いて消滅演算子 $\hat{\psi}(y)$ を $|0\rangle$ のすぐ左に持って来た後、$\hat{\psi}(y)|0\rangle = 0$ を用いることで証明できる。具体的に、$M = N = 2$ の場合には、次のように示せる。

$$\begin{aligned}\langle y_1 y_2|x_1 x_2\rangle &= \frac{1}{2!}\langle 0|\hat{\psi}(y_2)\hat{\psi}(y_1)\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)|0\rangle \\ &= \frac{1}{2!}\langle 0|\hat{\psi}(y_2)\big[\delta(y_1,x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2) + \sigma\delta(y_1,x_2)\hat{\psi}^\dagger(x_1) + \sigma^2\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{\psi}(y_1)\big]|0\rangle \\ &= \frac{1}{2!}\big[\delta(y_1,x_1)\delta(y_2,x_2) + \sigma\delta(y_1,x_2)\delta(y_2,x_1)\big].\end{aligned}$$

以上で $\hat{P}$ の固有空間が構成できた。

A.4 多粒子系におけるブラケット・ベクトルの構成

次に置換対称性 (206) を持つ波動関数 (205) に対するブラケット・ベクトルを次式で定義する。

$$|\Psi_\nu\rangle \equiv \int \mathrm{d}y_1 \int \mathrm{d}y_2 \cdots \int \mathrm{d}y_N\, |y_1 y_2 \cdots y_N\rangle \Psi_\nu(y_1, y_2, \cdots, y_N), \tag{213a}$$

$$\langle\Psi_\nu| \equiv \int \mathrm{d}y_1 \int \mathrm{d}y_2 \cdots \int \mathrm{d}y_N\, \langle y_1 y_2 \cdots y_N|\Psi_\nu^*(y_1, y_2, \cdots, y_N) = |\Psi_\nu\rangle^\dagger. \tag{213b}$$

ここで、$y_j = \mathbf{r}_j\alpha_j$ についての積分は、$\mathbf{r}_j$ についての積分と α_j についての和を意味するものとする。このブラ・ベクトルは以下の性質を持つ。

$$\hat{\psi}(x_1)|\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N}\int \mathrm{d}y_2 \cdots \int \mathrm{d}y_N\, |y_2 \cdots y_N\rangle \Psi_\nu(x_1, y_2, \cdots, y_N), \tag{214a}$$

$$\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)|\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N(N-1)}\int \mathrm{d}y_3 \cdots \int \mathrm{d}y_N\, |y_3 \cdots y_N\rangle \Psi_\nu(x_1, x_2, y_3, \cdots, y_N), \tag{214b}$$

$$\hat{\psi}(x_N)\cdots\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)|\Psi_\nu\rangle = \sqrt{N!}\,|0\rangle \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N). \tag{214c}$$

つまり、$\hat{\psi}(x)$ を $|\Psi_\nu\rangle$ に作用することにより、波動関数の座標 x があらわに引き出されることになる。証明は、(206) 式と (212) 式および積分変数の入れ換えにより、初等的に実行できる。(208), (209b), (214c) 式から次式が得られる。

$$\langle x_1 x_2 \cdots x_N|\Psi_\nu\rangle = \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N). \tag{215}$$

この式を (213a) 式に代入すると、以下の等式が出てくる。

$$|\Psi_\nu\rangle \equiv \int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \cdots \int \mathrm{d}x_N\, |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle\langle x_1 x_2 \cdots x_N|\Psi_\nu\rangle.$$

これは次の関係式に等価である。

$$\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \cdots \int \mathrm{d}x_N\, |x_1 x_2 \cdots x_N\rangle\langle x_1 x_2 \cdots x_N| = 1. \tag{216}$$

言い換えると、$|x_1 x_2 \cdots x_N\rangle$ は $\hat{P}$ の固有空間に対する完全系を構成している。

(213) 式を用いると、また、$\hat{P}$ の固有空間にない任意の関数 $\tilde{\Psi}(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ も、容易に対称化・反対称化することが可能である。実際、状態ベクトル

$$|\Psi\rangle = A_N \int \mathrm{d}y_1 \int \mathrm{d}y_2 \cdots \int \mathrm{d}y_N |y_1 y_2 \cdots y_N\rangle \tilde{\Psi}(y_1, y_2, \cdots, y_N) \tag{217}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を構成すると、$|y_1 y_2 \cdots y_N\rangle$ の効果により、$\tilde{\Psi}(y_1, y_2, \cdots, y_N)$ の中で対称・反対称な部分のみが取り出されることになる。ただし、規格化定数 A_N は別に決める必要がある。(217) 式は、$\tilde{\Psi}(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ を $\hat{P}$ の固有空間に埋め込む操作とも見なす事ができる。実際、この $|\Psi\rangle$ から (215) 式を用いて、$\hat{P}$ の固有空間の波動関数が以下のように構成できる。

$$\Psi(x_1, x_2, \cdots, x_N) \equiv \langle x_1, x_2, \cdots, x_N|\Psi\rangle = \frac{A_N}{N!}\sum_{\hat{P}} \sigma^P \tilde{\Psi}(x_{p_1}, x_{p_2}, \cdots, x_{p_N}). \tag{218}$$

ここでの変形に際しては (211) 式を用いた。この波動関数は (206) 式を満足し、正しい置換対称性を持っている。

A.5　ブラケット・ベクトルの規格直交性と完全性

(206) 式を満たす多粒子系の波動関数 $\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ が、また、規格直交性と完全性をあわせ持つと仮定しよう。そのことは次のように表せる。

$$\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \cdots \int \mathrm{d}x_N \Psi^*_{\nu'}(x_1, x_2, \cdots, x_N)\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \delta_{\nu'\nu}\,, \tag{219a}$$

$$\sum_\nu \Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)\Psi^*_\nu(x'_1, x'_2, \cdots, x'_N) = \frac{1}{N!}\sum_{\hat{P}} \sigma^P \delta(x'_1, x_{p_1})\delta(x'_2, x_{p_2}) \cdots \delta(x'_N, x_{p_N})\,. \tag{219b}$$

一方、これらの関係は、(213) 式のブラケット・ベクトルを用いて、以下のように簡潔に表現できる。

$$\langle \Psi_{\nu'}|\Psi_\nu\rangle = \delta_{\nu'\nu}, \qquad \sum_\nu |\Psi_\nu\rangle\langle\Psi_\nu| = 1. \tag{220}$$

証明は、(220) 式の左辺に (213) 式を代入し、(206), (211), (216), (219) 式を用いることで初等的に実行できる。

A.6　演算子の行列要素

状態ベクトル $|\Psi_\nu\rangle$ と場の演算子 $\hat{\psi}(x)$ を用いると、同種多粒子系における演算子の行列要素が簡潔に表現できる。このことを以下で見てゆこう。

(202) 式からも明らかなように、同種多粒子系の 1 粒子演算子 $\hat{H}^{(1)}$ と 2 粒子演算子 $\hat{H}^{(2)}$ は、一般に次の形を持つ。

$$\hat{H}^{(1)} \equiv \sum_{j=1}^{N} \hat{h}^{(1)}_j, \qquad \hat{H}^{(2)} \equiv \sum_{i<j} \hat{h}^{(2)}_{ij}. \tag{221}$$

これらの演算子の $\Psi^*_{\nu'}(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ と $\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ の間の行列要素は、ブラケット・ベ

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

クトル $\langle\Psi_{\nu'}|$ と $|\Psi_\nu\rangle$ を用いて以下のように表現できる。

$$\int \mathrm{d}x_1 \cdots \int \mathrm{d}x_N \Psi^*_{\nu'}(x_1,\cdots,x_N)\hat{H}^{(1)}\Psi_\nu(x_1,\cdots,x_N) = \int \mathrm{d}x_1 \langle\Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{h}^{(1)}_1\hat{\psi}(x_1)|\Psi_\nu\rangle, \tag{222a}$$

$$\int \mathrm{d}x_1 \cdots \int \mathrm{d}x_N \Psi^*_{\nu'}(x_1,\cdots,x_N)\hat{H}^{(2)}\Psi_\nu(x_1,\cdots,x_N)$$

$$= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \langle\Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)\hat{h}^{(2)}_{12}\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)|\Psi_\nu\rangle. \tag{222b}$$

証明は、右辺に (214) 式を代入し、(206) 式と (211) 式を用いることで初等的に実行できる。

A.7 第一量子化と第二量子化 — 同種多粒子系に対する二つの等価な記述法

以上により、同種多粒子系に対して二つの等価な記述法があることが明らかになった。

第一の方法は「第一量子化」と呼ばれ、通常の演算子と波動関数を用いて行列要素や期待値を評価する。例えば、ハミルトニアンは (202) 式で与えられ、対応する波動関数 (205) は (206) 式の対称性を満たすように構成しなければならない。

一方、第二量子化と呼ばれる場の演算子を用いた記述法では、(202) 式のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \int \mathrm{d}x_1 \hat{\psi}^\dagger(x_1)\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1)\right]\hat{\psi}(x_1) + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)V(|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|)\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1), \tag{223a}$$

と表される。対応する状態ベクトルは、(209) 式を用いて

$$|\Psi_\nu\rangle = \int \mathrm{d}x_1 \cdots \int \mathrm{d}x_N |x_1\cdots x_N\rangle \Psi_\nu(x_1,\cdots,x_N), \tag{223b}$$

で与えられ、規格直交完全性 (220) を満たす。(223) 式すなわち第二量子化法は、(222) 式より、「第一量子化」と全く等価な記述を与えることがわかる。

A.8 第二量子化—相互作用のない場合

以下では、相互作用のない系に対して、第二量子化のハミルトニアンと状態ベクトルをあらわに書き下しておく。考察するハミルトニアンとして、具体的に下記のものを考える。

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \equiv \int \hat{\psi}^\dagger(x_1)\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1)\right]\hat{\psi}(x_1)\mathrm{d}x_1. \tag{224}$$

ここで、1 粒子ハミルトニアンの固有値問題

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1)\right]\varphi_k(x_1) = \epsilon_k\varphi_k(x_1) \tag{225}$$

が解けたとし、その固有関数 $\varphi_k(x) = \langle x|k\rangle$ が以下の完全規格直交関係を満たすものと仮定する。

$$\langle k|k'\rangle \equiv \int \varphi^*_k(x_1)\varphi_{k'}(x_1)\mathrm{d}x_1 = \delta_{kk'}, \tag{226a}$$

$$\sum_k \varphi_k(x_1)\varphi^*_k(x_2) = \delta(x_1,x_2). \tag{226b}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

次に、$\varphi_k(x_1)$ を用いて、場の演算子 $\hat{\psi}(x)$ を下記のように展開する。

$$\hat{\psi}(x) = \sum_k \hat{c}_k \varphi_k(x), \qquad \hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_k \hat{c}_k^\dagger \varphi_k^*(x). \tag{227}$$

(207) 式と (226) 式を用いると、演算子 $\hat{c}_k$ と $\hat{c}_k^\dagger$ が次の交換関係を満たすことを容易に示せる。

$$[\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}^\dagger]_\sigma = \delta_{kk'}, \qquad [\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}]_\sigma = [\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_{k'}^\dagger]_\sigma = 0. \tag{228}$$

(227) 式を (224) 式に代入し、(225) 式と (226a) 式を考慮すると、(224) 式の $\hat{\mathcal{H}}_0$ が次のように書き換えられる。

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_k \epsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k. \tag{229}$$

次に、$\hat{\mathcal{H}}_0$ の固有ブラケット・ベクトルを求めよう。まず、相互作用のない N 粒子系の波動関数を得るため、1 粒子波動関数の N 個の積 $\tilde{\Psi}_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) \equiv \prod_{j=1}^N \langle x_j | k_j \rangle$ から出発する。ここで $\nu = (k_1, k_2, \cdots, k_N)$ である。そして、(218) 式により $\hat{P}$ の固有空間への埋め込み作業を行うと、正しい置換対称性を持った波動関数が以下のように得られる。

$$\Psi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \frac{A_N}{N!} \sum_{\hat{P}} \sigma^P \langle x_1 | k_{p_1} \rangle \langle x_2 | k_{p_2} \rangle \cdots \langle x_N | k_{p_N} \rangle. \tag{230}$$

特に、Fermi 粒子系 ($\sigma = -1$) の場合、(230) 式は行列式の定義に外ならず [56]、

$$\Psi_\nu^{(\mathrm{F})}(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \frac{A_N^{(\mathrm{F})}}{N!} \det \begin{bmatrix} \langle x_1 | k_1 \rangle & \cdots & \langle x_1 | k_N \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle x_N | k_1 \rangle & \cdots & \langle x_N | k_N \rangle \end{bmatrix}, \tag{231}$$

と Slater 行列式として表すことができる。そして、行列式の性質から、$(k_1, \cdots, k_N)$ もしくは $(x_1, \cdots, x_N)$ のなかに同一のものがあると $\Psi_\nu^{(\mathrm{F})} = 0$ となることが結論される。これは、「二つの同種粒子が同時に同じ 1 粒子状態もしくは (スピンも含めた) 同じ 1 粒子座標を占めることはできない」という Pauli 原理に他ならない。このように、「Pauli 原理」は実際は「原理」ではなく、同種粒子系の置換対称性から自然に導かれる法則である。Fermi 粒子系の規格化定数 $A_N^{(\mathrm{F})}$ は、k_j がすべて異なることに注意すると、以下のように計算できる。

$$\begin{aligned} 1 &= \int \mathrm{d}x_1 \cdots \int \mathrm{d}x_N |\Psi_\nu^{(\mathrm{F})}(x_1, \cdots, x_N)|^2 = \frac{\left(A_N^{(\mathrm{F})}\right)^2}{(N!)^2} \sum_{\hat{P}} \sum_{\hat{P}'} (-1)^{P'+P} \prod_{j=1}^N \langle k_{p'_j} | k_{p_j} \rangle \\ &= \frac{\left(A_N^{(\mathrm{F})}\right)^2}{(N!)^2} \sum_{\hat{P}} \sum_{\hat{P}'} (-1)^{P'+P} \prod_{j=1}^N \delta_{p'_j p_j} = \frac{\left(A_N^{(\mathrm{F})}\right)^2}{(N!)^2} \sum_{\hat{P}} \sum_{\hat{P}'} (-1)^{P'+P} \delta_{\hat{P}'\hat{P}} = \frac{\left(A_N^{(\mathrm{F})}\right)^2}{N!}. \end{aligned}$$

これから Fermi 粒子系の規格化定数が

$$A_N^{(\mathrm{F})} = \sqrt{N!} \tag{232}$$

と求まる。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

一方、Bose 粒子系 ($\sigma = 1$) の場合には、同一の k_j に複数個の粒子が入ることが可能になる。ここでは ν として、k_1 に n_1 個、k_2 に n_2 個、$\cdots$、k_ℓ に n_ℓ 個の粒子が存在する場合

$$\nu = (k_1, \cdots, k_1, k_2, \cdots, k_2, \cdots, k_\ell, \cdots, k_\ell), \qquad \sum_{j=1}^{\ell} n_j = N, \tag{233}$$

を考える。波動関数は再び $\sigma = 1$ の (230) 式で与えられ、k_{p_j} は (233) 式の ν の置換である。対応する規格化定数は以下のように計算できる。

$$\begin{aligned} 1 &= \int \mathrm{d}x_1 \cdots \int \mathrm{d}x_N |\Psi_\nu^{(\mathrm{B})}(x_1, \cdots, x_N)|^2 = \frac{\left(A_N^{(\mathrm{B})}\right)^2}{(N!)^2} \sum_{\hat{P}'} \sum_{\hat{P}} \prod_{j=1}^{N} \langle k_{p'_j} | k_{p_j} \rangle \\ &= \frac{\left(A_N^{(\mathrm{B})}\right)^2}{(N!)^2} N! \sum_{\hat{P}} \prod_{j=1}^{N} \langle k_j | k_{p_j} \rangle = \frac{\left(A_N^{(\mathrm{B})}\right)^2}{N!} n_1! n_2! \cdots n_\ell! . \end{aligned}$$

第三の等式では、$\hat{P}'$ が恒等置換の場合を考えて結果を $N!$ 倍した。このようにして、Bose 粒子系の規格化定数が

$$A_N^{(\mathrm{B})} = \frac{\sqrt{N!}}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots n_\ell!}} \tag{234}$$

と求まった。

以上で波動関数が得られたので、対応するブラ・ベクトル $|\Psi_\nu\rangle$ を具体的に書き下そう。まず、Fermi 粒子系の場合を考える。(230) 式に (232) 式と $\sigma = -1$ を代入し、その結果をさらに (223b) 式に代入した後、(226)-(228) 式を用いて変形すると、$|\Psi_\nu^{(\mathrm{F})}\rangle$ として次式が得られる。

$$|\Psi_\nu^{(\mathrm{F})}\rangle = \hat{c}_{k_1}^\dagger \hat{c}_{k_2}^\dagger \cdots \hat{c}_{k_N}^\dagger |0\rangle. \tag{235a}$$

この表現は (231) 式に較べてはるかに簡潔である。そして、Slater 行列式における列の入れ替え $k_i \leftrightarrow k_j$ による波動関数の符号変化が、$\hat{c}_{k_i}^\dagger$ と $\hat{c}_{k_j}^\dagger$ の入れ替えによる $|\Psi_\nu^{(\mathrm{F})}\rangle$ の符号変化に対応する。特に、ν を構成する k_j として 1 粒子エネルギーの低いものから順に N 個を選んだ場合の $|\Psi_\nu^{(\mathrm{F})}\rangle$ は、相互作用の無い Fermi 粒子系における基底状態を表し、「Fermi 真空」とも呼ばれる。

一方、Bose 粒子系の場合には、(230) 式に (234) 式と $\sigma = 1$ を代入し、同様に変形すると、(233) 式の ν に対する $|\Psi_\nu^{(\mathrm{B})}\rangle$ として次式が得られる。

$$|\Psi_\nu^{(\mathrm{B})}\rangle = \frac{(\hat{c}_{k_1}^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \cdots \frac{(\hat{c}_{k_\ell}^\dagger)^{n_\ell}}{\sqrt{n_\ell!}} |0\rangle . \tag{235b}$$

この表現は、多数の自由度を持つ調和振動子の固有関数の表現に他ならない [55]。

以上の例からも明らかなように、第二量子化は、同種多粒子系の簡潔な記述を可能にし、量子統計力学における必要不可欠の数学的道具である。

Fermi 粒子系においては、演算子の反交換関係より、$\hat{c}_k^2 |0\rangle = 0$ が成立する。このことを考慮すると、(235a) 式と (235b) 式は、まとめて

$$|\Psi_\nu\rangle = \frac{(\hat{c}_{k_1}^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \cdots \frac{(\hat{c}_{k_\ell}^\dagger)^{n_\ell}}{\sqrt{n_\ell!}} |0\rangle \tag{236}$$

と表すことができることを指摘しておく。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

Appendix B. 密度行列

ここでは、量子統計力学における最も重要な概念の一つである「密度行列」を導入し、平衡系に対してその具体形を求める。

B.1　全系と部分系

一般に、統計力学で扱う系は非常に膨大な自由度を持っており、それ自体を力学的に扱うことはほぼ不可能である。そこで、全系を注目する部分系とその他の外界に分け、外界の影響を確率的に取り込むことを考える (図 8 参照)。以下、部分系の全座標を $\xi \equiv (x_1, x_2, \cdots, x_N)$、また外界の全座標を q で表すことにする。

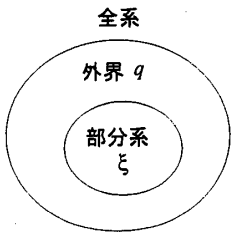


図 8: 全系と部分系

外界と部分系との間に相互作用がないとき、その部分系は「純粋系」と呼ばれる。この場合の部分系は、Schrödinger 方程式の解である波動関数

$$\Phi(\xi, t) = \sum_{\nu} a_\nu \phi_\nu(\xi, t), \tag{237}$$

で記述できるであろう。ここで $\phi_\nu(\xi, t)$ は完全規格直交系であり、また a_ν は展開係数で、規格化条件 $\int |\Phi(\xi, t)|^2 \mathrm{d}\xi = 1$ より、

$$\sum_{\nu} |a_\nu|^2 = 1, \tag{238}$$

を満たす。波動関数 $\Phi(x, t)$ を用いると、部分系の演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ の期待値は、

$$\mathcal{O}(t) \equiv \int \Phi^*(\xi, t) \hat{\mathcal{O}} \Phi(\xi, t) \mathrm{d}\xi = \sum_{\nu\nu'} a_\nu a^*_{\nu'} \int \phi^*_{\nu'}(\xi, t) \hat{\mathcal{O}} \phi_\nu(\xi, t) \mathrm{d}\xi, \tag{239}$$

と表せる。

次に、部分系と外界との間に相互作用がある場合を考える。その場合の部分系は「混合系」と呼ばれる。部分系に対する外界の影響を確率的に取り込むために、(239) 式の展開係数 $a_\nu a^*_{\nu'}$ をある平均値 $w_{\nu\nu'} \equiv \langle a_\nu a^*_{\nu'} \rangle$ で置き換えることを考える。$w_{\nu\nu'}$ の具体形は未だ不明である。しかし、その定義式より、以下の性質を持つことが期待できる。

(a) $w^*_{\nu\nu'} = \langle a_\nu a^*_{\nu'} \rangle^* = \langle a_{\nu'} a^*_\nu \rangle = w_{\nu'\nu}$　：エルミート行列。

(b) $w_{\nu\nu'} = \langle a_\nu a^*_{\nu'} \rangle$ は正値行列。

(c) $\sum_\nu w_{\nu\nu} = \sum_\nu \langle |a_\nu|^2 \rangle = \langle \sum_\nu |a_\nu|^2 \rangle = 1$ ：規格化。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

B.2 密度行列

上記の $w_{\nu\nu'}$ を用いて、密度行列 $\rho(\xi,\xi';t)$ を次式で定義する。

$$\rho(\xi,\xi';t) \equiv \sum_{\nu\nu'} w_{\nu\nu'}\phi_\nu(\xi,t)\phi^*_{\nu'}(\xi',t). \tag{240}$$

この密度行列を用いると、演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ の時刻 t における期待値 $\mathcal{O}(t)$ が、次のように表現できる。

$$\mathcal{O}(t) = \sum_{\nu\nu'} w_{\nu\nu'} \int \phi^*_{\nu'}(\xi,t)\hat{\mathcal{O}}\phi_\nu(\xi,t)\mathrm{d}\xi = \int \hat{\mathcal{O}}_\xi\, \rho(\xi,\xi';t)\big|_{\xi'=\xi}\,\mathrm{d}\xi. \tag{241}$$

ここで、演算子 $\hat{\mathcal{O}}_\xi$ の添え字 ξ は、$\rho(\xi,\xi';t)$ の ξ のみに作用することを表す。上記の $w_{\nu\nu'}$ の性質から、密度行列は以下の性質を持つ。

(a) $\rho(\xi,\xi';t) = \rho^*(\xi',\xi;t)$ ：エルミート行列。

(b) $\rho(\xi,\xi';t)$ は正値行列。

(c) $\displaystyle\int \rho(\xi,\xi;t)\mathrm{d}\xi = \sum_{\nu\nu'} w_{\nu\nu'} \int \phi^*_{\nu'}(\xi,t)\phi_\nu(\xi,t)\mathrm{d}\xi = 1$ ：規格化。

また、Schrödinger 方程式 $i\hbar\partial_t\phi_\nu(\xi,t) = \hat{H}\phi_\nu(\xi,t)$ より、密度行列が次の微分方程式を満たすことがわかる。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(\xi,\xi';t) = (\hat{H}_\xi - \hat{H}^*_{\xi'})\rho(\xi,\xi';t). \tag{242}$$

ただし、ここでは $w_{\nu\nu'}$ が時間依存性を持たないと仮定した。

B.3 平衡状態の密度行列

平衡状態においては、$\phi_\nu(\xi,t) = \Psi_\nu(\xi)\mathrm{e}^{-iE_\nu t/\hbar}$ と表されるエネルギー固有状態 $\Psi_\nu(\xi)$ を用いると便利である。このとき、密度行列 (240) は、

$$\rho(\xi,\xi';t) = \sum_{\nu} w_{\nu\nu'}\Psi_\nu(\xi)\Psi^*_{\nu'}(\xi')\mathrm{e}^{-i(E_\nu - E_{\nu'})t/\hbar} \tag{243}$$

と書き換えられる。ここで、平衡状態の ρ に時間依存性がないことを要請すると、$w_{\nu\nu'} \propto \delta_{\nu\nu'}$ が結論される。つまり、平衡状態の密度行列はエネルギー表示で対角的になり、

$$\rho(\xi,\xi') = \sum_{\nu} w(E_\nu)\Psi_\nu(\xi)\Psi^*_\nu(\xi'), \tag{244}$$

と表すことができる。

以下、相加性の仮定に基づいて、$w(E_\nu)$ の具体形を求めてゆく。図 9 のように、全系の中に二つの隣接する部分系を考え、表面を通して生じるそれらの間の相互作用は十分弱いものと仮定する。すると、部分系 1 と 2 はほとんど独立であり、複合系 1 + 2 の出現確率 $w^{(1+2)}$ は $w^{(1)}$ と $w^{(2)}$ の積で近似できるであろう。すなわち、$\ln w$ は相加的であり、

$$\ln w^{(1+2)} = \ln w^{(1)} + \ln w^{(2)}, \tag{245}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

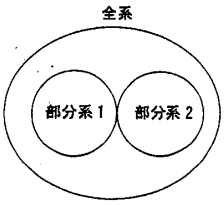


図 9: 部分系間の相互作用

を満たすことが結論される。同じ近似の範囲内で、$E^{(1+2)} = E^{(1)} + E^{(2)}$ が成立する。このことと (245) 式および $w = w(E)$ を考慮すると、$\ln w(E)$ の関数形が次のように求まる。

(a) $\ln w(E) = \alpha - \beta E$　　：$\ln w(E)$ は E の 1 次関数（E と $\ln w$ の相加性より）。

(b) $\alpha^{(1+2)} = \alpha^{(1)} + \alpha^{(2)}$　　：定数部分は相加的。

(c) $\beta^{(1)} = \beta^{(2)} \equiv \beta$　　：$\beta^{(j)}$ は各部分系で同じ。

(d) $1 = \sum_\nu w_\nu = \sum_\nu \mathrm{e}^{\alpha - \beta E_\nu}$　　$\longrightarrow$　　$\alpha = -\ln \sum_\nu \mathrm{e}^{-\beta E_\nu} \equiv \beta F$。

すなわち、w_ν の具体形として次式が得られた。

$$w_\nu = \mathrm{e}^{\beta(F - E_\nu)}, \qquad F \equiv -\frac{1}{\beta} \ln \sum_\nu \mathrm{e}^{-\beta E_\nu}. \tag{246}$$

さらに、エネルギーの低い状態のほうが出現確率が大きくなることを要請すると、

$$\beta \equiv \frac{1}{k_\mathrm{B} T} > 0. \tag{247}$$

が結論される。これは Boltzmann 定数 k_B を用いた温度 T の定義式ともみなせる。(246) 式の分布はカノニカル分布と呼ばれ、また、この分布に従う集団は「正準集団 (canonical ensemble)」と名づけられている。カノニカル分布は Boltzmann 分布と形は同じであるが、相互作用のない系の一粒子エネルギー ϵ_k ではなく、相互作用も含めた系の全エネルギー E_ν が指数の肩に現れていることに注意する必要がある。

以上の考察は、部分系 1 と部分系 2 との間に粒子のやり取りがある場合に容易に拡張できる。変更点は下記の通りである。

(a) $w_\nu = w(E_\nu)$　　$\longrightarrow$　　$w_{\nu N} = w(E_\nu, N)$.

(b) E と N に関する相加性の仮定　　$\longrightarrow$　　$w_{\nu N} = \mathrm{e}^{\beta(\Omega - E_\nu + \mu N)}$,　$\Omega \equiv -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{\nu N} \mathrm{e}^{-\beta(E_\nu - \mu N)}$.

この確率分布 $w_{\nu N} = \mathrm{e}^{\beta(\Omega - E_\nu + \mu N)}$ に従う集団は「大正準集団 (grand canonical ensemble)」と名づけられ、また、μ は化学ポテンシャルと呼ばれる。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

B.4 平衡状態の密度行列—第二量子化を用いた表現

以下、上記の密度行列に第二量子化の表現を与える。まず、カノニカル分布の密度行列は、(223) 式のハミルトニアンと状態ベクトルを用いて、下記のように表すことができる。

$$\hat{\rho} = \sum_{\nu} \mathrm{e}^{\beta(F-\hat{\mathcal{H}})} |\Psi_\nu\rangle\langle\Psi_\nu|, \qquad F \equiv -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{\nu} \mathrm{e}^{-\beta E_\nu}. \tag{248}$$

この密度行列を用いると、演算子 $\hat{\mathcal{O}}$ の期待値が次のように表現できる。

$$\mathcal{O} = \sum_{\nu} \mathrm{e}^{\beta(F-E_\nu)} \langle\Psi_\nu|\hat{\mathcal{O}}|\Psi_\nu\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{\mathcal{O}}. \tag{249}$$

例えば、密度演算子を第二量子化で表すと $\hat{n}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)$ と書け、その期待値 $n(x)$ は

$$n(x) = \sum_{\nu} \mathrm{e}^{\beta(F-E_\nu)} \langle\Psi_\nu|\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)|\Psi_\nu\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x). \tag{250}$$

と表現できる。

同様に、大正準集団 (grand canonical ensemble) の密度行列は、

$$\hat{\rho} = \sum_{\nu N} \mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{\mathcal{H}}+\mu\hat{N})} |\Psi_{\nu N}\rangle\langle\Psi_{\nu N}|, \qquad \Omega \equiv -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{\nu N} \mathrm{e}^{-\beta(E_\nu-\mu N)}, \tag{251}$$

と表される。ただし、

$$\hat{N} \equiv \int \hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}(x_1)\,\mathrm{d}x_1 = \sum_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k, \tag{252}$$

は粒子数演算子である。(252) 式の第二の等式では、(227) 式の展開を代入して (226a) 式の規格直交性を用いた。特に相互作用のないハミルトニアン (224) は、1 粒子ハミルトニアンを対角化する表示 (225) を用いて、(229) 式のように書き換えられる。この (229) 式と (252) 式、および、(236) 式を (251) 式に代入すると、相互作用のない大正準集団の密度行列 $\hat{\rho}_0$ が、以下のように表せることがわかる。

$$\hat{\rho}_0 = \prod_k \frac{\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_k-\mu)n} |n\rangle_k\,{}_k\langle n|}{\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_k-\mu)n}}, \qquad |n\rangle_k \equiv \frac{(\hat{c}_k^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle_k. \tag{253}$$

ただし、$|0\rangle_k$ は、$\hat{c}_k|0\rangle_k = 0$ を満たす状態 k の真空状態を表すものとする。Fermi 粒子系の場合、n についての和は、演算子の反交換関係に由来する $\hat{c}_k^2|0\rangle_k = 0$ の関係より、実質的に $n = 0, 1$ に制限されることを改めて指摘しておく。

B.5 縮約された密度行列

(223a) 式のハミルトニアンを見ると、1 粒子演算子や 2 粒子演算子の期待値の評価に関連して、(248) 式から得られる次の「縮約された密度行列」を導入しておくと便利であることがわかる。

$$\rho^{(1)}(x_1, x_1') \equiv \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1) = \langle\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1)\rangle, \tag{254a}$$

$$\rho^{(2)}(x_1, x_2; x_1', x_2') \equiv \langle\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}^\dagger(x_2')\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)\rangle. \tag{254b}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

実際、(223a) 式のハミルトニアンの期待値 $\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle$ は、(254) 式を用いて以下のように表現できる。

$$\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle = \int \mathrm{d}x_1 \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1)\right]\rho^{(1)}(x_1, x_1')\Big|_{x_1'=x_1} + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)\rho^{(2)}(x_1, x_2; x_1, x_2). \tag{255}$$

一般に、1 粒子演算子と 2 粒子演算子の期待値は、それぞれ $\rho^{(1)}$ と $\rho^{(2)}$ を用いて計算できる。(214) 式と (248) 式を考慮し、(254) 式を通常の第一量子化の表現で書き表すと、以下のようになる。

$$\rho^{(1)}(x_1, x_1') = \sum_\nu \mathrm{e}^{\beta(F-E_\nu)} N \int \mathrm{d}y_2 \cdots \int \mathrm{d}y_N \Psi_\nu(x_1, y_2, \cdots, y_N)\Psi_\nu^*(x_1', y_2, \cdots, y_N), \tag{256a}$$

$$\rho^{(2)}(x_1, x_2; x_1', x_2') = \sum_\nu \mathrm{e}^{\beta(F-E_\nu)} N(N-1) \int \mathrm{d}y_3 \cdots \int \mathrm{d}y_N \Psi_\nu(x_1, x_2, y_3, \cdots, y_N) \times \Psi_\nu^*(x_1', x_2', y_3, \cdots, y_N). \tag{256b}$$

これらの縮約された密度行列は、Yang により、超流動と超伝導の秩序変数を定義する際に用いられた [57]。

以上の正準集団に対する考察は、大正準集団にも容易に拡張可能である。

Appendix C. Bloch-de Dominicis の定理

多粒子系における二体相関は (254b) 式の密度行列で表現できるが、そこに現れる 4 個の場の演算子の積をいかに評価すればよいのであろうか？ 相互作用がない系に対して、場の演算子の積の期待値を簡便に評価することを可能にするのが、上記の Bloch-de Dominicis の定理である。この定理は、散乱理論における S 行列の評価に関連して、最初に Wick により純粋系に対し証明が与えられた [58]。それゆえ、しばしば Wick の定理とも呼ばれる。後に Bloch と de Dominicis は、混合系が関与する量子統計力学における証明を与えた [59]。ここでの証明法は、より初等的で明快な Gaudin [60] によるものである。

以下では相互作用のない大正準集団を考える。その密度行列 $\hat{\rho}_0$ は (253) 式のように書ける。この密度行列に関連し、$p_k = \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_k-\mu)}$ として、次の恒等式が証明できる。

$$\hat{c}\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle p^n\langle n| = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\hat{c}^\dagger)^{n-1}}{(n-1)!}|0\rangle p^n\langle 0|\hat{c}^n = p\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\hat{c}^\dagger)^n}{n!}|0\rangle p^n\langle 0|\hat{c}^{n+1} = p\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle p^n\langle n|\hat{c}. \tag{257a}$$

ここで添え字 k を省略した。この式のエルミート共役をとると、

$$\hat{c}^\dagger\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle p^n\langle n| = p^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle p^n\langle n|\hat{c}^\dagger, \tag{257b}$$

となる。(253) 式と (257) 式より、$\hat{c}_k$ と $\hat{c}_k^\dagger$ および $\hat{\rho}_0$ に関し、次の恒等式が得られる。

$$\hat{c}_k\hat{\rho}_0 = p_k\hat{\rho}_0\hat{c}_k, \qquad \hat{c}_k^\dagger\hat{\rho}_0 = p_k^{-1}\hat{\rho}_0\hat{c}_k^\dagger. \tag{258}$$

以上を準備として、Bloch-de Dominicis の定理

$$\langle\hat{C}_1\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 \equiv \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}_0\hat{C}_1\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n} = \sum_{\hat{P}}{}'\sigma^P\langle\hat{C}_{p_1}\hat{C}_{p_2}\rangle_0\langle\hat{C}_{p_3}\hat{C}_{p_4}\rangle_0\cdots\langle\hat{C}_{p_{2n-1}}\hat{C}_{p_{2n}}\rangle_0, \tag{259a}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を証明しよう。ここで $\hat{C}$ は $\hat{c}$ もしくは $\hat{c}^\dagger$ を表すものとし、また、$k_i \to i$ と略記した。また、$\sum_{\hat{P}}{}'$ は、(198) 式で定義された置換のうち、以下の条件を満たすものについての和を表す。

$$p_1 < p_2,\ p_3 < p_4,\ \cdots,\ p_{2n-1} < p_{2n}, \quad p_1 < p_3 < \cdots < p_{2n-1}. \tag{259b}$$

(259a) 式の右辺の操作は「Wick 分解 (Wick decomposition)」とも呼ばれる。また、演算子対の期待値を取ることを「縮約する (contract)」という。

まず、(228) 式で与えられる $\hat{C}$ の交換関係が、一般に

$$[\hat{C}_i, \hat{C}_j]_\sigma \equiv \hat{C}_i\hat{C}_j - \sigma\hat{C}_j\hat{C}_i = (ij),$$

と表すことができることに注意する。ここに (ij) は定数である。すると、(259a) 式左辺の期待値は、上式を繰り返し用いて $\hat{C}_1$ を右へ移動することにより、以下のように変形できる。

$$\begin{aligned}\langle\hat{C}_1\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 = (12)\langle\hat{C}_3\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 + \sigma(13)\langle\hat{C}_2\hat{C}_4\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 + \cdots \\ +\sigma^{2n-2}(1,2n)\langle\hat{C}_2\hat{C}_3\cdots\hat{C}_{2n-1}\rangle_0 + \sigma^{2n-1}\langle\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n}\hat{C}_1\rangle_0.\end{aligned}$$

ここで、最後の項は、(258) 式を用いて次のように書き換えられる。

$$\langle\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n}\hat{C}_1\rangle_0 = p_1^\lambda\langle\hat{C}_1\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0, \qquad \lambda = \begin{cases} 1 & : \hat{C}_1 = \hat{c}_1 \\ -1 & : \hat{C}_1 = \hat{c}_1^\dagger \end{cases}.$$

上の 2 式より、$\langle\hat{C}_1\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0$ が、$2n-2$ 個の演算子の積の期待値を用いて次のように表せる。

$$\begin{aligned}\langle\hat{C}_1\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 = \frac{(12)}{1-\sigma p_1^\lambda}\langle\hat{C}_3\hat{C}_4\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 + \sigma\frac{(13)}{1-\sigma p_1^\lambda}\langle\hat{C}_2\hat{C}_4\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 + \cdots \\ +\sigma^{2n-2}\frac{(1,2n)}{1-\sigma p_1^\lambda}\langle\hat{C}_2\hat{C}_3\cdots\hat{C}_{2n-1}\rangle_0.\end{aligned}$$

ここで特に $n=1$ の場合を考えると、この式は

$$\langle\hat{C}_1\hat{C}_2\rangle_0 = \frac{(12)}{1-\sigma p_1^\lambda},$$

となる。従って、

$$\begin{aligned}\langle\hat{C}_1\hat{C}_2\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 = \langle\hat{C}_1\hat{C}_2\rangle_0\langle\hat{C}_3\hat{C}_4\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 + \sigma\langle\hat{C}_1\hat{C}_3\rangle_0\langle\hat{C}_2\hat{C}_4\cdots\hat{C}_{2n}\rangle_0 + \cdots \\ +\sigma^{2n-2}\langle\hat{C}_1\hat{C}_{2n}\rangle_0\langle\hat{C}_2\hat{C}_3\cdots\hat{C}_{2n-1}\rangle_0.\end{aligned}$$

この操作を繰り返すと、結局、(259) 式が得られる。

以上の証明では、$\hat{c}_k^\dagger$ と $\hat{c}_k$ は 1 粒子 Schrödinger 方程式 (225) の固有状態に対応する生成消滅演算子であると仮定した。しかし、Bloch-de Dominicis の定理は、$\hat{c}_k$ の任意の線型結合 $\hat{b}_j \equiv \sum_k U_{kj}\hat{c}_k$ についても直接成立する。すなわち、$\hat{B}_j$ を $\hat{b}_j^\dagger$ もしくは $\hat{b}_j$ として、次式が成立する。

$$\langle\hat{B}_1\hat{B}_2\cdots\hat{B}_{2n}\rangle_0 = \sum_P{}'\sigma^P\langle\hat{B}_{p_1}\hat{B}_{p_2}\rangle_0\langle\hat{B}_{p_3}\hat{B}_{p_4}\rangle_0\cdots\langle\hat{B}_{p_{2n-1}}\hat{B}_{p_{2n}}\rangle_0. \tag{260}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

このことは、(260) 式の左辺を $\hat{C}_k$ で表しておいて (259) 式を用い、最後に U_{kj} を平均値の中に挿入することにより容易に証明できる。例として、(254b) 式の縮約された密度行列は、相互作用のない場合、以下のように書き換えられる。

$$\langle\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}^\dagger(x_2')\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1)\rangle_0 = \langle\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1)\rangle_0\langle\hat{\psi}^\dagger(x_2')\hat{\psi}(x_2)\rangle_0 + \sigma\langle\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_2)\rangle_0\langle\hat{\psi}^\dagger(x_2')\hat{\psi}(x_1)\rangle_0.$$

最後に次のことを指摘しておく。すなわち、上記の証明には、大正準集団の確率 $p_k = \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_k-\mu)}$ の特徴はどこにも用いられていない。従って、(259) 式あるいは (260) 式は、(253) 式の $\mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_k-\mu)}$ を任意の正の値 p_k で置き換えても成立する。

Appendix D. 熱力学関数の摂動展開

ここでは、(251) 式に現れる熱力学関数 Ω を、相互作用に関して摂動展開し評価する方法について解説する。

D.1　ハミルトニアン

以下、次のハミルトニアンで記述される相互作用のある系を考える。

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}. \tag{261}$$

ここで、$\hat{\mathcal{H}}_0$ と $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$ は次式で定義されている。

$$\hat{\mathcal{H}}_0 \equiv \int \hat{\psi}^\dagger(x)\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \mu\right]\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x = \sum_k(\epsilon_k-\mu)\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k, \tag{262a}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}} \equiv \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1\int \mathrm{d}x_2\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_2)V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\hat{\psi}(x_2)\hat{\psi}(x_1) = \frac{1}{2}\sum_{klk'l'}V_{k'l',kl}\hat{c}_{k'}^\dagger\hat{c}_{l'}^\dagger\hat{c}_l\hat{c}_k. \tag{262b}$$

ただし、ϵ_k は (225) 式で決まる固有値、μ は化学ポテンシャル、U は外場、V は相互作用ポテンシャルであり、また、$V_{k'l',kl}$ は ϵ_k に対する固有関数 $\varphi_k(x)$ を用いて

$$V_{k'l',kl} \equiv \int \mathrm{d}x_1\int \mathrm{d}x_2 V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\varphi_{k'}^*(x_1)\varphi_{l'}^*(x_2)\varphi_l(x_2)\varphi_k(x_1) = V_{kl,k'l'}^* \tag{263}$$

で定義されている。演算子 $\hat{c}_k$ を用いた表式は、(227) 式を代入し、規格直交性 (226a) を用いて得られた。

D.2　熱力学関数 Ω

この系の熱力学ポテンシャル $\Omega = \Omega(T,V,\mu)$ は次のように表せる。

$$\Omega = -\frac{1}{\beta}\ln Z_G, \qquad Z_G \equiv \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}. \tag{264}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ここに現れる Z_G を、相互作用 $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ についての摂動展開で評価する方法を確立する。この目的のために、$\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}$ を次のように書きかえる。

$$\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} = \mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{S}}(\beta) \quad \longleftrightarrow \quad \hat{\mathcal{S}}(\beta) = \mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}. \tag{265}$$

すると、Z_G は次のように変形できる。

$$Z_G = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{S}}(\beta) = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\frac{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{S}}(\beta)}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}} = Z_{G0}\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0. \tag{266}$$

ここで $\langle\cdots\rangle_0 = \mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\cdots)/\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}$ は相互作用のない大正準集団での期待値を表し、$Z_{G0} = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}$ はその大分配関数である。従って、(264) 式は、相互作用のない系の熱力学ポテンシャル $\Omega_0 \equiv -\beta^{-1}\ln\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}$ を用いて、次のように表せる。

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta}\ln\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0. \tag{267}$$

D.3 $\hat{\mathcal{S}}(\beta)$ に対する微分方程式

$\hat{\mathcal{S}}(\beta)$ の具体的表式を求めるために、(265) 式の $\hat{\mathcal{S}}(\beta)$ を β で微分し、以下のように変形する。

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathcal{S}}(\beta)}{\mathrm{d}\beta} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} = \mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}(\hat{\mathcal{H}}_0 - \hat{\mathcal{H}})\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} = -\mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}.$$

つまり、$\hat{\mathcal{S}}(\beta)$ に関する次の一階微分方程式が得られた。

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathcal{S}}(\beta)}{\mathrm{d}\beta} = -\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\beta)\hat{\mathcal{S}}(\beta), \qquad \hat{\mathcal{S}}(\beta=0) = 1. \tag{268}$$

ただし $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\beta)$ は次式で定義されている。

$$\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\beta) \equiv \mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}. \tag{269}$$

D.4 $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\beta)$ の具体形

(262b) 式より、(269) 式の $\mathcal{H}_{\rm int}(\beta)$ は次のように表せる。

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\beta) &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_1'\, V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')\mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1')\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \\ &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_1'\, V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1')\hat{\psi}^\dagger(x_1\beta)\hat{\psi}^\dagger(x_1'\beta)\hat{\psi}(x_1'\beta)\hat{\psi}(x_1\beta) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{klk'l'} V_{k'l',kl}\hat{c}_{k'}^\dagger(\beta)\hat{c}_{l'}^\dagger(\beta)\hat{c}_l(\beta)\hat{c}_k(\beta).\end{aligned} \tag{270}$$

第二の等式は、各演算子の間に $1 = \mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}$ を挿入することにより得られる。そこに現れる演算子 $\hat{\psi}(x_1\beta) \equiv \mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}$ は $\hat{\psi}(x_1)$ の相互作用表示であり、他の演算子も同様に定義されている。この相互作用表示では、$\hat{\psi}^\dagger(x_1\beta)$ が $\hat{\psi}(x_1\beta)$ のエルミート共役ではないことに注意する必要

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

がある。演算子 $\hat{c}_k(\beta) = \mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{c}_k\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}$ の具体形を求めるために、両辺を β で微分し、(262a) 式を代入して以下のように変形する。

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{c}_k(\beta)}{\mathrm{d}\beta} &= \mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}(\hat{\mathcal{H}}_0\hat{c}_k - \hat{c}_k\hat{\mathcal{H}}_0)\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} = \mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\sum_{k'}(\epsilon_{k'}-\mu)(\hat{c}^\dagger_{k'}\hat{c}_{k'}\hat{c}_k - \hat{c}_k\hat{c}^\dagger_{k'}\hat{c}_{k'})\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \\ &= \mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}\sum_{k'}(\epsilon_{k'}-\mu)[\hat{c}^\dagger_{k'}\sigma\hat{c}_k\hat{c}_{k'} - (\delta_{kk'}+\sigma\hat{c}^\dagger_{k'}\hat{c}_k)\hat{c}_{k'}]\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} = -\mathrm{e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}(\epsilon_k-\mu)\hat{c}_k\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \\ &= -(\epsilon_k-\mu)\hat{c}_k(\beta). \end{aligned} \tag{271}$$

この一階常微分方程式を、初期条件 $\hat{c}_k(\beta=0) = \hat{c}_k$ のもとに解くと、$\hat{c}_k(\beta)$ のあらわな表式が次のように得られる。

$$\hat{c}_k(\beta) = \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_k-\mu)}\hat{c}_k. \tag{272a}$$

$\hat{c}^\dagger_k(\beta)$ も同様に計算できる。$\hat{c}_k(\beta)$ の場合との違いは、β 微分の際に現れる演算子の交換関係が

$$\hat{c}^\dagger_{k'}\hat{c}_{k'}\hat{c}^\dagger_k - \hat{c}^\dagger_k\hat{c}^\dagger_{k'}\hat{c}_{k'} = \hat{c}^\dagger_{k'}(\delta_{kk'}+\sigma\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k'}) - \sigma\hat{c}^\dagger_{k'}\hat{c}^\dagger_k\hat{c}_{k'} = \delta_{kk'}\hat{c}_k,$$

となる点だけである。従って、$\hat{c}^\dagger_k(\beta)$ が下記のように得られる。

$$\hat{c}^\dagger_k(\beta) = \mathrm{e}^{\beta(\epsilon_k-\mu)}\hat{c}^\dagger_k. \tag{272b}$$

D.5　$\hat{\mathcal{S}}(\beta)$ の積分表示

以上の準備の下に (268) 式を解いて、$\hat{\mathcal{S}}(\beta)$ の具体形を求めよう。まず、微分方程式 (268) で $\beta \to \tau_1$ の置き換えをし、$\hat{\mathcal{S}}(0) = 1$ に注意して $0 \le \tau_1 \le \beta$ について積分すると、次式が得られる。

$$\hat{\mathcal{S}}(\beta) = 1 - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_1)\hat{\mathcal{S}}(\tau_1). \tag{273}$$

さらに、(273) 式の右辺の $\hat{\mathcal{S}}(\tau_1)$ に左辺の表式を代入する。この操作を繰り返すと、$\hat{\mathcal{S}}(\beta)$ のあらわな表式が以下のように得られる。

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{S}}(\beta) &= 1 - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_1)\left[1 - \int_0^{\tau_1}\mathrm{d}\tau_2\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_2)\hat{\mathcal{S}}(\tau_2)\right] \\ &= 1 - \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_1) + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1}\mathrm{d}\tau_2\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_1)\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_2)\left[1 - \int_0^{\tau_2}\mathrm{d}\tau_3\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_3)\hat{\mathcal{S}}(\tau_3)\right] \\ &= 1 + \sum_{n=1}^\infty(-1)^n\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1}\mathrm{d}\tau_2\cdots\int_0^{\tau_{n-1}}\mathrm{d}\tau_n\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_1)\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_2)\cdots\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_n). \end{aligned} \tag{274}$$

ここで T_τ 演算子を導入すると便利である。この演算子 T_τ は、「相互作用表示の場の演算子 $\hat{c}_k(\tau)$ または $\hat{c}^\dagger_k(\tau)$ を、"時間" τ の大きい順に左から並べ替え、その際の置換の偶奇に応じて σ^P $(\sigma = \pm 1)$ を乗じる」という操作を行うものとして定義されている。$\hat{C}_k(\tau)$ を $\hat{c}_k(\tau)$ もしくは $\hat{c}^\dagger_k(\tau)$ として、二つの場の演算子 $\hat{C}_k(\tau_1)$ と $\hat{C}_l(\tau_2)$ の積については、T_τ は具体的に以下の操作を行う。

$$\begin{aligned}T_\tau\hat{C}_k(\tau_1)\hat{C}_l(\tau_2) &\equiv \begin{cases}\hat{C}_k(\tau_1)\hat{C}_l(\tau_2) & :\tau_1 \ge \tau_2 \\ \sigma\hat{C}_l(\tau_2)\hat{C}_k(\tau_1) & :\tau_2 > \tau_1\end{cases} \\ &= \sigma T_\tau\hat{C}_l(\tau_2)\hat{C}_k(\tau_1). \end{aligned} \tag{275}$$

NII-Electronic Library Service

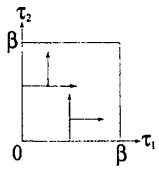
Bussei Kenkyu

この T_τ 演算子を用い、$\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ が四つの場の演算子の積であることを考慮すると、(274) 式が次のようにも書けることがわかる。

$$\begin{aligned}\hat{S}(\beta) &= 1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_2\cdots\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_n T_\tau \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_1)\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_2)\cdots\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_n)\\ &= T_\tau \exp\left[-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau\,\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau)\right].\end{aligned} \tag{276}$$

(274) 式と (276) 式の同等性は、例えば $n=2$ の場合について、以下のように示すことができる。

$$\begin{aligned}&\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_2\, T_\tau \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_1)\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_2)\\ &= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_2 \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_1)\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_2) + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_{\tau_1}^\beta \mathrm{d}\tau_2 \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_2)\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_1)\\ &= \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_2 \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_1)\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_2) + \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_2\int_0^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_1 \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_2)\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_1)\\ &= 2\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_2 \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_1)\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_2).\end{aligned}$$



D.6 $\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0$ の表式

(267) 式に現れる $\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0$ の表式を、(276) 式を用いて摂動展開に便利な形に書き換えよう。まず、T_τ 演算子の下では 4 つの演算子の積からなる $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau)$ 演算子が互いに可換であることを考慮すると、$\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0$ が次のように書ける。

$$\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0 = 1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_2\cdots\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_n\left\langle T_\tau\prod_{i=1}^{n}\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_i)\right\rangle_0. \tag{277}$$

次に、(i) 生成演算子を消滅演算子の左側に移動し、(ii) その際に必要な置換 $\hat{P}$ の偶奇に従って σ^P を乗じる、という新たな演算子 $\mathcal{N}$(いわゆる normal-ordering operator) を導入する。例えば二つの演算子の積 $\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_1')$ に $\mathcal{N}$ を作用すると下記のようになる。

$$\mathcal{N}\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_1') = \sigma\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1).$$

この $\mathcal{N}$ を用いると、$\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ に現れる 4 つの演算子の積が、以下のように書き換えられる。

$$\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1')\hat{\psi}(x_1) = \mathcal{N}[\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1')]. \tag{278}$$

(277) 式に (270) 式を代入し、(278) 式を用いると、$\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0$ が下記のように表せる。

$$\begin{aligned}\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0 = 1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{2^n n!}&\left(\prod_{i=1}^{n}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_i\int \mathrm{d}x_i\int \mathrm{d}x_i'\right)\\ &\times\langle T_\tau\prod_{i=1}^{n}V(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_i')\mathcal{N}[\hat{\psi}^\dagger(x_i\tau_i)\hat{\psi}(x_i\tau_i)\hat{\psi}^\dagger(x_i'\tau_i)\hat{\psi}(x_i'\tau_i)]\rangle_0.\end{aligned}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

さらに、

$$1 \equiv x_1\tau_1, \qquad \bar{V}(1-1') \equiv \delta(\tau_1-\tau_1')V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1'), \tag{279}$$

を導入すると、$\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0$ は次のように略記できる。

$$\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0 = 1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{2^n n!}\left(\prod_{i=1}^{n}\int \mathrm{d}i\int \mathrm{d}i'\right)\langle T_\tau\prod_{i=1}^{n}\bar{V}(i-i')\mathcal{N}[\hat{\psi}^\dagger(i)\hat{\psi}(i)\hat{\psi}^\dagger(i')\hat{\psi}(i')]\rangle_0. \tag{280}$$

(280) 式では $\hat{\psi}^\dagger(i)\hat{\psi}(i)$ を 1 単位として相互作用を表現しており、摂動展開において便利である。$\mathcal{N}$ 演算子は同時刻の 4 つの生成消滅演算子のみに対して有効であることを念頭において、以下、$\mathcal{N}$ を省略する。(280) 式の各相互作用は、図 10 の図形に対応させることができる。ここで、波線は相互作用 $\bar{V}$ を、また、出てゆく (入ってくる) 直線は生成（消滅）演算子を表す。

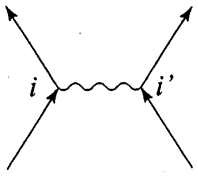


図 10: 相互作用の Feynman 図形

D.7　Bloch-de Dominicis の定理

(280) 式の n 次摂動項に現れるのは生成消滅演算子の $4n$ 個の積であり、その期待値は、Bloch-de Dominicis の定理を用いて評価できる。より具体的には、$\hat{\Psi}_i$ を $\hat{\psi}(i)$ もしくは $\hat{\psi}^\dagger(i)$ として、以下の書き換え (Wick 分解) が可能である。

$$\langle T_\tau\hat{\Psi}_1\hat{\Psi}_2\cdots\hat{\Psi}_{4n}\rangle_0 = \sum_{\hat{P}}{}'\sigma^P\langle T_\tau\hat{\Psi}_{p_1}\hat{\Psi}_{p_2}\rangle_0\cdots\langle T_\tau\hat{\Psi}_{p_{4n-1}}\hat{\Psi}_{p_{4n}}\rangle_0, \tag{281a}$$

$$p_1<p_2,\ p_3<p_4,\ \cdots,\ p_{4n-1}<p_{4n}, \quad p_1<p_3<\cdots<p_{4n-1}. \tag{281b}$$

この式が以前の Bloch-de Dominicis の定理 (260) と異なる点は、T_τ 演算子があることと演算子 $\hat{\Psi}_i$ に τ 依存性があることである。しかし、後者の τ 依存性は、(227) 式と (272) 式より、

$$\hat{\psi}(1) = \sum_k \hat{c}_k(\tau_1)\varphi_k(x_1) = \sum_k \hat{c}_k\varphi_k(x_1)\mathrm{e}^{-(\epsilon_k-\mu)\tau_1}, \tag{282a}$$

$$\hat{\psi}^\dagger(1) = \sum_k \hat{c}_k^\dagger(\tau_1)\varphi_k^*(x_1) = \sum_k \hat{c}_k^\dagger\varphi_k^*(x_1)\mathrm{e}^{(\epsilon_k-\mu)\tau_1}, \tag{282b}$$

のように、一粒子固有関数 $\varphi_k(x_1)$ と $\varphi_k^*(x_1)$ にそれぞれ指数因子 $\mathrm{e}^{-\tau_1(\epsilon_k-\mu)}$ および $\mathrm{e}^{\tau_1(\epsilon_k-\mu)}$ を乗じるだけであり、演算子の積の分解には関係しない。また、(281a) 式左辺の T_τ 演算子は、場の演算子を時間の大きい順に並べ替えることで取り除くことができる。その際の置換 $\hat{P}$ により因子 σ^P が現れる。その後 Wick 分解を実行すると、個々の縮約における二つの演算子の積は、条件 (259b)

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

より自動的に時間の大きい順に並んでおり、因子 σ^P をもつその表式は (281a) 式の右辺に他ならない。このようにして (281a) 式が成り立つことを確認できた。

最後に、同時刻の演算子の縮約に関しては、(280) 式の $\mathcal{N}$ 演算子を考慮して、生成演算子を消滅演算子の左側におく必要があることを指摘しておく。

D.8 グリーン関数

(281) 式の右辺は、$\langle T_\tau \hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2 \rangle_0$ なる期待値の積として表されている。この非摂動状態の期待値が有限の値を持つのは、$\hat{\Psi}_1$ と $\hat{\Psi}_2$ が生成演算子と消滅演算子の組である場合のみである。そこで、非摂動グリーン関数もしくは propagator と呼ばれる次の物理量を導入する。

$$G^{(0)}(1,2) \equiv -\langle T_\tau \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(2) \rangle_0. \tag{283a}$$

階段関数

$$\theta(\tau) \equiv \begin{cases} 1 & : \tau > 0 \\ 0 & : \tau < 0 \end{cases},$$

を導入し、(282b) 式に注意すると、上記のグリーン関数が次のようにも書けることがわかる。

$$\begin{aligned} & G^{(0)}(1,2) \\ &= \sum_{kk'} \left[-\theta(\tau_1 - \tau_2) \langle \hat{c}_k \hat{c}^\dagger_{k'} \rangle_0 - \theta(\tau_2 - \tau_1) \sigma \langle \hat{c}^\dagger_{k'} \hat{c}_k \rangle_0 \right] \varphi_k(x_1) \varphi^*_{k'}(x_2) \mathrm{e}^{-\tau_1(\epsilon_k - \mu) - \tau_2(\epsilon_{k'} - \mu)} \\ &= \sum_k \left[-\theta(\tau_1 - \tau_2) \frac{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_k - \mu)}}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - \sigma} - \theta(\tau_2 - \tau_1) \frac{\sigma}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - \sigma} \right] \varphi_k(x_1) \varphi^*_k(x_2) \mathrm{e}^{-(\epsilon_k - \mu)(\tau_1 - \tau_2)}. \end{aligned} \tag{283b}$$

ここで、$\langle \hat{c}_k \hat{c}^\dagger_{k'} \rangle_0 \propto \delta_{kk'}$ および $\langle \hat{c}^\dagger_{k'} \hat{c}_k \rangle_0 \propto \delta_{kk'}$ を使った。このように、グリーン関数 $G^{(0)}(1,2)$ は $\tau_1 - \tau_2$ のみの関数である。

グリーン関数 $G^{(0)}(1,2)$ がなぜグリーン関数と呼ばれるかをみるために、(283b) 式を τ_1 について微分する。右辺の τ_1 依存性は $\mathrm{e}^{-(\epsilon_k - \mu)(\tau_1 - \tau_2)}$ および $\theta(\pm(\tau_1 - \tau_2))$ にあり、τ_1 微分によりそれぞれ $-(\epsilon_k - \mu)\mathrm{e}^{-(\epsilon_k - \mu)(\tau_1 - \tau_2)}$ および $\pm\delta(\tau_1 - \tau_2)$ が出てくる。さらに (225) 式を用いると、この τ_1 微分は次のように書き換えられる。

$$\frac{\partial G^{(0)}(1,2)}{\partial \tau_1} = -\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) - \mu \right] G^{(0)}(1,2) - \delta(\tau_1 - \tau_2) \sum_k \varphi_k(x_1) \varphi^*_k(x_2).$$

ここで固有関数 φ_k の完全性 (226b) を用いると、最終的に次式が得られる。

$$\left[-\frac{\partial}{\partial \tau_1} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} - U(\mathbf{r}_1) + \mu \right] G^{(0)}(1,2) = \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta(x_1, x_2). \tag{284}$$

この式から、$G^{(0)}(1,2)$ が、偏微分方程式論における虚時間 Schrödinger 方程式 ($t_1 = -i\tau_1\hbar$)

$$-\frac{\partial}{\partial \tau_1} \varphi(x_1 \tau_1) = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1) - \mu \right] \varphi(x_1 \tau_1)$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

のグリーン関数であることがわかる。

グリーン関数 (283) を以下のように表しておくと便利である。

$$G^{(0)}(1,1') = \theta(\tau_1 - \tau_1')G^{>(0)}(1,1') + \theta(\tau_1' - \tau_1)G^{<(0)}(1,1'). \tag{285}$$

ここで $G^{>(0)}(1,1')$ および $G^{<(0)}(1,1')$ は Kadanoff-Baym の相関関数で [6]、以下のように定義されている。

$$G^{>(0)}(1,1') \equiv -\langle\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\rangle_0 = \sum_k \varphi_k(x_1)G_k^{>(0)}(\tau_1 - \tau_1')\varphi_k^*(x_1'), \tag{286a}$$

$$G^{<(0)}(1,1') \equiv -\sigma\langle\hat{\psi}^\dagger(1')\hat{\psi}(1)\rangle_0 = \sum_k \varphi_k(x_1)G_k^{<(0)}(\tau_1 - \tau_1')\varphi_k^*(x_1'). \tag{286b}$$

また、$G_k^{>(0)}(\tau_1 - \tau_1')$ と $G_k^{<(0)}(\tau_1 - \tau_1')$ はその対角表示で、(283b) 式より以下のように表せる。

$$G_k^{>(0)}(\tau) = -\frac{\mathrm{e}^{(\beta-\tau)(\epsilon_k-\mu)}}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_k-\mu)} - \sigma} = -[1 + \sigma f(\epsilon_k - \mu)]\mathrm{e}^{-\tau(\epsilon_k-\mu)}, \tag{287a}$$

$$G_k^{<(0)}(\tau) = -\sigma\frac{\mathrm{e}^{-\tau(\epsilon_k-\mu)}}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_k-\mu)} - \sigma} = -\sigma f(\epsilon_k - \mu)\mathrm{e}^{-\tau(\epsilon_k-\mu)}. \tag{287b}$$

ただし $f(\varepsilon) \equiv (\mathrm{e}^{\beta\varepsilon} - \sigma)^{-1}$ は Bose/Fermi 分布関数である。

D.9　Wick 分解と Feynman 図形

グリーン関数を用いると、(281) 式の各々の Wick 分解に Feynman 図形と呼ばれる図形を対応させて因子 σ^P を簡単に求め、摂動展開を系統的に実行することができる。このことを理解するために、2 次摂動に現れる次の Wick 分解を取り上げる。

$$\begin{aligned}&\langle T_\tau\hat{\psi}^\dagger(1)^b\hat{\psi}(1)^a\hat{\psi}^\dagger(1')^d\hat{\psi}(1')^c\hat{\psi}^\dagger(2)^a\hat{\psi}(2)^b\hat{\psi}^\dagger(2')^c\hat{\psi}(2')^d\rangle_0 \\ &= \langle T_\tau\hat{\psi}^\dagger(1)^b\hat{\psi}(1)^a\hat{\psi}^\dagger(2)^a\hat{\psi}(2)^b\rangle_0\langle T_\tau\hat{\psi}^\dagger(1')^d\hat{\psi}(1')^c\hat{\psi}^\dagger(2')^c\hat{\psi}(2')^d\rangle_0.\end{aligned} \tag{288}$$

ここで、縮約をとる演算子のペアを同じ上付きの記号 a, b, c, d で表した。この Wick 分解には図 11 の図形 (Feynman 図形) を対応させることができる。一般に、各々の Wick 分解に対し一つの Feynman 図形が対応する。以下、Feynman 図形を用いた摂動展開のポイントを列挙する。

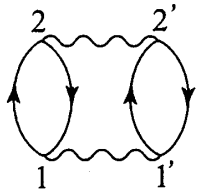


図 11: 2 次摂動の Feynman 図形の一つ

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

(a) 閉じた粒子線と符号 σ^P の関係

(288) 式の Wick 分解は二つの独立な部分からなり、それぞれが、Feynman 図形における粒子線の閉じたループで表されている。この Wick 分解をグリーン関数 (283) で表した場合に現れる因子 σ^P を求めよう。この目的のために、図 11 の左側のループに対応する (288) 式の独立成分を次のように変形する。

$$\begin{aligned}\langle T_\tau \hat{\psi}^\dagger(1)^b \hat{\psi}(1)^a \hat{\psi}^\dagger(2)^a \hat{\psi}(2)^b \rangle_0 &= \sigma^3 \langle T_\tau \hat{\psi}(1)^a \hat{\psi}^\dagger(2)^a \hat{\psi}(2)^b \hat{\psi}^\dagger(1)^b \rangle_0 \\ &= \sigma \langle T_\tau \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(2) \rangle_0 \langle T_\tau \hat{\psi}(2) \hat{\psi}^\dagger(1) \rangle_0 \\ &= \sigma (-1)^2 G^{(0)}(1,2) G^{(0)}(2,1). \end{aligned} \tag{289}$$

このように、**(i) Feynman 図形における各々の粒子線に $G^{(0)}$ が対応し、また、(ii) 各々の閉じたループからひとつの因子 σ が出てくる。**これは一般的規則である。このことを確かめるため、図 12 の Feynman 図形を取り上げる。そして、演算子対 $\hat{\psi}^\dagger(j)\hat{\psi}(j)$ を $\hat{\psi}^\dagger(j)$ と縮約をとる $\hat{\psi}(i)$ のすぐ右に移動させる操作を繰り返し、最後に $\hat{\psi}^\dagger(1)$ を最後尾に移すことにより、次のように変形する。

$$\begin{aligned}&\langle T_\tau \hat{\psi}^\dagger(1)^d \hat{\psi}(1)^a \hat{\psi}^\dagger(1')^b \hat{\psi}(1')^c \hat{\psi}^\dagger(2)^c \hat{\psi}(2)^d \hat{\psi}^\dagger(2')^a \hat{\psi}(2')^b \rangle_0 \\ &= \langle T_\tau \hat{\psi}^\dagger(1)^d \hat{\psi}(1)^a \hat{\psi}^\dagger(2')^a \hat{\psi}(2')^b \hat{\psi}^\dagger(1')^b \hat{\psi}(1')^c \hat{\psi}^\dagger(2)^c \hat{\psi}(2)^d \rangle_0 \\ &= \sigma^7 \langle T_\tau \hat{\psi}(1)^a \hat{\psi}^\dagger(2')^a \hat{\psi}(2')^b \hat{\psi}^\dagger(1')^b \hat{\psi}(1')^c \hat{\psi}^\dagger(2)^c \hat{\psi}(2)^d \hat{\psi}^\dagger(1)^d \rangle_0 \qquad (\sigma^7 = \sigma) \\ &= \sigma \langle T_\tau \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(2') \rangle_0 \langle T_\tau \hat{\psi}(2') \hat{\psi}^\dagger(1') \rangle_0 \langle T_\tau \hat{\psi}(1') \hat{\psi}^\dagger(2) \rangle_0 \langle T_\tau \hat{\psi}(2) \hat{\psi}^\dagger(1) \rangle_0 \\ &= \sigma (-1)^4 G^{(0)}(1,2') G^{(0)}(2',1') G^{(0)}(1',2) G^{(0)}(2,1'). \end{aligned} \tag{290}$$

この例では閉じたループは一つであり、やはり因子 σ がひとつ出てくる。一般に、ℓ 個の粒子線からなる閉じたループに対応する Wick 分解を実行するには、以下のようにすれば良い。(i) 演算子対 $\hat{\psi}^\dagger(j)\hat{\psi}(j)$ $(j = 2, 3, \cdots, \ell)$ を T_τ 演算子内で移動させ、$\hat{\psi}^\dagger(j)$ と縮約をとる $\hat{\psi}(i)$ のすぐ右に置く操作を繰り返す；(ii) 残された $\hat{\psi}^\dagger(1)$ を縮約をとる相手の右、すなわち最後尾に持ってゆく; (iii) 得られた演算子の順序で縮約をとる。(i) の操作は 2 個の演算子の同時移動を伴うため符号変化には寄与せず、結局、(ii) の操作による因子 $\sigma^{2\ell-1} = \sigma$ のみが残ることになる。また、(iii) の縮約は $-G^{(0)}$ を与えるが、一般に n 次摂動では $2n$ 個の縮約が現れるため、$-G^{(0)}$ の因子 -1 は考慮しなくてよい。

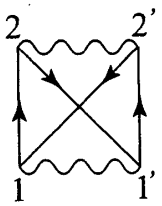


図 12: 2 次摂動における別の Feynman 図形

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

図 13: 1 次摂動の Feynman 図形

(b) 同時刻のグリーン関数

1 次摂動の Feynman 図形は図 13 の二種類あり、いずれも同時刻のグリーン関数 $G^{(0)}(1,1')$ $(\tau_1 = \tau_1')$ が関与する。この同時刻の縮約では、(280) 式の $\mathcal{N}$ 演算子が有効となり、(286b) 式の $G^{<(0)}(1,1')$ を用いる必要がある。また、$G^{<(0)}(1,1')$ は $\tau_1 - \tau_1'$ のみの関数であり、同時刻の場合には τ_1 に依らない。従って、つぎの規則を得る。**同時刻 $1 \leftarrow 1'$ の粒子線に対しては、$G^{<(0)}(x_1, x_1')$ を対応させる。ここで、$G^{<(0)}(x_1, x_1')$ は次式で定義されている。**

$$G^{<(0)}(x_1, x_1') = -\sigma\langle\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1)\rangle_0 = -\sigma\sum_k \frac{\varphi_k(x_1)\varphi_k^*(x_1')}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_k-\mu)} - \sigma}. \tag{291}$$

(c) つながった図形とつながらない図形

$\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0$ の 2 次摂動では、上記 (a) で示した 2 例のほかに、図 14 のようなつながらない図形も現れる。しかし、(267) 式で必要なのは $\ln\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0$ であり、それは、つながった図形 (connected diagrams) のみからの寄与を $\langle\hat{S}(\beta)\rangle_{0c}$ として、以下のように表せる。

$$\ln\langle\hat{S}(\beta)\rangle_0 = \langle\hat{S}(\beta)\rangle_{0c} - 1. \tag{292}$$

従って次の規則を得る。**(267) 式の熱力学関数 Ω に寄与するのは、**

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{\langle\hat{S}(\beta)\rangle_{0c} - 1}{\beta} \tag{293}$$

のように、つながった図形のみである。このことは下記のように証明できる。k 個の $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$ からなるつながった Feynman 図形の総和は、

$$\Xi_k \equiv \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1 \cdots \int_0^\beta \mathrm{d}\tau_k \langle T_\tau \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_1)\cdots\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_k)\rangle_{0c} \tag{294}$$

で表すことができる。そして、n 次摂動における一般項は、Ξ_k の個数を n_k 個として、

$$\sum_{k=1}^{\infty} k n_k = n$$

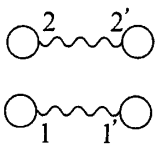


図 14: 2 次摂動におけるつながらない Feynman 図形

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

の条件を満たす $\{n_1, n_2, n_3, \cdots\}$ の組を指定することにより、一意的に決まる。そこで、n 個の $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ はすべて同等であることに注目し、同じ $\{n_1, n_2, n_3, \cdots\}$ を与える $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ の組み合わせの数 $F^{(n)}(n_1, n_2, \cdots)$ を求めよう。この数は、n 人の人を、それぞれ 1 個、2 個、$\cdots$ のベッドを持った n_1 個、n_2 個、$\cdots$ の部屋に同じ種類の部屋とベッドを区別せずに振り分ける場合の数に等しく、

$$F^{(n)}(n_1, n_2, \cdots) = \frac{n!}{n_1!\,(1!)^{n_1}\,n_2!\,(2!)^{n_2}\,\cdots} \tag{295}$$

と計算できる。従って、$\langle \mathcal{S}(\beta)\rangle_0$ が下記のように変形できる。

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} {\sum_{\{n_1,n_2,\cdots\}}}' F^{(n)}(n_1, n_2, \cdots) \Xi_1^{n_1} \Xi_2^{n_2} \cdots \qquad \left(\sum_{k=1}^{\infty} k n_k = n\right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} {\sum_{\{n_1,n_2,\cdots\}}}' \frac{(-1)^{n_1+2n_2+\cdots}}{n_1!\,(1!)^{n_1}\,n_2!\,(2!)^{n_2}\,\cdots} \Xi_1^{n_1} \Xi_2^{n_2} \cdots \qquad \left(\sum_{k=1}^{\infty} k n_k = n\right) \\
&= \sum_{n_1=0}^{\infty} \frac{1}{n_1!} \left[\frac{-1}{1!}\Xi_1\right]^{n_1} \sum_{n_2=0}^{\infty} \frac{1}{n_2!} \left[\frac{(-1)^2}{2!}\Xi_2\right]^{n_2} \cdots \\
&= \exp\left[\frac{-1}{1!}\Xi_1 + \frac{(-1)^2}{2!}\Xi_2 + \cdots\right] \\
&= \exp\left[\langle \hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_{0{\rm c}} - 1\right].
\end{aligned} \tag{296}$$

すなわち、(292) 式が成立する。

D.10 Ω の摂動計算における Feynman 則

以上の考察より、(267) 式と (280) 式を用いた Ω の摂動計算における Feynman 則が、以下のようにまとめられる。

(a) n 次のつながった Feynman 図形をすべて描く。

(b) 各々の Feynman 図形に次の因子を対応させる。

$$-\frac{1}{\beta}\frac{(-1)^n}{2^n n!}\sigma^{n_\ell} \prod_{i=1}^{n} \bar{V}(i - i'). \tag{297}$$

ここで n_ℓ は閉じた粒子線の数である。

(c) j を出発して i に到着する粒子線に $G^{(0)}(i, j)$ を対応させる。また、同時刻 $(\tau_i = \tau_j)$ の粒子線には $G^{<(0)}(x_i, x_j)$ を用いる。

(d) すべての内部変数について積分を行う。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

D.11　Ωの摂動計算 (1次)

Ωに対する1次摂動のFeynman図形は以前に現れた図13の二つである。これらの寄与を、上記のFeynman則を用いて評価すると、下記のようになる。

$$\begin{aligned}\Omega^{(1)} &= \frac{(-1)^2}{2\beta}\int \mathrm{d}1 \int \mathrm{d}1'\, \bar{V}(1-1')[G^{<(0)}(x_1,x_1)G^{<(0)}(x_1',x_1') + \sigma G^{<(0)}(x_1,x_1')G^{<(0)}(x_1',x_1)] \\ &= \frac{1}{2\beta}\int_0^\beta \mathrm{d}\tau_1 \int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_1'\, V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1') \\ &\qquad \times[G^{<(0)}(x_1,x_1)G^{<(0)}(x_1';x_1') + \sigma G^{<(0)}(x_1,x_1')G^{<(0)}(x_1',x_1)] \\ &= \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_1'\, V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1') \\ &\qquad \times[\langle\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}(x_1)\rangle_0\langle\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1')\rangle_0 + \sigma\langle\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1)\rangle_0\langle\hat{\psi}^\dagger(x_1)\hat{\psi}(x_1')\rangle_0]. \quad (298)\end{aligned}$$

最後の表式は、当然のことながら、(262b)式の$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$に直接Wick分解を行った結果と一致する。

D.12　Ωの摂動計算 (2次)

次にΩへの2次摂動の寄与を考察する。図15にそのFeynman図形の一部を示した。最初の二つのFeynman図形はring図形と呼ばれる。これらは、積分変数の入れ換え$2 \leftrightarrow 2'$で互いに移り変わるので、全く同じ寄与を与える。次の二つはexhange図形と呼ばれ、量子力学に特徴的な図形である。これらもやはり、積分変数の入れ換え$2 \leftrightarrow 2'$で互いに移り変り、全く同じ寄与を与える。最後の二つはanomalous図形と呼ばれる図形の一部で、同時刻を結ぶ粒子線があることにより特徴づけられる。anomalousの名前はKohnとLuttingerによる[61]。しかし、Appendix Fで詳述する「繰り込まれた摂動展開」においては、これらのanomalousな寄与は考えなくて良い。従って、2次摂動で本質的な図形はring図形とexchange図形である。

ここでは例としてring図形を取り上げる。これらring図形の寄与は、上述のFeynman則により、次のように得られる。

$$\begin{aligned}\Omega^{(2\mathrm{r})} = 2\times\frac{-1}{\beta}\frac{(-1)^2}{2^2 2!}\sigma^2 \int \mathrm{d}1 \int \mathrm{d}1' \int \mathrm{d}2 \int \mathrm{d}2'\bar{V}(1-1')\bar{V}(2-2')G^{(0)}(1,2)G^{(0)}(2,1) \\ \times G^{(0)}(1',2')G^{(0)}(2',1').\end{aligned}$$

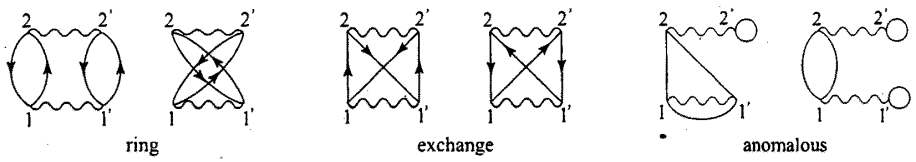


図 15: 2次摂動のFeynman図形

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

Appendix E. 松原グリーン関数

Appendix D における熱力学関数の摂動展開において、相互作用のない系でのグリーン関数を (283) 式で導入した。それを一般化して、相互作用のある系のグリーン関数を次式で定義する。

$$G(1,1') = -\langle T_\tau \hat{\psi}_{\rm H}(1)\hat{\psi}^\dagger_{\rm H}(1')\rangle. \tag{299}$$

ここで $\hat{\psi}_{\rm H}(1) \equiv {\rm e}^{\tau_1\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1){\rm e}^{-\tau_1\hat{\mathcal{H}}}$ は $\hat{\psi}(x_1)$ の Heisenberg 表示であり、また $\langle\hat{O}\rangle = {\rm Tr}\,{\rm e}^{\beta(\Omega-\hat{\mathcal{H}})}\hat{O}$ は、相互作用を含んだ密度行列による演算子 $\hat{O}$ の期待値を表す。0_+ を無限小の正数とし、$\tau_{1+} \equiv \tau_1 + 0_+$ を導入する。特に $\tau'_1 = \tau_{1+}$ のグリーン関数 $G(x_1\tau_1, x'_1\tau_{1+}) = -\sigma{\rm Tr}\,{\rm e}^{\beta(\Omega-\hat{\mathcal{H}})}{\rm e}^{\tau_1\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}^\dagger(x'_1)\hat{\psi}(x_1){\rm e}^{-\tau_1\hat{\mathcal{H}}}$ は、${\rm e}^{\pm\tau_1\hat{\mathcal{H}}}$ と ${\rm e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}$ とが可換であることから、τ_1 に依らず、

$$G(x_1\tau_1, x'_1\tau_{1+}) = -\sigma\langle\hat{\psi}^\dagger(x'_1)\hat{\psi}(x_1)\rangle = -\sigma\rho^{(1)}(x_1, x'_1), \tag{300}$$

のように、(254a) 式の縮約された密度行列に直接関係づけられる。従って、$G(1,1')$ を用いて任意の一粒子演算子の期待値が計算できることになる。(299) 式の G は 1955 に松原により統計力学に初めて導入された [7]。従って、このグリーン関数を松原グリーン関数と呼ぶ。

E.1 松原グリーン関数の摂動計算

(299) 式の松原グリーン関数に対する摂動展開を行うために、まず、演算子 $\hat{\mathcal{S}}(\beta) = {\rm e}^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0}{\rm e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}$ を以下のように一般化する。

$$\hat{\mathcal{S}}(\tau,\tau') \equiv {\rm e}^{\tau\hat{\mathcal{H}}_0}{\rm e}^{-\tau\hat{\mathcal{H}}}{\rm e}^{\tau'\hat{\mathcal{H}}}{\rm e}^{-\tau'\hat{\mathcal{H}}_0} = T_\tau \exp\left[-\int_{\tau'}^{\tau}\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_1){\rm d}\tau_1\right]. \tag{301}$$

第二の等式が成立することは、その左右が同じ一階微分方程式 $\partial\hat{\mathcal{S}}(\tau,\tau')/\partial\tau = -\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau)\hat{\mathcal{S}}(\tau,\tau')$ と初期条件 $\hat{\mathcal{S}}(\tau',\tau') = 1$ を満たすことから明らかである。この定義式から得られる関係式 ${\rm e}^{-\tau\hat{\mathcal{H}}}{\rm e}^{\tau'\hat{\mathcal{H}}} = {\rm e}^{-\tau\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{S}}(\tau,\tau'){\rm e}^{\tau'\hat{\mathcal{H}}_0}$ および ${\rm e}^{-\beta\Omega} = {\rm e}^{-\beta\Omega_0}\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0$ を用いると、(299) 式が次のように変形できる。

$$\begin{aligned}
G(1,1') &= -{\rm e}^{\beta\Omega}{\rm Tr}\,T_\tau{\rm e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}{\rm e}^{\tau_1\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1){\rm e}^{-\tau_1\hat{\mathcal{H}}}{\rm e}^{\tau'_1\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}^\dagger(x'_1){\rm e}^{-\tau'_1\hat{\mathcal{H}}} \\
&= -\frac{{\rm Tr}\,T_\tau{\rm e}^{\beta(\Omega_0-\hat{\mathcal{H}}_0)}\hat{\mathcal{S}}(\beta,\tau_1){\rm e}^{\tau_1\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\psi}(x_1){\rm e}^{-\tau_1\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{S}}(\tau_1,\tau'_1){\rm e}^{\tau'_1\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\psi}^\dagger(x'_1){\rm e}^{-\tau'_1\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{S}}(\tau'_1,0)}{\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0} \\
&= -\frac{\langle T_\tau\hat{\mathcal{S}}(\beta,\tau_1)\hat{\psi}(1)\hat{\mathcal{S}}(\tau_1,\tau'_1)\hat{\psi}^\dagger(1')\hat{\mathcal{S}}(\tau'_1,0)\rangle_0}{\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0} \\
&= -\frac{\langle T_\tau\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0}{\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0}.
\end{aligned} \tag{302}$$

(302) 式の分母は熱力学関数の摂動計算で既に扱ったので、ここでは分子を考察する。その非摂動項は、(283) 式の $G^{(0)}$ に等しい。つぎに、1 次摂動からは次の表式を得る。

$$-\langle T_\tau\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\hat{\mathcal{S}}^{(1)}(\beta)\rangle_0 = \frac{1}{2}\int{\rm d}2\int{\rm d}2'\,\bar{V}(2-2')\langle T_\tau\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\hat{\psi}^\dagger(2)\hat{\psi}(2)\hat{\psi}^\dagger(2')\hat{\psi}(2')\rangle_0.$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

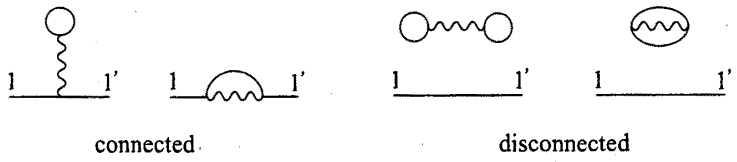


図 16: 松原グリーン関数に対する 1 次の Feynman 図形

被積分関数の中の期待値の評価は、Feynman 図形を用いて簡便に実行できる。トポロジー的に異なる Feynman 図形として、図 16 の 4 種類がある。これら 4 種類の図形は、"外線" $\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')$ との連結状態により、更に二つに分類できる。最初の二つの図形は外線とつながっている。一方、右二つは外線および外線から切り離された閉じた図形から成っている。これらの Feynman 図形には、(302) 式の分子の摂動展開における一般的構造が現れている。実際、n 次摂動に現れる Feynmann 図形は、外線とつながった $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ の数 $n_{\rm c}$ により分類できる。そして、同じ $n_{\rm c}$ を与える場合の数は、n 個の同等な $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ から $n_{\rm c}$ 個を選び出す組み合わせの数

$$ {}_nC_{n_{\rm c}} = \frac{n!}{n_{\rm c}!(n-n_{\rm c})!} $$

に等しい。従って、(302) 式の分子は、以下のように二つの寄与の積に変形できる。

$$
\begin{aligned}
&-\langle T_\tau \hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0 \\
&= -\sum_{n''=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n''}}{n''!}\sum_{n_{\rm c}=0}^{n''} {}_{n''}C_{n_{\rm c}} \int {\rm d}\tau_{1''}\cdots\int {\rm d}\tau_{n''}\langle T_\tau \hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_{1''})\cdots\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_{n_{\rm c}})\rangle_{0{\rm c}} \\
&\qquad\qquad \times\langle T_\tau \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_{n_{\rm c}+1})\cdots\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_{n''})\rangle_0 \\
&= -\sum_{n_{\rm c}=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n_{\rm c}}}{n_{\rm c}!}\int {\rm d}\tau_{1_{\rm c}}\cdots\int {\rm d}\tau_{n_{\rm c}}\langle T_\tau \hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_{1_{\rm c}})\cdots\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_{n_{\rm c}})\rangle_{0{\rm c}} \\
&\quad\times\sum_{n_{\rm d}=0}^{\infty}\frac{(-1)^{n_{\rm d}}}{n_{\rm d}!}\int {\rm d}\tau_{1_{\rm d}}\cdots\int {\rm d}\tau_{n_{\rm d}}\langle T_\tau \hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_{1_{\rm d}})\cdots\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau_{n_{\rm d}})\rangle_0 \\
&= -\langle T_\tau \hat{\mathcal{S}}(\beta)\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\rangle_{0{\rm c}}\langle\hat{\mathcal{S}}(\beta)\rangle_0 .
\end{aligned}
\tag{303}
$$

ここで添え字 $_{\rm c}$ は外線とつながった図形を現す。第二の等式では、$n_{\rm d}\equiv n-n_{\rm c}$ と置き、$(n,n_{\rm c})$ についての条件つきの和を、$(n_{\rm c},n_{\rm d})$ についての独立な和に書き換えた。この式を (302) 式に代入すると、最終的に以下の表式を得る。

$$ G(1,1') = -\langle T_\tau \hat{\mathcal{S}}(\beta)\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')\rangle_{0{\rm c}}. \tag{304} $$

このようにして、松原グリーン関数 $G(1,1')$ の摂動計算においては、外線 $\hat{\psi}(1)\hat{\psi}^\dagger(1')$ とつながった図形のみを考慮すればよいことが分かった。

松原グリーン関数の摂動計算における Feynman 則は、以下のようにまとめられる。

(a) 外線とつながった n 次の Feynman 図形をすべて描く。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

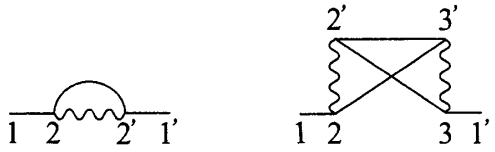


図 17: 松原グリーン関数に寄与する Feynman 図形の例

(b) 各々の Feynman 図形に次の因子を対応させる。

$$\frac{(-1)^n}{2^n n!}\sigma^{n_\ell}\prod_{i=1}^{n}\bar{V}(i-i'). \tag{305}$$

ここで n_ℓ は閉じた粒子線の数である。

(c) j を出発して i に到着する粒子線に (283) 式の $G^{(0)}(i,j)$ を対応させる。また、同時刻 $(\tau_i=\tau_j)$ の粒子線には (286b) 式の $G^{<(0)}(x_i,x_j)$ を用いる。

(d) すべての内部変数について積分を行う。

例として図 17 の二つの Feynman 図形を取り上げる。左図については、積分変数を $2\leftrightarrow 2'$ と入れ替えた図形も同じ寄与を与える。従って、左図とトポロジー的に同じ図形すべてからの寄与を Fock の頭文字を用いて $G^{(1\mathrm{F})}(1,1')$ とすると、$G^{(1\mathrm{F})}(1,1')$ として次式を得る。

$$\begin{aligned}G^{(1\mathrm{F})}(1,1') &= 2\times\frac{(-1)^1}{2^1 1!}\sigma^0\int \mathrm{d}2\int \mathrm{d}2'\,\bar{V}(2-2')G^{(0)}(1,2)G^{<(0)}(2,2')G^{(0)}(2',1')\\ &= -\int \mathrm{d}2\int \mathrm{d}2'\,\bar{V}(2-2')G^{(0)}(1,2)G^{<(0)}(2,2')G^{(0)}(2',1').\end{aligned} \tag{306a}$$

一方、右図に対しては、(i) $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_2)\leftrightarrow\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(\tau_3)$ および (ii) $2\leftrightarrow 2'$, $3\leftrightarrow 3'$ の入れ替えをした図形も同じ寄与を与える。従って、右図とトポロジー的に同じ図形の寄与を exchange の頭文字を用いて $G^{(2\mathrm{e})}(1,1')$ と表すと、$G^{(2\mathrm{e})}(1,1')$ として次式を得る。

$$\begin{aligned}G^{(2\mathrm{e})}(1,1') &= 2!2^2\times\frac{(-1)^2}{2^2 2!}\sigma^0\int \mathrm{d}2\int \mathrm{d}2'\int \mathrm{d}3\int \mathrm{d}3'\,\bar{V}(2-2')\bar{V}(3-3')\\ &\quad\times G^{(0)}(1,2)G^{(0)}(2,3')G^{(0)}(3',2')G^{(0)}(2',3)G^{(0)}(3,1')\\ &= \int \mathrm{d}2\int \mathrm{d}2'\int \mathrm{d}3\int \mathrm{d}3'\,\bar{V}(2-2')\bar{V}(3-3')\\ &\quad\times G^{(0)}(1,2)G^{(0)}(2,3')G^{(0)}(3',2')G^{(0)}(2',3)G^{(0)}(3,1').\end{aligned} \tag{306b}$$

これらの例に見られるように、一般に (305) 式の因子 $(2^n n!)^{-1}$ は、内部変数の取り替えの自由度とキャンセルして消える。

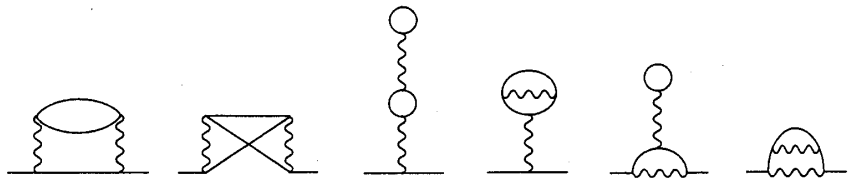
E.2 自己エネルギーと Dyson 方程式

上述のように、松原グリーン関数の摂動展開においては、外線とつながった Feynman 図形のみを考慮すればよい。ここでは、外線とつながった Feynman 図形もさらに 2 種類に大別できることを示す。そして、その事実を用いて自己エネルギーの概念を導入し、さらに Dyson 方程式を導く。

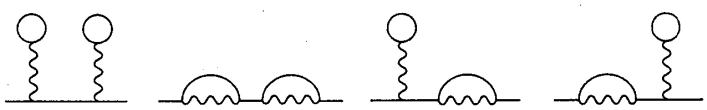
NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

この目的のために、(304) 式の 2 次摂動項を考察し、トポロジー的に異なる Feynman 図形をすべて描くと、次図のようになる。



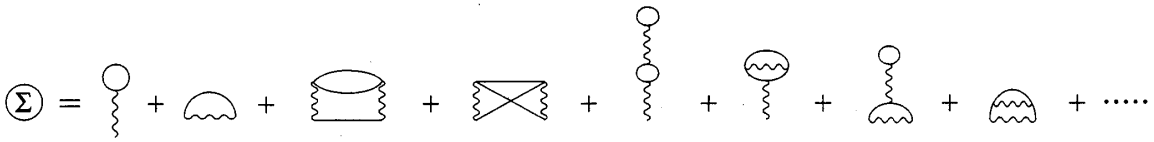
(a)



(b)

(b) の 4 種類の図形は中間の $G^{(0)}$ 線を 1 本切ることで二つの図形に分けることができる。そして、それらの各々は、1 次摂動に現れた図形に他ならない。一方、(a) の図形においては、外線と直接つながらない $G^{(0)}$ 線のうち、どれ一つを切っても二つに分けることはできない。これは、松原グリーン関数の摂動展開における一般的構造である。

この構造に対応して、(既約) 自己エネルギーという概念を導入する。自己エネルギー Σ とは、(a) のタイプの図形から、外線とつながった二つの $G^{(0)}$ 線を取り除くことにより得られる。具体的に Feynman 図形で表すと、下図のようになる。

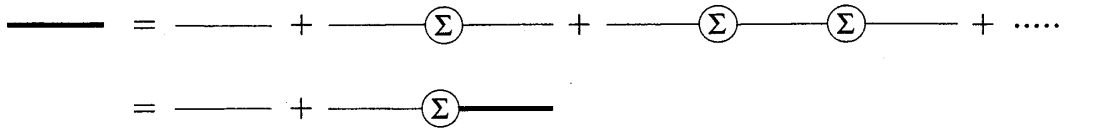


右辺の最初の 2 つが 1 次摂動からの寄与、次の 6 つが 2 次摂動からの寄与である。例えば、2 番目と 4 番目の図形に対応した自己エネルギーは、(306) 式より、それぞれ以下のように表せることがわかる。

$$\Sigma^{(1\mathrm{F})}(1,1') = -\bar{V}(1-1')G^{<(0)}(1,1'), \tag{307a}$$

$$\Sigma^{(2\mathrm{e})}(1,1') = \int \mathrm{d}2 \int \mathrm{d}2'\, \bar{V}(1-2)\bar{V}(1'-2')G^{(0)}(1,2')G^{(0)}(2',2)G^{(0)}(2,1'). \tag{307b}$$

この自己エネルギーを用い、また、$G^{(0)}$ と G にそれぞれ細い直線と太い直線を対応させると、(304) 式の摂動展開が次図のように表せる。



この図を数式で表現すると、以下のようになる。

$$\boldsymbol{G(1,1') = G^{(0)}(1,1') + \int \mathrm{d}2 \int \mathrm{d}2' G^{(0)}(1,2)\Sigma(2,2')G(2',1').} \tag{308}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

この方程式を積分形の Dyson 方程式と呼ぶ。この方程式の微分形は次のようにして得られる。まず、引数 1 と $1'$ をそれぞれ行列の行と列を指定する添え字とみなし、この方程式の左から $G^{(0)-1}$ を作用させると、次式が得られる。

$$\int \left[G^{(0)-1}(1,2) - \Sigma(1,2)\right] G(2,1')\,\mathrm{d}2 = \delta(1,1'). \tag{309}$$

一方、非摂動グリーン関数に対する方程式 (284) より、$G^{(0)-1}$ が以下のように求まる。

$$G^{(0)-1}(1,1') = \left[-\frac{\partial}{\partial\tau_1} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} - U(\mathbf{r}_1) + \mu\right]\delta(1,1'). \tag{310}$$

この式を (309) 式に代入すると、**微分形の Dyson 方程式が次のように得られる。**

$$\boldsymbol{\left[-\frac{\partial}{\partial\tau_1} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} - U(\mathbf{r}_1) + \mu\right] G(1,1') - \int \Sigma(1,2)G(2,1')\,\mathrm{d}2 = \delta(1,1').} \tag{311}$$

非摂動グリーン関数 $G^{(0)}(1,1')$ に対する方程式 (284) との違いは、左辺に自己エネルギー項があることである。

E.3 松原グリーン関数の一般的性質

ここでは松原グリーン関数の一般的性質を列挙する。

(a) $G(1,1')$ は $\tau_1 - \tau_1'$ のみの関数

このことは演算子 $\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}$ と $\mathrm{e}^{-\tau_1\hat{\mathcal{H}}}$ の可換性を用いて以下のように示せる。

$$\begin{aligned} G(1,1') &= -\mathrm{Tr}\,T_\tau \mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{\mathcal{H}})}\mathrm{e}^{\tau_1\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-\tau_1\hat{\mathcal{H}}}\mathrm{e}^{\tau_1'\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}^\dagger(x_1')\mathrm{e}^{-\tau_1'\hat{\mathcal{H}}} \\ &= -\mathrm{Tr}\,T_\tau \mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{\mathcal{H}})}\mathrm{e}^{(\tau_1-\tau_1')\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-(\tau_1-\tau_1')\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}^\dagger(x_1') \\ &\equiv G(x_1,x_1';\tau_1-\tau_1'). \end{aligned} \tag{312}$$

$0 \le \tau_1, \tau_1' \le \beta$ より、$\tau_1 - \tau_1'$ は領域 $-\beta \le \tau_1 - \tau_1' \le \beta$ を動くことがわかる。

(b) $-\beta \le \tau \le 0$ に対し $G(x_1,x_1';\tau+\beta) = \sigma G(x_1,x_1';\tau)$

このことは次のように示せる。まず、$-\beta \le \tau \le 0$ のとき、

$$G(x_1,x_1';\tau) = -\langle T_\tau \hat{\psi}_{\mathrm{H}}(x_1\tau)\hat{\psi}^\dagger(x_1')\rangle = -\sigma \mathrm{e}^{\beta\Omega}\,\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}^\dagger(x_1')\mathrm{e}^{\tau\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-\tau\hat{\mathcal{H}}}.$$

一方、$\tau+\beta \ge 0$ なので

$$\begin{aligned} G(x_1,x_1';\tau+\beta) &= -\mathrm{e}^{\beta\Omega}\,\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\mathrm{e}^{(\tau+\beta)\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-(\tau+\beta)\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}^\dagger(x_1') \\ &= -\mathrm{e}^{\beta\Omega}\,\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{\tau\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-\tau\hat{\mathcal{H}}}\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}^\dagger(x_1') \\ &= -\mathrm{e}^{\beta\Omega}\,\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}^\dagger(x_1')\mathrm{e}^{\tau\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-\tau\hat{\mathcal{H}}}. \end{aligned}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

従って、$G(x_1,x_1';\tau+\beta)=\sigma G(x_1,x_1';\tau)$。ここで、境界条件 $g(\tau+\beta)=\sigma g(\tau)$ を満たす完全系を構成するために、次の一階微分方程式を考える。

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\tau}=\lambda g,\qquad g(\tau+\beta)=\sigma g(\tau). \tag{313}$$

微分方程式の解は $g(\tau)\propto \mathrm{e}^{\lambda\tau}$ と求まり、境界条件を考慮すると、固有値が $\lambda=-i\varepsilon_\ell$ のように決まる。ただし、**ε_ℓ は、ℓ を整数として以下のように定義されている。**

$$\varepsilon_\ell=\begin{cases}2\ell\pi/\beta & :\sigma=+1\ \text{(Bose 粒子)}\\ (2\ell+1)\pi/\beta & :\sigma=-1\ \text{(Fermi 粒子)}\end{cases}. \tag{314}$$

$\omega_\ell\equiv\varepsilon_\ell/\hbar$ を松原周波数と呼ぶ。関数系 $\{\mathrm{e}^{-i\varepsilon_\ell\tau}\}_{\ell=-\infty}^{\infty}$ は、境界条件 $g(\tau+\beta)=\sigma g(\tau)$ を満たす任意の関数 $g(\tau)$ に関する直交完全系を構成する。従って、**松原グリーン関数は以下のように展開できる。**

$$G(x_1,x_1';\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_{\ell=-\infty}^{\infty}G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)\mathrm{e}^{-i\varepsilon_\ell\tau}. \tag{315a}$$

ここで、左辺と右辺の関数 G は、関数形が異なることに注意しておく。**この逆変換は、両辺に $\mathrm{e}^{i\varepsilon_{\ell'}\tau}$ をかけ区間 $[0,\beta]$ で積分し、続けて $\ell'\to\ell$ の置き換えを行うことにより、次のように求まる。**

$$G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)=\int_0^\beta G(x_1,x_1';\tau)\mathrm{e}^{i\varepsilon_\ell\tau}\,\mathrm{d}\tau. \tag{315b}$$

(c) 松原グリーン関数の Lehmann 表示

全ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ の固有値問題を $\hat{\mathcal{H}}|\Psi_\nu\rangle=E_\nu|\Psi_\nu\rangle$ とし、その固有値と固有関数が求まったと仮定する。(312) 式の $G(x_1,x_1';\tau)$ をこの完全系で展開すると、以下のようになる。

$$\begin{aligned}
&G(x_1,x_1';\tau)\\
&=-\theta(\tau)\sum_{\nu\nu'}\langle\Psi_\nu|\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{\mathcal{H}})}\mathrm{e}^{\tau\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-\tau\hat{\mathcal{H}}}|\Psi_{\nu'}\rangle\langle\Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1')|\Psi_\nu\rangle\\
&\quad-\sigma\theta(-\tau)\sum_{\nu\nu'}\langle\Psi_{\nu'}|\mathrm{e}^{\beta(\Omega-\hat{\mathcal{H}})}\hat{\psi}^\dagger(x_1')|\Psi_\nu\rangle\langle\Psi_\nu|\mathrm{e}^{\tau\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1)\mathrm{e}^{-\tau\hat{\mathcal{H}}}|\Psi_{\nu'}\rangle\\
&=-\sum_{\nu\nu'}\left[\theta(\tau)\mathrm{e}^{\beta(\Omega-E_\nu)}+\sigma\theta(-\tau)\mathrm{e}^{\beta(\Omega-E_{\nu'})}\right]\mathrm{e}^{\tau(E_\nu-E_{\nu'})}\langle\Psi_\nu|\hat{\psi}(x_1)|\Psi_{\nu'}\rangle\langle\Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1')|\Psi_\nu\rangle.
\end{aligned} \tag{316a}$$

この表式を (315b) 式に代入して積分を実行すると、次の表式が得られる。

$$\begin{aligned}
G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)&=-\sum_{\nu\nu'}\mathrm{e}^{\beta(\Omega-E_\nu)}\frac{\mathrm{e}^{\beta(i\varepsilon_\ell+E_\nu-E_{\nu'})}-1}{i\varepsilon_\ell+E_\nu-E_{\nu'}}\langle\Psi_\nu|\hat{\psi}(x_1)|\Psi_{\nu'}\rangle\langle\Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1')|\Psi_\nu\rangle\\
&=\sum_{\nu\nu'}\mathrm{e}^{\beta(\Omega-E_\nu)}\frac{1-\sigma\mathrm{e}^{\beta(E_\nu-E_{\nu'})}}{i\varepsilon_\ell+E_\nu-E_{\nu'}}\langle\Psi_\nu|\hat{\psi}(x_1)|\Psi_{\nu'}\rangle\langle\Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1')|\Psi_\nu\rangle.
\end{aligned} \tag{316b}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

第二の等式では $e^{i\varepsilon_\ell\beta}=\sigma$ を用いた。ここで、ε を実数として、スペクトル関数 $A(x_1,x_1';\varepsilon)$ を次式で導入する。

$$A(x_1,x_1';\varepsilon)\equiv 2\pi\sum_{\nu\nu'}e^{\beta(\Omega-E_\nu)}[1-\sigma e^{\beta(E_\nu-E_{\nu'})}]\langle\Psi_\nu|\hat{\psi}(x_1)|\Psi_{\nu'}\rangle\langle\Psi_{\nu'}|\hat{\psi}^\dagger(x_1')|\Psi_\nu\rangle \times\delta(\varepsilon-E_{\nu'}+E_\nu). \tag{317}$$

このスペクトル関数 $A(x_1,x_1';\varepsilon)$ を ε について積分すると、以下のようになる。

$$\int_{-\infty}^{\infty}A(x_1,x_1';\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{2\pi}=\sum_\nu e^{\beta(\Omega-E_\nu)}\langle\Psi_\nu|[\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}^\dagger(x_1')-\sigma\hat{\psi}^\dagger(x_1')\hat{\psi}(x_1)]|\Psi_\nu\rangle.$$

右辺の導出の際には、完全性 $|\Psi_\nu\rangle\langle\Psi_\nu|=1$ を用い、また σ に比例した項については添え字の入れ替え $\nu\leftrightarrow\nu'$ を行った。ここで、場の演算子の交換関係を用いると、最終的に次の総和則を得る。

$$\boldsymbol{\int_{-\infty}^{\infty}A(x_1,x_1';\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{2\pi}=\delta(x_1,x_1').} \tag{318a}$$

一方、(317) 式の複素共役をとることにより、以下の性質も導ける。

$$\boldsymbol{A^*(x_1,x_1';\varepsilon)=A(x_1',x_1;\varepsilon).} \tag{318b}$$

すなわち、x_1 と x_1' を行列の足と考えると、$A(x_1,x_1';\varepsilon)$ はエルミート行列とみなせる。最後に、$A(x_1,x_1';\varepsilon)$ の固有値と固有ベクトルを $A_r(\varepsilon)$ および $\varphi_r(x_1;\varepsilon)$ とする。すなわち

$$\int A(x_1,x_1';\varepsilon)\varphi_r(x_1';\varepsilon)dx_1'=A_r(\varepsilon)\varphi_r(x_1;\varepsilon).$$

そして、場の演算子を

$$\hat{\psi}(x)=\sum_r\hat{c}_r(\varepsilon)\varphi_r(x;\varepsilon)$$

と展開する。すると、$A_r(\varepsilon)$ は次のように書ける。

$$A_r(\varepsilon)=2\pi\sum_{\nu\nu'}e^{\beta(\Omega-E_\nu)}[1-\sigma e^{\beta(E_\nu-E_{\nu'})}]|\langle\Psi_\nu|\hat{c}_r(\varepsilon)|\Psi_{\nu'}\rangle|^2\delta(\varepsilon-E_{\nu'}+E_\nu).$$

この式より、$\sigma=-1$ の Fermi 粒子系では $A_r(\varepsilon)>0$ であることがわかる。また、$|\Psi_\nu\rangle$ が $|\Psi_{\nu'}\rangle$ に消滅演算子を作用して得られる状態であることを考慮すると、不等式 $E_{\nu'}-E_\nu>0$ が成立することがわかり、$1-e^{\beta(E_\nu-E_{\nu'})}>0$ が結論される。従って、$\sigma=+1$ の Bose 粒子系においても $A_r(\varepsilon)>0$ が成立する。以上より、**$A(x_1,x_1';\varepsilon)$ は、Bose 粒子系・Fermi 粒子系どちらにおいても正値エルミート行列である。**

スペクトル関数を用いると、(316b) 式は以下のように積分表示できる。

$$\boldsymbol{G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{A(x_1,x_1';\varepsilon)}{i\varepsilon_\ell-\varepsilon}d\varepsilon.} \tag{319}$$

この表現は、松原グリーン関数の Lehmann 表示と呼ばれている。この式より、スペクトル関数 $A(x_1,x_1';\varepsilon)$ が松原グリーン関数 $G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)$ を一意的に決定することがわかる。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

相互作用のない場合には、松原グリーン関数・スペクトル関数共に非常に簡単な形を持つ。まず、τ 表示の松原グリーン関数は (283b) 式で与えられる。それを (315b) 式に代入して積分すると、周波数表示の松原グリーン関数が以下のように得られる。

$$G^{(0)}(x_1,x_2;i\varepsilon_\ell)=\sum_k \frac{\varphi_k(x_1)\varphi_k^*(x_2)}{i\varepsilon_\ell-\xi_k}. \tag{320}$$

ここで、$\xi_k\equiv\epsilon_k-\mu$ は、化学ポテンシャルから測った一粒子エネルギー、すなわち励起エネルギーである。対応するスペクトル関数は、励起エネルギー ξ_k の δ 関数の和として、以下のように表される。

$$A^{(0)}(x_1,x_2,\varepsilon)=2\pi\sum_k \varphi_k(x_1)\varphi_k^*(x_2)\delta(\varepsilon-\xi_k). \tag{321}$$

(d) $G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)\to G(x_1,x_1';\tau)$ の変換

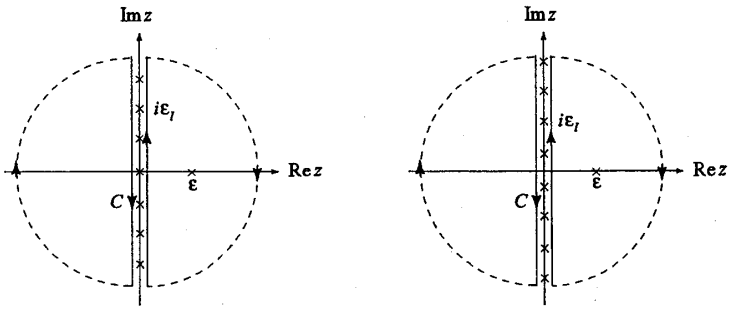
(315) 式では、$G(x_1,x_1';\tau)$ から、$\{\mathrm{e}^{-i\varepsilon_\ell\tau}\}_{\ell=-\infty}^{\infty}$ の直交性を用いることにより、$G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)$ 式の表現をえた。ここでは逆に、(315b) 式の表式が得られたとき、(315a) 式の和をとることを考える。ここで扱う方法は、平衡状態の摂動論における基本的テクニックである。

まず、複素数 z の関数としての Bose/Fermi 分布関数 $f(z)\equiv 1/(\mathrm{e}^{\beta z}-\sigma)$ が、(314) 式で与えられる ε_ℓ に対し、次の性質を持つことに注意する。

$$\lim_{z\to i\varepsilon_\ell}(z-i\varepsilon_\ell)f(z)=\lim_{z\to i\varepsilon_\ell}\frac{1}{\beta\mathrm{e}^{\beta z}}=\frac{\sigma}{\beta}.$$

すなわち $z=i\varepsilon_\ell$ は $f(z)$ の一位の極で、その留数は σ/β である。従って、複素関数論の留数の定理より、(315a) 式の和は以下のように変形できる。

$$\begin{aligned} I&\equiv\frac{1}{\beta}\sum_{\ell=-\infty}^{\infty}G(i\varepsilon_\ell)\mathrm{e}^{-i\varepsilon_\ell\tau}=\sigma\int_C\frac{\mathrm{d}z}{2\pi i}G(z)\mathrm{e}^{-\tau z}\{\theta(\tau)[f(z)+\sigma]+\theta(-\tau)f(z)\}\\ &=\sigma\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}A(\varepsilon)\int_C\frac{\mathrm{d}z}{2\pi i}\frac{\mathrm{e}^{-\tau z}}{z-\varepsilon}\left[\theta(\tau)\frac{\sigma\mathrm{e}^{\beta z}}{\mathrm{e}^{\beta z}-\sigma}+\theta(-\tau)\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta z}-\sigma}\right]. \end{aligned} \tag{322a}$$



Bose 粒子　　Fermi 粒子

図 18: 複素 z 平面上の積分経路

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ただし、Cは複素z平面の虚軸を反時計回りに一周する図18の積分路である。$\tau>0$の場合については、以下で複素関数論におけるJordanの補助定理を使えるようにするため、$f(z)$に定数σを加えた。この被積分関数は次のように$|z|\to\infty$で$|z|^{-1}$よりも速く0に近づく。

$$\frac{\theta(\tau)\sigma e^{(\beta-\tau)z}+\theta(-\tau)e^{-\tau z}}{(z-\varepsilon)(e^{\beta z}-\sigma)} \xrightarrow{|z|\to\infty} \begin{cases} \dfrac{\theta(\tau)\sigma e^{-\tau z}+\theta(-\tau)e^{-(\beta+\tau)z}}{z} & : -\dfrac{\pi}{2}<\arg z<\dfrac{\pi}{2} \\ -\dfrac{\theta(\tau)e^{(\beta-\tau)z}+\theta(-\tau)\sigma e^{-\tau z}}{z} & : \dfrac{\pi}{2}<\arg z<\dfrac{3\pi}{2} \end{cases}.$$

従って、Jordanの補助定理が適用可能である。より具体的には、複素z平面上に半径Rの積分路$(R\to\infty)$をつけ加え、虚軸の左右に積分路を閉じることができる。この閉じた二つの積分路は共に時計回りであり、その内部の特異点は$z=\varepsilon$における一位の極のみである。この極について留数の定理を適用し、さらに(317)式を代入すると、上記の和Iが次のように変形できる。

$$\begin{aligned} I &= -\sigma\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}A(\varepsilon)\left[\theta(\tau)\frac{\sigma e^{(\beta-\tau)\varepsilon}}{e^{\beta\varepsilon}-\sigma}+\theta(-\tau)\frac{e^{-\tau\varepsilon}}{e^{\beta\varepsilon}-\sigma}\right] \\ &= -\sigma\sum_{\nu\nu'}e^{\beta(\Omega-E_\nu)}[1-\sigma e^{\beta(E_\nu-E_{\nu'})}]\langle\Psi_\nu|\hat\psi(x_1)|\Psi_{\nu'}\rangle\langle\Psi_{\nu'}|\hat\psi^\dagger(x_1')|\Psi_\nu\rangle \\ &\quad\times\frac{e^{\tau(E_\nu-E_{\nu'})}[\theta(\tau)\sigma e^{-\beta(E_\nu-E_{\nu'})}+\theta(-\tau)]}{e^{-\beta(E_\nu-E_{\nu'})}-\sigma} \\ &= -\sum_{\nu\nu'}\left[\theta(\tau)e^{\beta(\Omega-E_\nu)}+\sigma\theta(-\tau)e^{\beta(\Omega-E_{\nu'})}\right]e^{\tau(E_\nu-E_{\nu'})}\langle\Psi_\nu|\hat\psi(x_1)|\Psi_{\nu'}\rangle\langle\Psi_{\nu'}|\hat\psi^\dagger(x_1')|\Psi_\nu\rangle. \end{aligned} \tag{322b}$$

このようにして、(316b)式から(316a)式が導かれた。

(e) $G(1,1')$のスペクトル関数による表現

(322b)式の第一の表式に注意し、それが(315a)式に等しいことを考慮すると、(285)式の一般化である次の表式を得る。

$$G(1,1')=\theta(\tau_1-\tau_1')G^>(1,1')+\theta(\tau_1'-\tau_1)G^<(1,1'). \tag{323a}$$

ここで$G^>$と$G^<$はKadanoff-Baymの相関関数[6]で、スペクトル関数AとBose/Fermi分布関数$f(\varepsilon)\equiv(e^{\beta\varepsilon}-\sigma)^{-1}$を用いて次のように表せる。

$$G^>(1,1')\equiv-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}A(x_1,x_1';\varepsilon)[1+\sigma f(\varepsilon)]e^{-\varepsilon(\tau_1-\tau_1')}, \tag{323b}$$

$$G^<(1,1')\equiv-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{2\pi}A(x_1,x_1';\varepsilon)\sigma f(\varepsilon)e^{-\varepsilon(\tau_1-\tau_1')}. \tag{323c}$$

Appendix F. 繰り込まれた摂動展開

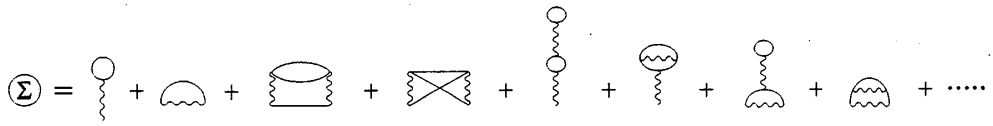
F.1 自己エネルギーの繰り込みと自己無撞着摂動展開

Appendix Eでは松原グリーン関数の摂動展開を考察した。この展開は外線とつながったFeynman図形を用いて実行できる。それに関連して自己エネルギーΣの概念も導入した。自己エネルギー

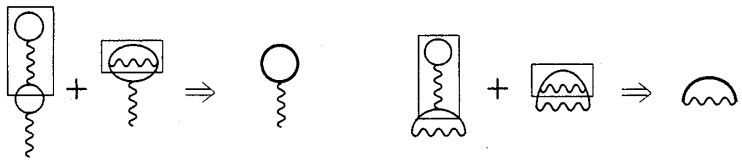
NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

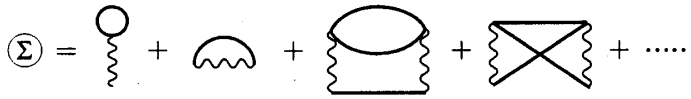
は、上記の Feynman 図形から外線 2 本を取り除いた図形の中で、どの一本の粒子線を切ることによっても二つに分けられない図形からの寄与として定義され、トポロジー的に異なる Feynman 図形を用いて以下のように表せる。



ここで最後の四つの図形に注目する。すると、下図の四角で囲まれた部分が、非摂動グリーン関数 $G^{(0)}$ に対する自己エネルギー補正に他ならず、以下の図のように自己エネルギー中で $G^{(0)} \to G$ とする効果があることがわかる。



この考察より、自己エネルギーは次のようにしても得られることがわかる。すなわち、自己エネルギーに寄与する Feynman 図形の中から「骨格図形」と呼ばれる自己エネルギー補正のない図形のみを取り出し、$G^{(0)} \to G$ の置き換えを実行する。この摂動展開を、以下、繰り込まれた骨格図形展開と呼ぼう。G に太い直線を対応させると、この摂動展開における自己エネルギーは、Feynman 図形を用いて以下のように表せる。

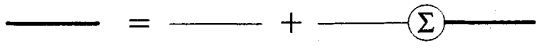


対応する解析的表現は、次式で与えられる。

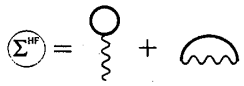
$$\begin{aligned}\Sigma(1,1') = -\sigma\delta(1,1')\int \mathrm{d}2\,\bar{V}(1-2)G(2,2) - \bar{V}(1-1')G(1,1') \\ + \int \mathrm{d}2 \int \mathrm{d}2'\,\bar{V}(1-2)\bar{V}(1'-2')[\sigma G(1,1')G(2,2')G(2',2) + G(1,2')G(2',2)G(2,1')] \\ + \cdots .\end{aligned} \tag{324}$$

ただし、1 次摂動に現れる同時刻の松原グリーン関数は $G^<$ と解釈するものとする。

骨格図形展開は自己無撞着な摂動展開である。実際この展開では、Σ は G の汎関数 $\Sigma = \Sigma[G]$ として与えられているが、一方 G は、Dyson 方程式



を満たすように決める必要があり、必然的に Σ に依存する。従って、繰り込まれた骨格図形展開では、G と Σ を自己無撞着に決める必要がある。特に、上記の Σ に対する骨格図形の中で、下図で表される 1 次摂動項 Σ^{HF} のみを残し、また Dyson 方程式中で $\Sigma \to \Sigma^{\mathrm{HF}}$ として G と Σ^{HF} を自己無撞着に決める近似法を、Hartree-Fock 近似と呼ぶ。具体的に、Σ^{HF} に対応する Feynman 図形は、以下のように与えられる。

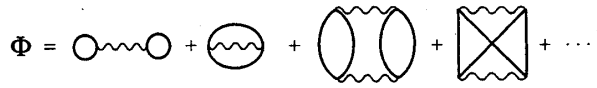


NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

F.2 自己エネルギーの別表現

(324) 式の自己エネルギーは、次のようにも表すことができる。まず、熱力学関数 Ω の摂動展開に現れる Feynman 図形の中から骨格図形のみを取り出し、$G^{(0)} \to G$ の置き換えをしたものを Φ で表す。Φ トポロジー的に異なる Feynman 図形を用いて表すと、以下のようになる。



これに対応する解析的表式は、

$$\begin{aligned}\Phi &\equiv -\frac{1}{\beta}[\langle \hat{S}(\beta)\rangle_{0c} - 1]_{\text{skeleton},G^{(0)}\to G}\cdot \\ &= \frac{1}{2\beta}\int \mathrm{d}1 \int \mathrm{d}1'\, \bar{V}(1-1')[G(1,1)G(1',1') + \sigma G(1,1')G(1',1)] \\ &\quad -\frac{1}{4\beta}\int \mathrm{d}1 \int \mathrm{d}1' \int \mathrm{d}2 \int \mathrm{d}2'\, \bar{V}(1-1')\bar{V}(2-2')[G(1,2)G(2,1)G(1',2')G(2',1') \\ &\qquad\qquad +\sigma G(1,2)G(2,1')G(1',2')G(2',1)] \\ &\quad +\cdots \end{aligned} \tag{325}$$

で与えられる。(325) 式の n 次摂動項を (324) 式の n 次摂動項と比べると、G の個数が一つ多く、かつ、数係数 $-\sigma/2n\beta$ の違いがあることがわかる。Φ に現れるこの因子 $1/2n$ は閉じた図形において $2n$ 個の G が同等であることに由来し、また、σ は閉じた粒子線の個数が一つ多いためである。簡単な計算で確かめられるように、(324) 式の Σ は、この Φ から、汎関数微分

$$\Sigma(1,1') = -\sigma\beta\frac{\delta\Phi}{\delta G(1',1)} \tag{326}$$

により得られる。

F.3 自己エネルギーの性質

自己エネルギー $\Sigma(1,1')$ は、グリーン関数 $G(1,1')$ と同じく $\tau_1 - \tau_1'$ のみの関数であり、(314) 式の ε_ℓ を用いて

$$\Sigma(1,1') = \frac{1}{\beta}\sum_\ell \Sigma(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)\,\mathrm{e}^{-i\varepsilon_\ell(\tau_1-\tau_1')} \tag{327}$$

と展開できる。これは、(i) $G(1,1')$ と $G^{(0)}(1,1')$ が (315a) 式のように展開できる、(ii) Dyson 方程式 $\Sigma = G^{(0)-1} - G^{-1}$ が成立する、という 2 点から明らかである。さらに、展開係数 $\Sigma(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)$ は、(319) 式の $G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)$ と同様に、以下のように Lehmann 表示できる。

$$\Sigma(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell) = \Sigma^{(\mathrm{HF})}(x_1,x_1') + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}\,\frac{A_\Sigma(x_1,x_1';\varepsilon)}{i\varepsilon_\ell - \varepsilon}. \tag{328}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

これは、(324) 式の各項の周波数表示を具体的に書き下すことで確かめられる。まず、(324) 式の Hartree-Fock 項を考えよう。この項は $\delta(\tau_1-\tau_1')=\beta^{-1}\sum_\ell \mathrm{e}^{-i\varepsilon_\ell(\tau_1-\tau_1')}$ に比例しており、(323) 式を代入すると、上式の $\Sigma^{(\mathrm{HF})}(x_1,x_1')$ が以下のように得られる。

$$\Sigma^{(\mathrm{HF})}(x_1,x_1')=\delta(x_1,x_1')\int \mathrm{d}x_2 V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_1}{2\pi}A(x_2,x_2;\varepsilon_1)f(\varepsilon_1)$$
$$+\sigma V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1')\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_1}{2\pi}A(x_1,x_1';\varepsilon_1)f(\varepsilon_1). \tag{329}$$

また、(324) 式の 2 次摂動項は、(279) 式と (323) 式を代入し、次のように表せる。

$$\Sigma^{(2)}(1,1')=-\int \mathrm{d}x_2\int \mathrm{d}x_2' V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1'-\mathbf{r}_2')\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_1'}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_2'}{2\pi}$$
$$\times\left[\sigma A(x_1,x_1';\varepsilon_2)A(x_2,x_2';\varepsilon_2')A(x_2',x_2;\varepsilon_1')+A(x_1,x_2';\varepsilon_2)A(x_2',x_2;\varepsilon_1')A(x_2,x_1';\varepsilon_2')\right]$$
$$\times\left[\theta(\tau_1-\tau_1')(1+\sigma f_2)(1+\sigma f_2)\sigma f_1'+\theta(\tau_1'-\tau_1)f_2 f_2'(1+\sigma f_1')\right]\mathrm{e}^{-(\tau_1-\tau_1')(\varepsilon_2+\varepsilon_2'-\varepsilon_1')}.$$

ここで $f(\varepsilon_1')=f_1'$ などと略記した。さらに、この式に $\mathrm{e}^{i\varepsilon_\ell(\tau_1-\tau_1')}$ をかけ、$\tau\equiv\tau_1-\tau_1'$ について区間 $[0,\beta]$ で積分する。すると、$\Sigma^{(2)}(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)$ の表式が以下のように得られる。

$$\Sigma^{(2)}(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)=-\int \mathrm{d}x_2\int \mathrm{d}x_2' V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1'-\mathbf{r}_2')\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_1'}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_2'}{2\pi}\left[A(x_1,x_1';\varepsilon_2)\right.$$
$$\left.\times A(x_2,x_2';\varepsilon_2')A(x_2',x_2;\varepsilon_1')+\sigma A(x_1,x_2';\varepsilon_2)A(x_2',x_2;\varepsilon_1')A(x_2,x_1';\varepsilon_2')\right]$$
$$\times\frac{\sigma(1+\sigma f_1')f_2 f_2'-f_1'(1+\sigma f_2)(1+\sigma f_2)}{i\varepsilon_\ell+\varepsilon_1'-\varepsilon_2-\varepsilon_2'}. \tag{330}$$

これを (328) 式と見較べることで、$A_\Sigma^{(2)}(x_1,x_1';\varepsilon_1)$ が次のように書き下せる。

$$A_\Sigma^{(2)}(x_1,x_1';\varepsilon_1)=-\int \mathrm{d}x_2\int \mathrm{d}x_2' V(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1'-\mathbf{r}_2')\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_1'}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon_2'}{2\pi}\left[A(x_1,x_1';\varepsilon_2)\right.$$
$$\left.\times A(x_2,x_2';\varepsilon_2')A(x_2',x_2;\varepsilon_1')+\sigma A(x_1,x_2';\varepsilon_2)A(x_2',x_2;\varepsilon_1')A(x_2,x_1';\varepsilon_2')\right]$$
$$\times[\sigma(1+\sigma f_1')f_2 f_2'-f_1'(1+\sigma f_2)(1+\sigma f_2)]2\pi\delta(\varepsilon_1+\varepsilon_1'-\varepsilon_2-\varepsilon_2'). \tag{331}$$

F.4　熱力学ポテンシャルの別表現—その 1

熱力学ポテンシャル Ω は (264) 式で定義され、(265) 式の $\hat{S}(\beta)$ を用いて (293) 式のようにも表すことができた。この Ω に二つの異なる表現を与えよう。それらは、熱力学量の一般的構造の解明や実際の計算に際し有益である。

まず、(264) 式の $\hat{\mathcal{H}}=\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$ において、λ' をパラメータとして $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}\to\lambda'\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$ の置き換えを行う。対応する熱力学ポテンシャル $\Omega_{\lambda'}$ を λ' で微分すると、

$$\frac{\partial\Omega_{\lambda'}}{\partial\lambda'}=\frac{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_{\lambda'}}\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_{\lambda'}}}=\frac{\langle\lambda'\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}\rangle_{\lambda'}}{\lambda'}$$

が得られる。ただし、$\langle\cdots\rangle_{\lambda'}$ は、$\hat{\mathcal{H}}_{\lambda'}\equiv\hat{\mathcal{H}}_0+\lambda'\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$ に対応する密度行列での期待値である。上式を λ' について 0 から λ まで積分し、$\hat{\mathcal{H}}_{\lambda'=0}=\hat{\mathcal{H}}_0$ に注意すると、次式が得られる。

$$\Omega_\lambda=\Omega_0+\int_0^\lambda\frac{\langle\lambda'\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}\rangle_{\lambda'}}{\lambda'}\mathrm{d}\lambda'. \tag{332}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

一方、$\hat{\psi}_{\rm H}(1) \equiv {\rm e}^{\tau_1\hat{\mathcal{H}}}\hat{\psi}(x_1){\rm e}^{-\tau_1\hat{\mathcal{H}}}$ に対する Heisenberg の運動方程式は、

$$\frac{\partial\hat{\psi}_{\rm H}(1)}{\partial\tau_1} = -{\rm e}^{\tau_1\hat{\mathcal{H}}}[\hat{\psi}(x_1)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{\psi}(x_1)]{\rm e}^{-\tau_1\hat{\mathcal{H}}}$$

で与えられる。この式に (261) 式で与えられる $\hat{\mathcal{H}}$ の表式を代入して交換関係を計算すると、次の結果が得られる。

$$\frac{\partial\hat{\psi}_{\rm H}(1)}{\partial\tau_1} = -\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \mu\right]\hat{\psi}_{\rm H}(1) - \int {\rm d}2\,\bar{V}(1-2)\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(2)\hat{\psi}_{\rm H}(2)\hat{\psi}_{\rm H}(1). \tag{333}$$

この式の右から $-\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(1')$ をかけた後、左から T_τ を作用し、さらに密度行列 $\hat{\rho} \equiv {\rm e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}/{\rm Tr}\,{\rm e}^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}$ で平均操作を行う。その結果を松原グリーン関数 $G(1,1') \equiv -\langle T_\tau\hat{\psi}_{\rm H}(1)\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(1')\rangle$ を用いて書き下すと、以下のようになる。

$$\left[-\frac{\partial}{\partial\tau_1} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} - U(\mathbf{r}) + \mu\right]G(1,1') + \int {\rm d}2\,\bar{V}(1-2)\langle T_\tau\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(2)\hat{\psi}_{\rm H}(2)\hat{\psi}_{\rm H}(1)\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(1')\rangle = \delta(1,1').$$

ここで右辺に δ 関数があるのは、両辺に $\frac{\partial\langle T_\tau\hat{\psi}_{\rm H}(1)\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(1')\rangle}{\partial\tau_1} - \langle T_\tau\frac{\partial\hat{\psi}_{\rm H}(1)}{\partial\tau_1}\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(1')\rangle = \delta(1,1')$ を加えたためである。この式を Dyson 方程式 (311) と見比べると、次の恒等式を得る。

$$\int {\rm d}2\,\Sigma(1,2)G(2,1') = -\int {\rm d}2\,\bar{V}(1-2)\langle T_\tau\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(2)\hat{\psi}_{\rm H}(2)\hat{\psi}_{\rm H}(1)\hat{\psi}_{\rm H}^\dagger(1')\rangle. \tag{334}$$

この式で $1' = 1_+$、すなわち $x_1' = x_1$ および $\tau_1' = \tau_{1+}$ と置き、$-\sigma/2\beta$ をかけて 1 について積分する。すると、右辺は相互作用の期待値 $\langle\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}\rangle$ を与える。従って、$\langle\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}\rangle$ に対する次の表式を得る。

$$\langle\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}\rangle = -\frac{\sigma}{2\beta}\int {\rm d}1\int {\rm d}2\,\Sigma(1,2)G(2,1')\big|_{1'=1_+}. \tag{335}$$

(335) 式を (332) 式に代入すると、熱力学関数を G と Σ で表す次の式が得られる。

$$\Omega_\lambda = \Omega_0 - \frac{\sigma}{2\beta}\int_0^\lambda\frac{{\rm d}\lambda'}{\lambda'}\int {\rm d}1\int {\rm d}2\,\Sigma_{\lambda'}(1,2)G_{\lambda'}(2,1')\big|_{1'=1_+}. \tag{336}$$

相互作用 $\hat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ に対する熱力学関数は、この式で $\lambda = 1$ と置くことにより得られる。しかし、この表式を実際の計算に使うためには、$0 \le \lambda \le 1$ の全領域における Σ_λ と G_λ が必要である。

F.5 熱力学ポテンシャルの別表現—その 2

熱力学関数のもう一つの表現は次式で与えられる。

$$\Omega = \frac{\sigma}{\beta}{\rm Tr}[\ln(-\underline{G}^{(0)-1} + \underline{\Sigma}) + \underline{\Sigma}\,\underline{G}] + \Phi. \tag{337}$$

ここで、$\underline{G}$ は $G(1,1')$ を行列要素とする行列であり、Tr は

$${\rm Tr}\underline{A} \equiv \int A(1,1_+){\rm d}1 \tag{338}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を表す。対数関数の分枝は実軸上の $-\infty$ から 0 に取った。また、Φ は (325) 式で定義されている。Luttinger と Ward [22] により見出されたこの表式は、松原グリーン関数から直接に熱力学関数を計算することを可能にするだけでなく、厳密な熱力学的関係式の導出に際しても大変便利である。なお、(337) 式は、Luttinger-Ward の原論文とは表現が少し異なる。Luttinger と Ward は、$G = G[\Sigma]$ と、松原グリーン関数を自己エネルギー Σ の汎関数とみなし、Ω を自己エネルギー Σ の汎関数として書き下した。ここでは逆に $\Sigma = \Sigma[G]$ と考え、Ω を松原グリーン関数 G の汎関数として与えている。Landau の Fermi 流体論との関連を考えるとき、ここでの定義の方が便利である。

(337) 式は次の性質を持つ。

$$\frac{\delta\Omega}{\delta G(1',1)} = 0. \tag{339}$$

すなわち、G が微小に変化しても Ω は不変である。(339) 式は、Dyson 方程式 $\underline{G}^{-1} = \underline{G}^{(0)-1} - \underline{\Sigma}$ と (326) 式を用いて、以下のように示せる。

$$\sigma\beta\frac{\delta\Omega}{\delta G(1',1)} = \mathrm{Tr}\left\{-\frac{\delta\underline{\Sigma}}{\delta G(1',1)}(\underline{G}^{(0)-1} - \underline{\Sigma})^{-1} + \left[\frac{\delta\underline{\Sigma}}{\delta G(1',1)}\underline{G} + \underline{\Sigma}\frac{\delta\underline{G}}{\delta G(1',1)}\right]\right\} + \sigma\beta\frac{\delta\Phi}{\delta G(1',1)} = 0.$$

(339) 式を用いると、(337) 式が (336) 式の $\Omega_{\lambda=1}$ と等価であることを示すことができる。この目的のために、(337) 式で $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}} \to \lambda\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$ と置き換えたものを

$$Y_\lambda \equiv \frac{\sigma}{\beta}\mathrm{Tr}[\ln(-\underline{G}^{(0)-1} + \underline{\Sigma}_\lambda) + \underline{\Sigma}_\lambda\underline{G}_\lambda] + \Phi_\lambda, \tag{340}$$

で表し、以下、$Y_\lambda = \Omega_\lambda$ を証明する。まず、この Y_λ を λ で微分しよう。Y_λ の λ 依存性には、Φ_λ の n 次項における n 個の相互作用に由来する λ^n の項と、G_λ を通した依存性の二種類がある。しかし、停留性 (339) より、後者の寄与は考慮しなくてよい。そして、(i) (324) 式と (325) 式の n 次摂動項における因子 $-\sigma/2n\beta$ の違い、(ii) $\mathrm{d}\lambda^n/\mathrm{d}\lambda = n\lambda^n/\lambda$、および、(iii) (326) 式に注意すると、次式を得る。

$$\frac{\partial Y_\lambda}{\partial\lambda} = \frac{\partial\Phi_\lambda}{\partial\lambda} = -\frac{\sigma}{2\beta\lambda}\mathrm{Tr}\underline{\Sigma}_\lambda\underline{G}_\lambda = \frac{\partial\Omega_\lambda}{\partial\lambda}. \tag{341a}$$

このように、Y_λ は、λ に関して (336) 式の Ω_λ と同じ一階微分方程式を満たす。従って、もし初期値 $Y_0 = (\sigma/\beta)\mathrm{Tr}\ln(-\underline{G}^{(0)-1})$ が $Y_0 = \Omega_0$ を満たせば、任意の λ について $Y_\lambda = \Omega_\lambda$ が成立することになる。$Y_0 = \Omega_0$ を示すために、(310) 式の $G^{(0)-1}(1,1')$ を対角化する表示 $\phi_{\ell k}(1) \equiv \frac{1}{\sqrt{\beta}}\mathrm{e}^{-i\varepsilon_\ell\tau_1}\varphi_k(x_1)$ を採用する。ここで $\varphi_k(x_1)$ は (225) 式の固有関数であり、また ε_ℓ は (314) 式で定義されている。この規格直交化された固有関数を用い、完全性 $\sum_{\ell k}\phi_{\ell k}(1)\phi^*_{\ell k}(1') = \delta(1,1')$ に注意すると、(310) 式の $G^{(0)-1}(1,1')$ が、$\xi_k \equiv \epsilon_k - \mu$ を用いて次のように書けることがわかる。

$$G^{(0)-1}(1,1') = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty}\sum_k \phi_{\ell k}(1)(i\varepsilon_\ell - \xi_k)\phi^*_{\ell k}(1').$$

この表示における Y_0 の表式は、

$$Y_0 = \frac{\sigma}{\beta}\sum_\ell\sum_k \mathrm{e}^{i\varepsilon_\ell 0+}\ln(\xi_k - i\varepsilon_\ell)$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

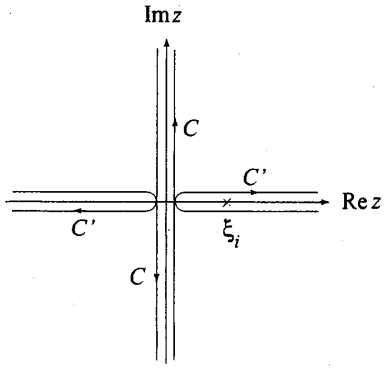


図 19: 複素 z 平面上の積分経路

で与えられる。ここで因子 $e^{i\varepsilon_\ell 0_+}$ は (338) 式における 1_+ の添え字に由来する。ε_ℓ が関数 $f(z) \equiv (e^{\beta z} - \sigma)^{-1}$ の一位の極であり、その留数が σ/β であることを用いると、n についての和は以下の複素積分に変換できる。

$$Y_0 = \int_C \frac{dz}{2\pi i} \sum_k \frac{e^{z0_+}}{e^{\beta z} - \sigma} \ln(\xi_k - z).$$

ここで C は虚軸の周りを反時計回りに回る図 19 の積分路を表す。(322) 式の辺りで詳しく述べたように、この虚軸に平行な経路 C は、Jordan の補助定理を用いて、実軸のまわりの経路 C' に変形できる。さらに、$(e^{\beta z} - \sigma)^{-1} = \frac{\sigma}{\beta} \frac{d}{dz} \ln(1 - \sigma e^{-\beta z})$ に注意して z に関して部分積分を行う。すると、C' の端からの寄与は消えることがわかる。最後に、C' 内の 1 位の極 ξ_k に留数の定理を用いる。以上の手順を経て Y_0 が次のように変形できる。

$$Y_0 = -\frac{\sigma}{\beta} \sum_k \int_{C'} \frac{dz}{2\pi i} e^{z0_+} \frac{\ln(1 - \sigma e^{-\beta z})}{z - \xi_k} = \frac{\sigma}{\beta} \sum_k \ln(1 - \sigma e^{-\beta \xi_k}) = \Omega_0. \tag{341b}$$

このようにして、$Y_0 = \Omega_0$ を示すことができた。(341) 式より、一般の $\lambda \geq 0$ について $Y_\lambda = \Omega_\lambda$ が成立することになる。そこで $\lambda = 1$ と置くことで、(337) 式の証明が完了した。

G　熱平衡状態におけるエントロピーの表式

(337) 式を用いると、熱平衡状態におけるエントロピー $S = -\partial\Omega/\partial T$ の厳密な表式が得られる [20, 21]。導出は後回しにしてまず結果を示すと、以下のようになる。

$$S = k_B \mathrm{Tr} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \left[-f \ln f + \sigma(1 + \sigma f) \ln(1 + \sigma f) \right] \left[\underline{A} \left(\underline{1} - \frac{\partial \mathrm{Re}\underline{\Sigma}^{\mathrm{R}}}{\partial \varepsilon} \right) + \underline{A}_\Sigma \frac{\partial \mathrm{Re}\underline{G}^{\mathrm{R}}}{\partial \varepsilon} \right]. \tag{342}$$

ここで $f(\varepsilon) \equiv (e^{\beta\varepsilon} - \sigma)^{-1}$ は Bose/Fermi 分布関数であり、$\underline{G}^{\mathrm{R}} = \underline{G}^{\mathrm{R}}(\varepsilon)$ は $G^{\mathrm{R}}(x_1, x_1'; \varepsilon)$ を要素とする行列、また、Tr は $x_1 = \mathbf{r}_1 \alpha_1$ を足とする行列の対角和 (積分) を表す。$\underline{G}^{\mathrm{R}}(\varepsilon)$ と $\underline{\Sigma}^{\mathrm{R}}(\varepsilon)$ は、それぞれ (319) 式および (328) 式から、$i\varepsilon_\ell \to \varepsilon + i0_+$ と解析接続して得られるいわゆる遅延関数である。さらに $\mathrm{Re}\underline{G}^{\mathrm{R}}$ と $\mathrm{Re}\underline{\Sigma}^{\mathrm{R}}$ は次式で定義されている。

$$\mathrm{Re}\underline{G}^{\mathrm{R}}(\varepsilon) \equiv \mathrm{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\underline{A}(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon'}, \qquad \mathrm{Re}\underline{\Sigma}^{\mathrm{R}}(\varepsilon) \equiv \underline{\Sigma}^{(\mathrm{HF})} + \mathrm{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{\underline{A}_\Sigma(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon'}. \tag{343}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

$\underline{G}^{\mathrm{R}}$ が行列のとき、$\mathrm{Re}\underline{G}^{\mathrm{R}}$ は必ずしも実数ではないことを注意しておく。

ここで、スピン自由度 α を無視し、さらに (262a) 式で $U(\mathbf{r})=0$ の場合を考える。すると、スペクトル関数 $A(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_1';\varepsilon)$ 等は、一様系の固有関数 $\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\equiv\mathcal{V}^{-1/2}\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ を用いて ($\mathcal{V}$ は系の体積)、

$$A(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_1';\varepsilon)=\sum_{\mathbf{p}}\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}_1)A(\mathbf{p},\varepsilon)\varphi_{\mathbf{p}}^{*}(\mathbf{r}_1')$$

と展開できる。これらの表式を (342) 式に代入し、$\mathcal{V}^{-1}$ をかけて $\mathbf{r}$ 積分を実行すると、次式が得られる。

$$\begin{aligned}\frac{S}{\mathcal{V}}=k_{\mathrm{B}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\bigl[-f\ln f+\sigma(1+\sigma f)\ln(1+\sigma f)\bigr]\\ \times\left\{A(\mathbf{p},\varepsilon)\left[1-\frac{\partial\mathrm{Re}\Sigma^{\mathrm{R}}(\mathbf{p},\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right]+A_{\Sigma}(\mathbf{p},\varepsilon)\frac{\partial\mathrm{Re}G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p},\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right\}.\end{aligned}\tag{344}$$

これは、(77) 式で $\phi\to f$ と置き換えたものに他ならない。このようにして、(77) 式が平衡統計力学と矛盾の無い表式であることがわかった。

(342) 式の導出に移ろう。まず、(337) 式を T 微分に便利な形に変形する。(315a) 式と (327) 式を (337) 式に代入し、(338) 式を考慮して τ_1 の対角和 (積分) を実行すると、次式が得られる。

$$\Omega=\frac{\sigma}{\beta}\sum_{\ell}\mathrm{Tr}\bigl\{\ln\bigl[\underline{H}^{(0)}+\underline{\Sigma}(i\varepsilon_\ell)-i\varepsilon_\ell\underline{1}\bigr]+\underline{\Sigma}(i\varepsilon_\ell)\,\underline{G}(i\varepsilon_\ell)\bigr\}\mathrm{e}^{i\varepsilon_\ell 0+}+\Phi.\tag{345}$$

ここで $\underline{G}(i\varepsilon_\ell)$ は $G(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)$ を要素とする行列を表し、また Tr は $x_1=\mathbf{r}_1\alpha_1$ を足とする行列の対角和を表す。この Φ と Ω は $\underline{G}(i\varepsilon_\ell)$ の汎関数と見直すことができる。そして、(326) 式と (339) 式に由来する次の性質を持つ。

$$\Sigma(x_1,x_1';i\varepsilon_\ell)=-\sigma\beta\frac{\delta\Phi}{\delta G(x_1',x_1;i\varepsilon_\ell)},\qquad\frac{\delta\Omega}{\delta G(x_1',x_1;i\varepsilon_\ell)}=0.\tag{346}$$

さらに、(341b) 式を導出した手続きを用いて、(345) 式を次のように変形する。

$$\begin{aligned}\Omega&=\int_{C'}\frac{\mathrm{d}z}{2\pi i}f(z)\mathrm{e}^{z0+}\mathrm{Tr}\bigl\{\ln\bigl[\underline{H}^{(0)}+\underline{\Sigma}(z)-z\underline{1}\bigr]+\underline{\Sigma}(z)\,\underline{G}(z)\bigr\}+\Phi\\&=\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}f(\varepsilon)\mathrm{Tr}\bigl\{\ln\bigl[\underline{H}^{(0)}+\underline{\Sigma}(\varepsilon_+)-\varepsilon_+\underline{1}\bigr]-\ln\bigl[\underline{H}^{(0)}+\underline{\Sigma}(\varepsilon_-)-\varepsilon_-\underline{1}\bigr]-\underline{A}(\varepsilon)\mathrm{Re}\underline{\Sigma}^{\mathrm{R}}(\varepsilon)\\&\quad-\underline{A}_{\Sigma}(\varepsilon)\mathrm{Re}\underline{G}^{\mathrm{R}}(\varepsilon)\bigr\}+\Phi.\end{aligned}\tag{347}$$

ここで、C' は図 19 に示した積分路であり、主値記号 P は Bose 分布関数の実軸上の極 $\varepsilon=0$ を除く必要から生じ、また、$\varepsilon_\pm\equiv\varepsilon\pm i0_+$ である。

(347) 式の右辺第一項は、T 微分を実行するのに適した形をしている。実際、(319) 式の Lehmann 表示を考慮すると、(345) 式あるいは (347) 式をスペクトル関数 $\underline{A}(\varepsilon)$ の汎関数と見直すことができる。そして、その $\Omega=\Omega[\underline{A}(\varepsilon)]$ は、明らかに

$$\frac{\delta\Omega}{\delta A(x_1',x_1;\varepsilon)}=0\tag{348}$$

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

を満たす。従って、(347) 式の T 微分を実行する際には、あらわな T 依存性、すなわち、$f(\varepsilon)$ の T 依存性のみを考慮すればよいことになる。

そこで、(325) 式の Φ も $\underline{A}$ と f を用いた表式に書き換えておく。(325) 式に (323) 式を代入し、(279) 式を考慮して τ 積分を実行する。すると、まず Hartree-Fock 項に対して、次の表式が得られる。

$$\Phi^{(\mathrm{HF})} = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_1' V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\varepsilon'}{2\pi} f(\varepsilon) f(\varepsilon') \times [A(x_1, x_1; \varepsilon) A(x_1', x_1'; \varepsilon') + \sigma A(x_1, x_1'; \varepsilon) A(x_1', x_1; \varepsilon')]. \tag{349}$$

同様に、(325) 式の 2 次摂動項は、以下のように書き換えられる。

$$\Phi^{(2)} = -\frac{1}{4}\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_1' \int \mathrm{d}x_2 \int \mathrm{d}x_2' V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1') V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\varepsilon_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\varepsilon_1'}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\varepsilon_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\varepsilon_2'}{2\pi} \times \big[A(x_1, x_2; \varepsilon_1) A(x_2, x_1; \varepsilon_2) A(x_1', x_2'; \varepsilon_1') A(x_2', x_1'; \varepsilon_2') + \sigma A(x_1, x_2; \varepsilon_1) A(x_2, x_1'; \varepsilon_2) \times A(x_1', x_2'; \varepsilon_1') A(x_2', x_1; \varepsilon_2')\big] J(\varepsilon_1, \varepsilon_1', \varepsilon_2, \varepsilon_2'). \tag{350}$$

ここで、$J(\varepsilon_1, \varepsilon_1', \varepsilon_2, \varepsilon_2')$ は次の最初の積分式で定義され、以下のように変形できる。

$$\begin{aligned} J(\varepsilon_1, \varepsilon_1', \varepsilon_2, \varepsilon_2') &\equiv \frac{(1+\sigma f_1)(1+\sigma f_1') f_2 f_2'}{\beta} \int_0^{\beta} \mathrm{d}\tau_1 \int_0^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_2 \, \mathrm{e}^{-(\tau_1 - \tau_2)(\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2')} + (1 \leftrightarrow 2) \\ &= \frac{(1+\sigma f_1)(1+\sigma f_1') f_2 f_2'}{\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2'} \left[1 + \frac{\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2')} - 1}{\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2')}\right] + (1 \leftrightarrow 2) \\ &= \frac{(1+\sigma f_1)(1+\sigma f_1') f_2 f_2' - f_1 f_1' (1+\sigma f_2)(1+\sigma f_2')}{\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2'}. \end{aligned} \tag{351a}$$

ここで、$f_1 = f(\varepsilon_1)$, $f_1' = f(\varepsilon_1')$ などであり、また、$(1 \leftrightarrow 2)$ は直前の項から添え字 1 と 2 を入れ替えることで得られる表式を意味している。最後の表式を得る際には、

$$(1+\sigma f_1)(1+\sigma f_1') f_2 f_2' \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2')} = f_1 f_1' (1+\sigma f_2)(1+\sigma f_2')$$

を用いた。上の $J(\varepsilon_1, \varepsilon_1', \varepsilon_2, \varepsilon_2')$ は $\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2' = 0$ で正則であることを注意しておく。これは、最初の積分による定義式からも明らかであり、また、途中の式においても、分子を $\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2' = 0$ から Taylor 展開することで容易に確かめられる。従って、J は以下のようにも表せる。

$$J(\varepsilon_1, \varepsilon_1', \varepsilon_2, \varepsilon_2') = \mathrm{P}\frac{(1+\sigma f_1)(1+\sigma f_1') f_2 f_2'}{\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2'} - \mathrm{P}\frac{f_1 f_1' (1+\sigma f_2)(1+\sigma f_2')}{\varepsilon_1 + \varepsilon_1' - \varepsilon_2 - \varepsilon_2'}. \tag{351b}$$

上で得られた $\Phi^{(\mathrm{HF})}$ と $\Phi^{(2)}$ の表式を $f(\varepsilon)$ で汎関数微分する。その際、J として (351b) 式を用いると便利である。そして、得られた表式を (329) 式と (330) 式と比較すると、ここで考察した摂動の 2 次までの範囲で、以下の関係式が成立していることがわかる。

$$\frac{\delta \Phi}{\delta f(\varepsilon)} = \frac{1}{2\pi} \mathrm{Tr} \underline{A}(\varepsilon) \mathrm{Re} \underline{\Sigma}^{\mathrm{R}}(\varepsilon). \tag{352}$$

これは、(323) 式と (326) 式に由来する一般的関係式で、より高次まで成立していることを確認できる [20, 21]。

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

(347), (348), (352) 式より、$S=-\partial\Omega/\partial T$ が次のように得られる。

$$S=-\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{2\pi}\frac{\partial f}{\partial T}\mathrm{Tr}\big\{\ln\big[\underline{H}^{(0)}+\underline{\Sigma}(\varepsilon_+)-\varepsilon_+\underline{1}\big]-\ln\big[\underline{H}^{(0)}+\underline{\Sigma}(\varepsilon_-)-\varepsilon_-\underline{1}\big]-\underline{A}_\Sigma(\varepsilon)\mathrm{Re}\underline{G}^{\mathrm{R}}(\varepsilon)\big\}.$$

さらに、$\partial f/\partial T=-(\partial/\partial\varepsilon)k_{\mathrm{B}}[-f\ln f+\sigma(1+\sigma f)\ln(1+\sigma f)]$ を代入し、ε についての部分積分を実行して変形すると、最終的に (342) 式が得られる。その際、Bose 分布の $-f\ln f+\sigma(1+\sigma f)\ln(1+\sigma f)$ における $\varepsilon=0$ の特異性は弱い対数的な発散であることを考慮し、P 記号を取り除いた。

謝辞

本稿の執筆をお勧め頂いた京都大学基礎物理学研究所の早川尚男氏に感謝する。また、大学院生の近藤佳之氏からは本稿に対する貴重なコメントを頂いた。ここにお礼申し上げる。

参考文献

[1] L. Boltzmann, Wiener Berichte **63** (1872), 275. 日本語訳が、物理学古典論文業書 6「統計力学」(東海大学出版会, 1970) に収められている。

[2] L. Boltzmann, Wiener Berichte **76** (1877), 373. 日本語訳が、物理学古典論文業書 6「統計力学」(東海大学出版会, 1970) に収められている。

[3] J. W. Gibbs, *Elementary principles in statistical mechanics* (Yale University Press, New Haven, 1902).

[4] 例えば、戸田盛和, 久保亮五編, 「統計物理学」(岩波書店, 1972) 参照。

[5] 例えば、M. C. Cross, P. C. Hohenberg, Rev. Mod. Phys. **65** (1993), 851 参照。

[6] L. P. Kadanoff, G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, New York, 1962).

[7] T. Matsubara, Prog. Theoret. Phys. **14** (1955), 351.

[8] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I.E. Dzyaloshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1963).

[9] N. N. Bogoliubov, J. Phys. (U.S.S.R.) **10** (1946), 256, 265.

[10] N. N. Bogoliubov, in *Studies in Statistical Mechanics*, edited by J. de Boer and G. E. Uhlenbeck (North-Holland, Amsterdam, 1962) vol. 1, p. 1. ロシアにおける量子系への拡張の歴史と文献に関しては、この参考文献の Translater's Foreward に詳しい。

[11] G. Baym, Phys. Rev. **127** (1962), 1391.

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

[12] 例えば、C. Cercignani, *The Boltzmann equation and its applications* (Springer-Verlag, New York, 1988) 参照。

[13] L. V. Keldysh, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47** (1964), 1515 [Sov. Phys. JETP **20** (1965), 1018].

[14] D. C. Langreth, in *Linear and Nonlinear Electron Transport in Solids*, edited by J. T. Devreese and V. E. van Doren (Plenum Press, New York, 1976) p. 3.

[15] J. Rammer, H. Smith, Rev. Mod. Phys. **58** (1986), 323.

[16] H. Haug, A. -P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer-Verlag, Berlin, 1998) Sec. 7.

[17] J. Rammer, *Quantum Field Theory of Non-equilibrium States* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).

[18] Yu. B. Ivanov, J. Knoll, D. N. Voskresensky, Nucl. Phys. A **672** (2000), 313.

[19] W. Botermans and R. Malfliet, Phys. Rep. **198** (1990), 115.

[20] T. Kita, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999), 3740.

[21] T. Kita, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006), 114005.

[22] J. M. Luttinger and J. C. Ward, Phys. Rev. **118** (1960), 1417.

[23] 例えば、A. C. Hewson, *The Kondo problem to heavy fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993) 参照。

[24] エントロピーを基礎とする熱力学再構成の試みとしては、清水明、「熱力学の基礎」（東京大学出版会, 2007 年）参照。

[25] 例えば、I. Prigogine, Thermodynamics of Irreversible Processes (Charles C Thomas, Springfield, 1955) 参照。

[26] 例えば、阿部龍蔵、「統計力学」（東京大学出版会, 1992 年）参照。

[27] J. Orban, A. Bellemans, Phys. Lett. **24**A (1967), 620.

[28] 例えば、上田正仁, 日本物理学会誌 **53** (1998), 663 参照。

[29] 例えば、J. Lebowitz, Phys. Today **46** (1993), 32 参照。

[30] A. I. Larkin and Yu. B. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **68** (1975), 1915 [Sov. Phys. JETP **41** (1975), 960].

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

[31] E. P. Wigner, Phys. Rev. **40** (1932), 749.

[32] H. Weyl, *The Theory of Groups and Quantum Mechanics* (Dover, New York, 1931).

[33] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully and E. P. Wigner, Phys. Rep. **106** (1984), 121.

[34] J. E. Moyal, Proc. Cam. Phil. Soc. **45** (1949), 99.

[35] H. J. Groenewold, Physica **12** (1946), 405.

[36] G. M. Carneiro and C. J. Pethick, Phys. Rev. B **11** (1975), 1106.

[37] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971) p. 111.

[38] R. E. Prange and L. P. Kadanoff, Phys. Rev. **134** (1964), A566.

[39] G. Eilenberger, Z. Phys. **214** (1968), 195.

[40] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, in *Nonequilibrium Superconductivity Vol. 12*, ed. by D. N. Langenberg and A. I. Larkin (Elsevier, Amsterdam, 1986) p. 493.

[41] T. Kita, Phys. Rev. B **64** (2001), 054503.

[42] J. W. Serene and D. Rainer, Phys. Rep. **101** (1983), 221.

[43] R. L. Stratonovich, Dok. Akad. Nauk SSSR **1** (1956), 72 [Sov. Phys. Dolkady **1** (1956), 414].

[44] S. Fujita, *Introduction to Non-Equilibrium Quantum Statistical Mechanics* (W. B. Saunders, Philadelphia, 1966).

[45] M. Levanda and V. Fleurov, Ann. Phys. **292** (2001), 199.

[46] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **19** (1964), 2127.

[47] S. Onoda, N. Sugimoto and N. Nagaosa, Prog. Theor. Phys. **116** (2006), 61.

[48] O. T. Serimaa, J. Javanainen and S. Varró, Phys. Rev. A **33** (1986), 2913 の Appendix 参照.

[49] エリ・デ・ランダウ、イェ・エム・リフシッツ、「流体力学」(竹内均訳、東京図書、1970 年)

[50] S. Chapman and T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 1990).

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

[51] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss and R. B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids* (Wiley, New York, 1954).

[52] T. Kita, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006), 124005.

[53] エリ・デ・ランダウ、イェ・エム・リフシッツ、「力学」(広重徹、水戸巌訳、増訂第3版、東京図書、1974年) §18.

[54] 浅野啓三、永尾汎、「群論」(岩波全書、1965年) §4。

[55] 例えば、猪木慶治、川合光、「量子力学」(講談社、1994年) 参照。

[56] 例えば、齋藤正彦、「線型代数入門」(東京大学出版会、1966年) 参照。

[57] C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34** (1962), 694.

[58] G. C. Wick, Phys. Rev. **80** (1950), 268.

[59] C. Bloch and C. T. de Dominicis, Nucl. Phys. **7** (1958), 459.

[60] M. Gaudin, Nucl. Phys. **15** (1960), 89.

[61] W. Kohn and J. M. Luttinger, Phys. Rev. **118** (1960), 41。

NII-Electronic Library Service