

# 道具としての場の量子論

文責： Physics Lab. 2023 統計物理班 星野真宏

2023年5月11日

# 目次

1	なぜ場の量子論か	2
2	Green 関数	4
2.1	場の演算子	4
2.2	運動量表示	5
2.3	Green 関数の性質	6
2.4	温度 Green 関数	9
2.5	摂動論	11
2.6	自己エネルギー	16
3	電子ガス	20
3.1	RPA 近似	20
4	電子-フォノン相互作用	24
4.1	フォノンの記述	24
4.2	電子-フォノン相互作用	25
4.3	フォノンの Green 関数	27
5	超伝導	30
5.1	Cooper 不安定性	30
5.2	BCS 理論	32
5.3	Meissner 効果とゲージ対称性	34
付録 A	第 2 量子化	40
A.1	フォック空間の構成	40
A.2	生成消滅演算子の定義	41
A.3	生成消滅演算子の活用	45
A.4	物理量の具体的な表現方法	46
	参考文献	50

# 1 なぜ場の量子論か

世の中の物質は基本的には多体系であり、その性質は構成要素間の相互作用によって決まってくる。少なくとも我々人間が世界を感知できるのは外界と感覚器官が相互作用をした結果であり、もし相互作用がないのであれば我々にとっては世界は存在しないも同然となってしまう。よって自然界のルールを調べる学問である物理学は、必然的に、相互作用をいかに記述して解析するかについて悩まなければならないのだ。もちろん物質の構成要素間の相互作用が“あまり大きくない”と仮定して計算することでおおまかな性質については理解できる。しかし、より精密に、より豊かな性質を調べるためにはやはり相互作用の効果を考える必要が出てくるだろう。

本記事のタイトルには“量子論”とあるが、古典論においても多体系の相互作用を扱うための理論は存在する。相互作用がある系のうち最初に習うのは磁性体を記述するモデルである Ising モデル [1, 2] であろうか。モデル自体は簡明ながら、それまでの同じ系を  $N$  個集めただけのモデルとはかなり異なった解析の方法を要したことが印象的である。他の例としては古典気体のクラスター展開 [3, 4] などがある。これは気体粒子の間の相互作用 (レナード-ジョーンズポテンシャルやクーロンポテンシャルなど) を考慮して、状態方程式の理想気体からのずれを計算する理論である。クラスター展開で登場するダイアグラムを用いた摂動計算の方法は場の量子論におけるファインマンダイアグラムの方法と通ずるものがある。さらに例を挙げると、輸送現象を説明するボルツマン方程式 [5, 6] などは相互作用の効果を (緩和時間近似などを通して) 1 体の問題に取り込む (半) 古典的な方法である。

しかし物質の性質は主に電子の振る舞いから決まるのであり、それを正確に扱うとするとどうしても量子論が必要になる。特に超伝導などの面白い物性が発現するのは量子効果の効いてくる低温においてである。そのような主に低温での物性を探るために用いられる基本的な道具が場の量子論である。場の量子論は多体系をそのまま“多くの粒子の集まり”として記述する代わりに、粒子がポコポコ点いたり消えたりするものとしての“場”を扱い、その量子論を議論するのである。ここでの“場”とは、電光掲示板が一つ一つの構成要素 (電球) を持ちながら、全体としてはある一つの表示を作るというイメージに近いものである [7]。場の概念を用いた系の記述は、少なくとも多体系をそのまま扱う理論よりかは、たいてい扱いやすいものになっている。

場の量子論においては Green 関数と呼ばれるものを計算することが目標となる。本記事を読み進めていくことでなぜ Green 関数を求めたいのかはだんだんとわかってくるが、簡単に言えば Green 関数さえわかれば系の性質がほとんどわかるようになっているからだ。場の量子論は素粒子・原子核の分野においても基本的な道具となっている。それらの分野では Green 関数は粒子同士の散乱断面積<sup>\*1</sup>や粒子の質量や寿命について教えてくれるものである [8, 9]。物質の性質を探る物性理論においても Green 関数は似たような働きをする。例えば物質中の電子は相互作用によりその質量を変え、“衣をまとったような状態”<sup>\*2</sup>になるが、その質量や寿命の変化を Green 関数を通して計算できる。また、相互作用による熱力学的な自由エネルギーの変化分も計算できる。さらには外場に対する応答 (線形応答) も Green 関数がわかればわかるようになっている。

Green 関数を求めるための系統的な摂動計算の方法が確立されているのも場の量子論を使う大きなメリットである。Green 関数を求めるには、相互作用があまり大きくない場合は摂動計算に頼ることになる。摂動の各項はファインマンダイアグラムという図形を描くことで係数まで含めて決定することができる。よって素朴にはファインマンダイアグラムを延々と描き続けることでいくらかでも高次の寄与を求めることができると考えられる。しかしそのような計算は大変なので、Dyson 方程式という Green 関数の積分方程式を近似的に解くことが一般的である。Dyson 方程式を解くことで、近似を入れつつも摂動の高次の寄与まで考慮することができるのだ<sup>\*3</sup>。

\*1 粒子同士を衝突させたときにどの方向にどれだけの運動量で散乱されるかという量。

\*2 このような状態のものを“準粒子”とよぶ、これは粒子そのものではないが粒子のように扱うことができる。

\*3 これだけでは場の量子論の摂動論の何が嬉しいのかピンとこないかもしれない。実際、筆者は電子間のクーロン力の“遮蔽効果”の

本記事では物性の問題において Green 関数を積極的に用いて得た結果について解説する。以下、本記事の構成について述べる。

第 2 章では Green 関数の基本的な性質と摂動論による計算について解説する。場の演算子を用いた記述を復習したのち、様々な Green 関数 (因果, 先進, 遅延, 温度) の間の関係について論じる。次に“虚時間”という一見動機がよくわからない概念を用いる“温度 Green 関数”の意義について考える。そして温度 Green 関数を摂動論を用いた求める方法についてまとめる。

第 3 章では前章で解説した Green 関数を用いて電子ガス (クーロン相互作用をする多体系) の遮蔽効果とプラズマ振動について見ていく。温度 Green 関数を用いると必ずと言っていいほど出てくる松原振動数についての和を複素積分を用いて評価する方法について解説する。

第 4 章では電子-フォノンの間の相互作用がある系について扱う。固体の振動を量子化したものであるフォノンは固体の性質に大きな影響を与える。次章で述べる超伝導も、発生の機構は電子とフォノンの間の相互作用であると考えられている。前章までの同一粒子間の相互作用から、異種間の相互作用に変わることによって、どのような変更点があるのかに注目する。

第 5 章では超伝導の微視的な理論について解説する。超伝導とは金属の電気抵抗が低温において急激に 0 になる現象として広く知られている。現在ではこの現象に量子論から出発して微視的に説明を与えることができる<sup>\*4</sup>。この章ではその微視的な理論について Green 関数を用いる方法で簡単に述べる。

本記事は筆者が学部 3 年次にゼミや自習で勉強したことをもとに書いたものである。扱った話題についてわかりやすく書かれた教科書は正直なかったもので、様々な文献から抽出して練り直して出来上がったものが本記事である。そんな中でも、最も参考にした文献をあげるとするならば阿部龍蔵の『統計力学』(東京大学出版会, 1992) [4] である。しかしこの教科書も超伝導について記述がなかったりとベストなものではないように思われる。

本記事のタイトルは“道具としての場の量子論”だが当然場の量子論のすべてを解説しているわけではない。むしろここで解説した摂動論よりも面白い話題がたくさんある理論だと筆者は考えている<sup>\*5</sup>。もちろん、場の量子論における摂動論も重要な問題で、例えば展開が漸近級数という (テーラー展開とは異なる性質の) ものになっていてその収束性をきちんと議論すると色々と問題が出てきたりする [10]。ともかく、本記事は物性物理における場の量子論の役割のごく一部を説明しただけのものである点をご了承していただきたい<sup>\*6</sup>。

---

計算を見ることで Dyson 方程式のありがたみを初めて理解した。この計算では摂動の最低次の項が発散してしまうのだが、任意の次数まで取り込む計算をすることで有限の結果を得ることができるのだ。この問題については第 3 章で解説する。

\*4 高温超伝導などでは未知の部分も多々あるようだが。

\*5 筆者は摂動論が元々好きではなかったのだが、気づいたらこのような記事を書いてしまっていた。

\*6 特に、本記事で用いた演算子形式と並行して経路積分でも同じ内容を解説したかったが、時間の都合上断念している。

## 2 Green 関数

### 2.1 場の演算子

多粒子系の量子力学においては**場の演算子**, より一般には**生成消滅演算子**, を用いた系の記述が最も便利である. 1 粒子系の量子力学では, シュレディンガー方程式により「粒子が 1 つ存在する状態」を時々刻々追っていくことができた. 一方, 多粒子系の量子力学では次のような事情がある.

- 粒子間の相互作用により, 粒子が生成消滅をする. つまり粒子数が変動しうる.
- 1 粒子系と同じ扱いをしたければ, マクロな数の粒子 ( $N \sim 10^{23}$ ) の分だけ演算子を用意しなければならない. そして物理量を求めるためにはそれを対角化しなければならない.
- 同種粒子の系では, 状態変数の入れ替えに対する対称性を課さなければならない.

よって, 多粒子系の場合は 1 粒子系の場合と同じような扱いをするわけにはいかない. そこで登場するのが場の演算子であり, 「多粒子系=場」という概念である.

場の演算子  $\psi_\alpha^\dagger(x)$  ( $\psi_\alpha(x)$ ) は位置  $x \in \mathbb{R}^3$  にスピン  $\alpha$  の粒子を 1 つ生成 (消滅) させる働きをする. (スピンのない系を考える際にはスピン変数  $\alpha$  などは無視して同様に議論できる.) つまり, 系には真空状態  $|0\rangle$  があり, これに場の演算子を作用させた状態  $\psi_\alpha^\dagger(x)|0\rangle$  は, 通常の 1 粒子の量子力学で見るとような粒子が 1 個 (位置  $x$ , スピン  $\alpha$  をもって) 存在する状態を表す. 同様に, 位置  $x$  と  $y$  にそれぞれスピン  $\alpha$  と  $\beta$  を持つ粒子が存在する状態は  $\psi_\alpha^\dagger(x)\psi_\beta^\dagger(y)|0\rangle$  と表すことができる.

以下, 場の演算子を用いた多粒子系の系の記述についてまとめる [11, 12]. 証明などについては [付録 A](#) を参照されたい.

場の演算子は次の交換関係を満たす.

$$[\psi_\alpha(x), \psi_\beta^\dagger(x')]_{-\zeta} := \psi_\alpha(x)\psi_\beta^\dagger(x') - \zeta\psi_\beta^\dagger(x')\psi_\alpha(x) = \delta(x-x')\delta_{\alpha,\beta}, \quad (2.1a)$$

$$[\psi_\alpha(x), \psi_\beta(x')]_{-\zeta} = 0, \quad (2.1b)$$

$$[\psi_\alpha^\dagger(x), \psi_\beta^\dagger(x')]_{-\zeta} = 0. \quad (2.1c)$$

ここで  $\delta(x-x')$  はディラックのデルタ関数,  $\delta_{\alpha,\beta}$  はクロネッカーのデルタである.  $\zeta$  は  $\zeta = \pm 1$  を値にとり,  $+1$  がボソン,  $-1$  がフェルミオンの場合に対応する. つまり,  $[A, B]_- := AB - BA$  は通常の交換関係で,  $[A, B]_+ := AB + BA$  は反交換関係である.

場の演算子を用いて多粒子系のハミルトニアンを記述することができる. 2 体間の相互作用まで含んだハミルトニアンは以下ようになる.

$$H = \sum_\alpha \int d^3x \psi_\alpha^\dagger(x) \left[ -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi_\alpha(x) + \frac{1}{2} \sum_\alpha \int d^3x \int d^3x' \psi_\alpha^\dagger(x) \psi_\alpha^\dagger(x') U(x-x') \psi_\alpha(x') \psi_\alpha(x). \quad (2.2)$$

ここで第 1 項は運動エネルギー, 第 2 項は 1 粒子が受けるポテンシャル, 第 3 項は 2 体間の相互作用を表す. 2 体間のポテンシャルを位置の差だけの関数とするのは, 系が並進対称性を持つことを仮定していることに相当する. また, スピンを変えるような過程は存在しないとした.

ハミルトニアン他に重要な演算子としては, 数密度演算子  $\rho(x)$ , 粒子数演算子  $N$  などが挙げられる. これらの演算子は場の演算子を用いて次のように表される.

$$\rho(x) = \sum_\alpha \psi_\alpha^\dagger(x) \psi_\alpha(x), \quad (2.3)$$

$$N = \sum_\alpha \int d^3x \psi_\alpha^\dagger(x) \psi_\alpha(x) = \int d^3x \rho(x). \quad (2.4)$$



数密度演算子は、位置  $x$  にある粒子の数密度を表し、粒子数演算子はその系の粒子数を表す。

系の時間発展は 1 粒子の量子力学と同じように、ある状態  $|\Psi\rangle$  がシュレディンガー方程式  $i\partial_t|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle$  に従うとして記述されるが、ハイゼンベルグ表示で演算子のダイナミクスに従うことも多い。場の演算子のハイゼンベルグ表示は以下で定義される。

$$\begin{cases} \psi_\alpha(x, t) := e^{iHt}\psi_\alpha(x)e^{-iHt} \\ \psi_\alpha^\dagger(x, t) := e^{iHt}\psi_\alpha^\dagger(x)e^{-iHt} \end{cases} \quad (2.5)$$

わかりにくいのが、ハイゼンベルグ表示かどうかは引数に  $t$  があるかないかで区別することにする。この定義式から、ハイゼンベルグ表示した場の演算子は次の微分方程式に従うことが示される。

$$\begin{aligned} & i\frac{\partial\psi_\alpha(x, t)}{\partial t} \\ &= [\psi_\alpha(x, t), H]_- \\ &= \left[-\frac{1}{2m}\nabla^2 + V(x)\right]\psi_\alpha(x, t) + \sum_{\alpha, \beta} \int d^3x' \psi_\beta^\dagger(x', t)U(x-x')\psi_\beta(x', t)\psi_\alpha(x, t). \end{aligned} \quad (2.6)$$

これは場の演算子  $\psi_\alpha(x, t)$  が (非線形な項を含む) シュレディンガー方程式にしたがっているように見え、量子力学の重ね合わせの原理に反するよう思われるが、場の演算子は波動関数とは異なるのでなんの問題もない。

## 2.2 運動量表示

前節で見てきた場の演算子による系の記述は、フーリエ変換をして運動量表示で見ることがもできる。多くの場合運動量表示の方が計算が楽なので、ここで説明しておく。

運動量表示において基本となる生成消滅演算子は、場の演算子と次の関係にある<sup>\*7</sup>。

$$\begin{aligned} a_{k\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3x e^{-ikx}\psi_\alpha(x) & \leftrightarrow & \psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{ikx} a_{k\alpha} \\ a_{k\alpha}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3x e^{ikx}\psi_\alpha^\dagger(x) & \leftrightarrow & \psi_\alpha^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{-ikx} a_{k\alpha}^\dagger. \end{aligned} \quad (2.7)$$

ここで  $V$  は系の体積であるが、 $V \rightarrow \infty$  の極限で  $k$  の和は積分になり、変換は次のように書ける。

$$a_{k\alpha} = \int d^3x e^{-ikx}\psi_\alpha(x), \quad \psi_\alpha(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{ikx} a_{k\alpha}. \quad (2.8)$$

このように定義した運動量表示の生成消滅演算子  $a_{k\alpha}^\dagger$  ( $a_{k\alpha}$ ) は運動量  $k$  とスピン  $\alpha$  をもった粒子 1 個を生成 (消滅) させる働きをする演算子だと解釈できる。

生成消滅演算子は次の交換関係を満たす。

$$[a_{k\alpha}, a_{k'\beta}^\dagger]_{-\zeta} = a_{k\alpha}a_{k'\beta}^\dagger - \zeta a_{k'\beta}^\dagger a_{k\alpha} = \delta_{k, k'}\delta_{\alpha, \beta}, \quad (2.9a)$$

$$[a_{k\alpha}, a_{k'\beta}]_{-\zeta} = 0 \quad (2.9b)$$

$$[a_{k\alpha}^\dagger, a_{k'\beta}^\dagger]_{-\zeta} = 0 \quad (2.9c)$$

これらの交換関係は場の演算子の満たす交換関係 (2.1) とフーリエ変換 (2.7) から導かれる。

運動量表示において、前節で考えたハミルトニアン (2.2) は次のように書き表すことができる。

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k, \alpha} \left[ \frac{k^2}{2m} a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + \frac{1}{V} \sum_{k'} \tilde{V}(k-k') a_{k\alpha}^\dagger a_{k'\alpha} \right] \\ &+ \frac{1}{2V} \sum \delta(k_1 + k_2 - k_3 - k_4) \tilde{U}(k_1 - k_4) a_{k_1\alpha}^\dagger a_{k_2\alpha'}^\dagger a_{k_3\alpha'} a_{k_4\alpha}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

<sup>\*7</sup> 運動量表示における生成消滅演算子はボソンの場合は  $a, a^\dagger$ 、フェルミオンの場合は  $c, c^\dagger$  を使う傾向があるように思われる。この時点では記号で区別はしていない。

2行目の和  $\sum$  は  $k_1, k_2, k_3, k_4, \alpha, \alpha'$  に関する和である. ここで  $\tilde{V}(k), \tilde{U}(k)$  はそれぞれ  $V(x), U(x)$  のフーリエ成分で, 次式で定義される.

$$\tilde{V}(k) := \int d^3x e^{-ikx} V(x), \quad (2.11a)$$

$$\tilde{U}(k) := \int d^3x e^{-ikx} U(x). \quad (2.11b)$$

このように表したハミルトニアン第1項は運動エネルギー, 第2項は1粒子が受けるポテンシャル, 第3項は2体間の相互作用を表す. 第3項はさらに  $k$  の和をもう一回とれるが, 見やすさのため残しておいた. 式中のデルタ関数  $\delta(k_1 + k_2 - k_3 - k_4)$  (離散の  $k$  の場合はクロネッカーのデルタ) はまさに運動量保存則を表している. つまり消滅する粒子の運動量  $k_3, k_4$  の和と, 生成する粒子の運動量  $k_1, k_2$  の和が等しいということである.

自由粒子の場合は生成消滅演算子のハイゼンベルグ表示が簡単に求まることをみよう. 自由粒子のハミルトニアン  $H_0$  とハイゼンベルグ表示した生成消滅演算子を次で定義する.

$$H_0 = \sum_{k,\alpha} \varepsilon_k a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} \quad \left( \varepsilon_k := \frac{k^2}{2m} \right), \quad (2.12)$$

$$a_{k\alpha}(t) := e^{iH_0 t} a_{k\alpha} e^{-iH_0 t}. \quad (2.13)$$

ここからハイゼンベルグの運動方程式を立てて, 生成消滅演算子の交換関係を用いて計算をすると,

$$\begin{aligned} i \frac{\partial a_{k\alpha}(t)}{\partial t} &= e^{iH_0 t} [a_{k\alpha}, H_0]_- e^{-iH_0 t} \\ &= \varepsilon_k a_{k\alpha}(t), \end{aligned}$$

$$\implies a_{k\alpha}(t) = e^{-i\varepsilon_k t} a_{k\alpha}(0) = e^{-i\varepsilon_k t} a_{k\alpha}, \quad (2.14a)$$

$$\implies a_{k\alpha}^\dagger(t) = e^{i\varepsilon_k t} a_{k\alpha}^\dagger, \quad (2.14b)$$

のように具体的に  $t$  依存性を見ることが出来る. この結果はボソンでもフェルミオンでも成立するが, 自由粒子の場合のみ正しいことに注意する. 物理的には, 自由粒子は運動量が一定であり, 運動量  $k$  の1粒子状態  $a_{k\alpha}^\dagger(t) |0\rangle$  は位相の変化しか受けないということである.

多体系の量子論では状態は粒子数の決まっていないフォック空間の元で表されるため, 有限温度での物理量を計算するにはグランドカノニカル分布を考えるのが都合がよい. そうでなければ常に粒子数演算子  $N$  の期待値が与えられた粒子数  $N_0$  に等しいという条件  $\langle N \rangle = N_0$  つきで物理量を計算しないといけない煩わしさがある. グランドカノニカル分布を考える際にはあらかじめハミルトニアンに  $-\mu N$  の項を付け加えておくことにする. ここから先の一般論では次のようなハミルトニアンを念頭に議論を進める.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= H_0 - \mu N = \sum_{k,\alpha} (\varepsilon_k - \mu) a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} = \sum_{k,\alpha} \xi_k a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha}, \\ \mathcal{H} &= H_0 - \mu N + H' = \mathcal{H}_0 + H', \\ H' &= \frac{1}{2V} \sum \delta(k_1 + k_2 - k_3 - k_4) \tilde{U}(k_1 - k_4) a_{k_1\alpha}^\dagger a_{k_2\alpha'}^\dagger a_{k_3\alpha'} a_{k_4\alpha}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

$\mathcal{H}_0$  が化学ポテンシャルを入れた無摂動ハミルトニアンで,  $H'$  は2体相互作用を表す摂動項である. ここで化学ポテンシャルから測ったエネルギーを  $\xi_k := \varepsilon_k - \mu$  と定義した.

### 2.3 Green 関数の性質

多体系の量子論では物理量は生成消滅演算子によって表されるが, 実験との比較が可能なのはそれらの期待値:

$$\langle A(t)B(t') \rangle, \quad (2.16)$$

であろう。考えている系が絶対零度であればこの期待値は真空期待値であり、熱平衡状態であれば熱平均である。また、付録 A でも述べるように、種々の生成消滅演算子は互いに線形変換で結びつくので、実際には場の演算子や運動量の生成消滅演算子の期待値を考えればよい。そこで、次のような量を計算することが目標となる。

$$\begin{aligned} G^C(x, t, \alpha; x', t', \alpha') &:= -i \text{Tr} \left[ e^{\beta(\Omega - \mathcal{H})} \mathbb{T} \psi_\alpha(x, t) \psi_{\alpha'}^\dagger(x', t') \right] \\ &= -i \langle \mathbb{T} \psi_\alpha(x, t) \psi_{\alpha'}^\dagger(x', t') \rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

これは因果 Green 関数 (Causal Green function) と呼ばれる Green 関数である。ここで、 $\langle \dots \rangle = \text{Tr} [e^{\beta(\Omega - \mathcal{H})} \dots]$  はグランドカノニカル分布による熱平均であり、グランドポテンシャル  $\Omega$  は  $e^{-\beta\Omega} := \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}}]$  により定義される。また、 $\mathbb{T}$  の記号は時間順序積で、ハイゼンベルグ表示 (もしくは相互作用表示) の演算子を以下のように並べ替える働きをする。

$$\begin{aligned} \mathbb{T} A(t) B(t') &= \begin{cases} A(t) B(t') & t > t' \\ \zeta B(t') A(t) & t' > t \end{cases} \\ &= A(t) B(t') \theta(t - t') + \zeta B(t') A(t) \theta(t' - t). \end{aligned} \quad (2.18)$$

つまり、演算子を右から順に時間が早いものを並べていき、その際フェルミオン ( $\zeta = -1$ ) の演算子は符号を入れ替える働きをする。上式 2 行目では階段関数  $\theta(t)$  を用いた表現を示した。階段関数は次のように定義される不連続な関数であり、その微分はデルタ関数になる。

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 1/2 & t = 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}. \quad (2.19)$$

因果 Green 関数の物理的な意味について考える。たとえば  $t > t'$  のとき、 $G^C(x, t, \alpha; x', t', \alpha')$  はスピン  $\alpha'$  をもった粒子が位置  $x'$  で時刻  $t'$  に生成し、それが時刻  $t$  でスピン  $\alpha$ 、位置  $x$  に見出されるという過程の熱平均である。 $t' > t$  のときは逆の過程についての熱平均となる。つまり、因果 Green 関数は 1 粒子系の量子力学でいうところのプロパゲーター ( $K(x, t; x', t') = \langle x, t | x', t' \rangle$ 、状態間の遷移の確率振幅) のようなものである。

自由粒子の場合は因果 Green 関数は簡単に計算ができる。スピンの自由度を無視して、場の演算子のフーリエ変換 (2.7) と、自由粒子の場合の生成消滅演算子の表式 (2.14a) を用いると、

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i(kx - \xi_k t)} a_k, \quad \psi^\dagger(x', t') = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{-i(k'x' - \xi_{k'} t')} a_{k'}^\dagger, \quad (2.20)$$

と平面波で展開できる。ここから直ちに以下を得る (自由粒子の場合の量には添え字 0 をつけることにする)。

$$\begin{aligned} &iG_0^C(x, t; x', t') \\ &= \theta(t - t') \langle \psi(x, t) \psi^\dagger(x', t') \rangle_0 + \zeta \theta(t' - t) \langle \psi^\dagger(x', t') \psi(x, t) \rangle_0 \\ &= \frac{1}{V} \sum_{k, k'} e^{i(kx - \xi_k t)} e^{-i(k'x' - \xi_{k'} t')} \left[ \theta(t - t') \langle a_k a_{k'}^\dagger \rangle_0 + \zeta \theta(t' - t) \langle a_{k'}^\dagger a_k \rangle_0 \right] \\ &= i \frac{1}{V} \sum_k e^{ik(x-x')} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i(\omega + \xi_k)(t-t')} \left[ \frac{\langle a_k a_k^\dagger \rangle_0}{\omega + i\varepsilon} - \zeta \frac{\langle a_k^\dagger a_k \rangle_0}{\omega - i\varepsilon} \right] \\ &= i \frac{1}{V} \sum_k e^{ik(x-x')} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \left[ \frac{\langle a_k a_k^\dagger \rangle_0}{\omega - \xi_k + i\varepsilon} - \zeta \frac{\langle a_k^\dagger a_k \rangle_0}{\omega - \xi_k - i\varepsilon} \right]. \end{aligned} \quad (2.21)$$

ここで  $\varepsilon$  は正の微小量で、階段関数のフーリエ展開:

$$\theta(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{ie^{-i\omega t}}{\omega + i\varepsilon} \quad (2.22)$$

から出てきたものである。また、異なる運動量  $k \neq k'$  のペアの期待値  $\langle a_k^\dagger a_{k'} \rangle_0$  は 0 であることを用いた。この表式から、自由粒子の因果 Green 関数は位置の差  $x - x'$  と時間の差  $t - t'$  にのみ依存することがわかる。よっ



て  $x, x', t, t'$  の 4 変数関数だと思われた Green 関数は改めて  $x = x - x', t = t - t'$  と定義すれば 2 変数関数であって、そのフーリエ成分は以下のように書くことができる。

$$\begin{aligned} \int dx \int dt e^{-i(kx - \omega t)} G_0^C(x, t) &= \frac{\langle a_k a_k^\dagger \rangle_0}{\omega - \xi_k + i\varepsilon} - \zeta \frac{\langle a_k^\dagger a_k \rangle_0}{\omega - \xi_k - i\varepsilon} \\ &=: G_0^C(k, \omega). \end{aligned} \quad (2.23)$$

位置表示なのか運動量表示なのかは引数が  $(x, t)$  なのか  $(k, \omega)$  なのかで区別することにする。

ここまで因果 Green 関数を考えてきたが、例えば線形応答理論において必要な物理量は因果 Green 関数よりも以下で定義される遅延 (retarded)・先進 (advanced) Green 関数である。

$$G^R(k, t) := -i\theta(t) \langle [a_k(t), a_k^\dagger]_{-\zeta} \rangle, \quad (2.24a)$$

$$G^A(k, t) := i\theta(-t) \langle [a_k(t), a_k^\dagger]_{-\zeta} \rangle. \quad (2.24b)$$

ここでは最初から運動量表示で Green 関数を定義した。期待値をとる演算子としては必ずしも運動量の生成消滅演算子である必要はないが、以前にも述べたように、運動量の生成消滅演算子に対する期待値がわかればその線形変換により他の基底の場合も求まるので一般性は損なわれぬ。また、因果 Green 関数のときと同じように、時間依存性はその差  $t - t'$  にしかないので、最初から  $t' = 0$  をとった。

因果 Green 関数と、遅延・先進 Green 関数の間の関係を調べるために便利なのがレーマン表示と呼ばれるものである。レーマン表示を用いると、3 種類の Green 関数の運動量表示 (時間に関するフーリエ成分) はそれぞれ次のように書くことができる。

$$G^C(k, \omega) = \sum_{n,m} |\langle n | a_k | m \rangle|^2 \left[ \frac{e^{\beta(\Omega - E_n)}}{\omega + E_n - E_m + i\varepsilon} - \zeta \frac{e^{\beta(\Omega - E_m)}}{\omega + E_n - E_m - i\varepsilon} \right], \quad (2.25a)$$

$$G^R(k, \omega) = \sum_{n,m} |\langle n | a_k | m \rangle|^2 \left[ \frac{e^{\beta(\Omega - E_n)}}{\omega + E_n - E_m + i\varepsilon} - \zeta \frac{e^{\beta(\Omega - E_m)}}{\omega + E_n - E_m + i\varepsilon} \right], \quad (2.25b)$$

$$G^A(k, \omega) = \sum_{n,m} |\langle n | a_k | m \rangle|^2 \left[ \frac{e^{\beta(\Omega - E_n)}}{\omega + E_n - E_m - i\varepsilon} - \zeta \frac{e^{\beta(\Omega - E_m)}}{\omega + E_n - E_m - i\varepsilon} \right]. \quad (2.25c)$$

ここで  $|n\rangle$  はハミルトニアン  $\mathcal{H}$  のエネルギー  $E_n$  の固有状態, i.e.,  $\mathcal{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$  である。この表示は熱平均に現れる  $\text{Tr}$  を具体的に計算して、階段関数のフーリエ変換 (2.22) を用いて導出できる。さらに、スペクトル強度を

$$\rho(k, \omega) := \sum_{n,m} |\langle n | a_k | m \rangle|^2 e^{\beta(\Omega - E_n)} (1 - \zeta e^{-\beta\omega}) 2\pi \delta(\omega + E_n - E_m) \quad (2.26)$$

で定義すれば、遅延・先進 Green 関数は次のように書ける。

$$\left\{ \begin{array}{l} G^R(k, \omega) \\ G^A(k, \omega) \end{array} \right\} = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(k, \omega')}{\omega - \omega' \pm i\varepsilon}. \quad (2.27)$$

ここで複号の  $+$  は遅延,  $-$  は先進 Green 関数に対するものである。また、スペクトル密度は総和則:

$$\begin{aligned} 1 &= \langle [a_k, a_k^\dagger]_{-\zeta} \rangle \\ &= \sum_{n,m} \left[ e^{\beta(\Omega - E_n)} \langle n | a_k | m \rangle \langle m | a_k^\dagger | n \rangle - \zeta e^{\beta(\Omega - E_m)} \langle m | a_k^\dagger | n \rangle \langle n | a_k | m \rangle \right] \\ &= \sum_{n,m} e^{\beta(\Omega - E_n)} |\langle n | a_k | m \rangle|^2 (1 - \zeta e^{\beta(E_n - E_m)}) \\ &= \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho(k, \omega), \end{aligned} \quad (2.28)$$

を満たす。これらの表式が意味するのは、いかなるハミルトニアンに対する遅延・先進 Green 関数も自由粒子の場合のその重ね合わせで書けるということである。ハミルトニアンによる具体的な性質はすべてスペクトル

ル強度  $\rho(k, \omega)$  に含まれているのだ。この結果は摂動論などによらない厳密なものであり、Green 関数の解析的性質を調べる際に有効である。

レーマン表示から直ちにわかる Green 関数の性質についてまとめる。

**極の位置:** Green 関数のレーマン表示 (2.25) から因果、遅延、先進 Green 関数の複素平面上での極の位置がわかる。遅延 Green 関数  $G^R(k, \omega)$  では実軸の下側にのみ極が並び、先進 Green 関数  $G^A(k, \omega)$  では実軸の上側にのみ極が並ぶ。一方で因果 Green 関数  $G^C(k, \omega)$  では実軸の上下ともに極が存在し、その解析性は遅延や先進より幾分悪くなっている。つまり、遅延 Green 関数は上半平面で正則であり、先進 Green 関数は下半平面で正則である\*8。

**3つの Green 関数の間の関係:** 3つの Green 関数はお互いにある関係で結ばれている。これらの関係を示すために、式 (2.25) にあるように分母に  $x + i\varepsilon$  がある積分では次の置き換えが可能であることに注目する。

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x). \quad (2.29)$$

ここで  $\mathcal{P}$  は主値積分 [13] である。これを用いると、以下の関係を示すことができる。

$$\operatorname{Re} \begin{Bmatrix} G^C(k, \omega) \\ G^R(k, \omega) \\ G^A(k, \omega) \end{Bmatrix} = \mathcal{P} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(k, \omega')}{\omega - \omega'}, \quad (2.30a)$$

$$\operatorname{Im} \begin{Bmatrix} G^C(k, \omega) \\ G^R(k, \omega) \\ G^A(k, \omega) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \tanh\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)^{-\zeta} \\ - \\ + \end{Bmatrix} \frac{1}{2}\rho(k, \omega). \quad (2.30b)$$

ここで  $\operatorname{Re}, \operatorname{Im}$  はそれぞれ直後の量の実部と虚部を表す。1つ目の式は、3つの Green 関数の実部はすべて同じであることを示し、2つ目の式は特に、 $G^R$  と  $G^A$  が互いに複素共役の関係にあることを示す。また、スペクトル強度は (定数倍を除いて) 遅延もしくは先進 Green 関数の虚部そのものであることもわかる。さらに、重要な関係式として Kramers–Kronig 関係式が示される。Kramers–Kronig 関係式は、遅延もしくは先進 Green 関数の実部と虚部を繋ぐ関係式で、以下のように書かれる。

$$\operatorname{Re} G^{R,A}(k, \omega) = \mp \mathcal{P} \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\operatorname{Im} G^{R,A}(k, \omega')}{\omega - \omega'}. \quad (2.31)$$

複号は上側の  $-$  が遅延、下側の  $+$  が先進 Green 関数に対応する。Kramers–Kronig 関係式を用いることで、Green 関数の実部から虚部が求められたりする。

スペクトル強度は一般のハミルトニアンでは解析的に求めることは困難であるが、後に述べる摂動論によって Green 関数が求まると、それによって計算することが可能になる。実験的には、光電子分光や角度分解型光電子分光 (ARPES) などを用いることでスペクトル強度を測定できる [14]。

## 2.4 温度 Green 関数

前節で導入した因果・遅延・先進 Green 関数は一般の相互作用をする多粒子系の場合にそれを厳密に計算することは難しい。自由粒子の場合は式 (2.21) のように計算ができるので、自由粒子のハミルトニアンに対する摂動として相互作用を扱うことが考えられる。Green 関数を摂動展開すると、より多くの生成消滅演算子の積の期待値を計算する必要がでてくる。そしてその項数は摂動の次数とともに指数関数的に増加してしまう。

そのような Green 関数に対する摂動展開を計算する上で有用なのがファインマンダイアグラムの方法である。ファインマンダイアグラムははじめ場の量子論において相互作用を考えるために考案された。場の量子論では場の演算子の真空期待値、つまり絶対零度における Green 関数を計算し、素粒子の散乱振幅などを求める。したがって、物性で考えるような有限温度の Green 関数の摂動展開にはそのままでは援用できない。

\*8 もちろんスペクトル強度  $\rho(k, \omega)$  が正則であればだが。

有限温度の Green 関数の摂動計算をするために用いられるのが**温度 Green 関数**と呼ばれる量である。温度 Green 関数はファインマンダイアグラムの方法を適用することができ、摂動展開が絶対零度の Green 関数と同様に得られる。温度 Green 関数がわかれば熱力学ポテンシャルが計算できるが、そこから解析接続を施すことで、遅延 Green 関数などの量も計算することができる。温度 Green 関数は通常の Green 関数の時間を**虚時間**に変換した奇妙な量であるが、そんな細工から他の様々な物理量が計算できるということで、まさに画期的な技法であると言える。

温度 Green 関数は因果 Green 関数の時間  $t$  を虚時間  $\tau = it$  に変換した量として定義される：

$$\mathcal{G}(x, \tau, \alpha; x', \tau', \alpha') := - \left\langle T \psi_\alpha(x, \tau) \psi_{\alpha'}^\dagger(x', \tau') \right\rangle. \quad (2.32)$$

ここで温度 Green 関数は別の書体の  $\mathcal{G}$  を用い、場の演算子の虚時間のハイゼンベルグ表示を以下のように定義した。

$$\psi_\alpha(x, \tau) := e^{\mathcal{H}\tau} \psi_\alpha(x) e^{-\mathcal{H}\tau}, \quad (2.33a)$$

$$\psi_\alpha^\dagger(x, \tau) := e^{\mathcal{H}\tau} \psi_\alpha^\dagger(x) e^{-\mathcal{H}\tau}. \quad (2.33b)$$

虚時間の場合は  $[\psi_\alpha(x, \tau)]^\dagger \neq \psi_\alpha^\dagger(x, \tau)$  なので注意が必要である。虚時間は通常のハイゼンベルグ表示の  $t$  と形式的に  $\tau = it$  で結びつくが、 $\tau$  自体は実数だと考える。虚時間  $\tau$  の範囲は  $0 < \tau < \beta$  ( $\beta$  は系の温度) であるとする。この範囲の理由は後に熱力学ポテンシャルの展開を考えると理解できるので、一旦天下りに決めてしまうことにする。

温度 Green 関数 (2.32) は  $t - t'$  の関数であることが通常の Green 関数と同様に示される。また、系が並進対称でかつ外部磁場 (スピンを変えるような過程) が存在しない場合、 $x - x'$  の関数であり  $\alpha$  をいちいち考える必要はなくなる。よって以下のように運動量表示された温度 Green 関数を考えることにする。

$$\mathcal{G}(k, \tau) := - \langle T a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle = -\theta(\tau) \langle a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle - \zeta \theta(-\tau) \langle a_k^\dagger a_k(\tau) \rangle. \quad (2.34)$$

この温度 Green 関数は実は周期  $2\beta$  の関数であることが示される。今、 $-\beta < \tau < 0$  だとして、エネルギー固有状態  $\{|n\rangle\}$  で展開すると、

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k, \tau) &= -\zeta \langle a_k^\dagger a_k(\tau) \rangle \\ &= -\zeta \sum_{n,m} e^{\beta(\Omega - E_n)} e^{(E_m - E_n)\tau} \langle n | a_k^\dagger | m \rangle \langle m | a_k | n \rangle, \end{aligned} \quad (2.35)$$

であり、また  $0 < \tau + \beta < \beta$  に関して同様に計算すると、

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k, \tau + \beta) &= - \sum_{n,m} e^{\beta(\Omega - E_m)} e^{(E_n - E_m)(\tau + \beta)} \langle n | a_k | m \rangle \langle m | a_k^\dagger | n \rangle \\ &= - \sum_{n,m} e^{\beta(\Omega - E_n)} e^{(E_m - E_n)\tau} \langle n | a_k^\dagger | m \rangle \langle m | a_k | n \rangle, \end{aligned} \quad (2.36)$$

となる。よって、 $\mathcal{G}(k, \tau + \beta) = \zeta \mathcal{G}(k, \tau)$  が成立する。 $\zeta^2 = 1$  であることから、周期が  $2\beta$  であることがわかる。

温度 Green 関数は周期  $2\beta$  であることがわかったので、これを虚時間に関してフーリエ展開することを考える。それは次のように書ける。

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k, \tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{G}(k, i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}, \\ \mathcal{G}(k, i\omega_n) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau \mathcal{G}(k, \tau) e^{i\omega_n \tau}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

ここで  $\omega_n = 2\pi n / 2\beta = \pi n / \beta$  である。ここで、温度 Green 関数はただの周期  $2\beta$  の関数ではなく、 $\mathcal{G}(k, \tau + \beta) = \zeta \mathcal{G}(k, \tau)$  という関係を満たすので、周波数  $\omega_n$  にさらに制限をつけることができる。フーリエ成分  $\mathcal{G}(k, i\omega_n)$  を

計算すると,

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(k, i\omega_n) &= \frac{1}{2} \left[ \int_{-\beta}^0 d\tau \mathcal{G}(k, \tau) e^{-i\omega_n \tau} + \int_0^{\beta} d\tau \mathcal{G}(k, \tau) e^{-i\omega_n \tau} \right] \\ &= \frac{1}{2} (\zeta e^{-i\omega_n \beta} + 1) \int_0^{\beta} d\tau \mathcal{G}(k, \tau') e^{-i\omega_n \tau'},\end{aligned}\quad (2.38)$$

となる. ここで2行目に行く際に第1項の積分変数を  $\tau' = \tau + \beta$  と変換して性質  $\mathcal{G}(k, \tau + \beta) = \zeta \mathcal{G}(k, \tau)$  を用いた.  $-i\omega_n \beta = -i\pi n$  なので,  $\zeta = -1$  のフェルミオンの時は  $n$  が偶数のとき右辺は0,  $\zeta = +1$  のボソンの時は  $n$  が奇数のとき右辺は0となる. よって, 次のように周波数に制限がつく:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(k, \tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_l \mathcal{G}(k, i\omega_l) e^{-i\omega_l \tau}, \\ \omega_l &= \begin{cases} \frac{(2l+1)\pi}{\beta} & \zeta = -1 \text{ (フェルミオン)} \\ \frac{2l\pi}{\beta} & \zeta = +1 \text{ (ボソン)} \end{cases}\end{aligned}\quad (2.39)$$

また, フーリエ成分も次のように表せる.

$$\mathcal{G}(k, i\omega_l) = \int_0^{\beta} d\tau \mathcal{G}(k, \tau) e^{i\omega_l \tau}.\quad (2.40)$$

温度 Green 関数の具体的な計算方法 (摂動論など) は次節に回すことにして, ここでは温度 Green 関数と遅延・先進 Green 関数との関係について調べる. 温度 Green 関数の運動量表示 (2.40) と遅延・先進 Green 関数の運動量表示, 特にレーマン表示 (2.27) とを比べる.

温度 Green 関数の運動量表示を定義通り計算する.

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(k, i\omega_l) &= \int_0^{\beta} d\tau \langle a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle e^{i\omega_l \tau} \quad (\because \text{積分範囲が } 0 < \tau < \beta) \\ &= - \int_0^{\beta} d\tau \sum_{n,m} |\langle n | a_k | m \rangle|^2 e^{\beta(\Omega - E_n)} e^{(E_n - E_m + i\omega_l)\tau} \\ &= \sum_{n,m} \frac{1 - \zeta e^{(E_n - E_m)\beta}}{E_n - E_m + i\omega_l} |\langle n | a_k | m \rangle|^2 e^{\beta(\Omega - E_n)} \quad (\because e^{-i\omega_l \beta} = \zeta) \\ &= \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\rho(k, \omega')}{i\omega_l - \omega'}.\end{aligned}\quad (2.41)$$

ここで  $\rho(k, \omega)$  は前節で定義したスペクトル強度:

$$\rho(k, \omega) = \sum_{n,m} |\langle n | a_k | m \rangle|^2 e^{\beta(\Omega - E_n)} (1 - \zeta e^{-\beta\omega}) 2\pi \delta(\omega + E_n - E_m)\quad (2.42)$$

である. よって, 遅延・先進 Green 関数のレーマン表示 (2.27) と見比べると, 温度 Green 関数の  $i\omega_l$  を  $\omega \pm i\varepsilon$  と解析接続することで遅延・先進 Green 関数が得られることがわかる. すなわち,

$$\begin{cases} G^R(k, \omega) \\ G^A(k, \omega) \end{cases} = \mathcal{G}(k, \omega \pm i\varepsilon) \quad (+ \text{ が遅延, } - \text{ が先進}),\quad (2.43)$$

のように結ばれている.

## 2.5 摂動論

ここから摂動論による温度 Green 関数の計算に移る. まずは自由粒子の温度 Green 関数の表式を得る. 次に相互作用表示を用いて, 温度 Green 関数を時間発展演算子と生成消滅演算子の積で表せることを見る. 摂動展開を系統的に行う道具としてファインマンダイアグラムを導入する.

簡単のためこの節では電子系を念頭におき、フェルミオン系 ( $\zeta = -1$ ) を考えることにする。

自由粒子の場合は生成消滅演算子のハイゼンベルグ表示が直接求められている (式 (2.14a)). よって虚時間におけるハイゼンベルグ表示も同様にして、

$$a_k(\tau) = e^{-\xi_k \tau} a_k \quad (2.44)$$

がわかる。これを用いると、 $\tau > 0$  における自由粒子の温度 Green 関数  $\mathcal{G}_0(k, \tau)$  は、

$$\mathcal{G}_0(k, \tau) = -\langle a_k a_k^\dagger \rangle_0 e^{-\xi_k \tau} = -\frac{e^{-\xi_k \tau}}{1 + e^{-\beta \xi_k}} \quad (2.45)$$

のように具体的に求めることができる。このフーリエ成分は以下のように計算される。

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_0(k, i\omega_l) &= \int_0^\beta d\tau \left[ -\frac{e^{-\xi_k \tau}}{1 + e^{-\beta \xi_k}} \cdot e^{i\omega_l \tau} \right] \\ &= -\frac{1}{1 + e^{-\beta \xi_k}} \cdot \frac{e^{-\beta \xi_k} e^{i\omega_l \beta} - 1}{i\omega_l - \xi_k} \\ &= \frac{1}{i\omega_l - \xi_k} \quad (\because e^{i\omega_l \beta} = -1). \end{aligned} \quad (2.46)$$

このように自由粒子の温度 Green 関数は簡単な形をしており、摂動展開においてはこれを基本的なパーツとして高次の補正を計算していくことになる。

摂動展開を見やすくするために温度 Green 関数を次のように書き表せることを見る。

$$\mathcal{G}(k, \tau) = -\frac{\langle \text{T} U(\beta) a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}. \quad (2.47)$$

前節と同様に  $\langle \cdots \rangle_0$  は相互作用を含まない無摂動ハミルトニアンによる熱平均である。  $U(\beta)$  は時間発展演算子のような働きをする演算子で、ハイゼンベルグ表示と相互作用表示をつなぐ役割がある。これは以下のように定義される。

$$\begin{aligned} e^{-\mathcal{H}\beta} &= e^{-\mathcal{H}_0\beta} U(\beta), \\ e^{\mathcal{H}\beta} &= U^{-1}(\beta) e^{\mathcal{H}_0\beta}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

ここから、ハイゼンベルグ表示  $a(\beta)$  と相互作用表示  $a_I(\beta) := e^{\mathcal{H}_0\beta} a e^{-\mathcal{H}_0\beta}$  が以下のように結び付けられる。

$$\begin{aligned} a(\beta) &= e^{\mathcal{H}\beta} a e^{-\mathcal{H}\beta} = U^{-1}(\beta) e^{\mathcal{H}_0\beta} a e^{-\mathcal{H}_0\beta} U(\beta) \\ &= U^{-1}(\beta) a_I(\beta) U(\beta). \end{aligned} \quad (2.49)$$

ここで添え字の  $k$  は省略した。また、 $U(\beta)$  は次の微分方程式に従う：

$$\frac{\partial U(\beta)}{\partial \beta} = -H'_I(\beta) U(\beta). \quad (2.50)$$

ここで  $H'_I(\beta) = e^{\beta \mathcal{H}_0} H' e^{-\beta \mathcal{H}_0}$  は摂動ハミルトニアンの相互作用表示である。ここから、 $U(\beta)$  は T 積を入れた指数関数で形式的に次のように書ける。

$$U(\beta) = \text{T exp} \left[ -\int_0^\beta d\tau H'_I(\tau) \right]. \quad (2.51)$$

ここで  $U(0) = 1$  であることを用いた。また、 $U(\tau_1, \tau_2) := U(\tau_1) U^{-1}(\tau_2)$  とおくとこれもまた同じような微分方程式に従い、次のように指数関数で書ける。

$$U(\tau_1, \tau_2) = \text{T exp} \left[ -\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau H'_I(\tau) \right]. \quad (2.52)$$



つまり  $U(\beta) = U(\beta, 0)$  である. さらに熱力学ポテンシャル  $\Omega$  も  $U(\beta)$  を用いて表すことができる. 定義より,

$$\begin{aligned} e^{-\beta\Omega} &= \text{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}}] = \text{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}_0}U(\beta)] \\ &= e^{-\beta\Omega_0} \text{Tr}[e^{\beta(\Omega_0 - \mathcal{H}_0)}U(\beta)] \quad (e^{-\beta\Omega_0} := \text{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}_0}]) \\ &= e^{-\beta\Omega_0} \langle U(\beta) \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.53)$$

以上の準備のもと, 温度 Green 関数の定義から  $U(\beta)$  などを用いて計算をする.

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k, \tau) &= -e^{\beta\Omega} \text{Tr}[e^{-\beta\mathcal{H}} U^{-1}(\tau) a_I(\tau) U(\tau) a^\dagger] \\ &= -\frac{1}{\langle U(\beta) \rangle_0} \langle \text{T exp} \left[ -\int_u^\beta d\tau' H_I(\tau') \right] a_I(\tau) \exp \left[ -\int_0^\tau d\tau'' H_I(\tau'') \right] a^\dagger \rangle_0 \\ &= -\frac{1}{\langle U(\beta) \rangle_0} \langle \text{T exp} \left[ -\int_0^\beta \beta d\tau' H_I(\tau') \right] a_I(\tau) a^\dagger \rangle_0 \\ &= -\frac{\langle \text{T } U(\beta) a_I(\tau) a^\dagger \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

ここで, T 積の中では  $a$  と  $H'$  などが可換であることを用いた. これは  $H'$  が  $a, a^\dagger$  の偶数個の積で書かれている場合に成立する. 注意点として, この形で書いた時の  $a$  は相互作用表示であるという点である. 記号を書く位置が足りないので  $k$  などを省略していたが, 以後この節では  $k$  などを添え字に書くことにし, 相互作用がある系を扱う際には暗黙のうちに相互作用表示を用いることにする.

さて, 温度 Green 関数の表式 (2.47), (2.54) を見ると,  $U(\beta)$  の指数関数を展開することで摂動展開が実行できそうである. このとき出てくる項としては例えば次のような複数の演算子の積の期待値が含まれたものである.

$$\frac{(-1)^2}{2!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \langle H'(\tau_1) H'(\tau_2) a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle_0. \quad (2.55)$$

相互作用のハミルトニアンとしては式 (2.15) などの複数 (2 体相互作用であれば 4 つ) の演算子の積で表されるものである. つまり, 摂動の各項を計算するためには複数の演算子の積の期待値を計算する必要があるのだ.

複数の演算子の積の期待値を計算するために用いられる定理がブロッホ–ドミニシス (Bloch–De Dominicis) の定理である. 次のような  $2n$  個の生成消滅演算子の積の期待値を考える. (定理の証明のみボソンとフェルミオンを同時に扱う.)

$$\langle A_1 \cdots A_{2n} \rangle_0 = \text{Tr} \left[ e^{\beta(\Omega - \mathcal{H}_0)} A_1 \cdots A_{2n} \right]. \quad (2.56)$$

ここで期待値は無摂動ハミルトニアン  $\mathcal{H}_0$  に関するグランドカノニカル分布での熱平均だとする\*9. また  $A_i$  は生成演算子  $a_i^\dagger$  もしくは消滅演算子  $a_i$  を表す ( $i$  は波数のラベル). これらの演算子の交換子を

$$[A_i, A_j]_{-\zeta} = A_i A_j - \zeta A_j A_i =: (ij) \quad (2.57)$$

とおく. このとき, 式 (2.56) で次のように順次  $A_1$  を右に移動させていくことができる.

$$\begin{aligned} \langle A_1 \cdots A_{2n} \rangle_0 &= (12) \langle A_3 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \zeta \langle A_2 A_1 A_3 \cdots A_{2n} \rangle_0 \\ &= (12) \langle A_3 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \zeta (13) \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \zeta^2 \langle A_2 A_3 A_1 \cdots A_{2n} \rangle_0 \\ &= \cdots \\ &= (12) \langle A_3 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \zeta (13) \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \cdots \\ &\quad + \zeta^{2n-2} (1, 2n) \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n-1} \rangle_0 + \zeta^{2n-1} \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.58)$$

\*9 基本的に, それ以外の場合は定理の対象外である.



ここで,  $\langle A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \rangle_0$  は次の関係:

$$\begin{aligned} a_k e^{-\beta \mathcal{H}_0} &= e^{-\xi_k} e^{-\beta \mathcal{H}_0} a_k \\ a_k^\dagger e^{-\beta \mathcal{H}_0} &= e^{\xi_k} e^{-\beta \mathcal{H}_0} a_k^\dagger \end{aligned} \quad (2.59a)$$

を用いることで変形できる.

$$\begin{aligned} \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \rangle_0 &= \text{Tr} \left[ e^{\beta(\Omega - \mathcal{H}_0)} A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \right] \\ &= e^{\mp \xi_1} \text{Tr} \left[ e^{\beta(\Omega - \mathcal{H}_0)} A_1 A_2 A_3 \cdots A_{2n} \right] \\ &= e^{\mp \xi_1} \langle A_1 \cdots A_{2n} \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.60)$$

ここで複号の  $-$  は  $A_1 = a_1$  のとき,  $+$  は  $A_1 = a_1^\dagger$  のときである. 以上の式 (2.58), (2.60) を合わせて次を得る.

$$\begin{aligned} (1 - \zeta e^{\mp \xi_1}) \langle A_1 \cdots A_{2n} \rangle_0 &= (12) \langle A_3 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \zeta (13) \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \cdots \\ &+ \zeta^{2n-2} (1, 2n) \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n-1} \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.61)$$

$n = 1$  の場合を考えると,  $(1 - \zeta e^{\mp \xi_1}) \langle A_1 A_2 \rangle_0 = (12)$  となり, ここから式 (2.61) の両辺を  $1 - \zeta e^{\mp \xi_1}$  で割ることで各  $(ij)$  を  $\langle A_i A_j \rangle_0$  にすることができ, 結局次を得る.

$$\begin{aligned} \langle A_1 \cdots A_{2n} \rangle_0 &= \langle A_1 A_2 \rangle_0 \langle A_3 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \zeta \langle A_1 A_3 \rangle_0 \langle A_2 A_4 \cdots A_{2n} \rangle_0 + \cdots \\ &+ \zeta^{2n-2} \langle A_1 A_{2n} \rangle_0 \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n-1} \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.62)$$

これは  $2n$  個の演算子の積を 2 個のペア (これをコントラクション, 縮約という) と  $2n - 2$  個の演算子の積に分解する式で, ウィック分解と呼ばれる操作である. 分解した後の  $2n - 2$  個の演算子の積もさらに分解することができ, 最終的には  $n$  個のペアの積で表すことができる. 例として  $n = 2$  の場合, 4 個のフェルミオン演算子の積の期待値をウィック分解すると,

$$\langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle_0 = \langle A_1 A_2 \rangle_0 \langle A_3 A_4 \rangle_0 - \langle A_1 A_3 \rangle_0 \langle A_2 A_4 \rangle_0 + \langle A_1 A_4 \rangle_0 \langle A_2 A_3 \rangle_0 \quad (2.63)$$

となる. ウィック分解をお手軽に行う方法としては, 生成消滅演算子の並びから, 生成演算子 + 消滅演算子のペアを繋いでいき, 出来上がる組み合わせの和をとることである<sup>\*10</sup>. たとえば次のようにする.

$$\begin{aligned} \overbrace{a^\dagger(1)a(1)a^\dagger(2)a(2)a^\dagger(3)a(3)} &\rightarrow \langle a^\dagger(1)a(2) \rangle_0 \langle a(1)a^\dagger(3) \rangle_0 \langle a^\dagger(2)a(3) \rangle_0, \\ \overbrace{a^\dagger(1)a(1)a^\dagger(2)a(2)a^\dagger(3)a(3)} &\rightarrow \langle a^\dagger(1)a(3) \rangle_0 \langle a(1)a^\dagger(2) \rangle_0 \langle a(2)a^\dagger(3) \rangle_0. \end{aligned} \quad (2.64)$$

ここでは  $A_i$  はシュレディンガー表示での演算子と見て計算をしたが, 自由粒子の相互作用表示の場合はただ数係数がかかるだけなので同様にウィック分解することが可能である.

以上の準備のもと, 摂動論により相互作用のある場合の温度 Green 関数を求めていく. 記号を再度整理しておく. 摂動ハミルトニアンとしては一般的な 2 体相互作用として式 (2.15) の  $H'$  などを考えればよいが, 表記を簡単にするためスピン変数  $\alpha$  に関する和と波数  $k$  に関する和をまとめて  $\sum$  と書き, ポテンシャルの行列要素もデルタ関数をわざわざ取り出さずに  $\tilde{U}(1, 2; 3, 4)$  と書く.

$$H' = \frac{1}{2V} \sum \tilde{U}(1, 2; 3, 4) a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4. \quad (2.65)$$

波数の添え字も簡単のため数字にした. また, 演算子の積の相互作用表示は, 相互作用表示の演算子の積に等しいので,  $H'(\tau) = (2V)^{-1} \sum \tilde{U}(1, 2; 3, 4) a_1^\dagger(\tau) a_2^\dagger(\tau) a_3(\tau) a_4(\tau)$  となる.

<sup>\*10</sup> ただし超伝導相における異常 Green 関数 ( $\langle a_1 a_2 \rangle_0$  のような項が非零の寄与をするもの) があるときは生成演算子 + 消滅演算子のペア以外も取る必要がある.

温度 Green 関数は次の時間発展演算子

$$U(\beta) = T \exp \left[ - \int_0^\beta d\tau H'(\tau) \right] \quad (2.66)$$

により次のように表すことができる.

$$\mathcal{G}(k, \tau) = - \frac{\langle T U(\beta) a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}. \quad (2.67)$$

このとき, 分子の  $U(\beta)$  の指数関数を展開した際の 0 次の項は,

$$\langle T a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle_0 \quad (2.68)$$

で, 自由粒子の Green 関数に等しい. 次に 1 次の項をみると,

$$- \frac{1}{2V} \sum \tilde{U}(1, 2; 3, 4) \int_0^\beta d\tau_1 \langle T a_1^\dagger(\tau_1) a_2^\dagger(\tau_1) a_3(\tau_1) a_4(\tau_1) a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle_0 \quad (2.69)$$

となる. これをウィック分解するのだが, 生成演算子同士, 消滅演算子同士のコントラクションは寄与しないので無視してよい<sup>\*11</sup>. よって寄与する項は 6 個である. 同様にしてより高次の摂動項も表すことができる.

摂動展開を続けていくとウィック分解の組み合わせが指数関数的に増大していき, それらをすべて数式で書くのは大変めんどろになる. そこで, 計算を便利に進めるためにファインマンダイアグラムを導入する. 摂動展開に寄与する項を以下のように図形的に表すことを考える. まず, 自由粒子の温度 Green 関数には実線に対応させる.

$$\langle a_1(\tau_1) a_2(\tau_2)^\dagger \rangle \rightarrow \begin{array}{c} \tau_1 \\ | \\ \tau_2 \end{array}. \quad (2.70)$$

矢印は時間の向きにとる (今の場合  $\tau_1 > \tau_2$  とした). 場合によっては時間の順番に紙面の下側から並べたり右側から並べたりする. 次にポテンシャルによる 2 体散乱は生成・消滅演算子が 2 つずつ働くので, これには 4 つの端子を持つ点線を対応させる.

$$\tilde{U}(1, 2; 3, 4) \rightarrow \begin{array}{c} 1 \\ \diagdown \\ \text{---} \\ \diagup \\ 3 \end{array} \text{---} \begin{array}{c} 2 \\ \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \\ 4 \end{array}. \quad (2.71)$$

点線がポテンシャルによる運動量の交換を表す. ここで, 散乱過程の時刻はすべて同一 (式 (2.69) で言えば  $\tau_1$ ) なので真横の点線を描いた<sup>\*12</sup>. 最後にこれら 2 つのパーツを結ぶ. すると摂動の 1 次の項の寄与 (式 (2.69)) は次のダイアグラムで表すことができる.

$$\begin{aligned} (1 \text{ 次 の 寄 与}) = & \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \text{---} \begin{array}{c} \tau \\ \tau_1 \\ 0 \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \tau \\ \tau_1 \\ 0 \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \tau \\ \tau_1 \\ 0 \end{array} \\ + & \begin{array}{c} \tau \\ \tau_1 \\ 0 \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \tau \\ \tau_1 \\ 0 \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \tau \\ \tau_1 \\ 0 \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array}. \quad (2.72) \end{aligned}$$

\*11 超伝導相などの“異常”な場合でなければ.

\*12 フォノンによる散乱などは運動量交換が有限時間で起こるため点線を斜めに描いたりする.

これを見ると同じ形をした図形があることが見て取れる．すなわち右辺第 2 と 6, 4 と 5 項は同じ形で，寄与も同じである．

ダイアグラムの中で  $a_k(\tau), a_k^\dagger$  につながった実線を外線と呼ぶ．ダイアグラムを観察すると，そのうち外線とつながっているものとつながっていないものに分類できることに気づく．外線とつながっていないグラフのことを真空泡グラフと呼ぶ．実は式 (2.67) の分子は真空泡グラフと，真空泡グラフを含まないグラフとの積で書けることが知られている．それを確かめるために次に 2 次の寄与を考える．ダイアグラムは図 1 にあるようなものになる．ここで同じ形のダイアグラムは省略している．

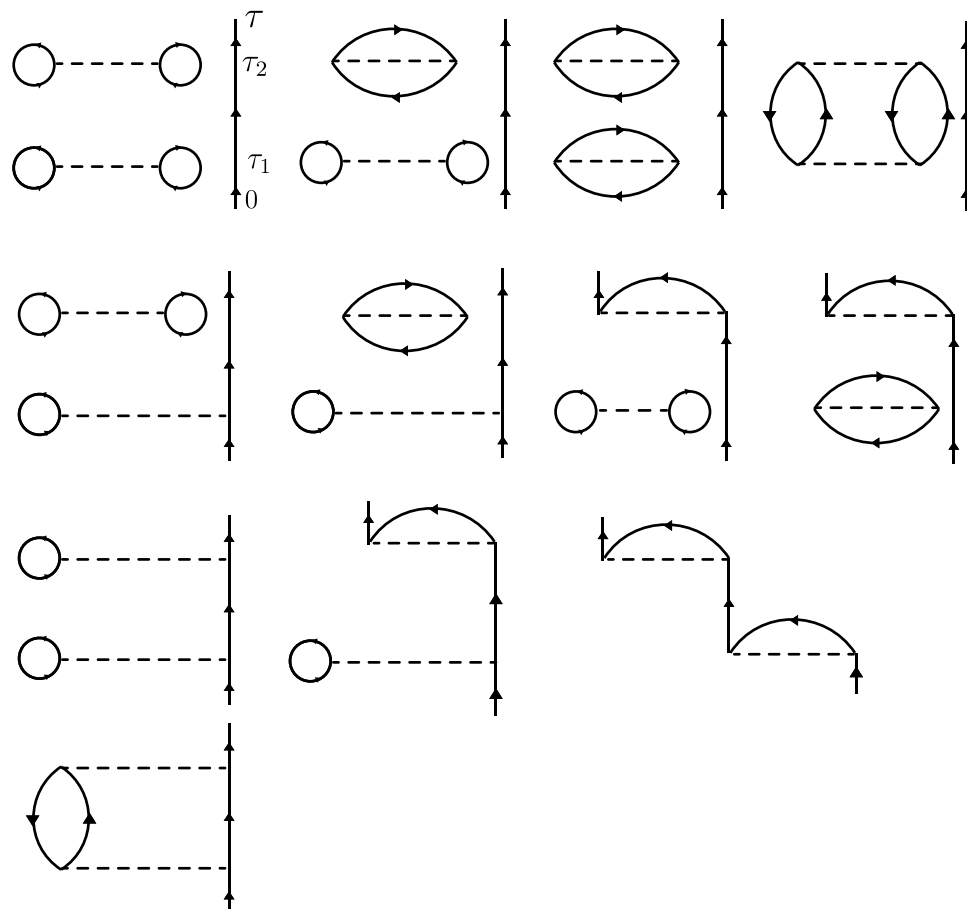


図 1 2 次の寄与.

ここからわかるようにつながっていない 2 次のダイアグラムは，1 次のダイアグラムと外線のないダイアグラムとを合わせたもので表現できている．よって次の関係が成り立つ．

$$(\mathcal{G}(k, \tau) \text{ の分子}) = (\text{真空泡グラフ}) \times (\text{真空泡グラフを含まないグラフ})$$

$$(\mathcal{G}(k, \tau) \text{ の分母}) = (\text{真空泡グラフ})$$

$$\mathcal{G}(k, \tau) = (\text{真空泡グラフを含まないグラフ}) = - \langle \text{T} U(\beta) a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle_{0L}. \quad (2.73)$$

ここで最後の式の添え字 0L は外線とつながったグラフのみの寄与を表す．

実際に摂動の各項を計算したい場合は次のようにする．まずは可能なファインマンダイアグラムを書き下す．それらに適切な係数を割り当てる．実線に  $(i\omega_l - \xi_k)^{-1}$  を対応させ，点線に  $\tilde{U}(1, 2; 3, 4)$  を対応させる．最後に和をとる．このような流れで摂動の各項が系統的に計算できる．以降の議論では具体的にそれを計算したりはしないので，係数の細かい話はここではしないことにする．詳しくは文献 [4]などを参照されたい．

## 2.6 自己エネルギー

次に，ファインマンダイアグラムを用いた摂動論において重要な地位を占める自己エネルギーについて説明する．ファインマンダイアグラムのうち，外線以外の実線の一つ切ったときに 2 つの部分に切り離されるもの

を非固有 (improper), 切り離されないものを固有 (proper) と呼ぶ<sup>\*13</sup>. 例えば図 1 の一番下のダイアグラムは固有で, 下から 2 番目の右端のダイアグラムは非固有である. 今, すべての次数の固有なダイアグラムの和を考えそれを図 2 のように描こう. 灰色の部分自己エネルギー部分と呼ばれ, 実線の一つ切っても切り離されないダイアグラムの和である. 図 2 のダイアグラムの温度 Green 関数への寄与は外線も含めて

$$\frac{1}{(i\omega_l - \xi_k)^2} \Sigma(k, i\omega_l) \quad (2.74)$$

と表される. 摂動展開をした温度 Green 関数はこの自己エネルギー部分を用いて次のように表せる.

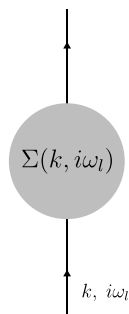


図 2 自己エネルギー部分のダイアグラム.

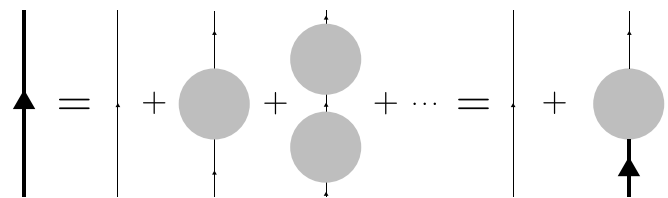


図 3 ダイソン方程式のダイアグラムでの表現.

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k, i\omega_l) &= \mathcal{G}_0(k, i\omega_l) + \mathcal{G}_0(k, i\omega_l) \Sigma(k, i\omega_l) \mathcal{G}(k, i\omega_l) \\ \implies \mathcal{G}(k, i\omega_l) &= \frac{1}{i\omega_l - \xi_k - \Sigma(k, i\omega_l)}. \end{aligned} \quad (2.75)$$

この式はダイソン方程式と呼ばれ, ダイアグラムで表すと図 3 のようになる.

自己エネルギーを用いて表した温度 Green 関数の表式 (2.75) は, 自由粒子のそれ  $(i\omega_l - \xi_k)^{-1}$  と形の上では似ている. 自己エネルギーは相互作用により出現する準粒子<sup>\*14</sup>の性質を決める量であることを以下でみる. 温度 Green 関数から遅延 Green 関数に変換  $i\omega_l \rightarrow \omega + i\varepsilon$  で移ると,

$$\begin{aligned} \Sigma(k, i\omega_l) &\rightarrow \Sigma^R(k, \omega) \\ G^R(k, \omega) &= \frac{1}{\omega - \xi_k - \Sigma^R(k, \omega) + i\varepsilon} \end{aligned} \quad (2.76)$$

となるので, スペクトル強度はこれの虚部をとって,

$$\rho(k, \omega) = -2\text{Im}G^R(k, \omega) = \frac{\Gamma(k, \omega)}{(\omega - \xi_k - \text{Re}\Sigma^R(k, \omega))^2 + (\Gamma(k, \omega)/2)^2} \quad (2.77)$$

となる. ここで自己エネルギーの虚部を  $\Gamma(k, \omega) = -2\text{Im}\Sigma^R(k, \omega)$  と定義した. これはローレンツ型の分布関数である (図 4). 自己エネルギーが 0 である自由粒子の場合はスペクトル強度はデルタ関数型になることから, 自己エネルギーの存在は粒子の存在確率を “ぼやけ” させる働きをするというイメージを持つことができる. また, このスペクトル強度の時間依存性 ( $\omega$  から  $t$  へフーリエ変換すればよい) を見ると, 自己エネルギーの虚部  $\Gamma$  が準粒子の寿命  $\sim 1/\Gamma$  を決めることも確認できる. 自己エネルギーは摂動の全次数からの寄与を含むので逐次的な方法で厳密に求めることは難しい. 実際には近似的に自己エネルギーを求めることになる.

式 (2.75) はまた, フーリエ変換を施すことで次の微分方程式として書くことができる.

$$\left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_k \right) \mathcal{G}(k, \tau) + \frac{1}{\beta} \sum_l e^{-i\omega_l \tau} \Sigma(k, i\omega_l) \mathcal{G}(k, i\omega_l) = -\delta(\tau). \quad (2.78)$$

\*13 切り離されないのはすべての点を実線もしくは点線で繋がっている場合と定義する.

\*14 衣をまとった粒子などとも呼ぶ.

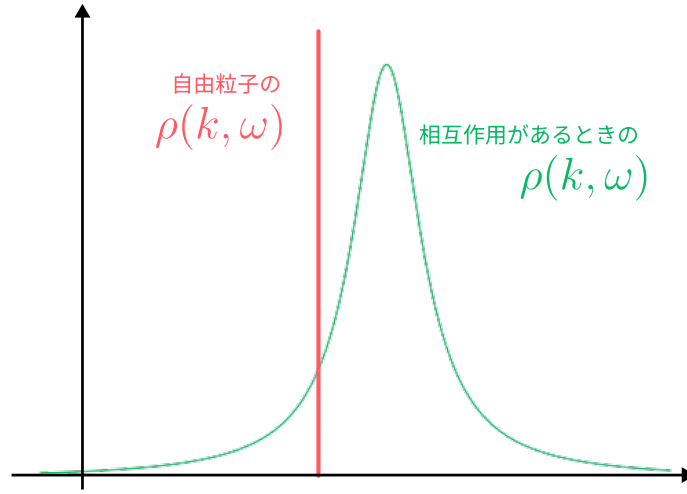


図4 自由粒子の場合と相互作用がある場合のスペクトル強度の違い。自由粒子の場合は決まったエネルギーのところにピークが出るが、相互作用がある（自己エネルギーがある）場合にはピークが“ぼやける”。自己エネルギーの実部がピーク的位置を、虚部がピークの幅を変える。

一方、温度 Green 関数を直接虚時間微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}(k, \tau) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ -\theta(\tau) \langle a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle - \zeta \theta(-\tau) \langle a_k^\dagger a_k(\tau) \rangle \right] \\ &= -\delta(\tau) - \langle \mathbb{T} \frac{\partial a_k(\tau)}{\partial \tau} a_k^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (2.79)$$

となる。  $a_k(\tau)$  の微分が出てきたが、これはハイゼンベルグの運動方程式から次のように計算する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_k(\tau)}{\partial \tau} &= [\mathcal{H}(\tau), a_k(\tau)]_-, \\ \mathcal{H}(\tau) &= \sum_k \xi_k a_k^\dagger(\tau) a_k(\tau) - \frac{1}{2V} \sum \tilde{U}(1, 2; 3, 4) a_1^\dagger(\tau) a_2^\dagger(\tau) a_3(\tau) a_4(\tau), \\ \Rightarrow \frac{\partial a_k(\tau)}{\partial \tau} &= -\xi_k a_k(\tau) - \frac{1}{V} \sum_{2,3,4} \tilde{U}(k, 2; 3, 4) a_2^\dagger(\tau) a_3(\tau) a_4(\tau). \end{aligned} \quad (2.80)$$

ただしポテンシャルの行列要素が  $\tilde{U}(1, 2; 3, 4) = \tilde{U}(2, 1; 4, 3)$  を満たすことを用いた。ここから、Green 関数の虚時間微分は、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}(k, \tau) = -\delta(\tau) + \xi_k \underbrace{\langle \mathbb{T} a_k(\tau) a_k^\dagger \rangle}_{-\mathcal{G}(k, \tau)} + \frac{1}{V} \sum_{2,3,4} \tilde{U}(k, 2; 3, 4) \langle \mathbb{T} a_2^\dagger(\tau) a_3(\tau) a_4(\tau) a_k^\dagger \rangle \quad (2.81)$$

のように得られる。よって、式 (2.78) と (2.81) を比べることで、自己エネルギーに関して次が成立する。

$$\frac{1}{V} \sum_{2,3,4} \tilde{U}(k, 2; 3, 4) \langle \mathbb{T} a_2^\dagger(\tau) a_3(\tau) a_4(\tau) a_k^\dagger \rangle = -\frac{1}{\beta} \sum_l e^{-i\omega_l \tau} \Sigma(k, i\omega_l) \mathcal{G}(k, i\omega_l). \quad (2.82)$$

ここでハミルトニアン  $\mathcal{H}$  を  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + gH'$  だとする。このとき、

$$e^{-\beta \Omega} = \text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}}] \quad (2.83)$$

を  $g$  で微分することで以下の式を得る（ファインマンの定理の応用）。

$$g \frac{\partial \Omega}{\partial g} = \langle gH' \rangle. \quad (2.84)$$

$gH' = (g/2V) \sum \tilde{U}(1, 2; 3, 4) a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4$  なので、上で得た式 (2.82) から次が成立する。

$$\begin{aligned} g \frac{\partial \Omega}{\partial g} &= \frac{1}{2\beta} \sum_{k,l} e^{i\omega_l + 0} \Sigma(k, i\omega_l; g) \mathcal{G}(k, i\omega_l; g) \\ \Rightarrow \Omega &= \Omega_0 + \frac{1}{2\beta} \sum_{k,l} \int_0^1 \frac{dg}{g} e^{i\omega_l + 0} \Sigma(k, i\omega_l; g) \mathcal{G}(k, i\omega_l; g). \end{aligned} \quad (2.85)$$

ここで  $g = 0$  のとき  $\Omega = \Omega_0$  とおいた. また  $\Sigma(k, i\omega; g), \mathcal{G}(k, i\omega_l; g)$  は摂動項が  $gH'$  であるときの自己エネルギーと温度 Green 関数である. このように, 自己エネルギーがわかれば熱力学的な自由エネルギーの摂動項による補正も求めることができる.



### 3 電子ガス

#### 3.1 RPA 近似

この章では, 前章で導入したダイアグラムの方法をクーロン相互作用をする電子ガスの系に応用する. 電子の消滅演算子を  $c_{k,\sigma}$  とすると\*15, この系の 2 体相互作用の部分のハミルトニアンは次のようになる.

$$H' = \frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k',\sigma'} c_{k,\sigma}. \quad (3.1)$$

ここで  $e$  は素電荷,  $\epsilon_0$  は真空の誘電率で,  $\tilde{U}(q) := e^2/(\epsilon_0 q^2)$  はクーロンポテンシャルのフーリエ成分である. 発散をきたす  $q = 0$  が除かれているのは, 結晶が作る一様バックグラウンドの正電荷により打ち消されていると考えることで正当化される. ここでの和  $\sum_{q \neq 0}$  は  $q = 0$  を除きつつ  $k, k', \sigma, \sigma', q$  について和をとっている. この相互作用をダイアグラムで表すと図 5 のようになる. この表式ではすでに散乱過程での運動量保存則は考慮されていることに注意する.

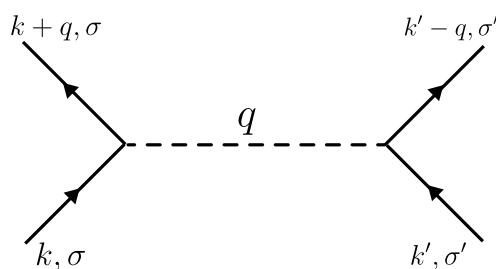


図 5 相互作用ハミルトニアン (3.1) による 2 体の散乱過程.

この節での目標は電子ガスにおける遮蔽効果を求めることである. クーロン力は本来距離の 2 乗に反比例する遠距離の力であるが, 多数の電子の相互作用 (散乱) により, 実効的にある程度の距離までしか働くなくなる. これを遮蔽効果と呼び, 式の上ではポテンシャルが次のように変更される.

$$U(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad \rightarrow \quad U(r)_{\text{遮蔽}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-q_T r}}{r}. \quad (3.2)$$

ここで  $q_T$  はトーマス-フェルミの波数と呼ばれ, 力が伝わる距離の逆数の程度を表す.

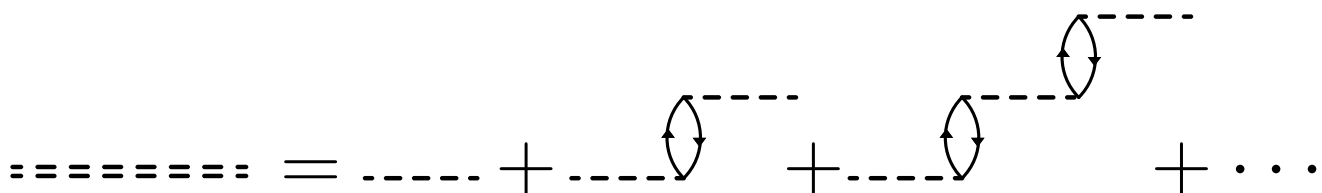


図 6 遮蔽効果を表すダイアグラム. 左辺の 2 重の点線が実効的なポテンシャル. この量は自己エネルギーの一部を与え, 近似的に自己エネルギーを求める際に用いることができる.

遮蔽効果は, ダイアグラムで表すと図 6 のように, 本来複数回の散乱過程で記述される運動量の交換をあたかも 1 回の散乱で起こったと考えることで導かれる. その実効的なポテンシャルを 2 重の点線で表すことにする. この 2 重の点線の部分は自己エネルギーに対する近似を与えることがわかるであろう. すなわち, 自己エネルギーには本来図 7 のようなより複雑な項の寄与も含まれるが, それを無視して図 6 で表されるような単純な項からの寄与のみを考えるのである. この近似を乱雑位相近似 (RPA) と呼ぶ.

\*15 先の章では一般の系を考えていたため生成消滅演算子は  $a^\dagger, a$  を用いていたが, 電子はよく  $c$  の文字が使われる.

輪っか1つの部分を分極部分と呼び、その寄与は以下で与えられる。

$$\Pi(k, i\omega_l) = -\frac{2}{\beta V} \sum_{q,m} \mathcal{G}_0(q, i\omega_m) \mathcal{G}_0(q+k, i\omega_l + i\omega_m). \quad (3.3)$$

これは図形的に見れば理解できるだろう (図 8). すなわち、2つの自由 Green 関数 (実線) を繋ぎ合わせて、 $k, m$  に関して和をとると、残るのが“端子”に  $(\pm k, \pm i\omega_l)$  の運動量とエネルギーをもつパーツができあがるというわけだ。係数の2はスピン変数に関する和から出るものである。この分極部分を用いると、例えば 9 のようなソーセージダイアグラムの寄与は

$$-\frac{1}{2^2 2! \beta} \sum_{q,l} \tilde{U}^2(q) \Pi^2(q, i\omega_l) \quad (3.4)$$

と書くことができる。

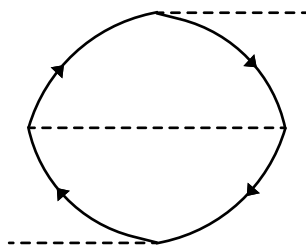


図 7 分極部分以外の自己エネルギーへの寄与を表すダイアグラム。

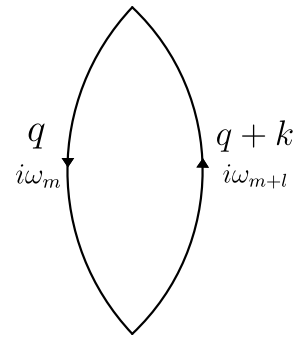


図 8 分極部分のダイアグラム。下端から  $(k, i\omega_l)$  が入ってきて上端から出ていく。

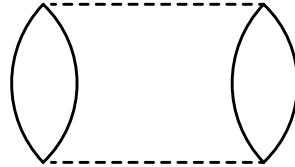


図 9 ソーセージダイアグラム。真空泡グラフの一つで、自由エネルギーの補正へ寄与する。

分極部分を用いて、実効的なポテンシャルの寄与を求める。ダイアグラム (図 6) を見れば一目瞭然な次の式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \tilde{U}_{\text{遮蔽}}(q, i\omega_l) &= \tilde{U}(q) - \tilde{U}^2(q) \Pi(q, i\omega_l) + \tilde{U}^3(q) \Pi^2(q, i\omega_l) - \dots \\ &= \frac{\tilde{U}(q)}{\varepsilon(q, i\omega_l)}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

ここで  $\varepsilon(q, i\omega_l) := 1 + \tilde{U}(q) \Pi(q, i\omega_l)$  と定義した。この表式からわかるように、実効的なポテンシャルは一般にエネルギー<sup>\*16</sup>  $i\omega_l$  にも依存する。この  $i\omega_l$  依存性は温度 Green 関数を遅延 Green 関数に解析接続した際に実時間の依存性として現れ、 $\varepsilon(q, i\omega_l)$  が電子ガスの外場に対する応答を決める重要な量となる。この  $\varepsilon(q, i\omega_l)$  を誘電率、もしくは誘電関数と呼ぶ。

分極部分を実際に求める。まず以下のように部分分数展開する。

$$\begin{aligned} \Pi(k, i\omega_l) &= -\frac{2}{\beta V} \sum_{q,m} \frac{1}{i\omega_{m+l} - \xi_{k+q}} \frac{1}{i\omega_m - \xi_q} \\ &= -\frac{2}{\beta V} \sum_{q,m} \left( \frac{1}{i\omega_{m+l} - \xi_{k+q}} - \frac{1}{i\omega_m - \xi_q} \right) \frac{1}{\xi_{k+q} - \xi_q - i\omega_l}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

\*16 虚時間なので本当のエネルギーではないが

かっこの外の最後の部分は  $m$  に依存しないことに注意する. ここで  $m$  に関する和は以下のような複素積分で計算することができる.

$$\frac{1}{\beta} \sum_m g(i\omega_m) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{g(z)}{e^{\beta z} + 1} dz. \quad (3.7)$$

なぜなら  $(e^{\beta z} + 1)^{-1}$  は  $z = (2m + 1)i\pi/\beta$  に極を持ち, その留数は  $-\beta^{-1}$  だからである. 積分経路は図 10 の  $C$  のように反時計回りにとっている. 積分経路を図 10 の  $C'$  のように変形して, 極が実軸上の  $z = \xi_{k+q}, \xi_q$  にあることに注意して積分すると,

$$\int_C \left( \frac{1}{z - \xi_{k+q}} - \frac{1}{z - \xi_q} \right) \frac{1}{e^{\beta z} + 1} dz = f_{k+q} - f_q \quad (3.8)$$

を得る. ここで  $f_k = (e^{\beta \xi_k} + 1)^{-1}$  はフェルミ粒子の分布関数である. よって分極部分を次のように表すことができる.

$$\Pi(k, i\omega_l) = -\frac{2}{V} \sum_q \frac{f_{q-k/2} - f_{q+k/2}}{i\omega_l + \xi_{q-k/2} - \xi_{q+k/2}}. \quad (3.9)$$

ここで  $q \rightarrow q - k/2$  と変換した.  $k \ll k_F$  ( $k_F$  はフェルミ波数) として  $f_{q\pm k/2}$  を展開する.

$$\begin{aligned} f_{q+k/2} - f_{q-k/2} &\simeq \frac{\partial f_q}{\partial \xi_q} (\xi_{q+k/2} - \xi_{q-k/2}) \\ &= \frac{\partial f_q}{\partial \xi_q} \frac{q \cdot k}{m} \end{aligned} \quad (3.10)$$

ここで  $\xi_{q\pm k/2} \simeq \xi_q \pm q \cdot k/(2m)$  を使った. さらに, 絶対零度の場合 (実際には十分低温な領域) を考えると,

$$\frac{\partial f_q}{\partial \xi_q} = -\delta(\xi_q - \xi_F) = -\frac{m}{k_F} \delta(q - k_F) \quad (3.11)$$

となる<sup>\*17</sup>. ここで  $\xi_F$  はフェルミエネルギーである.  $q \cdot k = qk \cos \theta$  を使って和を積分に直すと,

$$\begin{aligned} \Pi(k, i\omega_l) &\simeq -\frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^\infty q^2 dq \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{\frac{m}{k_F} \delta(q - k_F) \frac{qk \cos \theta}{m}}{i\omega_l - \frac{qk \cos \theta}{m}} \\ &= -\frac{2}{(2\pi)^2} m k_F \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{\frac{k_F k \cos \theta}{m}}{i\omega_l - \frac{k_F k \cos \theta}{m}} \\ &= 2\rho_0 \left[ 1 + \frac{i\omega_l}{2v_F k} \ln \left( \frac{i\omega_l - v_F k}{i\omega_l + v_F k} \right) \right] \\ &= 2\rho_0 \left[ 1 - \frac{\omega_l}{v_F k} \arctan \left( \frac{v_F k}{\omega_l} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

と計算できる. ここで  $\rho_0 = 2mk_F/(2\pi)^2$  はフェルミエネルギーにおける単位体積, スピンあたりの状態密度であり,  $v_F = k_F/m$  はフェルミ速度である.

分極部分が求まったのでここから遮蔽されたポテンシャルを求めることができる. 遮蔽効果を見るためには静的な場合 ( $\omega_l = 0$ ) を考えればよい<sup>\*18</sup>. それは次のようになる.

$$\Pi(k, 0) = 2\rho_0 = \frac{mk_F}{\pi^2} \quad (3.13)$$

$$\implies \tilde{U}_{\text{遮蔽}}(q) = \frac{U(q)}{1 + \tilde{U}(q)\Pi(q, 0)} = \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2} \frac{1}{1 + q_T^2/q^2}. \quad (3.14)$$

\*17 分布関数が階段関数となり, その微分はデルタ関数になる.

\*18 ここではすべての相互作用が素粒子のやりとりで起こるような理論を扱っているわけではなく, クーロンポテンシャルが最初から “ある” ような場合を考えたい. これは古典電磁気学でお馴染みの設定である. よってポテンシャルの効果が無限の時間をかけてゆっくりやってくるような静的な極限をとるのである.

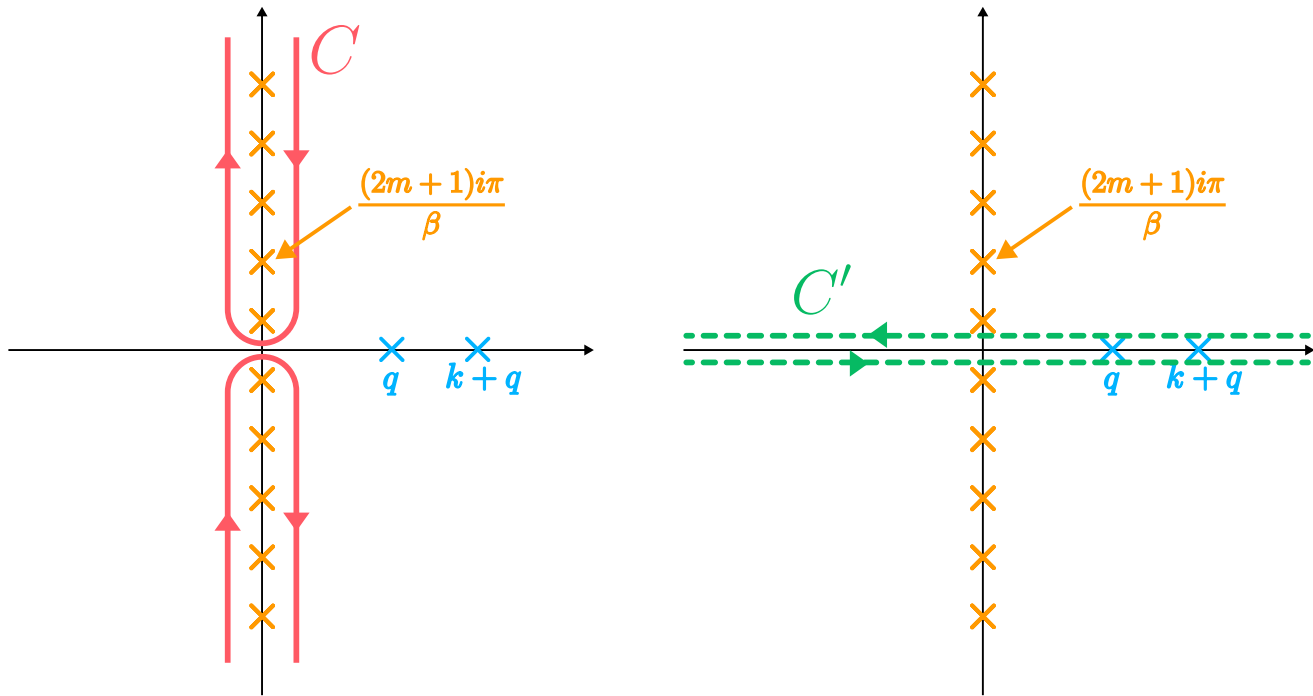


図 10 積分経路の図.  $i\omega_m$  に極が並んでいる. 左は  $m$  に関する和を積分に直すための経路  $C$  で, 極が  $i\omega_m = (2m+1)i\pi/\beta$  にあり, 留数が  $-\beta^{-1}$  である. 右は経路  $C$  を変形して経路  $C'$  にしたもの.

ここで  $q_T^2 := e^2 m k_F / (\varepsilon_0 \pi^2)$  と定義した. このようにして得られた  $\tilde{U}_{\text{遮蔽}}(q)$  をフーリエ変換すると, 先に見たような距離に関して減衰のあるポテンシャルが得られる\*19.

また, 分極部分の動的極限である高エネルギー側をとると, 電子ガスのプラズマ振動という現象を説明することができる. 動的極限は  $\arctan x \sim x - x^3/3$  を使って,

$$\Pi(k, i\omega_l) = \frac{2}{3} \rho_0 \left( \frac{v_F k}{\omega_l} \right)^2 \quad (3.15)$$

となる. フェルミ波数は  $k_F^3 = 3\pi^2 n$  ( $n$  は電子ガスの数密度) を満たすので,

$$\rho_0 v_F^2 = \frac{2k_F^3}{(2\pi)^2 m} = \frac{3n}{2m} \quad (3.16)$$

となる. そこで  $\omega_p^2 := ne^2 / (\varepsilon_0 m)$  とおくと,

$$\varepsilon(q, i\omega_l) \sim 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_l^2} \quad (3.17)$$

となり, これを  $i\omega_l \rightarrow \omega + i\varepsilon$  と解析接続すると実時間での誘電率 (誘電関数) が次のように得られる.

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{(\omega + i\varepsilon)^2} \quad (3.18)$$

誘電率は外部電場に対する応答を表すが, この結果は  $\omega = \omega_p$  のところに減衰なしの集団励起モードが存在することを示す. この集団励起をプラズマ振動と呼び,  $\omega_p$  をプラズマ振動数という.

前章の式 (2.85) を用いることで, RPA 近似による自由エネルギーの補正も求めることができる.

\*19 ここで現れたフーリエ変換はフーリエ変換を習いたての頃に必ず練習するはずの問題である. 遮蔽されたポテンシャルは湯川型ポテンシャルなどと呼ばれ物理のあらゆるところで顔を出す.

## 4 電子-フォノン相互作用

### 4.1 フォノンの記述

結晶は規則的に並んだ原子からできており、原子が平衡位置からずれてそれが振動として結晶を伝わることをできる。そもそもなぜ原子が結晶を作るのか、原子間に働く力はどうのように記述されるかという問題は難しいが、一旦最もらしいモデルを立ててこの結晶の振動の自由度を記述することを試みる。まずは古典力学で考えて、その後それを正準量子化をもって量子力学で扱うことにする。

考えるモデルは3次元の結晶で、すべて同一の質量  $m$  をもつ原子が隣接する原子とバネ定数  $\kappa$  のバネで繋がっているとす<sup>\*20</sup>。結晶の基本並進ベクトルを  $a_1, a_2, a_3$  とする。このときこの系のラグランジアンは以下のようなになる。

$$L = \sum_R \left[ \frac{m}{2} \dot{u}_R(t)^2 - \frac{\kappa}{2} \sum_X (u_{R+X}(t) - u_R(t))^2 \right]. \quad (4.1)$$

ここで、 $R$  は原子の振動中心の位置で、並進ベクトルと整数の組  $(n_1, n_2, n_3)$  を用いて  $R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$  と表せる。 $R$  についての和はすべての原子についての和という意味になる。 $X$  は  $R$  に隣接する原子までのベクトルを表しており、その和は  $R$  に近接する原子についての和である。原子の振動中心からの変位を3次元ベクトル  $u_R(t)$  として、 $\dot{u}_R(t)$  はその時間微分である。

単純な相互作用をする格子模型ではフーリエ変換によりラグランジアン(ハミルトニアン)を対角化できることが多い。そこで、変位ベクトルを次のように展開する。

$$u_R(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in K} \sum_{\alpha} e_{k,\alpha} q_{k,\alpha} e^{ikR} \quad (4.2a)$$

$$q_{k,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e_{k,\alpha} \cdot u_R(t) e^{-ikR}. \quad (4.2b)$$

ここで  $N$  は原子の総数であり、 $e_{k,\alpha}$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ )<sup>\*21</sup> は波数  $k$  のモードの振動方向を表す3次元ベクトルで、 $e_{k,\alpha} = e_{-k,\alpha}$  を満たす。 $k$  の和の範囲は第1ブリルアンゾーン  $K := \{k | -\pi \leq k \cdot a_i \leq \pi, (i = 1, 2, 3)\}$  を取ればよい。実際の計算の際には周期境界条件などを課して  $k_i = 2\pi\nu_i/L_i$  ( $\nu_i \in \mathbb{Z}$ ) と具体的に  $k$  の取る値を決める。 $(i$  方向の長さを  $L_i$  として、その方向に並ぶ原子数を  $N_i$  とする。すると  $N_i a_i = L_i$  が成立する。)

フーリエ変換で定義した  $q_{k,\alpha}$  を用いてラグランジアンを書くと、

$$L = \sum_{k,\alpha} \left[ \frac{m}{2} \dot{q}_{k,\alpha} \dot{q}_{-k,\alpha} - \frac{\kappa}{2} \sum_X 4 \sin \frac{kX}{2} q_{k,\alpha} q_{-k,\alpha} \right] = \sum_{k,\alpha} \left[ \frac{m}{2} \dot{q}_{k,\alpha} \dot{q}_{-k,\alpha} - \frac{m\omega_k^2}{2} q_{k,\alpha} q_{-k,\alpha} \right] \quad (4.3)$$

となる。ここで  $\omega_k^2 = \kappa/m \sum_X 4 \sin(kX/2)$  で定義した。ハミルトニアンを求めるために、 $q_{k,\alpha}$  の正準共役運動量を求める。

$$p_{k,\alpha} := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{k,\alpha}} = m \dot{q}_{-k,\alpha} = m \dot{q}_{k,\alpha}^*. \quad (4.4)$$

3つ目の等号については  $q_{k,\alpha}$  の定義からわかる。ここで定義した  $p_{k,\alpha}$  を用いるとハミルトニアンは

$$H = \sum_{k,\alpha} \left[ \frac{1}{2m} p_{k,\alpha} p_{-k,\alpha} + \frac{m\omega_k^2}{2} q_{k,\alpha} q_{-k,\alpha} \right] \quad (4.5)$$

\*20 本当にバネで繋げてしまうと例えば  $x$  方向に伸びたとき、同時に  $y, z$  方向にも伸びてしまい少し違った振る舞いをしてしまう。ここでは3方向独立に動ける(非現実的な)状況を考えている。

\*21 フォノンの場合には電磁場と違い縦波も許され、振動方向は3方向存在する。

のように調和振動子の集まりとして書ける。ここでは結晶が単一の原子でできたものとして考えたが、2種類以上の原子がある場合でも同様にハミルトニアンを対角化することができる。しかしその場合固有値にあたる  $\omega_k$  が簡単な形ではなくなることに注意が必要である。例えば周期性が  $R$  から  $2R$  に変わる場合、今出てきた  $\omega_k$  が記述する音響モードに加え、光学モードと呼ばれる新しいモードが出現する。詳しくは固体物理の教科書 [15, 5] を参照されたい。

この系を量子化するために、正準量子化の手続きを踏むことにする。次の交換関係を要請する。

$$[q_{k,\alpha}, p_{k',\alpha'}] = i\delta_{kk'}\delta_{\alpha\alpha'}. \quad (4.6)$$

ここでは  $q_{k,\alpha}, p_{k,\alpha}$  を演算子と考えている\*22。次に調和振動子を演算子法で解くときと同じようにして、次の生成消滅演算子を定義する。

$$b_{k,\alpha} := \sqrt{\frac{m\omega_k}{2}} \left( q_{k,\alpha} + \frac{i}{m\omega_k} p_{-k,\alpha} \right) \quad (4.7a)$$

$$b_{k,\alpha}^\dagger := \sqrt{\frac{m\omega_k}{2}} \left( q_{k,\alpha}^\dagger - \frac{i}{m\omega_k} p_{-k,\alpha}^\dagger \right). \quad (4.7b)$$

ここで  $q_{k,\alpha}, p_{k,\alpha}$  は必ずしもエルミートではない。演算子の  $q_{k,\alpha}^\dagger$  に対応するのは古典では  $q_{k,\alpha}^*$  (複素共役) であり、 $q_{k,\alpha}^* = q_{-k,\alpha}$  より、演算子は  $q_{k,\alpha}^\dagger = q_{-k,\alpha}$  を満たす。これは  $p$  の方も同様である。以上より、ハミルトニアンは生成消滅演算子を用いて、

$$H = \sum_{k,\alpha} \omega_k \left( b_{k,\alpha}^\dagger b_{k,\alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.8)$$

のように表すことができる。また、 $q_{k,\alpha}, p_{k,\alpha}$  を逆に生成消滅演算子で表すこともできて、そこから変位を表す演算子  $u_R(t)$  は以下のように書くことができる。

$$\begin{aligned} u_R(t) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,\alpha} e_{k,\alpha} q_{k,\alpha} e^{ikR} \\ &= \sum_{k,\alpha} \sqrt{\frac{1}{2Nm\omega_k}} e_{k,\alpha} \left( b_{k,\alpha} e^{ikR} + b_{k,\alpha}^\dagger e^{-ikR} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

格子間隔 (格子定数) を 0 にする極限で結晶は連続体になり、その変位は連続的なラベル  $x$  で書くことができる。原子の数密度を  $n_i = N/V$  とすると、この極限で変位は

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k,\alpha} \sqrt{\frac{1}{2n_i m \omega_k}} e_{k,\alpha} \left( b_{k,\alpha} e^{ikx} + b_{k,\alpha}^\dagger e^{-ikx} \right) \quad (4.10)$$

となる。これはある種のスカラー場を表していると見ることができる。波数の和が未だ離散的なのに注意が必要である。格子模型における極限は2種類存在し、1つ目は格子の間隔を 0 にする連続体の極限で、2つ目は体積無限大の極限である。前者では位置のラベルが  $R$  から  $x$  へと連続になり、後者では波数  $k$  が連続になる。また、この導出では生成消滅演算子がすでに時間依存性を持って定義されており、ハイゼンベルグ表示を用いていると考えて差し支えない。

## 4.2 電子-フォノン相互作用

電子と原子 (の振動であるフォノン) との相互作用を考える。本来は原子の作る周期ポテンシャルにより電子はブロッホ状態で記述されるようになるが、ここでは周期ポテンシャルが一様正電荷だとして自由電子の系と

\*22 定義域と値域を書かかずに演算子を定義するのは許せないという方もいるかもしれない、が許していただきたい。



して考える。イオンと電子のクーロン相互作用によるハミルトニアンはシュレディンガー表示で次のように書ける。

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x \int d^3x' \frac{-Ze^2}{|x-x'|} \psi(x)^\dagger \psi(x) n_i(x') \quad (4.11)$$

ここで  $n_i(x')$  は原子の位置  $x'$  における数密度であり、平均の数密度  $n_i$  を用いて次のように近似することができる。

$$n_i(x') = \frac{n_i v}{v + \delta v} \simeq n_i \left(1 - \frac{\delta v}{v}\right) = n_i (1 - \nabla \cdot u(x')) \quad (4.12)$$

これは最初微小体積  $v$  にあった原子数を振動による変化後の体積  $v + \delta v$  で割って変化した数密度  $n_i(x')$  を求めたことに相当する。右辺の第1項は一様正電荷による寄与を与えるので、結局フォノンとの相互作用は次のハミルトニアンで記述できる。

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x \int d^3x' \frac{Ze^2 n_i}{|x-x'|} \psi(x)^\dagger \psi(x) \nabla \cdot u(x'). \quad (4.13)$$

関係式

$$\frac{1}{|x-x'|} = \frac{4\pi}{V} \sum_q \frac{e^{iq(x-x')}}{q^2}, \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot u(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k,\alpha} i \sqrt{\frac{1}{2n_i m \omega_k}} (e_{k,\alpha} \cdot k) (b_{k,\alpha} e^{ikx} - b_{k,\alpha}^\dagger e^{-ikx}) \\ &= \sqrt{\frac{1}{2n_i m V}} \sum_{k,\alpha} \frac{i(k \cdot e_{k,\alpha})}{\sqrt{\omega_k}} (b_{k,\alpha} + b_{-k,\alpha}^\dagger) e^{ikx}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

を用いて電子-フォノン相互作用のハミルトニアンは運動量表示で以下のようにになる。(式 (4.15) の2行目では  $e_{k,\alpha} = e_{-k,\alpha}$  を用いた。)

$$H_{e-p} = \frac{Ze^2 n_i}{\epsilon_0 \sqrt{2n_i m V}} \sum_{k,q} \frac{1}{\sqrt{\omega_q}} \frac{1}{q} c_{k+q} c_k (b_q + b_{-q}^\dagger). \quad (4.16)$$

電子の生成消滅演算子が  $c_k, c_k^\dagger$  で、フォノンの生成消滅演算子が  $b_k, b_k^\dagger$  である。また、フォノンは縦波成分だけを取り出して書いた。つまり、 $k \cdot e_{k,\alpha}$  を改めて  $q$  とおいたことになる。

以上の解析ではフォノンが電子と直接クーロン相互作用をすとしたが、実際には前章で見たように、電子相関により遮蔽効果が起こる (図 11)。よってクーロンポテンシャルを以下のように遮蔽されたものに変更する必要がある。

$$\frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \rightarrow \frac{e^2}{\epsilon_0 (q^2 + q_T^2)}. \quad (4.17)$$

この変更により、電子-フォノン相互作用を次のように書き直すことになる。

$$\begin{aligned} H_{e-p} &= \sum_{kq} g(q) c_{k+q}^\dagger c_k (b_q + b_{-q}^\dagger), \\ g(q) &= \frac{Ze^2 n_i q}{\epsilon_0 (q^2 + q_T^2) \sqrt{2n_i m \omega_q V}}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

$g_q$  はフォノンと電子の結合定数である (定数といいつつ  $q$  に依存)。  $g_{-q} = g_q^*$  より、この相互作用ハミルトニアンはエルミートであることがわかる。ここではフォノンの縦波成分だけが相互作用をすとし、またフォノン

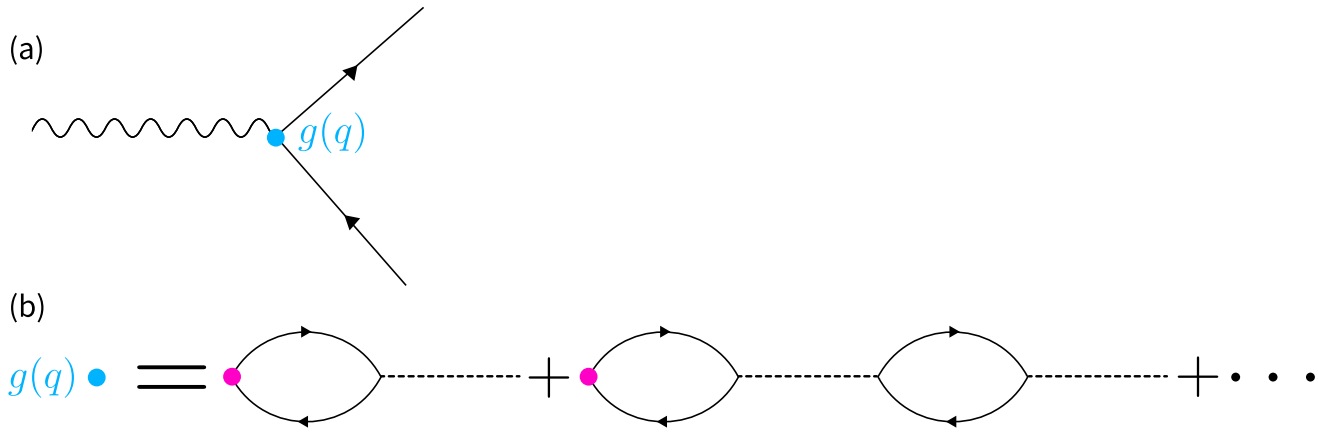


図 11 遮蔽効果による電子-フォノン結合定数の補正. 上の図 (a) が結合定数  $g(q)$  での電子-フォノンの散乱過程を描いている.  $g(q)$  は下の図 (b) のように, 電子間のクーロン力により遮蔽される. 波線はフォノンの Green 関数を表し, ピンク色の点が遮蔽前の裸の結合定数である.

のエネルギー  $\omega_q$  に上限も課さず<sup>\*23</sup>, さらに電子を自由電子だと考えて結果を導いた. これらは必ずしも現実の金属に適用しないので実験と比較する場合はより正確な議論が必要である.

この節の最後に, 相互作用のポテンシャルを求めるもう一つの方法を紹介する. 先述の議論は原子の数密度の変化の結果ポテンシャルがかかるという流れであったが, 今度は電子と原子の位置の変化から直接相互作用ポテンシャルを導く. 電子の位置は  $x$ , 原子の静止位置は  $x'$  とすると, 原子が  $u(x')$  だけ変位したとするとポテンシャルは次のように変化する.

$$U(x - x') \rightarrow U(x - x' - u(x')) \simeq U(x - x') - u(x') \cdot \nabla U(x - x'). \quad (4.19)$$

この式右辺第 2 項を  $x'$  に関して部分積分すると,

$$\begin{aligned} & \int d^3x' u(x') \cdot \nabla U(x - x') \\ &= \int d^3x' [\nabla \cdot (U(x - x')u(x')) - U(x - x')\nabla \cdot u(x')] = - \int d^3x' U(x - x')\nabla \cdot u(x') \end{aligned} \quad (4.20)$$

を得る. もちろん表面項を落とした. これは先に得た結果と整合する.

### 4.3 フォノンの Green 関数

電子-フォノン系の全系のハミルトニアンは次のように書ける.

$$\begin{aligned} H &= H_e + H_p + H_{e-p} \\ &= \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_q \omega_q b_q^\dagger b_q + \sum_{k,q} g(q) c_{k+q}^\dagger c_k \varphi_q. \end{aligned} \quad (4.21)$$

右辺はそれぞれ電子, フォノン, 電子-フォノン相互作用のハミルトニアンである. ここで  $\varphi_q := b_q + b_{-q}^\dagger$  とおいた. このようにおいた  $\varphi_q$  はスピン 0 の実スカラー場を表す. 収束性などの難しい部分は置いておいて,  $H_{e-p}$  を摂動としてこの系の Green 関数を考える.

電子の Green 関数  $\mathcal{G}(k, \tau)$  は以下のように書ける.

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k, \tau) &= - \langle \text{T} U(\beta) c_k(\tau) c_k^\dagger \rangle_{0L}, \\ U(\beta) &= \text{T} \exp \left[ - \int_0^\beta d\tau' H_{e-p}(\tau') \right]. \end{aligned} \quad (4.22)$$

\*23 第 1 ブリルアンゾーンを超えた運動量 (波数) を持つフォノンの散乱をウムクラップ散乱と呼ぶ.

この Green 関数の 0 次の項は当然自由電子の Green 関数であり, 1 次の項はフォノンがただ生成されるだけでもしくはただ消滅するだけの過程しか含まず平均をとって消えてしまう. よって最低次の寄与は 2 次であり, その寄与は次のように書ける.

$$-\frac{1}{2!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_{k_1, q_1, k_2, q_2} g(q_1)g(q_2) \times \langle T c_{k_1+q_1}^\dagger(1) c_{k_1}(1) \varphi_{q_1}(1) c_{k_2+q_2}^\dagger(2) c_{k_2}(2) \varphi_{q_2}(2) c_k(\tau) c_k^\dagger \rangle_{0L}. \quad (4.23)$$

ここで  $\tau_1, \tau_2$  を引数の中では簡単に 1, 2 と書いた. フォノンと電子の演算子は可換であるので\*24, コントラクションをとると  $\langle \varphi_{q_1}(1) \varphi_{q_2}(2) \rangle_{0L}$  が得られる. 定義から明らかにこれは  $q_1 = -q_2$  でないと 0 を与える. よってこの条件のもとで, 外線とつながったコントラクションとして以下が得られる.

$$\begin{array}{c} \overbrace{c_{k_1+q}^\dagger(1) c_{k_1}(1) \varphi_q(1) c_{k_2-q}^\dagger(2) c_{k_2}(2) \varphi_{-q}(2) c_k(\tau) c_k^\dagger} \\ \overbrace{c_{k_1+q}^\dagger(1) c_{k_1}(1) \varphi_q(1) c_{k_2-q}^\dagger(2) c_{k_2}(2) \varphi_{-q}(2) c_k(\tau) c_k^\dagger} \end{array} \quad (4.24a)$$

ダイアグラムはそれぞれ図 12 のようになる (虚時間の順序を  $\tau > \tau_1 > \tau_2 > 0$  とする). この系では前章におけるポテンシャルの役割をフォノンが担っており, 電子の運動量交換がフォノンを媒介として起こっている. 自由電子の Green 関数を用いて図 12 の左のダイアグラムの寄与を書くと,

$$\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_q |g(q)|^2 \langle T \varphi_q(1) \varphi_{-q}(2) \rangle_0 \mathcal{G}_0(k, \tau - \tau_1) \mathcal{G}_0(k - q, \tau_1 - \tau_2) \mathcal{G}_0(k, \tau_2) \quad (4.25)$$

となる. ここで現れる  $\langle T \varphi_q(1) \varphi_{-q}(2) \rangle_0$  は自由フォノンの Green 関数である.

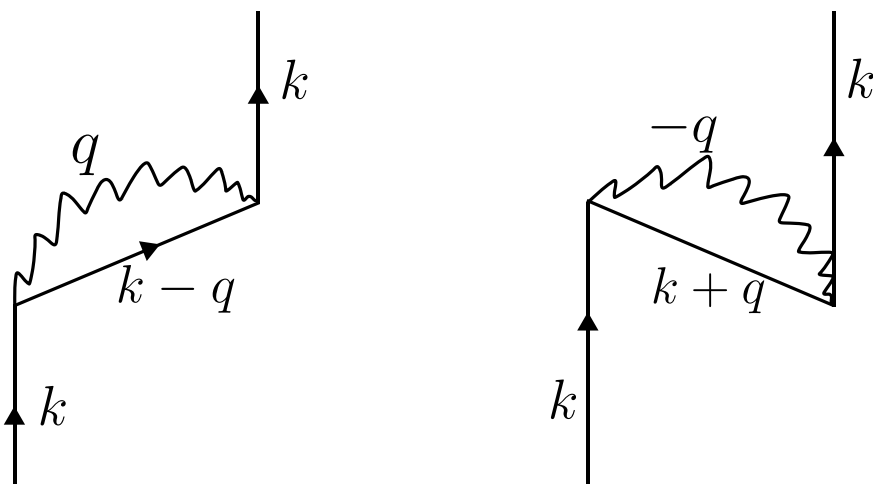


図 12 電子-フォノン相互作用による電子の Green 関数への 2 次寄与. フォノンにより運動量交換が起こっていることがわかる. クーロンポテンシャルと異なり, この過程は有限の時間で起こる.

フォノンの Green 関数を便宜上  $|g(q)|^2$  も含めて,

$$D(q, \tau) = |g(q)|^2 \langle \varphi_q(\tau) \varphi_{-q} \rangle_0 \quad (4.26)$$

と定義する. 虚時間に関するこのフーリエ変換は,

$$D(q, i\nu_l) = |g(q)|^2 \left( \frac{1}{\omega_q + i\nu_l} + \frac{1}{\omega_q - i\nu_l} \right) \quad (4.27)$$

\*24 電子とフォノンの生成消滅演算子が可換かどうかは定義から自明ではない. また, フェルミオンの生成消滅演算子は反可換とすべきか, 可換とすべきかも自明ではない. その交換に対する性質を決めるには多少の議論が必要であるが [16], 普通はどちらに設定しても問題はないようである.

となる. ここで  $\nu_l = 2l\pi/\beta$  ( $l \in \mathbb{Z}$ ) である. 電子-フォノン相互作用の摂動計算は, 前章まで点線で表していたポテンシャルの部分をもフォノンの Green 関数にしてそれに  $D(q, \nu_l)$  を対応させて実行することができる. たとえば図 13 のような電子の 2 次の自己エネルギー  $\Sigma(k, i\omega_l)$  は次のように計算できる.

$$\Sigma(k, i\omega_l) = \frac{1}{\beta} \sum_{p, q, m, n} D(q, i\nu_n) \mathcal{G}_0(p, i\omega_m) \delta_{l, m+n} \delta_{k, p+q}. \quad (4.28)$$

ここでは行わないが, この量は低温領域できちんと計算することができ, 電子の比熱の変化などを捉えることができる.

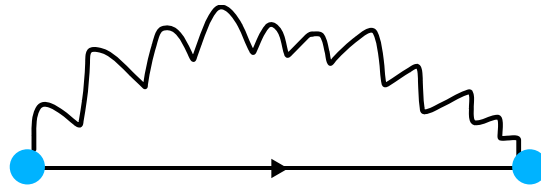


図 13 電子の自己エネルギーに対する 2 次の寄与を表すダイアグラム.

## 5 超伝導

### 5.1 Cooper 不安定性

超伝導は電子間に引力が働くことで電子が Cooper 対と呼ばれるペアを作り、それらが凝縮することで生じる現象である。超伝導を微視的な理論から説明する理論が BCS 理論であり、これは電子間に引力さえ働けば超伝導の諸性質をすべて説明できることを明らかにした点で重要である [17]。電子間の引力はフォノンを媒介として働く。これは前章で扱った電子-フォノン系の解析からわかることではあるが、ここではその導出はしない。また、高温超伝導に代表されるように、超伝導の起源にはまだ謎があるということも指摘しておく。

ここではまず電子間に引力が働くとフェルミ面が不安定になり、系がより低いエネルギー状態を持つようになることを説明する。第 1 原理的なハミルトニアンから出発してこれを導くのは置いておいて、引力相互作用を持つ最も単純なモデルを用いることにする。考えるハミルトニアンは次のように書ける。

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + g \sum_q \Phi_q^\dagger \Phi_q. \quad (5.1)$$

ここで  $\Phi_q := \sum_k' c_{-k\downarrow} c_{k+q\uparrow}$  であり、重心運動量  $q$  を持つ電子の対を表している。和の  $\sum_k'$  は実際の系でペアを作る電子がフェルミ面近傍、すなわち  $|\xi_k| < \omega_D, |\xi_{k+q}| < \omega_D$  を満たすものに限られていることから、この範囲に  $k$  を制限した和を表す記号である。 $\omega_D$  は今の場合どの程度の振動数 (エネルギー) でも良いが、典型的にはフォノンのエネルギーのカットオフであるデバイ振動数にとることにする。

このような系が低温においてある種の“異常”を起こすことを見るために、電子対を外部から打ち込むことを考える。それは相互作用ハミルトニアン  $H_{\text{ext}} = -F e^{-i\omega t} \Phi_q^\dagger$  を加えることで実現される。応答としては電子対の平均  $\langle \Phi_q(t) \rangle$  を考えるのだが、これは普通の金属では  $q=0, \omega=0$  のとき 0 であることに注意する。線形応答理論から、この応答は次のように遅延 Green 関数を用いて求めることができる。

$$\langle \Phi_q(t) \rangle = -F e^{-i\omega t} D^R(q, \omega), \quad (5.2)$$

$$D^R(q, \omega) = -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [\Phi_q(t), \Phi_q^\dagger] \rangle. \quad (5.3)$$

ここで定義した遅延 Green 関数  $D^R(q, \omega)$  を求めるためには、対応する温度 Green 関数

$$D(q, i\omega_n) = - \int_0^\beta e^{i\omega_n \tau} \langle \Phi_q(\tau) \Phi_q^\dagger \rangle \quad (5.4)$$

を求めてから解析接続  $i\omega_n \rightarrow \omega + i\varepsilon$  をすればよい。

当然  $D(q, i\omega_n)$  を厳密に求めることは難しいので、RPA 近似をしたときと同じような近似をして求めることにする。この近似は図 14 のようなダイアグラムで描くことができ、分極部分  $\Pi(q, i\omega_n)$  を用いて次のように表せる。

$$\begin{aligned} D(q, i\omega_n) &= \Pi(q, i\omega_n) + \Pi(q, i\omega_n) g D(q, i\omega_n), \\ \Rightarrow D(q, i\omega_n) &= \frac{\Pi(q, i\omega_n)}{1 - g\Pi(q, i\omega_n)}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

分極部分は次のように定義される。

$$\Pi(q, i\omega_n) := \frac{1}{\beta} \sum_{k, i\omega_m}' \mathcal{G}_0(k+q, i\omega_n + i\omega_m) \mathcal{G}_0(-k, -i\omega_m). \quad (5.6)$$

これを実際に計算していくが、先に結果を述べると、ある温度  $T_c = 1/\beta_c$  で  $D(0, 0)$  が発散することがわかる。

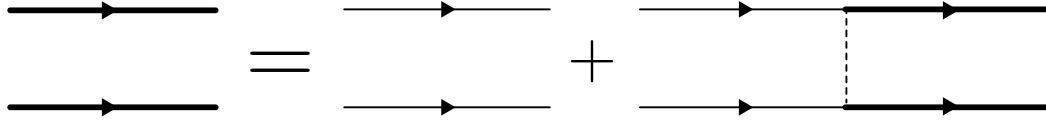


図 14 電子対の期待値を求めるための Dyson 方程式のダイアグラムによる表現.

以下これを検証していく.

$$\begin{aligned}
 \Pi(0,0) &= \frac{1}{\beta} \sum'_{k,i\omega_m} \mathcal{G}_0(k, i\omega_m) \mathcal{G}_0(-k, -i\omega_m) \\
 &= \frac{1}{\beta} \sum'_{k,i\omega_m} \left( \frac{1}{i\omega_m + \xi_k} - \frac{1}{i\omega_m - \xi_k} \right) \frac{1}{2\xi_k} \\
 &= \sum'_k \frac{1}{2\xi_k} \frac{1}{2\pi i} \int_C \left( \frac{1}{z + \xi_k} - \frac{1}{z - \xi_k} \right) \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \quad (\because 3.1 \text{ 節を参照}) \\
 &= \sum'_k \frac{f_{-k} - f_k}{2\xi_k} = \sum'_k \frac{1 - f_k}{2\xi_k}. \tag{5.7}
 \end{aligned}$$

和  $\sum'_k$  の範囲はフェルミ面近傍に限定してあるので, フェルミ面の状態密度  $D(0)$  を用いてこの和を評価できる.

$$\begin{aligned}
 \Pi(0,0) &= \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi D(\xi) \frac{1 - f_k}{2\xi} \\
 &\simeq D(0) \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \tanh\left(\frac{\beta\xi}{2}\right) \\
 &\simeq D(0) \ln\left(\frac{2e^\gamma}{\pi} \beta\omega_D\right) \quad \text{when } 1 \ll \beta\omega_D. \tag{5.8}
 \end{aligned}$$

最後は低温での値を求めた. ここで  $\gamma$  はオイラー定数であり,  $\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} (\sum_{k=1}^n k^{-1} - \ln n)$  である.  $D = \Pi/(1 - g\Pi)$  であるので,  $D$  が発散する温度  $T = T_c$  は,

$$\begin{aligned}
 gD(0) \ln\left(\frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\omega_D}{T_c}\right) &= 1 \\
 \implies T_c &= \frac{2e^\gamma}{\pi} \omega_D \exp\left(-\frac{1}{gD(0)}\right), \tag{5.9}
 \end{aligned}$$

と求まる.  $2e^\gamma/\pi \approx 1.13$  である. この結果が意味するのは, たとえエネルギーも運動量も 0 の電子ペアでも自発的に  $\langle \Phi_0 \rangle \neq 0$  の状態を系がとりうるということを示している.  $\Phi_0 = \sum'_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \neq 0$  であるので, 少なくとも一つのペアで  $\langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle \neq 0$  となる. 正常状態であれば消滅演算子同士の期待値は 0 であるのでこれはある意味で“異常”な状態であり, フェルミ面が不安定であるとはこのことを指すのである. 超伝導転移が 2 次相転移であること, 低温の秩序相で  $\langle \Phi_0 \rangle$  が自発的に  $\neq 0$  の状態になること, などを鑑みるに, この  $\langle \Phi_0 \rangle$  がまさに相転移のオーダーパラメーターであることが予想できるだろう. 実際 BCS 理論ではこれはギャップ関数と呼ばれ, GL 理論ではオーダーパラメーターの役割を担うことがわかっている.

この節の解析で, 電子間に引力が働くとフェルミ面が不安定となり, 消滅演算子同士の期待値  $\langle cc \rangle$  が自発的に非ゼロの状態を取ることがわかった. しかしこれだけでは当然超伝導状態の性質を説明しつくすことはできない. 次節において平均場近似の範囲で電子の Green 関数を求めることで超伝導の諸性質が解明されることを見る.



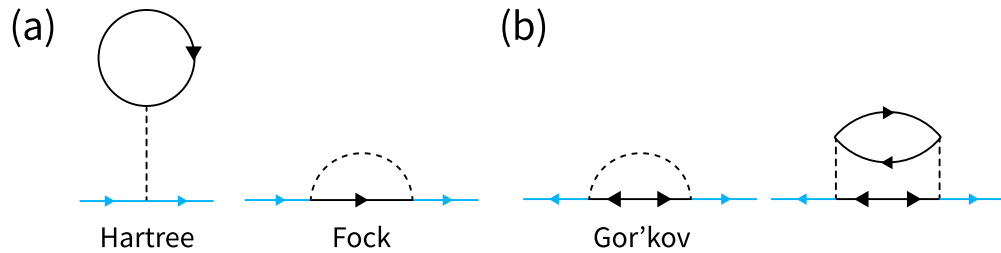


図 15 超伝導状態で寄与する 2 種類の自己エネルギーのダイアグラム. (a) は通用の自己エネルギーへの寄与, (b) は異常な自己エネルギーである. 自己エネルギーは黒線の部分で, 青線は自己エネルギーには含まれない外線である. 左から Hartree 項, Fock 項, Gor'kov 項である. 右端は異常自己エネルギーの 2 次の寄与であり, 平均場近似では考慮しない.

## 5.2 BCS 理論

前節での解析により電子間に引力が働く系は低温で消滅演算子同士の積の期待値  $\langle c_{-k\downarrow}c_{k\uparrow} \rangle$  が非ゼロとなることを見た. 定量的な議論をするために次のように通常の Green 関数  $\mathcal{G}$  と, “異常 Green 関数”  $\mathcal{F}$  を定義する.

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(k, i\omega_n) &:= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle \text{T}c_{k\sigma}(\tau)c_{k\sigma}^\dagger \rangle, \\ \mathcal{F}(k, i\omega_n) &:= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle \text{T}c_{k\uparrow}(\tau)c_{-k\downarrow} \rangle, \\ \mathcal{F}^\dagger(k, i\omega_n) &:= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle \text{T}c_{-k\downarrow}^\dagger(\tau)c_{k\uparrow}^\dagger \rangle.\end{aligned}\quad (5.10)$$

超伝導状態における自己エネルギーには図 15 のように 2 種類のもので考えられる. これらをそれぞれ  $\Sigma(k, i\omega_n), \Xi(k, i\omega_n)$  とおくと, Dyson(-Gor'kov)<sup>\*25</sup>方程式は次のように書ける.

$$\mathcal{G}(k) = \mathcal{G}_0(k) + \mathcal{G}_0(k)\Sigma(k)\mathcal{G}(k) + \mathcal{G}_0(k)\Xi(k)\mathcal{F}^\dagger(k), \quad (5.11a)$$

$$\mathcal{F}^\dagger(k) = \mathcal{G}_0(-k)\Sigma(-k)\mathcal{F}^\dagger(k) + \mathcal{G}_0(-k)\Xi(-k)\mathcal{G}(k). \quad (5.11b)$$

ここで  $k = (k, i\omega)$ ,  $-k = (-k, -i\omega_n)$  と略記した. この方程式は南部表示と呼ばれる記法を用いると見通しがよい. 南部表示ではスピンシングレットを作る  $c_{k\uparrow}, c_{-k\downarrow}^\dagger$  を組にした次のベクトルを考える.

$$\Psi_k := \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \Psi_k^\dagger = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^\dagger & c_{-k\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

これを用いて次の Green 関数を定義する.

$$\mathcal{G}(k, \tau) := - \langle \text{T}\Psi_k(\tau)\Psi_k^\dagger \rangle = \begin{pmatrix} - \langle \text{T}c_{k\uparrow}(\tau)c_{k\uparrow}^\dagger \rangle & - \langle \text{T}c_{k\uparrow}(\tau)c_{-k\downarrow} \rangle \\ - \langle \text{T}c_{-k\downarrow}^\dagger(\tau)c_{k\uparrow}^\dagger \rangle & - \langle \text{T}c_{-k\downarrow}^\dagger(\tau)c_{-k\downarrow} \rangle \end{pmatrix}, \quad (5.13a)$$

$$\mathcal{G}(k, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \mathcal{G}(k, \tau). \quad (5.13b)$$

\*25 おそらく超伝導のときは Gor'kov をつけることが多いのだと思われる.

定義からこれは  $2 \times 2$  行列となる. 同じように  $2 \times 2$  行列である  $\mathcal{G}_0(k, i\omega_n), \Sigma(k, i\omega_n)$  を次のように定義する.

$$\mathcal{G}_0(k, i\omega_n) = - \int_0^\beta d\tau \langle T \Psi_k(\tau) \Psi_k^\dagger \rangle_0, \quad (5.14)$$

$$\Sigma(k, i\omega_n) = \begin{pmatrix} \Sigma(k, i\omega_n) & \Xi(k, i\omega_n) \\ \Xi^*(k, i\omega_n) & \Sigma(-k, -i\omega_n) \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

すると先の Dyson–Gor’kov 方程式は次のように行列の方程式として書ける.

$$\mathcal{G}(k) = \mathcal{G}_0(k) + \mathcal{G}_0(k) \Sigma(k) \mathcal{G}(k). \quad (5.16)$$

この方程式はダイアグラムで書けば次の式のようにになる. この方程式を平均場近似で解いたものが BCS 理論にほかならない.

$$\left( \begin{array}{c} \overleftarrow{\quad} \quad \overleftrightarrow{\quad} \\ \overleftrightarrow{\quad} \quad \overrightarrow{\quad} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \overleftarrow{\quad} \\ \overrightarrow{\quad} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \overleftarrow{\quad} \\ \overrightarrow{\quad} \end{array} \right) \begin{pmatrix} \Sigma & \Xi \\ \Xi^* & \Sigma \end{pmatrix} \left( \begin{array}{c} \overleftarrow{\quad} \quad \overleftrightarrow{\quad} \\ \overleftrightarrow{\quad} \quad \overrightarrow{\quad} \end{array} \right). \quad (5.17)$$

BCS 理論における平均場近似は Hartree–Fock–Gor’kov (HFG) 近似とも呼ばれる近似である. これは通常の自己エネルギー  $\Sigma$  に関しては図 15 の (a) のような寄与を考え, “異常” な自己エネルギー  $\Xi$  に関しては図 15 の (b) の左側のような寄与を考える近似に相当する<sup>\*26</sup>. 今注目するのは異常自己エネルギー  $\Xi$  の方であるので, 通常の自己エネルギーの HF 近似による補正はすでに粒子のエネルギー  $\xi_k$  に考慮されているものとしよう. するとこの近似の範囲で異常自己エネルギーは次のように求めることができる.

$$\Xi = \Delta := - \frac{g}{\beta} \sum_k \sum_n \mathcal{F}^\dagger(k, i\omega_n). \quad (5.18)$$

ここで定義した  $\Delta$  はギャップ関数と呼ばれ,  $\mathcal{F}$  を用いて定義されているため, 最後に自己無撞着に決定する必要がある. 今は電子間の相互作用がデルタ関数的  $\tilde{U}(k - k') = g$  な系を考えているため,  $\Delta$  は  $k$  に依存しない. ここから Dyson–Gor’kov 方程式を解くと,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k) &= \mathcal{G}_0(k) + \mathcal{G}_0(k) \Sigma(k) \mathcal{G}(k) \\ \implies \mathcal{G}(k)^{-1} &= \mathcal{G}_0(k)^{-1} - \Sigma(k) = \begin{pmatrix} i\omega_n - \xi_k & -\Delta \\ -\Delta^* & i\omega_n + \xi_k \end{pmatrix}, \\ \implies \mathcal{G}(k) &= \frac{1}{(i\omega_n)^2 - \xi_k^2 - |\Delta|^2} \begin{pmatrix} i\omega_n + \xi_k & \Delta \\ \Delta^* & i\omega_n - \xi_k \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.19)$$

のように  $\mathcal{G}$  を求めることができる. よって, BCS 理論の自己無撞着方程式 (Self-Consistent equation) は次のように書くことができる.

$$\Delta = - \frac{g}{\beta} \sum_k \sum_n \frac{\Delta}{(i\omega_n)^2 - \xi_k^2 - |\Delta|^2}. \quad (5.20)$$

この方程式の  $n$  に関する和は 3.1 節での議論を繰り返すことで次のように実行できる.

$$1 = g \sum_k \frac{1}{2E_k} \tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right). \quad (5.21)$$

ここで準粒子のエネルギーを  $E_k := \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}$  で定義し, 両辺の  $\Delta$  を約した. さらに, 引力の働く電子がフェルミ面近傍に限られるとすると  $k$  の和もフェルミ面近傍での積分に置き換えることができ, それは次のようになる.

$$1 = gD(0) \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{1}{E_k} \tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right). \quad (5.22)$$

<sup>\*26</sup> Hartree–Fock (HF) 近似は粒子間の相互作用をポテンシャルの変化としてのみ考慮するもので, 平均場近似と同じであることはそのようにして理解できる.

超伝導転移のギャップ関数  $\Delta$  が 0 になる温度が転移温度  $T_c$  であるが、それは  $E_k \rightarrow \xi_k$  という条件のもとでの自己無撞着方程式 (5.22) を解くことで得られる。その計算は前節ですで行なっており、 $\langle cc \rangle$  というペアの期待値が非ゼロになる条件式 (5.8) と同じである。すなわち、BCS 理論による超伝導転移温度  $T_c$  は

$$T_c = \frac{2e^\gamma}{\pi} \omega_D \exp\left(-\frac{1}{gD(0)}\right) \quad (5.23)$$

と求められる。

ギャップ関数はその名の通り、電子のペアについてのエネルギーギャップを表すものである<sup>\*27</sup>。その電子のペアは  $\Psi_k$  そのものというよりは、平均場近似を施したハミルトニアンを  $\Psi_k$  を用いて表したときに、それを対角化するように変換した電子のペアである。この変換のことを Bogoliubov 変換といい、相互作用のある多体系の問題を解く際によく現れるものである。

エネルギーギャップが生まれることにより、超伝導体は摂動に対して“堅い”状態になると表現されることがある。これは直感的には次のように理解することができる。ある外場からの摂動  $H'$  の効果は波動関数の振幅に  $\langle \psi_m | H' | \psi_n \rangle / (E_m - E_n)$  だけ変更を加える。系全体に対するこの摂動の効果が小さいというのは、振幅の和  $\sum_m \langle \psi_m | H' | \psi_n \rangle / (E_m - E_n)$  が十分に小さいということである。この条件は各項について分母  $E_m - E_n$  を有限に保ちながら、分子  $\langle \psi_m | H' | \psi_n \rangle$  を小さくすることで満たされる。エネルギーギャップがない系では分母が 0 に近づいてしまうためこれは満たされない。したがって、エネルギーギャップの存在が摂動に対する“堅さ”に貢献しうるのである。しかし、ただ単にエネルギーギャップがあればよいわけではない。実際に半導体などではバンドギャップというギャップが存在するが、超伝導体のような振る舞いはしない。これは、超伝導体の場合は電子間の相互作用による相関の効果で系全体が巨視的な波動関数として記述できる点で異なっているからである [18]<sup>\*28</sup>。

BCS 理論はあくまでも近似理論であって、実際の物質の転移温度などは正確に計算することはできない<sup>\*29</sup>。そもそも出発点であるハミルトニアンから近似が入っていたのだ。より定量的な結果を目指し、電子-フォノン相互作用から遡って超伝導の性質を調べる理論としてはエリASHBERG (Eliashberg) 理論 [19, 20] などが存在する。

### 5.3 Meissner 効果とゲージ対称性

Meissner 効果は超伝導体内部に磁場が侵入できないという現象のことである。この現象は現象論的にロンドン方程式で記述できるが、BCS 理論はこれに微視的な説明を与える。外部磁場を加えると、電子はベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}(t, x)$  と結合し、その電流密度 (演算子)  $\mathbf{J}$  は場の演算子  $\psi(x)$  を用いて次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(x) &= -\frac{e}{2mi} \sum_{\sigma} [\psi_{\sigma}^{\dagger}(x)(\nabla + ie\mathbf{A})\psi_{\sigma}(x) - ((\nabla + ie\mathbf{A})\psi_{\sigma}(x))^{\dagger}\psi_{\sigma}(x)] \\ &= -\frac{e}{2mi} \sum_{\sigma} [\psi_{\sigma}^{\dagger}(x)\nabla\psi_{\sigma}(x) - (\nabla\psi_{\sigma}^{\dagger}(x))\psi_{\sigma}(x)] - \frac{e^2}{m}\mathbf{A}(t, x) \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(x)\psi_{\sigma}(x). \end{aligned} \quad (5.24)$$

ここで電子の電荷を  $-e$ ,  $\hbar = c = 1$  とした。このように、電流密度は 2 つの部分に分かれており、2 行目第 1 項を常磁性電流、第 2 項を反磁性電流と呼ぶ。通常の状態では常磁性電流が反磁性電流を打ち消すのだが、超伝導状態では常磁性電流が生まれなくなり、その結果反磁性電流が台頭する。Meissner 効果はこのように反磁性電流による完全反磁性として特徴付けられる。

<sup>\*27</sup> Green 関数の極が準粒子のエネルギーを与えるのであった。  $E_k$  は  $k \rightarrow 0$  においても有限の値をもつのでエネルギーギャップがあると言える。

<sup>\*28</sup> 反対に、バンドの概念は結晶中の電子を 1 体問題として扱って出てくるものである。

<sup>\*29</sup> もちろんある程度定量的な結果は得られる。

外部磁場を加えたときの応答を見るためにこの過程を線形応答理論で扱うことにする。まず次の 4 元電流密度を定義する。

$$J^\mu(t, x) = \left( \rho_e(x), \mathbf{j}(x) + \frac{e}{m} \rho_e(x) \mathbf{A}(t, x) \right) \quad (5.25)$$

$$j^\mu(x) = (\rho_e(x), \mathbf{j}(x)) \quad (5.26)$$

$$\text{where } \rho_e(x) := -e \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x),$$

$$\mathbf{j}(x) := -\frac{e}{2mi} \sum_{\sigma} [\psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \nabla \psi_{\sigma}(x) - (\nabla \psi_{\sigma}^{\dagger}(x)) \psi_{\sigma}(x)]. \quad (5.27)$$

4 元ベクトルの時間成分が電荷密度であり、空間成分が電流密度となる。大文字の  $J$  は電磁場があるときの電流で、小文字の  $j$  は電磁場がないときの電流である。これを用いて、電磁場により加わるハミルトニアンは次のように表せる。

$$H' = \int d^3x j^\mu(x) A_\mu(t, x) - \frac{e}{2m} \int d^3x \rho_e(x) |\mathbf{A}(t, x)|^2. \quad (5.28)$$

ここで 4 元ポテンシャル  $A_\mu = (\psi, -\mathbf{A})$  ( $\psi$  はスカラーポテンシャル) を定義した。このハミルトニアンの形はゲージ原理から決まるものである<sup>\*30</sup>。線形応答理論によると、外場  $A_\mu$  を加えることによる電流の変化は  $A$  の 1 次までで、次のように表せる。

$$\langle j^\mu(x) \rangle_t - \langle j^\mu(x) \rangle_0 = \int d^3x' \int dt' R^{\mu\nu}(x, x'; t - t') A_\nu(t', x') \quad (5.29)$$

ここで、添え字についてはアインシュタインの縮約を用い、電磁場を加えてから時間  $t$  だけ後の電流密度の期待値を  $\langle j^\mu(x) \rangle_t$  と書いた。また電磁場がないときの電流密度は  $\langle j^\mu(x) \rangle_0 = (en, 0)$  ( $n$  は数密度) である。係数  $R^{\mu\nu}$  は次のように遅延 Green 関数によって表すことができる。

$$R^{\mu\nu}(x, x'; t) := -i\theta(t) \langle [j^\mu(t, x), j^\nu(x')]_- \rangle. \quad (5.30)$$

ここで  $j^\mu(t, x)$  は電磁場 (摂動項)  $H'$  がいないときのハイゼンベルグ表示、すなわち相互作用表示の電流密度である。ここから、電磁場があるときの電流密度に対して次が成り立つ。

$$\langle J^\mu(t, x) \rangle_t - \langle J^\mu(0, x) \rangle_0 = \int d^3x' \int dt' K^{\mu\nu}(x, x'; t - t') A_\nu(t', x'),$$

$$\text{where } K^{\mu\nu}(x, x'; t) = R^{\mu\nu}(x, x'; t) + \frac{ne^2}{m} \delta(t) \eta^{\mu\nu} (1 - \delta_0^\nu). \quad (5.31)$$

ここで  $\eta^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$  とした。系が並進対称性を持つ場合、 $K^{\mu\nu}$  は座標の差  $x - x'$  にのみ依存するので、上式はフーリエ成分で書くことができ、それは次のようになる。

$$\langle J^\mu(k) \rangle = K^{\mu\nu}(k) A_\nu(k),$$

$$K^{\mu\nu}(k) = R^{\mu\nu}(k) + \frac{ne^2}{m} \eta^{\mu\nu} (1 - \delta_0^\nu),$$

$$R^{\mu\nu}(k) = -i \int dt e^{i\omega t} \theta(t) \langle [j^\mu(t, k), j^\nu(0, -k)]_- \rangle. \quad (5.32)$$

ここで  $j^\mu(t, k)$  は  $j^\mu(x)$  を空間部分についてのフーリエ係数であり、 $j^\mu(k)$  は時間と空間の両方についてのフーリエ係数である。

もし系が摂動に対して“堅い”状態であり、 $R^{\mu\nu}$  の部分が 0 になるのなら線形応答の式 (5.32) はロンドン方程式 [21, 22]:

$$\mathbf{J} = -\frac{ne^2}{m} \mathbf{A} \quad (5.33)$$

\*30 つまり電荷保存則を満たすように決められる。

に帰着する<sup>\*31</sup>. 実際, ギャップが有限のときにこれを示すことができ, 現象論であったロンドン方程式を微視的に説明することが可能となる. すなわち Meissner 効果は常磁性項が反磁性項を打ち消さず,  $K^{\mu\nu}$  が 0 にならないときに起こる現象だと理解できる. 次にこれを示そう.

今知りたいのは超伝導状態において  $R^{\mu\nu}$  が果たして本当に消えるのかどうかである. そこで, 遅延 Green 関数  $R^{\mu\nu}$  に対応する温度 Green 関数として以下を考える.

$$P^{\mu\nu}(\tau, k) := -\langle \text{T} j^\mu(\tau, k) j^\nu(0, -k) \rangle. \quad (5.34)$$

$\tau$  は虚時間である. 具体的に計算を進めるために  $j^\mu(k)$  の空間成分  $i = 1, 2, 3$  を運動量表示すると,

$$j(q) = -\frac{e}{m} \sum_{k, \sigma} \left(k + \frac{q}{2}\right) c_{k\sigma}^\dagger c_{k+q\sigma} \quad (5.35)$$

となる. ここから,  $P^{ij}(q)$  は次のように表せる.

$$P^{ij}(\tau, q) = -\frac{e^2}{m^2} \sum_{k, k', \sigma, \sigma'} \left(k + \frac{q}{2}\right)_i \left(k' + \frac{q}{2}\right)_j \langle \text{T} c_{k\sigma}^\dagger(\tau) c_{k+q\sigma}(\tau) c_{k'+q\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} \rangle. \quad (5.36)$$

これは前節で導入した南部表示を用いると次のように書き直せる.

$$P^{ij}(\tau, q) = -\frac{e^2}{m^2} \sum_{k, k'} \left(k + \frac{q}{2}\right)_i \left(k' + \frac{q}{2}\right)_j \langle \text{T} \Psi_k^\dagger(\tau) \Psi_{k+q}(\tau) \Psi_{k'+q}^\dagger \Psi_{k'} \rangle. \quad (5.37)$$

BCS 理論における HFG 近似を用いると, 4つの  $\Psi$  の期待値を次のように2つの Green 関数の積で表すことになる.

$$\langle \text{T} \Psi_k^\dagger(\tau) \Psi_{k+q}(\tau) \Psi_{k'+q}^\dagger \Psi_{k'} \rangle \simeq \text{Tr}[\mathcal{G}(k+q, \tau) \mathcal{G}(k, -\tau)] \delta_{k, k'}. \quad (5.38)$$

これを虚時間に関してフーリエ変換すると,

$$P^{ij}(i\omega_l, q) = -\frac{e^2}{m^2} \sum_k \left(k + \frac{q}{2}\right)_i \left(k' + \frac{q}{2}\right)_j L_k(q, i\omega_n),$$

$$\text{where } L_k(q, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_l \text{Tr}[\mathcal{G}(k+q, i\omega_l) \mathcal{G}(k, i\omega_l + i\omega_n)]. \quad (5.39)$$

を得る. 静的な応答を考える際には  $\omega \rightarrow 0$  での  $P^{ij}$  を参照すればよいので, 次のように  $i\omega_n = 0$  のもとで和を評価すればよい.

$$L_k(q, 0) = \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{2(z^2 + \xi_{k+q}\xi_k + |\Delta|^2)}{(z^2 - E_{k+q}^2)(z^2 - E_k^2)}$$

$$= \frac{E_{k+q}^2 + \xi_{k+q}\xi_k + |\Delta|^2}{E_{k+q}(E_{k+q}^2 - E_k^2)} [1 - 2f(E_{k+q})] + \frac{E_k^2 + \xi_{k+q}\xi_k + |\Delta|^2}{E_k(E_k^2 - E_{k+q}^2)} [1 - 2f(E_k)]$$

$$= -\frac{p_k(q)^2}{E_{k+q} + E_k} (1 - f(E_k) - f(E_{k+q})) + \frac{l_k(q)^2}{E_{k+q} - E_k} (f(E_{k+q}) - f(E_k)). \quad (5.40)$$

ここで  $\mathcal{G}$  の具体的な表式は式 (5.19) を用いた.  $f(E) = (e^{\beta E} + 1)^{-1}$  はフェルミ分布関数である.  $p_k(q)^2, l_k(q)^2$  はコヒーレンス因子と呼ばれ, 次式で定義される.

$$1 \mp \frac{\xi_{k+q}\xi_k + |\Delta|^2}{E_{k+q}E_k} \quad (5.41)$$

<sup>\*31</sup> 実際にはロンドン方程式を満たすのはベクトルポテンシャルの横波成分だけである.



複号の  $-$  が  $p^2$ ,  $+$  が  $l^2$  の定義である. 今興味のある Meissner 効果は一様磁場, すなわち  $q \rightarrow 0$  の応答であるので, この極限で考えると  $p_k(q)^2 \rightarrow 0$  であり第 1 項は寄与しない. したがって,

$$\lim_{q \rightarrow 0} L_k(q, 0) = 2 \frac{\partial f(E_k)}{\partial E_k} = -2\beta f(E_k)(1 - f(E_k)) \quad (5.42)$$

となり,

$$\lim_{q \rightarrow 0} P^{ij}(0, q) = \frac{ne^2}{m} \left[ 1 - \frac{n_s(T)}{n_s(0)} \right] \delta_{ij} = \lim_{q \rightarrow 0} R^{ij}(0, q) \quad (5.43)$$

を得る. ここで  $n_s(T)$  は超伝導に寄与する電子の温度  $T = 1/\beta$  における密度であり, 次で定義される.

$$\frac{n_s(T)}{n_s(0)} = 1 - \frac{2\beta E_F}{k_F^5} \int dk k^4 f(E_k)(1 - f(E_k)). \quad (5.44)$$

$k_F, E_F$  はそれぞれフェルミ波数とフェルミエネルギーである. また  $n_s(0) = n$  である. 以上より, 超伝導相において応答関数  $K^{ij}$  が

$$\lim_{q \rightarrow 0} K^{ij}(0, q) = -\frac{ne^2}{m} \frac{n_s(T)}{n_s(0)} \delta_{ij}. \quad (5.45)$$

と書けることが確認できた. これが Meissner 効果の微視的説明である. 確かに  $T \rightarrow 0$  で  $R^{ij} \rightarrow 0$  となることが確認できる.  $n_s(T)/n_s(0)$  は温度が上がるにつれて小さくなっていき,  $T = T_c$  で 0 になる. よって Meissner 効果が見られるのはこの  $n_s(T)/n_s(0)$  が非負となる  $T < T_c$  の領域, すなわち超伝導状態においてである.

電磁ポテンシャル  $A_\mu$  にはゲージ変換の自由度があり物理量はゲージの選択に依存してはならない. しかし, ここで導出した応答関数  $K^{\mu\nu}$  から導かれる  $\mathbf{J} \propto \mathbf{A}$  という式は明らかにゲージ不変性を備えていない. すなわち, ゲージ変換  $A_\mu \rightarrow A_\mu + iq_\mu \Lambda$  に対して,  $\mathbf{J} \rightarrow \mathbf{J} + i\alpha \Lambda \mathbf{q}$  ( $\alpha$  は係数) のように電流密度が変化してしまう. 特に, ゲージ変換ではベクトルポテンシャルの縦波成分のみが変わりうるので, 非物理的な縦波成分の応答を導いてしまう\*32. この問題点は当然 BCS 理論における HFG 近似を施した結果だと考えられる.

そこで, ゲージ不変性を保ったまま議論する方法として, バーテックス補正と Ward-Takahashi 恒等式を考慮した定式化が編み出された [23].

南部表示における電流密度演算子\*33は“自由なバーテックス部分”  $\Gamma_0^\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p})$  を用いて次のように表せる. (以降 4 元ベクトルと 3 次元ベクトルを区別するために, 3 次元ベクトルの方を太字で書く.)

$$j^\mu(\mathbf{q}) = -e \sum_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \Gamma_0^\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}},$$

$$\Gamma_0^\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) := \begin{cases} \tau_3 & \mu = 0 \\ \frac{1}{m} \left( \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right)_i & \mu = i = 1, 2, 3. \end{cases} \quad (5.46)$$

ここで  $\tau_3 = \text{diag}(1, -1)$  はパウリ行列の第 3 成分である. “自由な” と書いたことはのちに “自由でない” バーテックス部分を定義するとその意味が理解できる. そこで, バーテックス部分を次のように定義する.

$$\Lambda^\mu(x, y, z) := \langle T j^\mu(z) \Psi(x) \Psi^\dagger(y) \rangle =: e \int d^4 x' \int d^4 y' \mathcal{G}(x, x') \Gamma^\mu(x', y', z) \mathcal{G}(y', y). \quad (5.47)$$

ここで  $\mathcal{G}(x, x') := -\langle T \Psi(x) \Psi^\dagger(x') \rangle$  と定義した.  $\Psi(x), \Psi^\dagger(x)$  はそれぞれ  $\Psi_k, \Psi_k^\dagger$  の逆フーリエ成分である. そしてバーテックス部分のフーリエ成分を次のように定義する (ここでの  $p, q$  は 4 元運動量である).

$$\Lambda^\mu(p + q, p) = e \mathcal{G}(p + q) \Gamma^\mu(p + q, p) \mathcal{G}(p)$$

where  $\Lambda^\mu(x, y, z) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \Lambda^\mu(p + q, p) e^{ip(x-y) + q(x-z)}. \quad (5.48)$



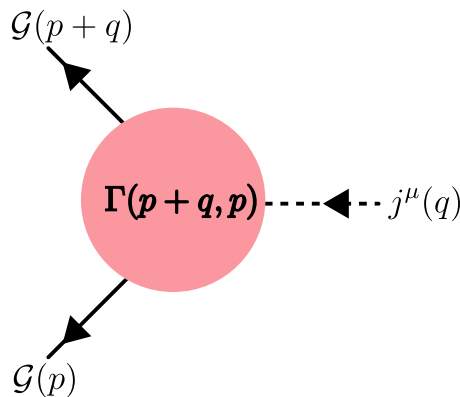


図 16 バーテックス部分のダイアグラム.

バーテックス部分はダイアグラムで表すと図 16 のようになっている. このように定義されたバーテックス部分は次の Ward–Takahashi 恒等式を満たす.

$$q_\mu \Gamma^\mu(p+q, p) = \mathcal{G}^{-1}(p+q)\tau_3 - \tau_3 \mathcal{G}^{-1}(p). \quad (5.49)$$

証明は置いておいて, 先ほど定義した“自由なバーテックス部分” $\gamma^\mu$  がこれを満たすことを確認する. この場合  $\mathcal{G}$  も自由 Green 関数であり,  $\mathcal{G}^{-1}(p) = p^0 - \tau_3 \xi_p$  である ( $p^0 = i\omega_n$  とおいた). よって  $\Gamma_0^\mu$  が Ward–Takahashi 恒等式を満たすことを次のように示すことができる.

$$\begin{aligned} \text{(右辺)} &= q_\mu \Gamma_0^\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) = \tau_3 q^0 - \mathbf{q} \cdot \frac{1}{m} \left( \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right) = \begin{pmatrix} q^0 + \xi_{p+q} - \xi_p & 0 \\ 0 & -q^0 + \xi_{p+q} - \xi_p \end{pmatrix}, \\ \text{(左辺)} &= \tau_3 \begin{pmatrix} p^0 + q^0 - \xi_{p+q} & 0 \\ 0 & p^0 + q^0 + \xi_{p+q} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} p^0 - \xi_p & 0 \\ 0 & p^0 + \xi_p \end{pmatrix} \tau_3 = \text{(右辺)} \end{aligned} \quad (5.50)$$

ここで  $\xi_p = \mathbf{p}^2/(2m) - \mu$  であることを用いた.

バーテックス部分を用いて常磁性部分の応答関数  $P^{\mu\nu}$  を書き表すことができる. まず, (4 元) 運動量表示にすると,

$$P^{\mu\nu}(k) = - \int_0^\beta d\tau e^{ik^0\tau} \langle \text{T} j^\mu(\tau, \mathbf{k}) j^\nu(0, -\mathbf{k}) \rangle = - \langle j^\mu(k) j^\nu(-k) \rangle \quad (5.51)$$

となる. ここに  $j^\mu(\mathbf{q})$  の表式 (5.46) を代入すると,

$$\begin{aligned} P^{\mu\nu}(q) &= e \sum_p \Gamma_0^\nu(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \underbrace{\langle j^\mu(\mathbf{q}) \Psi_{p+q}^\dagger \Psi_p \rangle}_{\text{Tr}[\Lambda(p+q, p)]} \\ &= e^2 \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\Gamma_0^\nu(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \mathcal{G}(p+q) \Gamma^\mu(p+q, p) \mathcal{G}(p)] \\ &= e^2 \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\Gamma_0^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \mathcal{G}(p+q) \Gamma^\nu(p+q, p) \mathcal{G}(p)] \end{aligned} \quad (5.52)$$

を得る<sup>\*34</sup> 運動量に関する和を積分で表すため体積無限大の熱力学極限をとっている. 最後の行では自由なバーテックスと自由でないものを入れ替えてもよいことを用いた.

ゲージ不変性を保つ取り扱いでは, ゲージ変換  $A_\mu \rightarrow A_\mu + iq_\mu \Lambda$  に対して  $j^\mu$  が不変であればよいので, 応答関数に対して次が成り立つことが求められる.

$$K^{\mu\nu} q_\nu = 0. \quad (5.53)$$

\*32 前にも述べたが, ロンドン方程式ではベクトルポテンシャルの横波成分のみを考慮していたため応用上は問題にはならなかった. ゲージ変換で縦波成分しか変化しないことは, 変換が波数に平行な成分 ( $\propto q_\mu$ ) しかなされないことから理解できる.

\*33 ここではシュレディンガー表示における演算子. ハイゼンベルグ表示のときは引数を 4 元ベクトルの形で書くことにする.

\*34 この計算は間違っている可能性がある. 参考文献 [22] の結果と合うようにした.

常磁性応答関数を式 (5.52) のように表して, Ward–Takahashi 恒等式を用いることでこれを示すことができる.

$$\begin{aligned}
P^{\mu\nu} q_\nu &= e^2 \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\Gamma_0^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \mathcal{G}(p + q) q_\nu \Gamma^\nu(p + q, p) \mathcal{G}(p)] \\
&= e^2 \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\Gamma_0^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \mathcal{G}(p + q) (\mathcal{G}^{-1}(p + q) \tau_3 - \tau_3 \mathcal{G}^{-1}(p)) \mathcal{G}(p)] \\
&= e^2 \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\Gamma_0^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{q}) (\tau_3 \mathcal{G}(p) - \mathcal{G}(p + q) \tau_3)] \\
&= e^2 \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\Gamma_0^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{q}) (\tau_3 \mathcal{G}(p) - \mathcal{G}(p + q) \tau_3)] \\
&= -\frac{ne^2}{m} q^\mu (1 - \delta_0^\mu). \tag{5.54}
\end{aligned}$$

ここで  $\Gamma_0^\mu$  の定義式 (5.46) を使い,  $\mathcal{G}(p) \tau_3$  の全運動量空間積分が数密度  $n$  を与えることを用いた.  $P^{\mu\nu}$  と  $R^{\mu\nu}$  の実部は同じである. よってここから,

$$\begin{aligned}
K^{\mu\nu} q_\nu &= R^{\mu\nu} q_\nu + \frac{ne^2}{m} \eta^{\mu\nu} (1 - \delta_0^\nu) q_\nu \\
&= -\frac{ne^2}{m} q^\mu (1 - \delta_0^\nu) + \frac{ne^2}{m} q^\mu (1 - \delta_0^\nu) \\
&= 0 \tag{5.55}
\end{aligned}$$

とゲージ不変性が保たれていることが確かめられる. このようにバーテックス部分を考慮することで, 保存則を壊さない形で摂動計算を進めていくことができる.

## 付録 A 第 2 量子化

### A.1 フォック空間の構成

多粒子系の状態ベクトルの棲むヒルベルト空間を構成する。考える系は  $N$  個の同一粒子 (互いに区別不可能) の系であり, その粒子の 1 粒子状態がヒルベルト空間  $\mathcal{H}_1$  のベクトルで表せるとする。  $\mathcal{H}_1$  の正規直交基底を  $\{|\alpha\rangle\}_{\alpha \in \mathbb{N}}$  とする。すなわち任意の  $\mathcal{H}_1$  の元は  $|\alpha\rangle$  の線形結合で書け,  $\langle\alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$ ,  $\sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{1}$  を満たす。ここで  $\delta_{ij}$  はクロネッカーのデルタで,  $\hat{1}$  は  $\mathcal{H}_1$  の恒等演算子である。

$N$  粒子系の状態ベクトルが棲むヒルベルト空間  $\mathcal{H}_N$  は次のように定義される。

$$\mathcal{H}_N := \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_1 = \text{Span}\{|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle \mid \alpha_i \in \mathbb{N}\} \quad (\text{A.1})$$

ここで Span はその集合の元の ( $\mathbb{C}$  係数) 線形結合が張る部分空間を表す。すなわち  $N$  個の 1 粒子系の空間を持ってきて並べると  $N$  粒子系の空間を作れるというわけだ。  $N$  粒子系の状態ベクトル  $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_N$  は,  $N$  個の 1 粒子状態ベクトル  $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}_1$  を選んで,

$$|\Phi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle \quad (\text{A.2})$$

と書ける<sup>\*35</sup>。これを  $|\Phi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \cdots |\psi_N\rangle$  と略記することもある。

$\mathcal{H}_N$  の内積は,  $\mathcal{H}_1$  の内積を用いて定義される。見やすさのため  $\mathcal{H}_N$  の内積を  $(\cdot, \cdot) : \mathcal{H}_N \times \mathcal{H}_N \rightarrow \mathbb{C}$  と表すと, それは

$$(|\varphi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_N\rangle, |\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle) := \prod_{i=1}^N \langle\varphi_i|\psi_i\rangle \quad (\text{A.3})$$

で定義される。容易に確かめられることだが, この内積のもとで  $\mathcal{H}_1$  の正規直交基底のテンソル積  $|\alpha_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle$  ( $\alpha_i \in \mathbb{N}$ ) は  $\mathcal{H}_N$  の正規直交基底を張る。

同種粒子の不可弁別性から, 状態ベクトルには入れ替えに対する対称性が課される。  $\mathcal{H}_N$  の元で,  $i$  番目の  $\mathcal{H}_1$  の状態が  $|\psi_i\rangle$  で,  $j$  番目の  $\mathcal{H}_1$  の状態が  $|\psi_j\rangle$  であるような状態  $|\Phi_{ij}\rangle$  と,  $i$  番目の  $\mathcal{H}_1$  の状態が  $|\psi_j\rangle$  で,  $j$  番目の  $\mathcal{H}_1$  の状態が  $|\psi_i\rangle$  であるような状態  $|\Phi_{ji}\rangle$  は区別ができない。そこでそれらの状態は位相因子  $\zeta$  を用いて,  $|\Phi_{ij}\rangle = \zeta |\Phi_{ji}\rangle$  と結ばれる。入れ替えを二度行うと元に戻ることから  $\zeta = \pm 1$  であることがわかる。考える粒子がボソンの場合  $\zeta = +1$ , フェルミオンの場合  $\zeta = -1$  であることが知られている (スピン統計定理)。

さて,  $N$  粒子系の空間  $\mathcal{H}_N$  の元で, 状態の入れ替えに対して位相因子  $\zeta$  を返すもの全体を考えると, その集合は  $\mathcal{H}_N$  の部分空間をなす。  $|\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle \in \mathcal{H}_N$  を「対称化」「反対称化」したものをそれぞれ  $|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_+, |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_-$  と書く。これは以下のように定義される:

#### 定義 A.1.1 (状態ベクトルの対称化・反対称化)

$$|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P |\psi_{P(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{P(N)}\rangle \quad (\text{A.4})$$

$$|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P |\psi_{P(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{P(N)}\rangle \quad (\text{A.5})$$

ここで  $(-1)^P$  は置換  $P$  が偶置換のとき 1, 奇置換のとき  $-1$  を与える<sup>\*36</sup>。両者をまとめて  $|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta$  と書くことにする。因子  $1/\sqrt{N!}$  は, 各 1 粒子状態ベクトルが規格化されている場合に, これらの (反) 対称化されたベクトルが規格化されるように入れている。

<sup>\*35</sup> このとき, 選ぶ  $\mathcal{H}_1$  の元を規格化されたものに限ると,  $\mathcal{H}_N$  の元をすべて埋め尽くせない。規格化された状態の 1 組のテンソル積で書き表せない  $\mathcal{H}_N$  の状態をエンタングル状態と呼ぶ。

<sup>\*36</sup> 置換 (Permutation)  $P$  とは  $P : \{1, 2, \dots, N\} \rightarrow \{1, 2, \dots, N\}$  の全単射である。自然数  $i$  の置換による変換先を  $P(i)$  と書く。

このように定義された状態ベクトルは置換に対して望み通りの振る舞いをしてくれることが見て取れるだろう。  $\mathcal{H}_N$  の元で、対称化 (反対称化) されたものの全体の集合を  $\mathcal{F}_S^N(\mathcal{H})$  ( $\mathcal{F}_A^N(\mathcal{H})$ ) と書く。

次にフォック空間 (Fock space) の構成に入る。フォック空間とはあらゆる粒子数をもつ多粒子空間の和であり、粒子数を定めない理論において有用である。<sup>\*37</sup> 最初に自由フォック空間 (Free Fock space)  $\mathcal{F}_f(\mathcal{H})$  を以下のように定義する:

$$\mathcal{F}_f(\mathcal{H}) := \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_1. \quad (\text{A.6})$$

これはあらゆる  $N$  ( $N = 0, 1, \dots$ ) 粒子空間を考慮して集めてきた空間だと言える。置換に対する対称性などは何も課していない。これに対して、置換に対する対称性を課した対称フォック空間 (Symmetric (or Bosonic) Fock space) と反対称フォック空間 (Antisymmetric (or Fermionic) Fock space) を以下で定義する:

### 定義 A.1.2 (対称 (反対称) フォック空間)

対称フォック空間  $\mathcal{F}_S(\mathcal{H})$ , 反対称フォック空間  $\mathcal{F}_A(\mathcal{H})$  は次で定義される。

$$\mathcal{F}_S(\mathcal{H}) = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{F}_S^N(\mathcal{H}) \quad (\text{A.7})$$

$$\mathcal{F}_A(\mathcal{H}) = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{F}_A^N(\mathcal{H}). \quad (\text{A.8})$$

両者をまとめて、

$$\mathcal{F}_\zeta(\mathcal{H}) = \begin{cases} \mathcal{F}_S(\mathcal{H}) & \zeta = +1 \text{ のとき} \\ \mathcal{F}_A(\mathcal{H}) & \zeta = -1 \text{ のとき} \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

と書くことにする。

これらが直和で書かれているのは、 $\mathcal{H}_N, \mathcal{H}_M$  ( $N \neq M$ ) の元はお互いに交わらないためである<sup>\*38</sup>。各種フォック空間の内積は  $\mathcal{H}_N$  の内積をそのまま用いて定義し、異なる粒子数の元は直交していると考えてよい。また、 $\mathcal{H}_0 = \mathcal{F}_S^0 = \mathcal{F}_A^0 = \mathbb{C}$  とする。後にわかるようにこの空間  $\mathcal{H}_0$  は真空状態  $|0\rangle$  の張る ( $\mathbb{C}$  係数の) 1 次元空間である。

実際の物理状態はこの空間の規格化されたベクトルになるわけだが、一旦規格化は気にせず次に進もう。対称化 (反対称化) されたフォック空間の基底や次元についての情報も欲しいところだが、次に導入する生成消滅演算子を用いるのならそれらはあまり気にする必要がない。

## A.2 生成消滅演算子の定義

ここまで多粒子系の状態ベクトルが棲む空間 (フォック空間) について考えてきたが、具体的にどのようにしてそのベクトルを作れば良いのかは述べてこなかった。そこで、フォック空間の元を作るための有用な“ツール”である生成消滅演算子を導入する。

### 定義 A.2.1 (生成演算子)

1 粒子状態  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_1$  と  $N - 1$  粒子の (反) 対称フォック空間のベクトル  $|\psi_1, \dots, \psi_{N-1}\rangle_\zeta \in \mathcal{F}_\zeta^{N-1}(\mathcal{H})$  から、 $N$  粒子の (反) 対称フォック空間のベクトル  $|\varphi, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}\rangle_\zeta \in \mathcal{F}_\zeta^N(\mathcal{H})$  を定める演算子、 $\hat{a}^\dagger : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{F}_\zeta^{N-1}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{F}_\zeta^N(\mathcal{H})$  を、

$$\hat{a}^\dagger(|\varphi\rangle) |\psi_1, \dots, \psi_{N-1}\rangle_\zeta = |\varphi, \psi_1, \dots, \psi_{N-1}\rangle_\zeta \quad (\text{A.10})$$

<sup>\*37</sup> 例えばコヒーレント状態は粒子数が確定していないような状態である。

<sup>\*38</sup> というより、そうなるように内積を定義している。というのを宣言するために直和記号で書いている？

で定義する\*39. 見やすさのため  $\hat{a}^\dagger(|\varphi\rangle)$  をしばしば  $\hat{a}^\dagger(\varphi)$  と略記する.

この演算子のはたらきは物理的には,  $N - 1$  粒子状態に 1 粒子状態を「付け加える」演算子であると考えられる. 定義から明らかであるが, この演算は状態ベクトルの置換対称性を保つ. また計算して確かめられるように, この生成演算子の作用を自由フォック空間の元への操作として以下のように書き下すこともできる:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger(\varphi)|\psi_1, \dots, \psi_{N-1}\rangle_\zeta &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \zeta^P |\psi_{P(0)}\rangle \otimes |\psi_{P(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{P(N-1)}\rangle \quad (|\psi_0\rangle := |\varphi\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \zeta^{j-1} |\psi_j\rangle \otimes |\psi_1, \dots, \psi_{j-1}, \varphi, \psi_{j+1}, \dots, \psi_{N-1}\rangle_\zeta.\end{aligned}\quad (\text{A.11})$$

生成演算子の持つこのはたらきからわかるように, 生成演算子を粒子の少ない (きちんと対称化された) 状態にかけていけばより大きな粒子数を持つ状態を構成できる. 生成演算子 (と次に導入する消滅演算子) を用いれば, 適切な置換対称性をもったフォック空間の元を行き来できる. 生成演算子の定義は複数の粒子状態を持つ  $\mathcal{F}_\zeta(\mathcal{H})$  の一般の元へ作用するように拡張できる. すなわち定義域と値域は両方とも  $\mathcal{F}_\zeta(\mathcal{H})$  としてもよい.

次に消滅演算子を定義するわけだが, その定義には 2 通りの (等価な) 方法がある. 一方は生成演算子  $\hat{a}^\dagger$  のエルミート共役とする方法で, もう一方は微分形式などで登場する「内部積」を用いた方法である\*40. どちらを採用するにしてもまずは (反) 対称フォック空間のベクトルの内積の性質を考えるのが得策だ.

### 定理 A.2.2 ((反) 対称フォック空間のベクトルの内積)

2 つの状態ベクトル  $|\varphi_1, \dots, \varphi_N\rangle_\zeta, |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta \in \mathcal{F}_\zeta^N(\mathcal{H})$  の内積は次のように表すことができる:

$$\zeta \langle \varphi_1, \dots, \varphi_N | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle_\zeta = \begin{vmatrix} \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \psi_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_N | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_N | \psi_N \rangle \end{vmatrix}_\zeta.\quad (\text{A.12})$$

ここで  $N \times N$  行列  $A = (a_{i,j})$  に対して,  $|A|_\zeta = \sum_P \zeta^P a_{1,P(1)} a_{2,P(2)} \dots a_{N,P(N)}$  であり,  $\zeta = +1$  に対してはパーマメント,  $\zeta = -1$  に対しては通常のデターミナントである.

### 定理 A.2.2 の証明

数学的帰納法を用いて証明することもできるが, 定義通り愚直に計算しても証明ができる. 以下後者の方法を

\*39 今引数と考えていた  $\mathcal{H}_1$  の元を固定すればこれは  $\mathcal{F}_\zeta^{N-1} \rightarrow \mathcal{F}_\zeta^N$  という写像になり, またベクトル空間  $V$  から  $W$  への線形写像を  $\text{Hom}(V, W)$  と書くならばこれは  $\mathcal{H}_1 \rightarrow \text{Hom}(\mathcal{F}_\zeta^{N-1}, \mathcal{F}_\zeta^N)$  という写像にもなる.

\*40 置換に対する対称性を考えていると, 微分形式を含むテンソル場の理論との類似性が著しいことに気づく. 一方に登場する量にはほとんど対応物がもう一方の理論にもみつかると. 物理的に何か関係しているのだろうか.

とる.

$$\begin{aligned}
& \zeta \langle \varphi_1, \dots, \varphi_N | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle_\zeta \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{P,Q} \zeta^P \zeta^Q (|\varphi_{P(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{P(N)}\rangle, |\psi_{Q(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{Q(N)}\rangle) \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{P,Q} \zeta^P \zeta^Q \langle \varphi_{P(1)} | \psi_{Q(1)} \rangle \dots \langle \varphi_{P(N)} | \psi_{Q(N)} \rangle \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{P,Q} \zeta^P \zeta^Q \langle \varphi_1 | \psi_{QP^{-1}(1)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{QP^{-1}(N)} \rangle \quad (\because P \text{ で並べ替えた}) \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{P,Q} \zeta^{QP^{-1}} \langle \varphi_1 | \psi_{QP^{-1}(1)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{QP^{-1}(N)} \rangle \quad (\because \zeta^P = \zeta^{P^{-1}}, \zeta^Q \zeta^{P^{-1}} = \zeta^{QP^{-1}}) \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{P,R} \zeta^R \langle \varphi_1 | \psi_{R(1)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{R(N)} \rangle \quad (\because QP^{-1} = R \text{ とおいた}) \\
&= \sum_R \zeta^R \langle \varphi_1 | \psi_{R(1)} \rangle \dots \langle \varphi_N | \psi_{R(N)} \rangle = |\langle \varphi_i | \psi_j \rangle|_\zeta \tag{A.13}
\end{aligned}$$

より示された. 最後の行に移る際, 置換  $P$  はただ  $N!$  回の足し算をする役割しかしていない. ■

ここで証明した定理 A.2.2 により消滅演算子の導入が楽になる. ここでは消滅演算子を生成演算子のエルミート共役として定義する.

### 定義 A.2.3 (消滅演算子)

消滅演算子  $\hat{a} : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{F}_\zeta^N \rightarrow \mathcal{F}_\zeta^{N-1}$  を以下のように生成演算子のエルミート共役として定義する:

$$\left( \hat{a}^\dagger(\varphi_0) |\varphi_1, \dots, \varphi_{N-1}\rangle_\zeta, |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta \right) = \left( |\varphi_1, \dots, \varphi_{N-1}\rangle_\zeta, \hat{a}(\varphi_0) |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta \right). \tag{A.14}$$

定義だけでは消滅演算子の物理的意味がよくわからないので, より具体的にその作用を示すのが以下の定理 A.2.4 である.

### 定理 A.2.4 (消滅演算子の作用の具体的表式)

消滅演算子  $\hat{a}(\varphi_0)$  の  $\mathcal{F}_\zeta^N$  の元  $|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta$  への作用は具体的には以下のように表される.

$$\hat{a}(\varphi_0) |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta = \sum_{k=1}^N \zeta^{k+1} \langle \varphi_0 | \psi_k \rangle |\psi_1, \dots, \check{\psi}_k, \dots, \psi_N\rangle_\zeta \tag{A.15}$$

ここで  $\check{\psi}_k$  はその中から  $\psi_k$  を取り除いたことを示す記号である. 物理的には, 元々の状態  $|\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta$  から  $|\varphi_0\rangle$  と交わる部分を各粒子から取り出していることを示している\*41. このように書くことで  $\hat{a}$  が確かに「消滅」演算子のはたらきをしていることが理解できるだろう. また,  $\mathcal{F}_\zeta^0(\mathcal{H})$  の元はこの定義域からはもれてしまうが, 特別に  $\hat{a}(\varphi) |0\rangle = 0$  for  $|0\rangle \in \mathcal{F}_\zeta^0(\mathcal{H}) = \mathbb{C}$  と約束する. これは物理的には, 真空から粒子を消滅させることはできないことを表しており, 自然な定義だと言える.

定理 A.2.4 の証明は行列のデターミナント (もしくはパーマネント) として書けることを知った今となってはすぐに実行できる.

### 定理 A.2.4 の証明

\*41 日本語がとても難しいが要はそういうこと



エルミート共役としての定義式 (A.14) の左辺は以下のように計算できる:

$$\begin{aligned}
& \left( \hat{a}^\dagger(\varphi_0) |\varphi_1, \dots, \varphi_{N-1}\rangle_\zeta, |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle_\zeta \right) \\
&= {}_\zeta \langle \varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{N-1} | \psi_1, \dots, \psi_N \rangle_\zeta \\
&= \left| \begin{array}{ccc} \langle \varphi_0 | \psi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_0 | \psi_N \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_{N-1} | \psi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_{N-1} | \psi_N \rangle \end{array} \right|_\zeta \\
&= \sum_{k=1}^N \zeta^{k+1} \langle \varphi_0 | \psi_k \rangle {}_\zeta \langle \varphi_1, \dots, \varphi_{N-1} | \psi_1, \dots, \check{\psi}_k, \dots, \psi_N \rangle_\zeta \\
&= {}_\zeta \langle \varphi_1, \dots, \varphi_{N-1} | \left( \sum_{k=1}^N \zeta^{k+1} \langle \varphi_0 | \psi_k \rangle | \psi_1, \dots, \check{\psi}_k, \dots, \psi_N \rangle_\zeta \right) \quad (\text{A.16})
\end{aligned}$$

ここで3つ目の等号ではデターミナント (もしくはパーマネント) の1行目での余因子展開を実行した。よって定義式 (A.14) の右辺と見比べて、定理の表式が確かめられた。 ■

以上によりフォック空間の元を表すのに有用なツールである生成消滅演算子の定義が完了した。ここでもう少しその性質, 特に交換関係について調べてみよう。次の結果が成立する。

#### 定理 A.2.5 (生成消滅演算子の (反) 交換関係)

2つの生成消滅演算子を  $\hat{a}^\dagger(\varphi), \hat{a}^\dagger(\psi)$  とする。それらの間の (反) 交換関係として以下が成立する:

$$[\hat{a}(\varphi), \hat{a}(\psi)]_{-\zeta} = 0 \quad (\text{A.17a})$$

$$[\hat{a}^\dagger(\varphi), \hat{a}^\dagger(\psi)]_{-\zeta} = 0 \quad (\text{A.17b})$$

$$[\hat{a}(\varphi), \hat{a}^\dagger(\psi)]_{-\zeta} = \langle \varphi | \psi \rangle \quad (\text{A.17c})$$

ここで, 演算子  $\hat{A}, \hat{B}$  に対して交換関係  $[\cdot, \cdot]_{-\zeta}$  を  $[\hat{A}, \hat{B}]_{-\zeta} := \hat{A}\hat{B} - \zeta\hat{B}\hat{A}$  と定義する。これは  $\zeta = +1$  のとき通常の交換関係であり,  $\zeta = -1$  のとき反交換関係となる。

上2つ (A.17a), (A.17b) の交換関係の証明は非常に簡単である。まず, 生成演算子の交換関係から調べるのがよい。任意の  $\mathcal{F}_\zeta(\mathcal{H})$  の元  $|\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta$  に対して,

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger(\varphi)\hat{a}^\dagger(\psi) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta &= |\varphi, \psi, \xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta \\
\hat{a}^\dagger(\psi)\hat{a}^\dagger(\varphi) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta &= |\psi, \varphi, \xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta = \zeta |\varphi, \psi, \xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta
\end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

となるので, これらの差をとって  $\hat{a}^\dagger(\psi)\hat{a}^\dagger(\varphi) - \zeta\hat{a}^\dagger(\varphi)\hat{a}^\dagger(\psi) = [\hat{a}^\dagger(\psi), \hat{a}^\dagger(\varphi)]_{-\zeta} = 0$  を得る。これが式 (A.17b) である。消滅演算子の方に関してはこれのエルミート共役をとると同じく0になる。最後に (A.17c) の計算については以下のようにする。

$$\begin{aligned}
\hat{a}(\varphi)\hat{a}^\dagger(\psi) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta &= \hat{a}(\varphi) |\psi, \xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta \\
&= \langle \varphi | \psi \rangle |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta + \sum_{k=1}^N \zeta^k \langle \varphi | \xi_k \rangle |\psi, \xi_1, \dots, \check{\xi}_k, \dots, \xi_N\rangle_\zeta
\end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger(\psi)\hat{a}(\varphi) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\zeta &= \hat{a}^\dagger(\psi) \cdot \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi | \xi_k \rangle |\xi_1, \dots, \check{\xi}_k, \dots, \xi_N\rangle_\zeta \\
&= \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \varphi | \xi_k \rangle |\psi, \xi_1, \dots, \check{\xi}_k, \dots, \xi_N\rangle_\zeta
\end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

第1式から第2式に  $\zeta$  をかけたものを引くと求める式 (A.17c) が示される。ここまでの議論で, よく知られている生成消滅演算子の交換関係が導出された。ボソンの生成消滅演算子が満たす交換関係は量子力学で学ぶ調和振動子に登場するそれと同じ関係を満たしていることが見て取れるだろう。

次に、ほとんど定義より自明な次の定理を述べておく。これは生成消滅演算子の具体的な基底に関する表示を考える基礎となる。

### 定理 A.2.6 (生成消滅演算子の線形性)

生成演算子  $\hat{a}^\dagger : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{F}_\zeta \rightarrow \mathcal{F}_\zeta$  はその引数である 1 粒子状態ベクトルに関して線形な演算子である。すなわち任意の  $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$  について、

$$\hat{a}^\dagger(c_1\varphi + c_2\psi) = c_1\hat{a}^\dagger(\varphi) + c_2\hat{a}^\dagger(\psi) \quad (\text{A.21})$$

が成立する。消滅演算子についても同様のことが成立する。

証明は定義 (と、テンソル積が線形なこと) より自明である。この定理は後に引用する。

## A.3 生成消滅演算子の活用

フォック空間の元は生成消滅演算子により粒子を加えたり消したりすることで表現できるように思える。ここではその思惑をきちんと定式化する。

1 粒子状態のヒルベルト空間  $\mathcal{H}_1$  の任意の正規直交基底  $\{|\alpha\rangle\}_{\alpha=1,2,\dots}$  を考える。このとき、(反) 対称化された  $N$  粒子状態の空間  $\mathcal{F}_\zeta^N(\mathcal{H}_1)$  の正規直交基底として、以下のものが取れる:

$$\frac{|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_\zeta}{\sqrt{n_1!n_2!\dots}} = \begin{cases} \frac{|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_+}{\sqrt{n_1!n_2!\dots}} & (\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots \leq \alpha_N) \quad \text{ボソンの場合} \\ |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_- & (\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N) \quad \text{フェルミオンの場合} \end{cases} \quad (\text{A.22})$$

ここで  $\alpha_i$  は  $\mathcal{H}_1$  の基底のどれかを指し示すラベルであり、 $n_i$  は選んだ  $\alpha_1, \dots, \alpha_N$  の中に  $\alpha_i$  が何個現れたかを数えた自然数である。この  $n_i$  のことを占有数と呼ぶ。フェルミオンの場合  $n_i$  は 0, 1 のいずれかなので  $n_i!$  は必ず 1 となる。正規性と直交性はこの基底の状態ベクトルの内積を定理 A.2.2 に従って計算すれば確かめることができる。完全性条件としては以下が成立する:

$$\frac{1}{N!} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_\zeta \langle \alpha_1, \dots, \alpha_N| = \hat{1}. \quad (\text{A.23})$$

この右辺の  $\hat{1}$  は  $\mathcal{F}_\zeta^N(\mathcal{H})$  における恒等演算子を表す。この和は各  $\alpha_i$  がすべての 1 粒子状態の基底を走るので、重複を打ち消すための  $1/N!$  がかけられている。

このようにしてフォック空間の基底が書けるわけだが、この基底は次のように生成演算子を掛け合わせて作ることができる<sup>\*42</sup>:

$$\frac{|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_\zeta}{\sqrt{n_1!n_2!\dots}} = \left( \prod_{\alpha=1}^{\infty} \frac{(\hat{a}_\alpha^\dagger)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} \right) |0\rangle \quad (\text{A.24})$$

ここで  $\mathcal{H}_1$  の基底  $|\alpha\rangle$  の生成演算子を  $\hat{a}_\alpha^\dagger := \hat{a}^\dagger(|\alpha\rangle)$  と書いた。また  $n_\alpha$  は 1 粒子状態  $|\alpha\rangle$  の占有数であり  $N = \sum_\alpha n_\alpha$  という拘束条件を満たしている。

ここまで見てきて、生成演算子がものすごく便利なはたらきをしてくれていることがわかる。それは、生成演算子を真空  $|0\rangle$  にただかけていけば、適切に対称化された  $N$  粒子状態ベクトルが得られるということだ。そしてその物理的意味も明確である。1 粒子状態  $|\alpha\rangle$  を引数に持つ生成演算子  $\hat{a}_\alpha^\dagger$  をかけると、その系に状態  $|\alpha\rangle$  の粒子が 1 つ存在することを表現することができる。

また、生成演算子の積の形で状態を表しておく、物理量の演算子  $\hat{O}$  を状態に作用させたときの効果がわかりやすくなる。一般のエルミート演算子  $\hat{o}$  で、1 粒子状態  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$  に作用するもの考える。同じ 1 粒子状態

<sup>\*42</sup>  $\alpha$  が  $\infty$  までであるような書き方をしているが、基底が有限であるような状態でも良い。

の基底  $\{|\alpha\rangle\}_{\alpha=1,2,\dots}$  をとりその行列要素を用いて次の演算子を定義する:

$$\hat{O} := \sum_{\alpha,\beta} \hat{a}_\alpha^\dagger \langle \alpha | \hat{o} | \beta \rangle \hat{a}_\beta = \sum_{\alpha,\beta} o_{\alpha,\beta} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta. \quad (\text{A.25})$$

ここで行列要素を  $o_{\alpha,\beta} := \langle \alpha | \hat{o} | \beta \rangle \in \mathbb{C}$  とおいた. この演算子  $\hat{O}$  が実は  $N$  粒子状態の各々の粒子に  $\hat{o}$  のはたらきをする  $\mathcal{F}_\zeta(\mathcal{H})$  の演算子であることがわかる. そのためにまず  $\hat{O}$  と生成演算子  $\hat{a}^\dagger(\varphi)$  との交換関係を調べる. それは次のように計算できる:

$$\begin{aligned} \hat{O}\hat{a}^\dagger(\varphi) &= \sum_{\alpha,\beta} o_{\alpha,\beta} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \hat{a}^\dagger(\varphi) \\ &= \sum_{\alpha,\beta} o_{\alpha,\beta} [\zeta \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}^\dagger(\varphi) \hat{a}_\beta + \hat{a}_\alpha^\dagger \langle \beta | \varphi \rangle] \\ &= \hat{a}^\dagger(\varphi) \hat{O} + \sum_{\alpha,\beta} \hat{a}_\alpha^\dagger \langle \alpha | \hat{o} | \beta \rangle \langle \beta | \varphi \rangle \\ &= \hat{a}^\dagger(\varphi) \hat{O} + \hat{a}^\dagger \left( \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha | \hat{o} | \varphi \rangle \right) \\ &= \hat{a}^\dagger(\varphi) \hat{O} + \hat{a}^\dagger(\hat{o} | \varphi \rangle). \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

ここで最後から2番目と最後の等号で生成演算子の線形性 (定理 A.2.6) を用いた.  $\hat{O}$  の右端には消滅演算子が来ているのでこれは真空  $|0\rangle$  に作用しても寄与しない. よって,  $\hat{O}$  を一般の  $N$  粒子状態  $\hat{a}^\dagger(\varphi_1) \hat{a}^\dagger(\varphi_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\varphi_N) |0\rangle$  に作用させると,

$$\begin{aligned} \hat{O} \hat{a}^\dagger(\varphi_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\varphi_N) |0\rangle &= \hat{a}^\dagger(\varphi_1) \hat{O} \hat{a}^\dagger(\varphi_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\varphi_N) |0\rangle + \hat{a}^\dagger(\hat{o} | \varphi_1 \rangle) \hat{a}^\dagger(\varphi_2) \cdots \hat{a}^\dagger(\varphi_N) |0\rangle \\ &= \cdots \\ &= \sum_{j=1}^N \hat{a}^\dagger(\varphi_1) \cdots \hat{a}^\dagger(\hat{o} | \varphi_j \rangle) \cdots \hat{a}^\dagger(\varphi_N) |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

となる. これはつまり  $N$  粒子のそれぞれの粒子の状態に対して  $\hat{o}$  (1 粒子状態にかかる演算子) がかかって, その和をとった形になる<sup>\*43</sup>.

例として1粒子状態にかかる演算子  $\hat{A}^{(1)}$  を考え, その固有状態  $\{|\alpha\rangle\}_{\alpha=1,2,\dots}$  を基底として取ろう. 固有状態  $|\alpha\rangle$  に対する固有値を  $\alpha$  と書く. このとき  $N$  粒子状態にかかる演算子  $\hat{A}$  を  $\hat{A} = \sum_{\alpha} \alpha \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha$  と定義する (これは先の  $\hat{O}$  の定義と同じだが, 基底が  $\hat{A}^{(1)}$  の固有状態であるため和を片方の添字に関してのみ取ればよくなる.) 演算子  $\hat{A}$  が  $N$  粒子状態  $|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_\zeta$  に作用すると,

$$\hat{A} |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_\zeta = (\alpha_1 + \cdots + \alpha_N) |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle_\zeta \quad (\text{A.28})$$

となる. それぞれの1粒子状態の固有値の和が全体の固有値となる. 例えば  $\hat{A}^{(1)}$  が1粒子状態のハミルトニアンであれば,  $\hat{A}$  は全エネルギーの演算になる. また  $\hat{A}^{(1)}$  が恒等演算子  $\hat{1}$  であれば  $\hat{A}$  は粒子数演算子となる (固有値は  $N$  になるから). このようにして, 生成消滅演算子で系を記述することで状態ベクトルのみならず, 演算子の方も容易に  $N$  粒子系の演算子に書き換えることができる.

## A.4 物理量の具体的な表現方法

前節で定式化した多粒子系にかかる演算子の具体例を見ていく. 与えられた1粒子状態の物理量から, 多粒子系 (以降一般の数を指して  $N$  粒子系という) の状態に作用する物理量を構成する手順としては以下のようにすればよい.

<sup>\*43</sup> 逆に, 各々の1粒子状態に  $\hat{o}$  を作用させた状態の和を与える演算子として  $\hat{O}$  を定義してもよい. そちらの方が天下り感はなく自然かもしれない.

1. 1 粒子状態  $\mathcal{H}_1$  の演算子  $\hat{o}$  を考え, 適当な (適切な) 基底を用いて行列要素で展開する:

$$\hat{o} = \sum_{\alpha, \beta} o_{\alpha, \beta} |\alpha\rangle\langle\beta|. \quad (\text{A.29})$$

ここで「適切な」と書いたのは,  $\hat{o}$  の固有状態を基底にとるとその形が簡単になることからである. つまり, 固有状態を基底にとることで対角成分のみを考えればよくなり都合がよい.

2. ケットベクトルを生成演算子, ブラベクトルを消滅演算子に置き換えることで一般の  $N$  粒子状態  $\mathcal{F}_\zeta(\mathcal{H})$  の元にかかる演算子  $\hat{O}$  が得られる:

$$\hat{O} := \sum_{\alpha, \beta} o_{\alpha, \beta} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta. \quad (\text{A.30})$$

このとき,  $\hat{O}$  は展開する基底によらない. つまり次の関係が成立する.

$$\hat{O} = \sum_{\alpha, \beta} \langle\alpha|\hat{o}|\beta\rangle \hat{a}^\dagger(|\alpha\rangle)\hat{a}(|\beta\rangle) = \sum_{\xi, \eta} \langle\xi|\hat{o}|\eta\rangle \hat{a}^\dagger(|\xi\rangle)\hat{a}(|\eta\rangle). \quad (\text{A.31})$$

これは生成消滅演算子の線形性 (定理 A.2.6) からわかる.

最初に最も単純な  $N$  粒子状態の物理量, 数演算子  $\hat{N}$  を見てみる. 対応する 1 粒子状態の演算子は恒等演算子  $\hat{1}$  である. 数演算子をいくつかの基底で表すと次のようになる.

$$\hat{N} = \sum_{\alpha} \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha \quad (\text{A.32a})$$

$$= \int d^3x \hat{a}^\dagger(x) \hat{a}(x) \quad (\text{A.32b})$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) \quad (\text{A.32c})$$

ここで基底  $|x\rangle, |p\rangle$  はそれぞれ位置基底と運動量基底で, 対応する生成消滅演算子を  $\hat{a}^\dagger(x), \hat{a}^\dagger(p)$  と書いた<sup>\*44</sup>. 数演算子は  $N$  粒子状態に作用して固有値  $N$  を返す演算子である.

運動量演算子  $\hat{p}$  を考えると, 1 粒子状態の演算子は

$$\begin{aligned} \hat{p} &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} p |p\rangle\langle p| \\ &= \int d^3x |x\rangle(-i\nabla)\langle x| \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

なので,  $N$  粒子状態では,

$$\begin{aligned} \hat{P} &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} p \hat{a}^\dagger(p) \hat{a}(p) \\ &= \int d^3x \hat{a}^\dagger(x) (-i\nabla) \hat{a}(x) \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

となる. これは合計の運動量を与える物理量である.

次に 1 粒子に対するハミルトニアン  $\hat{h} = \hat{p}^2/(2m) + V(\hat{x})$  を考える. 位置表示ではその表現はいつも通り

$$\langle x|\hat{h}|x'\rangle = -\frac{1}{2m} \nabla^2 \delta^3(x-x') + V(x) \delta^3(x-x') \quad (\text{A.35})$$

なので,  $N$  粒子のハミルトニアンとして,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d^3x \int d^3x' \hat{a}^\dagger(x) \left[ -\frac{1}{2m} \nabla^2 \delta^3(x-x') + V(x) \delta^3(x-x') \right] \hat{a}(x') \\ &= \int d^3x \hat{a}^\dagger(x) \left[ -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \hat{a}(x) \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

<sup>\*44</sup> 位置基底の生成消滅演算子は波動関数との類似性から  $\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}(x)$  と書くこともある. 位置基底の生成消滅演算子のことを「場の演算子」と呼ぶことが多い.

を得る. これは相互作用のない  $N$  粒子の系を記述する (相互作用のある場合は後に扱う). 運動量表示でも見よう. 基底  $|p\rangle$  で展開すると,

$$\begin{aligned}\langle p|\hat{h}|p\rangle &= \frac{p^2}{2m}(2\pi)^3\delta(p-p') + \int d^3x \langle p|x\rangle V(x) \langle x|p'\rangle \\ &= \frac{p^2}{2m}(2\pi)^3\delta(p-p') + \int d^3x V(x)e^{-ip\cdot(x-x')} \\ &= \frac{p^2}{2m}(2\pi)^3\delta(p-p') + \tilde{V}(p-p')\end{aligned}\quad (\text{A.37})$$

となる. ここで  $\langle x|p\rangle = e^{ipx}$  を用いて, さらに  $V(x)$  のフーリエ変換を

$$\tilde{V}(q) := \int d^3x V(x)e^{-iq\cdot x}\quad (\text{A.38})$$

で定義した. ここから  $N$  粒子のハミルトニアンとして,

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{2m} \hat{a}^\dagger(p)\hat{a}(p) + \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \tilde{V}(p-p') \hat{a}^\dagger(p)\hat{a}(p') \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{p^2}{2m} \hat{a}^\dagger(p)\hat{a}(p) + \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \tilde{V}(q) \hat{a}^\dagger(p+q)\hat{a}(p)\end{aligned}\quad (\text{A.39})$$

が得られる. 2行目の第2項は確率振幅  $\tilde{V}(q)$  で運動量  $p$  の粒子を消滅させて運動量  $p+q$  の粒子を生成するという過程を描いている.

最後に最も簡単な表式となるエネルギー固有状態での表現を確かめる. 1粒子状態のハミルトニアンのエネルギー固有状態  $|\alpha\rangle$  を基底にとると,  $N$  粒子状態のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}\quad (\text{A.40})$$

となる. ここで固有状態  $|\alpha\rangle$  のエネルギー固有値を  $E_{\alpha}$  とした.

以上により 1粒子状態の物理量を  $N$  粒子状態の物理量に書き換える手続きの説明は終了した. より一般の物理量についても同様である.

最後に残った課題として, 粒子が独立ではなくお互いに影響を与え合っている相互作用のある系の扱いがある. ここで注意が必要なのが, 先ほどまで構成してきた演算子は独立した  $N$  粒子にはたらくものであったということだ (そもそもそのようなはたらきを持つように定義した). これから見えていく例えば2体間の相互作用などは異なる構成の仕方をしなければならない.

2体間の相互作用とは何か, ということから始める. 2体間の相互作用は2粒子状態  $\mathcal{H}_2$  に作用して2粒子状態  $\mathcal{H}_2$  を返す演算子 (物理量) のことである. その一般的な形は位置表示で次のように表すことができる:

$$\hat{V}^{(2)} |x_1, x_2\rangle_{\zeta} = V^{(2)}(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle_{\zeta}\quad (\text{A.41})$$

ここで  $V^{(2)}(x_1, x_2)$  は  $V^{(2)}(x_1, x_2) = V^{(2)}(x_2, x_1)$  を満たすとする (普通のポテンシャルなら満たされるはず). このような演算子  $\hat{V}^{(2)}$  はまた次のように表すことができる:

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3y |x, y\rangle_{\zeta} V^{(2)}(x, y) {}_{\zeta}\langle x, y|.\quad (\text{A.42})$$

ここから2体間相互作用を  $N$  粒子のあらゆる組について作用させる演算子を構築したい. そのような  $N$  粒子状態に作用する演算子  $\hat{V}_{\text{int}}$  は次のような作用をする.

$$\begin{aligned}\hat{V}_{\text{int}} &= \sum_{i<j} V^{(2)}(x_i, x_j) |x_1, \dots, x_N\rangle_{\zeta} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i\neq j} V^{(2)}(x_i, x_j) |x_1, \dots, x_N\rangle_{\zeta}\end{aligned}\quad (\text{A.43})$$

$\hat{a}(x)\hat{a}(y)$  は状態  $|x, y\rangle_\zeta$  を消して,  $\hat{a}^\dagger(x)\hat{a}^\dagger(y)$  は状態  $|x, y\rangle_\zeta$  を生成するという生成消滅演算子のはたらきと式 (A.42) を考えると, そのような  $\hat{V}_{\text{int}}$  は次のように表せると考えられる:

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3y \hat{a}^\dagger(x)\hat{a}^\dagger(y)V^{(2)}(x, y)\hat{a}(y)\hat{a}(x). \quad (\text{A.44})$$

これは実際に  $|x_1, \dots, x_N\rangle_\zeta$  に作用させてみれば確かめることができる. 計算は次のように行う.

$$\begin{aligned} \hat{a}(y)\hat{a}(x) |x_1, \dots, x_N\rangle_\zeta &= \hat{a}(y) \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \delta^3(x - x_k) \underbrace{|x_1, \dots, x_N\rangle_\zeta}_{x_k \text{ なし}} \\ &= \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \delta^3(x - x_k) \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^N \eta_{jk} \delta^3(y - x_j) \underbrace{|x_1, \dots, x_N\rangle_\zeta}_{x_k, x_j \text{ なし}} \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

ここで  $\eta_{jk}$  は  $j < k$  のとき  $\zeta^{j-1}$ ,  $j > k$  のとき  $\zeta^j$  を返す記号である.

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger(x)\hat{a}^\dagger(y)\hat{a}(y)\hat{a}(x) |x_1, \dots, x_N\rangle_\zeta &= \sum_{j \neq k} \zeta^{k-1} \eta_{jk} \delta^3(x - x_k) \delta^3(y - x_j) \underbrace{|x, y, x_1, \dots, x_N\rangle_\zeta}_{x_k, x_j \text{ なし}} \\ &= \sum_{j \neq k} \zeta^{k-1} \eta_{jk} \delta^3(x - x_k) \delta^3(y - x_j) \underbrace{|x_k, x_j, x_1, \dots, x_N\rangle_\zeta}_{\text{先頭以外の } x_k, x_j \text{ なし}} \\ &= \sum_{j \neq k} \delta^3(x - x_k) \delta^3(y - x_j) |x_1, \dots, x_N\rangle_\zeta \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

最後の等号では並び替えにより  $x_j, x_k$  が元の位置に戻り,  $\zeta$  の因子がちょうどうまく消える. よってここに  $V^{(2)}(x, y)$  をかけて積分をして2で割れば式 (A.44) で定義した  $\hat{V}_{\text{int}}$  が式 (A.43) を満たすことがわかる.

ここで得た相互作用を表す  $\hat{V}_{\text{int}}$  を運動量で表示すると面白い. 運動量を基底にとると, 位置基底での生成消滅演算子を用いて,

$$\hat{a}^\dagger(p) = \int d^3x e^{ip \cdot x} \hat{a}^\dagger(x) \quad (\text{A.47a})$$

$$\hat{a}(p) = \int d^3x e^{-ip \cdot x} \hat{a}(x) \quad (\text{A.47b})$$

$$\hat{a}^\dagger(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-ip \cdot x} \hat{a}^\dagger(p) \quad (\text{A.47c})$$

$$\hat{a}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{ip \cdot x} \hat{a}(p) \quad (\text{A.47d})$$

と表すことができる. これを用いて  $\hat{V}_{\text{int}}$  を表すと (多少計算をして),

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \tilde{V}(q) \hat{a}^\dagger(p+q) \hat{a}^\dagger(p'-q) \hat{a}(p') \hat{a}(p) \quad (\text{A.48})$$

と表すことができる. ここで2体間の相互作用を  $V^{(2)}(x, y) = V(x - y)$  と距離のみに依存すると仮定した (並進対称性があれば満たされる).  $\tilde{V}(q)$  は  $V(x)$  のフーリエ成分を表す. この表式から,  $\hat{V}_{\text{int}}$  は2体間相互作用によって運動量  $p, p'$  の粒子から確率振幅  $\tilde{V}(q)$  で運動量  $p+q, p'-q$  の粒子が生成する過程を描いていることが理解できる. これは運動量保存則と整合する.



## 参考文献

- [1] Wilhelm LENZ. Beitrag zum verstandnis der magnetischen erscheinunge in festen korpern. *Phys. Zs.*, Vol. 21, pp. 613–615, 1920.
- [2] 高橋和孝, 西森秀稔. 相転移・臨界現象とくりこみ群. 丸善出版, 2017.
- [3] Joseph Edward Mayer and Maria Goeppert Mayer. *Statistical mechanics*, Vol. 28. John Wiley & Sons New York, 1940.
- [4] 阿部龍蔵. 統計力学. 東京大学出版会, 1992.
- [5] Neil W Ashcroft and N David Mermin. *Solid state physics*. Cengage Learning, 2022.
- [6] Carlo Cercignani and Carlo Cercignani. *The boltzmann equation*. Springer, 1988.
- [7] 永長直人. 物性論における場の量子論. 岩波書店, 1995.
- [8] 坂本真人. 場の量子論 (II): ファインマン・グラフとくりこみを中心にして. 裳華房, 2020.
- [9] 坂本真人. 場の量子論 不変性と自由場を中心にして. 裳華房, 2014.
- [10] Daniele Dorigoni. An introduction to resurgence, trans-series and alien calculus. *Annals of Physics*, Vol. 409, p. 167914, 2019.
- [11] Richard P Feynman. *Statistical mechanics: a set of lectures*. CRC press, 2018.
- [12] Hal Tasaki. Introduction to the "second quantization" formalism for non-relativistic quantum mechanics: A possible substitution for sections 6.7 and 6.8 of feynman's "statistical mechanics", 2018.
- [13] Elias M Stein and Rami Shakarchi. *Complex analysis*, Vol. 2. Princeton University Press, 2010.
- [14] Andrea Damascelli. Probing the electronic structure of complex systems by arpes. *Physica Scripta*, Vol. 2004, No. T109, p. 61, 2004.
- [15] 寺崎一郎. 固体物理学. 日本評論社, 2023.
- [16] 藪博之. 多粒子系の量子論. 裳華房, 2016.
- [17] John Bardeen, Leon N Cooper, and John Robert Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical review*, Vol. 108, No. 5, p. 1175, 1957.
- [18] 高木伸. 巨視的トンネル現象. 岩波オンデマンドブックス, 2016.
- [19] AB Migdal. Interaction between electrons and lattice vibrations in a normal metal. *Sov. Phys. JETP*, Vol. 7, No. 6, pp. 996–1001, 1958.
- [20] GM Eliashberg. Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor. *Sov. Phys. JETP*, Vol. 11, No. 3, pp. 696–702, 1960.
- [21] F London. On the problem of the molecular theory of superconductivity. *Physical Review*, Vol. 74, No. 5, p. 562, 1948.
- [22] J Robert Schrieffer. *Theory of superconductivity*. CRC press, 2018.
- [23] Yoichiro Nambu. Quasi-particles and gauge invariance in the theory of superconductivity. *Physical Review*, Vol. 117, No. 3, p. 648, 1960.
- [24] 北孝文. 統計力学から理解する超伝導理論. サイエンス社, 2021.
- [25] 高橋康. 物性研究者のための場の量子論 1,2. 培風館, 1974.
- [26] Michael Tinkham. *Introduction to superconductivity*. Courier Corporation, 2004.
- [27] 貴嗣堀田. 強相関電子系における超伝導 (強相関伝導系の物理 若手秋の学校, 講義ノート). 物性研究, Vol. 70, No. 2, 5 1998.
- [28] 高田康民. 第一原理からの超伝導理論. 物性研究電子版, Vol. 3, No. 1, 2 2014.
- [29] Alexandre M Zagoskin. *Quantum theory of many-body systems*, Vol. 174. Springer, 1998.
- [30] 伏屋雄紀, 福山秀敏. 誌上セミナー 久保公式とグリーン関数法の実践的基礎. 固体物理/アグネ技術セン

ター [編], Vol. 51, No. 7, pp. 371–388, 2016.

[31] Alekseĭ Alekseevich Abrikosov, Lev Petrovich Gorkov, and Igor Ekhievich Dzyaloshinski. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. Courier Corporation, 2012.

[32] John W Negele. *Quantum many-particle systems*. CRC Press, 2018.