

非平衡グリーン関数

宮崎 優*

2021年6月9日

1 時間依存する系の量子統計力学

1.1 時間依存する系の時間発展演算子

量子系の時間発展を記述する Schrödinger 方程式は

$$i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle \quad (1)$$

であるが、この解は一般にユニタリー演算子 $\hat{U}(t, t_0)$ を用いて

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

と表せる ($t > t_0$ とする)。これを (1) に代入すると微分方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = 1 \quad (3)$$

を得る。これを積分すると

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \\ &= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \left(1 - i \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_2) \hat{U}(t_2, t_0) \right) \\ &= \dots = \sum_{k=0}^{\infty} (-i)^k \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{k-1}} dt_k \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_k) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_k} dt_k T \left\{ \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_k) \right\} \\ &=: T \left\{ \exp \left(-i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right) \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

ここで T は時間順序積 (T 積) であり、その定義は $t_m \geq \dots \geq t_1$ のとき $(1, 2, \dots, m)$ の置換を P として

$$T \left\{ \hat{H}(t_{P(m)}) \hat{H}(t_{P(m-1)}) \dots \hat{H}(t_{P(1)}) \right\} = \hat{H}(t_m) \hat{H}(t_{m-1}) \dots \hat{H}(t_1) \quad (5)$$

* 何かあれば <https://miyazaki-yu.github.io/webpage/about.html> にある連絡先までご連絡願います。すぐに対応できるかはわかりませんが...

である。 T 積の重要な性質として T 積のもとにある時間の異なる演算子は可換となる*¹。これは演算子 $\hat{A}(t_A), \hat{B}(t_B), (t_A > t_B)$ の交換関係

$$T \left\{ \left[\hat{A}(t_A), \hat{B}(t_B) \right]_- \right\} = \hat{A}(t_A)\hat{B}(t_B) - \hat{A}(t_A)\hat{B}(t_B) = 0 \quad (6)$$

からわかる。

時間発展演算子はユニタリー演算子なので

$$\hat{U}(t_0, t) = \left[\hat{U}(t, t_0) \right]^{-1} = \left[\hat{U}(t, t_0) \right]^\dagger = \bar{T} \left\{ \exp \left(+i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right) \right\} \quad (7)$$

である。ここで \bar{T} は逆時間順序積であり、 T 積と逆の順序に並べる。以上をまとめると

$$\hat{U}(t_2, t_1) = \begin{cases} T \left\{ \exp \left(-i \int_{t_1}^{t_2} dt' \hat{H}(t') \right) \right\} & (t_2 > t_1) \\ \bar{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{t_2}^{t_1} dt' \hat{H}(t') \right) \right\} & (t_2 < t_1) \end{cases} \quad (8)$$

1.2 時間依存する量子状態の期待値

時間 t での演算子 $\hat{O}(t)$ *²の期待値 $O(t)$ は $t = t_0$ のときの状態を $|\Psi_0\rangle := |\Psi(t_0)\rangle$ として

$$O(t) := \langle \Psi(t) | \hat{O}(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{U}(t_0, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0) | \Psi_0 \rangle \quad (9)$$

で表される。(8) を用いて表すと

$$O(t) = \langle \psi_0 | \bar{T} \left\{ \exp \left(-i \int_t^{t_0} dt' \hat{H}(t') \right) \right\} \hat{O}(t) T \left\{ \exp \left(-i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right) \right\} | \Psi_0 \rangle \quad (10)$$

となる。

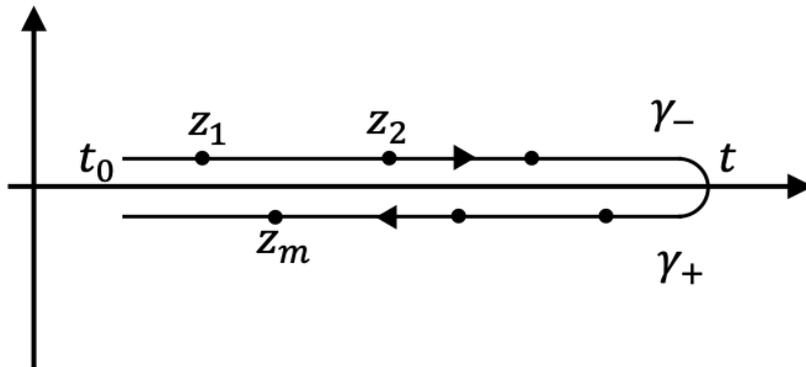


図1 複素時間における経路 γ は t_0 と t の間の実軸に沿った経路 γ_- と γ_+ からなる。 γ に沿って $z_1 \rightarrow z_2 \rightarrow \dots \rightarrow z_m$ の順で並んでいる。

ここで

$$\gamma = \underbrace{[t_0, t]}_{\gamma_-} \oplus \underbrace{[t, t_0]}_{\gamma_+} \quad (11)$$

*¹ 後述するフェルミオン場の演算子だと反交換する

*² $\hat{O}(t)$ は schrödinger 表示であることに注意する。

のような「経路」を考えてみる (図 1)。実時間 t' に対応する γ 上の点 z' は 2 種類あり、 γ_- 上にあるとき $z' = t'_-$ 、 γ_+ 上にあるとき $z' = t'_+$ と書くことにすると演算子 $\hat{A}(z')$ は

$$\hat{A}(z') := \begin{cases} \hat{A}_-(t') & (z' = t'_-) \\ \hat{A}_+(t') & (z' = t'_+) \end{cases} \quad (12)$$

ここで一般には $\hat{A}_-(t')$ と $\hat{A}_+(t')$ は異なっていても良い*3。しかし、今はハミルトニアン \hat{H} と観測する演算子 \hat{O} については $z' = t'_-$ と $z' = t'_+$ のどちらも等しいとする。

$$\begin{aligned} \hat{H}(z' = t'_\pm) &=: \hat{H}(t') \\ \hat{O}(z' = t'_\pm) &=: \hat{O}(t') \end{aligned} \quad (13)$$

また、時間順序積 (5) に対応する、経路 γ の経路順序積 \mathcal{T} を導入する。これは経路の前側にある演算子を右に、後ろ側にある演算子を左に並べる演算子で、経路 γ に沿って $z_1 \rightarrow z_2 \rightarrow \dots \rightarrow z_m$ の順で並んでいるとき (図 1)

$$\mathcal{T} \left\{ \hat{A}_{P(m)}(z_{P(m)}) \hat{A}_{P(m-1)}(z_{P(m-1)}) \cdots \hat{A}_{P(1)}(z_{P(1)}) \right\} = \hat{A}_m(z_m) \hat{A}_{m-1}(z_{m-1}) \cdots \hat{A}_1(z_1) \quad (14)$$

と作用する。例えば、

$$\mathcal{T} \left\{ \hat{A}(z_1) \hat{B}(z_2) \right\} = \begin{cases} \mathcal{T} \left\{ \hat{A}_-(t_1) \hat{B}_-(t_2) \right\} & z_1 = t_{1-}, z_2 = t_{2-} \\ \hat{A}_+(t_1) \hat{B}_-(t_2) & z_1 = t_{1+}, z_2 = t_{2-} \\ \hat{B}_+(t_2) \hat{A}_-(t_1) & z_1 = t_{1-}, z_2 = t_{2+} \\ \bar{\mathcal{T}} \left\{ \hat{A}_+(t_1) \hat{B}_+(t_2) \right\} & z_1 = t_{1+}, z_2 = t_{2+} \end{cases} \quad (15)$$

となる。これを用いて (10) を書き直すと

$$\begin{aligned} O(t) &= \langle \Psi_0 | \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma_+} dz' \hat{H}(z') \right) \hat{O}(t_\pm) \exp \left(-i \int_{\gamma_-} dz' \hat{H}(z') \right) \right\} | \Psi_0 \rangle \\ &= \langle \Psi_0 | \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \hat{O}(t_\pm) \right\} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (16)$$

となる。ここで \mathcal{T} 積のもとで異なる時間の演算子が可換となることを用いた。

しかし、(16) の定式化は γ の経路が t に依存してしまうという点において不便である。そこで γ を $t \rightarrow \infty$ まで拡張した経路を考える (図 2)。 \mathcal{T} 積に注意して具体的に (16) を書き下すと

$$\begin{aligned} \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \hat{O}(t_-) \right\} &= \hat{U}(t_0, \infty) \hat{U}(\infty, t_0) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0) \\ \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \hat{O}(t_+) \right\} &= \hat{U}(t_0, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, \infty) \hat{U}(\infty, t_0) = \hat{U}(t_0, t) \hat{O}(t) \hat{U}(t, t_0) \end{aligned} \quad (17)$$

となり、結果は拡張する前の γ と一致する。以上をまとめると、経路 γ (図 2) に対して

$$\boxed{O(t) = \langle \Psi_0 | \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \hat{O}(t_\pm) \right\} | \Psi_0 \rangle} \quad (18)$$

が成り立つ*4。

*3 [1]

*4 ここで、 \hat{O} が t に依存しない場合、(10) では $\hat{O}(t) =: \hat{O}$ と書いても問題ないが、(18) の場合はこのように書いてしまった場合に経路順序積が定義できないため、 \mathcal{T} の下では γ 上の時間を指定する必要がある。

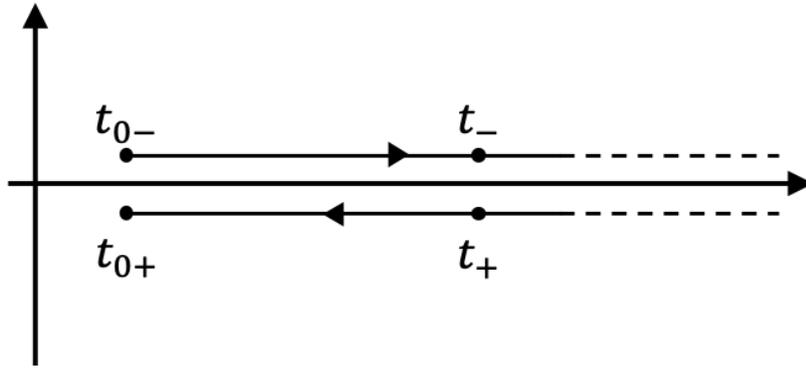


図2 拡張された経路 γ は t_0 と ∞ の間の実軸に沿った経路である。 γ 上では2つの点 t_{\pm} が実時間 t に対応する。

1.3 時間依存するアンサンブル平均

今までは孤立した系(純粋系)の時間発展を考えてきた。しかし、実際の物理系は殆どの場合環境と系が相互作用している。この場合は混合状態を考える必要がある。混合状態とは純粋状態 $|\chi_n\rangle$ が確率 w_n で混ざり合っている状態を指す*5。今、時刻 $t = t_0$ でこの混合状態にあるとすると、演算子 $\hat{O}(t_0)$ のアンサンブル平均 $\bar{O}(t_0)$ は

$$\bar{O}(t_0) = \sum_n w_n \langle \chi_n | \hat{O}(t_0) | \chi_n \rangle \quad (19)$$

で表される。アンサンブル平均を扱うには以下のような密度行列

$$\hat{\rho} := \sum_n w_n |\chi_n\rangle \langle \chi_n| \quad (20)$$

を定義すると便利でアンサンブル平均は

$$\bar{O}(t_0) = \text{Tr} [\hat{\rho} \hat{O}(t_0)] \quad (21)$$

のようになる。

今、時刻 $t = t_0$ でハミルトニアン $\hat{H}(t_0) = \hat{H}_0$ のカノニカルアンサンブルを考えると、エネルギー固有値 E_k に対応する固有状態を $|\Psi_k\rangle$ とすればハミルトニアン \hat{H}_0 は

$$\hat{H}_0 = \sum_k E_k |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| \quad (22)$$

と分解できることから、密度演算子は

$$\hat{\rho}_0 = \sum_k \frac{e^{-\beta E_k}}{Z} |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k| = \frac{e^{-\beta \hat{H}_0}}{Z} \quad (23)$$

ここで Z は分配関数

$$Z := \text{Tr} [e^{-\beta \hat{H}_0}] \quad (24)$$

*5 一般には $|\chi_n\rangle$ は直交しているとは限らない。

である。したがって熱平均は

$$\langle \hat{O}(t_0) \rangle = \bar{O}(t_0) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{O}(t_0) \right] \quad (25)$$

で表せる。ここでハミルトニアン \hat{H}_0 による熱平均を

$$\langle \dots \rangle := \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_0} \dots \right] \quad (26)$$

と書くことにする。

この時間発展を考えると、時刻 t での $\hat{O}(t)$ の熱平均は (18) を用いれば

$$\bar{O}(t) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \hat{O}(t_{\pm}) \right\} \right] = \langle \hat{O}_H(t) \rangle \quad (27)$$

と書ける。

$$\hat{O}_H(t) := \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \hat{O}(t_{\pm}) \right\} \quad (28)$$

は演算子 \hat{O} の Heisenberg 表示である*6。

ここで $\mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \right\} = 1$ を分母に挿入すると

$$\bar{O}(t) = \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \hat{O}(t_{\pm}) \right\} \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{H}(z') \right) \right\} \right]} \quad (29)$$

グランドカノニカルアンサンブルを扱うにはボルツマン因子 $e^{-\beta \hat{H}_0}$ を $e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})}$ (μ は化学ポテンシャル、 \hat{N} は粒子数密度) に置き換えてトレースを取れば良い。

2 非平衡 Green 関数の導入

2.1 相互作用表示

(27) によって任意の時間における有限温度の期待値が (原理的には) 求めることができるようになった。しかし、実際にはこれを計算することはほとんどできないため、何らかの近似や仮定を用いて計算を進める必要がある。その方針はいくつかあるが、今回はその中で最も汎用性が高く広く用いられていると考えられる非平衡グリーン関数の摂動展開について扱う*7。

摂動展開では相互作用表示を用いるため、まずはその導入を行う。ハミルトニアンが

$$\hat{H}(t) = \begin{cases} \hat{H}_0 & (t < t_0) \\ \hat{H}_0 + \hat{V}(t) & (t \geq t_0) \end{cases} \quad (30)$$

の形でかけていると仮定する。ここで \hat{H}_0 について問題は完全に解けていなければならない*8。具体的には自由粒子の場合を想定する。ここで

$$\hat{U}_0(t, t_0) := \exp(-i\hat{H}_0(t - t_0)) \quad (31)$$

*6 Heisenberg 表示と後述する相互作用表示は $t = t_0$ で Schrödinger 表示に一致するとした。

*7 摂動展開以外の手法については [1] を参照

*8 前節の議論は密度演算子の具体的な形には依存せずに成り立つが、結局は非平衡状態の密度行列がわからない場合がほとんどであるため、非平衡グリーン関数を用いて任意の非平衡状態を求めることができるわけではない。

を定義し、相互作用表示の演算子 $\hat{A}_I(t)$ を

$$\hat{A}_I(t) := \left[\hat{U}_0(t, t_0) \right]^\dagger \hat{A}(t_0) \hat{U}_0(t, t_0) \quad (32)$$

とする。時間発展演算子 (8) が

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) \hat{W}(t, t_0) \quad (33)$$

という形を仮定して (3) に代入すると

$$\underbrace{\left(i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_0(t, t_0) \right)}_{=\hat{H}_0(t)\hat{U}_0(t, t_0) \text{ (}\cdot\text{: (3))}} \hat{W} + i \hat{U}_0(t, t_0) \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{W}(t, t_0) \right) = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) \hat{U}_0(t, t_0) \hat{W}(t, t_0)$$

整理すると

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \hat{W}(t, t_0) &= \left[\hat{U}_0(t, t_0) \right]^\dagger \hat{V}(t_0) \hat{U}_0(t, t_0) \hat{W}(t, t_0) \\ &= \hat{V}_I \hat{W}(t, t_0) \end{aligned} \quad (34)$$

であるが、これは (3) の形となるのでその解は 1.1 節の議論と同様に

$$\hat{W}(t, t_0) = T \left\{ \exp \left(-i \int_{t_1}^{t_2} dt' \hat{V}_I(t') \right) \right\} \quad (35)$$

すなわち

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) T \left\{ \exp \left(-i \int_{t_1}^{t_2} dt' \hat{V}_I(t') \right) \right\} \quad (36)$$

である。

この結果を用いれば (27) は

$$\begin{aligned} \bar{O}(t) &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_0} \bar{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{t_2}^{t_1} dt' \hat{V}_I(t') \right) \right\} \hat{O}_I(t_\pm) T \left\{ \exp \left(-i \int_{t_1}^{t_2} dt' \hat{V}_I(t') \right) \right\} \right] \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz' \hat{V}_I(z') \right) \hat{O}_I(t_\pm) \right\} \right] \end{aligned} \quad (37)$$

と書ける。

2.2 非平衡 Green 関数

いよいよ非平衡 Green 関数を定義する。非平衡 Green 関数は $z, z' \in \gamma$ に対して

$$G^C(\mathbf{r}, z; \mathbf{r}', z') := -i \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz'' \hat{H}(z'') \right) \hat{a}(\mathbf{r}, z) \hat{a}^\dagger(\mathbf{r}', z') \right\} \right] \quad (38)$$

で定義される。ここでボゾンの場の演算子 $\hat{\psi}(t) = \hat{b}(\mathbf{r}, t)$ or $\hat{b}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ の場合、フェルミオンの場の演算子 $\hat{\psi}(t) = \hat{c}(\mathbf{r}, t)$ or $\hat{c}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ の場合に対して、経路 γ に沿って $z_1 \rightarrow z_2 \rightarrow \dots \rightarrow z_m$ の順で並んでいるとき (図 1) に \mathcal{T} 積を符号付きで

$$\mathcal{T} \left\{ \hat{\psi}_{P(m)}(z_{P(m)}) \cdots \hat{\psi}_{P(1)}(z_{P(1)}) \right\} = (\pm 1)^P \hat{\psi}_m(z_m) \cdots \hat{\psi}_1(z_1) \quad (39)$$

と定義する*9。(15)を思い出すと、非平衡 Green 関数の(複素)時間の引数は $z = t_{\pm}$ と $z' = t'_{\pm}$ という4通りが考えられる。この4つの場合のそれぞれに名前がついていて、

$$\begin{aligned} \text{時間順序 Green 関数} : G^{--}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &:= G^C(\mathbf{r}, t_-; \mathbf{r}', t'_-) \\ &= -i \langle T \{ \hat{a}_H(\mathbf{r}, t) \hat{a}_H^\dagger(\mathbf{r}', t') \} \rangle \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \text{lesser Green 関数} : G^{-+}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &:= G^C(\mathbf{r}, t_-; \mathbf{r}', t'_+) \\ &= \mp i \langle \hat{a}_H^\dagger(\mathbf{r}', t') \hat{a}_H(\mathbf{r}, t) \rangle \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \text{greater Green 関数} : G^{+-}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &:= G^C(\mathbf{r}, t_+; \mathbf{r}', t'_-) \\ &= -i \langle \hat{a}_H(\mathbf{r}, t) \hat{a}_H^\dagger(\mathbf{r}', t') \rangle \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \text{逆時間順序 Green 関数} : G^{++}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') &:= G^C(\mathbf{r}, t_+; \mathbf{r}', t'_+) \\ &= -i \langle \bar{T} \{ \hat{a}_H(\mathbf{r}, t) \hat{a}_H^\dagger(\mathbf{r}', t') \} \rangle \end{aligned} \quad (43)$$

と定義される。ここで $\hat{a}_H(\mathbf{r}, t) := \hat{U}^\dagger(t-t_0) \hat{a}(\mathbf{r}) \hat{U}(t-t_0) = \mathcal{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz'' \hat{H}(z'') \right) \hat{a}(\mathbf{r}', t_{\pm}) \right\}$ は Heisenberg 表示の消滅演算子である。

これらの Green 関数を用いることで時刻 t での物理量を表現できる。例えば、求める物理量の演算子が $\hat{O} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' [\hat{a}^\dagger(\mathbf{r}) \mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{a}(\mathbf{r}')]$ のような2次形式で表されるとき、時刻 t での \hat{O} の期待値は

$$\bar{O}(t) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' [-i \mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') G^{-+}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t)] \quad (44)$$

で表される。

これら4種の Green 関数は独立ではなく、例えば

$$G^{--}(t, t') = \theta(t-t') G^{+-}(t, t') + \theta(t'-t) G^{-+}(t, t') \quad (45)$$

のような関係を持つ。しかし、後に見るように摂動論を展開する上では4種の Green 関数を定義しておくのが便利であり、自然でもあることがわかる。

これらとは別に通常の場合の理論で用いられる遅延 Green 関数

$$G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') := -i \langle [\hat{a}_H(\mathbf{r}, t), \hat{a}_H^\dagger(\mathbf{r}', t')]_{\mp} \rangle \theta(t-t') \quad (46)$$

及び先進 Green 関数

$$G^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') := i \langle [\hat{a}_H(\mathbf{r}, t), \hat{a}_H^\dagger(\mathbf{r}', t')]_{\mp} \rangle \theta(t'-t) \quad (47)$$

と非平衡 Green 関数との関係を求めておく*10。Keldysh Green 関数を

$$G^K := -i \langle \hat{a}_H(\mathbf{r}, t) \hat{a}_H^\dagger(\mathbf{r}', t') \pm \hat{a}_H^\dagger(\mathbf{r}', t') \hat{a}_H(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (48)$$

で定義し、 2×2 の Green 関数の行列

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') := \begin{pmatrix} G^{--}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') & G^{-+}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \\ G^{+-}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') & G^{++}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \end{pmatrix} \quad (49)$$

$$\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') := \begin{pmatrix} G^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') & G^K(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \\ 0 & G^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \end{pmatrix} \quad (50)$$

*9 符号 \pm はボゾン(上)/フェルミオン(下)に対応する。 T 積および \bar{T} 積についても同様。

*10 $[\clubsuit, \clubsuit]_{\mp}$ はボゾン(上)/フェルミオン(下)に対応する交換/反交換関係であり、経路 γ の \pm とは関係ない

を考えると、これらの関係は τ_0 を単位行列、 $\tau_i (i = 1, 2, 3)$ を Pauli 行列の x, y, z 成分として

$$\tilde{\mathbf{G}} = \frac{1}{2} (\tau_0 - i\tau_2) \tau_3 \mathbf{G} (\tau_0 - i\tau_2)^\dagger \quad (51)$$

と表せる。

2.3 自由電子の非平衡 Green 関数

(44) を用いれば物理量の期待値が求まることがわかったが、これを計算するには (41) を求める必要がある。まずは厳密に計算できる自由電子の場合について 4 種の Green 関数を求めておく。この自由 Green 関数の結果が摂動計算に用いられる。自由電子のハミルトニアンを

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{r} \hat{c}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} - \mu \right) \hat{c}(\mathbf{r}) \quad (52)$$

とする。化学ポテンシャル μ を含む項はグランドカノニカル分布を扱い、 μ をエネルギーの基準とすることを意味する。自由粒子では Heisenberg 表示と相互作用表示が一致することに注意して相互作用表示の電子の消滅演算子

$$\hat{c}_I(\mathbf{r}, t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{c}(\mathbf{r}) \hat{U}(t) \quad (53)$$

を考えると ($t_0 = 0$ とした)、Heisenberg 方程式から

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{c}_I(\mathbf{r}, t) &= i[\hat{H}_0, \hat{c}_I(\mathbf{r}, t)] \\ &= i \int d\mathbf{r}' \left[\hat{c}^\dagger(\mathbf{r}') \left(-\frac{\nabla'^2}{2m} - \mu \right) \hat{c}(\mathbf{r}'), \hat{c}_I(\mathbf{r}, t) \right] \\ &= i \int d\mathbf{r}' \left[\hat{c}^\dagger(\mathbf{r}') \left\{ \left(-\frac{\nabla'^2}{2m} - \mu \right) \hat{c}(\mathbf{r}'), \hat{c}_I(\mathbf{r}, t) \right\} \right. \\ &\quad \left. - \left\{ \hat{c}^\dagger(\mathbf{r}'), \hat{c}_I(\mathbf{r}, t) \right\} \left(-\frac{\nabla'^2}{2m} - \mu \right) \hat{c}(\mathbf{r}') \right] \\ &= -i \left(-\frac{\nabla^2}{2m} - \mu \right) \hat{c}_I(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (54)$$

これを空間について Fourier 変換^{*11}すれば解は波数表示で

$$\hat{c}_{I\mathbf{k}}(t) = e^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}}t} \hat{c}_{\mathbf{k}} \quad (55)$$

で表される。ここで $\varepsilon_{\mathbf{k}} := \frac{k^2}{2m} - \mu$ とし、 $t_0 = 0$ で相互作用表示と Schrödinger 表示が一致することをういた。

*11 本稿では場の演算子 $\hat{c}(\mathbf{r}, t)$ は体積を V として $\frac{1}{\sqrt{V}}$ の単位を持つとして、Fourier 変換は

$$\hat{c}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k}}(t) \xrightarrow[\sum_{\mathbf{k} \rightarrow V} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}]{} \sqrt{V} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k}}(t)$$

とする。したがって $\hat{c}_{\mathbf{k}}(t)$ は無次元である。Green 関数は \hbar を頭に書けば $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ が $(\hbar V)^{-1}$ の次元、Fourier 変換を

$$G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{V} \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-i\omega(t-t')} G_{\mathbf{k}, \omega}$$

とすれば $G_{\mathbf{k}, \omega}$ が $(\hbar\omega)^{-1}$ の次元である。

今、波数表示した自由電子の時間順序 Green 関数 (以降、自由電子の Green 関数は小文字の g で表すことにする) は

$$g_{\mathbf{k}}^{--}(t-t') = -ie^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}}(t-t')} \left[\theta(t-t') \langle \hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \pm \theta(t'-t) \langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \rangle \right] \quad (56)$$

である^{*12*13}。ここで $\theta(t)$ は Heaviside の階段関数である。ここに現れる期待値は Fermi(Bose) 分布関数 $f_{\mathbf{k}}$ を用いて

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \rangle &= f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}} \mp 1} \\ \langle \hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle &= 1 \pm \langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \rangle = 1 \pm f_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (57)$$

と表せることから

$$g_{\mathbf{k}}^{--}(t-t') = -ie^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}}(t-t')} [\theta(t-t')(1 \pm f_{\mathbf{k}}) \pm \theta(t'-t)f_{\mathbf{k}}] \quad (58)$$

である。(45) からわかるように

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}}^{-+}(t) &= \mp ie^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}}t} f_{\mathbf{k}} \\ g_{\mathbf{k}}^{+-}(t) &= -ie^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}}t} (1 \pm f_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (59)$$

となる。

これらを時間に対しても Fourier 変換して振動数で表示する。証明は省略するが Heaviside 関数の Fourier 変換は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) e^{+i\omega t} = \lim_{\eta \rightarrow +0} \frac{i}{\omega + i\eta} =: \frac{i}{\omega + i0} \quad (60)$$

であることを用いて、時間順序 Green 関数の Fourier 変換は

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k},\omega}^{--} &= \frac{1 \pm f_{\mathbf{k}}}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0} \pm \frac{f_{\mathbf{k}}}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - i0} \\ &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0} \mp 2\pi i f_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (61)$$

である。他の Green 関数の Fourier 変換は

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k},\omega}^{-+} &= \mp 2\pi i f_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \\ g_{\mathbf{k},\omega}^{+-} &= -2\pi i (1 \pm f_{\mathbf{k}}) \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \\ g_{\mathbf{k},\omega}^{--} &= -\frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0} \mp 2\pi i f_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \\ g_{\mathbf{k},\omega}^R &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i0} \\ g_{\mathbf{k},\omega}^A &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - i0} \\ g_{\mathbf{k},\omega}^K &= -2\pi i (1 \pm 2f_{\mathbf{k}}) \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (62)$$

である。これらから便利な関係式

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k},\omega}^{-+} &= f_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k},\omega}^A - g_{\mathbf{k},\omega}^R) \\ g_{\mathbf{k},\omega}^{+-} &= -(1 \pm f_{\mathbf{k}}) (g_{\mathbf{k},\omega}^A - g_{\mathbf{k},\omega}^R) \end{aligned} \quad (63)$$

が導ける。

^{*12} ここで系が空間並進対称性を持つことから Green 関数は $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ の関数の形で表されるため、1つの波数で表示することができる。また、今は時間並進対称性も持つことから時間の引数を $(t - t')$ と書いている。

^{*13} 本稿では用いないが念のためボゾンの場合についても書いておく。ボゾン (上)/フェルミオン (下)

2.4 非平衡 Green 関数の摂動論

物理量は (44) のように非平衡 Green 関数の 4 つの成分で書き表せるが、これらを一般のハミルトニアンに対して求めることはできないので、自由粒子のハミルトニアンを参照系として摂動論を展開することにする。

非平衡グリーン関数 (38) は相互作用表示で

$$\begin{aligned} G^C(z; z') &= -i \langle \mathcal{T} \{ \exp \left(-i \int_{\gamma} dz'' \hat{V}_I(z'') \right) \hat{a}_I(\mathbf{r}, z) \hat{a}_I^\dagger(\mathbf{r}', z') \} \rangle \\ &= -i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left[\prod_{i=1}^n \int_{\gamma} dz_i \right] \langle \mathcal{T} \{ \hat{V}_I(z_1) \cdots \hat{V}_I(z_n) \hat{a}_I(z) \hat{a}_I^\dagger(z') \} \rangle \end{aligned} \quad (64)$$

と書ける^{*14}。これが摂動展開の最もプリミティブな式で、

$$\begin{aligned} G^{C(0)} &:= \langle \mathcal{T}(-i) \{ \hat{a}_I(z) \hat{a}_I^\dagger(z') \} \rangle = g(z; z') \\ G^{C(1)} &:= \int_{\gamma} dz_1 \langle \mathcal{T} \{ (-i) \hat{V}_I(z_1) (-i) \hat{a}_I(z) \hat{a}_I^\dagger(z') \} \rangle \\ G^{C(2)} &:= \frac{1}{2} \int_{\gamma} dz_1 dz_2 \langle \mathcal{T} \{ (-i) \hat{V}_I(z_1) (-i) \hat{V}_I(z_2) (-i) \hat{a}_I(z) \hat{a}_I^\dagger(z') \} \rangle \\ &\vdots \end{aligned} \quad (65)$$

と n 次の Green 関数を定義していけば

$$G^C(z; z') \sim G^{C(0)} + G^{C(1)} + G^{C(2)} + \cdots + G^{C(n)} \quad (66)$$

のように求めたい Green 関数を近似的に求めることができる^{*15}のが場の理論における Green 関数を用いた摂動論である。

最も簡単な例としてフェルミオン系で \hat{V} が場の演算子の 2 次形式

$$\hat{V}(t) = W(t) \hat{c}^\dagger \hat{c} \quad (67)$$

で表される場合に (44) を求めるのに必要な lesser 成分 (41) に対する摂動計算を行ってみよう。

$$\begin{aligned} G^{-+(1)}(t; t') &= G^{C(1)}(t_-; t'_+) \\ &= - \int_{\gamma_-} dt_{1-} \langle \mathcal{T} \{ W(t_{1-}) \hat{c}_I^\dagger(t_{1-} + 0) \hat{c}_I(t_{1-}) \hat{c}_I(t_-) \hat{c}_I^\dagger(t'_+) \} \rangle \\ &\quad - \int_{\gamma_+} dt_{1+} \langle \mathcal{T} \{ W(t_{1+}) \hat{c}_I^\dagger(t_{1+} - 0) \hat{c}_I(t_{1+}) \hat{c}_I(t_-) \hat{c}_I^\dagger(t'_+) \} \rangle \end{aligned} \quad (68)$$

これを Bloch de Dominicis (Wick) の定理^{*16}を用いて Wick 展開するが、その前に

- Bloch de Dominicis の定理は通常は時間順序積で定義された Green 関数に対して適用されるが、証明で重要なのは順序が厳密に決まっている場の演算子で定義された物理量の期待値

^{*14} 位置依存性の引数は省略した

^{*15} 摂動展開は殆どの場合が収束半径が 0 の漸近展開なので $n \rightarrow \infty$ でも収束しないどころか、ある次数を超えると急激に近似が悪くなる [5]

^{*16} 絶対零度での Wick 展開を示したのが Wick の定理、グランドカノニカル分布での Wick 展開を示したのが Bloch de Dominicis の定理らしいが、多くの文献ではグランドカノニカル分布の場合も Wick の定理とよんでいる。

が同じ順序で定義された自由 Green 関数に分解されるという点であり、逆時間順序積であろうが経路時間順序積であろうが Wick 分解可能である。

- Bloch de Dominicis の定理の適用条件は熱平均が $\hat{\rho}_0 = e^{-\beta\hat{H}_0}$ のトレースで表され^{*17}、 \hat{H}_0 が対応する場の演算子の 2 次形式で書かれていることなので、一般の非平衡状態を初期条件とする場合だと摂動展開することはできない^{*18}。また、もし仮に展開できたとしても展開先も非平衡状態なのでその密度行列がわかっていなければ計算することはできない。

であることを指摘しておく。これに注意して Wick 展開を行うと

$$\begin{aligned}
& -\langle \mathcal{T}\{W(t_{1-})\hat{c}_I^\dagger(t_{1-}+0)\hat{c}_I(t_{1-})\hat{c}_I(t_-)\hat{c}_I^\dagger(t'_+)\} \rangle \\
& = +\langle \mathcal{T}\{\hat{c}_I(t_{1-})\hat{c}_I^\dagger(t_{1-}+0)\} \rangle W(t_{1-}) \langle \mathcal{T}\{\hat{c}_I(t_-)\hat{c}_I^\dagger(t'_+)\} \rangle \\
& \quad - \langle \mathcal{T}\{\hat{c}_I(t_-)\hat{c}_I^\dagger(t_{1-})\} \rangle W(t_{1-}) \langle \mathcal{T}\{\hat{c}_I(t_{1-})\hat{c}_I^\dagger(t'_+)\} \rangle \\
& = g^{--}(t_1; t_1+0)W(t_1)g^{-+}(t_1; t') - g^{--}(t; t_1)W(t_1)g^{-+}(t_1; t')
\end{aligned} \tag{69}$$

$$\begin{aligned}
& -\langle \mathcal{T}\{W(t_{1+})\hat{c}_I^\dagger(t_{1+})\hat{c}_I(t_{1+}+0)\hat{c}_I(t_-)\hat{c}_I^\dagger(t'_+)\} \rangle \\
& = +\langle \mathcal{T}\{\hat{c}_I(t_-)\hat{c}_I^\dagger(t'_+)\} \rangle W(t_{1+}) \langle \mathcal{T}\{\hat{c}_I(t_{1+}+0)\hat{c}_I^\dagger(t_{1+})\} \rangle \\
& \quad - \langle \mathcal{T}\{\hat{c}_I(t_-)\hat{c}_I^\dagger(t_{1+})\} \rangle W(t_{1+}) \langle \mathcal{T}\{\hat{c}_I(t_{1+})\hat{c}_I^\dagger(t'_+)\} \rangle \\
& = g^{-+}(t; t')W(t_1)g^{++}(t_1+0; t_1) - g^{-+}(t; t_1)W(t_1)g^{++}(t_1; t')
\end{aligned} \tag{70}$$

である^{*19}から

$$\begin{aligned}
& G^{-+(1)}(t; t') \\
& = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 (g^{--}(t_1; t_1+0)W(t_1)g^{-+}(t_1; t') - g^{--}(t; t_1)W(t_1)g^{-+}(t_1; t')) \\
& \quad + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 (g^{-+}(t; t')W(t_1)g^{++}(t_1+0; t_1) - g^{-+}(t; t_1)W(t_1)g^{++}(t_1; t')) \\
& = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 (ig^{--}(t; t_1)W(t_1)ig^{-+}(t_1; t') + ig^{-+}(t; t_1)(-W(t_1))ig^{++}(t_1; t'))
\end{aligned} \tag{71}$$

これは図 3 のダイアグラムで表される。各成分について同様の計算を行うと

$$i\mathbf{G}^{(1)}(t; t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 (ig(t; t_1)) (i\mathbf{W}(t_1)) (ig(t_1; t')) \tag{72}$$

$$\mathbf{W}(t) := W(t)\tau_3 \tag{73}$$

^{*17} ここではグランドカノニカル分布の場合について考える。実はカノニカル分布では Wick 展開ができないということが知られている (この事実は齊藤研の恒川くんから教えてもらった)。そのときはカノニカル分布でも 2 次形式の形になっているのでどこが問題なのかわからなかったが、後で考えてみると当たり前であることがわかった。重要なのはグランドカノニカル分布では粒子数は変化するのに対してカノニカル分布は粒子数が固定されているという点である。Bloch de Dominicis の定理の証明にはトレースの巡回公式を用いるのだが、場の演算子が作用する Fock 空間は粒子数が固定されていないのに対し、カノニカル分布で熱平均を取るという操作は密度行列をかけてからある 1 つの粒子数の Hilbert 空間でトレースを取るという操作に対応する。つまり部分トレースを取るのだが、部分トレースについては巡回公式が成り立たないのでカノニカル分布では Wick 展開が厳密ではないのである。(あるいは、同じことだが経路積分の形式では積分区間が全空間を覆わないので Gauss 積分の公式が使えない。) 私がこのことで得た教訓は、量子論においては考える全空間 (全体集合) というのは考える演算子に対して自然に定まるものであり、それが考えたい状況の集合と一致しているかは注意する必要があるということである。

^{*18} 一応、この条件は緩めることができるようである [7] が、相互作用がある初期条件には適用できない。

^{*19} \mathcal{T} 積の中で同じ時刻の演算子がある場合は、順序を明確にするために無限小の時間 $+0$ をどちらかに付け足す。どちらに付け足すかは物理的に正しくなるように (この場合であれば (67) と同じ順序になるように) 取る。

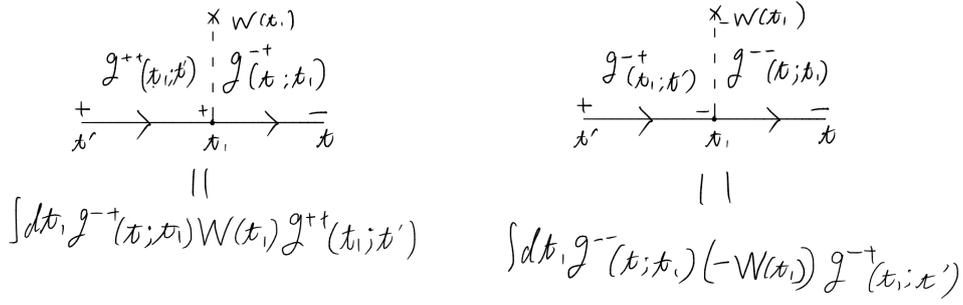


図3 1次のダイアグラム

と表せる。

lesser 成分の計算に戻ると (71) は

$$G^{-+(1)}(t; t') = \left[\int_{\gamma} dz_1 g^C(z; z_1) W(z_1) g^C(z_1; z') \right]_{z=t_-, z'=t'_+} \quad (74)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 [g^R(t; t_1) W(t_1) g^{-+}(t_1; t') + g^{-+}(t; t_1) W(t_1) g^A(t_1; t')]$$

を満たす。ここで (51) の関係式

$$g^{--} = g^R + g^{-+}$$

$$g^{++} = -g^A + g^{-+} \quad (75)$$

を用いた。これを簡単に

$$\boxed{[g^C g^C]^{-+} = g^R g^{-+} + g^{-+} g^A} \quad (76)$$

と書くことにする。遅延及び先進 Green 関数については

$$\boxed{[g^C g^C]^R = g^R g^R}$$

$$\boxed{[g^C g^C]^A = g^A g^A} \quad (77)$$

が成り立つ。これらのような一連の分解のルールを Langreth の定理という。

2.5 Dyson 方程式と自己エネルギー

再び (67) の相互作用を保つ場合の摂動について考えよう。高次の摂動まで計算を行うと同じ構造の繰り返しが現れることがわかる*20。

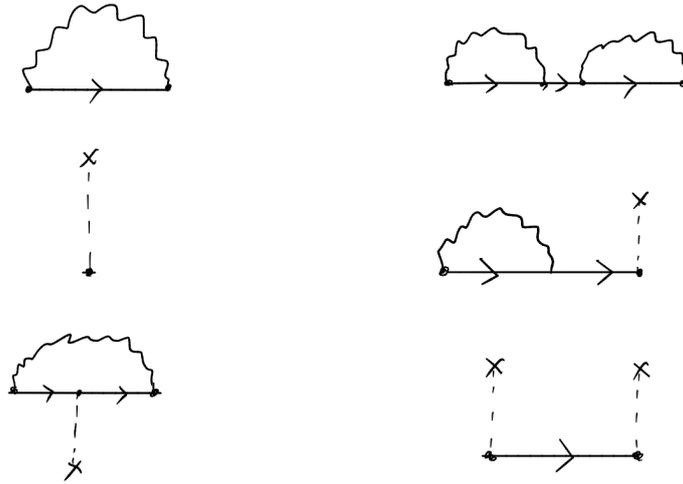
$$G = g + gWg + gWgWg + \dots$$

$$= g + gW(g + gWg + gWgWg + \dots) \quad (78)$$

$$= g + gWG$$

以上からわかるように Green 関数の摂動論はある種の「等比級数」となっている。

*20 ここでは形式的に引数及び積分記号は省略する。また、実際には (72) のように Green 関数や相互作用の前に虚数単位 i が付くがこれも省略する。



既約な自己エネルギー

既約でない

図4 自己エネルギーのダイアグラムの例。自己エネルギー内部には繰り返し構造が含まれない。

$$\begin{aligned}
 \longrightarrow &= \longrightarrow + \longrightarrow \textcircled{\Sigma} \longrightarrow \\
 &+ \longrightarrow \textcircled{\Sigma} \longrightarrow \textcircled{\Sigma} \longrightarrow + \dots \\
 &= \longrightarrow + \longrightarrow \textcircled{\Sigma} \left(\longrightarrow + \longrightarrow \textcircled{\Sigma} \longrightarrow + \dots \right) \\
 &= \longrightarrow \textcircled{\Sigma} \longrightarrow
 \end{aligned}$$

図5 Dyson 方程式のダイアグラム。太線が摂動をフルに含んだ Green 関数 G 、細線が相互作用がない自由 Green 関数 g 、 Σ が自己エネルギー。

このような繰り返し構造は Green 関数の摂動論に一般に現れる。このとき、内線の繰り返しの単位構造 (図4) を既約^{*21}自己エネルギー Σ と呼び、等比級数

$$G = g \Sigma G \tag{79}$$

を Dyson 方程式と呼ぶ (図5)。

Langreth の定理を用いると、例えば lesser Green 関数の Dyson 方程式は

$$G^{-+} = g^{-+} + g^R \Sigma^R G^{-+} + g^R \Sigma^{-+} G^A + g^{-+} \Sigma^A G^A \tag{80}$$

のように分解される。変形すれば

$$(1 - g^R \Sigma^R) G^{-+} = g^{-+} (1 + \Sigma^A G^A) + g^R \Sigma^{-+} G^A \tag{81}$$

^{*21} Green 関数が既約であるかどうかの判別方法は簡単で、自由 Green 関数 g に対応する線を1箇所切断したときにどの線を切断しても2つの構造に分けられないときに Green 関数は既約である。

retarded Green 関数については Dyson 方程式は

$$G^R = g^R + g^R \Sigma^R G^R \quad (82)$$

であるから、

$$G^R = \frac{g^R}{1 - g^R \Sigma^R} \quad (83)$$

$$1 + G^R \Sigma^R = \frac{1}{1 - g^R \Sigma^R} \quad (84)$$

より、

$$\begin{aligned} G^{-+} &= (1 + \Sigma^R G^R) g^{-+} (1 + \Sigma^A G^A) + (g^R + g^R \Sigma^R G^R) \Sigma^{-+} G^A \\ &= (1 + \Sigma^R G^R) g^{-+} (1 + \Sigma^A G^A) + G^R \Sigma^{-+} G^A \end{aligned} \quad (85)$$

のようになる。

2.6 非平衡 Green 関数の Feynman 則

以上で議論してきた摂動論はダイアグラムを用いて行ってきた。ここでは一般の場合についてダイアグラムが従う Feynman 則についてまとめる [7]。

1. 外線とつながった (連結した)^{*22} n 次の図形をすべて描く。
2. 各々の図形に次の因子を関連づける。

$$\frac{i^n (\pm 1)^{n_i}}{n!} \quad \begin{cases} +1 & : \text{Boson} \\ -1 & : \text{Fermion} \end{cases} \quad (86)$$

ここで n_i はフェルミオンの閉じた粒子線 (フェルミオンループ) の数を表す。また、 i^n の因子は (78) で無視した虚数因子である。 $n!$ の因子はトポロジカルに等価なダイアグラムの数と等しく、これをすべて考慮することで打ち消されることに注意する。

3. (\mathbf{r}', t'_j) から (\mathbf{r}, t_i) へ到着する粒子線を $G^{ij}(\mathbf{r}, t_i; \mathbf{r}', t'_j)$ と対応付ける。ここで $i, j \in \{-, +\}$ は経路 γ_{\pm} の符号に対応する。
4. もし $G^{ii(0)}$ における 2 つの時刻が等しければ、 $i = -, +$ の場合に対し、それぞれ $G^{--(0)}(\mathbf{r}, t_i; \mathbf{r}', t_i + 0)$ 、 $G^{++(0)}(\mathbf{r}, t_i + 0; \mathbf{r}', t_i)$ とする。これは相互作用演算子 \hat{V} が正規順序^{*23}であるためである。
5. すべての内部変数について積分もしくは和を実行する。その際、経路 γ_+ では相互作用が $-V$ となっていることに注意する^{*24}。

^{*22} 連結したダイアグラムのみを考慮するのは熱平均が (44) のように表され、分子の非連結のダイアグラムは分母のダイアグラムと約分されるためである。詳しくは [5]、[6] を参照のこと。

^{*23} 消滅演算子が生成演算子よりも右側にある演算子の順序を正規順序という。

^{*24} (72) で $\mathbf{W}(t) = W(t)\boldsymbol{\tau}_3$ としたように相互作用には Pauli 行列 $\boldsymbol{\tau}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ の $++$ 成分に負符号がついているのと同じ理由。

3 事例研究

問題 1：電磁場に対する応答 [2]

金属に対し電磁場を加える場合を考える。電磁場はベクトルポテンシャル \mathbf{A} を用いて^a

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int d\mathbf{r} \frac{1}{2m} (i\nabla\hat{c}(\mathbf{r}, t) - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^\dagger (i\nabla\hat{c}(\mathbf{r}, t) - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)) \\ &= \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2m} (\nabla\hat{c}^\dagger)(\nabla\hat{c}) - \hat{\mathbf{j}}_p \cdot \mathbf{A} - \hat{\mathbf{j}}_d \cdot \mathbf{A} \right]\end{aligned}\quad (87)$$

で表される ($e < 0$ は電気素量)。ここで常磁性電流密度の演算子を

$$\hat{\mathbf{j}}_p := -\frac{ie}{2m} [\hat{c}^\dagger (\nabla\hat{c}) - (\nabla\hat{c}^\dagger) \hat{c}] \quad (88)$$

反磁性電流密度を

$$\hat{\mathbf{j}}_d := -\frac{e^2}{m} \mathbf{A} \hat{c}^\dagger \hat{c} \quad (89)$$

と定義する。

(1) 電流密度演算子 $\hat{\mathbf{j}}$ が

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_p + \hat{\mathbf{j}}_d \quad (90)$$

で表されることを示せ。また、電流密度の期待値 $\bar{\mathbf{j}}$ を lesser Green 関数を用いて表わせ。

(2) 以下では \mathbf{A} に対して 1 次の項のみを考える (線形応答)。波数表示した非平衡 Green 関数について

$$\begin{aligned}G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^C(z; z') \\ = g_{\mathbf{k}}(z, z') - \frac{1}{V} \frac{ek_j}{m} \int_{\gamma} dz_1 A_j(\mathbf{q}, z_1) g_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{k}}{2}}^C(z; z_1) g_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{k}}{2}}^C(z_1; z') + O(A^2)\end{aligned}\quad (91)$$

を示せ^b。

(3) \mathbf{A} が時間依存しないときに $\bar{\mathbf{j}}$ と \mathbf{A} の関係を求めよ。ただしベクトルポテンシャルの空間変動は緩やかで $\mathbf{A}(\mathbf{q}, t) = \int d\mathbf{r} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ と表したとき、波数は $q \ll k_F$ の寄与のみを考える。

(4) \mathbf{A} が空間依存しないときに $\bar{\mathbf{j}}$ と \mathbf{A} の関係を求めよ。ただしベクトルポテンシャルの時間変動は緩やかで $\mathbf{A}(\mathbf{r}, \Omega) = \int dt \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) e^{i\Omega t}$ と表したとき、振動数は $\Omega \ll \omega$ (ω は電子の振動数) の寄与のみを考える。

^a スカラーポテンシャルが 0 となるゲージを取ることにする。スカラーポテンシャルは ill-defined な場合が存在するため取り扱いが難しいようである [6]。

^b Einstein の縮約を用いて j についての和は省略した。

(1) 電流密度 $\hat{\mathbf{j}}$ は連続の式

$$\nabla \hat{\mathbf{j}}_H(\mathbf{r}, t) = -e \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{c}_H(\mathbf{r}, t) \right) \quad (92)$$

を満たす。

Heisenberg 方程式より

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{c}_H(\mathbf{r}, t) \right) \\
&= -i \left[\hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{c}_H(\mathbf{r}, t), \hat{H} \right] \\
&= -\frac{1}{2m} \int d\mathbf{r}' \left[\hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \{ \hat{c}_H(\mathbf{r}, t), (\nabla' + 2ime\mathbf{A}) \hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}', t) \} (\nabla' - 2ime\mathbf{A}) \hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}', t) \right. \\
&\quad \left. - (\nabla' + 2ime) \hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}', t) \{ \hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t), (\nabla' - 2ime) \hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}', t) \} \hat{c}_H(\mathbf{r}, t) \right] \quad (93) \\
&= -\frac{1}{2m} \left[\hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) (\nabla^2 - 2ie\mathbf{A} \cdot \nabla - ie\nabla \cdot \mathbf{A}) \hat{c}_H(\mathbf{r}, t) \right. \\
&\quad \left. - (\nabla^2 + 2ie\mathbf{A} \cdot \nabla + ie\nabla \cdot \mathbf{A}) \hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{c}_H(\mathbf{r}, t) \right] \\
&= -\frac{\nabla}{2m} \cdot \left[\hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \nabla \hat{c}_H(\mathbf{r}, t) - \nabla \hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{c}_H(\mathbf{r}, t) - 2ie\mathbf{A} \hat{c}_H^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{c}_H(\mathbf{r}, t) \right]
\end{aligned}$$

ここで

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] = \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\}\hat{D} - \{\hat{A}, \hat{C}\}\hat{B}\hat{D} + \hat{C}\hat{A}\{\hat{B}, \hat{D}\} - \hat{C}\{\hat{A}, \hat{D}\}\hat{B} \quad (94)$$

を用いた。従って

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{-ie}{2m} [\hat{c}^\dagger \nabla \hat{c} - \nabla \hat{c}^\dagger \hat{c}] - \frac{e^2}{m} \mathbf{A} \hat{c}^\dagger \hat{c} = \hat{\mathbf{j}}_p + \hat{\mathbf{j}}_d \quad (95)$$

これらの期待値は

$$\bar{\mathbf{j}}_p(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{e}{2m} (\nabla - \nabla') G^{-+}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t) \right]_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \quad (96)$$

$$\bar{\mathbf{j}}_d(\mathbf{r}, t) = \frac{ie^2}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) G^{-+}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}, t) \quad (97)$$

であるから

$$\bar{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{e}{2m} (\nabla - \nabla') G^{-+}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t) \right]_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} + \frac{ie^2}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) G^{-+}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}, t) \quad (98)$$

(2) 場の演算子の Fourier 変換は

$$\hat{c}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega t} \hat{c}_{\mathbf{k}\omega} \quad (99)$$

であり、lesser Green 関数の Fourier 変換も

$$G^{-+}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{-+}(t, t') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i\frac{\mathbf{q}}{2} \cdot (\mathbf{r}+\mathbf{r}')} \quad (100)$$

で定義する*25。電流密度も

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{q}, t) \quad (101)$$

のように波数表示すれば各電流の $i (= x, y, z)$ 成分は

$$\bar{j}_{p,i}(\mathbf{q}, t) = -i \frac{e}{m} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k_i G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{-+}(t; t) \quad (102)$$

$$\bar{j}_{d,i}(\mathbf{q}, t) = i \frac{e^2}{m} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} A_i(\mathbf{q}, t) G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}}^{-+}(t; t) \quad (103)$$

*25 このような素直でない形で定義するのは直後に見るように常磁性電流密度の表式がきれいになるためである。

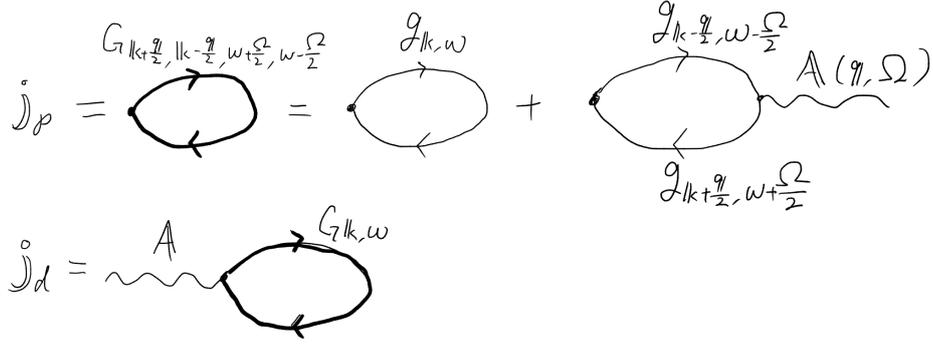


図6 電流密度を表す Feynman ダイアグラム。太線がベクトルポテンシャルを含んだ Green 関数 G 、細線が相互作用がない自由 Green 関数 g 、波線がベクトルポテンシャル A

である。今の場合、相互作用項は

$$\begin{aligned}\hat{V} &= \int d\mathbf{r} \left[-\hat{\mathbf{j}}_p(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \frac{e^2}{2m} \hat{c}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{c}(\mathbf{r}, t) \right] \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \frac{ek_j}{m} A_j(\mathbf{q}, t) \hat{c}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger(t) \hat{c}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}(t) + O(A^2)\end{aligned}\quad (104)$$

であることから非平衡 Green 関数の摂動展開は

$$\begin{aligned}G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^C(z; z') &= -i \int_{\gamma} dz_1 \langle \mathcal{T} \exp(-i\hat{V}_I(z_1)) \hat{c}_{I, \mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(z) \hat{c}_{I, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger(z') \rangle \\ &= g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}}^C(z; z') + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_1} \frac{ek_{1,j}}{m} A_j(\mathbf{q}_1, z_1) \\ &\quad \times \langle \mathcal{T} \hat{c}_{I, \mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{q}_1}{2}}^\dagger(z_1) \hat{c}_{I, \mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{q}_1}{2}}(z_1) \hat{c}_{I, \mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(z) \hat{c}_{I, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger(z') \rangle + O(A^2) \\ &= g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}}^C(z; z') + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_1} \frac{ek_{1,j}}{m} \int_{\gamma} dz_1 A_j(\mathbf{q}_1, z_1) \\ &\quad \times \langle \mathcal{T} \hat{c}_{I, \mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}(z) \hat{c}_{I, \mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{q}_1}{2}}^\dagger(z_1) \rangle \langle \mathcal{T} \hat{c}_{I, \mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{q}_1}{2}}(z_1) \hat{c}_{I, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^\dagger(z') \rangle + O(A^2) \\ &= g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}}^C(z; z') - \frac{1}{V} \frac{ek_j}{m} \int_{\gamma} dz_1 A_j(\mathbf{q}, z_1) \\ &\quad \times g_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^C(z; z_1) g_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^C(z_1; z') + O(A^2)\end{aligned}\quad (105)$$

より、線形応答の範囲では

$$G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^C(z; z') = g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}}^C(z; z') - \frac{1}{V} \frac{ek_j}{m} \int_{\gamma} dz_1 A_j(\mathbf{q}, z_1) g_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^C(z; z_1) g_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^C(z_1; z') \quad (106)$$

が成り立つ。

(3) ベクトルポテンシャルが時間依存しないとき系は時間並進対称性を持つため、例えば (106) の lesser 成分について Fourier 変換の畳み込みの形となる。Langreth の定理を用いると

$$G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{-+}(t; t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[g_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \omega}^{-+} - \frac{ek_j}{m} A_j(\mathbf{q}) \left\{ g_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \omega}^R g_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \omega}^{-+} + g_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \omega}^{-+} g_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \omega}^A \right\} \right] \quad (107)$$

であるが、(63) を使うと

$$G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^{-+}(t; t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[g_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \omega}^{-+} - \frac{ek_j}{m} A_j(\mathbf{q}) f(\omega) \Im \left\{ g_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \omega}^A g_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \omega}^A \right\} \right] \quad (108)$$

となる*26。 $q \ll k_F$ より q^2 のオーダーまで展開すると*27

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{k_i k_j}{m} g_{\mathbf{k}+\frac{q}{2},\omega}^A g_{\mathbf{k}-\frac{q}{2},\omega}^A = \sum_{\mathbf{k}} \left[-\delta_{ij} g_{\mathbf{k},\omega}^A - \frac{1}{12m^2} (q^2 \delta_{ij} - q_i q_j) (g_{\mathbf{k},\omega}^A)^2 \right] \quad (109)$$

これを用いれば常磁性電流は

$$\bar{j}_{p,i}(\mathbf{q}) = \frac{2e^2}{m} A_j(\mathbf{q}) \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Im \left[\delta_{ij} g_{\mathbf{k},\omega}^A + \frac{1}{12m^2} (q^2 \delta_{ij} - q_i q_j) (g_{\mathbf{k},\omega}^A)^2 \right] \quad (110)$$

反磁性電流は (63) より、

$$\bar{j}_{d,i}(\mathbf{q}) = -\frac{2e^2}{m} A_i(\mathbf{q}) \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Im [g_{\mathbf{k},\omega}^A] \quad (111)$$

足し合わせると

$$\bar{\mathbf{j}} = \frac{1}{\mu_e} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \frac{1}{\mu_e} \nabla \times \mathbf{B} \quad (112)$$

$$\frac{1}{\mu_e} = \frac{e^2}{6m} \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Im [(g_{\mathbf{k},\omega}^A)^2] \quad (113)$$

(4) ベクトルポテンシャルが空間依存しない場合は並進対称性から相互作用によって電子の波数は保存するため

$$\begin{aligned} \hat{V} &= -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}} k_j A_j(t) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \hat{c}_{\mathbf{k}}(t) \\ &= -\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}} k_j \int \frac{d\Omega}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\Omega t} A_j(t) \hat{c}_{\mathbf{k},\omega+\Omega}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\omega} + O(A^2) \end{aligned} \quad (114)$$

より (2) の場合と同様に摂動展開すると

$$G_{\mathbf{k}}^C(z; z') = g^C(z; z') - \frac{e}{m} k_j \int_{\gamma} dz_1 g_{\mathbf{k}}^C(z; z_1) A_j(z_1) g_{\mathbf{k}}^C(z_1; z') \quad (115)$$

であるから Langreth の定理で lesser 成分を取り出して時間について Fourier 変換すると

$$G_{\mathbf{k},\omega+\Omega,\omega}^{-+} = g_{\mathbf{k},\omega}^{-+} - e k_j A_j(\Omega) \left[g_{\mathbf{k},\omega+\Omega}^R g_{\mathbf{k},\omega}^{-+} + g_{\mathbf{k},\omega+\Omega}^{-+} g_{\mathbf{k},\omega}^A \right] \quad (116)$$

従って常磁性電流は

$$\begin{aligned} \bar{j}_{p,i}(t) &= \frac{ie}{m^2} \int \frac{d\Omega}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\Omega t} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k_i k_j \\ &\quad \left[\left\{ f\left(\omega + \frac{\Omega}{2}\right) - f\left(\omega - \frac{\Omega}{2}\right) \right\} g_{\mathbf{k},\omega+\frac{\Omega}{2}}^R g_{\mathbf{k},\omega-\frac{\Omega}{2}}^{-+} + g_{\mathbf{k},\omega+\frac{\Omega}{2}}^{-+} g_{\mathbf{k},\omega-\frac{\Omega}{2}}^A \right] \end{aligned} \quad (117)$$

$\Omega \ll \omega$ を用いて Ω の 1 次について展開する

$$\begin{aligned} \bar{j}_{p,i}(t) &= \frac{ie}{m} \int \frac{d\Omega}{2\pi} A_j(\Omega) e^{-i\Omega t} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{V} \\ &\quad \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{k_i k_j}{2m} \Omega f'(\Omega) (g_{\mathbf{k}\omega}^A - g_{\mathbf{k}\omega}^R)^2 + \delta_{ij} f(\omega) (g_{\mathbf{k}\omega}^A - g_{\mathbf{k}\omega}^R) \right] \end{aligned} \quad (118)$$

*26 \Re は複素数の実部、 \Im は複素数の虚部

*27 この展開の計算は少し面倒で本筋からそれるので省略する。詳しくは [3]

反磁性電流は

$$\bar{j}_{d,i}(t) = \frac{-ie}{m} \int \frac{d\Omega}{2\pi} A_j(\Omega) e^{-i\Omega t} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}\omega}^A - g_{\mathbf{k}\omega}^R) \quad (119)$$

である。足し合わせると

$$\bar{j}_i = \frac{ie}{2m^2} \int \frac{d\Omega}{2\pi} A_j(\Omega) e^{-i\Omega t} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k_i k_j \Omega f'(\omega) (g_{\mathbf{k}\omega}^A - g_{\mathbf{k}\omega}^R)^2 \quad (120)$$

である。今のゲージでは

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} \quad (121)$$

振動数表示すると

$$\mathbf{E}(\Omega) = -i\Omega \mathbf{A}(\Omega) \quad (122)$$

であるから

$$\bar{j}_i = \sigma_{ij} E_j \quad (123)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{2m^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} k_i k_j f'(\omega) (g_{\mathbf{k}\omega}^A - g_{\mathbf{k}\omega}^R)^2 \quad (124)$$

のように書ける。

問題 2 : 量子ドット接合系の電流 [8]

2つの電極 L, R が量子ドット D につながっている系を考える。この系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{L\mathbf{k}} \hat{c}_{L\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{L\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{R\mathbf{k}} \hat{c}_{R\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{R\mathbf{k}} + \varepsilon_0 \hat{d}^\dagger \hat{d} + \sum_{\alpha=L,R} \sum_{\mathbf{k}} \left(\gamma_\alpha \hat{c}_{\alpha\mathbf{k}}^\dagger \hat{d} + \gamma_\alpha^* \hat{d}^\dagger \hat{c}_{\alpha\mathbf{k}} \right) \quad (125)$$

で表されるとする (スピンの自由度は考えない)。第1項は左の電極 L 、第2項は右の電極 R 、第3項が量子ドット D 、第4項が電極から量子ドットへの飛び移り項である。全系は定常状態に達している。

(1) L から D に流れる電流演算子 \hat{J}_L が L の電子数密度 \hat{N}_L の時間微分

$$\hat{J}_L := -\frac{d}{dt} \hat{N}_L \quad (126)$$

で与えられることから電流演算子の表式を求めよ。また電流の期待値を D と L の間の lesser Green 関数

$$G_{D,Lk}^{-+}(t; t') := \langle \hat{d}_H(t) \hat{c}_{H,Lk}^\dagger(t') \rangle \quad (127)$$

で表わせ。

(2) $G_{D,Lk}^C(t-t')$ を $G_{D,D}^C$ 、 $g_{Lk,Lk}^C$ で表わせ。

(3) 電流の Fourier 変換

$$\bar{J}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{J}(t) e^{i\omega t} \quad (128)$$

を求めよ。

(1) Heisenberg の運動方程式から

$$\begin{aligned}\hat{J}_{H,L} &= -\frac{d}{dt} \sum_k \hat{c}_{H,Lk}^\dagger \hat{c}_{H,Lk} = \sum_k i \left[\hat{c}_{H,Lk}^\dagger \hat{c}_{H,Lk}, \hat{H} \right] \\ &= i \sum_k \left(\gamma_L \hat{c}_{H,Lk}^\dagger \hat{d} - \gamma_L^* \hat{d}^\dagger \hat{c}_{H,Lk} \right)\end{aligned}\quad (129)$$

また、その期待値は

$$\bar{J}(t) = 2\Re \sum_k \gamma_L G_{D,Lk}^{-+}(t; t) \quad (130)$$

で表される。

(2) $\hat{V}_L = \sum_k \left(\gamma_L \hat{c}_{Lk}^\dagger \hat{d} + \gamma_L^* \hat{d}^\dagger \hat{c}_{Lk} \right)$ として Bloch de Dominicis の定理を用いると

$$\begin{aligned}G_{D,Lk}^C(t; t') &= -i \langle \mathcal{T} \hat{d}_H(z) \hat{c}_{H,Lk}^\dagger(z') \rangle \\ &= -i \langle \mathcal{T} \int_\gamma dz_1 \exp(-i\hat{V}_{I,L}(z_1)) \hat{d}_I(z) \hat{c}_{I,Lk}^\dagger(z') \rangle \\ &= -i \langle \mathcal{T} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_\gamma dz_1 \cdots dz_n \hat{V}_{I,L}(z_1) \cdots \hat{V}_{I,L}(z_n) \hat{d}_I(z) \hat{c}_{I,Lk}^\dagger(z') \rangle \\ &= -i \int_\gamma dz_1 \gamma_L^* \langle \mathcal{T} \hat{c}_{I,Lk}(z_1) \hat{c}_{I,Lk}^\dagger(z') \rangle \\ &\quad \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} n \int_\gamma dz_2 \cdots dz_n \langle \mathcal{T} \hat{V}_{I,L}(z_2) \cdots \hat{V}_{I,L}(z_n) \hat{d}_I(z) \hat{d}_I^\dagger(z_1) \rangle \\ &= \gamma_L^* \int_\gamma dz_1 G_{D,D}^C(z; z_1) g_{Lk,Lk}^C(z_1; z')\end{aligned}\quad (131)$$

(3) Langreth の定理より

$$G_{D,Lk}^{-+}(t; t') = \gamma_L^* \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \left[G_{D,D}^R(t; t_1) g_{Lk,Lk}^{-+}(t_1; t') + G_{D,D}^{-+}(t; t_1) g_{Lk,Lk}^A(t_1; t') \right] \quad (132)$$

であるが、(2) と同様にすると

$$\begin{aligned}G_{D,D}^C(z; z') &= g_{D,D}^C(z; z') + \int_\gamma dz_1 \sum_{\alpha=L,R} \sum_k \gamma_\alpha G_{D,\alpha k}^C(z; z_1) g_{D,D}^C(z_1; z') \\ &= g_{D,D}^C(z; z') \\ &\quad + \int_\gamma dz_1 dz_2 G_{D,D}^C(z; z_1) \sum_{\alpha=L,R} \sum_k |\gamma_\alpha|^2 g_{\alpha k, \alpha k}^C(z_1; z_2) g_{D,D}^C(z_2; z')\end{aligned}\quad (133)$$

であることから $G_{D,D}^C(z; z')$ の自己エネルギーは

$$\Sigma_{D,D}^C(z; z') = \sum_{\alpha=L,R} \Sigma_\alpha^C(z; z') = \sum_{\alpha=L,R} \sum_k |\gamma_\alpha|^2 g_{\alpha k, \alpha k}^C(z; z') \quad (134)$$

と表せる*28。

この自己エネルギーを用いると電流の期待値は (130)、(132) より

$$\bar{J}(t) = 2\Re \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \left[G_{D,D}^R(t; t_1) \Sigma_L^{-+}(t_1; t') + G_{D,D}^{-+}(t; t_1) \Sigma_L^A(t_1; t') \right] \quad (135)$$

*28 紛らわしいが Σ_L は $G_{Lk,Lk}$ の自己エネルギーではない。 $\Sigma_{D,D}$ の中で L に関係する部分を指す。

今、系のハミルトニアンは時間並進対称性を持つことから Green 関数や自己エネルギーはすべて時間の差分で書けているから、(135) は Fourier 変換の畳み込みの形になっている。Fourier 変換すると

$$\bar{J}(\omega) = 2\Re\gamma_L^* G_{D,D}^R(\omega)\Sigma_L^{-+}(\omega) + G_{D,D}^{-+}(\omega)\Sigma_L^A(\omega) \quad (136)$$

である。後はこれを各々評価していく。

$$\begin{aligned} \Sigma_L^A &= \sum_k |\gamma_L|^2 g_{Lk,Lk}^A \\ &= \sum_k |\gamma_L|^2 \frac{1}{\omega - \varepsilon_{Lk} + i0} \\ &= \sum_k |\gamma_L|^2 \left(\mathcal{P} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{Lk}} - i\pi\delta(\omega - \varepsilon_{Lk}) \right) \\ &\simeq i\pi\nu_L(\omega) = \frac{i\Gamma_L}{2} \end{aligned} \quad (137)$$

となる*29。ここで

$$\nu_L(\varepsilon) := \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_{Lk}) \quad (138)$$

は L の状態密度であり、

$$\Gamma(\omega) := 2\pi|\gamma_L|^2\nu_L(\omega) \quad (139)$$

とした。

同様に

$$\Sigma_L^{-+}(\omega) = \sum_k |\gamma_L|^2 2\pi i f_L(\varepsilon_{Lk}) \delta(\omega - \varepsilon_{Lk}) = 2\pi i |\gamma_L|^2 f_L(\omega) \nu(\omega) = i\Gamma_L(\omega) f_L(\omega) \quad (140)$$

となる。ここで f_L は L での Fermi 分布関数。

ここで一度 (136) を見てみると右辺は $\Gamma_L(\omega)$ でくくり出せることがわかる。これと定常条件 $\bar{J}_L + \bar{J}_R = 0$ を用いると*30式がさらに簡単になる。

$$(\Gamma_L + \Gamma_R)\bar{J}_L(\omega) = \Gamma_R\bar{J}_L - \Gamma_L\bar{J}_R = \frac{1}{\pi}\Re G_{D,D}^R(\omega) (\Gamma_R\Sigma_L^{-+}(\omega) - \Gamma_L\Sigma_R^{-+}(\omega)) \quad (141)$$

Dyson 方程式 (133) と Langreth の定理を用いて

$$\begin{aligned} G_{D,D}^R(\omega) &= \frac{g_{D,D}^R}{1 - \Sigma_{D,D}^R g_{D,D}^R} \\ &= \frac{1}{(g_{D,D}^R)^{-1} - \Sigma_{D,D}^R} \\ &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 + i0 - \sum_k |\gamma_L|^2 \frac{1}{\omega - \varepsilon_{Lk} + i0} - \sum_k |\gamma_R|^2 \frac{1}{\omega - \varepsilon_{Rk} + i0}} \\ &\simeq \frac{1}{\omega - \varepsilon_0 + i\left(\frac{\Gamma_L}{2} + \frac{\Gamma_R}{2}\right)} \end{aligned} \quad (142)$$

*29 \mathcal{P} は関数の主値で、 $\sum_k \mathcal{P} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{Lk}} = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\nu(\varepsilon)d\varepsilon}{\omega - \varepsilon} \simeq \nu(\omega) \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{Lk}} = 0$ を用いている。

*30 今は電極から電子が出ていく方を正の電流としているので J_L と J_R は逆向きに定義されていることに注意。

より、

$$\begin{aligned}\bar{J}_L(\omega) &= \frac{1}{\pi} \Re \frac{i(\Gamma_R \Gamma_L f_L(\omega) - \Gamma_L \Gamma_R f_R(\omega))}{(\omega - \varepsilon_0 + i(\frac{\Gamma_L}{2} + \frac{\Gamma_R}{2}))(\Gamma_L + \Gamma_R)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_L(\omega)\Gamma_R(\omega)}{(\omega - \varepsilon_0)^2 + (\frac{\Gamma_L}{2} + \frac{\Gamma_R}{2})^2} (f_L(\omega) - f_R(\omega))\end{aligned}\tag{143}$$

参考文献

- [1] Gianluca Stefanucci and Robert van Leeuwen, Nonequilibrium Many-Body Theory of Quantum Systems A Modern Introduction, Cambridge University Press (2013)
主に前半部分に関して参考にした。非平衡 Green 関数に焦点を当てた 600 ページもある本で、多くの紙面を使って丁寧に議論されている。
- [2] 多々良 源, スピントロニクス of 物理 場の理論の立場から, 内田老鶴圃 (2019)
主に後半部分について参考にした。最初の 3 章でスピントロニクスについて簡単にまとめられており、4 章で場の理論と経路積分、5 章で非平衡 Green 関数を扱っていて、6 章にはスピントロニクスの場の理論を用いた計算の記載がある。
- [3] 多々良 源, スピントロニクス of 理論の基礎, 培風館 (2009)
扱っている内容はほとんど [2] と変わらないが、一部の計算がより詳しく書いてある。絶版。
- [4] Alexandre M. Zagoskin, Quantum Theory of Many Body Systems, Springer New York (1998) (樺沢 宇紀 訳, 多体系の量子論 新装版, 丸善プラネット (2012))
非平衡 Green 関数についてはそこまで紙面を割いていないが、逆に言えば簡潔にまとまっている。今回取り扱いたかったが時間の都合で入らなかった運動論的方程式の議論がある。
- [5] Alexander Altland, Ben D. Simons, Condensed Matter Field Theory, Cambridge University Press (2010) (新井 正男 他 訳, 凝縮系物理における場の理論 第 2 版, 吉岡書店 (2012))
経路積分に基づいた場の理論の教科書であるが、非平衡 Green 関数については最後の章で扱っている。ノイズや完全計数統計について扱っているが、この章は他と比べてもかなり難しいように思う (もちろん全て読んだわけではない)。
- [6] 小形 正男, 物性物理のための場の理論・グリーン関数 量子多体系をどう解くか?, サイエンス社 (2018)
松原形式を取り扱っており、非平衡 Green 関数については記載がないが、Feynman ダイアグラムや摂動論の計算の仕方についてわかりやすく書かれていて参考になる。後半は線形応答に基づいた計算をメインに扱っていて、非平衡 Green 関数と良い比較になる。
- [7] 北 孝文, 量子輸送方程式と非平衡エントロピー, 物性研究, **90**(1), 1-95 (2008)
- [8] 齊藤 圭司, 非平衡輸送現象: 輸送現象における計数統計を学ぶための基礎, 物性研究, **92**(4), 345-376 (2009)