

遅延関数と平衡系におけるダイアグラム法

東北大学金属材料研究所 松本秀樹

1. はじめに

$T = 0^\circ \text{K}$ での場の理論においては、因果関数を基礎としたフアイマンダイアグラム法が摂動計算に有効であり、遅延関数を用いた摂動計算はその複雑さの為に見通しが悪く特別の場合を除いては余り使われないのが普通である。この事は粒子の伝播で粒子と反粒子を同等に取り扱う事で見通しのよい取扱ができるためである事は良く知られている。

有限温度の場の理論に於ける摂動論では松原グリーン関数法がよく用いられるが、実時間を用いた $T = 0^\circ \text{K}$ の場の理論の拡張として *Thermo Field Dynamics* (TFD) [1] が提唱されている。この理論では通常の場の理論との対応もよく、いろいろな作用素演算もそのまま拡張できる利点があるが、温度の情報を理論の中に取り入れた見返りとして作用素の数が二倍となり、そのために伝播関数が 2×2 の行列の性質を持ちダイアグラムの計算が複雑になるように見える。これは、粒子と熱ホール粒子の伝播関数に現れる比重の違いに起因している。

また、スピン系や最近物性で問題となっている重い電子系の問題や高温超伝導の問題を取り扱うときに、系の運動を記述する作用素が簡単な調和振動子型の代数を満足するのではなく、ある閉じた代数を満足する場合、(つまり作用素の交換または反交換関係がまた作用素となる場合)を考える必要が生じて来る。このような閉じた代数を作る作用素を場の理論の枠組みの中で取り扱え得るかの問題は *Wick*の定理が使えない場合の問題として有限温度の理論でいろいろと議論されてきた。一般化した *Wick*の定理を導く試みもされているが [2]、それによる摂動論を基にして無限のダイアグラムの足し合わせを実行するとき、あまり見通しのよい法則を与えない。その理由はこのような系では各作用素はいくつかの状態間の遷移を表し、その作用素をバーテックスとして生成消滅される励起が一種類だけではなく、因果関数による記述がかならずしも有効でないためである。この事は起こる課程を時間的に追える遅延関数による取扱いのほうが良いことを示唆しているように思える。

この報告ではまずTFDの枠組みでは遅延関数による理論展開が容易であり、二重にされた作用素のため時間方向を一方向に考えるだけで粒子-反粒子(つまり、熱的効果も含んだホール状態)の寄与が取り入れられることを指摘し、ダイアグラムの計算が簡単になることを述べる。次に、閉じた代数を張る作用素について *Wick*の定理によらない有限温度でのダイアグラム法が展開できることを述べる。高温超伝導で使われている *p-d*混成模型を用いて、その方法を説明する。

2. TFDにおける遅延関数による摂動論

TFDに於いては、熱平均は温度による真空の真空期待値で表現される。 $\langle 1|$ 及び $|\beta\rangle$ で記される非対称な真空状態 [3-5]を用いるのが以下の議論に便利である。作用素の自由度は、作用素 A に \tilde{A} を次の法則で対応させ、二重にする。

$$i)[A_1 A_2] \sim \tilde{A}_1 \tilde{A}_2, \quad ii)[c_1 A_1 + c_2 A_2] \sim c_1^* \tilde{A}_1 + c_2^* \tilde{A}_2, \quad iii)[A^\dagger] \sim \tilde{A}^\dagger, \quad iv)[\tilde{A}] \sim A \quad (1)$$

真空は次の条件で指定される、

$$A|\beta\rangle = \sigma e^{\beta \hat{H}} \tilde{A}^\dagger |\beta\rangle, \quad \langle 1|A = \langle 1| \sigma^* \tilde{A}^\dagger \quad (2a)$$

$$[|\beta\rangle]^\sim = |\beta\rangle, \quad [|\langle 1|]^\sim = \langle 1| \quad (2b)$$

ここで $\sigma = 1$ (ボソン) あるいは i (フェルミオン)、 $\hat{H} = H - \hat{H}$ である。熱場二重項 $A^a(\mathbf{x})$ は、 $a = 1$ の成分を $A(\mathbf{x})$ 、 $a = 2$ の成分を \hat{A}^\dagger として与えられる。時間順序付けられた作用素の熱平均を次の記号で定義する、

$$\langle A_1^{a_1}(\mathbf{x}_1) A_2^{a_2}(\mathbf{x}_2) \cdots A_n^{a_n}(\mathbf{x}_n) \rangle = \theta(t_{\mathbf{x}_1} - t_{\mathbf{x}_2}) \cdots \theta(t_{\mathbf{x}_{n-1}} - t_{\mathbf{x}_n}) \langle 1 | A_1^{a_1}(\mathbf{x}_1) A_2^{a_2}(\mathbf{x}_2) \cdots A_n^{a_n}(\mathbf{x}_n) | \beta \rangle \quad (3)$$

$\hat{B}(\mathbf{y}) = B(\mathbf{y}) - \sigma^* \hat{B}^\dagger(\mathbf{y})$ で定義される作用素を導入すると、遅延関数は

$$\theta(t_{\mathbf{x}} - t_{\mathbf{y}}) \langle 1 | [A(\mathbf{x}), B(\mathbf{y})]_{\pm} | \beta \rangle = \langle A(\mathbf{x}) \hat{B}(\mathbf{y}) \rangle \quad (4)$$

のように記さる。又、 $\langle A_1(\mathbf{x}_1) \hat{A}_2(\mathbf{x}_2) \cdots \hat{A}_n(\mathbf{x}_n) \rangle$ は一般化された遅延関数となっている。式(4)では遅延関数が熱場二重項の適当な線形結合で表されているので、 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$ として \hat{H}_I を摂動項とする摂動論で次のゲルマン・ロー公式を使うことができる [4]、

$$\langle A(\mathbf{x}) \hat{B}(\mathbf{y}) \rangle = \frac{\langle T \hat{u}(\infty, -\infty) A(\mathbf{x}) \hat{B}(\mathbf{y}) u(-\infty, -\infty + i\beta) \rangle}{\langle u(-\infty, -\infty + i\beta) \rangle} \quad (5)$$

ここで右辺は相互作用表示を表し、それぞれ

$$\hat{u}(\infty, -\infty) = T \exp\{-i \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{H}_I(t)\} \quad (6a)$$

$$u(-\infty, -\infty + i\beta) = T_c \exp\{-i \int_{-\infty + i\beta}^{-\infty} dz H_I(z)\} \quad (6b)$$

与えられる。式(2)、(3)で与えられる表示の特徴は式(2)により常に $\langle 1 | \hat{H}_I(t) = 0$ であり、式(5)によりダイアグラム法を展開するとき、粒子線が $\hat{H}_I(t)$ で与えられるバーテックスで全て消滅するようなダイアグラムは寄与しないことを示している。又 $\langle 1 | \hat{B}(\mathbf{y}) = 0$ であるから、式(5)をもとにしたダイアグラムとしては、時間的に $t_{\mathbf{x}}$ より過去に \hat{H}_I を並べ、正方向に突出したバーテックスを生成しないようなダイアグラムのみが寄与することとなる。ある場 $\psi^a(\mathbf{x})$ の時間順序付けられた伝播関数は式(2)から

$$\langle \psi^a(\mathbf{x}) \psi^{1b}(\mathbf{y}) \rangle = \epsilon_\sigma^a \langle \psi(\mathbf{x}) \psi^{1b}(\mathbf{y}) \rangle, \quad \sigma^2 \langle \psi^{1b}(\mathbf{y}) \psi^a(\mathbf{x}) \rangle = \epsilon_\sigma^b \sigma^2 \langle \psi^1(\mathbf{y}) \psi^a(\mathbf{x}) \rangle \quad (7)$$

(ここで $\epsilon_\sigma^a = 1 (a = 1), \sigma^2 (a = 2)$) の二種類が現れ、それぞれスペクトル表示 [5]

$$\langle \psi(\mathbf{x}) \psi^{1b}(\mathbf{y}) \rangle = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d\omega d^3k e^{-i\omega(t_{\mathbf{x}} - t_{\mathbf{y}}) + i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{y})} S_{>}^b(\omega, \vec{k})$$

$$\sigma^2 \langle \psi^1(\mathbf{y}) \psi^a(\mathbf{x}) \rangle = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d\omega d^3k e^{-i\omega(t_{\mathbf{x}} - t_{\mathbf{y}}) + i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{y})} S_{<}^b(\omega, \vec{k}),$$

$$S_{>}^b(\omega, \vec{k}) = \int d\kappa \sigma(\kappa, \vec{k}) \frac{1}{\omega - \kappa + i\epsilon} \frac{1}{e^{\beta\kappa} - \sigma^2} (e^{\beta\kappa}, \sigma^*)^b \quad (8a)$$

$$S_{<}^a(\omega, \vec{k}) = \int d\kappa \sigma(\kappa, \vec{k}) \frac{1}{\omega - \kappa + i\epsilon} \frac{1}{e^{\beta\kappa} - \sigma^2} (1, \sigma^* e^{\beta\kappa})^a \quad (8b)$$

与えられる。例として、 $H_I = \frac{1}{8} \lambda \psi^4$ の場合を考えると、 $\hat{H}_I = \sum_a \epsilon^a \lambda \psi^{a4}$ であり、自己エネルギーは λ の二次で

$$\begin{aligned} \Sigma(k) &= \frac{3}{2} \left[\frac{i\lambda}{(2\pi)^4} \right]^2 \int dk' dk'' \sum_a S_{>}^a(k - k' - k'') S_{>}^a(k') S_{>}^a(k'') \epsilon^a \\ &= \frac{3}{2} \left[\frac{\lambda}{(2\pi)^3} \right]^2 \int d^3k' d^3k'' \int d\kappa_1 d\kappa_2 d\kappa_3 \sigma(\kappa_1, \vec{k} - \vec{k}' - \vec{k}'') \sigma(\kappa_2, \vec{k}') \sigma(\kappa_3, \vec{k}'') \\ &\quad \times \frac{(1 + f_B(\kappa_1))(1 + f_B(\kappa_2))(1 + f_B(\kappa_3)) - f_B(\kappa_1)f_B(\kappa_2)f_B(\kappa_3)}{\omega - \kappa_1 - \kappa_2 - \kappa_3 + i\epsilon} \end{aligned} \quad (9)$$

とスペクトラル表示 (8 a) を用いて得られる。温度関数の現れ方が単純な熱成分 “a” の組合せで与えられる点に利点がある。もともと式 (5) で与えられる因果関数による公式から出発しているの、通常の場合 Wick の定理が成立することは明かであるが、式 (2) の性質のために遅延関数に対する摂動論が同時に与えられることとなる。この事は、 \hat{H}_I の積が遅延関数の一般化した形を与えることでも明かであろう。

3. Wick の定理によらない摂動展開

非摂動ハミルトニアン H_0 の固有値作用素 A_n ($[H_0, A_n] = -\epsilon_n A_n$) の交換または反交換関係が c 数にならない場合には、これらの作用素の縮約後にその寄与を c 数として期待値の外にくくりだせない為、Wick の定理が適用できず、ダイアグラム法の適用に困難を生ずる。前章で述べた、遅延関数による摂動論では、時間的に並べた作用素が、式 (8) の伝播関数の組合せで記述できるかとの観点から考えれば代数が調和振動子型かどうかによらず議論を進めることが出来る。一般には作用素の積

$$AB = \sum_C g_{ABC}^1 C, \quad BA = \sum_C g_{ABC}^2 C \quad (10)$$

と期待値 $\langle C \rangle$ が与えられれば、 $\langle A_1(t_1)A_2(t_2)\cdots A_n(t_n) \rangle$ は A_i が固有値作用素であることと代数 (10) を順次用いる事により求める事が出来る。時間による作用素に対して、式 (10) を

$$\theta(t-t') \langle 1|A(t)B^a(t') = \sum_{A'} \langle A(t)A'^{\dagger a}(t') \rangle J_{A'BC}^a \langle 1|C^a(t') \rangle \quad (11)$$

と拡張し、 $J_{A'BC}^a$ を

$$\sum_{A'} \langle A^a A'^{\dagger a} \rangle J_{A'BC}^a = g_{ABC}^a \quad (12)$$

と選べば良いことになる。ここで A'^{\dagger} は A と結ばれる作用素の完全系である。上の式は作用素 A が行列的性質を持っているときトレースの分解が $\text{tr}[AB\rho] = \sum_{A'} \text{tr}[AA'^{\dagger}\rho] \text{tr}[A'B\rho] / \text{tr}[A'A'^{\dagger}\rho]$ のように行列の完全系を考慮すれば出来る事に対応する。又第二章の方法によれば、 \hat{H}_I で作られるバーテックスが正時間方向に凸の場合には自動的に零となるので、作用素積の性質を時間的な順序で壊さないような (11) の分解によるダイアグラム法が可能となる。相互作用を考慮に入れた足し合わせを行っても、式 (11) に現れる伝播関数は作用素の性質を損なわずに全伝播関数へと移行出来る。従って、ダイアグラム法としては、 \hat{H}_I に現れる作用素の式 (10) から決定される J_{ABC}^a をバーテックスとし、式 (8) で与えられる伝播関数を用いて時間順序付けられたダイアグラムを構成すれば良いことになる。このダイアグラム法の特徴は、ある作用素 A が生成消滅演算子的に働くと同時に、バーテックスとしても働く事である。

4. 強相関 p-d 混成模型

例として強相関 p-d 混成模型を考えてみよう、

$$H = \sum_i (\epsilon_p p_i^\dagger p_i + \epsilon_d d_i^\dagger d_i + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) + \sum_{ij} t_{ij} (p_i^\dagger d_j + d_j^\dagger p_i) \quad (13)$$

ここで p_i, d_i はスピノル表示で与えられた i-格子点での電子消滅演算子である。 $\epsilon_p (= \epsilon_d + U)$ を一定とし、 $\epsilon_d \rightarrow -\infty$ の極限を考えると、d の自由度は各格子点で $n_d = 1 \leftrightarrow n_d = 2$ の自由度のみ許される事となる。この遷移は

$$\eta_{i\uparrow} = d_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad \eta_{i\downarrow} = d_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (14)$$

で与えられる複合演算子で表現される。この作用素の反交換関係は

$$\{\eta_{i\sigma}, \eta_{j\sigma}^\dagger\} = \delta_{ij} \left(-\frac{1}{2} n_i + \frac{1}{2} \vec{n}_i \cdot \vec{\sigma} \right)_{\sigma\sigma} \quad (15)$$

で与えられ [2]、三章で論じた場合となっている。ηで表示されるレベルは通常ハバード分離した上位レベルと称せられるが、 $n_d = 1 \leftrightarrow n_d = 2$ の遷移のみを表す事から、通常のバンドレベルとはかなり違った性質を生じさせる。実際 p と η の運動方程式をたててみれば、

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_p \right) p(\mathbf{x}) = t(-i\vec{\partial})\eta(\mathbf{x}) \quad (16a)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_\eta \right) \eta(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \sigma^\mu n_\mu(\mathbf{x}) t(-i\vec{\partial})p(\mathbf{x}) \quad (16b)$$

(ここで $p_i = p(\mathbf{x})$ 、 $\sum_j t_{ij} \eta_j = t(-i\vec{\partial})\eta(\mathbf{x})$ 及び $\sigma^\mu = (-1, \vec{\sigma})$ 、 $n_\mu = d^\dagger \sigma_\mu d$ 、 $\sigma_\mu = (1, \vec{\sigma})$ の表示を用いた。) となり、η-自由度の変化はスピンと電荷の揺らぎを生成する事を示している。相互作用項として

$$\hat{H}_I = \int d\mathbf{x} \sum_a \left(p^{\dagger a}(\mathbf{x}) t(-i\vec{\partial}) \eta^a(\mathbf{x}) + \eta^{\dagger a}(\mathbf{x}) t(-i\vec{\partial}) p^a(\mathbf{x}) \right) \quad (17)$$

を考えれば、 p -電子については通常の Wick の定理を用い、η-電子については

$$\langle \eta(\mathbf{x}) \eta^{\dagger a}(\mathbf{y}) \rangle = \langle \eta(\mathbf{x}) \eta^{\dagger a}(\mathbf{y}) \rangle J_{\eta^\dagger \mu}^a \langle \delta n_\mu^a(\mathbf{y}) \rangle \quad (18a)$$

$$\langle \eta^\dagger(\mathbf{x}) \eta^a(\mathbf{y}) \rangle = \langle \eta^\dagger(\mathbf{x}) \eta^a(\mathbf{y}) \rangle J_{\eta \mu}^a \langle \delta n_\mu^a(\mathbf{y}) \rangle \quad (18b)$$

(ここで $\delta n_\mu(\mathbf{x}) = n_\mu(\mathbf{x}) - \langle n_\mu(\mathbf{x}) \rangle$) で決められるバーテックス $J_{\eta \mu}^a$ 、 $J_{\eta^\dagger \mu}^a$ をもちいてダイアグラム法を展開する事ができる。

$$\eta_\sigma \eta_\sigma^\dagger = \left(\frac{1}{2} n - n_\uparrow n_\downarrow + \frac{1}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \right)_{\sigma\sigma}, \quad \eta_\sigma^\dagger \eta_\sigma = (n_\uparrow n_\downarrow)_{\sigma\sigma} \quad (19)$$

であるから、 $\langle \eta_\sigma \eta_\sigma^\dagger \rangle = \langle 1 - \frac{n}{2} \rangle \delta_{\sigma\sigma}$ 、 $\langle \eta_\sigma^\dagger \eta_\sigma \rangle = \langle n - 1 \rangle \delta_{\sigma\sigma}$ 及び運動方程式からの帰結 $\delta(n_\uparrow n_\downarrow) = \delta n$ を用いて

$$J_{\eta^\dagger \mu}^a = J_{\eta \mu}^{-a} = \delta_{\mu 0} \left(-\frac{1}{2-n}, \frac{1}{n-1} \right)^a + \delta_{\mu i} \sigma_i \left(-\frac{1}{2-n}, 0 \right)^a \quad (20)$$

のように与えられる。この方法を用いた具体的な計算は著者等による原論文 [6] を参照されたい。

参考文献

1. H. Umezawa, H. Matsumoto and M. Tachiki, "Thermo Field Dynamics and Condensed States", (North-Holland Pub., 1982).
2. H. Matsumoto and H. Umezawa, Phys. Rev. **B31**, 4433 (1985).
3. M. Schmutz, Z. Phys. **B30**, 97 (1987); T. Arimi tsu and H. Umezawa, Prog. Theor. Phys. **74**, 429 (1985).
4. H. Matsumoto, Z. Phys. **C34**, 335 (1987).
5. H. Matsumoto, Z. Phys. **C33**, 201 (1986).
6. H. Matsumoto, M. Sasaki and M. Tachiki (preprint, 1990).