閉経路形式によるボルツマン方程式の導出

慶応義塾大学理工学研究科　小出 純 [1]

Abstract

閉経路形式を用いたボルツマン方程式の導出を行う. 新しい形のプローブを用いることでまず外源の汎関数として数演算子の期待値を求め, それを外源について逆に解く. 得られた結果は粒子数の運動方程式を与え, それがボルツマン方程式の形を取ることを示す. 導出には反転公式を用いる.

本稿ではボルツマン方程式の新しい導出法[1]について論じる. 閉 (時間) 経路形式 (closed-time-path (CTP) formalism) によるボルツマン方程式の導出についてはいくつかの方法が知られているが, 粒子数の時間依存性を手で導入するような方法を除くと, 相殺項 (counterterm) を用いるのが一般的なようである.[2, 3] しかしそれらの取扱ではボルツマン方程式はどちらかと言えば非平衡系での摂動論を作るうえでの副産物的なものであった. 勿論それでも構わないのであるが, もっと直接に数演算子の期待値の運動方程式を出すという形でボルツマン方程式を導きたいというのがこの研究の目的である.

CTP 形式[4]ではまず興味のある演算子にたいしてプローブとして外源 J をカップルする. 力学変数 $\hat{\varphi}$ の関数 $Q(\hat{\varphi})$ が調べたければ CTP 生成汎関数を

$$\exp\{\, iW\,[\,J_1,J_2\,]\,\} \equiv \mathrm{Tr}\,\mathrm{T}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_\mathrm{I}}^{t_\mathrm{F}}\mathrm{d}t\,(\hat{H}-J_1(t)\hat{Q})}\,\hat{\rho}\,\tilde{\mathrm{T}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_\mathrm{I}}^{t_\mathrm{F}}\mathrm{d}t\,(\hat{H}-J_2(t)\hat{Q})} \tag{1}$$

$$\propto \int [\,\mathrm{d}\varphi_1\, d\varphi_2\,]\,\langle\,\varphi_{1\mathrm{I}}\,|\,\hat{\rho}\,|\,\varphi_{2\mathrm{I}}\,\rangle \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_\mathrm{I}}^{t_\mathrm{F}}\mathrm{d}t\,\left(L(\varphi_1)-L(\varphi_2)+J_1Q(\varphi_1)-J_2Q(\varphi_2)\right)\right\}, \tag{2}$$

で定義する. ここで $\hat{\rho}$ は初期分布であり, T と $\tilde{\mathrm{T}}$ はそれぞれ時間順序積, および逆順序積を示す. 式 (2) は経路積分表示をしたものであり, 順方向, 逆方向の時間発展にしたがってφ_1, φ_2 の積分変数を用いる. ここで "物理的" 表示を導入しておく.[4] $J_\mathrm{C} \equiv \frac{1}{2}\,(J_1+J_2)$, $J_\Delta \equiv J_1 - J_2$ と定義すると $J_\Delta = 0$ が物理的に意味があり, そのとき J_C は外力の役割を果たす. 外力 $J_\mathrm{C} = J$ のあるところで$\hat{Q}$ の時刻 t での期待値は

$$Q(t) \equiv \left.\frac{\delta W\,[\,J_\Delta, J_\mathrm{C}\,]}{\delta J_\Delta(t)}\right|_{\substack{J_\mathrm{C}=J\\ J_\Delta=0}} = \left\langle\, \hat{Q}(t)\,\right\rangle_{J_\mathrm{C}}, \tag{3}$$

によって計算できてる.

これによって Q は J の汎関数として得られるわけであるが, Q の運動方程式を得るためにはこれを J について逆に解いて Q の汎関数として表し, その後で $J=0$ と置いてやれば良い. (反転法, Inversion method[5]) このようにして導かれる運動方程式の一般的な表式は W のルジャンドル変換を用いて書くことが出来るが. ここでは以下に述べる反転公式 (Inversion formula) を用いて J について逆に解くという操作を摂動的に実行する.[5] Q の J の汎関数としての表式, およびこれを J について逆に解いた式が λ を摂動パラメターとして

$$Q(t) = f\,[\,t;J\,] = \sum_n \lambda^n f^{(n)}[\,t;J\,], \qquad J(t) = g\,[\,t;Q\,] = \sum_m \lambda^m g^{(m)}[\,t;Q\,], \tag{4}$$

[1] E-mail: koide@rk.phys.keio.ac.jp

といった具合に得られるとする．ここで例えば $f[t;J]$ は t の関数で，外源 J の汎関数であることを表す．普通は $f^{(i)}$ の表式が先に得られるのでこれを用いて $g^{(i)}$ を表すのが目的となる．そこで簡単な恒等式から

$$
\begin{aligned}
Q(t) &= f[t;g[Q]] \\
&= f^{(0)}\Big[t;g^{(0)}[Q]\Big] + \lambda\left(\int \mathrm{d}s \frac{\delta f^{(0)}(t)}{\delta g^{(0)}(s)} g^{(1)}[s;Q] + f^{(1)}\Big[t;g^{(0)}[Q]\Big]\right) + O(\lambda^2), \quad (5)
\end{aligned}
$$

となるので，λ の各次数で較べてやれば $g^{(i)}$ を $f^{(i)}$ で表すことが出来る．

$$
\begin{aligned}
g^{(0)}[t;Q] &= {f^{(0)}}^{-1}[t;Q], \quad (6) \\
g^{(1)}[t;Q] &= -\int \mathrm{d}s \left(\frac{\delta f^{(0)}}{\delta g^{(0)}}\right)^{-1}(t,s)\, f^{(1)}\Big[s;g^{(0)}\Big], \\
g^{(2)}[t;Q] &= -\int \mathrm{d}t' \left(\frac{\delta f^{(0)}}{\delta g^{(0)}}\right)^{-1}(t,t') \left(\frac{1}{2}\int \mathrm{d}s\,\mathrm{d}s' \frac{\delta^2 f^{(0)}(t')}{\delta g^{(0)}(s)\delta g^{(0)}(s')} g^{(1)}[s;Q]\, g^{(1)}[s';Q]\right. \\
&\qquad \left. + \int \mathrm{d}s \frac{\delta f^{(1)}(t')}{\delta g^{(0)}(s)} g^{(1)}[s;Q] + f^{(2)}[t';g^{(0)}]\right). \quad (7)
\end{aligned}
$$

これらを「反転公式」と呼ぶ．反転公式を使うためには，まず (??) のように摂動の最低次での関係が逆に解けていることが必要であり，この点がボルツマン方程式を導出するうえで重要となる．

以下，非相対論的で一様な系でのボソン場 ψ を考えて自由部分 $\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \psi^\dagger_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}$，相互作用 $\hat{H}_{\mathrm{int}} = \frac{\lambda}{4}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \psi^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \psi^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}'}$ で表わされるハミルトニアン $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{int}}$，を用いる．ボルツマン方程式を導出するのに上に述べた方法を用いるのであれば，興味ある演算子は粒子数 $\psi^\dagger\psi$ であるから外源 J を $\hat{H} - \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}}(t) \psi^\dagger_{\mathbf{k}}(t) \psi_{\mathbf{k}}(t)$ と導入する．そうすると CTP 生成汎関数の経路積分表示に現れてくるラグランジアン $L(\psi_1) - L(\psi_2)$ の自由部分は

$$
\begin{aligned}
L_0(\psi_1) - L_0(\psi_2) &= \sum_{\mathbf{k}} \psi^*_{i,\mathbf{k}} \mathcal{D}_{0ij,\mathbf{k}} \psi_{j,\mathbf{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \psi^*_{1,\mathbf{k}} & \psi^*_{2,\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\hbar\partial_t - \epsilon_{\mathbf{k}} + J_{\mathbf{k}}(t) & 0 \\ 0 & -i\hbar\partial_t + \epsilon_{\mathbf{k}} - J_{\mathbf{k}}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1,\mathbf{k}} \\ \psi_{2,\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (8)
\end{aligned}
$$

と書ける．ところが (7) の逆行列としてプロパゲータを作って無摂動の粒子数の期待値 $n(t)$ を計算すると $\langle \psi^\dagger_{\mathbf{k}}(t) \psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle_J = n_{\mathbf{k}}(t_{\mathrm{I}})$ となってしまって，初期値を与えるのみで J に依存する表式が得られない．したがってこれを逆に解くこともできず，反転公式を用いることは出来ない．これが反転法でボルツマン方程式を導出するうえで困難な点である．

では何故 [2, 3] の相殺項の方法はうまく行くのか？相殺項の方法によるとラグランジアンの自由部分の中に (7) のような対角な形のパラメターの他に物理的に許容される (プロパゲータの形が (10) を保つ) 非対角な格好で別なパラメターを導入することができ，これらがボルツマン方程式を導出するうえで鍵になっている．そこでそういった形のパラメターをプローブとして用いてみようというのが今回の試みである．以下では $\psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 - \psi_1^*\psi_2 - \psi_2^*\psi_1$ に外源がカップルするような形，つまりラグランジアンの自由部分の行列としては

$$
\mathcal{D}(t,\partial_t) = \begin{pmatrix} i\hbar\partial_t - \epsilon + iJ(t) & -iJ(t) \\ -iJ(t) & -i\hbar\partial_t + \epsilon + iJ(t) \end{pmatrix}. \quad (9)
$$

というものを考えることにする．

まず無摂動プロパゲータ G_0 を

$$\mathcal{D}(t,\partial_t)G_0(t,s)=G_0(t,s)\mathcal{D}(s,-\overleftarrow{\partial}_s)=-i\hbar\delta(t-s), \tag{10}$$

によって求めよう．CTP 形式のプロパゲータは $h(t,s)\equiv-\langle\psi(t)\psi^\dagger(s)\rangle_{\mathrm{c}}$, $k(t,s)\equiv-\langle\psi^\dagger(s)\psi(t)\rangle_{\mathrm{c}}$ として (c は連結部分の意味)

$$\begin{aligned}G(t,s)&\equiv-\mathrm{Tr}\,\rho\begin{pmatrix}\mathrm{T}\psi(t)\psi^\dagger(s) & \psi^\dagger(s)\psi(t)\\ \psi(t)\psi^\dagger(s) & \tilde{\mathrm{T}}\psi(t)\psi^\dagger(s)\end{pmatrix}_{\mathrm{c}}\\ &=\theta(t-s)\begin{pmatrix}h(t,s) & k(t,s)\\ h(t,s) & k(t,s)\end{pmatrix}+\theta(s-t)\begin{pmatrix}k^*(s,t) & k^*(s,t)\\ h^*(s,t) & h^*(s,t)\end{pmatrix},\end{aligned} \tag{11}$$

という構造を持っている．$\mathcal{D}$ はこの構造を壊さないように作られているので G_0 も h,g を h_0,g_0 で置き換えた同様の形を持つものとする．すると (9) から，

$$\begin{cases}(i\hbar\partial_t-\epsilon)\,h_0(t,s)=0,\\ (i\hbar\partial_t-\epsilon)\,k_0(t,s)=0,\end{cases}\qquad(\text{for } t>s) \tag{12}$$

$$\begin{cases}(i\hbar\partial_t-\epsilon+iJ(t))\,k_0^*(s,t)=iJ(t)h_0^*(s,t),\\ (i\hbar\partial_t-\epsilon-iJ(t))\,h_0^*(s,t)=-iJ(t)k_0^*(s,t),\end{cases}\qquad(\text{for } s>t) \tag{13}$$

の方程式を満たし $t=s$ での境界条件が

$$\begin{aligned}&h_0(s,s)-k_0^*(s,s)=-1, &&k_0(s,s)-h_0^*(s,s)=+1,\\ &h_0(s,s)-h_0^*(s,s)=0, &&k_0(s,s)-k_0^*(s,s)=0,\end{aligned} \tag{14}$$

で与えられることになる．この微分方程式は簡単に解けて，解は

$$k_0(t,s)=-n^{(0)}(s)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon(t-s)},\qquad h_0(t,s)=-(n^{(0)}(s)+1)\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon(t-s)}, \tag{15}$$

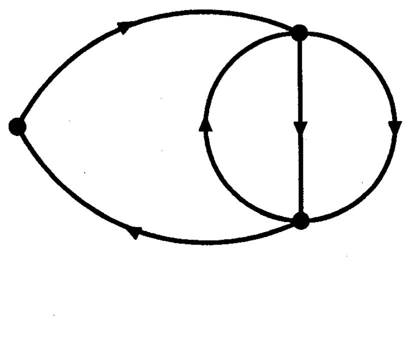
ただし $n^{(0)}$ は

$$J(t)=\hbar\partial_t n^{(0)}(t), \tag{16}$$

の運動方程式を満たすというものである．k の定義から $n^{(0)}(t)=k_0(t,t)$ は摂動の 0 次での数演算子の期待値を与えるものであるから，我々は摂動の最低次で n の J 依存性を持たせることができたというわけである．$n^{(0)}(t)$ を J の汎関数としてちゃんと書けば

$$n^{(0)}[t;J]=n^{(0)}(t_{\mathrm{I}})+\int_{t_{\mathrm{I}}}^{t}\mathrm{d}s\frac{J(s)}{\hbar}, \tag{17}$$

となる．式 (4) と対応させると (16) が $f^{(0)}$, (15) が $g^{(0)}$ である．



上で得られたプロパゲータを用いて粒子数 n に対する補正を計算すると右図のようなダイアグラムから摂動の 2 次の補正が加わる．結果は

$$\begin{aligned}n_{\mathbf{k}}[t,J]&=n_{\mathbf{k}}^{(0)}(t)\\ &+\left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^2\sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\int_{t_{\mathrm{I}}}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_{\mathrm{I}}}^{t'}\mathrm{d}s'\cos\left(\omega_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{q}'}(t'-s')\right)\\ &\times\left\{(n_{\mathbf{k}}^{(0)}+1)(n_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'-\mathbf{k}}^{(0)}+1)n_{\mathbf{q}}^{(0)}n_{\mathbf{q}'}^{(0)}-n_{\mathbf{k}}^{(0)}n_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'-\mathbf{k}}^{(0)}(n_{\mathbf{q}}^{(0)}+1)(n_{\mathbf{q}'}^{(0)}+1)\right\}(s'),\end{aligned} \tag{18}$$

となる. ただし $\omega_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{q}'} \equiv \frac{1}{\hbar}(\epsilon_{\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'-\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}})$ である. 式 (17) の $n_{\mathbf{k}}^{(0)}$ は全て $J_{\mathbf{k}}$ の汎関数であることに注意されたい. 式 (17) は (4) でいえば $f^{(0)} + \lambda f^{(1)} + \lambda^2 f^{(2)}$ を計算したことになる. (Tadpole 型ダイアグラムの寄与は消える.)

反転公式 (6) を用いれば (15) に対する補正が得られて

$$J_{\mathbf{k}}(t) = \hbar\partial_t n_{\mathbf{k}}(t) - \frac{\lambda^2}{\hbar}\sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}\int_{t_{\mathrm{I}}}^{t} \mathrm{d}s \cos\left(\omega_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{q}'}(t'-s')\right)$$
$$\times\left((n_{\mathbf{k}}+1)(n_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'-\mathbf{k}}+1)n_{\mathbf{q}}n_{\mathbf{q}'} - n_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'-\mathbf{k}}(n_{\mathbf{q}}+1)(n_{\mathbf{q}'}+1)\right)(s), \quad (19)$$

となる. ここで外源を取り除き $J=0$ とすれば粒子数の運動方程式が得られ, 時間について非局所的なボルツマン方程式となっていることがわかる. 時間について局所的な形は断熱展開をすれば得られる.

以上に示したように新しい形のプローブを導入することでボルツマン方程式が粒子数の運動方程式として導出されたわけであるが, プローブの物理的な意味について少しコメントしておく. 式 (8) の意味は ψ の有効作用を考えると少しわかりやすい. CTP 生成汎関数の $\hat{Q}$ として場の変数 ψ を考え, $W[J_\Delta, J_{\mathrm{C}}]$ のルジャンドル変換によって有効作用 $\Gamma[\psi_\Delta, \psi_{\mathrm{C}}]$ ($\psi_{\Delta(\mathrm{C})} \equiv \delta W/\delta J_{\mathrm{C}(\Delta)}$) を計算すると, (8) はその 2 回微分に対応するものとなる. そうすると (8) の外源 J は直感的には $\delta^2\Gamma/\delta\psi_\Delta^*\delta\psi_\Delta$ を手で揺すぶっているようなものということになる. これは対称化された相関関数 $\langle\{\psi^\dagger, \psi\}\rangle$ の 1 粒子既約な足切り部分に相当しており,[4, 5] そのような外源によって粒子数がうまく制御できることが少し理解できよう.

参考文献

[1] J. Koide, to appear in J. Phys. A.

[2] I. D. Lawrie, J. Phys. A **25** L823; Phys. Rev. D **40** (1989) 3330;
I. D. Lawrie and D. B. McKernan, Phys. Rev. D **55** (1997) 2290.

[3] A. Niegawa, Phys. Lett. B **416** (1998) 137; Prog. Theor. Phys. 102 (1999) 1.

[4] K. Chou, Z. Su, B. Hao and L. Yu, Phys. Rep. **118** (1985) 1.

[5] R. Fukuda, M. Komachiya, S. Yokojima, Y. Suzuki, K. Okumura and T. Inagaki, Prog. Theor. Phys. Suppl. **121** (1995) 1.