

古典統計と量子統計の ダイアグラム展開における対応

小谷岳生

大阪大学基礎工学部物性物理工学科豊中市待兼山1-1, 560

(1992年8月27日受理)

I Introduction

本論文では、Green 関数や分配関数等を計算するための古典粒子系の Feynmann rule と量子系における Feynmann rule との対応を示す。

古典粒子系の有限温度での統計的性質は、外場の汎関数としての大分配関数を与える Ursell-Mayer の摂動展開 (cluster expansion) を base にして議論することができる [1-4]。密度相関関数 = (空間的)2 点密度 Green's function 等は、その大分配関数の外場による汎関数微分で与えることができ、やはり摂動展開により与えられる。HNC eq. 等の積分方程式はこの摂動展開の近似和を与える方程式として理解され得る。これらの理論は、古典液体、古典 Coulomb プラズマ等に適用され成功を収めている [1,5]。一方、量子系 (Fermion) においても path-integral の手法で、sec.II のように大分配関数に対する摂動展開が構成できる。この汎関数微分が 2 点密度 Green's function (Imaginary-time formalism) を与える点も古典系と同様である。

しかしながら摂動展開 (diagram) のレベルでの、古典系と量子系との対応があまり明確に書かれたものはないようである。本論文ではこの点を明確にする。まず sec.II で古典粒子系について、外場の汎関数としての大分配関数を計算するための Feynmann rule を Ursell-Mayer 展開と少々異なった形で与える。この rule により量子系の場合との対応を明確にすることができる。さらには

Legendre transformation により密度汎関数を与える。sec.III で、量子系の場合を論じ、古典系の場合との diagram レベルでの対応をみる。

II 古典粒子系における大分配関数と Feynmann rule

外場 $\phi(\mathbf{x})$ 中にあり、 $v(\mathbf{x}-\mathbf{y})$ で相互作用する古典的な粒子 (電子) を考える。この系の大分配関数は、

$$\Xi[J] = \sum_{N=0}^{\infty} \int d1 d2 \dots dN z_0^N \prod_{i=1}^N \exp(J(i)) \prod_{j < k}^N \exp(-\beta v(j-k))$$

$$z_0 = (M k_B T / 2\pi \hbar^2)^{3/2} \quad (2.1)$$

で与えられる [1]。ここで $J(\mathbf{x}) = \beta(\mu - \phi(\mathbf{x}))$ (μ は chemical potential) であり、 $1 \equiv \mathbf{x}$ の notation を用いた。 Ξ の argument J は、 Ξ が $J(\mathbf{x})$ の汎関数であることを意味する。eq.(2.1) は

$$\frac{\delta \exp(J(1))}{\delta J(2)} = \exp(J(1)) \delta(1-2) \quad (2.2)$$

を用いて

$$\text{eq.(2.1)} = \exp \left(-\frac{\beta}{2} \int d1' d2' v(1'-2') \frac{\delta}{\delta J(1')} \frac{\delta}{\delta J(2')} + \frac{\beta}{2} \int d1' d2' v(0) \frac{\delta}{\delta J(1')} \right) \times \Xi_0[J] \quad (2.3)$$

$$\Xi_0[J] = \sum_{N=0}^{\infty} \int d1 d2 \dots dN z_0^N \prod_{i=1}^N \exp(J(i)) = \exp \left\{ n_s \int d1 z_0 \exp(J(1)) \right\} \quad (2.4)$$

と書くことができる (eq.(2.4) でスピン自由度、 $n_s = 2$ を考慮した)。ここで $\Xi_0[J]$ は相互作用のない粒子に対する大分配関数であり、この式により、摂動展開を Feynman diagrams を用いて書き下すことができる。すなわち primary な N 点 vertex を、

$$\frac{\delta \{ n_s z_0 \int d1 \exp(J(1)) \}}{\delta J(1) \dots \delta J(N)} = n_s z_0 \exp(J(1)) \delta(1-2) \delta(1-3) \dots \delta(1-N) \quad (2.5)$$

により、 $n_s z_0 \exp(J(1)) \delta(1-2) \delta(1-3) \dots \delta(1-N)$; ($N \geq 1$) で与えられる点状のものであるとし、propageter を $\beta v(1-2)$ であるとして書き下した全 connected diagrams の和が $W[J]$ (ただし $\Xi_0[J] =$

$\exp(W[J])$ を与える (Fig.1)。ただし、積分は空間3次元でおこない、ウエイトは適当に決めてやるとする。また eq.(2.3) 中の $\exp\left\{\frac{\beta}{2} \int d1' d2' v(0) \frac{\delta}{\delta J(1')}\right\}$ により「自己相互作用」に対応する diagrams を含むものは禁止される (Fig.2)。

Ursell-Mayer による展開は $\exp(-\beta v(j-k)) = 1 + f_{jk}$ として f_{jk} で展開する方法である。diagram を書き下すルールを比べてみると、Ursell-Mayer では2つの点 (vertex に対応) をつなぐ線 (propagator に対応) が1本しかないという点で違っている。ここでの展開の立場からみると、 f_{jk} とは、diagrams において、j,k の2つの vertex に対し、これをつなぐべきすべての propagators を加えあげたものであるといえる (Fig.3)。ここで述べた摂動展開は後述の量子系における diagram 展開との対応を見る上では有利である。

$W[J]$ は connected Green functions の generating functional となっている。すなわち、 $W[J]$ の汎関数微分がそれらの列を与える、

$$\frac{\delta W[J]}{\delta J(1)} = \langle n(1) \rangle_J \equiv \bar{n}(1) \quad (2.6)$$

$$\frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(1) \delta J(2)} = \langle (n(1) - \bar{n}(1))(n(2) - \bar{n}(2)) \rangle_J \equiv X^{-1}(1, 2)。 \quad (2.7)$$

高次微分も同様であり、 $\langle \dots \rangle_J$ は温度 T での期待値を意味する。また $\bar{n}(1), X^{-1}(1, 2)$ を後のために定義しておいた。

この $W[J]$ の functional Legendre 変換によって Effective Action(Potential) を定義する。すなわち

$$\begin{aligned} \Gamma[\bar{n}] &= W[J] - \int d1 J(1) \frac{\delta W[J]}{\delta J(1)} \\ \bar{n}(1) &= \frac{\delta W[J]}{\delta J(1)} \end{aligned} \quad (2.8)$$

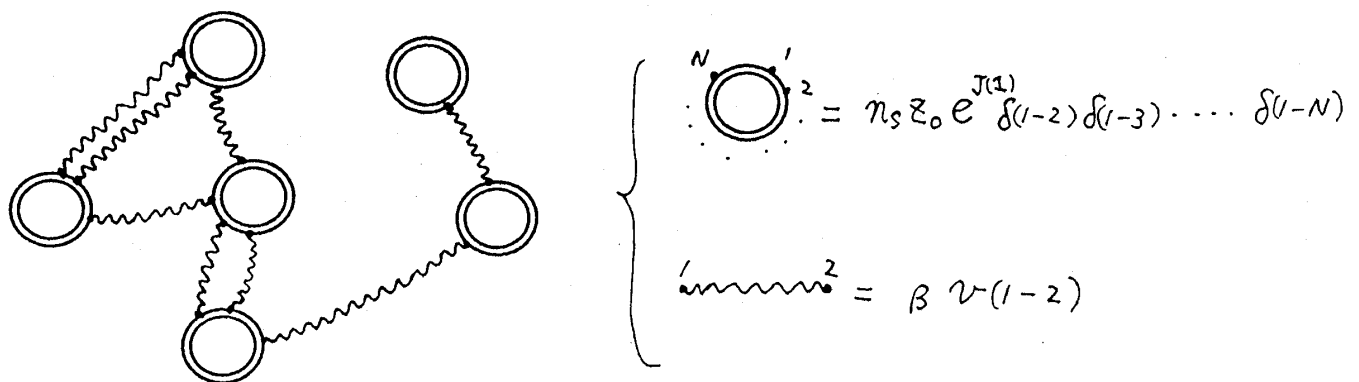


Fig.1 $W[J]$ に含まれる diagram の例

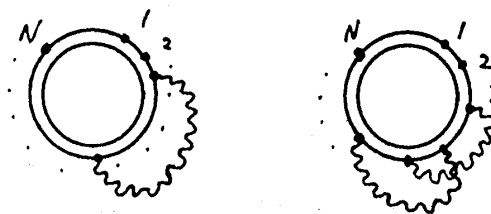


Fig.2 禁止される自己相互作用の diagram の例

$$\sum_i \text{Diagram with two vertices } i \text{ and } k \text{ connected by a wavy line} = e^{-\beta v_{(i-k)}} \times (n_s z_0 e^{J^{(i)}}) \times (n_s z_0 e^{J^{(k)}})$$

Fig.3 2つの vertex を結ぶ相互作用の線 ('propagator') の和

により $\Gamma[\bar{n}]$ を定義する。すると、これは proper vertex の generating functional であり、この汎関

数微分は、eq.(2.8) の表式を微分して、

$$\frac{\delta\Gamma[\bar{n}]}{\delta\bar{n}(1)} = -J(1) \quad (2.9)$$

$$\frac{\delta^2\Gamma[\bar{n}]}{\delta\bar{n}(1)\delta\bar{n}(2)} = -X(1,2) \quad (2.10)$$

$$\frac{\delta^3\Gamma[\bar{n}]}{\delta\bar{n}(1)\delta\bar{n}(2)\delta\bar{n}(3)} = \int d1'd2'd3' X(1,1')X(2,2')X(3,3') \frac{\delta^3W[J]}{\delta J(1')\delta J(2')\delta J(3')} , \quad (2.11)$$

などと与えられる。

なお、Ref.1,4 における密度汎関数 $\Omega[n]$ は、

$$\Omega[n] = -\frac{1}{\beta}\Gamma[n] + \int d1(\phi(1) - \mu)n(1) \quad (2.12)$$

で与えられ、この functional を極小にする $n(1)$ が、外場 $\phi(1)$ に対する密度を与える。(=eq.(2.9))

III 量子系と古典系の diagram レベルでの対応

以下のような Hamiltonian $\hat{H}_{total}$ で規定される系を考える。 $\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x})$ を Fermion(電子) の場の Operator として

$$\begin{aligned} \hat{H}_{total} &= \hat{H} + \int d^3\mathbf{x}(\phi_\alpha(\mathbf{x}) - \mu)\hat{n}_\alpha(\mathbf{x}), \\ \hat{H} &= \int d^3\mathbf{x} \sum_\alpha \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m}\right) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} \int d^3\mathbf{y} \sum_{\alpha,\beta} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{y}) v(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{y}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) \\ \hat{n}_\alpha(\mathbf{x}) &= \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (3.1)$$

ここで $\phi_\alpha(\mathbf{x})$ は外場であり α, β は spin index である。この $\hat{H}$ から functional path-integral で $Z[J]$

および connected density Green's functions の generating functional $W[J]$ を作ることができる。す

なわち、

$$Z[J] = \exp(W[J])$$

$$= \int [d\psi d\psi^\dagger] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left\{ \int d\mathbf{x} \psi^\dagger(1) \partial_\tau \psi(1) - H(\psi^\dagger, \psi) + \int d\mathbf{x} J(1) n(1) \right\}\right], \quad (3.2)$$

ここで $\int [d\psi^\dagger d\psi]$ は Grassman 代数の functional path-integral を表わす [6]。この section では $1 \equiv \alpha \mathbf{x} \tau$ 、 $x \equiv \mathbf{x} \tau$ の notation を用いる。 τ は虚時間で $0 \leq \tau \leq \beta\hbar$ 。 $J(1)$ は、時間空間およびスピンの依存した probe としての source term であるが、この $J(1)$ に $\mu - \phi_\alpha(\mathbf{x}) (\equiv J_\alpha^0(\mathbf{x}))$ という time-independent なものを代入するなら $Z[J^0]$ は J^0 の汎関数としての大分配関数となる。

eq.(3.2) は、汎関数微分する際の同時刻での $\psi, \psi^\dagger$ の ordering に注意して [6]、

$$Z[J] = \exp(W[J])$$

$$= \exp\left(-\frac{\hbar}{2} \int d1' d2' v(1' - 2') \delta(\tau_1' - \tau_2') \frac{\delta}{\delta J(1')} \frac{\delta}{\delta J(2')}\right) \times \exp(W_0[J]) \quad (3.3)$$

と書くことができる。ただし $W_0[J]$ は non-interacting な場合の functional で

$$Z_0[J] = \exp(W_0[J])$$

$$= \int [d\psi d\psi^\dagger] \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int d1 \psi^\dagger(1) \left(\partial_\tau + \frac{\nabla^2}{2m} + J(1)\right) \psi(1)\right], \quad (3.4)$$

である。eqs.(3.3) と (3.4) から Feynmann rule を与えるのは容易で、propagator として $v(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2)$ を、primary な vertex として Fermion one-loop からなる Fig.4 のようなものを考えればよいことがわかる。(注; 以下で、'propagator' は、この意味で用いる。)

ところで、 $\hbar \rightarrow 0$ で $Z[J^0]$ は古典系での $\Xi[J^0]$ に一致するはずである。上述の Feynman Rule と、sec.II での古典系におけるものを比較すると Feynmann diagram レベルにおける対応を見ることができる。すなわち、「古典系における点状の N 点 vertex に対応するものが、Fermion one loop から

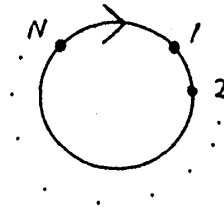


Fig.4 Fermion loop からの N 点 vertex

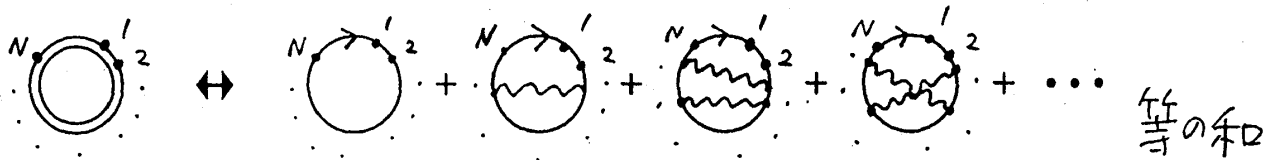


Fig.5a

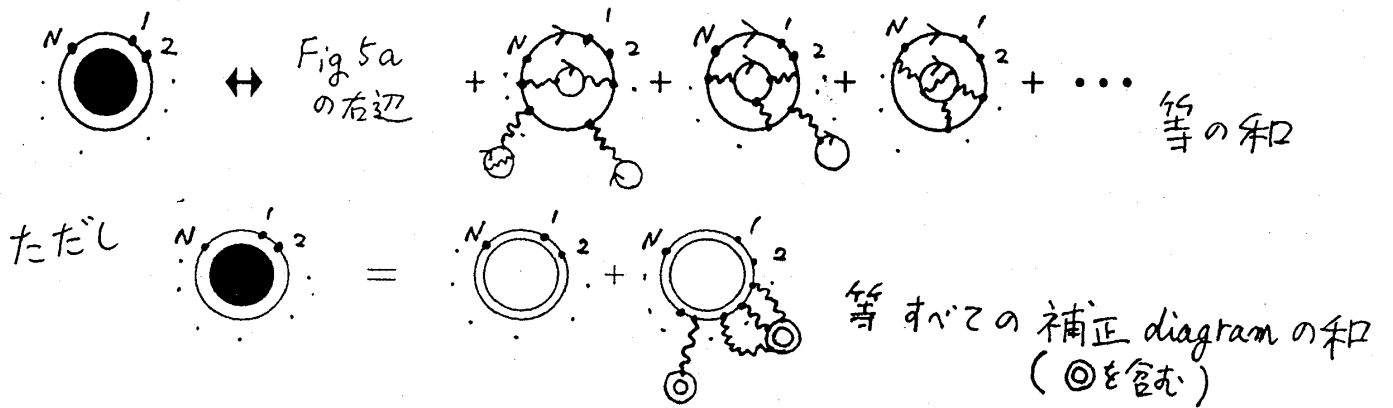


Fig.5b

Fig.5 古典系と量子系の vertex における対応

なる N 点の vertex (ただしすべての相互作用の線 ('propagator') による補正を加えた one loop) である。』とすればよい (Fig.5a)。Fig.5a 右辺の Fermion one loop に対する相互作用の線による補正は、二項目の Fock energy 項以下、 $\hbar \rightarrow 0$ でゼロとなる量である ($Z[J]$ の中で $\hbar$ と m は $\hbar^2/m$ の組み合わせで現れるので、代わりに $m \rightarrow \infty$ と考えてもよい)。そして、補正なしの Fermion one loop からなる vertex のみが、 $\hbar \rightarrow 0$ で生き残り、 τ -independent で空間的には点状なものとなって古典系における vertex となる。

あるいは Fig.5b のように、相互作用の線と Fermion loops からなる図形による補正を加えた vertex が、古典系での同等の補正をした vertex に対応するとしてもよい。古典系では、この vertex は、

$$\text{vertex of Fig.5b} = \langle n(1) \rangle_J \delta(1-2) \delta(1-3) \dots \delta(1-N) \quad (3.5)$$

となる。これは Fig.5a の bare な vertex を補正する際に sum すべき diagrams (Fig.5b) が eq.(2.6) での $\langle n(1) \rangle_J$ を与える diagrams に一致することからわかる。

Fig.5a もしくは Fig.5b の補正した vertex と、'propagator' を用いて diagrams を書き下すなら、Feynmann rule は、量子系と古典系で同一で、量子系の場合の個々の diagram からの寄与は $\hbar \rightarrow 0$ で、対応する古典系の diagrams からの寄与と一致する。

$W[J]$ は温度 T での虚時間形式における density Green's functions の generating functional であり、 $J_\alpha(x)$ による functional derivative は sec.II と同様に

$$\frac{\delta W[J]}{\delta J(1)} = \frac{1}{\hbar} \langle \hat{n}(1) \rangle_J \quad (3.6)$$

$$\frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(1) \delta J(2)} = \frac{1}{\hbar^2} \langle T(\hat{n}(1) - n(1))(\hat{n}(2) - n(2)) \rangle_J \quad (3.7)$$

等で与えられる。この辺の事情は sec.II とほとんど同様であり $\Gamma[n]$ も同様に定義できる。相違点は量子系の場合、(虚) 時間を含んだものとなること、である。

この $\Gamma[n]$ については、Functional Legendre transformation により、その場の理論的基礎づけを行った論文 [R.Fukuda, T.Kotani, Y.Suzuki, and S.Yokojima, to be published] において、議論した。また、 $\Gamma[n]$ を n の非局所的な汎関数として展開する方法について研究している [T.Kotani, to be published]。

References

- 1 S. Ichimaru, H. Iyetomi, and S. Tanaka, Phys. Rep., 149, 91(1987).
- 2 戸田他「液体の構造と性質」岩波 1976
- 3 J. P. Hassen and I. R. McDonald *The theory of simple liquids*, Academic Press 1976
- 4 R. Evans, Adv. Phys. 28, 143(1979)
- 5 星野公三 渡部三雄, 液体金属の理論 固体物理27(2),95(1992)
- 6 J. W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley, London, 1987).