§7. 統計力学と経路積分のユークリッド表示

波動関数が観測領域 $|\varphi_i\rangle$ と未知領域 $|\theta_\alpha\rangle$ の直積で与えられるとする。

$$|\psi\rangle = \sum_{i,\alpha} C_{i\alpha} |\varphi_i\rangle \otimes |\theta_\alpha\rangle$$

$$(\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} \ , \ \langle\theta_\alpha|\theta_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta})$$

物理量Aの期待値は

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

$$= \sum_{i,j,\alpha,\beta} C_{j\beta}^* C_{i\alpha} \langle\theta_\beta|\theta_\alpha\rangle\langle\varphi_j|\hat{A}|\varphi_i\rangle$$

$$= \sum_{i,j,\alpha} C_{i\alpha} C_{j\alpha}^* \langle\varphi_j|\hat{A}|\varphi_i\rangle$$

(密度行列 $\rho_{ij} \equiv \sum_\alpha C_{i\alpha} C_{j\alpha}^*$)

$$= \sum_{i,j} \rho_{ij} \langle\varphi_j|\hat{A}|\varphi_i\rangle$$

と書きかえられる。

規格化条件 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ より $\sum_{i,\alpha} |C_{i\alpha}|^2 = 1$

$$\therefore \sum_i \rho_{ii} = 1$$

ここで密度演算子を $\rho_{ij} = \langle\varphi_i|\hat{\rho}|\varphi_j\rangle$ を満たすものとして定義する。

すると、エルミート性 $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ が成り立つ。

(証明)
$\langle \varphi_i | \hat{\rho} | \varphi_j \rangle = \sum_\alpha C_{i\alpha} C_{j\alpha}^*$

$\langle \varphi_j | \hat{\rho}^+ | \varphi_i \rangle = \sum_\alpha C_{i\alpha}^* C_{j\alpha} = \rho_{ji} = \langle \varphi_j | \hat{\rho} | \varphi_i \rangle$ ▯

$\mathrm{Tr}\,\hat{A} \equiv \sum_i \langle i | \hat{A} | i \rangle$ とすると

$\langle \hat{A} \rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{A}$, $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$ が成り立つ。

(証明)
$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{ij} \rho_{ij} \langle \varphi_j | \hat{A} | \varphi_i \rangle$

$= \sum_{ij} \langle \varphi_i | \hat{\rho} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \hat{A} | \varphi_i \rangle$

$= \sum_i \langle \varphi_i | \hat{\rho}\hat{A} | \varphi_i \rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{A}$

$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = \sum_i \langle \varphi_i | \hat{\rho} | \varphi_i \rangle$

$= \sum_i \rho_{ii} = 1$ ▯

さらに $\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B} = \mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{A}$ が成り立つ。

(証明)
$\mathrm{Tr}\,\hat{A}\hat{B} = \sum_i \langle \varphi_i | \hat{A}\hat{B} | \varphi_i \rangle$

$= \sum_{ij} \langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \hat{B} | \varphi_i \rangle$

$= \sum_{ij} \langle \varphi_j | \hat{B} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_j \rangle$

$= \sum_j \langle \varphi_j | \hat{B}\hat{A} | \varphi_j \rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{A}$ ▯

よって $\mathrm{Tr}\,\hat{A} = \mathrm{Tr}\,\hat{O}^{-1}\hat{A}\hat{O}$ が成り立つ。

($\hat{O}$ は逆 $\hat{O}^{-1}$ をもつ任意の演算子)

ハミルトニアンの固有状態を $|E_i\rangle$ とする。

$$\hat{H}|E_i\rangle = E_i|E_i\rangle \ , \ \langle E_i|E_j\rangle = \delta_{ij}$$

すると密度演算子のエネルギー表示は

$$\hat{\rho}_E = \sum_i W(E_i)|E_i\rangle\langle E_i|$$

となる。

(証明)

$\hat{V} \equiv \sum_i |a_i\rangle\langle\beta_i|$ とする。

$$\hat{V}^\dagger\hat{V} = \sum_{ij}|\beta_i\rangle\langle a_i|a_j\rangle\langle\beta_j| = \sum_i|\beta_i\rangle\langle\beta_i| = \hat{I}$$

$\hat{\rho}$はエルミート演算子であるから

$$\hat{\rho}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$$

を満たす固有ケットが存在する。

$\hat{V} \equiv \sum_i |a_i\rangle\langle E_i|$ と定義しなおすと、

$$\hat{V}^\dagger\hat{\rho}\hat{V} = \sum_{ij}|E_i\rangle\underbrace{\langle a_i|\hat{\rho}|a_j\rangle}_{W(E_i)}\langle E_j|$$

$$= \sum_i W(E_i)|E_i\rangle\langle E_i| \equiv \hat{\rho}_E \quad \square$$

$\hat{A}$の期待値は$\hat{\rho}_E$を用いて

$$\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}_E\hat{A} = \sum_i\langle E_i|\hat{\rho}_E\hat{A}|E_i\rangle$$

$$= \sum_{ij}W(E_j)\langle E_i|E_j\rangle\langle E_j|\hat{A}|E_i\rangle$$

$$= \sum_i W(E_i)\langle E_i|\hat{A}|E_i\rangle$$

のように与えられる。

$\hat{P}_k = |E_k\rangle\langle E_k|$ とする。

$\langle \hat{P}_k \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}_E \hat{P}_k = \sum_i W(E_i) \langle E_i | E_k \rangle \langle E_k | E_i \rangle$

$= W(E_k)$

$\therefore W(E_k) = \langle \hat{P}_k \rangle = \langle \psi | E_k \rangle \langle E_k | \psi \rangle = |\langle E_k | \psi \rangle|^2 \geq 0$

$1 = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}_E = \sum_j \langle E_j | \hat{\rho}_E | E_j \rangle$

$= \sum_{ij} W(E_i) \langle E_j | E_i \rangle \langle E_i | E_j \rangle$

$= \sum_i W(E_i)$

よって $W(E_i) \geq 0$, $\sum_i W(E_i) = 1$ を満たし、

確率分布関数とみなすことができる。

$W(E_i)$ の具体形を求める。

$E_0 < E_1 < E_2 < \cdots$

とすると、$W(E_i)$ は次の条件を満たさねばならない。

(i) エネルギーが低い方に系は移動するから

$W(E_k) < W(E_j) \quad (E_k > E_j)$

(ii) $W(E_i)$ はエネルギー原点のとり方によらない。

$E_k > E_j$ とすると (ii) より

$$\frac{W(E_j)}{W(E_k)} = \frac{W(E_j+\varepsilon)}{W(E_k+\varepsilon)} = \frac{W(E_j)+\varepsilon W'(E_j)}{W(E_k)+\varepsilon W'(E_k)}$$

$$\therefore \frac{W'(E_k)}{W(E_k)} = \frac{W'(E_j)}{W(E_j)} = -\beta\,(\text{定数})$$

$$\therefore W(E_i) = C e^{-\beta E_i}$$

$1 = C \sum_i e^{-\beta E_i}$ より $C = \dfrac{1}{\sum_i e^{-\beta E_i}}$

$Z \equiv \sum_i e^{-\beta E_i}$ とすれば $W(E_i) = \dfrac{e^{-\beta E_i}}{Z}$

$$\therefore \begin{cases} Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_i \langle E_i | e^{-\beta \hat{H}} | E_i \rangle = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}} \\ \hat{\rho}_E = \dfrac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} |E_i\rangle\langle E_i| = \dfrac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z} \sum_i |E_i\rangle\langle E_i| = \dfrac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z} \end{cases}$$

統計力学と経路積分

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta\hat{H}} = \sum_i \langle i | e^{-\beta \hat{H}} | i \rangle$$

$$= \sum_i \langle i | \int dx |x\rangle\langle x| e^{-\beta\hat{H}} | i\rangle = \sum_i \int dx \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | i\rangle\langle i | x\rangle$$

$$= \int dx \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle$$

ファインマン核 $\langle x | e^{-\frac{iT\hat{H}}{\hbar}} | x' \rangle$ と比較すると、

$T \Leftrightarrow -i\tau$ $(\tau \equiv \hbar\beta)$ とおきかえれば
(ユークリッド化)

$K(x, x'; T) \Leftrightarrow K(x, x'; \tau)$ と移り変わる。

$$\tilde{K}(x, x'; \tau) \equiv K(x, x'; -i\tau) = \langle x | e^{-\frac{\tau\hat{H}}{\hbar}} | x' \rangle$$

をユークリッドファインマン核という。

$$\therefore Z(\tau) = \int dx\, \tilde{K}(x, x; \tau)$$

ユークリッドファインマン核はファインマン核について

$\Delta t \to -i\Delta\tau$ とおきかえて

$$\tilde{K}(x, x'; \tau) = \lim_{N\to\infty}\left(\prod_{j=1}^{N-1}\int dx_j\right)\left(\prod_{j=1}^{N}\int\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\right)$$

$$\times \exp\left[\frac{1}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{ip_j\Delta x_j - \Delta\tau H(p_j, x_j)\right\}\right]$$

とかける。

$$\therefore Z(\tau) = \lim_{N\to\infty}\left(\prod_{j=1}^{N}\int\frac{dx_j\,dp_j}{2\pi\hbar}\right)\exp\left[\frac{\Delta\tau}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{ip_j\left(\frac{\Delta x_j}{\Delta\tau}\right) - H(p_j, x_j)\right\}\right]$$

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$ のときは以前と同じように

フレネル積分を実行して

$$\tilde{K}(x,x';\tau) = \lim_{N\to\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau}} \left(\prod_{j=1}^{N-1}\int\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau}}\,dx_j\right)$$

$$\times \exp\left[-\frac{\Delta\tau}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x_j}{\Delta\tau}\right)^2+V(x_j)\right\}\right]$$

$$\therefore Z(\gamma) = \lim_{N\to\infty}\left(\prod_{j=1}^{N}\int\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau}}\,dx_j\right)\exp\left[-\frac{\Delta\tau}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta x_j}{\Delta\tau}\right)^2+V(x_j)\right\}\right]$$

形式的な連続極限 $N\to\infty$ を考えると、

$$Z(\gamma) = \int\mathcal{D}x(\tau)\exp\left[-\frac{\tilde{S}[x]}{\hbar}\right]$$

$$\left(\tilde{S}[x] = \int_0^{\gamma}d\tau\left[\frac{m}{2}\left(\frac{dx(\tau)}{d\tau}\right)^2+V(x)\right]\right)$$

ユークリッド作用

[利点1]

以前に示した経路積分表示では指数の肩が $\frac{iS}{\hbar}$ と i が含まれているため振動してしまう。

一方、上の表記では指数の肩が $-\frac{\tilde{S}}{\hbar}$ となり収束性がよい。

[利点2]

$$\tilde{K}(x, x'; \tau) = \langle x | e^{-\frac{\tau H}{\hbar}} | x' \rangle$$

$$= \sum_n \langle x | e^{-\frac{\tau H}{\hbar}} | n \rangle \langle n | x' \rangle$$

$$= \sum_n e^{-\frac{\tau E_n}{\hbar}} \varphi_n(x) \varphi_n^*(x')$$

$\tau \to \infty$ では $e^{-\frac{\tau E_n}{\hbar}}$ のため和で基底状態 E_0 のみ

が生き残り,

$$\lim_{\tau \to \infty} \tilde{K}(x, x'; \tau) = \lim_{\tau \to \infty} e^{-\frac{\tau E_0}{\hbar}} \varphi_0(x) \varphi_0^*(x')$$

$$\therefore E_0 = \lim_{\tau \to \infty} -\hbar \frac{\log \tilde{K}(x, x', \tau)}{\tau}$$

ボース・フェルミ分配関数の経路積分表示

$$Z^B(\tau) = \mathrm{Tr}\, e^{-\frac{\tau \hat{H}}{\hbar}} = \sum_i \langle i | e^{-\frac{\tau \hat{H}}{\hbar}} | i \rangle$$

$$= \sum_i \langle i | \int \frac{d^{2f} a}{\pi^f} | a \rangle \langle a | e^{-\frac{\tau \hat{H}}{\hbar}} | i \rangle$$

$$= \sum_i \int \frac{d^{2f} a}{\pi^f} \langle a | e^{-\frac{\tau \hat{H}}{\hbar}} | i \rangle \langle i | a \rangle$$

$$= \int \frac{d^{2f} a}{\pi^f} \langle a | e^{-\frac{\tau \hat{H}}{\hbar}} | a \rangle$$

$$= \int \frac{d^{2f} a}{\pi^f} \tilde{K}(a, a; \tau)$$

$$\left(\tilde{K}(a'; a; \tau) \equiv \langle a' | e^{-\frac{\tau \hat{H}}{\hbar}} | a \rangle \right)$$

ユークリッド核 $\tilde{K}(a', a; \tau)$ は前に求めた

ファインマン核に対して $\Delta t \to -i\Delta\tau$, $a \to a'$, $a_0 \to a$

とおきかえればよいから

$$\tilde{K}(a', a; \tau) = \lim_{N\to\infty} \left(\prod_{j=1}^{N-1} \int \frac{d^{2f} a_j}{\pi^f} \right)$$

$$\times \exp\left[-\sum_{j=1}^{N} \left\{ \frac{a_j^* \Delta a_j}{2} - \frac{\Delta a_j^* a_{j-1}}{2} + \frac{\Delta\tau}{\hbar} H(a_j^*, a_{j-1}) \right\} \right]$$

ここで $\displaystyle\sum_{j=1}^{N} \left(\frac{a_j^* \Delta a_j}{2} - \frac{\Delta a_j^* a_{j-1}}{2} \right) = \frac{a_N^* a_N}{2} + \frac{a_N^* a_N}{2} - a_N^* a_{N-1} + \sum_{j=1}^{N-1} a_j^* \Delta a_j$

$$= \sum_{j=1}^{N} a_j^* \Delta a_j$$ より

$$Z^B(\tau) = \lim_{N\to\infty} \left(\prod_{j=1}^{N} \int \frac{d^{2f} a_j}{\pi^f} \right) \exp\left[-\sum_{j=1}^{N} \left\{ a_j^* \Delta a_j + \frac{\Delta\tau}{\hbar} H(a_j^*, a_{j-1}) \right\} \right]$$

次にフェルミ粒子の分配関数を求める。

$$Z^F(\gamma) = \mathrm{Tr}\, e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} = \int d^f\xi\, d^f\xi^* \langle -\xi | e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} | \xi \rangle$$

$$= \int d^f\xi\, d^f\xi^* \langle \xi | e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} | -\xi \rangle$$

のように始状態，終状態で符号が変わる

反周期境界条件で与えられる。

(証明)

$$\mathrm{Tr}\, e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} = \sum_{m=0}^{f} \sum_{r=1}^{r_m} \langle m;r | e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} | m;r \rangle$$

$$= \sum_{m=0}^{f} \sum_{r=1}^{r_m} \langle m;r | \int d^f\xi\, d^f\xi^* | \xi \rangle \langle \xi | e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} | m;r \rangle$$

$$= \int d^f\xi\, d^f\xi^* \sum_{m=0}^{f} \sum_{r=1}^{r_m} \langle m;r | \xi \rangle \langle \xi | e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} | m;r \rangle$$

$\left(\langle m;r | \xi \rangle = \xi_{p_m} \xi_{p_{m-1}} \cdots \xi_{p_1} \exp\left[-\frac{\xi^* \xi}{2} \right] \text{より} \right)$

$$= \int d^f\xi\, d^f\xi^* \sum_{m=0}^{f} \sum_{r=1}^{r_m} \langle \xi | e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} | m;r \rangle$$

$$\times (-\xi_{p_m})(-\xi_{p_{m-1}}) \cdots (-\xi_{p_1}) \exp\left[-\frac{\xi^* \xi}{2} \right]$$

$$= \int d^f\xi\, d^f\xi^* \sum_{m=0}^{f} \sum_{r=1}^{r_m} \langle \xi | e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} | m;r \rangle \langle m;r | -\xi \rangle$$

$$= \int d^f\xi\, d^f\xi^* \langle \xi | e^{-\frac{\gamma \hat{H}}{\hbar}} | -\xi \rangle$$

□

コークリッド核を

$$\tilde{K}(\xi',\xi;\tau) \equiv K(\xi',\xi;-i\tau) = \langle \xi' | e^{-\frac{\tau H}{\hbar}} | \xi \rangle$$

と書けば前に求めたファインマン核に対して

$\Delta t \to -i\Delta\tau$, $\xi \to \xi'$, $\xi_0 \to \xi$ とおいて

$$\tilde{K}(\xi',\xi;\tau) = \lim_{N\to\infty}\left(\prod_{j=1}^{N-1}\int d^{+}\xi_j\, d^{+}\xi_j^{*}\right)$$

$$\times \exp\left[-\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{\xi_j^{*}\Delta\xi_j}{2} - \frac{\Delta\xi_j^{*}\xi_{j-1}}{2} + \frac{\Delta\tau}{\hbar}H(\xi_j^{*},\xi_{j-1})\right\}\right]$$

$$\therefore Z^{F}(\tau) = \lim_{N\to\infty}\left(\prod_{j=1}^{N}\int d^{+}\xi_j\, d^{+}\xi_j^{*}\right)\exp\left[-\sum_{j=1}^{N}\left\{\underbrace{\xi_j^{*}\Delta\xi_j + \frac{\Delta\tau}{\hbar}H(\xi_j^{*},\xi_{j-1})}_{\text{ボース粒子のときと同じ計算}}\right\}\right]$$