# 2. 経路積分量子化

渡辺展正（Hiromasa Watanabe）[a]

2024年9月10日

[a] 京都大学基礎物理学研究所, hiromasa.watanabe@yukawa.kyoto-u.ac.jp

# まえがき

# まえがき

本講義では、格子ゲージ理論、とりわけ数値計算への応用を念頭に、「経路積分量子化」について解説した。

一コマの授業に収めるため、説明が簡略化されている箇所や重要な内容が省略されている点についてはご容赦いただきたい。

この講義では、$c = \hbar = 1$ の自然単位系を使用する。

# 目次

# 量子力学の経路積分

# 準備（時間発展）

- 位置演算子と運動量演算子 $\hat{q}, \hat{p}$ : $[\hat{q}, \hat{p}] = \mathrm{i}$.
- 状態 $|\psi(t)\rangle$ はSchrödinger方程式に従う。

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle .$$

- Heisenberg 表示では演算子が時間発展する。

$$\hat{O}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\,\hat{O}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} .$$

- Schrödinger 表示での演算子 $\hat{q}$ の固有状態 $|q\rangle$ を使って

$$|q, t\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}|q\rangle , \qquad \hat{q}(t)|q, t\rangle = q|q, t\rangle .$$

# 準備（完全系）

位置演算子の固有状態$\{|q\rangle\}$を使うと

$$\mathbb{1} = \int \mathrm{d}q \; |q\rangle\langle q| \,.$$

また、$\mathbb{1} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t} \; \mathbb{1} \; \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}$ でもあることから

$$\mathbb{1} = \int \mathrm{d}q \; |q, t\rangle\langle q, t| \,,$$

と表すこともできる。

以降では、この恒等演算 $\mathbb{1}$ をあちこちに挿入することになる。

# 遷移振幅

時刻 $t = t_\mathrm{I}$ に位置 $q = q_\mathrm{I}$ にある状態から、時刻 $t = t_\mathrm{F}$ $(> t_\mathrm{I})$ に位置 $q = q_\mathrm{F}$ にある状態に変わる遷移振幅は、

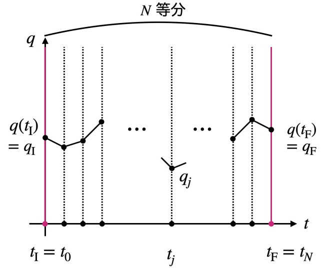
$$\langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle = \langle q_\mathrm{F} | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t_\mathrm{F}-t_\mathrm{I})} \, | q_\mathrm{I} \rangle .$$

このとき時間方向を次のように離散化する:

$$\Delta t = \frac{t_\mathrm{F} - t_\mathrm{I}}{N}, \qquad t_n = t_\mathrm{I} + n\Delta t,$$

$$q_n = q(t_n),$$

$$q_0 = q(t_0) = q_\mathrm{I}, \; q_N = q(t_N) = q_\mathrm{F}.$$



# 遷移振幅

各時刻 $t_n$ ごとに完全系を遷移振幅へ挿入していくと、

$$
\begin{aligned}
\langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle &= \int \mathrm{d}q_1 \, \langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | q_1, t_1 \rangle \langle q_1, t_1 | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle \\
&= \int \mathrm{d}q_2 \, \mathrm{d}q_1 \, \langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | q_2, t_2 \rangle \langle q_2, t_2 | q_1, t_1 \rangle \langle q_1, t_1 | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle \\
&= \cdots \\
&= \int \mathrm{d}q_{N-1} \cdots \mathrm{d}q_1 \prod_{n=0}^{N-1} \langle q_{n+1}, t_{n+1} | q_n, t_n \rangle \\
&= \int \mathrm{d}q_{N-1} \cdots \mathrm{d}q_1 \prod_{n=0}^{N-1} \boxed{\langle q_{n+1} | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}\Delta t} \, | q_n \rangle}.
\end{aligned}
$$

ある時刻$t_n$と$t_n + \Delta t$の間の遷移振幅に注目する。

# 微小時間の遷移振幅

運動量基底での完全系

$$\mathbb{1} = \int \mathrm{d}p \, |p\rangle\langle p| \, ,$$

を挿入すると、$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}pq}$ より

$$\begin{aligned}
\langle q_{n+1}| \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}\Delta t} \, |q_n\rangle &= \int \mathrm{d}p_n \, \langle q_{n+1}|p_n\rangle \, \langle p_n| \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}\Delta t} \, |q_n\rangle \\
&= \int \mathrm{d}p_n \left[1 - \mathrm{i}H(p_n, q_n)\Delta t + O(\Delta t^2)\right] \langle q_{n+1}|p_n\rangle \, \langle p_n|q_n\rangle \\
&= \int \frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi} \exp\left[\mathrm{i}\left\{p_n(q_{n+1} - q_n) - H(p_n, q_n)\Delta t + O(\Delta t^2)\right\}\right].
\end{aligned}$$

従って、全体の遷移振幅は

$$\langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F}|q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I}\rangle = \int \left[\prod_{n=1}^{N-1} \mathrm{d}q_n\right] \left[\prod_{n=0}^{N-1} \frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi}\right] \exp\left[\mathrm{i}\left\{\sum_{n=0}^{N-1} \left(p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\Delta t} - H(p_n, q_n)\right)\Delta t\right\}\right] + O(\Delta t^2).$$

# 経路積分表示（位相空間）

遷移振幅全体として

$$\langle q_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | q_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle \approx \int \left[ \prod_{n=1}^{N-1} \mathrm{d}q_n \right] \left[ \prod_{n=0}^{N-1} \frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi} \right] \exp \left[ \mathrm{i} \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \left( p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\Delta t} - H(p_n, q_n) \right) \Delta t \right\} \right]$$

$$\xrightarrow{\Delta t \to 0} \int_{q(t_{\mathrm{I}})=q_{\mathrm{I}}}^{q(t_{\mathrm{F}})=q_{\mathrm{F}}} \widetilde{\mathcal{D}q} \widetilde{\mathcal{D}p} \exp \left[ \mathrm{i} \int_{t_{\mathrm{I}}}^{t_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}t \{ p(t) \dot{q}(t) - H(p(t), q(t)) \} \right].$$

積分測度は形式的に($\Delta t \to 0$ と $N \to \infty$が等価なので)

$$\widetilde{\mathcal{D}q} \widetilde{\mathcal{D}p} := \lim_{N \to \infty} \left[ \prod_{n=1}^{N-1} \mathrm{d}q_n \right] \left[ \prod_{n=0}^{N-1} \frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi} \right].$$

より一般的な波動関数 $\psi(q) = \langle q | \psi \rangle$ を与える状態に対しても

$$\langle \psi_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | \psi_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle = \int \mathrm{d}q_{\mathrm{F}} \, \mathrm{d}q_{\mathrm{I}} \, \langle \psi_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | q_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} \rangle \langle q_{\mathrm{F}}, t_{\mathrm{F}} | q_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle \langle q_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} | \psi_{\mathrm{I}}, t_{\mathrm{I}} \rangle$$

$$= \int \widetilde{\mathcal{D}q} \widetilde{\mathcal{D}p} \, \psi_{\mathrm{F}}^*(q(t_{\mathrm{F}})) \psi_{\mathrm{I}}(q(t_{\mathrm{I}})) \exp \left[ \mathrm{i} \int_{t_{\mathrm{I}}}^{t_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}t \{ p(t) \dot{q}(t) - H(p(t), q(t)) \} \right],$$

：位相空間の経路積分、Hamiltonian経路積分

# 経路積分表示（配位空間）

Hamiltonianが $H=\frac{1}{2}p^2+V(q)$, の場合、非積分関数の指数部分は

$$\sum_n \left(p_n \frac{q_{n+1}-q_n}{\Delta t} - H(p_n, q_n)\right) = \sum_n \left(-\frac{1}{2}p_n^2 + \frac{q_{n+1}-q_n}{\Delta t}p_n - V(q_n)\right)$$
$$= \sum_n \left[-\frac{1}{2}\left(p_n - \frac{q_{n+1}-q_n}{\Delta t}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{q_{n+1}-q_n}{\Delta t}\right)^2 - V(q_n)\right].$$

位相空間の経路積分は各時刻で $p_n$ の2次なので、ガウス積分できて

$$\langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I}\rangle = C\int \left[\prod_n \mathrm{d}q_n\right] \exp\left[\mathrm{i}\sum_n \left\{\frac{1}{2}\left(\frac{q_{n+1}-q_n}{\Delta t} - V(q_n)\right)^2\right\}\right] + \cdots$$
$$\xrightarrow{\Delta t\to 0} \int_{q(t_\mathrm{I})=q_\mathrm{I}}^{q(t_\mathrm{F})=q_\mathrm{F}} \mathcal{D}q \, \exp\left[\mathrm{i}\int_{t_\mathrm{I}}^{t_\mathrm{F}} \mathrm{d}t\, L(q(t), \dot{q}(t))\right] = \int_{q(t_\mathrm{I})=q_\mathrm{I}}^{q(t_\mathrm{F})=q_\mathrm{F}} \mathcal{D}q\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[q]}.$$

（係数 $C$ は積分測度 $\mathcal{D}q$ の定義に吸収させた。）

：配位空間の経路積分、Lagrangian経路積分

# Euclidean経路積分

時間を虚数 $t = -\mathrm{i}\tau$ に取った Euclidean 経路積分がよく扱われる；

$$\hat{q}_{\mathrm{E}}(\tau) := \hat{q}(-\mathrm{i}\tau) = \mathrm{e}^{\hat{H}\tau}\,\hat{q}\,\mathrm{e}^{-\hat{H}\tau}\,, \quad |q,\tau\rangle_{\mathrm{E}} = |q,-\mathrm{i}\tau\rangle = \mathrm{e}^{\hat{H}\tau}\,|q\rangle\,.$$

(:Hamiltonian は実時間と同じ。よって実時間の物理をちゃんと反映している。)

Euclidean Lagrangian $L_{\mathrm{E}}(q(\tau),\partial_\tau q(\tau)) := -L(q(\tau),\mathrm{i}\partial_\tau q(\tau))$ を使って

$$\begin{aligned}
{}_{\mathrm{E}}\langle q_{\mathrm{F}},\tau_{\mathrm{F}}|q_{\mathrm{I}},\tau_{\mathrm{I}}\rangle_{\mathrm{E}} &= \langle q_{\mathrm{F}},-\mathrm{i}\tau_{\mathrm{F}}|q_{\mathrm{I}},-\mathrm{i}\tau_{\mathrm{I}}\rangle \\
&= \int_{q(\tau_{\mathrm{I}})=q_{\mathrm{I}}}^{q(\tau_{\mathrm{F}})=q_{\mathrm{F}}} \mathcal{D}q\,\exp\left[-\int_{\tau_{\mathrm{I}}}^{\tau_{\mathrm{F}}} \mathrm{d}\tau L_{\mathrm{E}}(q(\tau),\partial_\tau q(\tau))\right] \\
&= \int_{q(\tau_{\mathrm{I}})=q_{\mathrm{I}}}^{q(\tau_{\mathrm{F}})=q_{\mathrm{F}}} \mathcal{D}q\;\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{E}}[q]}\,.
\end{aligned}$$

もしポテンシャル項が下に有界であれば、作用 $S_{\mathrm{E}}$ が下限を持ち、この積分は実時間の経路積分よりも良い収束性を持つ。

# 有限温度系

Hamiltonian $\hat{H}$ に対して、逆温度 $\beta > 0$ の分配関数

$$Z(\beta) = \mathrm{Tr}\left[\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\right] = \sum_n \langle n|\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\,|n\rangle = \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n}\,.$$

前述の実時間発展の類似から、虚時間方向の$\beta$時間発展を表す。

一方で、実時間の場合のように位置の固有状態を使ってもよい。
逆温度 $\beta = \mathrm{i}t$ の同一視で $\langle q_\mathrm{F}|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\,|q_\mathrm{I}\rangle = \langle q_\mathrm{F}|\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\,|q_\mathrm{I}\rangle$ から

$$\begin{aligned} Z(\beta) = \int \mathrm{d}q\,\langle q|\,\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\,|q\rangle &= \int \mathrm{d}q \int_{\tilde{q}(0)=q}^{\tilde{q}(\beta)=q} \mathcal{D}\tilde{q}\;\mathrm{e}^{-S_\mathrm{E}[\tilde{q}]} \\ &= \int_{q:\mathrm{periodic}} \mathcal{D}q\;\mathrm{e}^{-S_\mathrm{E}[q]}\,. \end{aligned}$$

：トレースから、虚時間方向に対する周期境界条件が課されている。

# 時間順序積

演算子 $A(t), B(t)$ の間の時間順序積（あるいはT積）:

$$T[A(t_1)B(t_2)] = A(t_1)B(t_2)\theta(t_1 - t_2) + B(t_2)A(t_1)\Theta(t_2 - t_1),$$

（左側が未来、右側が過去のものになるよう並び替える。3つ以上の場合も同様。）

行列要素（$n$点相関関数）は ($t_\mathrm{F} > t_n \geq \cdots \geq t_1 > t_\mathrm{I}$のとき)

$$\begin{aligned}
&\langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | \hat{q}(t_n) \cdots \hat{q}(t_1) | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle \\
&= \langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | \, \hat{q}(t_n) \int \mathrm{d}q_n \, |q_n, t_n\rangle\langle q_n, t_n| \cdots \hat{q}(t_1) \int \mathrm{d}q_1 \, |q_1, t_1\rangle \, \langle q_1, t_1 | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle \, , \\
&= \int \left[ \prod_{j=1}^{n} \mathrm{d}q_j \, q_j \right] \langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | q_n, t_n \rangle \cdots \langle q_1, t_1 | q_\mathrm{I}, q_\mathrm{I} \rangle = \int \mathcal{D}q \, q(t_1) \cdots q(t_n) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[q]} \, .
\end{aligned}$$

時間順序の概念は経路積分形式に自然に入っており、

$$\langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | T[\hat{q}(t_1) \cdots \hat{q}(t_n)] | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle = \int \mathcal{D}q \, q(t_1) \cdots q(t_n) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[q]} \, .$$

# 生成汎関数

生成汎関数$Z[J]$を導入すれば、相関関数を簡単に構成できる。
(以降、Euclideanで議論する。)

$J(\tau)$：ソースと呼ばれる外場

$$S[q,J] = \int_{\tau_\mathrm{I}}^{\tau_\mathrm{F}} \mathrm{d}\tau (L + q(\tau)J(\tau)).$$

$J(\tau)$ についての汎関数微分から、ソース付きの遷移振幅は

$$\frac{\delta}{\delta J(\tau)} \langle q_\mathrm{F}, \tau_\mathrm{F} | q_\mathrm{I}, \tau_\mathrm{I} \rangle_J = \int \mathcal{D}q \, (-q(\tau)) \, \mathrm{e}^{-S[q,J]} \, .$$

これより、行列要素（相関関数）は

$$\langle q_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | T[\hat{q}(t_1) \cdots \hat{q}(t_n)] | q_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle = (-1)^n \frac{\delta^n}{\delta J(\tau_1) \cdots \delta J(\tau_n)} \int \mathcal{D}q \, \mathrm{e}^{-S[q,J]} \Big|_{J=0} .$$

# 生成汎関数

ソース付きのHamiltonian：

$$H_J := H - q(\tau)J(\tau), \quad J(\tau) = J_0(\tau)\Theta(\tau - \tau_a)\Theta(\tau_b - \tau),$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \langle q_{\mathrm{F}}, \tau_{\mathrm{F}} | q_{\mathrm{I}}, \tau_{\mathrm{I}} \rangle_J &= \langle q_{\mathrm{F}} | \, \mathrm{e}^{-H_J(\tau_{\mathrm{F}} - \tau_{\mathrm{I}})} \, | q_{\mathrm{I}} \rangle \\
&= \sum_{n,n'} \langle q_{\mathrm{F}} | \, \mathrm{e}^{-H(\tau_{\mathrm{F}} - \tau_b)} \, | n \rangle\langle n | \, \mathrm{e}^{-H_J(\tau_b - \tau_a)} \, | n' \rangle\langle n' | \, \mathrm{e}^{-H_J(\tau_a - \tau_{\mathrm{I}})} \, | q_{\mathrm{I}} \rangle \\
&= \sum_{n,n'} \mathrm{e}^{-E_n(\tau_{\mathrm{F}} - \tau_b)} \, \mathrm{e}^{-E_{n'}(\tau_a - \tau_{\mathrm{I}})} \, \langle q_{\mathrm{F}} | n \rangle \, \langle n' | q_{\mathrm{I}} \rangle \, \langle n | \, \mathrm{e}^{-H_J(\tau_b - \tau_a)} \, | n' \rangle .
\end{aligned}$$

$\Rightarrow \tau_{\mathrm{F}} \to +\infty, \tau_{\mathrm{I}} \to -\infty$ では、基底状態（真空）$|0\rangle$のみが残る！

生成汎関数 $Z[J] := \langle 0 | \, \mathrm{e}^{-H_J(\tau_b - \tau_a)} \, | 0 \rangle = \lim_{\substack{\tau_{\mathrm{F}} \to +\infty \\ \tau_{\mathrm{I}} \to -\infty}} \langle 0 | \, \mathrm{e}^{-H_J(\tau_{\mathrm{F}} - \tau_{\mathrm{I}})} \, | 0 \rangle$ は

$$Z[J] = \lim_{\substack{\tau_{\mathrm{F}} \to +\infty \\ \tau_{\mathrm{I}} \to -\infty}} \frac{\langle q_{\mathrm{F}}, \tau_{\mathrm{F}} | q_{\mathrm{I}}, \tau_{\mathrm{I}} \rangle_J}{\langle q_{\mathrm{F}} | 0 \rangle \, \langle 0 | q_{\mathrm{I}} \rangle} = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q \; \mathrm{e}^{-S[q,J]}, \quad \mathcal{N}^{-1} = Z[J=0].$$

$$\langle 0 | T[\hat{q}(\tau_1) \cdots \hat{q}(\tau_n)] | 0 \rangle = (-1)^n \frac{\delta^n}{\delta J(\tau_1) \cdots \delta J(\tau_n)} Z[J] \bigg|_{J=0} .$$

# 場の量子論の経路積分

# 場の量子論の経路積分

場の量子論の経路積分形式も、基本的には量子力学の際に行った手続きと同じことをくりかえすことで構成できる。

例）1成分の実スカラー場の場合

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - \frac{m^2}{2}\phi^2 + \mathcal{L}_{\mathrm{int}}(\phi),$$

$$H = \int \mathrm{d}^3x\mathcal{H}[\pi(x), \phi(x)] = \int \mathrm{d}^3x\left[\frac{1}{2}\pi^2(x) + V[\phi]\right].$$

場の変数を演算子に格上げすると、やはり Heisenberg 表示で表せる。

例）場の演算子

$$\hat{\phi}(x) = \hat{\phi}(\vec{x}, t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\,\hat{\phi}(\vec{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\,.$$

状態の時間発展も

$$|\phi, t\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}\,|\phi\rangle\,, \qquad \hat{\phi}(\vec{x})\,|\phi\rangle = \phi(\vec{x})\,|\phi\rangle\,,$$

$$\hat{\phi}(\vec{x}, t)\,|\phi, t\rangle = \phi(\vec{x})\,|\phi, t\rangle\,.$$

# 場の量子論の経路積分

場の量子論は連続パラメータ $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ で指定される無限個の場の変数 $\{\phi(\vec{x})\}$ を持つ無限自由度の量子力学だと思えばよい。

**位相空間の経路積分：**

$$\langle \phi_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | \phi_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle = \int_{\phi(\vec{x},t_\mathrm{I})=\phi_\mathrm{I}(\vec{x})}^{\phi(\vec{x},t_\mathrm{F})=\phi_\mathrm{F}(\vec{x})} \widetilde{\mathcal{D}\phi}\widetilde{\mathcal{D}\pi} \exp\left[ \mathrm{i} \int_{t_\mathrm{I}}^{t_\mathrm{F}} \mathrm{d}t\, \mathrm{d}^3x \left\{ \pi(x)\dot{\phi}(x) - \mathcal{H}[\pi(x), \phi(x)] \right\} \right].$$

ただし積分測度は

$$\widetilde{\mathcal{D}\phi}\widetilde{\mathcal{D}\pi} \propto \prod_{t_\mathrm{I} \le t \le t_\mathrm{F}} \prod_{\vec{x}} \mathrm{d}\phi(\vec{x}, t)\, \mathrm{d}\pi(\vec{x}, t).$$

**配位空間の経路積分：**

$$\langle \phi_\mathrm{F}, t_\mathrm{F} | \phi_\mathrm{I}, t_\mathrm{I} \rangle = \int \mathcal{D}\phi \exp\left[ \mathrm{i} \int_{t_\mathrm{I}}^{t_\mathrm{F}} \mathrm{d}t\, \mathrm{d}^3x \left\{ \frac{1}{2}(\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - m^2\phi) + \mathcal{L}_\mathrm{int}(\phi) \right\} \right] = \int \mathcal{D}\phi\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[\phi]}.$$

**生成汎関数：**

$$Z[J] = \frac{1}{Z[J=0]} \int \mathcal{D}\phi\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}S[\phi, J]}, \qquad J = J(t, \vec{x}).$$

# フェルミオンの経路積分

# Grassmann数

フェルミオン的な自由度、例えばPauliの排他律や

$$\left\{\hat{\psi}_\alpha(\vec{x}), \hat{\psi}^\dagger_\beta(\vec{y})\right\} = \delta^3(\vec{x}-\vec{y})\delta_{\alpha\beta},$$

のような関係を満たす対象を扱うため、Grassmann数を考える。

一変数のGrassmann数 $\xi$ の場合から始めよう。自身の反可換性から、

$$\xi\xi = -\xi\xi, \quad \to \quad \xi^2 = 0.$$

$\Rightarrow \xi$ の任意関数のべき展開は有限（この場合1次）で止まる:

$$f(\xi) = f_0 + f_1\xi.$$

Grassmann数の指数関数

$$\mathrm{e}^{c\,\xi} = 1 + c\,\xi, \qquad c \in \mathbb{C}.$$

# Grassmann積分

通常の積分が持つ以下の二つの性質を要請：

1. ある数係数 $a, b \in \mathbb{C}$ とGrassmannな関数 $f(\xi), g(\xi)$ の積分は次の線形性を持つ:
$$\int \mathrm{d}\xi [af(\xi) + bg(\xi)] = a \int \mathrm{d}\xi f(\xi) + b \int \mathrm{d}\xi g(\xi).$$
2. 境界項が消えて、部分積分が可能:
$$\int \mathrm{d}\xi \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} f(\xi)\right] = \int \mathrm{d}\xi \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(f_0 + f_1\xi)\right] = 0.$$

$\Rightarrow$

**Grassmann積分（一変数の場合）**

$$\int \mathrm{d}\xi\, 1 := 0, \qquad \int \mathrm{d}\xi\, \xi := 1.$$

これは、Grassmann数の積分は微分と同じであることを表している。

# Grassmann積分（多変数の場合）

**Grassmann積分（$N$ 変数 $(j = 1, \cdots, N)$ の場合）**

$$\int \mathrm{d}\xi_j \, 1 = 0, \qquad \int \mathrm{d}\xi_j \, \xi_j = 1,$$
$$\{\xi_j, \xi_k\} = \{\xi_j, \mathrm{d}\xi_k\} = \{\mathrm{d}\xi_j, \mathrm{d}\xi_k\} = 0.$$

Grassmann数を引数にする任意関数のべき展開

$$f(\xi) = f_0 + \sum_j f_j \xi_j + \sum_{j,k} f_{jk} \xi_j \xi_k + \cdots + f_N \xi_N \cdots \xi_1,$$
$$\Rightarrow \int \mathrm{d}^N \xi \, f(\xi) = f_N, \qquad \mathrm{d}^N \xi = \mathrm{d}\xi_1 \cdots \mathrm{d}\xi_N.$$

（他の次数では、必ず1つ以上 $\xi_j$ が含まれておらず、$\int \mathrm{d}\xi_j \, 1 = 0.$ ）

**複素Grassmann数：2つのGrassmann変数 $\xi_j, \eta_j$ を使って**

$$\psi_j = \xi_j + \mathrm{i}\eta_j, \quad \psi_j^* = \xi_j - \mathrm{i}\eta_j.$$

# Grassmann積分の変数変換

[1変数] $\xi' = a\xi,\ \mathrm{d}\xi = J\mathrm{d}\xi'$（$a$:数）の変数変換（$J$：Jabobian）

$$\int \mathrm{d}\xi\, a\xi = \int J\mathrm{d}\xi'\, \xi', \quad \Rightarrow \quad a = J.$$

（通常の積分に対してJacobianが逆数で現れるのが、Grassmann積分の特徴）

[$N$変数] $\xi'_j = \sum_k A_{jk}\xi_k,\ \mathrm{d}^N\xi = J\mathrm{d}^N\xi'$ の変数変換

$$\int \mathrm{d}^N\xi\, f(A\xi) = \int J\mathrm{d}^N\xi'\, f(\xi'),$$

の条件式のうち、左辺の $N$ 次項が

$$f_N \sum_{\{j_1,\cdots,j_N\}} (A_{Nj_N}\cdots A_{1j_1})\,\xi_{j_N}\cdots\xi_{j_1} = f_N \det A\cdot\xi_N\cdots\xi_1.$$

この項のGrassmann積分が右辺のそれと一致するので、

$$\mathrm{d}^N\xi = \det A\,\mathrm{d}^N\xi', \qquad J = \det A.$$

# Grassmann積分に関する関係式

## Fourier積分とデルタ関数

$$\int \mathrm{d}\xi\, \mathrm{e}^{\xi\eta} = \delta(\eta) = \eta.$$

## ガウス積分：$N$成分変数 $\xi, \eta$ と$N \times N$数行列 $A$を使って

$$\int \mathrm{d}\eta \mathrm{d}\xi \exp\left(\xi^{\mathsf{T}} A\eta\right) = \det A,$$

$$\mathrm{d}\eta \mathrm{d}\xi = (\mathrm{d}\eta_1 \mathrm{d}\xi_1) \cdots (\mathrm{d}\eta_N \mathrm{d}\xi_N) = \mathrm{d}\eta_N \cdots \mathrm{d}\eta_1 \mathrm{d}\xi_1 \cdots \mathrm{d}\xi_N.$$

**Proof.** $\eta$ の変数変換を通して

$$\int \mathrm{d}\eta \mathrm{d}\xi\, \mathrm{e}^{\xi^{\mathsf{T}} A\eta} = \det A \int \mathrm{d}\eta' \mathrm{d}\xi\, \mathrm{e}^{\xi^{\mathsf{T}} \eta'} = \det A \int \mathrm{d}\eta' \delta^N(\eta') = \det A. \quad \square$$

複素Grassmann数 $\psi_j, \psi_j^*$ に対しては

$$\int \mathrm{d}\psi \mathrm{d}\psi^* \exp\left(\psi^\dagger A\psi\right) = \det A.$$

# Grassmann積分に関する関係式

**生成汎関数：反交換するソース $J, J^*$ を導入して**

$$\int \mathrm{d}\psi \mathrm{d}\psi^* \exp\left(\psi^\dagger A\psi + J^\dagger\psi + \psi^\dagger J\right) = \det A\, \mathrm{e}^{-J^\dagger A^{-1} J}\,.$$

**Proof.**
指数部分を平方完成すると

$$\psi_j^* A_{jk}\psi_k + J_l^*\psi_l + \psi_l^* J_l = \left(\psi_j^* + J_l^* A_{lj}^{-1}\right) A_{jk}\left(\psi_k + A_{km}^{-1} J_m\right) - J_l^* A_{lm}^{-1} J_m.$$

積分変数を定数だけシフトさせた

$$\Psi_k = \psi_k + A_{km}^{-1} J_m, \qquad \Psi_j^* = \psi_j^* + J_l^* A_{lj}^{-1},$$

の変数変換から

$$\int \mathrm{d}\psi \mathrm{d}\psi^*\, \mathrm{e}^{\psi^\dagger A\psi + J^\dagger\psi + \psi^\dagger J} = \mathrm{e}^{-J^\dagger A^{-1} J} \int \mathrm{d}\Psi \mathrm{d}\Psi^*\, \mathrm{e}^{\Psi^\dagger A\Psi} = \det A\, \mathrm{e}^{-J^\dagger A^{-1} J}\,.$$

□

# 格子QCD計算でのフェルミオン経路積分

フェルミオンと結合したゲージ理論の経路積分は（Euclideanで）

$$Z = \int \mathcal{D}A\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi}\ \mathrm{e}^{-S[A,\psi,\bar{\psi}]},$$

$$S[A,\psi,\bar{\psi}] = S_{\mathrm{G}}[A] + S_{\mathrm{F}}[\psi,\bar{\psi};A].$$

フェルミオン作用の具体系を仮定すると

$$S_{\mathrm{F}}[\psi,\bar{\psi};A] = -\bar{\psi}D[A]\psi,$$

$$Z_{\mathrm{F}}[A] = \int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi}\,\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{F}}[\psi,\bar{\psi};A]} = \det D[A].$$

つまり、最初の経路積分を$A$ のみで書けて

$$Z = \int \mathcal{D}A\det D[A]\,\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{G}}[A]} = \int \mathcal{D}A\,\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{eff}}[A]},$$

$$S_{\mathrm{eff}}[A] := S_{\mathrm{G}}[A] - \log\det D[A].$$

実際の格子QCD計算：ゲージ場 $A_\mu(x) \to$ リンク変数 $U_\mu(x)$

# ゲージ理論

# なぜ格子正則化なのか？

QCDのような強結合なゲージ理論を取り扱う手法として、格子正則化がWilson によって1974年に提案された[1]（今年はちょうど50周年！）。

ゲージ理論の格子正則化が重宝されている理由

- 経路積分の有限性
- ゲージ対称性との相性のよさ
- クォークの閉じ込め（confinement）
- ...

# ゲージ対称性（冗長性）と発散

ゲージ群 $G$ でのゲージ場の作用（簡単のため、他の物質場を無視した）

$$S[A] = \int \mathrm{d}^4 x \, \mathcal{L}[A(x)].$$

作用は、ゲージ場の変換

$$A_\mu(x) \mapsto A^\theta_\mu(x) = U(\theta(x)) A_\mu(x) U^{-1}(\theta(x)) + \frac{\mathrm{i}}{g} U(\theta(x)) \partial_\mu U^{-1}(\theta(x)),$$

の下で作用は不変。ただし、$\theta(x) \in G$、$U(\theta(x))$ : $\theta(x)$ の表現行列

ゲージ変換を繰り返すと、

$$A_\mu \mapsto A^\theta_\mu \mapsto A^{\theta'}_\mu \mapsto \cdots ,$$

のように、関数空間上で軌道（gauge orbit）を描く。

（同じ軌道上では、作用 $S[A]$ などのゲージ不変な量は常に同じ値）

# ゲージ対称性（冗長性）と発散

ゲージ理論の経路積分は形式的に

$$Z = \int \mathcal{D}A \, \Psi_{\mathrm{F}}^{*} \Psi_{\mathrm{I}} \, \mathrm{e}^{-S[A]}, \qquad \mathcal{D}A := \prod_{x,\mu,a} \mathrm{d}A_{\mu}^{a}(x).$$

（始状態・終状態として物理的（ゲージ不変）な状態を適切に取る）

実際には、ゲージ変換の元 $U(\theta(x)) = \exp(\mathrm{i}g\theta^{a}(x)T_{a})$ に関する積分

$$\int \mathcal{D}U = \int \prod_{x} \int_{G} \mathrm{d}U(x) \overset{|\theta|\ll 1}{\sim} \int \prod_{x,a} \mathrm{d}\theta^{a}(x),$$

が「空回り」する分から発散が生じる。
⇒ 経路積分がwell-definedになっていない。

**Faddeev-Popovの処方 [2]**

経路積分に対してゲージ固定条件を課しておき、ゲージ変換由来の「空回り」積分因子を抜き出しておくことで、残りの有限部分を計算する。

# Faddeev-Popov処方

共変ゲージ（Landauゲージ）$\partial_\mu A_\mu = 0$ の場合のFP行列式は

$$\Delta^{-1}[A] := \int \mathcal{D}U \prod_{x,a} \delta\left(\partial_\mu \left(A^U\right)^a_\mu\right).$$

$\delta(\partial A)$：各ゲージ軌道上の関数から代表元を1つ選ぶ役割

経路積分$Z$に $1 = \int \mathcal{D}U \prod_{x,a} \delta\left(\partial_\mu \left(A^U\right)^a_\mu\right) \Delta[A]$, をかけると、($\Psi_{\mathrm{F}}^* \Psi_{\mathrm{I}} = \mathcal{A}$)

$$\begin{aligned}
Z &= \int \mathcal{D}U \int \mathcal{D}A\, \mathcal{A}\, \Delta[A^U]\, \mathrm{e}^{-S[A^U]} \prod_{x,a} \delta\left(\partial_\mu \left(A^U\right)^a_\mu\right) \\
&= \int \mathcal{D}U \int \mathcal{D}A'\, \mathcal{A}\, \Delta[A']\, \mathrm{e}^{-S[A']} \prod_{x,a} \delta\left(\partial_\mu \left(A'\right)^a_\mu\right) \\
&\qquad \left(\because \mathcal{D}A = \mathcal{D}A^U,\, A_\mu \mapsto A'_\mu = A^U_\mu\right) \\
&= \int \mathcal{D}A\, \mathcal{A}\, \Delta[A]\, \mathrm{e}^{-S[A]} \prod_{x,a} \delta\left(\partial_\mu (A)^a_\mu\right) \cdot \int \mathcal{D}U, \qquad (5.1)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ ゲージ不変な物理的状態について、経路積分表示が構成できた。

# 格子正則化とゲージ固定

格子正則化されたゲージ理論[1]の積分測度は

$$\mathcal{D}A \to \mathcal{D}U_{\mathrm{link}} := \prod_{x,\mu} \boxed{\mathrm{d}U_\mu(x)}, \qquad U_\mu(x) \in G.$$

大雑把には、（格子間隔 $a$）

$$U_\mu(x) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}agA_\mu(x)}.$$

各パラメータ$(x,\mu)$での測度：Haar測度（群 $G$ 上での不変測度）

$$\int \mathrm{d}U 1 = 1, \qquad \mathrm{d}(UV) = \mathrm{d}(VU) = \mathrm{d}U, \quad {}^\forall V \in G.$$

コンパクト群 $G$ かつ時空点が有限個なら、経路積分は発散なし

$\Leftrightarrow$ ゲージ固定せずに経路積分を実行できる！

# Elitzurの定理と物理量

## Elitzurの定理[3]

ゲージ不変でない演算子の期待値はゼロになる。観測可能な物理量はゲージ不変なものに限られる。 $\Leftrightarrow$ 「ゲージ対称性は自発的には破れない。」

**“証明” [4, 5].**

$$\langle O\rangle = \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}A\, O(A)\, \mathrm{e}^{-S[A]}\,.$$

ここで、ゲージ場を変数変換して$A^\theta$についての表式として書くと

$$\langle O\rangle = \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}A^\theta\, O(A^\theta)\, \mathrm{e}^{-S[A^\theta]} = \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}A\, O(A^\theta)\, \mathrm{e}^{-S[A]}\,.$$

作用と積分測度のゲージ不変性を使った。二式は同じ量なので、

$$0 = \int \mathcal{D}A \left(O(A) - O(A^\theta)\right) \mathrm{e}^{-S[A]}\,.$$

任意の$\theta$ で $O(A) = O(A^\theta)$ $\Rightarrow$ ゲージ不変量を考えるのが一番自然。
逆に$O(A) \neq O(A^\theta)$（ゲージ不変でない）なら、$\langle O\rangle = 0$. $\square$

# どうやって経路積分を計算するのか？

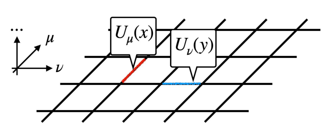
格子正則化して積分する自由度を有限に落としたが、それでもなお数値計算で扱う必要のある自由度の数は膨大。（“超” 多重積分による次元の呪い）

実際に数値計算する際には、工夫して積分の値を評価している：

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A\, O(A)\, \mathrm{e}^{-S[A]} \approx \frac{1}{N_{\mathrm{sample}}} \sum_{j=1}^{N_{\mathrm{sample}}} O(A^{(j)}).$$

$A^{(j)}$ ：確率分布 $P[A] := \mathrm{e}^{-S[A]}/Z$ に従って生成されたゲージ場の配位

（$(x,\mu)$ ごとにゲージ自由度を表す行列がある。）




モンテカルロ法（Monte Carlo method）は、疑似乱数を使って

$$\cdots \to A^{(j)} \xrightarrow{P[A]} A^{(j+1)} \xrightarrow{P[A]} \cdots \to A^{(N_{\mathrm{sample}})}.$$

確率分布 $P[A]$ に従って生成される列：マルコフ鎖 (Markov Chain)

$\Rightarrow$ マルコフ連鎖モンテカルロ法（Markov-Chain Monte Carlo method）

# さいごに

# さいごに

## 本講義で眺めたもの

まえがき

量子力学の経路積分

場の量子論の経路積分

フェルミオンの経路積分

ゲージ理論

## 本講義で扱えなかったもの

具体例での計算、摂動論、くりこみ、半古典近似（インスタントン等)、とじこめ、…

*Thank you!*

# Backups

# FP行列式の具体系

ゲージ変換は単位元近傍

$$U(x) \sim \mathbb{1} + \mathrm{i}g\theta^a(x)T_a,$$

のみを考えれば十分で、そのときのゲージ変換後のゲージ場は

$$\left(A^U\right)^a_\mu(x) = A^a_\mu(x) + \partial_\mu\theta^a(x) + gf_{abc}A^b_\mu(x)\theta^c(x) = A^a_\mu(x) + D_\mu\theta^a(x).$$

$$\Rightarrow \Delta^{-1}[A] = \int \mathcal{D}U \prod_{x,a} \delta(\partial_\mu D_\mu \theta^a(x)) = \mathrm{Det}^{-1}(\partial_\mu D_\mu).$$

ただし、デルタ関数の性質 $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$ の一般化

$$\delta^N(M\vec{x}) = \prod_{j=1}^{N} \delta\left(\sum_{k=1}^{N} M_{jk}x_k\right) = \frac{1}{\det M}\delta^N(x),$$

$$\xrightarrow{j\to x} \prod_x \delta(\mathcal{M}X(x)) = \mathrm{Det}^{-1}\,\mathcal{M}\prod_x \delta(X(x)),$$

の関係式を用いた。結局、汎関数行列式が得られた：

$$\Delta[A] = \mathrm{Det}(\partial_\mu D_\mu).$$

# あとがき

- 主に教科書 [6, 7, 8, 9]の内容に基づいている。また準備にあたっては、西岡辰磨氏の講義「場の量子論と量子エンタングルメント入門」（第1回極限宇宙スクール）も参考にした。
- 他にも経路積分の教科書としては、[10, 11, 12]等も有名である。
- 4章のフェルミオンの経路積分については、格子QCDの教科書 [13]も参考にした。
- 5章のゲージ理論の議論は、格子場の理論を扱った日本語の教科書 [14, 15, 16]から多くの影響を受けている。
- Faddeev-Popov処方の説明を含むゲージ場の理論の経路積分形式については、定番の教科書[7]に加えて、記事[17]が非常によくまとまっている。一度ゲージ理論を学んだ人でも一読の価値がある。

# Reference i


[1] K. G. Wilson, “Confinement of Quarks,” Phys. Rev. D **10** (1974) 2445–2459.

[2] L. D. Faddeev and V. N. Popov, “Feynman Diagrams for the Yang-Mills Field,” Phys. Lett. B **25** (1967) 29–30.

[3] S. Elitzur, “Impossibility of Spontaneously Breaking Local Symmetries,” Phys. Rev. D **12** (1975) 3978–3982.

[4] `https://archive.org/details/LectureAPCTPTanizaki/`.

[5] 川平将志氏、私信.

[6] 柏太郎,『量子力学選書 経路積分 –例題と演習–』, 裳華房, 2015.

[7] 九後汰一郎,『ゲージ場の量子論**I**』, 培風館, 1989.

[8] 中原幹夫,『理論物理学のための幾何学とトポロジー**I**』**[**原著第**2**版**]**, 日本評論社, 2018.

# Reference ii

[9] S. Weinberg, **The Quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations**, Cambridge University Press, 6, 2005.

[10] R. Feynman, A. Hibbs, and D. Styer, **Quantum Mechanics and Path Integrals**, Dover Publications, 2010.

[11] R. Feynman, A. Hibbs, D. Styer, and 北原和夫（訳）,『量子力学と経路積分（新版）』, みすず書房, 2017.

[12] 崎田文二 and 吉川圭二,『径路積分による多自由度系の量子力学』, 岩波書店, 1986.

[13] C. Gattringer and C. B. Lang, **Quantum chromodynamics on the lattice**, vol. 788, Springer, Berlin, 2010.

[14] 青木慎也,『格子上の場の理論』, 丸善出版, 2012.

# Reference iii


[15] 大川正典 and 石川健一, **SGCライブラリ140**『格子場の理論入門』, サイエンス社, 2018.

[16] 藤川和男, 『現代物理学叢書ゲージ場の理論』, 岩波書店, 2001.

[17] 九後汰一郎, 『ゲージ場の理論と経路積分』**, 数理科学 2019年2月号**, サイエンス社, 2019.