Wickの定理とSchwinger項の導出

塩崎　謙

February 3, 2024

1　Wickの定理

１粒子のHilbert空間の基底を$|k\rangle$とし，フェルミオンの生成消滅演算子を$\psi_k^\dagger, \psi_k$と書く．エネルギーをE_kと書き，添字kに対して条件$E_k > 0, E_k < 0$を単に$k > 0, k < 0$と書くことにする．$|0\rangle$を任意のkに対して$\psi_k |0\rangle = 0$を満たす真空とする．基底状態を

$$|\mathrm{GS}\rangle = \prod_{k<0} \psi_k^\dagger |0\rangle \tag{1}$$

として，正規順序

$$\ddagger\, \psi_k^\dagger \psi_l \,\ddagger = \begin{cases} -\psi_l \psi_k^\dagger & (k = l < 0), \\ \psi_k^\dagger \psi_l & (\text{else}), \end{cases} \tag{2}$$

を導入する．２体以上の演算子についても，$\ddagger\, \mathcal{O} \,\ddagger |GS\rangle = 0$なるように順番を入れ替える．順番の入れ替えに対して負号が生じる．

$$\ddagger\, \psi_k^\dagger \psi_l \,\ddagger = -\ddagger\, \psi_l \psi_k^\dagger \,\ddagger \tag{3}$$

に注意．より一般には，正規順序内でフェルミオン演算子を入れ替える際に負号が生じる．例えば$A_1, \dots, A_N$をフェルミオン生成消滅演算子，$\sigma \in S_N$を置換として，

$$\ddagger\, A_{\sigma_1} \cdots A_{\sigma_N} \,\ddagger = (-1)^\sigma \ddagger\, A_1 \cdots A_N \,\ddagger \tag{4}$$

である．

　フェルミオンの生成消滅演算子に対して縮約を

$$\overbracket{AB} := AB - \ddagger\, AB \,\ddagger \tag{5}$$

と定義する．記号

$$\delta_{kl>0} := \begin{cases} \delta_{kl} & (k = l > 0) \\ 0 & (\text{else}) \end{cases}, \quad \delta_{kl<0} := \begin{cases} \delta_{kl} & (k = l < 0) \\ 0 & (\text{else}) \end{cases} \tag{6}$$

を導入すると，

$$\overbracket{\psi_k^\dagger \psi_l} = \psi_k^\dagger \psi_l - \begin{cases} -\psi_l \psi_k^\dagger & (k = l < 0) \\ 0 & (\text{else}) \end{cases} = \delta_{kl<0}, \tag{7}$$

$$\overbracket{\psi_l \psi_k^\dagger} = \psi_l \psi_k^\dagger - \ddagger\, \psi_l \psi_k^\dagger \,\ddagger = \delta_{kl} - \psi_k^\dagger \psi_l + \ddagger\, \psi_k^\dagger \psi_l \,\ddagger = \delta_{kl} - \psi_k^\dagger \psi_l = \delta_{kl} - \delta_{kl<0} = \delta_{kl>0}, \tag{8}$$

$$\overbracket{\psi_k^\dagger \psi_l^\dagger} = \overbracket{\psi_k \psi_l} = 0 \tag{9}$$

となる．いずれもc数であることに注意．縮約はABが正規順序でない場合に非ゼロの値を持つ．正規順序は内部の演算子の順番を入れ替えても結果は符号が変化するだけであるが，縮約は演算子の順番に依存することに注意.

次にWickの定理を証明する．正規順序と縮約を同時に含む記法を導入する．フェルミオンの生成消滅演算子の集合$A_1,\dots,A_N$に対して，n個の対を

$$p_1,\dots,p_{2n}, \tag{10}$$
$$p_1<p_3<\cdots p_{2n-1}, \tag{11}$$
$$p_{2j-1}<p_{2j},\quad j=1,\dots,n, \tag{12}$$

で指定する．集合$\{1,\dots,N\}\backslash\{p_1,\dots,p_{2n}\}$の任意の順序付き集合を

$$q_1,\dots,q_{N-2n} \tag{13}$$

と書く． $p_1,\dots,p_{2n}$で指定される組に対する縮約を取った正規順序を

$$C_{\{p_i\}_{i=1}^{2n}}(A_1\cdots A_N):=\mathrm{sgn}\begin{pmatrix}1 & \cdots & N\\ p_1 & \cdots p_{2n}q_1\cdots & q_{N-2n}\end{pmatrix}\times\prod_{j=1}^{n}\overbracket{A_{p_{2j-1}}A_{p_{2j}}}\times\ddagger\, A_{q_1}\cdots A_{q_{N-2n}}\,\ddagger \tag{14}$$

と定義する．右辺は$q_1,\dots,q_{N-2n}$の選び方に依存しないことに注意． Wickの定理の主張は

$$A_1\cdots A_N=\sum_{n=0}^{\lfloor N/2\rfloor}\sum_{\{p_i\}_{i=1}^{2n}}C_{\{p_i\}_{i=1}^{2n}}(A_1\cdots A_N). \tag{15}$$

手計算の際は

$$A_1\cdots A_N=\ddagger\, A_1\cdots\,\ddagger+\sum_{\text{singles}}\ddagger\cdots\overbracket{A_i\cdots A_j}\cdots\,\ddagger+\sum_{\text{doubles}}\ddagger\cdots\overbracket{A_i\cdots A_j\cdots A_k}\cdots A_l\cdots\,\ddagger+\cdots \tag{16}$$

などと計算すると良い．帰納法で証明する．$N=2$は縮約の定義そのもの． $N=M$に対して成立を仮定する.

$$A_0A_1\cdots A_M=A_0\sum_{n=0}^{\lfloor M/2\rfloor}\sum_{\{p_i\}_{i=1}^{2n}}C_{\{p_i\}_{i=1}^{2n}}(A_1\cdots A_N) \tag{17}$$

である．各項は

$$\mathrm{sgn}\begin{pmatrix}1 & \cdots & N\\ p_1 & \cdots p_{2n}q_1\cdots & q_{N-2n}\end{pmatrix}\times\prod_{j=1}^{n}\overbracket{A_{p_{2j-1}}A_{p_{2j}}}\times A_0\ddagger\, A_{q_1}\cdots A_{q_{N-2n}}\,\ddagger \tag{18}$$

であるが，ここで$q_1\cdots q_{N-2n}$として，正規順序となる順番

$$\ddagger\, A_{q_1}\cdots A_{q_{N-2n}}\,\ddagger=A_{r_1}\cdots A_{r_k}A_{s_1}\cdots A_{s_l},\quad(k+l=N-2n), \tag{19}$$

を採用すると（$A_{r_1},\dots,A_{r_k}$は$\psi^\dagger_{a>0},\psi_{a<0}$のいずれかであり，$A_{s_1},\dots,A_{s_l}$は$\psi^\dagger_{a<0},\psi_{a>0}$のいずれかである.），

$$A_0\ddagger\, A_{q_1}\cdots A_{q_{N-2n}}\,\ddagger=A_0A_{r_1}\cdots A_{r_k}A_{s_1}\cdots A_{s_l} \tag{20}$$

A_0が$\psi^\dagger_{a>0},\psi_{a<0}$のいずれかの場合は新たな縮約は生じず，主張を得る． A_0が$\psi^\dagger_{a<0},\psi_{a>0}$のいずれかの場合は新たな縮約が生じる.

$$\begin{aligned}A_0A_{r_1}\cdots A_{r_k}&=\ddagger\, A_0A_{r_1}\cdots A_{r_k}\,\ddagger+\overbracket{A_0A_{r_1}}A_{r_2}\cdots A_{r_k}-\overbracket{A_0A_{r_2}}A_{r_1}\cdots A_{r_k}\\&\quad+\cdots+(-1)^{k-1}\overbracket{A_0A_{r_k}}A_{r_1}\cdots A_{r_{k-1}}\end{aligned} \tag{21}$$

より，A_0との縮約が加わる．よって示された.

2 Schwinger項

$\psi_a^\dagger, \psi_a$をそれぞれa', aと書くことにする．正規順序にある1体の演算子の積$\ddagger\, a'b \,\ddagger\ddagger\, c'd \,\ddagger$を計算する．単純計算より，

$$
\begin{aligned}
\ddagger\, a'b \,\ddagger\ddagger\, c'd \,\ddagger &= \ddagger\, a'bc'd + a'bc'd + a'bc'd + a'bc'd \,\ddagger \\
&= \ddagger\, a'bc'd \,\ddagger + \delta_{ad<0} \ddagger\, bc' \,\ddagger + \delta_{bc>0} \ddagger\, a'd \,\ddagger + \delta_{ad<0}\delta_{bc>0} \qquad (22)
\end{aligned}
$$

が得られる．これは，既に正規順序にしている添字の組$a'b, c'd$内の縮約は，可能な縮約の和に含めない，ということ．1粒子Hilbert空間上の行列$A = A_{ab}$に対して，

$$
Q(A) := \sum_{ab} A_{ab} \ddagger\, a'b \,\ddagger \qquad (23)
$$

と定義する．また，射影

$$
P_+ = \sum_{a>0} |a\rangle \langle a| , \quad P_- = \sum_{a<0} |a\rangle \langle a| \qquad (24)
$$

を導入し，記法

$$
A_{\epsilon\epsilon'} = P_\epsilon A P_{\epsilon'}, \quad \epsilon, \epsilon' \in \{+, -\} \qquad (25)
$$

も導入する．すると，

$$
\begin{aligned}
Q(A)Q(B) &= \sum_{abcd} A_{ab} B_{cd} (\ddagger\, a'bc'd \,\ddagger + \delta_{ad<0} \ddagger\, bc' \,\ddagger + \delta_{bc>0} \ddagger\, a'd \,\ddagger + \delta_{ad<0}\delta_{bc>0}) \qquad (26) \\
&= Q_2(A \otimes B) + Q(AP_+B - BP_-A) + \mathrm{tr}\,(A_{-+}B_{+-}). \qquad (27)
\end{aligned}
$$

ここで，

$$
Q_2(A \otimes B) = \sum_{abcd} A_{ab} B_{cd} \ddagger\, a'bc'd \,\ddagger \qquad (28)
$$

と書いた．つまり，

$$
Q_{0,2}(A \otimes B) = \sum_{abcd} A_{ab} B_{cd} a'bc'd \qquad (29)
$$

に対して，

$$
Q_2(A \otimes B) = \ddagger\, Q_{0,2}(A \otimes B) \,\ddagger \qquad (30)
$$

である．正規順序の中で演算子の順番を入れ替えることができるので，

$$
Q_2(A \otimes B) = Q_2(B \otimes A) \qquad (31)
$$

に注意．$Q_{0,2}(A \otimes B)$はこの性質を持たない．

交換子は

$$
\begin{aligned}
[Q(A), Q(B)] &= Q(AP_+B - BP_-A) + \mathrm{tr}\,(A_{-+}B_{+-}) - (A \leftrightarrow B) \qquad (32) \\
&= Q(AP_-B - BP_-A - BP_-A + AP_-B) + \mathrm{tr}\,(A_{-+}B_{+-} - B_{-+}A_{+-}) \qquad (33) \\
&= Q([A, B]) + S_2(A, B) \qquad (34)
\end{aligned}
$$

となる．

$$
S_2(A, B) := \mathrm{tr}\,(A_{-+}B_{+-} - B_{-+}A_{+-}) \qquad (35)
$$

はSchwinger項と呼ばれる．

3　高次積

同様にして，1 体の演算子 3 つの積は

$$
\begin{aligned}
&\ddagger\, a'b \ddagger\ddagger\, c'd \ddagger\ddagger\, e'f \,\ddagger \\
&= \ddagger a'bc'de'f \\
&+ a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f \\
&+ a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f + a'bc'de'f \\
&+ a'bc'de'f + a'bc'de'f\ddagger \qquad (36)\\
&= \ddagger\, a'bc'de'f \,\ddagger \\
&+ \ddagger\, \delta_{ad<0}bc'e'f + \delta_{af<0}bc'de' + \delta_{bc>0}a'de'f + \delta_{be>0}a'c'df + \delta_{cf<0}a'bde' + \delta_{de>0}a'bc'f \,\ddagger \\
&+ \ddagger\delta_{ad<0}\delta_{bc>0}e'f - \delta_{ad<0}\delta_{be>0}c'f - \delta_{ad<0}\delta_{cf<0}be' + \delta_{af<0}\delta_{bc>0}de' \\
&+ \delta_{af<0}\delta_{be>0}c'd + \delta_{bc>0}\delta_{de>0}a'f + \delta_{be>0}\delta_{cf<0}a'd + \delta_{cf<0}\delta_{de>0}a'b\ddagger \\
&- \delta_{ad<0}\delta_{be>0}\delta_{cf<0} + \delta_{af<0}\delta_{bc>0}\delta_{de>0}. \qquad (37)
\end{aligned}
$$

これから，

$$
\begin{aligned}
&Q(A)Q(B)Q(C) \\
&= Q_3(A\otimes B\otimes C) \\
&- Q_2(BP_-A\otimes C) - Q_2(CP_-A\otimes B) + Q_2(AP_+B\otimes C) + Q_2(AP_+C\otimes B) - Q_2(CP_-B\otimes A) + Q_2(BP_+C\otimes A) \\
&+ Q(C)\mathrm{tr}\,(AP_+BP_-) - Q(BP_-AP_+C) + Q(CP_-BP_-A) - Q(CP_-AP_+B) \\
&+ Q(B)\mathrm{tr}\,(AP_+CP_-) + Q(AP_+BP_+C) + Q(AP_+CP_-B) + Q(A)\mathrm{tr}\,(BP_+CP_-) \\
&- \mathrm{tr}\,(AP_+CP_-BP_-) + \mathrm{tr}\,(AP_+BP_+CP_-). \qquad (38)
\end{aligned}
$$

整理して，

$$
\begin{aligned}
&Q(A)Q(B)Q(C) \\
&= Q_3(A\otimes B\otimes C) \\
&+ Q_2(AP_+B\otimes C) + Q_2(AP_+C\otimes B) + Q_2(BP_+C\otimes A) \\
&- Q_2(BP_-A\otimes C) - Q_2(CP_-A\otimes B) - Q_2(CP_-B\otimes A) \\
&- Q(BP_-AP_+C) + Q(CP_-BP_-A) - Q(CP_-AP_+B) + Q(AP_+BP_+C) + Q(AP_+CP_-B) \\
&+ Q(C)\mathrm{tr}\,(AP_+BP_-) + Q(B)\mathrm{tr}\,(AP_+CP_-) + Q(A)\mathrm{tr}\,(BP_+CP_-) \\
&- \mathrm{tr}\,(AP_+CP_-BP_-) + \mathrm{tr}\,(AP_+BP_+CP_-) \qquad (39)\\
& \qquad (40)
\end{aligned}
$$

あるいは，

$$
\begin{aligned}
&Q(A)Q(B)Q(C) \\
&= Q_3(A\otimes B\otimes C) \\
&+ Q_2((AP_+B - BP_-A)\otimes C) + Q_2((AP_+C - CP_-A)\otimes B) + Q_2((BP_+C - CP_-B)\otimes A) \\
&- Q(BP_-AP_+C) + Q(CP_-BP_-A) - Q(CP_-AP_+B) + Q(AP_+BP_+C) + Q(AP_+CP_-B) \\
&+ Q(C)\mathrm{tr}\,(AP_+BP_-) + Q(B)\mathrm{tr}\,(AP_+CP_-) + Q(A)\mathrm{tr}\,(BP_+CP_-) \\
&- \mathrm{tr}\,(AP_+CP_-BP_-) + \mathrm{tr}\,(AP_+BP_+CP_-) \qquad (41)
\end{aligned}
$$

を得る...

4　3括弧

完全反対称積

$$[Q(A^1), Q(A^2), Q(A^3)] = \epsilon_{xyz} Q(A^x) Q(A^y) Q(A^z) \tag{42}$$

を計算しよう.

$$\begin{aligned}
[Q(A^1), Q(A^2), Q(A^3)] &= \frac{1}{2}\epsilon_{xyz} Q(A^x)[Q(A^y), Q(A^z)] && (43)\\
&= \frac{1}{2}\epsilon_{xyz} Q(A^x)\left(Q([A^y, A^z]) + S_2(A^y, A^z)\right) && (44)\\
&= \frac{1}{2}\epsilon_{xyz}\Big(Q_2(A^x \otimes [A^y, A^z]) + Q(A^x P_+ [A^y, A^z] - [A^y, A^z] P_- A^x)\\
&\quad + \mathrm{tr}\,(A^x_{-+}[A^y, A^z]_{+-}) + Q(A^x)\mathrm{tr}\,(A^y_{-+}A^z_{+-} - A^z_{-+}A^y_{+-})\Big). && (45)
\end{aligned}$$

5　４括弧

完全反対称積

$$[Q(A^1), Q(A^2), Q(A^3), Q(A^4)] = \epsilon_{xyzw} Q(A^x) Q(A^y) Q(A^z) Q(A^w) \tag{46}$$

を計算しよう.

$$\begin{aligned}
&[Q(A^1), Q(A^2), Q(A^3), Q(A^4)]\\
&= \frac{1}{4}\epsilon_{xyzw}[Q(A^x), Q(A^y)][Q(A^z), Q(A^w)] && (47)\\
&= \frac{1}{4}\epsilon_{xyzw}\left(Q([A^x, A^y]) + S_2(A^x, A^y)\right)\left(Q([A^z, A^w]) + S_2(A^z, A^w)\right) && (48)\\
&= \frac{1}{4}\epsilon_{xyzw}\Big(Q_2([A^x, A^y] \otimes [A^z, A^w]) + Q([A^x, A^y] P_+ [A^z, A^w] - [A^z, A^w] P_- [A^x, A^y])\\
&+ \mathrm{tr}\,([A^x, A^y]_{-+}[A^z, A^w]_{+-}) + Q([A^x, A^y])\mathrm{tr}\,(A^z_{-+}A^w_{+-} - A^w_{-+}A^z_{+-}) + Q([A^z, A^w])\mathrm{tr}\,(A^x_{-+}A^y_{+-} - A^y_{-+}A^x_{+-})\\
&+ \mathrm{tr}\,(A^x_{-+}A^y_{+-} - A^y_{-+}A^x_{+-})\mathrm{tr}\,(A^z_{-+}A^w_{+-} - A^w_{-+}A^z_{+-})\Big). && (49)
\end{aligned}$$