

Brillouin-Wigner 摂動論におけるツリー展開と
ループ総和法

石田和也

首都大学東京 理工学研究科
物理学専攻 素粒子理論研究室

2019年1月10日

目次

第 1 章	Introduction	2
第 2 章	摂動論	4
2.1	Gell-Mann-Low の定理	4
2.2	Rayleigh-Schrödinger 摂動論	6
2.3	Brillouin-Wigner 摂動論	8
2.4	BW 摂動論の利点	9
2.4.1	RS 摂動論の再現性	9
2.4.2	BW 級数の加速収束性	10
2.5	BW 摂動論の難点	11
第 3 章	再帰グリーン関数による BW 級数のループ再総和	13
3.1	部分空間 M_n 上の全グリーン関数	13
3.2	再帰グリーン関数	15
3.3	ツリー展開とループ総和	17
3.4	厳密な自己無撞着方程式	20
第 4 章	BW 摂動論との比較	23
4.1	RS-BW-RBW 理論間の関係性	23
4.2	Resummed Brillouin-Wigner 摂動論の高収束性	24
4.3	強結合領域への拡張	26
第 5 章	先行研究	29
第 6 章	まとめ	31
付録 A		32
A.1:	再帰関係式 (3.12) の導出	32
A.2:	定理の証明	32
謝辞		36

第1章 Introduction

場の理論において素粒子同士の相互作用を近似的に記述するために摂動論はその中心を担っている。通常、この摂動論は結合定数のべきによる漸近展開として物理量を近似できることを期待する。しかしながら摂動計算において時に摂動近似を破綻させるような発散するループグラフが摂動項に含まれることがあり、回避策としてこれらはある種の総和法である繰り込み処方によって除去される [1]。一方で、場の理論の基礎となる量子力学においても類似のループグラフが存在し、それらは永年項と呼ばれている。永年項もまた長時間領域での摂動論を破綻させることで知られており、時間依存する摂動論では微分方程式における繰り込み手続き [2, 3] や multi-scale analysis [4, 5]、最近ではハイゼンベルグ形式での交換関係条件による除去スキーム [6] が研究されている。これらの処方の共通点はループグラフの再総和によって摂動論が改善されることであり、このように場の理論に限らず量子力学においてもループグラフの再総和が可能であることを示唆し、両者の摂動論をループグラフの再総和という観点から対応関係や類似例を調べることは非常に興味深い。

本研究では量子力学における時間依存しない摂動論を中心に摂動級数のループ再総和の可能性を議論した。エネルギー固有値問題に対する Rayleigh-Schrödinger (RS) 摂動論 [7, 8] は naive な摂動展開として最も有名であり、古くから研究されている。それに対して射影演算子からアプローチする Brillouin-Wigner (BW) 摂動論 [9] は RS 摂動論に比べ速い収束性や RS 摂動論の内包性などの観点から優れていると考えられている。特にこれはエネルギー固有値 E に関する次の自己無撞着方程式を与え、場の理論における Dyson 方程式のプロトタイプ [10] となっている。

$$E = Z_0 + \lambda Z_1(E) + \lambda^2 Z_2(E) + \lambda^3 Z_3(E) + \dots \quad (1.1)$$

また、これらの RS 摂動論に対する優位性は全てある種の自己エネルギー項を再総和した形式を持つことに由来している。そして自己エネルギーは diagram の観点からループグラフに対応しているので、BW 摂動論はループグラフについての再総和理論とみなすことができる。しかしながら自己エネルギー以外のループグラフについては考慮しておらず、もし完全に全てのループグラフを再総和できた場合、それは高次の項を正確に取り込んだ理論となる。したがってそれは BW 摂動論よりも高精度・高収束する解を与えるだろうと期待できる。

本研究の目的は BW 摂動論におけるすべてのループグラフの総和法の構築である。先の予想をもとにまずは、BW 摂動論を量子遷移の観点から再検討し、そのと

き簡単のため、離散スペクトルを持つ N 準位非縮退系を考える。この制限は系が離散スペクトル系であることを除き、後に適用範囲の拡張や $N \rightarrow \infty$ などの極限をとることで外すことができる。そしてループグラフの再総和をスムーズに実行するために本研究では再帰グリーン関数法を採用した。これは BW 級数から系統的にループグラフの分離を可能にし、複雑な diagram を簡潔にする。第 5 章では本研究の成果であるループ再総和された BW 摂動公式は先行研究となる Feenberg 摂動公式 [11] の型違いであることを指摘し、本質的に等価であることを確認した。またこれは Mower [12] によっても導出されており、したがって本研究は再帰グリーン関数による Mower 型の Feenberg 摂動公式の再導出を行ったことに相当する。

第2章 摂動論

本章ではまず、場の理論と量子力学の摂動論に共通する発散ループグラフの存在について確認する。これは Gell-Mann-Low の定理 [13] と深く関わりがあり、量子力学では時間依存する摂動論の永年項として知られる。その次に二つの時間依存しない摂動論 (Rayleigh-Schrödinger 摂動論、Brillouin-Wigner 摂動論) をループ再総和の観点から一通り復習し Brillouin-Wigner 摂動論の利点と難点について紹介する。

2.1 Gell-Mann-Low の定理

場の理論において相互作用を通した素粒子の遷移確率は S 行列の計算によって求められる。この S 行列は無窮大の過去における自由真空から無窮大の未来までの自由真空の断熱遷移過程をもとに構築されており、その時の真空状態は Gell-Mann-Low の定理により記述される。そしてこの定理は量子力学においても成立するので、diagrammatic に両者の摂動論を俯瞰するにはとても良い例となる。ここでは量子力学の側面から直接摂動計算を行い、量子力学と場の理論におけるループグラフの対応関係の一例を簡単に説明する。

Gell-Mann-Low の定理とは無窮大の過去から自由真空 $|\bar{0}\rangle$ に相互作用 $\lambda\hat{V}$ を断熱的に加えたとき、下式で定義される真空 $|0\rangle$ は $\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$ の固有状態になるという主張である。

$$|0\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}_\epsilon(0, -\infty) |\bar{0}\rangle}{\langle \bar{0} | \hat{U}_\epsilon(0, -\infty) | \bar{0} \rangle} \quad (2.1)$$

$\hat{U}_\epsilon(0, -\infty)$ は相互作用表示での $t = -\infty$ から $t = 0$ までの時間発展演算子であり、非摂動ハミルトニアン \hat{H}_0 の第 i 準位の固有状態を $|i\rangle$ 、固有エネルギーを ω_i とするとそれは以下のシュレディンガー方程式を満たす。

$$i \frac{d}{dt} \hat{U}_\epsilon = \lambda \hat{V}_{int} e^{-\epsilon|t|} \hat{U}_\epsilon, \quad \hat{V}_{int} = \sum_{i,j} |i\rangle V_{ij} \langle j| e^{i\omega_{ij}t} \quad (2.2)$$

ここで $\omega_{ij} = \omega_i - \omega_j$ 、 $\langle i | \hat{V} | j \rangle = V_{ij}$ とした。

したがって $\hat{U}_\epsilon(0, -\infty)$ は初期条件 $\hat{U}_\epsilon(t = -\infty) = \hat{1}$ としたとき以下のようにダイソソ級数で展開することができる

$$\hat{1} + (-i\lambda) \int_{-\infty}^0 \hat{V}_{int}(t) e^{\epsilon t} dt + \frac{1}{2!} (-i\lambda)^2 \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^0 T\{\hat{V}_{int}(t) \hat{V}_{int}(t')\} e^{\epsilon(t+t')} dt' dt \dots \quad (2.3)$$

このように結合定数 λ で摂動展開される。 λ の次数は相互作用の回数を意味し例えば n 次の摂動項は $-\infty < t < 0$ の間に n 回の相互作用を受けた摂動状態を表す。

このダイソソ級数は量子力学に限らず多体系の場の理論でも登場するととも汎用性の高い式である。しかし実は右辺の各項には以下のような極限 $\epsilon \rightarrow 0$ で発散する項を含んでおり、これらは永年項と呼ばれている。

$$\begin{aligned} (-i\lambda) \sum_i |i\rangle \frac{V_{ii}}{\epsilon} \langle i|, & \quad (-i\lambda)^2 \sum_{i \neq j} |j\rangle \frac{V_{ji}}{i\omega_{ji} + 2\epsilon} \frac{V_{ii}}{\epsilon} \langle i| \\ (-i\lambda)^2 \sum_{i \neq j} |i\rangle \frac{V_{ij}}{2\epsilon} \frac{V_{ji}}{i\omega_{ji} + \epsilon} \langle i|, & \quad (-i\lambda)^2 \frac{1}{2} \sum_i |i\rangle \left(\frac{V_{ii}}{\epsilon}\right)^2 \langle i| \end{aligned} \quad (2.4)$$

ダイソソ級数に現れる全ての永年項はその遷移ダイアグラムにループグラフを含み、断熱過程の場合では分母の極として発散を引き起こす。時間依存する摂動論の観点からはこれらは永年項問題として扱われ、主に multi-scale analysis や微分方程式に関する繰り込み手続きなどにより指数関数型の位相として再総和することができる。そして発散パート ϵ^{-n} を除くループグラフはエネルギー固有値の補正つまり自己エネルギーとして寄与し、最終的に級数の収束性を回復できることが知られている。そのときの断熱遷移状態は形式的に

$$\hat{U}_\epsilon(0, -\infty) |\bar{0}\rangle = \exp\left(-i \int_{-\infty}^0 E_{0_\epsilon}(\tau) dt\right) |0_\epsilon\rangle \quad (2.5)$$

ここで E_{0_ϵ} 、 $|0_\epsilon\rangle$ は λ の二次の摂動補正で以下のように与えられる。

$$E_{0_\epsilon}(\tau) = \omega_{\bar{0}} + \lambda V_{\bar{0}\bar{0}} e^\tau + \lambda^2 \sum_{i \neq \bar{0}} \frac{V_{\bar{0}i} V_{i\bar{0}}}{\omega_{\bar{0}i} + i\epsilon} e^{2\tau} \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} |0_\epsilon\rangle = & |\bar{0}\rangle + \lambda \sum_{i \neq \bar{0}} |i\rangle \frac{V_{i\bar{0}}}{\omega_{\bar{0}i} + i\epsilon} \\ & + \lambda^2 \left(\sum_{i, j \neq \bar{0}} |j\rangle \frac{V_{ji} V_{i\bar{0}}}{(\omega_{\bar{0}j} + i2\epsilon)(\omega_{\bar{0}i} + i\epsilon)} - \sum_{i \neq \bar{0}} |i\rangle \frac{V_{i\bar{0}} V_{\bar{0}\bar{0}}}{(\omega_{\bar{0}i} + i2\epsilon)(\omega_{\bar{0}i} + i\epsilon)} \right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

確かに極限 $\epsilon \rightarrow 0$ で $|0_\epsilon\rangle$ は全ハミルトニアン $\hat{H} \equiv \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$ の固有状態になる事が分かる。そしてその極限における (2.5) 式は量子力学の断熱定理そのものを表して

おり、特に位相パートのエネルギーについての長時間積分が(2.4)式の永年項の要因となっている。更に(2.1)式の定義ではちょうどこの位相パートが分母でキャンセルされ、発散ループグラフのない真空-真空遷移が実現されている。

場の理論においてもこの永年項に対応する発散ループグラフは存在し、それは真空泡グラフと呼ばれている。真空泡グラフはそのダイアグラムに連結する外線を持たないため観測される素粒子の遷移過程に寄与しない。それゆえに先の永年項と同様に(2.1)式で定義した真空は真空泡グラフがキャンセルされて出現しない表式となる。このように場の理論と量子力学には扱う系が一粒子・多粒子系や相対論的共変性の有無など大きく異なるにもかかわらず永年項と真空泡グラフはどちらも発散するループグラフとして対応しており、GML定理ではそれらを分母でキャンセルするという同じ機構を持ち合わせている。ところで場の理論にはこの真空泡グラフ以外にも真空-真空遷移(固有状態)の摂動計算で発散するループグラフが出現し、それらは繰り込み処方によって再総和される。一方で量子力学ではそれに対応する発散ループグラフは存在せず、したがって繰り込み処方などのループグラフの再総和を必要としない。しかし先の永年項と真空泡グラフの対応関係を考慮すれば、量子力学においても固有状態に含まれるループグラフは再総和の可能性が残されていると推測できる。実際、このような再総和理論は存在しており次節では時間依存しない摂動論を中心にループ再総和について議論を進める。

2.2 Rayleigh-Schrödinger 摂動論

改めて時間依存しない摂動論を考えると、それは以下の時間依存しない Rayleigh-Schrödinger 方程式で記述される。

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (2.8)$$

このとき微小パラメーター λ がハミルトニアンに含まれていることから固有エネルギー E_n と固有状態 $|\psi_n\rangle$ も λ 依存性を持つ。しかし今、 λ が十分小さいことを考慮すると、その影響もまた微小であり、それ故に次のように固有エネルギー E_n と固有状態 $|\psi_n\rangle$ を結合定数 λ で近似的に展開できる。

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \end{aligned}$$

これらを(2.8)式に代入し λ の次数ごとに整理すると、それは λ についての恒等式となるので、任意の次数で次式が得られる。

$$\begin{aligned} \lambda^0; & \quad \hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\ \lambda^1; & \quad \hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{V} |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\ \lambda^2; & \quad \hat{H}_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{V} |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \\ & \quad \vdots \end{aligned}$$

まず λ^0 式から見ていくと、これはまさに \hat{H}_0 の固有方程式なので、固有状態 $|n\rangle$, 固有値 ω_n が解となる。次に λ^1 において、 λ^0 式の解を代入し $|\psi_n^{(1)}\rangle$ についてまとめると

$$(\omega_n - \hat{H}_0) |\psi_n^{(1)}\rangle = (\hat{V} - E_n^{(1)}) |n\rangle \quad (2.9)$$

したがって左辺に逆演算子 $\frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0}$ を左から作用させれば求めることができる。しかし、これは $|n\rangle$ に作用するとき定義できないので、右辺に $|n\rangle$ 成分を含むか確かめる必要がある。試しに左から $\langle n|$ を掛けてみると

$$\begin{aligned} \langle n| (\omega_n - \hat{H}_0) |\psi_n^{(1)}\rangle &= \langle n| (\hat{V} - E_n^{(1)}) |n\rangle \\ \langle n| (\omega_n - \omega_n) |\psi_n^{(1)}\rangle &= \langle n| (\hat{V} - E_n^{(1)}) |n\rangle \\ 0 &= \langle n| (\hat{V} - E_n^{(1)}) |n\rangle \end{aligned} \quad (2.10)$$

\hat{H}_0 のエルミート性より直ちに左辺は 0 となり、つまり右辺は $|n\rangle$ 成分を含まないことがわかる。したがって逆演算子 $\frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0}$ は (2.9) 式において正当性を持ち、一次の摂動解は次のように書ける。ⁱ

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} |n\rangle \quad E^{(1)} = \langle n| \hat{V} |n\rangle \quad (2.11)$$

ここで、演算子形式で記述するために補足的な射影演算子 \hat{P}_n を導入した。定義、性質は以下のとおりである。

$$\hat{P}_n = \hat{1} - |n\rangle\langle n| = \sum_{i \neq n}^N |i\rangle\langle i| \quad \frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n = \sum_{i \neq n}^N \frac{|i\rangle\langle i|}{\omega_n - \omega_i} \quad (2.12)$$

このように演算子法を用いた解法は任意の次数でも成立し systematic に摂動解を構築できる。例として二次までの摂動解は下式で表される。

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= |n\rangle + \lambda \frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} |n\rangle + \lambda^2 \frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} \frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} |n\rangle \\ &\quad - \lambda^2 \frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \langle n| \hat{V} |n\rangle \frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} |n\rangle \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$E_n = \omega_n + \lambda \langle n| \hat{V} |n\rangle + \lambda^2 \langle n| \hat{V} \frac{1}{\omega_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} |n\rangle \dots$$

また (2.12) 式により、いつでも添え字を露にすることができる。 $\langle i| \hat{V} |j\rangle = V_{ij}$, $\omega_i - \omega_j = \omega_{ij}$ などを用いれば

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \lambda \sum_{i \neq n}^N |i\rangle \frac{V_{in}}{\omega_{ni}} + \lambda^2 \left(\sum_{i,j \neq n}^N |j\rangle \frac{V_{ji} V_{in}}{\omega_{nj} \omega_{ni}} - \sum_{i \neq n}^N |i\rangle \frac{V_{in} V_{nn}}{\omega_{ni}^2} \right) \dots \quad (2.14)$$

$$E_n = \omega_n + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{i \neq n}^N \frac{V_{ni} V_{in}}{\omega_{ni}} \dots \quad (2.15)$$

ⁱ一次のエネルギー補正 $E_n^{(1)}$ は (2.10) 式から導かれることに注意。

この添え字表記では遷移行列 V のラベルに注目することで量子遷移を見ることができる。

2.3 Brillouin-Wigner 摂動論

前節では最も基礎的な摂動論として RS 摂動論を紹介した。これは広く普及し、時間依存しない摂動論の代表格となっている。一方で、時間依存しない系における摂動論は他にも提唱されており、それは Brillouin-Wigner(BW) 摂動論と呼ばれている。これはしばしば量子化学の分野で利用されており、RS 摂動論に比べていくつかの利点を有することが指摘されている。特に注目すべき性質として、これはエネルギーについての自己無撞着方程式を与える。

BW 理論の特徴はエネルギー固有値と固有状態を直接 λ で展開しないことである。その代わりに、固有状態を以下のように摂動・非摂動パートに分割し

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + |\phi_n\rangle \quad \hat{P}_n |\phi_n\rangle = |\phi_n\rangle \quad (2.16)$$

このとき $|\phi_n\rangle$ が摂動による変化成分であり、 $|n\rangle$ 成分は持たないとする。したがって、(2.8) 式に \hat{P}_n を左から掛け、 $|\phi_n\rangle$ について整理すると次式を得る。

$$\left[\hat{1} - \lambda \frac{1}{E_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} \right] |\phi_n\rangle = \lambda \frac{1}{E_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} |n\rangle \quad (2.17)$$

途中、交換関係 $[\hat{H}_0, \hat{P}_n] = 0$ や逆演算子 $\frac{1}{E_n - \hat{H}_0}$ を用いた。ⁱⁱ

これは $|\phi_n\rangle$ についての線形方程式であり、 λ が十分に小さい時、次のノイマン級数で表示された逆演算子を用いることで形式的に $|\phi_n\rangle$ を得ることができる。

$$\left[\hat{1} - \lambda \frac{1}{E_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} \right]^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\lambda \frac{1}{E_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} \right)^l \quad (2.18)$$

$$|\phi_n\rangle = \sum_{l=1}^{\infty} \left(\lambda \frac{1}{E_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} \right)^l |n\rangle \quad (2.19)$$

一方で、エネルギー固有値 E_n は (2.8) 式に左から $\langle n|$ を掛けることにより得られ

$$E_n = \omega_n + \lambda \langle n | \hat{V} | \psi_n \rangle = \omega_n + \lambda \langle n | \hat{V} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\lambda \frac{1}{E_n - \hat{H}_0} \hat{P}_n \hat{V} \right)^l |n\rangle \quad (2.20)$$

ⁱⁱ逆演算子 $\frac{1}{E_n - \hat{H}_0}$ の正当性は (2.9) 式以降の議論と同様にして言えるので問題なく式変形できる。

結局、エネルギー固有値問題は以下の連立方程式に書き直される。

$$E_n = \omega_n + \Delta_{nn}(E_n) \quad (2.21)$$

$$\Delta_{nn}(E_n) = \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{i \neq n}^N \frac{V_{ni} V_{in}}{E_n - \omega_i} + \lambda^3 \sum_{i \neq n}^N \sum_{j \neq n}^N \frac{V_{nj} V_{ji} V_{in}}{(E_n - \omega_j)(E_n - \omega_i)} + \dots \quad (2.22)$$

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \lambda \sum_{i \neq n}^N \frac{V_{in}}{E_n - \omega_i} |i\rangle + \lambda^2 \sum_{i \neq n}^N \sum_{j \neq n}^N \frac{V_{ji} V_{in}}{(E_n - \omega_j)(E_n - \omega_i)} |j\rangle + \dots \quad (2.23)$$

明らかに (2.21) 式の右辺には未知のエネルギー固有値 E_n がエネルギー補正項 $\Delta_{nn}(E_n)$ を通して各項の分母に現れており、 E_n について陽に表示された RS 摂動公式 (2.15) とは大きく異なる。これは E_n についての自己無撞着な方程式となり、一般に反復法や steffensen 法 [14] などの数値解析法を用いることでエネルギーを求めることができる。そして、そのエネルギー固有値を (2.23) 式に代入することで固有状態 $|\psi_n\rangle$ が決定され、この一連の流れが BW 摂動論の計算手続きとなる。

2.4 BW 摂動論の利点

RS 摂動論は結合定数 λ についての直接的な摂動展開で近似解が構築されるのに対し、BW 摂動論ではノイマン級数により固有エネルギー E_n ・固有状態 $|\psi_n\rangle$ は表現される。特に後者に関しては E_n についての自己無撞着な理論形式を持ち、この性質は BW 理論に対して様々な利点を与えることが知られている。以下ではこのことについて 2 つの主な利点を紹介する。

2.4.1 RS 摂動論の再現性

RS と BW 摂動論には最も重要な関係があり、それは”RS 摂動論は BW 摂動論の近似として導出される”という事実である [9]。このことは実際に BW 摂動公式を E_n について逐次的に代入し、 λ の次数で近似することで確かめることができる。例として $\mathcal{O}(\lambda^3)$ まで考慮した BW 摂動公式は

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \lambda \sum_{i \neq n}^N |i\rangle \frac{V_{in}}{E_n - \omega_i} + \lambda^2 \sum_{i, j \neq n}^N |j\rangle \frac{V_{ji} V_{in}}{(E_n - \omega_j)(E_n - \omega_i)} + \lambda^3 \sum_{i, j, k \neq n}^N |k\rangle \frac{V_{kj} V_{ji} V_{in}}{(E_n - \omega_k)(E_n - \omega_j)(E_n - \omega_i)} + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad (2.24)$$

$$E_n = \omega_n + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{i \neq n}^N \frac{V_{ni} V_{in}}{E_n - \omega_i} + \lambda^3 \sum_{i, j \neq n}^N \frac{V_{nj} V_{ji} V_{in}}{(E_n - \omega_j)(E_n - \omega_i)} + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad (2.25)$$

このとき (2.25) 式における 3 次までのエネルギー補正項を $\Delta_{nn}^{(3)}$ として置き、次のような幾何級数展開を各項に施すと

$$\begin{aligned} \frac{1}{E_n - \omega_i} &= \frac{1}{\omega_n + \Delta_{nn}^{(3)} - \omega_i} \\ &= \frac{1}{\omega_{ni}} + \frac{1}{\omega_{ni}} (-\Delta_{nn}^{(3)}) \frac{1}{\omega_{ni}} + \frac{1}{\omega_{ni}} (-\Delta_{nn}^{(3)}) \frac{1}{\omega_{ni}} (-\Delta_{nn}^{(3)}) \frac{1}{\omega_{ni}} \dots \end{aligned} \quad (2.26)$$

ここで $\Delta_{nn}^{(3)} \sim \mathcal{O}(\lambda)$ であるとした。また、エネルギー補正項はそれ自身にも E_n を各項の分母に有しているのでもそれらについても入れ子構造式に展開し、 λ について 3 次までの近似を行えば、次式を得る。

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= |n\rangle + \lambda \sum_{i \neq n} |i\rangle \frac{V_{in}}{\omega_{ni}} + \lambda^2 \sum_{i,j \neq n} |j\rangle \frac{V_{ji}V_{in}}{\omega_{nj}\omega_{ni}} + \lambda^3 \sum_{i,j,k \neq n} |k\rangle \frac{V_{kj}V_{ji}V_{in}}{\omega_{nk}\omega_{nj}\omega_{ni}} \\ &+ \left[-\lambda^2 \sum_{i \neq n} |i\rangle \frac{V_{in}V_{nn}}{\omega_{ni}^2} - \lambda^3 \sum_{i,j \neq n} |j\rangle \frac{V_{ji}V_{in}V_{nn}}{\omega_{nj}^2\omega_{ni}} - \lambda^3 \sum_{i,j \neq n} |j\rangle \frac{V_{ji}V_{in}V_{nn}}{\omega_{nj}\omega_{ni}^2} \right. \\ &\quad \left. + \lambda^3 \sum_{i \neq n} |i\rangle \frac{V_{in}V_{nn}^2}{\omega_{ni}^3} - \lambda^3 \sum_{i,j \neq n} |i\rangle \frac{V_{in}V_{nj}V_{jn}}{\omega_{ni}\omega_{nj}^2} \right] \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$E_n = \omega_n + \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{i \neq n} \frac{V_{ni}V_{in}}{\omega_{ni}} + \lambda^3 \sum_{i,j \neq n} \frac{V_{nj}V_{ji}V_{in}}{\omega_{nj}\omega_{ni}} - \left[\lambda^3 \sum_{i \neq n} \frac{V_{ni}V_{in}V_{nn}}{\omega_{ni}^2} \right] \quad (2.28)$$

これは 3 次までの RS 摂動公式に等しく、確かに RS 摂動論は BW 摂動論の近似理論として見做すことができる。特に、上式において角括弧内の項は全てエネルギー補正項 $\Delta_{nn}^{(3)}$ についての展開で現れたものであり、いずれも以下のような自己エネルギー項と連結している事が分かる。

$$\lambda V_{nn} \quad \lambda^2 \sum_{i \neq n} \frac{V_{ni}V_{in}}{\omega_{ni}} \quad (2.29)$$

一方でこの RS と BW 摂動論の関係は逆に解釈することができ、BW 摂動公式は上記の自己エネルギー項をあらかじめ幾何級数の形で取り込んでいると言える。そして量子遷移の解釈から、これらの自己エネルギーは全て $n \rightarrow n$ ループグラフに対応しているので、BW 摂動論は RS 摂動論の $n \rightarrow n$ ループ再総和理論と見做すことができる。この解釈は本研究で取り扱うエネルギー固有状態に関する全てのループグラフの再総和の可能性を示唆するものである。

2.4.2 BW 級数の加速収束性

第 2 の BW 摂動論の利点として、Lennard-Jones(1930 年 [15]) と Brillouin(1935 年) は (2.24) 式の BW 級数は RS 級数に比べて早く収束することに気づいた。これ

は先の RS と BW 摂動論の関係性から見る事ができ、明らかに BW 級数は RS 級数に比べて高次の自己エネルギー項を (2.26) 式の形であらかじめ含んでいる。特に簡単な $N = 2$ の場合では厳密解を与えることで BW 摂動論はしばしば有名であり、ここではそれを例にとり、BW 級数の収束性について見る。まず始めに、 $N = 2$ 準位系のハミルトニアンは一般に行列形式で以下のように置かれる。

$$\mathbf{H}_0 = \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & \omega_2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{bmatrix}$$

このとき基底状態 $n = 1$ に対する BW 摂動公式は

$$E_1 = \omega_1 + \lambda V_{11} + \lambda^2 \frac{V_{12}V_{21}}{E_1 - \omega_2} + \lambda^3 \frac{V_{12}V_{22}V_{21}}{(E_1 - \omega_2)^2} + \lambda^4 \frac{V_{12}V_{22}V_{22}V_{21}}{(E_1 - \omega_2)^3} \dots \quad (2.30)$$

$$|\psi_1\rangle = |1\rangle + |2\rangle \left(\lambda \frac{V_{21}}{E_1 - \omega_2} + \lambda^2 \frac{V_{22}V_{21}}{(E_1 - \omega_2)^2} + \lambda^3 \frac{V_{22}V_{22}V_{21}}{(E_1 - \omega_2)^3} \dots \right) \quad (2.31)$$

上式において遷移行列要素 V_{22} に注目すると、各式はちょうど幾何級数で展開されていることが分かる。したがってその部分に関して幾何級数公式によりまとめることができ上式は次のコンパクトな形に書き直すことができる。

$$E_1 = \omega_1 + \lambda V_{11} + \lambda^2 \frac{V_{12}V_{21}}{E_1 - \omega_2 - \lambda V_{22}} \quad (2.32)$$

$$|\psi_1\rangle = |1\rangle + \lambda \frac{V_{21}}{E_1 - \omega_2 - \lambda V_{22}} |2\rangle \quad (2.33)$$

当然、右辺は無限級数ではなくなり、 λ の 2 次までの式で完結し E_1 , $|\psi_1\rangle$ についての厳密な方程式を与える。そして (2.32) 式は E_1 についての 2 次方程式であり条件 $E_1 \rightarrow \omega_1$ ($\lambda \rightarrow 0$) の下で厳密なエネルギー固有値 E_1 を得る。

$$E_1 = \frac{1}{2} \left(\omega_1 + \omega_2 + \lambda(V_{11} + V_{22}) + \sqrt{(\omega_{12} + \lambda(V_{11} - V_{22}))^2 + 4\lambda^2|V_{12}|^2} \right) \quad (2.34)$$

このように $N = 2$ の場合、BW 摂動公式は (2.32)(2.33) 式の書き換えのような再総和を行うことで厳密なエネルギーを与えることが分かる。また今の場合、 λ は十分に小さいとして幾何級数公式を用いたが、解析接続の観点から (2.32)(2.33) 式は強結合領域 $\lambda \sim 1$ まで拡張できる。それ故に通常の RS 級数では発散するような λ についても厳密なエネルギー固有値 E_1 を与える事ができるので BW 摂動論は大きな利点を持つと考えられている。

2.5 BW 摂動論の難点

前節で見たように BW 摂動論はエネルギー固有値 E_n についての自己無撞着方程式を持ち、RS 級数に比べ BW 級数は収束が早いことや、特別な場合 ($N = 2$) に

は厳密解を与えてくれるなどの利点があることを紹介した。しかし後者はかなり限定的な場合にのみ活かされる利点であり一般の $N \geq 3$ などの場合、BW 摂動論ではコンパクトな摂動公式を与えてくれない。当然、摂動論の立場としては前者の収束加速性は十分な効果を発揮するが、(2.32) 式のような自己無撞着形式による解の厳密性は一般に失われる [9]。このことは BW 摂動論の不利な側面として知られており、具体的には実際の数値計算を行う上では全ての次数を考慮することはできないので自己無撞着方程式 (2.21) を有限次数でカットする必要がある。それ故に数値解析で十分に収束する数値解を得たとしてもそれは必ず有限の誤差を含み、厳密なエネルギー固有値に任意の精度で収束するような数値解を求めることは不可能となる。

例えば、 λ の m 次までの摂動補正を考えたとき自己無撞着方程式は下式となり

$$\mathcal{E}_n = \omega_n + \Delta_{nn}^{(m)}(\mathcal{E}_n) \quad (2.35)$$

これは反復的な数値解析法で十分に収束するような数値解 \mathcal{E}_n を求めることができる。しかし、本来無限級数で表現されている自己無撞着方程式を有限級数として近似しているので、厳密なエネルギー固有値 E_n に一致する保証はない。つまり近似の代償としてその数値解は $\mathcal{O}(\lambda^{m+1})$ の誤差を含む。

$$E_n = \mathcal{E}_n + \mathcal{O}(\lambda^m) \quad (2.36)$$

当然、誤差を小さく抑えるには高次の補正項まで考慮する必要があるが、いずれにせよ数値計算を行うには無限級数を取り扱うことは不可能なので次数による近似は必須となる。また、この近似に関するもう一つの難点として強結合領域での公式の適用が不可能となることが挙げられる。これは BW 級数がもともと λ についての漸近展開として導かれているので $\lambda \sim 1$ の場合は適用できないことから明白である。

しかし、前節でも見たように $N = 2$ のときは簡単な幾何級数公式によって本来は無限級数として与えられる (2.32) 式は近似することなく二次までの有限級数に書き直すことができた。そしてその式はエネルギー固有値 E_n についての厳密な自己無撞着方程式となり上記二つの難点を克服することができる。そのとき注目すべきこととして、(2.33) 式には一切のループグラフを含んでいないことに気が付く。そもそも $1 \rightarrow 1$ ループグラフは BW 摂動論ではすでに自己エネルギー項としてエネルギー分母にまとめられており、これが RS 摂動論の再総和理論という解釈であった。そして (2.32)(2.33) 式で行った幾何級数公式による総和は自己エネルギーとは異なる他のループグラフ ($2 \rightarrow 2$) についての再総和を意味し、そのおかげで自己無撞着方程式は厳密な有限級数で表される。したがってもし BW 摂動論における全てのループグラフを再総和する方法が存在すれば、それは $N \geq 3$ の場合でもエネルギー固有値に関する厳密な自己無撞着方程式を与えるものと期待できる。

第3章 再帰グリーン関数によるBW級数のループ再総和

この章ではBW級数におけるループグラフの再総和を systematic に実行する。その第一ステップとして、まずはBW級数から全てのループグラフを分離するスキームを考える。このループ分離スキームは量子遷移の観点から構築され、BW級数の遷移解釈を見やすくする点で重要な役割を担っている。

3.1 部分空間 M_n 上の全グリーン関数

このループ分離スキームの基本となる考え方は、グリーン関数を対角・非対角要素に分離して計算することである。そのことを見るために、以下の形で書かれた(2.17)式に立ち戻って議論を始めよう。

$$\hat{P}_n[\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}]\hat{P}_n|\phi_n\rangle = (-i\lambda)\hat{P}_n\hat{W}|n\rangle, \quad \hat{W} = \frac{-i}{\hat{H}_0 - E_n}\hat{P}_n\hat{V} \quad (3.1)$$

ここで、冪等律 $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$ と二つの射影関係式 $\hat{P}_n|\phi_n\rangle = |\phi_n\rangle$ 、 $\hat{P}_n\hat{W} = \hat{W}$ を用いた。この式は右辺をソース $(-i\lambda)\hat{P}_n\hat{W}|n\rangle$ とした摂動パートの状態 $|\phi_n\rangle$ についての発展方程式とみなすことができる。そして上式は部分空間 M_n 上で記述されていることに気づけば、その全グリーン関数もまた以下のような M_n 上で定義できることが分かる。

$$\hat{P}_n[\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}]\hat{P}_n\hat{G} = \hat{P}_n, \quad \hat{P}_n\hat{G}\hat{P}_n = \hat{G} \quad (3.2)$$

行列形式では n 行 n 列を取り除いた $(N-1) \times (N-1)$ 小行列で記述され

$$\sum_{j \neq n}^N [\delta_{ij} - (-i\lambda)W_{ij}]G_{jk} = \delta_{ik}, \quad \text{for } i, k \neq n \quad (3.3)$$

したがって、このグリーン関数はまさに $i, j \neq n$ に対する主小行列 $[\delta_{ij} - (-i\lambda)W_{ij}]$ の逆行列と等価であることが分かる。また、 λ が十分小さい時にはその主小行列は正則であることから問題なく \hat{G} を定義できることに注意したい。

量子遷移の観点からすると行列要素 G_{ji} は M_n 空間に属する第 i から第 j 固有状態への全遷移振幅を意味し、それは全ての可能なダイアグラム ($i \rightarrow j$) から構成さ

れている。このことは具体的に (3.3) 式から G_{ji} をノイマン級数表示することで理解でき

$$G_{ji} = \delta_{ji} + (-i\lambda)W_{ji} + (-i\lambda)^2 \sum_{\alpha \neq n}^N W_{j\alpha} W_{\alpha i} + (-i\lambda)^3 \sum_{\beta \neq n}^N \sum_{\alpha \neq n}^N W_{j\beta} W_{\beta\alpha} W_{\alpha i} \cdots \quad (3.4)$$

このとき W_{ji} を BW 摂動論における基本的な遷移振幅もしくはプロパゲーター ($i \rightarrow j$) と見做せば、各項は図 3. 1 に示すように λ の次数に応じたあらゆるダイアグラムを表す。

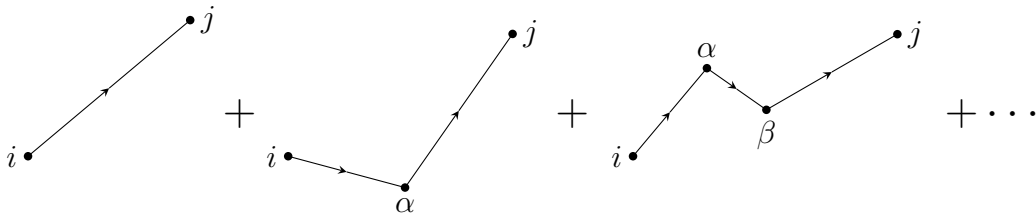


図 3.1: $i \neq j$ のときのダイアグラム

したがってその対角要素 G_{ii} は $i \rightarrow i$ ループグラフに対応し、摂動状態 $|\phi_n\rangle$ は全グリーン関数を用いて形式的に以下の分離した式で書ける。

$$|\phi_n\rangle = (-i\lambda)\hat{G}\hat{P}_n\hat{W}|n\rangle = (-i\lambda) \sum_{i \neq n}^N \sum_{j \neq n, i}^N |j\rangle G_{ji} W_{in} + (-i\lambda) \sum_{i \neq n}^N |i\rangle G_{ii} W_{in} \quad (3.5)$$

確かに上式の第二項は G_{ij} で記述された $i \rightarrow i$ ループグラフを含んでおり、この意味で \hat{G} の対角項としてループグラフを分離することができる。しかしこの分離方法は実は不完全であり、非対角要素 G_{ji} にはまだ遷移ダイアグラム ($i \rightarrow j$) と連結した他のループグラフが残されている。以降の議論ではそのことについてもう少し具体的に調べていく。

全グリーン関数 \hat{G} を対角・非対角要素に分けて計算するために、以下の分離を施したケットベクトル $\hat{G}|i\rangle$ ($i \neq n$) に焦点を当てて計算を進める。

$$\hat{G}|i\rangle = |g_i\rangle + |i\rangle G_{ii}, \quad |g_i\rangle = \sum_{j \neq i, n}^N |j\rangle G_{ji} \quad (3.6)$$

そのとき、この分離表現において射影演算子 $\hat{P}_{i,n} \equiv \hat{P}_n - |i\rangle\langle i|$ を導入すると表記は簡単になる。(これは $|n\rangle, |i\rangle$ を除くすべての非摂動固有状態で張られる部分空間 $M_{i,n}$ への射影演算子であり、 $\hat{P}_{i,n}\hat{G}|i\rangle = |g_i\rangle$ の関係が成り立つ) そして (3.6) 式

を (3.2) 式に代入し、左から $\hat{P}_{i,n}$ を掛けると、以下の対角要素 $|i\rangle G_{ii}$ と非対角要素 $|g_i\rangle$ の重要な関係式を得る。

$$\hat{P}_{i,n} [\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}] \hat{P}_{i,n} |g_i\rangle = (-i\lambda) \hat{P}_{i,n} \hat{W} |i\rangle G_{ii} \quad (3.7)$$

この式もまた (3.1) 式と同様に $|g_i\rangle$ についての発展方程式と見做すことができ、部分空間 $M_{i,n}$ 上で記述される。したがって、 $|\phi_n\rangle$ を求めた時と同じくグリーン関数 \hat{G}' を導入することで非対角要素 $|g_i\rangle$ を形式的に書き下すことができ

$$|g_i\rangle = (-i\lambda) \sum_{j \neq i,n}^N \sum_{k \neq j,i,n}^N |k\rangle G'_{kj} W_{ji} G_{ii} + (-i\lambda) \sum_{j \neq i,n}^N |j\rangle G'_{jj} W_{ji} G_{ii}, \quad \text{for } i \neq n \quad (3.8)$$

また、(3.7) 式に対するグリーン関数 \hat{G}' は以下のように $M_{i,n}$ 上で定義される。

$$\hat{P}_{i,n} [\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}] \hat{P}_{i,n} \hat{G}' = \hat{P}_{i,n}, \quad \hat{P}_{i,n} \hat{G}' \hat{P}_{i,n} = \hat{G}' \quad (3.9)$$

(3.8) 式を見ると、確かに非対角要素 $|g_i\rangle$ は対角要素 G_{ii} と G'_{jj} で記述されたループグラフを含んでおり、 \hat{G} の対角要素だけではループグラフを分離できていないことがわかる。更に非対角要素 G'_{kj} も G_{ji} と同様に他のループグラフを分離しないまま保持しているが、それは部分空間 $M_{i,n}$ 上の遷移振幅を記述するので、 G'_{kj} は $i \rightarrow i \neq n$ ループグラフを含まない。言い換えれば \hat{G}' の導入によって $|g_i\rangle$ に含まれている分離されるべきループグラフの種類は一つだけ減ることを意味する。したがって今度は非対角パート $|g'_j\rangle$ について繰り返し \hat{G}' のようなグリーン関数を導入すれば、全てのループグラフはそれらの対角要素として分離できるだろう。次節ではこの反復スキームを任意のステップまで拡張可能な表記方法で構築する。

3.2 再帰グリーン関数

前節での反復スキームを systematic に行うために、次のような変数集合を採用する：初期状態の主量子数を $\tau_0 \equiv n$ 、そして τ_0 につづく中間状態変数を τ_1, τ_2, \dots と置く。そのとき、 k -step における再帰グリーン関数 $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ を次のように定義する。

$$\hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} [\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}] \hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} \hat{G}_{[\mathbf{p}_k]} = \hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} \quad k = 1, 2, \dots, N-1 \quad (3.10)$$

ここで \mathbf{p}_k は変数 $\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_{k-1}$ から成る k -tuple であり、 $\hat{P}_{[\mathbf{p}_k]}$ は第 $\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_{k-1}$ 準位を除くすべての固有状態で張られた部分空間 $M_{[\mathbf{p}_k]}$ への射影演算子である。

$$\mathbf{p}_k = [\tau_{k-1}, \dots, \tau_1, \tau_0] \quad \hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} \equiv \sum_{\substack{\tau_k \neq \tau_i \\ i < k}}^N |\tau_k\rangle \langle \tau_k| \quad (3.11)$$

この定義において、1-step の $\hat{G}_{[\mathbf{p}_1]}$ は前節での全グリーン関数 \hat{G} に相当する。またここでも $\hat{P}_{[\mathbf{p}_k]}\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}\hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} = \hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ は成立し、グリーン関数の存在保証のため λ は十分に小さいとする。以下の議論ではこれらの再帰グリーン関数の性質について言及する。

まず初めに、この再帰グリーン関数の導入目的は全グリーンの非対角要素 $|g_i\rangle$ からすべてのループグラフをひとつずつ分離することである。詳細な導出は付録 A.1 で示すとして、 $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ と $\hat{G}_{[\mathbf{p}_{k+1}]}$ には次の関係式が成立する。

$$|g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]} = (-i\lambda)\hat{G}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} \hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} \hat{W} |\tau_k\rangle G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]} \quad (3.12)$$

再帰関係式の形式で書き直すと

$$|g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]} = (-i\lambda) \sum_{\substack{\tau_{k+1} \neq \tau_i \\ i < k+1}}^N \left(|g_{\tau_{k+1}}\rangle_{[\mathbf{p}_{k+1}]} + |\tau_{k+1}\rangle G_{\tau_{k+1}\tau_{k+1}[\mathbf{p}_{k+1}]} \right) W_{\tau_{k+1}\tau_k} G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]} \quad (3.13)$$

上式において $|g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]}$ はケットベクトル $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]} |\tau_k\rangle$ の非対角要素であり、また $G_{ij[\mathbf{p}_k]}$ は行列要素 $\langle i | \hat{G}_{[\mathbf{p}_k]} | j \rangle$ を表す。この再帰関係式は $\hat{G}_{[\mathbf{p}_{k+1}]}$ によって非対角要素 $|g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]}$ に含まれる $\tau_k \rightarrow \tau_k$ ループグラフを $G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ として分離できることを意味する。それ故に (3.13) 式を逐次的に実行し $|g_{\tau_1}\rangle_{[\tau_0]}$ を展開したとき、全グリーン関数に含まれるループグラフはそれぞれ対角要素 $G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]} (0 < k < N)$ として分離されることになる。

次に角括弧で括られた添え字 \mathbf{p}_k の起源について言及する。この \mathbf{p}_k 依存性は $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ を導入するまでの 1 から k -step までの反復スキームの副産物として発生する。もう少し具体的に説明すると、この反復スキームでは各 i -step ($i = 1, 2, \dots, k-1$) において、 $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ の τ_i 列ベクトルに注目して計算を行うので、結果的に k -step で定義された物理量はそれまでの k -tuple $[\tau_{k-1}, \dots, \tau_1, \tau_0]$ に依存することになる。そのとき、それらの \mathbf{p}_k 依存性を $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ 、 $\hat{P}_{[\mathbf{p}_k]}$ 、 $M_{[\mathbf{p}_k]}$ などと記述することにした。更に \mathbf{p}_k について留意すべきことがもう一つあり、それは \mathbf{p}_k には $\tau_0 = n$ とした主量子数の集合 $\{1, 2, \dots, N\}$ の k -順列が代入されることである。このことは射影演算子の各変数にかかる総和条件 $\tau_i \neq \tau_{i'} \text{ for } i' < i < k$ から理解でき、明らかにそれは k -順列の生成スキームである。したがって、このことを考慮すれば \mathbf{p}_k の順序総数 $n_p(k)$ 、 $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ の総数 $n_G(k)$ 、 $M_{[\mathbf{p}_k]}$ の次元は以下のように与えられる。

$$n_p(k) = {}_{N-1}P_{k-1}, \quad n_G(k) = {}_{N-1}C_{k-1}, \quad \dim(M_{[\mathbf{p}_k]}) = N - k \quad (3.14)$$

ここで $n_G(k)$ のカウントにおいて $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ は変数 $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{k-1}$ の入れ替えに対して対称であることを使った。

最後に再帰グリーン関数の性質についてまとめると、 k -step 時の $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ は $N - k$ 種類の分離されるべきループグラフ ($i \rightarrow i \neq \tau_0, \dots, \tau_{k-1}$) をその行列要素に保有す

る一方で、 k 種類のループグラフ ($i \rightarrow i = \tau_0, \dots, \tau_{k-1}$) は k ステップ以降の再帰グリーン関数には現れない。これらは定義からも明らかで $\hat{G}_{[p_k]}$ は $N - k$ 次元の部分固有空間でのプロパゲーターであるゆえに、含むループグラフと含まれないループグラフははっきりしている。後者は既に $\hat{G}_{[p_i]}$ ($i < k$) の対角要素として分離されていることを意味し、図 3.2 では $\hat{G}_{[p_k]}$ の導入アルゴリズムとその役割を示した。特に $(N - 1)$ -step 時では分離されるべきループグラフは最後の一つとなり、それはこの反復スキームには終わりがあることを意味している。言い換えれば全部で $2^{N-1} - 1$ 個の再帰グリーン関数を計算することにより非摂動状態 $|\phi_{\tau_0}\rangle$ が求まる。そして次節で示すように、このループ分離スキームの有限性はよりコンパクトな BW 摂動公式を与える要因となる。

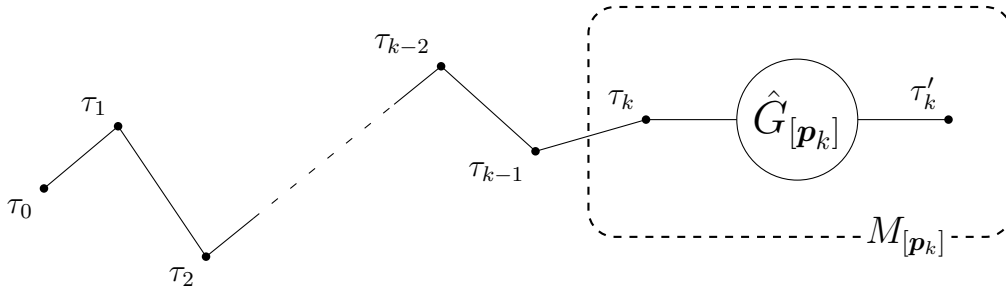


図 3.2: k -step 時の再帰グリーン関数 $\hat{G}_{[p_k]}$ は部分空間 $M_{[p_k]}$ 上のプロパゲーターとして定義され、第 $\tau_k - \tau'_k$ 準位間の量子遷移を記述する。

3.3 ツリー展開とループ総和

前節では再帰グリーン関数を用いたループ分離スキームの構築を行い、それは N 準位系の場合有限回の操作ですべてのループグラフの分離を可能にすることを確認した。今度は実際に (3.13) 式を用いて再帰グリーン関数を計算し、BW 級数におけるすべてのループグラフを再総和する方法を考える。

まず初めに (3.13) 式を反復的に解く際、次の 2 点について留意する。

1. $(N - 1)$ -step におけるケットベクトル $|g_{\tau_{N-1}}\rangle_{[p_{N-1}]}$ は任意の p_{N-1} に対して常に 0 である。
2. 摂動状態 $|\phi_{\tau_0}\rangle$ を 0-step におけるケットベクトル $|g_{\tau_0}\rangle_{[p_0]}$ と形式的に見做すことができる。

前者は (3.12) 式から明らかであり、射影演算子 $\hat{P}_{[p_{N-1}]}$ は任意の p_{N-1} に対して常に 0 である。一方で、後者は 0-step 時の $\hat{G}_{[p_0]}$ を次のように置くことで達成される。

$$|g_{\tau_0}\rangle_{[]} = (-i\lambda)\hat{G}_{[\tau_0]}\hat{P}_{[\tau_0]}\hat{W}|\tau_0\rangle G_{\tau_0\tau_0[]} \rightarrow |\phi_{\tau_0}\rangle \quad \text{if we assume } G_{\tau_0\tau_0[]} = 1 \quad (3.15)$$

ここで \mathbf{p}_0 は 0-tuple に相当するので数学記法に則り、以降では $[\mathbf{p}_0]$ を $[\]$ と記すことにする。したがってこれら 2つの条件に従えば、初期条件を $|g_{\tau_{N-1}}\rangle_{[\mathbf{p}_{N-1}]} = 0$ とおいた (3.13) 式を逐次的に $k = N - 1$ から 0 まで実行することで摂動状態 $|\phi_{\tau_0}\rangle$ を直接的に構築することができる。

(3.13) 式を簡単にするため、一度以下のような置き換えを行う。

$$|\tilde{g}_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]} = \frac{1}{G_{\tau_k \tau_k}[\mathbf{p}_k]} |g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]}, \quad \tilde{W}_{\tau_{k+1} \tau_k} = G_{\tau_{k+1} \tau_{k+1}[\mathbf{p}_{k+1}]} W_{\tau_{k+1} \tau_k} \quad (3.16)$$

これらの置き換えの上でも先の二つ条件は変わらないことに注意: $|\tilde{g}_{\tau_{N-1}}\rangle_{[\mathbf{p}_{N-1}]} = 0$ かつ $|\tilde{g}_{\tau_0}\rangle_{[\]} = |\phi_{\tau_0}\rangle$ そのとき、再帰関係式は次のように書き直すことができ

$$|\tilde{g}_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]} = (-i\lambda) \sum_{\substack{\tau_{k+1} \neq \tau_i \\ i < k+1}}^N \left(|\tilde{g}_{\tau_{k+1}}\rangle_{[\mathbf{p}_{k+1}]} + |\tau_{k+1}\rangle \right) \tilde{W}_{\tau_{k+1} \tau_k} \quad (3.17)$$

そして上式を逐次的に使うことで $|\tilde{g}_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]}$ は形式的に求められる。

$$\begin{aligned} |\tilde{g}_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]} &= (-i\lambda) \sum_{\substack{\tau_{k+1} \neq \tau_i \\ i < k+1}}^N |\tau_{k+1}\rangle \tilde{W}_{\tau_{k+1} \tau_k} + (-i\lambda)^2 \sum_{\substack{\tau_{k+1} \neq \tau_i \\ i < k+1}}^N \sum_{\substack{\tau_{k+2} \neq \tau_i \\ i < k+2}}^N |\tau_{k+2}\rangle \tilde{W}_{\tau_{k+2} \tau_{k+1}} \tilde{W}_{\tau_{k+1} \tau_k} \\ &+ \dots + (-i\lambda)^{N-k-1} \sum_{\substack{\tau_{k+1} \neq \tau_i \\ i < k+1}}^N \sum_{\substack{\tau_{k+2} \neq \tau_i \\ i < k+2}}^N \dots \sum_{\substack{\tau_{N-1} \neq \tau_i \\ i < N-1}}^N |\tau_{N-1}\rangle \left(\tilde{W}_{\tau_{N-1} \tau_{N-2}} \dots \tilde{W}_{\tau_{k+2} \tau_{k+1}} \tilde{W}_{\tau_{k+1} \tau_k} \right) \end{aligned} \quad (3.18)$$

この右辺はさらに簡略的に書き直され

$$\sum_{l=1}^{N-k-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\mathbf{p}_{k+1}]}}} (-i\lambda)^l |\tau_{k+l}\rangle \left(\tilde{W}_{\tau_{k+l} \tau_{k+l-1}} \dots \tilde{W}_{\tau_{k+2} \tau_{k+1}} \tilde{W}_{\tau_{k+1} \tau_k} \right) \quad (3.19)$$

このとき $Q_{[\mathbf{p}_{k+1}]}$ は集合 $\{1, 2, \dots, \alpha, \dots, N | \alpha \neq \tau_0, \tau_1, \dots, \tau_k\}$ を表し、ダミー変数 $\tau_{k+1}, \dots, \tau_{k+l}$ についての総和は全ての $Q_{[\mathbf{p}_{k+1}]}$ の l -順列をとるものとする。したがって、最終的に固有状態 $|\psi_{\tau_0}\rangle = |\tau_0\rangle + |\tilde{g}_{\tau_0}\rangle_{[\]}$ と固有エネルギー E_{τ_0} は

$$|\psi_{\tau_0}\rangle = |\tau_0\rangle + \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^l |\tau_l\rangle \left(\tilde{W}_{\tau_l \tau_{l-1}} \dots \tilde{W}_{\tau_2 \tau_1} \tilde{W}_{\tau_1 \tau_0} \right) \quad (3.20)$$

$$E_{\tau_0} = \omega_{\tau_0} + i \left[(-i\lambda) V_{\tau_0 \tau_0} + \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^{l+1} V_{\tau_0 \tau_l} \left(\tilde{W}_{\tau_l \tau_{l-1}} \dots \tilde{W}_{\tau_2 \tau_1} \tilde{W}_{\tau_1 \tau_0} \right) \right] \quad (3.21)$$

ここでも (3.21) 式は (2.20) 式と同じ手続きで与えられる。これらの式と第 2 章で与えた BW 摂動公式と比較したとき、もっとも大きな違いは (3.20)(3.21) 式はどちらも有限級数としてのコンパクトな形を持つことである。この摂動級数の有限性は 3.2 節でも見た有限回のループ分離スキームから起因しており、これは近似を用いることなく E_{τ_0} と $|\psi_{\tau_0}\rangle$ についての方程式を導出できることを意味する。しかしその一方で、未だに $\tilde{W}_{\tau_k\tau_{k-1}}$ に含まれている非対角要素 $G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ についての表式を具体的に与えていない。したがって、ここからは $G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ に対応するループグラフの再総和を実行し、ループ再総和された摂動公式を完成させる。

$G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ について計算するために、(3.10) 式に対して $|\tau_k\rangle$ で期待値を取り (3.18) 式を用いると、これは次のように与えられる。

$$G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]} = \frac{1}{1 - (-i\lambda)W_{\tau_k\tau_k} - (-i\lambda)\langle\tau_k|\hat{W}|\tilde{g}_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]}} = \frac{1}{1 - \frac{-i}{\omega_{\tau_k} - E_{\tau_0}}(-i\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]})} \quad (3.22)$$

ここで $-i\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]} (k = 1, 2, \dots, N-1)$ は以下の有限級数を表し

$$(-i\lambda)V_{\tau_k\tau_k} + \sum_{l=1}^{N-k-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\mathbf{p}_{k+1}]}}} (-i\lambda)^{l+1} V_{\tau_k\tau_{k+l}} \left(\tilde{W}_{\tau_{k+l}\tau_{k+l-1}} \cdots \tilde{W}_{\tau_{k+2}\tau_{k+1}} \tilde{W}_{\tau_{k+1}\tau_k} \right) \quad (3.23)$$

よって、 $\tilde{W}_{\tau_k\tau_{k-1}}$ は以下のように式変形される。

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{\tau_k\tau_{k-1}} &= G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]} W_{\tau_k\tau_{k-1}} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{1}{\omega_{\tau_k} - E_{\tau_0}} \Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}} \times \frac{-iV_{\tau_k\tau_{k-1}}}{\omega_{\tau_k} - E_{\tau_0}} \\ &= \frac{-iV_{\tau_k\tau_{k-1}}}{\omega_{\tau_k} + \Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]} - E_{\tau_0}} \end{aligned} \quad (3.24)$$

量子遷移の観点から見たとき、これはループグラフの振幅 $G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ は $W_{\tau_k\tau_{k-1}}$ のエネルギー分母 ω_{τ_k} を自己エネルギー $\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ の分だけシフトさせることを意味している。言い換えれば、その再総和された遷移振幅 $\tilde{W}_{\tau_k\tau_{k-1}}$ はループ補正を受けた effective なダイアグラム ($\tau_{k-1} \rightarrow \tau_k \neq \tau_{k-1}$) を表しており、この解釈のもとではループグラフは摂動状態から完全に消えることになる。このことを明確にするために、次の shifted energy $E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ を導入し (3.20)(3.21) 式を (3.24) 式で置き換えると

$$E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]} = \omega_{\tau_k} + \Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (3.25)$$

ここで自己エネルギー $\Delta_{\tau_k \tau_k[\mathbf{p}_k]}$ の定義式は

$$-i\Delta_{\tau_k \tau_k[\mathbf{p}_k]} \equiv (-i\lambda)V_{\tau_k \tau_k} + \sum_{\substack{\text{single loops} \\ \text{on } M[\mathbf{p}_k]}} \left(\sum_{l=1}^{N-k-1} (-i\lambda)^{l+1} \frac{V_{\tau_k \tau_{k+l}} \cdots V_{\tau_{k+2} \tau_{k+1}} V_{\tau_{k+1} \tau_k}}{iE_{\tau_{k+l} \tau_0} \cdots iE_{\tau_{k+1} \tau_0}} \right) \quad (3.26)$$

同様に、 $|\psi_{\tau_0}\rangle$ も書き換えられる。

$$|\psi_{\tau_0}\rangle = |\tau_0\rangle + \sum_{\text{trees}} \left(\sum_{l=1}^{N-1} (-i\lambda)^l \frac{V_{\tau_l \tau_{l-1}} \cdots V_{\tau_2 \tau_1} V_{\tau_1 \tau_0}}{iE_{\tau_l \tau_0} \cdots iE_{\tau_2 \tau_0} iE_{\tau_1 \tau_0}} |\tau_l\rangle \right) \quad (3.27)$$

このとき $E_{\tau_i \tau_0}$ はエネルギー差 $E_{\tau_i[\mathbf{p}_i]} - E_{\tau_0}$ を表し、また $k=0$ の時には $E_{\tau_0[\]} = E_{\tau_0}$ であることを用いた。(3.26)(3.27) 式の書き換えにおいて、量子遷移のダイナミクスを明確にするために次の2つの総和則を導入した。(3.27) 式における”trees” は各エネルギー準位をグラフの頂点とした時、与えられているヒルベルト空間 $M[\]$ 上のすべてのツリーグラフについて遷移振幅の和をとり、また(3.26) 式の”single loops on $M[\mathbf{p}_k]$ ” は部分空間 $M[\mathbf{p}_k]$ 上のすべての単ループグラフについて総和することを意味している。グラフ理論ではこれらのツリーと単ループグラフはそれぞれ paths と cycles に対応している。

これら三つの方程式はループグラフの再総和によって従来のBW摂動公式にとって替わる公式である。興味深いことにループグラフについて再総和されたBW級数は有限個のツリーグラフから、部分空間上の自己エネルギーもまた有限個の単ループグラフから構成されている。それ故に、 N が有限次数である限りこれらの公式は摂動的にダイアグラムをカットすることなく厳密な方程式となる。このとき(3.27) 式の展開形式を本論文ではツリー展開と呼ぶことにする。

3.4 厳密な自己無撞着方程式

これは shifted energy についての(3.25) 式から間接的に導くことができる。まず留意すべき点として(3.25) 式は $E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ についての $n_E(N)$ 変数非線形方程式となることである。ある k に対する $E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ の数は対角要素 $G_{\tau_k \tau_k[\mathbf{p}_k]}$ の数に等しく $(N-k)n_G(k)$ であることを考慮すれば、具体的な総数 $n_E(N)$ は

$$n_E(N) = 1 + \sum_{k=1}^{N-1} (N-k)n_G(k) = 1 + (N-1)2^{N-2} \quad (3.28)$$

そして(3.26) 式の自己エネルギーの変数を明示的に表記すれば

$$E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]} = \omega_{\tau_k} + \Delta_{\tau_k \tau_k[\mathbf{p}_k]}(E_{\tau_{k+1}[\mathbf{p}_{k+1}]}, \dots, E_{\tau_{N-1}[\mathbf{p}_{N-1}]}; E_{\tau_0}) \quad (3.29)$$

これもまた $E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ についての再帰関係式であることがわかる。特に $k = N - 1$ のときは任意の \mathbf{p}_{N-1} について $E_{\tau_{N-1}[\mathbf{p}_{N-1}]} = \omega_{\tau_{N-1}} + \lambda V_{\tau_{N-1}\tau_{N-1}}$ が成り立つので、これを初項として逐次的に (3.29) 式を使用すれば形式的に全ての $E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ を E_{τ_0} の連分数関数として書くことができる。

$$E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]} = Z_{\tau_k[\mathbf{p}_k]}(E_{\tau_0}) \quad k = 0, 1, \dots, N - 1 \quad (3.30)$$

ここで $Z_{\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ は E_{τ_0} についての有限連分数である。

そして $k = 0$ のとき、 $E_{\tau_0[\]} = E_{\tau_0}$ であることを思い出せば (3.30) 式は E_{τ_0} についての方程式となり

$$E_{\tau_0} = Z_{\tau_0[\]}(E_{\tau_0}) \quad (3.31)$$

これはまさにエネルギー E_{τ_0} に対する厳密な自己無撞着方程式である。そしてこれは有限連分数の構造を持っており、右辺の分母を整理することで結果的に E_{τ_0} についての N 次方程式、いわゆる固有多項式となる。このような観点から再総和された BW 摂動公式はエネルギー固有値問題を厳密に自己無撞着な形式で記述する事が分かる。

2.5 節で議論したように、エネルギー固有値 E_{τ_0} を計算する際に BW 摂動公式は実用上ある次数で近似した式を用いて反復法や Sttefensen の方法により数値解を求めなくてはならず、たとえ十分に数値解が収束したとしてもそれは有限の誤差を持つ。しかし (3.31) 式で示した厳密な自己無撞着方程式は数値計算により任意の精度で厳密解に近づく数値解を与えることができ、これは BW 摂動論の持つ自己無撞着性の完全な回復を実現したことを意味する。そして E_{τ_0} を十分な精度で求めた後、(3.30) 式に再代入することですべての shifted energy は決定され最終的に固有状態 $|\psi_{\tau_0}\rangle$ を求めることができる。以上が自己無撞着形式での固有値問題に対する数値解法の流れとなる。

例として、 $N = 3$, $\tau_0 = 1$ のときの公式を以下に書き下すと

$$\begin{aligned} E_1 &= \omega_1 + i \left[(-i\lambda)V_{11} + (-i\lambda)^2 V_{12} \frac{-i}{E_{2[1]} - E_1} V_{21} + (-i\lambda)^2 V_{13} \frac{-i}{E_{3[1]} - E_1} V_{31} \right. \\ &+ \left. (-i\lambda)^3 V_{12} \frac{-i}{E_{2[31]} - E_1} V_{23} \frac{-i}{E_{3[1]} - E_1} V_{31} + (-i\lambda)^3 V_{13} \frac{-i}{E_{3[21]} - E_1} V_{32} \frac{-i}{E_{2[1]} - E_1} V_{21} \right] \\ E_{2[1]} &= \omega_2 + i \left[(-i\lambda)V_{22} + (-i\lambda)^2 V_{23} \frac{-i}{E_{3[21]} - E_1} V_{32} \right] \\ E_{3[1]} &= \omega_3 + i \left[(-i\lambda)V_{33} + (-i\lambda)^2 V_{32} \frac{-i}{E_{2[31]} - E_1} V_{23} \right] \\ E_{2[31]} &= \omega_2 + i \left[(-i\lambda)V_{22} \right] \\ E_{3[21]} &= \omega_3 + i \left[(-i\lambda)V_{33} \right] \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle = & |1\rangle + (-i\lambda) |2\rangle \frac{-i}{E_{2[1]} - E_1} V_{21} + (-i\lambda) |3\rangle \frac{-i}{E_{3[1]} - E_1} V_{31} \\
& + (-i\lambda)^2 |2\rangle \frac{-i}{E_{2[31]} - E_1} V_{23} \frac{-i}{E_{3[1]} - E_1} V_{31} + (-i\lambda)^2 |3\rangle \frac{-i}{E_{3[21]} - E_1} V_{32} \frac{-i}{E_{2[1]} - E_1} V_{21}
\end{aligned} \tag{3.33}$$

確かに (3.32) 式は $n_E(3) = 5$ つの shifted energy についての非線形方程式であり、入れ子式に変数を消去することで有限連分数としての厳密な自己無撞着方程式が完成する。そして (3.33) 式には一切のループグラフは存在せず、全てツリーグラフで展開されていることも確認できる。

第4章 BW 摂動論との比較

本章では従来の Brillouin-Wigner(BW) 摂動論と3章で導いた Resummed Brillouin-Wigner(RBW) 摂動論を、RS-BW-RBW 摂動論の関係・収束性・適用範囲の観点から比較し、BW 摂動論よりも優れていることを数値計算例とともに示す。

4.1 RS-BW-RBW 理論間の関係性

まず初めに、ループ再総和された BW 摂動論 (RBW 摂動論) は従来の BW 摂動論を近似として含むことを説明する。RBW 理論において、すべてのループグラフは各遷移振幅 $(-i\lambda)W_{\tau_k\tau_{k-1}}$ ($k > 0$) にループ補正として寄与し、RBW 級数からは完全に姿を消すことを見た。これは RS-BW 摂動論の関係と同じであり、BW 摂動論は RBW 摂動論の近似として導くことができる。このことは再総和された遷移振幅 $(-i\lambda)\tilde{W}_{\tau_k\tau_{k-1}}$ を自己エネルギー $\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ について幾何級数展開することで確かめることができ

$$\left[1 + \frac{-i}{\omega_{\tau_k} - E_{\tau_0}}(-i\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}) + \frac{-i}{\omega_{\tau_k} - E_{\tau_0}}(-i\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]})\frac{-i}{\omega_{\tau_k} - E_{\tau_0}}(-i\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}) + \dots \right] \times (-i\lambda)W_{\tau_k\tau_{k-1}} \quad (4.1)$$

この展開において $\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ は $\mathcal{O}(\lambda)$ のオーダーとみなしている。ループグラフの部分 $G_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ に注目すると、部分空間 $M_{[\mathbf{p}_k]}$ 上の全てのループグラフ ($\tau_k \rightarrow \tau_k$) は single loop graphs の連結したダイアグラムで表現されることが分かる。さらに定義式 (3.26) から明らかなように自己エネルギー $\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ 自身も入れ子構造的に展開でき、それは莫大な数のループグラフ ($i \rightarrow i \neq \tau_k, \dots, \tau_0$) を生成する。このようにして部分空間 $M_{[\mathbf{p}_k]}$ における全てのループグラフは再び無限級数の形で姿を現し、それは BW 摂動論を RBW 摂動論の近似とみなすことのできる理由となる。

$$\text{RS theory} \begin{array}{c} \xrightarrow{\text{resummation}} \\ \xleftarrow{\text{approximation}} \end{array} \text{BW theory} \begin{array}{c} \xrightarrow{\text{resummation}} \\ \xleftarrow{\text{approximation}} \end{array} \text{RBW theory}$$

$\Delta_{\tau_0\tau_0[\]}$ $\Delta_{\tau_k\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ for $0 < k < N$

図 4.1: RS-BW-RBW 摂動論の関係性

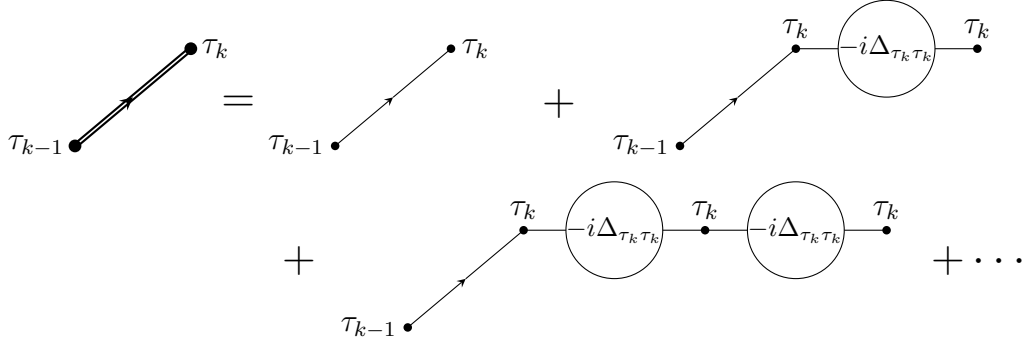


図 4.2: 再総和された遷移振幅 $(-i\lambda)\tilde{W}_{\tau_k\tau_{k-1}}$

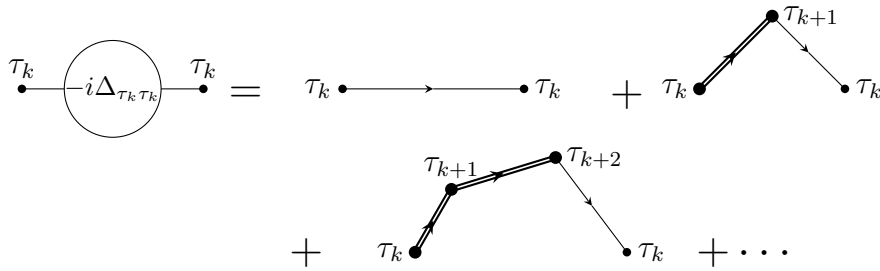


図 4.3: 部分空間 $M_{[p_k]}$ 上の自己エネルギー $\Delta_{\tau_k\tau_k[p_k]}$

図 4.1 では RS、BW、RBW 摂動論の関係を自己エネルギー項についての近似・再総和の観点で図示した。また図 4.2、4.3 はそれぞれ再総和された遷移振幅 $(-i\lambda)\tilde{W}_{\tau_k\tau_{k-1}}$ と自己エネルギー $\Delta_{\tau_k\tau_k[p_k]}$ のダイアグラムを表している。

4.2 Resummed Brillouin-Wigner 摂動論の高収束性

RBW 摂動論は有限次元系でコンパクトな自己無撞着方程式を与え、従来の BW 摂動論とは異なり任意の精度でエネルギー固有値を求めることができる。そしてこの高い収束性はすべてのループ補正を (4.1) 式の再総和された形式で取り込んだことに起因すると考えられる。ここでは摂動論の観点から BW/RBW 理論が与える解の収束速度を比較し、ループ補正の再総和効果を確認する。このとき両者の比較のために RBW 理論に対して次の物理的な近似を提案する。

$$E_{\tau_k[p_k]} = \omega_{\tau_k} + \Delta_{\tau_k\tau_k[p_k]}^{(m)} + \mathcal{O}(\lambda^{m+1}) \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (4.2)$$

ここで $\Delta_{\tau_k\tau_k[p_k]}^{(m)}$ は λ の m 次までの自己エネルギーである。この近似は RBW 理論では single loop graphs がエネルギー分母に対する基本的な補正を担うという解釈に基づいており、(4.2) 式が形成する自己無撞着方程式は厳密に m 次までの single loop 補正を取り込んでいる。それ故にループ再総和の効果を検討すれば、 m 次の BW 摂動論と比較して高精度な近似解を RBW 理論は与えるものと期待できる。

この予想を確かめるために、以下の $N = 7$ のときのハミルトニアンを数値計算例として考える。

$$\mathbf{H}_0 = \text{diag}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6, \omega_7) = \text{diag}(0.07, 0.30, 0.37, 0.48, 0.51, 0.80, 0.86)$$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} (0.26, \pi) & (0.09, 4.48) & (0.38, 3.39) & (0.66, 4.82) & (0.97, 2.66) & (0.37, 3.97) & (0.05, 0.53) \\ & (0.15, \pi) & (0.88, 0.18) & (0.95, 3.57) & (0.49, 1.10) & (0.09, 5.68) & (0.70, 1.95) \\ & & (0.48, \pi) & (0.01, 1.47) & (0.43, 1.04) & (0.59, 0.77) & (0.72, 6.06) \\ & & & (0.44, \pi) & (0.68, 5.91) & (0.17, 1.04) & (0.52, 4.69) \\ & * & & & (0.49, 0.00) & (0.99, 3.63) & (0.96, 3.40) \\ & & & & & (0.46, 0.00) & (0.79, 6.26) \\ & & & & & & (0.22, \pi) \end{bmatrix}$$

ここで \mathbf{V} はエルミート行列なので左下 ($j < i$) は $V_{ij} = V_{ji}^*$ で与えられ、また \mathbf{H}_0 と \mathbf{V} の各要素は $0 \leq \omega_i \leq 1$ 、 $|V_{ij}| \leq 1$ の領域からランダムに選んだ。そして上記において要素 V_{ij} を極座標点 ($|V_{ij}|, \arg(V_{ij})$) で表記している。

図3では結合定数を $\lambda = 0.01$ に固定し、以下で定義した相対誤差の幾何平均 (GMRE) を摂動次数 m の関数としてプロットした。

$$\text{GMRE}(m) \equiv \sqrt[7]{\prod_{i=1}^7 \left| \frac{E_i^{(m)} - E_i^{\text{exact}}}{E_i^{\text{exact}}} \right|} \quad (4.3)$$

ここで $E_i^{(m)}$ は m 次の BW(RBW) 摂動論によって与えられる第 i 準位のエネルギー固有値を表し、その数値計算には Sttefensen の方法 [14] を用いた。

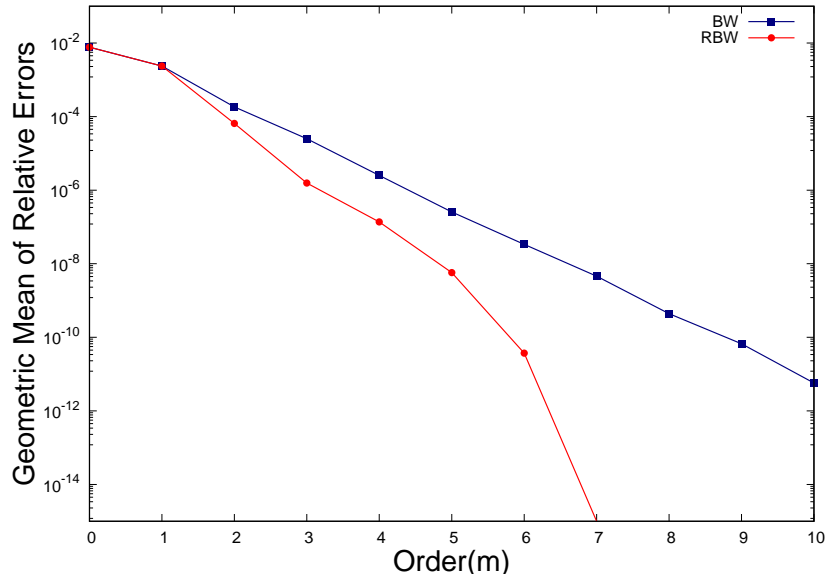


図 4.4: $\lambda = 0.01$ のときの各エネルギー固有値に関する相対誤差の幾何平均。青/赤の実線はそれぞれ BW/RBW 摂動論の結果を表す。

$m = 0, 1$ 次 of BW/RBW 摂動公式はどちらも同じ精度の結果を与えているが、その理由は単純で両者の $m = 1$ 次までの公式に差はない事に由来する。次に $m = 2$ 次以降の結果に注目すると、RBW 摂動論の数値解は平均的に BW 摂動論に比べてより速く収束してく様子が読み取れ、これはループ再総和の効果による加速収束を支持する結果である。特に $m = 7$ 次 of RBW 摂動公式はもとの厳密な公式に戻るので、今回の数値計算では図 4.4 で示されているように 10^{-15} 以下の誤差で数値解を与えることが分かった。

4.3 強結合領域への拡張

最後に、RBW 摂動論の適用範囲について考察する。RBW 摂動公式を導出した際、再帰グリーン関数の存在を保証するため結合定数 λ は十分に小さいと仮定していた。しかしながら実際には λ の次数で級数をカットするような摂動近似を行っておらず、それは厳密な導出過程である。そこで以下の定理を与えることで λ の適用範囲を強結合領域まで拡張することができる。

定理. $E_{\tau_k}^*$ を (3.25) 式の解としたとき、もしそれが次の十分条件を満たすならば

$$E_{\tau_0}^* \neq E_{\tau_k}^*, \quad k = 1, 2, \dots, N-1 \quad (4.4)$$

そのとき RBW 摂動公式で与えられる $E_{\tau_0}^*$ と $|\psi_{\tau_0}^*\rangle$ はそれぞれ全ハミルトニアン $\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$ のエネルギー固有値と固有状態となる。

証明. (4.4) 式は強結合領域への十分条件であり、数学的には RBW 摂動公式の極が全て回避される場合を意味する。そして十分性の証明は付録 A.2 で与えられ、そのときエネルギー固有値問題の定義式を摂動直接 $E_{\tau_0}^*$ と $|\psi_{\tau_0}^*\rangle$ が満たすことを示す。重要なことにこの定理は λ の強さに関わらず常に成り立つので、十分条件の下で RBW 公式は強結合領域でも適用可能となる。また、この証明により系が縮退・非縮退に関わらず RBW 摂動公式が成立することにも注意したい。□

RBW 摂動論の有効性を確かめるために、再び先のハミルトニアンを例に λ が 0 から 1 まで増加するときのエネルギー固有値と固有状態を数値計算で求める。この計算では上記の十分条件は概ね常に成り立つと仮定し、また E_{τ_0} についての自己無撞着方程式をフリーパラメーター λ を含む非線形方程式とみなす。

$$E_{\tau_0} = Z_{\tau_0[\cdot]}(E_{\tau_0}, \lambda) \quad (4.5)$$

反復計算の初期値として $\lambda = 0$ のとき $E_{\tau_0} = \omega_{\tau_0}$ を置き、Ref[16] に従って固有値を λ について一つずつ追跡する。このような固有値の追跡方法はホモトピー法などの応用として研究されており、得られた解曲線をしばしば固有パスと呼ぶ。また (4.5) 式をもとに固有パスを計算すると時々他の固有パスに遷移してしまうことがあるが、これは数値解析的な側面の問題であり、そのような遷移を回避するために超球面アルゴリズム [17] を併用して計算を行った。

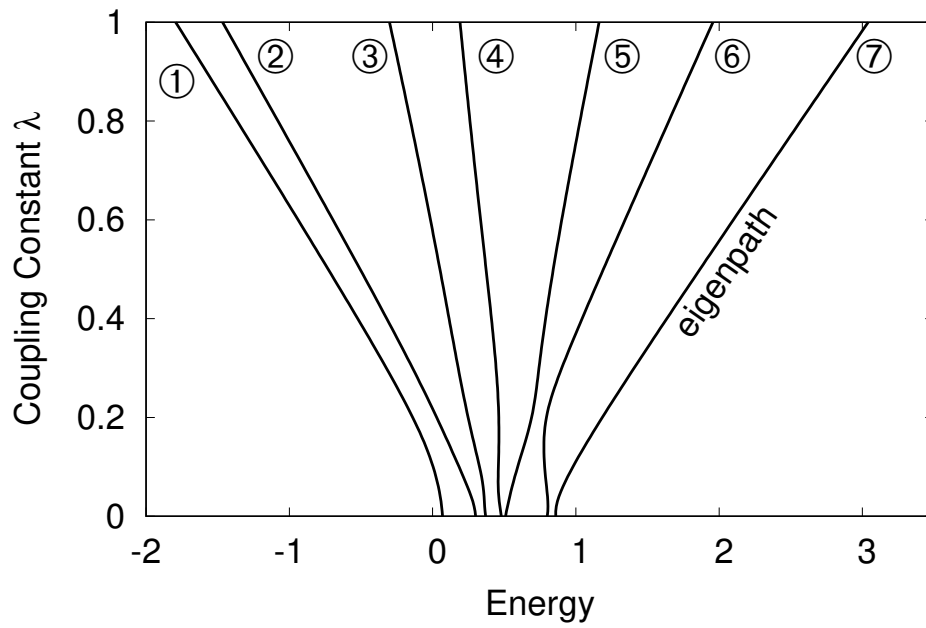


図 4.5: エネルギー固有値の成長過程。実線 ①,... ⑦ はそれぞれ、第 τ_0 準位 ($\tau_0 = 1 \dots 7$) の固有パスを表す。

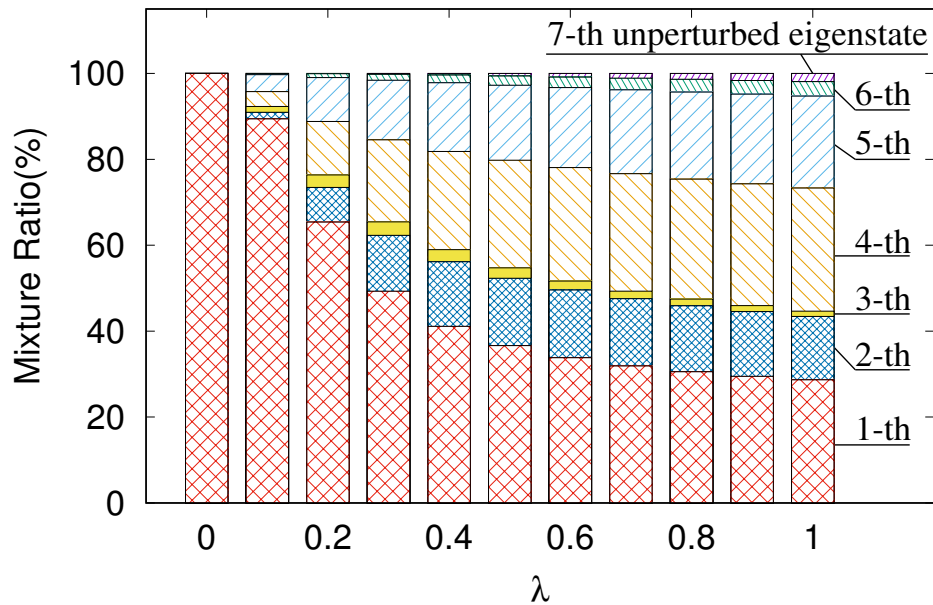


図 4.6: 基底状態 $|\psi_1\rangle$ の構成成分の比率

図 4.5 は摂動領域 ($\lambda \ll 1$) を超えて各エネルギー固有値が成長する過程を表している。一般に BW 摂動論は弱結合 $\lambda \ll 1$ で近似として機能するので、このように強結合領域まで固有値を追跡することはできない。故にこの固有パスの構築は RBW 摂動論の advantage と言える。また、各固有パスは λ が増加するにつれて扇状に広がる様子が見える。これは系のハミルトニアンにある $\lambda \hat{V}$ が強結合領域では支配項となるため、その固有値に漸近することに起因する。

図 4.6 では基底状態 $|\psi_1\rangle$ の構成成分比率を非摂動固有状態の存在確率として表現した。非摂動成分 ($|1\rangle$ の存在確率) は λ の増加とともに減少し、一方で他の摂動成分 ($|2\rangle \dots |7\rangle$ の存在確率) は増えていくことが分かる。特に $\lambda \sim 1$ では非摂動固有状態間で大きな混合が引き起こされており、明らかにこれは非摂動状態である。このことから分かるように RBW 摂動論は強結合領域でも利用可能であると結論できる。

第5章 先行研究

Brillouin-Wigner 摂動論の提唱から約 13 年後の 1948 年、Feenberg は BW 摂動論に対する改善公式 [11] を発表した。彼の研究はまさしく本研究で提案した RBW 公式と本質的に等価な式を与えており、本章ではその導出過程や表式の違いに焦点を当て Feenberg 公式について言及する。まず初めに Feenberg はその導出において、直接 shifted energy を定義し解析接続の観点から BW 級数を再総和する手法をとっている。この総和法は数学的に厳密であるが、少々 shifted energy の導入動機や物理的解釈が不明瞭となっていた。その後 1953 年に、逐次近似展開を用いたより簡単な導出方法が Feshbach によって提案された [17]。この導出法はとてもシンプルであり、その近似アプローチはちょうど 4 章で提案した (4.2) 式の近似に相当している。しかし Feenberg 公式と本研究で導出した摂動公式 (3.25)(3.26)(3.27) は若干の型違いとなっており

$$E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]} = \omega_{\tau_k} + \Delta_{\tau_k \tau_k[\mathbf{p}_k]}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (5.1)$$

ここで自己エネルギー $\Delta_{\tau_k \tau_k[\mathbf{p}_k]}$ は

$$-i\Delta_{\tau_k \tau_k[\mathbf{p}_k]} \equiv (-i\lambda)V_{\tau_k \tau_k} + \sum_{\mathbf{p}_{k+1}}^* \left(\sum_{l=1}^{N-k-1} (-i\lambda)^{l+1} \frac{V_{\tau_k \tau_{k+1}} V_{\tau_{k+1} \tau_{k+2}} \cdots V_{\tau_{k+l} \tau_k}}{iE_{\tau_{k+1} \tau_0} \cdots iE_{\tau_{k+l} \tau_0}} \right) \quad (5.2)$$

同様に固有状態 $|\psi_{\tau_0}\rangle$ は

$$|\psi_{\tau_0}\rangle = |\tau_0\rangle + \sum_{l=1}^* \left(\sum_{l=1}^{N-1} (-i\lambda)^l \frac{V_{\tau_1 \tau_2} V_{\tau_2 \tau_3} \cdots V_{\tau_l \tau_0}}{iE_{\tau_1 \tau_0} iE_{\tau_2 \tau_0} \cdots iE_{\tau_l \tau_0}} |\tau_l\rangle \right) \quad (5.3)$$

ここで $E_{\tau_k \tau_0}$ はエネルギー差 $E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]} - E_{\tau_0}$ を表し、また本研究での公式と比較するため全体的に原論文とは異なる記法で Feenberg 公式を記述した。

一見すると、これはただ RBW 摂動公式のダミー変数の順序を逆にしたものに見えるが、実は分母の shifted energy $E_{\tau_k[\mathbf{p}_k]}$ の出現順序が逆となっている。また上式におけるアスタリスク付きの総和について、(5.2) 式では \mathbf{p}_{k+1} に含まれる番号を除いたエネルギー準位に関して互い違いに中間状態を総和することを意味し、(5.3) 式では互い違いな全ての中間状態の総和を表している。このように Feenberg 公式の導出には、本研究で用いた再帰グリーン関数に関する部分空間 M や量子遷移の解釈がないので、非常に複雑なままとなっている。実際に $N = 3$ の場合を書

き下してみると

$$\begin{aligned}
E_1 &= \omega_1 + i \left[(-i\lambda)V_{11} + (-i\lambda)^2 V_{12} \frac{-i}{E_{2[1]} - E_1} V_{21} + (-i\lambda)^2 V_{13} \frac{-i}{E_{3[1]} - E_1} V_{31} \right. \\
&+ \left. (-i\lambda)^3 V_{12} \frac{-i}{E_{2[1]} - E_1} V_{23} \frac{-i}{E_{3[21]} - E_1} V_{31} + (-i\lambda)^3 V_{13} \frac{-i}{E_{3[1]} - E_1} V_{32} \frac{-i}{E_{2[31]} - E_1} V_{21} \right] \\
E_{2[1]} &= \omega_2 + i \left[(-i\lambda)V_{22} + (-i\lambda)^2 V_{23} \frac{-i}{E_{3[21]} - E_1} V_{32} \right] \\
E_{3[1]} &= \omega_3 + i \left[(-i\lambda)V_{33} + (-i\lambda)^2 V_{32} \frac{-i}{E_{2[31]} - E_1} V_{23} \right] \\
E_{2[31]} &= \omega_2 + i \left[(-i\lambda)V_{22} \right] \\
E_{3[21]} &= \omega_3 + i \left[(-i\lambda)V_{33} \right]
\end{aligned} \tag{5.4}$$

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle &= |1\rangle + (-i\lambda) |2\rangle \frac{-i}{E_{2[1]} - E_1} V_{21} + (-i\lambda) |3\rangle \frac{-i}{E_{3[1]} - E_1} V_{31} \\
&+ (-i\lambda)^2 |2\rangle \frac{-i}{E_{2[1]} - E_1} V_{23} \frac{-i}{E_{3[21]} - E_1} V_{31} + (-i\lambda)^2 |3\rangle \frac{-i}{E_{3[1]} - E_1} V_{32} \frac{-i}{E_{2[31]} - E_1} V_{21}
\end{aligned} \tag{5.5}$$

$N = 3$ の RBW 摂動公式と比べて、確かに $E_{3[21]}$ や $E_{2[31]}$ の場所が異なっている。しかし全体的に見れば shifted energy はやはり有限連分数の構造を持ち、同じく厳密な自己無撞着方程式を与える。そして両者の公式において以下のエネルギー分母の積は明らかに等しいことから、

$$\frac{1}{E_{2[1]} - E_1} \frac{1}{E_{3[21]} - E_1} = \frac{1}{E_{2[31]} - E_1} \frac{1}{E_{3[1]} - E_1} \tag{5.6}$$

したがって $N = 3$ の場合、両者の公式は完全に等価であることがわかる。また、この Feenberg 公式との比較を例としてループグラフの再総和の仕方は一通りではないことが示唆される。

実際、Mower は射影演算子のアプローチから本研究と同じ順序の再総和公式を導いている [12]。彼の導出は以下で定義される level-shift-operator の逐次展開を重点に置き、そのとき射影演算子による逐次的な部分空間への制限というアイデアは本研究の再帰グリーン関数によるアプローチと非常に近い。

$$\hat{R} \equiv \hat{V} + \hat{V} \hat{P}_{[\tau_0]} \left(E_{\tau_0} - \hat{P}_{[\tau_0]} \hat{H} \hat{P}_{[\tau_0]} \right)^{-1} \hat{P}_{[\tau_0]} \hat{V} \tag{5.7}$$

第6章 まとめ

本研究では再帰グリーン関数による有限準位系の Brillouin-Wigner 摂動論における全てのループグラフの総和法を提案した。そしてループ再総和された BW 摂動論は従来のノイマン級数表示の公式を有限でコンパクトな形に書き換えることを見た。特に最も重要な結果として、resummed BW 公式はエネルギー固有値についての厳密な自己無撞着方程式を有限連分数形で構築し、これにより BW 摂動論の自己無撞着性の利点は最大限に引き出されることを数値計算例とともに示した。また RBW 摂動論に現れる量子遷移はとても簡潔な解釈ができ、エネルギー補正は部分空間 $M_{[p_k]}$ における single loop graphs、エネルギー固有状態は系のエネルギースペクトル空間 $M_{[1]}$ 上の tree graphs として展開されることがわかった。そして最後に本研究は Feenberg 摂動論と本質的に等価であることを確認し、BW 摂動論におけるループグラフの再総和方法はユニークではなく本研究と同じ Mower 型が存在することを改めて指摘した。

付録 A

A.1: 再帰関係式 (3.12) の導出

この再帰関係式 (3.12) は定義式 (3.10) から導かれる。まず初めに k -step 時の再帰グリーン関数 $\hat{G}_{[\mathbf{p}_k]}$ は第 $\tau_0 \dots \tau_{k-1}$ の行と列を持たないことから、 $\tau_k \neq \tau_0 \dots \tau_{k-1}$ となる第 τ_k 列ベクトルについて着目すると

$$\hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} [\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}] \hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} \hat{G}_{[\mathbf{p}_k]} |\tau_k\rangle = |\tau_k\rangle \quad (\text{A1})$$

(A1) 式に対して左から $\hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]}$ もしくは $\langle \tau_k |$ を掛けて、 $\hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} = \hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} + |\tau_k\rangle \langle \tau_k |$ を用いれば次式が得られる。

$$\hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} [\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}] (\hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} + |\tau_k\rangle \langle \tau_k |) \hat{G}_{[\mathbf{p}_k]} |\tau_k\rangle = 0 \quad (\text{A2})$$

$$\langle \tau_k | [\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}] (\hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} + |\tau_k\rangle \langle \tau_k |) \hat{G}_{[\mathbf{p}_k]} |\tau_k\rangle = 1 \quad (\text{A3})$$

途中、 $\hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} \hat{P}_{[\mathbf{p}_k]} = \hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]}$ を用いた。これらの式は合わせて (A1) 式と完全に等価であり、特に (A2) 式は再帰関係式 (3.12) を導く一方で (A3) 式は対角要素 $G_{\tau_k \tau_k}[\mathbf{p}_k]$ についての (3.22) 式を直接与えることに注意したい。

このとき (A2) 式は対角要素 $|\tau_k\rangle G_{\tau_k \tau_k}[\mathbf{p}_k]$ と非対角要素 $|g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]} = \hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} \hat{G}_{[\mathbf{p}_k]} |\tau_k\rangle$ の関係式として書き換えることができ

$$\hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} [\hat{1} - (-i\lambda)\hat{W}] \hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} |g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]} = (-i\lambda) \hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} \hat{W} |\tau_k\rangle G_{\tau_k \tau_k}[\mathbf{p}_k] \quad (\text{A4})$$

これは $|g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]}$ についての発展方程式である。そして $(k+1)$ -step 時の再帰グリーン関数 $\hat{G}_{[\mathbf{p}_{k+1}]}$ の導入により $|g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]}$ は形式的に求められ

$$|g_{\tau_k}\rangle_{[\mathbf{p}_k]} = (-i\lambda) \hat{G}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} \hat{P}_{[\mathbf{p}_{k+1}]} \hat{W} |\tau_k\rangle G_{\tau_k \tau_k}[\mathbf{p}_k] \quad (\text{A5})$$

ここで k は $1, 2, \dots, N-1$ を取り、このようにして再帰関係式 (3.12) は導出される。

A.2: 定理の証明

本付録では RBW 摂動論の強結合領域への拡張に関する定理の証明を与える。まず初めに留意すべきことに、RBW 摂動公式は十分条件 (4.4) の下で極は回避され

るので well-defined である。したがって、RBW 摂動公式を用いて直接 (2.8) 式の左辺を変形し、それが右辺に等しくなることを示すことができる。

(2.8) 式の左辺において状態 $|\psi_{\tau_0}^*\rangle$ に全ハミルトニアンを作用させたとき、その状態は以下のようになり

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}) |\psi_{\tau_0}^*\rangle &= \omega_{\tau_0} |\tau_0\rangle + \lambda \sum_{\alpha=1}^N |\alpha\rangle V_{\alpha\tau_0} \\ &+ \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^l \left(\omega_{\tau_l} |\tau_l\rangle + \lambda \sum_{\alpha=1}^N |\alpha\rangle V_{\alpha\tau_l} \right) \left(\tilde{W}_{\tau_l\tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_2\tau_1}^* \tilde{W}_{\tau_1\tau_0}^* \right) \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

このとき $|\psi_{\tau_0}^*\rangle$ について (3.20) 式の表現と恒等演算子 $\hat{1}$ を使った。

$$\tilde{W}_{\tau_l\tau_{l-1}}^* = \frac{-iV_{\tau_k\tau_{l-1}}}{E_{\tau_l[\mathbf{p}_l]}^* - E_{\tau_0}^*}, \quad \hat{1} = \sum_{\alpha=1}^N |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{A7})$$

次に (A6) 式の右辺に $l = 0, 1, \dots, N-1$ に対する以下の自明な分割式を適用する。

$$\sum_{\alpha=1}^N |\alpha\rangle V_{\alpha\tau_l} = \sum_{\substack{\tau_{l+1} \neq \tau_i \\ i < l+1}} |\tau_{l+1}\rangle V_{\tau_{l+1}\tau_l} + \sum_{k=1}^l |\tau_k\rangle V_{\tau_k\tau_l} + |\tau_0\rangle V_{\tau_0\tau_l} \quad (\text{A8})$$

これは相異なる i, j に対して $\tau_i \neq \tau_j$ となる時に適用できる式であり、 \mathbf{p}_{l+1} は集合 $\{1, 2, \dots, N\}$ の $(l+1)$ -順列であることを思い出せば問題なく使用することができる。

そして以下の証明では (A6) 式を第 τ_0 とそれ以外の第 $\tau_1, \dots, \tau_{N-1}$ 成分に場合分けして計算を続けることにする。まず第 τ_0 成分に対しては (3.25) 式もしくは (3.21) 式を用いることで簡単に書き換えることができる。

$$\begin{aligned} (\text{A6) 式の第 } \tau_0 \text{ 成分} &= \omega_{\tau_0} |\tau_0\rangle + \lambda |\tau_0\rangle V_{\tau_0\tau_0} \\ &+ i \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^{l+1} |\tau_0\rangle V_{\tau_0\tau_l} \left(\tilde{W}_{\tau_l\tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_2\tau_1}^* \tilde{W}_{\tau_1\tau_0}^* \right) \\ &= E_{\tau_0}^* |\tau_0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

一方で第 $\tau_1, \dots, \tau_{N-1}$ 成分に対しては以下のように計算される。

$$\begin{aligned} \lambda \sum_{\tau_1 \neq \tau_0}^N |\tau_1\rangle V_{\tau_1 \tau_0} + \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^l \left(\omega_{\tau_l} |\tau_l\rangle + \lambda \sum_{\substack{\tau_{l+1} \neq \tau_i \\ i < l+1}}^N |\tau_{l+1}\rangle V_{\tau_{l+1} \tau_l} \right) \left(\tilde{W}_{\tau_l \tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_1 \tau_0}^* \right) \\ + i \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^{l+1} \sum_{k=1}^l |\tau_k\rangle V_{\tau_k \tau_l} \left(\tilde{W}_{\tau_l \tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_1 \tau_0}^* \right) \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

このとき (A10) 式の第3項は τ_1, \dots, τ_l と k についての総和は交換可能であることに注意すれば、更に書き直すことができ

$$i \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^{l+1} |\tau_k\rangle V_{\tau_k \tau_l} \left(\tilde{W}_{\tau_l \tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_2 \tau_1}^* \tilde{W}_{\tau_1 \tau_0}^* \right) \quad (\text{A11})$$

また上式において任意の数列 a_{kl} に対して成り立つ以下の恒等式を用いた。

$$\sum_{l=1}^{N-1} \sum_{k=1}^l a_{kl} = \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k}^{N-1} a_{kl} = \sum_{k \leq l}^{N-1} a_{kl} \quad (\text{A12})$$

そして更に (A11) 式は以下の手続きに従い簡単にすることができ

$$\begin{aligned} i \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=k+1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^{l+1} |\tau_k\rangle V_{\tau_k \tau_l} \left(\tilde{W}_{\tau_l \tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_{k+1} \tau_k}^* \right) \left(\tilde{W}_{\tau_k \tau_{k-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_1 \tau_0}^* \right) \\ + i \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{\substack{k\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^{k+1} |\tau_k\rangle V_{\tau_k \tau_k} \left(\tilde{W}_{\tau_k \tau_{k-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_1 \tau_0}^* \right) \end{aligned} \quad (\text{A13})$$

そのとき上式の総和の定義を思い出すと

$$\sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} \equiv \sum_{\tau_1 \neq \tau_0}^N \cdots \sum_{\substack{\tau_k \neq \tau_i \\ i < k}}^N \sum_{\substack{\tau_{k+1} \neq \tau_i \\ i < k+1}}^N \cdots \sum_{\substack{\tau_l \neq \tau_i \\ i < l}}^N \quad (\text{A14})$$

よって

$$\begin{aligned} i \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{\tau_0 \neq \tau_1}^N \cdots \sum_{\substack{\tau_k \neq \tau_i \\ i < k}}^N (-i\lambda)^k |\tau_k\rangle \left\{ \sum_{l=k+1}^{N-1} \sum_{\substack{\tau_{k+1} \neq \tau_i \\ i < k+1}}^N \cdots \sum_{\substack{\tau_l \neq \tau_i \\ i < l}}^N (-i\lambda)^{l-k+1} V_{\tau_k \tau_l} \left(\tilde{W}_{\tau_l \tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_{k+1} \tau_k}^* \right) \right. \\ \left. + (-i)\lambda V_{\tau_k \tau_k} \right\} \left(\tilde{W}_{\tau_k \tau_{k-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_1 \tau_0}^* \right) \quad (\text{A15}) \end{aligned}$$

上式の波括弧に対してはダミー変数を $l \rightarrow l' = l - k$ のように変えることで自己エネルギーの表式 (3.23) に置き換えることができ

$$i \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{\substack{k\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^k |\tau_k\rangle (-i\Delta_{\tau_k\tau_{k-1}}^*[\mathbf{p}_k]) \left(\tilde{W}_{\tau_k\tau_{k-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_1\tau_0}^* \right) \quad (\text{A16})$$

(A16) 式を (A10) 式に戻すと (A6) 式の第 $\tau_1, \dots, \tau_{N-1}$ 成分は以下のように書き直される。

$$\begin{aligned} \lambda \sum_{\tau_1 \neq \tau_0}^N |\tau_1\rangle V_{\tau_1\tau_0} + \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^l \left(E_{\tau_l\tau_0}^* + \lambda \sum_{\substack{\tau_{l+1} \neq \tau_i \\ i < l+1}}^N |\tau_{l+1}\rangle V_{\tau_{l+1}\tau_l} \right) \left(\tilde{W}_{\tau_l\tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_1\tau_0}^* \right) \\ + E_{\tau_0}^* \sum_{l=1}^{N-1} \sum_{\substack{l\text{-perms} \\ \text{of } Q_{[\tau_0]}}} (-i\lambda)^l |\tau_l\rangle \left(\tilde{W}_{\tau_l\tau_{l-1}}^* \cdots \tilde{W}_{\tau_1\tau_0}^* \right) \end{aligned} \quad (\text{A17})$$

ここで (3.25) 式と $E_{\tau_l\tau_0}^* = E_{\tau_l[\mathbf{p}_l]}^* - E_{\tau_0}^*$ を用いた。

そして $E_{\tau_l\tau_0}^* \tilde{W}_{\tau_l\tau_{l-1}}^* = -iV_{\tau_l\tau_{l-1}}$ を用いて上式を整理すると、ちょうど最後の項を残して全てキャンセルされる。最後に (A9) と (A17) を合わせて (A6) 式の右辺を書き直すと

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}) |\psi_{\tau_0}^*\rangle = E_{\tau_0}^* |\psi_{\tau_0}^*\rangle \quad (\text{A18})$$

これはエネルギー固有値問題の表式である。このとき $E_{\tau_0}^*$ と $|\psi_{\tau_0}^*\rangle$ はそれぞれエネルギー固有値と固有状態となり、これで証明は完了する。

謝辞

他の専門分野にも関わらず本研究の機会を与えて下さった安田修教授、温かいご支援を頂いた北澤敬章助教に感謝の意を表します。この2年間では贅沢かつとても貴重な経験をさせて頂きました。そして多大な時間を割いて議論させて頂いた非線形物理研究室の田中先生に心から御礼申し上げます。これまでの経験は何一つ無駄はなく、今後の人生の糧になると確信しております。最後に、私が困難に直面した時、常に支えてくれた研究室メンバー、学友そして家族に深く感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Lewis H. Ryder, QUANTUM FIELD THEORY (Second edition), Cambridge University Press (1996)
- [2] L. Y. Chen, N. Goldenfeld and Y. Oono, Renormalization group and singular perturbations: Multiple scales, boundary layers, and reductive perturbation theory, Phys. Rev. E., 54 (1996), 376-394. doi: 10.1103/PhysRevE.54.376.
- [3] H. Chiba, Extension and unication of singular perturbation methods for ODEs based on the renormalization group method, SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 8 (2009), pp. 10661115.
- [4] C. M. Bender and S. A. Orszag, Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers. I, Springer-Verlag, New York, 1999.
- [5] 柴田正和著, 漸近級数と特異摂動法-微分方程式の体系的近似解法, 森北出版, 2009年.
- [6] S. Iso, H. Ohta and T. Suyama, Secular Terms in Dyson Series to All-Orders of Perturbation, KEK-TH-2017/arXiv:1712.00943 [hep-th]
- [7] J. J. Sakurai, Jim Napolitano Modern Quantum Mechanics, 2nd edition, Pearson Education, Upper Saddle River, NJ (2011).
- [8] J. W. S. Rayleigh, The Theory of Sound, London and New York, 1894, vol. 1, p. 113
- [9] I. Hübner, S. Wilson, Brillouin-Wigner Methods for Many-Body Systems, Springer, New York, 2010.
- [10] J. M. Ziman: Elements of Advanced Quantum Theory (Cambridge University Press, Cambridge 1969).
- [11] E. Feenberg, A Note on Perturbation Theory, Phys. Rev. 74, 206 (1948).
- [12] L. Mower, Projection-operator approach to perturbation theory, Phys. Rev. A 22, 882 (1980).

- [13] M. Gell-Mann and F. Low, Bound states in quantum field theory, Phys. Rev. 84, 350 (1951).
- [14] Peter Henrici. Elements of numerical analysis. Wiley.(1964).
- [15] J. E. Lennard-Jones, Proc. Roy. Soc. A129, 598 (1930).
- [16] 鈴木 智博. ホモトピー法を適用した実数非対称行列の固有値問題. 日本応用数
理学会論文誌. 日本応用数理学会. (1997) vol.7, no.4, p.353-362.
- [17] K. Yamamura, Simple Algorithms for Tracing Solution Curves, IEEE Trans.
Circuits Syst., 40 (1993), pp 537-541
- [18] H. Feshbach, On Feenberg's Perturbation Formula, Phys. Rev. 74, 1548
(1948).