簡約公式

S 行列と n 点相関関数を結ぶ式を導きます。
演算子形式と生成汎関数を使った方法の 2 つで見ていきます。

S 行列と n 点相関関数を関連付ける式を求めるための状況を設定していきます。考える状況は実スカラー場による散乱過程です (相互作用ありの実スカラー場)。

まず、散乱過程での入射してくる粒子の状態は時間が $-\infty$ のときに $|\alpha, in\rangle$ と与えられて、他の粒子と干渉していない 1 粒子状態によって記述できるとします。ここで問題になるのが、その 1 粒子状態を何によって作るかです。相互作用がなければ、単純に場の演算子 $\phi_0(x)$ から生成、消滅演算子を真空 $|0\rangle$ に作用させればいいです。しかし、今は相互作用が存在している場合を考えています。このため、相互作用のある真空 $|\Omega\rangle$ に作用させることで $|\alpha, in\rangle$ が作れる生成演算子、つまり、α を運動量 $\boldsymbol{p}$ とすれば

$$a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p})|\Omega\rangle = a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p})|0, in\rangle = |\boldsymbol{p}, in\rangle$$

となる演算子 $a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p})$ が必要です。これは、相互作用がない場合での

$$a^\dagger_0(\boldsymbol{p})|0\rangle = |\boldsymbol{p}\rangle_0$$

との対応から、相互作用のないクライン・ゴルドン方程式を満たす相互作用があるとした場合での場の演算子によって作れると考えます。ようは、その場の演算子を $\phi_{in}(x)$ とすれば

$$(\Box + m^2)\phi_{in}(x) = 0$$

に従うということです。ただし、質量 m は相互作用がないときの質量 m_0 と同じとはしません。この考えによって

$$\phi_{in}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_{\boldsymbol{p}}}(a_{in}(\boldsymbol{p})e^{-ipx} + a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p})e^{ipx}) \quad (p_0 = E_{\boldsymbol{p}} = \sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2})$$

として、生成、消滅演算子 $a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p}), a_{in}(\boldsymbol{p})$ が作れます (これらの交換関係は通常の生成、消滅演算子による交換関係と同じ)。このような設定を考えるのは、「S 行列」で見たように全ハミルトニアン H と相互作用のないハミルトニアン H_0 でのハイゼンベルグ方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\phi_{in}(x) = [\phi_{in}(x), H(\phi(x), \pi(x))] = [\phi_{in}(x), H_0(\phi_{in}(x), \pi_{in}(x))]$$

に従う場の演算子 $\phi_{in}(x)$ が作れることと ($\pi(x)$ は共役な場)、「Lehmann-Källen スペクトル表示」で出てきたように 1 粒子状態の 2 点相関関数 $D(p)$ の $p^2 = m^2$ の極において

$$D(p) = \frac{iZ}{p^2 - m^2 + i\epsilon} \quad (p^2 = m^2) \tag{1}$$

となっているからです。

このような場の演算子 $\phi_{in}(x)$ を考えている散乱過程の中に存在させるために、相互作用ありでの場の演算子 $\phi(x)$ を適当な状態 (ハイゼンベルグ描像) で挟んだ期待値に対して

$$\lim_{x_0\to-\infty}\langle b|\phi(x)|a\rangle = \langle b|\phi_{in}(x)|a\rangle$$

という条件を入れます。これは弱い漸近条件 (weak asymptotic condition) と呼ばれます。ただ、$\phi_{in}(x)$ とならずに適当な定数がくっついていてもいいだろうとして、(1) での定数 Z をくっつけて

$$\lim_{x_0\to-\infty}\langle b|\phi(x)|a\rangle = \sqrt{Z}\langle b|\phi_{in}(x)|a\rangle \tag{2}$$

とします。これに対して

$$\lim_{x_0\to-\infty}\phi(x) = \sqrt{Z}\phi_{in}(x)$$

という条件もあり、これは強い漸近条件と呼ばれます (strong asymptotic condition)。強い漸近条件だと収束性の問題や相互作用を入れられない (Haag の定理) といった数学的な問題が出てきます。なので、弱い漸近条件を使います。ここから漸近条件と言ったら、弱い漸近条件を指します。

同様のことが $x_0\to+\infty$ での状態 $|\alpha, out\rangle$ でも出来るとします。というわけで

$$\begin{aligned}
&\phi_{in}(x) = \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_{\boldsymbol{p}}}(a_{in}(\boldsymbol{p})e^{-ipx} + a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p})e^{ipx})\\
&\phi_{out}(x) = \int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2E_{\boldsymbol{p}}}(a_{out}(\boldsymbol{p})e^{-ipx} + a^\dagger_{out}(\boldsymbol{p})e^{ipx})\\
&\lim_{x_0\to-\infty}\langle b|\phi(x)|a\rangle = \sqrt{Z}\langle b|\phi_{in}(x)|a\rangle\\
&\lim_{x_0\to+\infty}\langle b|\phi(x)|a\rangle = \sqrt{Z}\langle b|\phi_{out}(x)|a\rangle\\
&|p_1, p_2, \ldots, p_n, in\rangle = a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p}_1)a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p}_2)\cdots a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p}_n)|0, in\rangle\\
&|p_1, p_2, \ldots, p_n, out\rangle = a^\dagger_{out}(\boldsymbol{p}_1)a^\dagger_{out}(\boldsymbol{p}_2)\cdots a^\dagger_{out}(\boldsymbol{p}_n)|0, out\rangle
\end{aligned}$$

と設定します。真空は一意的に定義できるとして $|\Omega\rangle = |0, in\rangle = |0, out\rangle$ とします。そして、$|\alpha, in\rangle, |\alpha, out\rangle$ によって、「S 行列」で示した S 行列の定義

$$S = \langle\beta, out|\alpha, in\rangle \tag{3}$$

を作れ、S 行列演算子は

$$|\alpha, in\rangle = S|\alpha, out\rangle\ ,\ \phi_{in}(x) = S\phi_{out}(x)S^\dagger\ ,\ S^\dagger S = SS^\dagger = 1\ ,\ \langle\Omega|S|\Omega\rangle = \langle\Omega|\Omega\rangle = 1 \tag{4}$$

となります。

これで準備が出来たので S 行列と n 点関数を関連付けます。S 行列は

$$S = \langle \beta, out|\alpha, in\rangle = \langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|p_1, p_2, \ldots, p_n, in\rangle$$

とします。これを生成演算子 $a_{in}^{\dagger}(\boldsymbol{p}_1)$ を使って

$$\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|p_1, p_2, \ldots, p_n, in\rangle = \langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|a_{in}^{\dagger}(\boldsymbol{p}_1)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle$$

と書き換えます。相互作用のないときの生成演算子 $a^{\dagger}(\boldsymbol{p})$ は「クライン・ゴルドン場〜実スカラー場〜」で求めているように、相互作用のないときの場の演算子 $\phi_0(x)$ から

$$a^{\dagger}(\boldsymbol{p}) = i\int d^3x\ \big(\phi_0(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ipx} - e^{-ipx}\frac{\partial}{\partial t}\phi_0(x)\big) \quad (p_0 = \sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2}) \tag{5}$$

と書けること (今の規格化では $1/\sqrt{2E_{\boldsymbol{p}}}$ は出てきません) を使って

$$\begin{aligned}
&\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|a_{in}^{\dagger}(\boldsymbol{p}_1)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\
&\quad = i\int d^3x\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi_{in}(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ip_1x} - e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi_{in}(x)\big)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle
\end{aligned}$$

このとき、$x_0 = t$ は任意なので $t = -\infty$ に取れば、漸近条件 (2) によって

$$\begin{aligned}
&\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|a_{in}^{\dagger}(\boldsymbol{p}_1)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\
&\quad = i\lim_{t\to-\infty}\int d^3x\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ip_1x} - e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle
\end{aligned}$$

漸近条件 (2) から定数 $Z^{-1/2}$ が本当は出てきますが、計算に影響しないので省いておいて、最後にくっつけます。

積分と微分は

$$\int_{t_1}^{t_2} dt\ \frac{\partial}{\partial t}f(t) = f(t_2) - f(t_1) \tag{6}$$

となっているので、この積分での t_1 を $t_1 = t = -\infty$ とすれば

$$\begin{aligned}
&i\int d^3x\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ip_1x} - e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle\big|_{t=t_1=-\infty} \\
&\quad = -i\int d^3x\int_{-\infty}^{t_2} dt\ \frac{\partial}{\partial t}\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ip_1x} - e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\
&\qquad + i\int d^3x\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ip_1x} - e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle\big|_{t=t_2}
\end{aligned}$$

そして、漸近条件から

$$a^{\dagger}_{out}(\boldsymbol{p}) = i\lim_{t\to+\infty}\int d^3x\ \big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ipx} - e^{-ipx}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)$$

であるので、$t_2 = +\infty$ として

$$\begin{aligned}&\langle q_1, q_2, \dots, q_m, out|p_1, p_2, \dots, p_n, in\rangle\\ &=\ -i\int d^4x\ \frac{\partial}{\partial t}\langle q_1, q_2, \dots, q_m, out|\big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ip_1x} - e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)|p_2, \dots, p_n, in\rangle\\ &\quad+\int d^3x\langle q_1, q_2, \dots, q_m, out|a^{\dagger}_{out}(\boldsymbol{p}_1)|p_2, \dots, p_n, in\rangle\end{aligned}$$

第 2 項での $a^{\dagger}_{out}(\boldsymbol{p}_1)$ は $\langle q_1, q_2, \dots, q_m, out|$ への消滅演算子として作用しています。なので、これは out 状態に $\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{q}_i$ となる運動量があるときにその粒子を消し、そのような運動量がなければ寄与しません。つまり

$$\begin{aligned}&\langle q_1, q_2, \dots, q_m, out|a^{\dagger}_{out}(\boldsymbol{p}_1)|p_2, \dots, p_n, in\rangle\\ &\quad= 2E_{\boldsymbol{p}_1}(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{q}_i)\langle q_1, q_2, \dots, q_{i-1}, q_{i+1}, \dots, q_m, out|p_2, \dots, p_n, in\rangle\end{aligned}$$

ということです ($2E_{\boldsymbol{p}_1}(2\pi)^3$ は今の規格化による部分)。より一般化すれば

$$\begin{aligned}&\langle q_1, q_2, \dots, q_m, out|a^{\dagger}_{out}(\boldsymbol{p}_1)|p_2, \dots, p_n, in\rangle\\ &\quad= \sum_{k=1}^{m}2E_{\boldsymbol{p}_k}(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{q}_k)\langle q_1, q_2, \dots, q_{k-1}, q_{k+1}, \dots, q_m, out|p_2, \dots, p_n, in\rangle\end{aligned}$$

と書けます。in 状態と out 状態の運動量が全て異なっているとすれば、これは 0 です。$\boldsymbol{p}_1 = \boldsymbol{q}_i$ となる場合でも、in 状態から out 状態へ何の影響も受けずに到達する粒子がいるということなので、散乱過程に影響を与えません。これはファインマン図で言えば、disconnected な図を含んでいることに対応します。

というわけで、残っている第 1 項だけを見ていきます。第 1 項は

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}\big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ip_1x}-e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)\\
&\quad= -iE_{\boldsymbol{p}_1}\frac{\partial}{\partial t}(\phi(x)e^{-ip_1x})+iE_{\boldsymbol{p}_1}e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)-e^{-ip_1x}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x)\\
&\quad= -iE_{\boldsymbol{p}_1}e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)-E_{\boldsymbol{p}_1}^2\phi(x)e^{-ip_1x}+iE_{\boldsymbol{p}_1}e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)-e^{-ip_1x}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x)\\
&\quad= -(\boldsymbol{p}_1^2+m^2)\phi(x)e^{-ip_1x}-e^{-ip_1x}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x)\\
&\quad= -(-\phi(x)\nabla^2e^{-ip_1x}+m^2\phi(x)e^{-ip_1x})-e^{-ip_1x}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x)\\
&\quad= -e^{-ip_1x}(-\nabla^2+m^2)\phi(x)-e^{-ip_1x}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi(x)\\
&\quad= -e^{-ip_1x}(\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2+m^2)\phi(x)
\end{aligned}
\tag{7}
$$

下から 2 行目に行くときに部分積分で

$$
\begin{aligned}
\int d^3x\phi(x)\nabla^2e^{-ip_1x} &= \int d^3x\nabla(\phi(x)\nabla e^{-ip_1x})-\int d^3x\nabla\phi(x)\nabla e^{-ip_1x}\\
&= -\int d^3x\nabla(\nabla\phi(x)e^{-ip_1x})+\int d^3x\ e^{-ip_1x}\nabla^2\phi(x)\\
&= \int d^3x\ e^{-ip_1x}\nabla^2\phi(x)
\end{aligned}
$$

となることを使っています。よって

$$
\begin{aligned}
&-i\int d^4x\ \frac{\partial}{\partial t}\langle q_1,q_2,\dots,q_m,out|\big(\phi(x)\frac{\partial}{\partial t}e^{-ip_1x}-e^{-ip_1x}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x)\big)|p_2,\dots,p_n,in\rangle\\
&\qquad= i\int d^4xe^{-ip_1x}\langle q_1,q_2,\dots,q_m,out|(\Box+m^2)\phi(x)|p_2,\dots,p_n,in\rangle\\
&\qquad= i\int d^4xe^{-ip_1x}(\Box+m^2)\langle q_1,q_2,\dots,q_m,out|\phi(x)|p_2,\dots,p_n,in\rangle
\end{aligned}
$$

よって、S 行列は

$$
\begin{aligned}
&\langle q_1,q_2,\dots,q_m,out|p_1,p_2,\dots,p_n,in\rangle\\
&\quad= \sum_{k=1}^{m}2E_{\boldsymbol{p}_k}(2\pi)^3\delta^3(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{q}_k)\langle q_1,q_2,\dots,q_{k-1},q_{k+1},\dots,q_m,out|p_2,\dots,p_n,in\rangle\\
&\qquad+i\int d^4xe^{-ip_1x}(\Box+m^2)\langle q_1,q_2,\dots,q_m,out|\phi(x)|p_2,\dots,p_n,in\rangle
\end{aligned}
\tag{8}
$$

と変形されます。

次に $\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|$ に対して同じことを行います。つまり

$$\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle = \langle q_2, \ldots, q_m, out|a_{out}(\boldsymbol{q}_1)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle$$

として同様の手順を行います。そうすると、任意の時間 y_0 を $y_0 = +\infty$ とすることで

$$\begin{aligned}
&\langle q_2, \ldots, q_m, out|a_{out}(\boldsymbol{q}_1)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\
&\quad = -i\lim_{y_0\to+\infty}\int d^3y\langle q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle
\end{aligned}$$

積分の性質 (6) と in 状態の漸近条件を使って変形すると

$$\begin{aligned}
-i&\lim_{y_0\to+\infty}\int d^3y\langle q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\
&= -i\int d^3y\int_{-\infty}^{\infty}dy_0\frac{\partial}{\partial y_0}\langle q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\
&\quad + i\int d^3y\langle q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle\big|_{y_0=-\infty} \\
&= -i\int d^4y\frac{\partial}{\partial y_0}\langle q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\
&\quad + i\langle q_2, \ldots, q_m, out|a_{in}(\boldsymbol{q}_1)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle
\end{aligned} \tag{9}$$

第 2 項はこのままでは $|p_2, \ldots, p_n, in\rangle$ に直接作用しないので手を加えます。今は時間として x_0, y_0 の 2 つがあり、(9) の 1 行目で y_0 を $+\infty$ に持っていっています。このため、時間順序積を入れて

$$\begin{aligned}
-i&\lim_{y_0\to+\infty}\int d^3y\langle q_2, \ldots, q_m, out|\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\
&= -i\lim_{y_0\to+\infty}\int d^3y\langle q_2, \ldots, q_m, out|T\big(\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)\phi(x)\big)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle
\end{aligned}$$

としても式の意味は変更されません ($\phi(y)\phi(x)$ の並びのままだから)。そうすると、(9) の 3 行目は

$$\begin{aligned}
i&\int d^3y\langle q_2, \ldots, q_m, out|T\big(\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)\phi(x)\big)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle\big|_{y_0=-\infty} \\
&= i\int d^3y\langle q_2, \ldots, q_m, out|\phi(x)(\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle\big|_{y_0=-\infty} \\
&= i\langle q_2, \ldots, q_m, out|\phi(x)a_{in}(\boldsymbol{q}_1)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle
\end{aligned}$$

というように並びが逆になります。よって、この項は $\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{p}_i$ のとき $|p_2, \ldots, p_n, in\rangle$ への消滅演算子として寄与する項です。

(9) の第 1 項は明らかに (7) と同じことになるので

$$\int d^4y \frac{\partial}{\partial y_0}\big(\phi(y)\frac{\partial}{\partial y_0}e^{iq_1y} - e^{iq_1y}\frac{\partial}{\partial y_0}\phi(y)\big) = -\int d^4y\ e^{iq_1y}(\Box_y + m^2)\phi(y)$$

$\Box$ の下についてる y は y での微分という意味です。よって

$$\begin{aligned}\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle &= i\langle q_2, \ldots, q_m, out|\phi(x)a_{in}(\boldsymbol{q}_1)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\ &\quad + i\int d^4y\ e^{iq_1y}(\Box_y + m^2)\langle q_2, \ldots, q_m, out|T(\phi(y)\phi(x))|p_2, \ldots, p_n, in\rangle\end{aligned}$$

これの第 1 項は $\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{p}_i$ のときに寄与を持つ項なので、dicsonnected な図を含む項です。
これを (8) に入れることで

$$\begin{aligned}&\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|p_1, p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\ &\quad = \text{disconnected} \\ &\qquad + i\int d^4x e^{-ip_1x}(\Box + m^2)\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out|\phi(x)|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\ &\quad = \text{disconnected} \\ &\qquad + i^2\int d^4y d^4x e^{iq_1y}e^{-ip_1x}(\Box_y + m^2)(\Box_x + m^2)\langle q_2, \ldots, q_m, out|T(\phi(y)\phi(x))|p_2, \ldots, p_n, in\rangle\end{aligned}$$

dicsonnected な図を含む項は dicsonnected にまとめています。
ここからさらに同じことを繰り返します。例えば

$$\begin{aligned}&\langle q_2, \ldots, q_m, out|T(\phi(y_1)\phi(x_1))|p_2, \ldots, p_n, in\rangle \\ &\quad = \langle q_2, \ldots, q_m, out|T(\phi(y_1)\phi(x_1))a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p}_2)|p_3, \ldots, p_n, in\rangle \\ &\quad = i\lim_{t_2\to-\infty}\int d^3x_2\langle q_2, \ldots, q_m, out|T(\phi(y_1)\phi(x_1))\big(\phi(x_2)\frac{\partial}{\partial t_2}e^{-ipx_2} - e^{-ipx_2}\frac{\partial}{\partial t_2}\phi(x_2)\big)|p_3, \ldots, p_n, in\rangle\end{aligned}$$

のようになりますが、これは明らかに時間順序積の中に $\phi(x_2)$ を入れられます。そうすれば、(6) での $t_2 = +\infty$ の項に対応する項から出てくる $a^\dagger_{out}(\boldsymbol{p}_2)$ は、$\phi(y_1)\phi(x_1)$ の左側に来ます。なので、同様の手順が踏めます。これは

$$\langle q_3, \ldots, q_m, out|a_{out}(\boldsymbol{q}_2)T(\phi(y_1)\phi(x_1))|p_2, \ldots, p_n, in\rangle$$

でも同じです。よって、真空で挟まれている形まで繰り返せば

$$S = \langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out | p_1, p_2, \ldots, p_n, in\rangle$$

$$= \text{disconnected}$$

$$+ (iZ^{-1/2})^{m+n}\int d^4y_1 \cdots d^4y_m d^4x_1 \cdots d^4x_n \ e^{iq_1y_1}\cdots e^{iq_my_m}e^{-ip_1x_1}\cdots e^{-ip_nx_n}$$

$$\times(\Box_{y_1}+m^2)\cdots(\Box_{y_m}+m^2)(\Box_{x_1}+m^2)\cdots(\Box_{x_n}+m^2)\langle 0, out|T(\phi(y_1)\cdots\phi(y_m)\phi(x_1)\cdots\phi(x_n))|0, in\rangle$$

となります ($|0, in\rangle = |0, out\rangle = |\Omega\rangle$)。漸近条件 (2) からの定数 $Z^{-1/2}$ をくっつけています。これを簡約公式 (reduction formula) や、これを示した Lehmann,Symanzik,Zimmermann から LSZ 簡約公式と呼びます。これによって、S 行列を n 点相関関数から求められます。

右辺は $(\Box + m^2)$ がなければ

$$G(k_1, \ldots k_n) = \int d^4z_1 \cdots d^4z_n \ e^{ik_1z_1}\cdots e^{ik_nz_n}\langle\Omega|T(\phi(z_1)\cdots\phi(z_n))|\Omega\rangle$$

$$= \int d^4z_1 \cdots d^4z_n \ e^{ik_1z_1}\cdots e^{ik_nz_n}G(z_1, \ldots, z_n)$$

という n 点相関関数のフーリエ変換の式なので、部分積分によって

$$\int d^4z \ e^{ikz}(\Box_z + m^2)\phi(z) = \int d^4z \ \phi(z)(\Box_z + m^2)e^{ikz}$$

$$= -\int d^4z \ (k^2 - m^2)e^{ikz}\phi(z)$$

と変形させることで、(5) から運動量表示では

$$S = \langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out | p_1, p_2, \ldots, p_n, in\rangle$$

$$= \text{disconnected}$$

$$+ (-iZ^{-1/2})^N(q_1^2 - m^2)\cdots(q_m^2 - m^2)(p_1^2 - m^2)\cdots(p_n^2 - m^2)$$

$$\times\langle 0, out|G(q_1, \ldots q_m, -p_1, \cdots, -p_n)|0, in\rangle \quad (q_i^0 = \sqrt{\boldsymbol{q}_i^2 + m^2}, p_i^0 = \sqrt{\boldsymbol{p}_i^2 + m^2}) \tag{10}$$

となります (規格化やフーリエ変換の定義によっては 2π とかが係数に出てくる)。$q_i^2 = m^2, p_i^2 = m^2$ なので、これは消えるように思えます。しかし、摂動論で言えば、n 点相関関数 $G(k_1, \ldots k_n)$ は伝播関数 $(k^2 - m^2 + i\epsilon)^{-1}$ と運動量積分の組み合わせなので、$k^2 = m^2$ となるときに $(q_i^2 - m^2)$ や $(p_i^2 - m^2)$ の項を消します。なので、(10) は消えるとは言えません。

フーリエ変換せずに部分積分の形で止めるともう少し構造が分かりやすいです。この場合は

$$
\begin{aligned}
S &= \langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out | p_1, p_2, \ldots, p_n, in \rangle \\
&= \text{disconnected} \\
&\quad + (-iZ^{-1/2})^{m+n} \int d^4y_1 \cdots d^4y_m d^4x_1 \cdots d^4x_n \ e^{iq_1y_1} \cdots e^{iq_my_m} e^{-ip_1x_1} \cdots e^{-ip_nx_n} \\
&\qquad\qquad \times (q_1^2 - m^2) \cdots (q_m^2 - m^2)(p_1^2 - m^2) \cdots (p_n^2 - m^2) \langle \Omega | T(\phi(y_1) \cdots \phi(y_m)\phi(x_1) \cdots \phi(x_n)) | \Omega \rangle
\end{aligned}
$$

disconnected の項は散乱前と散乱後の運動量が等しい過程を含んでいるので、散乱過程の計算からは無視できます (寄与しない)。第 2 項での

$$
(q_1^2 - m^2) \cdots (q_m^2 - m^2)(p_1^2 - m^2) \cdots (p_n^2 - m^2)
$$

の部分は、n 点相関関数のファインマン図の計算での

$$
\frac{1}{k^2 - m^2 + i\epsilon}
$$

によって打ち消されます。つまり、散乱振幅の connected な図への寄与は形式的に

$$
\begin{aligned}
&\langle q_1, q_2, \ldots, q_m, out | p_1, p_2, \ldots, p_n, in \rangle |_{\text{connected}} \\
&\quad = (-iZ^{-1/2})^{m+n} \int d^4y_1 \cdots d^4y_m d^4x_1 \cdots d^4x_n \ e^{iq_1y_1} \cdots e^{iq_my_m} e^{-ip_1x_1} \cdots e^{-ip_nx_n} \\
&\qquad\qquad \times \langle \Omega | T(\phi(y_1) \cdots \phi(y_m)\phi(x_1) \cdots \phi(x_n)) | \Omega \rangle |_{\text{connected}}
\end{aligned}
$$

と書けます。実際に、「不変振幅」での ϕ^4 理論の計算で、外線が繋がってバツの形になっている図の散乱振幅への寄与は

$$
-\frac{i\lambda}{4!}(2\pi)^4 \delta^4(p_A + p_B - p_1 - p_2)
$$

となっています。これは「経路積分〜クライン・ゴルドン場 (相互作用)〜」で示した 4 点相関関数の図を見れば分かるように、図を構成する 4 つの伝播関数がなくなり、頂点部分の運動量保存だけが残った形です。

今度は生成汎関数を使って簡約公式を求ます。状況設定は同じです。ラグランジアンとして

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

を使います。対応する方程式は

$$
(\Box + m^2)\phi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}_{int}}{\partial \phi(x)} \qquad (\hat{K}\phi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}_{int}}{\partial \phi(x)})
$$

という、相互作用ありのクライン・ゴルドン方程式です。簡略化するために左辺の演算子部分を $\hat{K}$ として

$$\hat{K}\phi(x) = \frac{\partial\mathcal{L}_{int}}{\partial\phi(x)}$$

という記号を定義しておきます。これに対するグリーン関数の満たすべき方程式は

$$(\Box_y + m^2)G(y-x) = \delta^4(y-x)$$

そうすると、よくあるグリーン関数の解法 (例えば QED での「相対論的な伝播関数」参照) によって、ϕ は

$$\phi(x) = \phi_{in}(x) - \int d^4y G^+(x-y)\frac{\partial\mathcal{L}_{int}}{\partial\phi(y)} = \phi_{in}(x) - \int d^4y G^+(x-y)\hat{K}_y\phi(y) \tag{11a}$$

$$\phi(x) = \phi_{out}(x) - \int d^4y G^-(x-y)\frac{\partial\mathcal{L}_{int}}{\partial\phi(y)} = \phi_{out}(x) - \int d^4y G^-(x-y)\hat{K}_y\phi(y) \tag{11b}$$

G^+ は遅延グリーン関数、G^- は先進グリーン関数で

$$G^+(x-y) = \theta(x_0-y_0)\Delta(x,y)\ ,\ G^-(x-y) = -\theta(y_0-x_0)\Delta(x,y)$$

と定義しています。θ は階段関数で、$\Delta(x,y)$ は

$$(\Box + m^2)\Delta(x,y) = 0$$

に従うものです (「伝播関数について」参照。グリーン関数の定義は「伝播関数について」とは $-i$ 異なっています)。$\phi_{in}(x), \phi_{out}(x)$ は同次の解で、条件として

$$\lim_{x_0\to-\infty}\phi(x) = \phi_{in}(x)\ ,\ \lim_{x_0\to+\infty}\phi(x) = \phi_{out}(x)$$

としています。これは演算子 $\hat{\phi}(x)$ でも同じですが、上で触れたように、この条件では数学的な問題が出てくるので、$\hat{\phi}_{in}(x), \hat{\phi}_{out}(x)$ には弱い漸近条件 (2) を使います。

これで準備が整ったので簡約公式を導きます。まず、場の演算子 $\hat{\phi}(x)$ を使って

$$I[J] = T\Big(\exp\Big[i\int d^4x\ J(x)\hat{\phi}(x)\Big]\Big)$$

というのを作ります (T は時間順序積)。c 数との区別をはっきりさせるために演算子にはハットをつけます。これを汎関数微分すれば

$$\frac{1}{i}\frac{\delta I[J]}{\delta J(x)} = T\Big(\hat{\phi}(x)\exp\Big[i\int d^4x\ J(x)\hat{\phi}(x)\Big]\Big) = T(\hat{\phi}(x)I[J])$$

となるので、$Z[J]$ と n 点相関関数の関係

$$\frac{1}{i^n}\frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(x_1)\cdots\delta J(x_n)}\Big|_{J=0} = \langle\Omega|T\left(\hat{\phi}(x_1)\cdots\hat{\phi}(x_n)\right)|\Omega\rangle$$

と比べると、$I[0]=1$ であることから、真空 $|\Omega\rangle$ で挟めば

$$Z[J] = \langle\Omega|I[J]|\Omega\rangle$$

となっていることがわかります。(11a) に $I[J]$ をかけて、時間順序積を作用させると $\hat{\phi}_{in}(x)$ は漸近条件から $x_0 \to -\infty$ なので

$$T(\hat{\phi}(x)I[J]) = T(\hat{\phi}_{in}(x)I[J]) - \int d^4y G^+(x-y)\hat{K}_y T(\hat{\phi}(y)I[J])$$
$$\frac{1}{i}\frac{\delta I[J]}{\delta J(x)} = I[J]\hat{\phi}_{in}(x) - \int d^4y G^+(x-y)\hat{K}_y \frac{1}{i}\frac{\delta I[J]}{\delta J(y)}$$

同様に $\hat{\phi}_{out}$ では $x_0 \to +\infty$ なので時間順序積の左側に来ることから

$$\frac{1}{i}\frac{\delta I[J]}{\delta J(x)} = \hat{\phi}_{out}(x)I[J] - \int d^4y G^-(x-y)\hat{K}_y \frac{1}{i}\frac{\delta I[J]}{\delta J(y)}$$

この二つを引いて

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_{out}(x)I[J] - I[J]\hat{\phi}_{in}(x) &= \int d^4y G^-(x-y)\hat{K}_y\frac{1}{i}\frac{\delta I[J]}{\delta J(y)} - \int d^4y G^+(x-y)\hat{K}_y\frac{1}{i}\frac{\delta I[J]}{\delta J(y)} \\ &= -\int d^4y \Delta(x-y)\hat{K}_y\frac{1}{i}\frac{\delta I[J]}{\delta J(y)} \quad (\Delta(x-y) = G^+(x-y) - G^-(x-y))\end{aligned}$$

これの左辺は (4) を使うと

$$\begin{aligned}\hat{S}^\dagger\hat{\phi}_{in}(x)\hat{S}I[J] - I[J]\hat{\phi}_{in}(x) &= \hat{S}^\dagger(\hat{\phi}_{in}\hat{S}I[J] - \hat{S}I[J]\hat{\phi}_{in}(x)) \\ &= \hat{S}^\dagger[\hat{\phi}_{in}(x), \hat{S}I[J]]\end{aligned}$$

となるので、左から $\hat{S}$ を作用させれば

$$\begin{aligned}[\hat{\phi}_{in}(x), \hat{S}I[J]] &= i\int d^4y \Delta(x-y)\hat{K}_y\frac{\delta\hat{S}I[J]}{\delta J(y)} \\ &= \int d^4y [\hat{\phi}_{in}(x), \hat{\phi}_{in}(y)]\hat{K}_y\frac{\delta\hat{S}I[J]}{\delta J(y)} \qquad (12)\end{aligned}$$

$\hat{K}_y$ は y による微分演算子なので、$\hat{S}$ と交換させます。$\Delta(x-y)$ は「伝播関数について」で見たように場の演算子の交換関係によるものなので

$$i\Delta(x-y)=[\hat{\phi}_{in}(x),\hat{\phi}_{in}(y)]$$

となっています。

ここで知りたいのは $\hat{S}I[J]$ がどうなっているのかです。そのために右辺の形を別の方向から求めます。必要になるのはハウスドルフの公式（A,B は演算子）

$$e^{B}Ae^{-B}=A+[B,A]$$

を変形した

$$e^{B}A=Ae^{B}+[B,A]e^{B}$$
$$[A,e^{B}]=[A,B]e^{B}$$

という形です。これを

$$[\hat{\phi}_{in}(x),e^{B}]=[\hat{\phi}_{in}(x),B]e^{B}$$

として、(12) と比較することで

$$e^{B}=\hat{S}I[J]$$

から、$\hat{S}I[J]$ を求めます。

(12) の形になるように、まず

$$\begin{aligned}\Big[\hat{\phi}_{in}(x),\exp\Big[\int d^4y\hat{\phi}_{in}(y)\hat{K}_y\frac{\delta}{\delta J(y)}\Big]\Big] &= \Big[\hat{\phi}_{in}(x),\int d^4y\hat{\phi}_{in}(y)\hat{K}_y\frac{\delta}{\delta J(y)}\Big]\exp\Big[\int d^4z\hat{\phi}_{in}(z)\hat{K}_z\frac{\delta}{\delta J(z)}\Big]\\ &= \int d^4y[\hat{\phi}_{in}(x),\hat{\phi}_{in}(y)]\hat{K}_y\frac{\delta}{\delta J(y)}\exp\Big[\int d^4z\hat{\phi}_{in}(z)\hat{K}_z\frac{\delta}{\delta J(z)}\Big]\\ &= i\int d^4y\Delta(x-y)\hat{K}_y\frac{\delta}{\delta J(y)}\exp\Big[\int d^4z\hat{\phi}_{in}(z)\hat{K}_z\frac{\delta}{\delta J(z)}\Big] \qquad (13)\end{aligned}$$

とします。これだと汎関数微分が浮いているので、適当な汎関数 $F[J]$ を exp にくっつけて

$$\begin{aligned}&i\int d^4y\Delta(x-y)\hat{K}_y\frac{\delta}{\delta J(y)}\exp\Big[\int d^4z\phi_{in}(z)\hat{K}_z\frac{\delta}{\delta J(z)}\Big]F[J]\\ &=i\int d^4y\Delta(x-y)\hat{K}_y\exp\Big[\int d^4z\phi_{in}(z)\hat{K}_z\frac{\delta}{\delta J(z)}\Big]\frac{\delta F[J]}{\delta J(y)}\end{aligned}$$

これと (12) の右辺とを比較すれば

$$\frac{\delta F[J]}{\delta J(y)} = \frac{\delta \hat{S} I[J]}{\delta J(y)} \frac{1}{\exp\left[\int d^4 y \phi_{in}(z) \hat{K} \frac{\delta}{\delta J(z)}\right]}$$

とすることで一致させられます。というわけで、(13) は

$$\begin{aligned}\left[\phi_{in}(x), \exp\left[\int d^4 z \phi_{in}(z) \hat{K} \frac{\delta}{\delta J(z)}\right] F[J]\right] &= i \int d^4 y \Delta(x-y) \hat{K}_y \exp\left[\int d^4 z \phi_{in}(z) \hat{K}_z \frac{\delta}{\delta J(z)}\right] \frac{\delta F[J]}{\delta J(y)} \\ &= i \int d^4 y \Delta(x-y) \hat{K}_y \frac{\delta \hat{S} I[J]}{\delta J(y)}\end{aligned}$$

となるので、$\hat{S} I[J]$ は (12) から

$$\hat{S} I[J] = \exp\left[\int d^4 z \phi_{in}(z) \hat{K}_z \frac{\delta}{\delta J(z)}\right] F[J]$$

となります。$F[J]$ を決定するために、$|\Omega\rangle$ で挟んでみると、$\langle\Omega|\hat{S} = \langle\Omega|$ であることから

$$\langle\Omega|\hat{S} I[J]|\Omega\rangle = \langle\Omega|I[J]|\Omega\rangle = Z[J]$$

そして、右辺は正規積にして挟めば、exp には ϕ_{in} が 1 つしかないので (ϕ_{in} は $|\Omega\rangle$ に対する生成、消滅演算子を含む)、正規積「: :」の性質である場の演算子を真空で挟めば 0 になるということから

$$\langle\Omega| : \exp\left[\int d^4 y \phi_{in}(y) \hat{K}_z \frac{\delta}{\delta J(y)}\right] F[J] : |\Omega\rangle = F[J]$$

よって、exp 部分を正規積にすれば $F[J] = Z[J]$ なので

$$\hat{S} I[J] =: \exp\left[\int d^4 y \phi_{in}(y) \hat{K}_z \frac{\delta}{\delta J(y)}\right] : Z[J]$$

となります。そして、$I[0] = 1$ であることから

$$\hat{S} =: \exp\left[\int d^4 z \phi_{in}(z) \hat{K}_z \frac{\delta}{\delta J(z)}\right] : Z[J]\Big|_{J=0} \tag{14}$$

となり、S 行列演算子 $\hat{S}$ が生成汎関数から求められます。exp を展開すると

$$\exp\left[\int d^4 z \phi_{in}(z) \hat{K}_z \frac{\delta}{\delta J(z)}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int dz_1 \cdots dz_n \phi_{in}(z_1) \cdots \phi_{in}(z_n) \hat{K}_{z_1} \frac{\delta}{\delta J(z_1)} \cdots \hat{K}_{z_n} \frac{\delta}{\delta J(z_n)}$$

となるので、$Z[J]$ に J の微分が掛かることで n 点相関関数が出てくることになります。そして、そこに $\hat{K}$ が作用して n 点相関関数の伝播関数を消し、デルタ関数が出てくるというようになっています。(4) から S 行列は $\hat{S}$ から

$$S = \langle \boldsymbol{q}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_m, out | \boldsymbol{p}_1, \ldots, \boldsymbol{p}_n, in\rangle = \langle \boldsymbol{q}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_m, in | \hat{S} | \boldsymbol{p}_1, \ldots, \boldsymbol{p}_n, in\rangle$$

で求まるので、(14) を必要な状態で挟めばいいです。というわけで、これが生成汎関数を使った場合での簡約公式 (reduction formula) となります。$\hat{S}$ を使って計算をしてみると S は伝播関数の積よって表現され、それは「S 行列」でファインマン則を使って振幅を求めたものと一致します。ただし、この場合 connected な図だけでなく disconnected な図も含めて出てくるので、自分で disconnected な図は除かないといけません。

ここではクライン・ゴルドン場で話をしてきましたが、ディラック場へ変更出来ます。出発点の方程式をディラック方程式にすればいいだけで、$\hat{K}$ を $i\gamma_\mu\partial^\mu - m$ に変更し、J を $\eta, \overline{\eta}$ の 2 つにすればいいです。なので

$$\hat{S} =: \exp\Big[\int d^4x\ \overline{\psi}_{in}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\frac{\delta}{\delta\overline{\eta}} - \frac{\delta}{\delta\eta}(-i\gamma^\mu\overleftarrow{\partial}_\mu - m)\psi_{in}\Big] : Z[\eta, \overline{\eta}]\Big|_{\eta=\overline{\eta}=0}$$

となります。