# S 行列

「不変振幅」で簡易的に作った $S$ 行列をもう少し細かく見ておきます。

ここでは極限が存在するかについては無視しています。
先に量子力学での「$S$ 行列」の話をしておきます。状態は $|\psi;t\rangle$ とし、これはシュレーディンガー方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi;t\rangle = H|\psi;t\rangle$$

に従います。$H$ は相互作用なしのハミルトニアン $H_0$ と相互作用部分 $H_{int}$ によって

$$H = H_0 + H_{int}$$

とします。このときの時間発展は

$$|\psi;t\rangle = e^{-iHt}|\psi;t=0\rangle$$

で与えられます。ここでは、$t=0$ で相互作用が起きているとします。なので、$|\psi\rangle = |\psi;t=0\rangle$ は始状態ではないことに注意してください。始状態は $|\psi_{in}\rangle$、終状態は $|\psi_{out}\rangle$ として

$$\lim_{t\to-\infty}|\psi;t\rangle = |\psi_{in}\rangle\ ,\ \lim_{t\to+\infty}|\psi;t\rangle = |\psi_{out}\rangle$$

$|\psi_{in}\rangle$ と $|\psi_{out}\rangle$ は相互作用なしでのハミルトニアン $H_0$ に従っているとして、時間発展は

$$|\psi_{in};t\rangle = e^{-iH_0t}|\psi_{in}\rangle\ ,\ |\psi_{out};t\rangle = e^{-iH_0t}|\psi_{out}\rangle$$

$|\psi_{in}\rangle, |\psi_{out}\rangle$ は時間独立な任意の状態です。
相互作用描像にします。$|\psi;t\rangle$ (シュレーディンガー描像) の相互作用描像は

$$|\psi;t\rangle_I = e^{iH_0t}|\psi;t\rangle$$

相互作用描像の時間発展は

$$|\psi;t_2\rangle_I = U(t_2,t_1)|\psi;t_1\rangle_I\ ,\ U(t_2,t_1) = e^{iH_0t_2}e^{-iH(t_2-t_1)}e^{-iH_0t_1}$$

ここでは時間発展演算子は $U$ しか出てこないので、相互作用描像を表す $I$ は書かずにいきます。これらから相互作用描像において

$$|\psi_{in};t\rangle_I = e^{iH_0t}|\psi_{in};t\rangle = e^{iH_0t}e^{-iH_0t}|\psi_{in}\rangle = |\psi_{in}\rangle$$

$|\psi_{in}\rangle$ は時間独立としているので

$$|\psi_{in};-\infty\rangle_I = |\psi_{in}\rangle$$

と与えて、同様に $|\psi_{out}\rangle$ を $t=+\infty$ での状態とし

$$|\psi_{out};+\infty\rangle_I = |\psi_{out}\rangle$$

また、始状態 $|\psi_{in}\rangle$ と終状態 $|\psi_{out}\rangle$ は時間独立な状態なので

$$|\psi;t=-\infty\rangle_I = |\psi_{in}\rangle\ ,\ |\psi;t=+\infty\rangle_I = |\psi_{out}\rangle$$

とします。

　$|\psi\rangle$ と $|\psi_{in}\rangle, |\psi_{out}\rangle$ を繋ぐ演算子 $\Omega_+, \Omega_-$ を

$$|\psi\rangle = \Omega_+|\psi_{in}\rangle\ ,\ |\psi\rangle = \Omega_-|\psi_{out}\rangle$$

と定義します。$|\psi\rangle$ と $|\psi_{in}\rangle$ は時間発展の関係から

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \lim_{t\to-\infty} e^{iHt}|\psi;t\rangle \\
&= \lim_{t\to-\infty} e^{iHt}|\psi_{in};t\rangle \\
&= \lim_{t\to-\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t}|\psi_{in}\rangle \\
&= \lim_{t\to-\infty} U(0,t)|\psi_{in}\rangle
\end{aligned}$$

$|\psi_{out}\rangle$ でも同様に

$$|\psi\rangle = \lim_{t\to+\infty} U(0,t)|\psi_{out}\rangle$$

となるので、$\Omega_\pm$ は

$$\Omega_+ = \lim_{t\to-\infty} U(0,t)\ ,\ \Omega_- = \lim_{t\to+\infty} U(0,t)$$

となり、これらは Mϕller wave operator と呼ばれます。
　後で使う $\Omega_\pm$ の性質を出しておきます。時間発展演算子 $U(0,t)$ は

$$e^{iHt_1}U(0,t_2) = U(0,t_1+t_2)e^{iH_0t_1}$$

という関係を持っています。これは

$$e^{iHt_1}e^{iHt_2}e^{-iH_0t_2} = e^{iH(t_1+t_2)}e^{-iH_0(t_1+t_2)}e^{iH_0t_1}$$
$$e^{iHt_1}U(0,t_2) = U(0,t_1+t_2)e^{iH_0t_1}$$

から確かめられます。これに対して $t_2$ の $\pm\infty$ の極限を取ると

$$e^{iHt_1}\Omega_\pm = \Omega_\pm e^{iH_0t_1}$$

となり、$t_1$ で微分して $t_1=0$ にすれば

$$H\Omega_\pm = \Omega_\pm H_0$$

という関係になります。
　$\Omega_\pm$ を使って $S$ 行列演算子を導入します。$\Omega_\pm$ は

$$\Omega_\pm^\dagger\Omega_\pm = 1$$

であることを使うと (ユニタリー演算子ではないことに注意。一般的に $\Omega_\pm\Omega_\pm^\dagger \neq 1$)

$$|\psi_{out}\rangle = \Omega_-^\dagger|\psi\rangle = \Omega_-^\dagger\Omega_+|\psi_{in}\rangle = S|\psi_{in}\rangle$$

として、$|\psi_{in}\rangle$ と $|\psi_{out}\rangle$ を繋ぐ演算子を定義できます。この $S$ は時間発展演算子 $U(t_1,t_2)$ によって

$$S = \Omega_-^\dagger\Omega_+ = \lim_{t_1\to-\infty}\lim_{t_2\to+\infty} U^\dagger(0,t_2)U(0,t_1) = \lim_{t_1\to-\infty}\lim_{t_2\to+\infty} U(t_2,t_1)$$

と与えられます。逆では

$$|\psi_{in}\rangle = \Omega_+^\dagger|\psi\rangle = \Omega_+^\dagger\Omega_-|\psi_{out}\rangle = \lim_{t_1\to-\infty}\lim_{t_2\to+\infty}U^\dagger(0,t_1)U(0,t_2) = S^\dagger|\psi_{out}\rangle$$

また、

$$S^\dagger = \lim_{t_1\to-\infty}\lim_{t_2\to+\infty}U^\dagger(0,t_1)U(0,t_2) = \lim_{t_1\to-\infty}\lim_{t_2\to+\infty}U(t_1,t_2)$$

から

$$S^\dagger S = SS^\dagger = 1$$

となっています。単純に言えば、$U$ がユニタリー演算子なので、$S$ もユニタリー演算子というだけです。

量子論で知りたいことは、始状態 $|A\rangle$ が相互作用を受けた後に観測したい終状態 $|B\rangle$ になる確率です。なので、$\psi(t)$ と $\Psi(t)$ という異なった状態 (同じハミルトニアンで記述される) による $\langle\Psi_{out}|\psi_{out}\rangle$ を今求められた関係を使って相互作用描像で書いてみると

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{out}|\psi_{out}\rangle &= {}_I\langle\Psi;+\infty|U(+\infty,0)U(0,-\infty)|\psi;-\infty\rangle_I\\ &= {}_I\langle\Psi;+\infty|U(+\infty,-\infty)|\psi;-\infty\rangle_I\\ &= {}_I\langle\Psi;+\infty|S|\psi;-\infty\rangle_I \qquad (1)\end{aligned}$$

となり、これが $S$ 行列となります。もっと単純には相互作用描像での

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{out}|\psi;t_2\rangle_I &= \langle\Psi_{out}|U(t_2,t_1)|\psi;t_1\rangle_I\\ &= {}_I\langle\Psi;t_2|U(t_2,t_1)|\psi;t_1\rangle_I \quad (|\Psi_{out}\rangle = \lim_{t\to+\infty}|\Psi;t\rangle_I)\end{aligned}$$

に対して $t_2\to+\infty,\ t_1\to-\infty$ の極限を取ったものです。

このようにして、$S$ 行列と $S$ 行列演算子は

$$\begin{aligned}&S = \langle\Psi_{out}|\psi_{out}\rangle = {}_I\langle\Psi;+\infty|\hat{S}|\psi;-\infty\rangle_I\\ &\hat{S} = \lim_{t_1\to-\infty}\lim_{t_2\to+\infty}U(t_2,t_1)\end{aligned}$$

と定義されます。

この定義から $S$ 行列の計算を行えますが、場の量子論では場の演算子を使うので、それに合うように $S$ 行列を与えます (場の理論でない量子力学でも同様に作れる)。

まず、$|\alpha,in\rangle, |\alpha,out\rangle$ という状態を作ります。この状態に対する粒子の生成、消滅は、$\phi_{in}(x),\phi_{out}(x)$ による生成、消滅演算子 $a^\dagger_{in}(\boldsymbol{p}),a^\dagger_{out}(\boldsymbol{p}),a_{in}(\boldsymbol{p}),a_{out}(\boldsymbol{p})$ によって出来るとします。$\phi_{in}(x),\phi_{out}(x)$ の時間発展は相互作用も含めたハミルトニアン $H$ によるとして

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

に従うとします (相互作用がある状況なので $H$ によって記述される)。しかし、これだと手が出なくなるので、$\phi_{in}(x)$ は相互作用のないハミルトニアン $H_0$ を用いて記述できるように作ります。

$\phi_{in}(\boldsymbol{x},t)$ の時間発展は

$$\phi_{in}(\boldsymbol{x},t)=e^{iHt}\phi_{in}(\boldsymbol{x})e^{-iHt}$$

なので

$$[\phi_{in}(x),H]=e^{iHt}\phi_{in}(\boldsymbol{x})e^{-iHt}H-He^{iHt}\phi_{in}(\boldsymbol{x})e^{-iHt}=e^{iHt}\phi_{in}(\boldsymbol{x})He^{-iHt}-e^{iHt}H\phi_{in}(\boldsymbol{x})e^{-iHt}$$

ここで $\Omega_\pm$ とハミルトニアンの関係 $H\Omega_\pm=\Omega_\pm H_0$ を利用して、$H$ を $H_0$ に書き換えることを考えます。そのために

$$\phi_{in}(\boldsymbol{x})=\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger$$

とすると

$$\begin{aligned}
&e^{iHt}\phi_{in}(\boldsymbol{x})He^{-iHt}-e^{iHt}H\phi_{in}(\boldsymbol{x})e^{-iHt}\\
&\quad=e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger He^{-iHt}-e^{iHt}H\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt}\\
&\quad=e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}-e^{iHt}\Omega_+H_0\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt}\\
&\quad=e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}-e^{iHt}\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt}\\
&\quad=e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt}e^{iHt}\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}-e^{iHt}\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt}\\
&\quad=(e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt})e^{iHt}\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}-e^{iHt}\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}(e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt})\\
&\quad=\phi_{in}(\boldsymbol{x},t)e^{iHt}\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}-e^{iHt}\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}\phi_{in}(\boldsymbol{x},t)\\
&\quad=\phi_{in}(\boldsymbol{x},t)H_0^{in}-H_0^{in}\phi_{in}(\boldsymbol{x},t)\qquad(H_0^{in}=e^{iHt}\Omega_+H_0\Omega_+^\dagger e^{-iHt}=H_0(\phi_{in}(\boldsymbol{x},t),\pi_{in}(\boldsymbol{x},t)))\\
&\quad=[\phi_{in}(\boldsymbol{x},t),H_0^{in}]
\end{aligned}$$

$H_0$ での $\phi(\boldsymbol{x}),\pi(\boldsymbol{x})$ は $e^{iHt}\Omega_+$ と $\Omega_+^\dagger e^{-iHt}$ で挟んで $\phi_{in}(x),\pi_{in}(x)$ になれるように含まれていると仮定しています (多項式しかない)。これから、ハイゼンベルク方程式は、

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

となり、場の演算子が

$$\phi_{in}(x) = e^{iHt}\phi_{in}(\boldsymbol{x})e^{-iHt} = e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt}$$

と変換されている相互作用のないハミルトニアン $H_0(\phi_{in}(x), \pi_{in}(x))$ によって書かれています ($H_0(\phi_{in}(x), \pi_{in}(x)) = H$)。これは相互作用描像の場の演算子が相互作用のないハイゼンベルク描像の場の演算子とみなせたのと同じ状況です。なので、$\phi_{in}(x)$ はスカラー場なら相互作用のないクライン・ゴルドン方程式に従います。

$\phi_{in}(\boldsymbol{x}, t)$ の変換は

$$\begin{aligned}
\phi_{in}(\boldsymbol{x}, t) &= e^{iHt}\phi_{in}(\boldsymbol{x})e^{-iHt} \\
&= e^{iHt}\Omega_+\phi(\boldsymbol{x})\Omega_+^\dagger e^{-iHt} \\
&= \Omega_+ e^{iH_0t}\phi(\boldsymbol{x})e^{-iH_0t}\Omega_+^\dagger \\
&= \Omega_+ e^{iH_0t}e^{-iHt}e^{iHt}\phi(\boldsymbol{x})e^{-iHt}e^{iHt}e^{-iH_0t}\Omega_+^\dagger \\
&= \Omega_+ U^\dagger(0, t)e^{iHt}\phi(\boldsymbol{x})e^{-iHt}U(0, t)\Omega_+^\dagger \\
&= \Omega_+ U^\dagger(0, t)\phi(\boldsymbol{x}, t)U(0, t)\Omega_+^\dagger \\
&= \Omega_+ U(t, 0)\phi(\boldsymbol{x}, t)U^\dagger(t, 0)\Omega_+^\dagger \\
&= \Omega_+\phi_I(\boldsymbol{x}, t)\Omega_+^\dagger
\end{aligned}$$

と変形できます。途中でハイゼンベルク描像 $A(t)$ と相互作用描像 $A_I(t)$ の関係

$$A_I(t) = U(t, 0)A(t)U^\dagger(t, 0)$$

を使っています。$\phi_{out}$ も同様にすることで、ハイゼンベルク描像と相互作用描像の変換

$$\begin{aligned}
\phi_{in}(\boldsymbol{x}, t) = \Omega_+U(t, 0)\phi(\boldsymbol{x}, t)U^\dagger(t, 0)\Omega_+^\dagger = \Omega_+\phi_I(\boldsymbol{x}, t)\Omega_+^\dagger \\
\phi_{out}(\boldsymbol{x}, t) = \Omega_-U(t, 0)\phi(\boldsymbol{x}, t)U^\dagger(t, 0)\Omega_-^\dagger = \Omega_-\phi_I(\boldsymbol{x}, t)\Omega_-^\dagger
\end{aligned}$$

が求まります。$\phi_{out}(x)$ も相互作用のないクライン・ゴルドン方程式に従います。

この変換によって、相互作用描像での状態から $|\alpha, in\rangle$ への変換は

$$|\alpha, in\rangle = \Omega_+|\alpha\rangle_I\ ,\ |\alpha, out\rangle = \Omega_-|\alpha\rangle_I$$

両辺は時間依存していないので $|\alpha\rangle_I = |\alpha; \pm\infty\rangle_I$ と出来ます。そうすると

$$|\alpha, in\rangle = \Omega_+|\alpha\rangle_I = \Omega_+\Omega_-^\dagger|\alpha, out\rangle$$

となるので、$|\alpha, in\rangle$ と $|\alpha, out\rangle$ を繋ぐ演算子として

$$\mathcal{S} = \Omega_+ \Omega_-^\dagger$$

を与えられます。これは

$$\mathcal{S}^\dagger \mathcal{S} = \Omega_- \Omega_+^\dagger \Omega_+ \Omega_-^\dagger = 1\ ,\ \mathcal{S}\mathcal{S}^\dagger = \Omega_+ \Omega_-^\dagger \Omega_- \Omega_+^\dagger = 1$$

なので、ユニタリー演算子です。

この結果から

$$\begin{aligned}
\langle \beta, out|\alpha, in\rangle &= \langle \beta, out|\mathcal{S}|\alpha, out\rangle \\
&= {}_I\langle \beta|\Omega_-^\dagger \mathcal{S} \Omega_-|\alpha\rangle_I \\
&= {}_I\langle \beta|\Omega_-^\dagger \Omega_+ \Omega_-^\dagger \Omega_-|\alpha\rangle_I \\
&= {}_I\langle \beta|\Omega_-^\dagger \Omega_+|\alpha\rangle_I \\
&= \lim_{t_1 \to +\infty} \lim_{t_2 \to -\infty} {}_I\langle \beta|U^\dagger(0, t_1) U(0, t_2)|\alpha\rangle_I \\
&= {}_I\langle \beta|U(+\infty, -\infty)|\alpha\rangle_I
\end{aligned}$$

となり、(1) での $S$ 行列に一致します。また $\phi_{in}(x)$ と $\phi_{out}(x)$ は

$$\begin{aligned}
\phi_{in}(x) &= \Omega_+ \phi_I(x) \Omega_+^\dagger \\
&= \Omega_+ \Omega_-^\dagger \Omega_- \phi_I(x) \Omega_-^\dagger \Omega_- \Omega_+^\dagger \\
&= \Omega_+ \Omega_-^\dagger \phi_{out}(x) \Omega_- \Omega_+^\dagger \\
&= \mathcal{S} \phi_{out}(x) \mathcal{S}^\dagger
\end{aligned}$$

となっています。

特徴的なのは、最初の $|\psi, -\infty\rangle_I, |\psi, +\infty\rangle_I$ は相互作用のないハミルトニアン $H_0$ に従っているのに対して、$|\alpha, in\rangle, |\alpha, out\rangle$ は $H$ に従っていることです。このため、今見た定義だと相互作用あるなしのハミルトニアンの切り替えがないです。

$\phi_{in}(x), \phi_{out}(x)$ について簡単に触れておきます。これらは相互作用のないハミルトニアンにしたがっているので、相互作用ありでのクライン・ゴルドン方程式

$$(\Box + m^2)\phi(x) = J(x)$$

の解において

$$\phi(x) = \phi_{in}(x) - \int d^4x\ G^{+}(x - x')J(x')$$

$$\phi(x) = \phi_{out}(x) - \int d^4x\ G^{-}(x - x')J(x')$$

として、第 1 項に同次での場合 $(J(x) = 0)$ の解として入ってきます。$G^+, G^-$ は遅延、先進グリーン関数で、時間に対して遅延は $t > t'$, 先進は $t < t'$ となっています $(t = x_0, t' = x'_0)$。これは相互作用が $\phi_{in}$ となる $t = -\infty$ と、$\phi_{out}$ となる $t = +\infty$ で消えることを要求します。このため適当な状態で $\phi(x)$ を挟んだとき

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

$$\lim_{t \to +\infty} \langle b|\phi(x)|a\rangle = \langle b|\phi_{out}(x)|a\rangle$$

となる条件が入ってきます (これは修正が必要な形です。「簡約公式」参照)。単純に言えば、微分方程式と適当な初期条件に対して $\phi(x)$ が求められ、それが滑らかな関数であるなら、$\phi_{in}(x), \phi_{out}(x)$ が存在するはずということです。この条件のもとで、$\phi_{in}(x), \phi_{out}(x)$ を相互作用のないハイゼンベルク描像の演算子に対応させられます。そうすることで、$\phi_{in}(x), \phi_{out}(x)$ からの生成演算子によって

$$|\alpha, in\rangle = |p_1, p_2, \ldots, p_n, in\rangle = a^{\dagger}_{in}(\boldsymbol{p}_1)a^{\dagger}_{in}(\boldsymbol{p}_2)\cdots a^{\dagger}_{in}(\boldsymbol{p}_n)|\Omega, in\rangle$$

$$|\alpha, out\rangle = |p_1, p_2, \ldots, p_n, out\rangle = a^{\dagger}_{out}(\boldsymbol{p}_1)a^{\dagger}_{out}(\boldsymbol{p}_2)\cdots a^{\dagger}_{out}(\boldsymbol{p}_n)|\Omega, out\rangle$$

となる状態を作れ、$S$ 行列を

$$S = \langle \beta, out|\alpha.in\rangle\ ,\ \ \phi_{in}(x) = \mathcal{S}\phi_{out}(x)\mathcal{S}^{\dagger}$$

と与えられます。