



# Nelson's Stochastic Quantization in Thermo Field Dynamics

2010年8月31日

基研研究会 「熱場の量子論とその応用」

小林恵太 早稲田大学理工学研究所

山中由也 早稲田大学電子光システム学科

# 目次

- Nelsonの量子力学
- Nelson確率過程の熱的状況下への拡張
  - Thermo Field Dynamics (TFD)
  - TFDによるNelson確率過程量子化
- 有限温度調和振動子への適用
  - 数値結果
  - 確率力学による位置と運動量の不確定性関係
- まとめと今後の展望

# Nelson量子力学 ①

## 仮定 I : Brownian運動する粒子を仮定

Langevin方程式: 時間可逆性を取り入れるためforward time型とbackward time型を用いる

forward time 
$$dx(t) = b(x(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}dW$$
  

$$(dx(t) = x(t + dt) - dx(t))$$

backward time 
$$dx(t) = b_*(x(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}dW_*$$
  

$$(dx(t) = x(t) - dx(t - dt))$$

white Gaussian noise

$$E[dW_i(t)] = E[dW_{i*}(t)] = 0$$

$$E[dW_i(t)dW_j(t)] = E[dW_{*i}(t)dW_{*j}(t)] = \delta_{ij}dt$$

$$(i = x, y, z)$$

## 仮定 II : 外場の影響をNewtonの運動方程式により取り入れる

### Newton-Nelson方程式

$$ma(t) = -\nabla V$$

前向き微分 
$$Df(t) = \lim_{dt \rightarrow 0+} E \left[ \frac{f(x(t+dt)) - f(x(t))}{dt} \middle| x(t) \right]$$

平均加速度

$$a(t) = \frac{1}{2}(DD_* + D_*D)x(t)$$

後ろ向き微分 
$$D_*f(t) = \lim_{dt \rightarrow 0+} E \left[ \frac{f(x(t)) - f(x(t-dt))}{dt} \middle| x(t) \right]$$

$E[\dots | x(t)]$ : 条件付期待値



Schrödinger方程式:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t) \right) \Psi(x, t)$  を導出できる

# Nelson量子力学 ②

## Nelson量子力学

仮定 I : Brownian運動

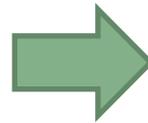
仮定 II : Newtonの運動方程式



## Schrödinger方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t) \right) \Psi(x, t)$$

Langevin方程式の速度場項、確率分布を与える方程式としてSchrödinger方程式が導出される



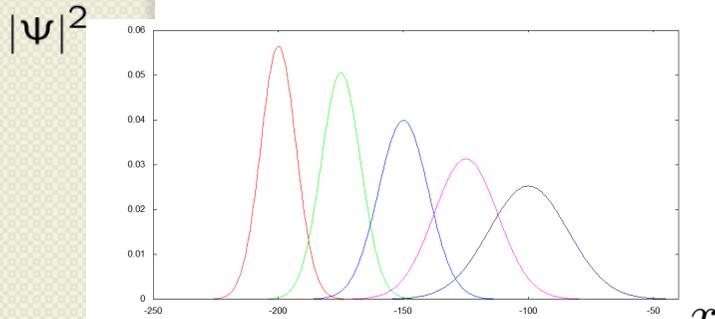
## Langevin方程式

**forward time**  $dx(t) = b(x(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}dW$

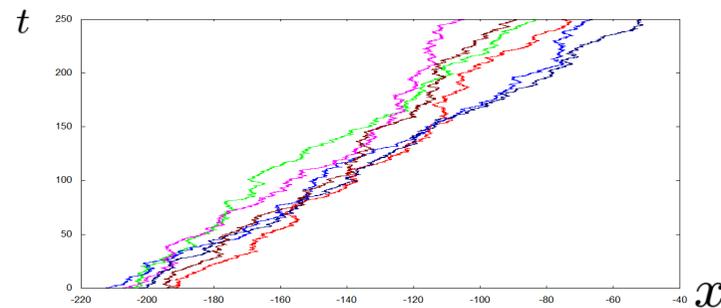
速度場項  $b = \frac{\hbar}{m}(\text{Re} + \text{Im})\nabla \ln \Psi$

**backward time**  $dx(t) = b_*(x(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}dW_*$

速度場項  $b_* = -\frac{\hbar}{m}(\text{Re} - \text{Im})\nabla \ln \Psi$



波束の時間発展(確率分布)



粒子の軌跡(サンプルパス)

- ・粒子の軌跡(サンプルパス)を与えることができる  
(サンプルパスが従う確率分布はSchrödinger方程式から得られるものと等価になる)
- ・粒子の通過時間、トンネル時間などが計算できる
- ・速度場項を求めるためにSchrödinger方程式を解かなければならない

# Nelson確率過程の熱的状況下への拡張

## 拡張と応用

- 多体系への拡張

Nelson E 1985 Quantum Fluctuations (Princeton Univ. Press, New Jersey)

Loffredo I M and Morato L M 2007 J. Phys. A: Math. Theor. **40** 8709

- ラグランジアン形式への拡張

Yasue K 1981 J. Funct. Anal. **41** 327

- トンネル時間の計算

Imafuku K, Ohba I and Yamanaka Y 1995 Phys. Lett. A **204** 329

### 熱の効果を取り入れた拡張

- 調和振動子系

Ruggiero P and Zannetti M 1982 Phys. Rev. Lett. **48** 963

- Schrödinger Langevin方程式**

Yasue K 1978 Ann. Phys. **114** 479



Newton-Nelson方程式を変更する

$$ma(t) = -\nabla V - \gamma \frac{b + b^*}{2} + \sqrt{D}dW$$

熱揺らぎと摩擦項を付け加える

K.Yasue (1978)

## 今回の発表

- 量子統計力学と等価になるような拡張を行いたい
- Thermo Field Dynamics の形式を用いる

# Thermo Field Dynamics (TFD)

量子揺らぎ



熱揺らぎを用いて表す

Parisi-Wu 確率過程量子化 (仮想時間)

Nelson 確率過程量子化 (実時間)

熱揺らぎ



量子揺らぎを用いて表す

Thermo Field Dynamics (自由度二重化)

# Thermo Field Dynamics (TFD)

自由度を倍加

$$A \rightarrow A, \tilde{A}$$

$$|u_n\rangle \rightarrow |u_n, \tilde{u}_n\rangle$$

$$H|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle$$

Hamiltonian

$$H \rightarrow \hat{H} = H - \tilde{H}$$

状態ベクトル

$$|\Phi\rangle = \sum_n f_n |u_n, \tilde{u}_n\rangle \longrightarrow$$

期待値

$$\langle \Phi | A | \Phi \rangle = \sum_n f_n^2 \langle u_n | A | u_n \rangle = \text{Tr}[\rho A]$$

$$\rho = \sum_n f_n^2 |u_n\rangle \langle u_n|$$

- ・混合状態の期待値を純粋状態での期待値で表現できる
- ・ノンチルダ粒子とチルダ粒子間の量子相関を熱揺らぎに読み替える

状態ベクトルの時間発展: TFD型Schrödinger方程式  $i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = (H - \tilde{H}) |\Psi(t)\rangle$

密度行列との対応

$\rho$	$\iff$	$ \Psi\rangle$
$A\rho$	$\iff$	$A \Psi\rangle$
$\rho A^\dagger$	$\iff$	$\tilde{A} \Psi\rangle$
$\mathcal{L}$	$\iff$	$\hat{H} = H - \tilde{H}$
$\rho^\dagger = \rho$	$\iff$	$( \Psi\rangle)^\sim =  \Psi\rangle$
$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = \mathcal{L}\rho(t)$	$\iff$	$i\hbar \frac{d}{dt}  \Psi(t)\rangle = (H - \tilde{H})  \Psi(t)\rangle$

# TFDによるNelson確率過程量子化 ①

## 方針

Schrödinger方程式 (純粋状態)

Liouville-von Neumann 方程式 (混合状態)

⇕ 等価

⇕ 等価

Nelsonの量子力学 (確率微分方程式)

TFD型Schrödinger方程式 (純粋状態)

- ・TFD型Schrödinger方程式の再現を目指す
- ・ノンチルダ粒子、チルダ粒子を記述するLangevin方程式を用いる
- ・今回は簡単のため1粒子系で議論を進める(多体系への拡張は容易)

## TFD型Schrödinger方程式(1粒子系、x表示)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, \tilde{x}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t) + \frac{\hbar^2}{2m} \tilde{\nabla}^2 - V(\tilde{x}, t) \right] \Psi(x, \tilde{x}, t)$$

変形

$$\Psi = e^{R+iS} \quad \left( v = \frac{\hbar}{m} \nabla S \quad \tilde{v} = -\frac{\hbar}{m} \tilde{\nabla} S \quad u = \frac{\hbar}{m} \nabla R \quad \tilde{u} = \frac{\hbar}{m} \tilde{\nabla} R \right)$$

Dynamical方程式

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} (\nabla^2 - \tilde{\nabla}^2) u + (u \cdot \nabla - \tilde{u} \cdot \tilde{\nabla}) u - (v \cdot \nabla + \tilde{v} \cdot \tilde{\nabla}) v - \frac{1}{m} \nabla (V - \tilde{V})$$

Kinematical方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} (\nabla^2 - \tilde{\nabla}^2) v - \nabla (u \cdot v + \tilde{u} \cdot \tilde{v})$$

Nelsonの方法を用いてTFD型のDynamical, Kinematical方程式を導出していく

# TFDによるNelson確率過程量子化 ②

$$i\hbar \frac{d}{dt} A = [A, \hat{H}] = [A, H]$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{A} = [\tilde{A}, \hat{H}] = -[\tilde{A}, \tilde{H}]$$

チルダ自由度: もととのシステム(ノンチルダ)を時間反転させたものと見做せる

チルダ粒子はノンチルダ粒子に対し時間逆向きの振る舞いをする

## Langevin方程式

チルダ粒子の振る舞いをbackward time型のLangevin方程式で記述

• forward time

$$dx(t) = b(x(t), \tilde{x}(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}dW, \quad (dx(t) = x(t+dt) - dx(t))$$

$$d\tilde{x}(t) = \tilde{b}_*(x(t), \tilde{x}(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\tilde{W}_*, \quad (d\tilde{x}(t) = \tilde{x}(t) - d\tilde{x}(t-dt))$$

• backward time

$$dx(t) = b_*(x(t), \tilde{x}(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}dW_*, \quad (dx(t) = x(t) - dx(t-dt))$$

$$d\tilde{x}(t) = \tilde{b}(x(t), \tilde{x}(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\tilde{W}, \quad (d\tilde{x}(t) = \tilde{x}(t+dt) - d\tilde{x}(t))$$

前向き微分  $\bar{D}f(x(t), \tilde{x}(t), t) = \lim_{dt \rightarrow 0^+} E \left[ \frac{f(x(t+dt), \tilde{x}(t), t+dt) - f(x(t), \tilde{x}(t-dt), t)}{dt} \middle| x(t), \tilde{x}(t) \right]$

後ろ向き微分  $\bar{D}_*f(x(t), \tilde{x}(t), t) = \lim_{dt \rightarrow 0^+} E \left[ \frac{f(x(t), \tilde{x}(t+dt), t) - f(x(t-dt), \tilde{x}(t), t-dt)}{dt} \middle| x(t), \tilde{x}(t) \right]$

# TFDによるNelson確率過程量子化 ③

## Fokker-Planck方程式

$$\begin{aligned} \text{forward time} \quad \frac{\partial P}{\partial t} &= -\nabla \cdot (bP) - \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{b}_*P) + \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{\hbar} (\nabla^2 - \tilde{\nabla}^2) P \\ \text{backward time} \quad \frac{\partial P}{\partial t} &= -\nabla \cdot (b_*P) - \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{b}P) - \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{\hbar} (\nabla^2 - \tilde{\nabla}^2) P \end{aligned}$$

連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t} P + \nabla \cdot (vP) + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{v}P) = 0$$

浸透圧公式

$$\mathbf{u} = \frac{\hbar}{2m} \nabla \ln P, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{\hbar}{2m} \tilde{\nabla} \ln P$$

浸透速度場

流速速度場

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \frac{1}{2}(\mathbf{b} - \mathbf{b}_*), & \mathbf{v} &= \frac{1}{2}(\mathbf{b} + \mathbf{b}_*), \\ \tilde{\mathbf{u}} &= \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{b}} - \tilde{\mathbf{b}}_*), & \tilde{\mathbf{v}} &= \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{b}} + \tilde{\mathbf{b}}_*), \end{aligned}$$

## TFD型Kinematical方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u} = -\frac{\hbar}{2m} (\nabla^2 - \tilde{\nabla}^2) \mathbf{v} - \nabla(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{v}})$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\mathbf{u}} = -\frac{\hbar}{2m} (\nabla^2 - \tilde{\nabla}^2) \tilde{\mathbf{v}} - \tilde{\nabla}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{v}}) \right)$$

# TFDによるNelson確率過程量子化 ④

Newton-Nelson方程式

$$m\mathbf{a} = -\nabla(V - \tilde{V}) \quad (m\tilde{\mathbf{a}} = \tilde{\nabla}(V - \tilde{V})) \quad \mathbf{a}(t) = \frac{1}{2}(\bar{D}\bar{D}_* + \bar{D}_*\bar{D})\mathbf{x}(t)$$



TFD型Dynamical方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= \frac{\hbar}{2m} (\nabla^2 - \tilde{\nabla}^2) \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla - \tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla}) \mathbf{u} - (\mathbf{v} \cdot \nabla + \tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla}) \mathbf{v} - \frac{1}{m} \nabla(V - \tilde{V}) \\ \left( \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} (\tilde{\nabla}^2 - \nabla^2) \tilde{\mathbf{u}} + (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\nabla} - \mathbf{u} \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{u}} - (\tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\nabla} + \mathbf{v} \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{v}} - \frac{1}{m} \tilde{\nabla}(V - \tilde{V}) \right) \end{aligned}$$

TFD型Schrödinger方程式と等価！

forward time  $dx(t) = b(x(t), \tilde{x}(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\mathbf{W}, \quad d\tilde{x}(t) = \tilde{b}_*(x(t), \tilde{x}(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\tilde{\mathbf{W}}_*$

backward time  $dx(t) = b_*(x(t), \tilde{x}(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\mathbf{W}_*, \quad d\tilde{x}(t) = \tilde{b}(x(t), \tilde{x}(t), t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\tilde{\mathbf{W}}$

速度場項

$$\mathbf{b} = \frac{\hbar}{m}(\text{Re} + \text{Im})\nabla \ln \Psi, \quad b_* = -\frac{\hbar}{m}(\text{Re} - \text{Im})\nabla \ln \Psi, \quad \tilde{\mathbf{b}} = \frac{\hbar}{m}(\text{Re} - \text{Im})\tilde{\nabla} \ln \Psi, \quad \tilde{b}_* = -\frac{\hbar}{m}(\text{Re} + \text{Im})\tilde{\nabla} \ln \Psi$$

# 有限温度調和振動子 ①

調和振動子中のSchrödinger方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, \tilde{x}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\omega^2 m}{2} x^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\omega^2 m}{2} \tilde{x}^2 \right) \Psi(x, \tilde{x}, t)$$

$$\Psi_{\text{eq}}(x, \tilde{x}) = \sum_n \frac{e^{-\frac{\beta \hbar \omega n}{2}}}{Z(\beta)^{1/2}} u_n(x) u_n^*(\tilde{x}) \quad \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\omega^2 m}{2} x^2 \right) u_n(x) = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) u_n(x)$$

熱平衡解

$$\Psi_{\text{eq}}(x, \tilde{x}) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left( -\frac{m\omega}{\hbar} \frac{(x^2 + \tilde{x}^2) \cosh(\beta\hbar\omega/2) - 2x\tilde{x}}{2 \sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right)$$

## Langevin方程式

ノンチルダ粒子

$$dx(t) = -\omega \left( x(t) \frac{\cosh(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} - \tilde{x}(t) \frac{1}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right) dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}} dW$$

チルダ粒子

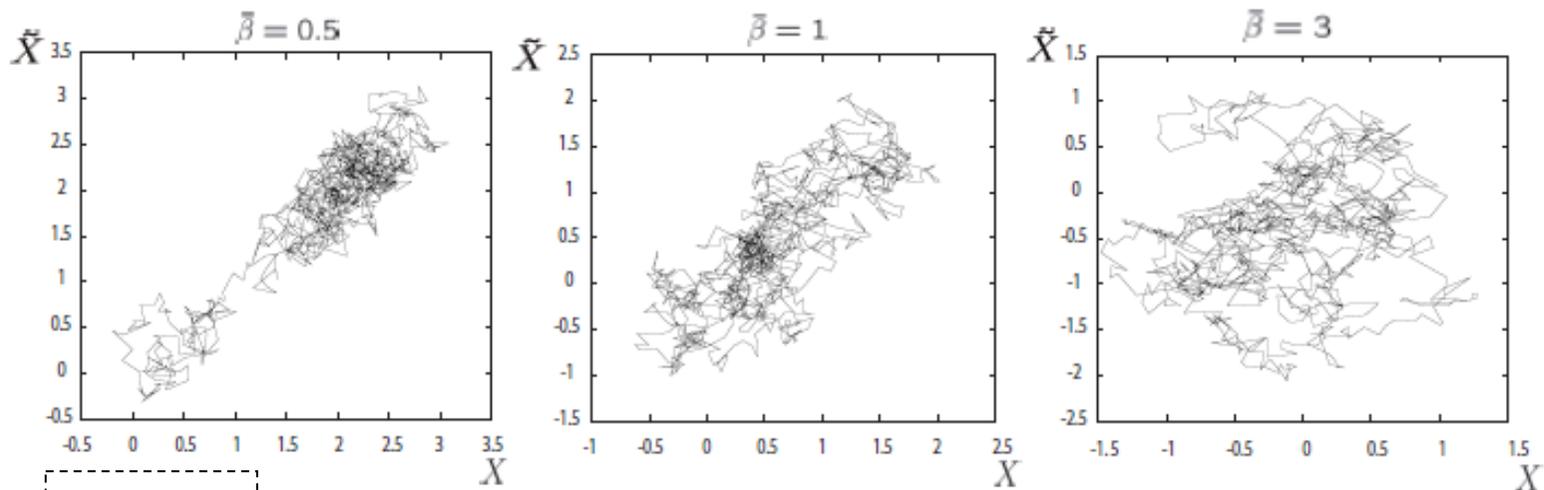
$$d\tilde{x}(t) = \omega \left( \tilde{x}(t) \frac{\cosh(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} - x(t) \frac{1}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right) dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}} dW$$

★ 熱揺らぎは速度場項を通じてチルダ・ノンチルダ粒子の運動により引き起こされる

★ 低温 ( $\beta\hbar\omega \gg 1$ ) においてノンチルダ粒子、チルダ粒子の運動は独立となる

$$\left\{ dx(t) \simeq -\omega x(t) dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}} dW \quad \Rightarrow \quad P(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left( -\frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right) \quad \text{基底状態の確率密度} \right\}$$

# 有限温度調和振動子 ② (数値結果)



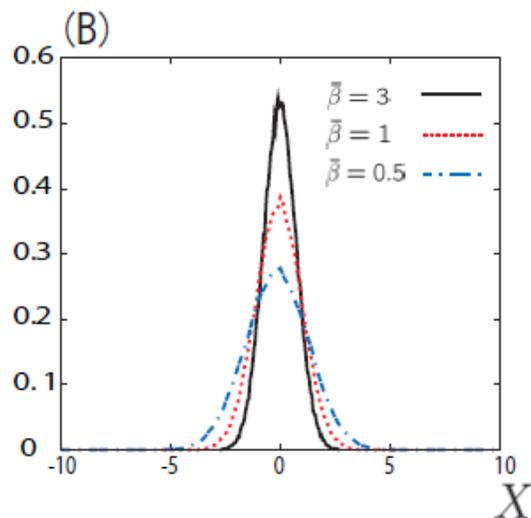
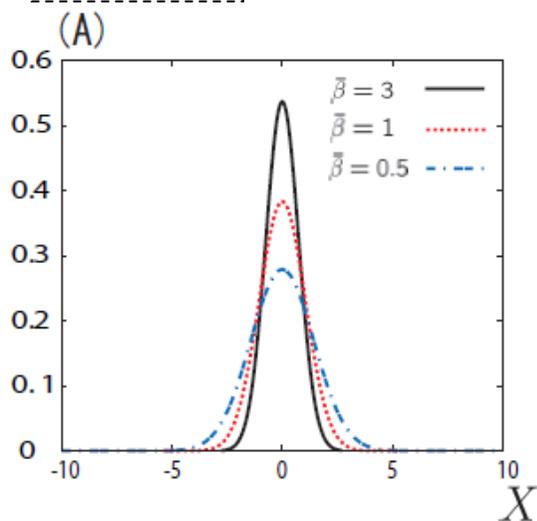
$$\bar{\beta} = \hbar\omega\beta$$

$$X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

$$\tilde{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\tilde{x}$$

(X,  $\tilde{X}$ ) 平面でのサンプルパス

・高温になるにつれノンチルダ粒子とチルダ粒子間の相関が強くなる



(A): 粒子の確率分布(解析解)

(B): 多数回の試行によりサンプルパス(ノンチルダ粒子)から作成したヒストグラム

・有限温度の確率分布を再現することを数値計算上でも確認

# Nelson確率過程における不確定性関係

浸透圧公式:  $u = \frac{\hbar}{2m} \nabla \ln P$   
 前向き運動量:  $p = mb$   
 後ろ向き運動量:  $p_* = mb_*$



$$E \left[ (x_i - E[x_i]) \left( \frac{p_i - p_{*i}}{2} - E \left[ \frac{p_i - p_{*i}}{2} \right] \right) \right] = -\frac{\hbar}{2}$$

シュワルツの不等式を用いて



$$\sqrt{\text{Var}[x_i]} \sqrt{\text{Var}[(p_i - p_{*i})/2]} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Falco D, Martino S, and Siena S 1982 Phys. Rev.Lett. **49** 181

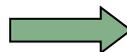
確率力学による位置と運動量の不確定性関係

## ・有限温度調和振動子系

位置と運動量の分散

$$\text{Var}[x_i] = \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{1}{\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}$$

$$\text{Var}[(p_i - p_{*i})/2] = \frac{m\hbar\omega}{2} \frac{1}{\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}$$



位置と運動量の不確定性関係

$$\sqrt{\text{Var}[x_i]} \sqrt{\text{Var}[(p_i - p_{*i})/2]} = \frac{\hbar}{2} + \hbar N$$

量子揺らぎ

熱揺らぎ

$$\left[ N = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right]$$

- ・有限温度不確定性関係: 量子揺らぎ+熱揺らぎ
- ・一般化された不確定性関係を確率力学により再現

Mann A, Revzen M, Umezawa H and Yamanaka Y 1989 Phys Lett. **140A** 475

# まとめと今後の展望

## まとめ

- **Nelson確率過程量子化を熱的状況下への拡張**
  - ★有限温度調和振動子系に適用、数値計算を行った
  - ★確率過程を用いた有限温度下での不確定性関係を導出
  - ★量子統計力学を再現する結果が得られた
- **多体系への拡張は容易**

## 今後の展望

- **散逸系(量子開放系)への拡張など**

# 古典的なLangevin方程式との対応

Langevin方程式(調和振動子系)

$$dx(t) = -\omega \left( x(t) \frac{\cosh(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} - \tilde{x}(t) \frac{1}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right) dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}} dW$$

$$d\tilde{x}(t) = \omega \left( \tilde{x}(t) \frac{\cosh(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} - x(t) \frac{1}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \right) dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}} dW$$



変数変換

$$X(t) = \sqrt{(1+n)}x(t) - \sqrt{n}\tilde{x}(t)$$

$$\tilde{X}(t) = \sqrt{(1+n)}\tilde{x}(t) - \sqrt{n}x(t)$$

$$n = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

$$dX(t) = -\omega X(t)dt + \sqrt{\frac{\hbar(1+n)}{m}} dW - \sqrt{\frac{\hbar n}{m}} d\tilde{W}$$

$$d\tilde{X}(t) = \omega \tilde{X}(t)dt + \sqrt{\frac{\hbar(1+n)}{m}} d\tilde{W} - \sqrt{\frac{\hbar n}{m}} dW$$

$$\beta \rightarrow \infty \quad dX(t) = -\omega X(t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}} dW$$

$$\beta \rightarrow 0 \quad dX(t) = -\omega X(t)dt + \sqrt{2kT/(\omega m)}(dW - d\tilde{W})/\sqrt{2}$$