非平衡Thermo Field Dynamicsによる量子輸送方程式

2011年8月23日
基研研究会「熱場の量子論とその応用 」

中村祐介

共同研究者：山中由也

早大 基幹理工 電子光システム

もくじ

- 平衡系に対するThermo Field Dynamics
  - TFD = 熱的な状況を倍加した空間の純粋状態で記述
  - その概念が如何に自然に導かれるか

- 非平衡系に対するThermo Field Dynamics
  - 平衡TFDを非平衡へ拡張
  - そのアイデア

- 量子輸送方程式
  - メモリー効果、エネルギーの揺らぎ

簡単のため、非相対論的な一成分のboson系で説明する

- 多成分でも、fermionでも、Bose-Fermi混合系でも同様
- 相対論的な場合でも定式化可能

熱場の量子論

熱的な物理量は混合状態期待値で与えられる

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}[\rho A] = \sum_m \langle\langle m|\rho A|m\rangle\rangle$$

ρ 規格化された密度演算子

２つの熱場の量子論

Thermo Field Dynamics (TFD)

空間を倍加することで、
熱的な混合状態を**純粋状態**で記述する

Closed time path法
(Schwinger-Keldysh)

空間を倍加しない。
Keldysh経路を使う

共通する性質：

- Heisenberg描像のHeisenberg方程式から出発する
- 2×2のGreen関数
- Dyson方程式に基づく ➡ 相互作用描像、Wickの定理、Feynman図法が重要
- 平衡系では同等な理論 ➡ 一方、非平衡では同等でない

H. Umezawa, *Advanced Field Theory — Micro, Macro, and Thermal Physics* (AIP, New York, 1993).

平衡のThermo Field Dynamics

粒子数状態 $|m\rangle$ の定義：

非摂動ハミルトニアンを対角化する演算子で作る $H_0=\sum_\ell \omega_\ell a_\ell^\dagger a_\ell$ $|m\rangle_\ell = \frac{1}{\sqrt{m!}}(a_\ell^\dagger)^m|0\rangle_\ell$

規格化された密度演算子

$$\rho = (1-p)\sum_{m=0}^{\infty} p^m |m\rangle\langle m|$$

熱平衡なので $p=e^{-\beta\omega}$

規格化定数

本当は a, p ではなく a_ℓ, p_ℓ

$$\rho = \prod_\ell \left[(1-p_\ell)\sum_{m_\ell=0}^{\infty} p_\ell^{m_\ell}|m_\ell\rangle\langle m_\ell| \right]$$

見やすさの為、量子数 ℓ は省略する

出発

$s=$

一様系でも　有限サイズ系でも

$H_0=\int d^3k\,\omega_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}}$ $H_0=\sum_\ell \omega_\ell a_\ell^\dagger a_\ell$

まったく同じように定式化できる

局所近似はしないで、粒子描像を守る

何故、空間を倍加するか？

超演算子形式から見た視点

規格化された密度演算子 $\rho = (1-p)\sum_{m=0}^{\infty} p^m |m\rangle\langle m|$ $\quad p = e^{-\beta\omega}$

ρ に対する演算の種類

「左から演算子を掛ける」と 右から演算子を掛ける」の２通りの演算がある

$A\rho$ $\quad\quad$ ρA

密度演算子に作用する演算子（超演算子）

ρ は超演算子が作用するケット・ベクトル

ρ に左から A を掛ける超演算子を A 、

ρ に右から $A^\dagger$ を掛ける超演算子を $\tilde{A}$ と書く

$$\rho \rightarrow |\rho\rangle\!\rangle$$

$$A\rho \rightarrow A|\rho\rangle\!\rangle$$

$$\rho A^\dagger \rightarrow \tilde{A}|\rho\rangle\!\rangle$$

M. Scumutz, Z. Physik B **30**, 97 (1978).

超演算子形式

密度演算子に対応する超ケット

$$|\rho\rangle\!\rangle = (1-p)\sum_{m=0}^{\infty} p^m |m\rangle\langle m|$$

熱的状態条件

$$a\,\rho - p\rho\,a = 0$$

$$\rho\,a^\dagger - pa^\dagger\rho = 0$$

$$(a - p\tilde{a}^\dagger)|\rho\rangle\!\rangle = 0$$

$$(\tilde{a} - pa^\dagger)|\rho\rangle\!\rangle = 0$$

トレース演算に対応する超ブラ

$$\langle\!\langle 1| = \sum_m \langle m|\bullet|m\rangle$$

トレースの循環性

$$\mathrm{Tr}[a\bullet] = \mathrm{Tr}[\bullet a]$$

$$\langle\!\langle 1|(a - \tilde{a}^\dagger) = 0$$

$$\langle\!\langle 1|(a^\dagger - \tilde{a}) = 0$$

熱的期待値： $\mathrm{Tr}[A\rho] = \langle\!\langle 1|A|\rho\rangle\!\rangle$

$A = A(a, a^\dagger)$

チルダルール　超演算子に対する代数

超演算子 $a,\ \tilde{a}$ に関する代数：
$$[a, a^\dagger] = [\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger] = 1$$
$$[a, \tilde{a}] = [a, \tilde{a}^\dagger] = 0$$

証明） $[a, \tilde{a}]|R\rangle\!\rangle = (a\tilde{a} - \tilde{a}a)|R\rangle\!\rangle = a(Ra^\dagger) - (aR)a^\dagger = 0$

任意の超ケット $|R\rangle\!\rangle$

超演算子に対するハミルトニアン
$$\hat{H} = H - \tilde{H}$$

Liouville方程式
$$i\frac{d}{dt}\rho_{\rm s} = [H, \rho_{\rm s}] = H\rho_{\rm s} - \rho_{\rm s}H \quad \Rightarrow \quad i\frac{d}{dt}|\rho_{\rm s}\rangle\!\rangle = (H - \tilde{H})|\rho_{\rm s}\rangle\!\rangle$$

いわゆるLiouvillian

超演算子の空間から倍加されたFock空間へ

$$|\rho\rangle\!\rangle = (1-p)\sum_m p^m |m\rangle\langle m| \rightarrow (1-p)\sum_m p^m |m\rangle \otimes |m\rangle \equiv |0\rangle$$

$a, a^\dagger$　　$\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger$

$$\langle\!\langle 1| = \sum_m \langle m| \bullet |m\rangle \rightarrow \sum_m \langle m| \otimes \langle m| \equiv \langle 0|$$

熱的真空

熱的期待値

混合状態		超ブラと超ケット		倍加されたFock空間の純粋状態
$\mathrm{Tr} A\rho$	→	$\langle\!\langle 1\|A\|\rho\rangle\!\rangle$	→	$\langle 0\|A\|0\rangle$

＝TFD

TFD：空間を倍加した純粋状態で、熱的な混合状態を扱う！

熱的Bogoliubov変換

Bose-Einstein分布

$$n = \langle 0|a^\dagger a|0\rangle = \frac{p}{1-p}$$

$a,\ \tilde{a}$ は熱的真空を消去しない

$$a|0\rangle \neq 0$$
$$\tilde{a}|0\rangle \neq 0$$

熱的真空を消去する演算子 $\xi,\ \tilde{\xi}$ を導入

＝熱的Bogoliubov変換

2つの自由度がある。

α 熱的真空の定義 $\mathrm{Tr}[A\rho] = \mathrm{Tr}[\rho^{1-\alpha} A \rho^{\alpha}]$

s スケール変換 $\xi \to c\xi, \quad \xi^\dagger \to \xi^\dagger / c$

密度行列の情報をブラ・ケット
どちらに持たせるか？

$$\langle\!\langle 1|A|\rho\rangle\!\rangle = \langle\!\langle \rho^{1-\alpha}|A|\rho^{\alpha}\rangle\!\rangle$$

熱的Bogoliubov変換

$$\xi^\mu = B^{\mu\nu} a^\nu$$
$$\bar{\xi}^\nu = \bar{a}^\mu B^{-1,\mu\nu}$$

$$B = \sqrt{1+n}\, e^{s\tau_3} \begin{pmatrix} 1 & -p^\alpha \\ -p^{1-\alpha} & 1 \end{pmatrix}$$

$$a^\mu = \begin{pmatrix} a \\ \tilde{a}^\dagger \end{pmatrix}$$
$$\bar{a}^\mu = \begin{pmatrix} a^\dagger & -\tilde{a} \end{pmatrix}$$

s も α も平衡系では意味のない自由度
　何にとっても結果は変わらない

T. S. Evans et al., J. Math. Phys. **33**, 370 (1992).

しかし非平衡系では、
重要になってくる！

TFD形式

熱的な**混合状態期待値**を与えるような**純粋状態**をどう作る？

$\mathrm{Tr}[A\rho] = \langle 0|A|0\rangle$ となる $\langle 0|$ と $|0\rangle$ はどう作る？

全ての演算に対となるチルダ演算子を導入

$$a \Longrightarrow a,\ \tilde{a}$$

非チルダ・チルダの交換関係

$$[a, a^\dagger] = [\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger] = 1$$
$$[a, \tilde{a}] = [a, \tilde{a}^\dagger] = 0$$

Heisenberg方程式

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

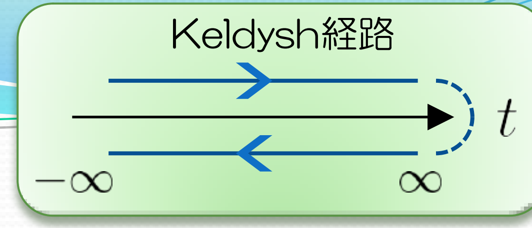
熱的Bogoliubov変換

$$\xi^\mu = B^{\mu\nu}a^\nu$$
$$\bar{\xi}^\nu = \bar{a}^\mu B^{-1,\mu\nu}$$
$$B = \sqrt{1+n}\, e^{s\tau_3} \begin{pmatrix} 1 & -p^\alpha \\ -p^{1-\alpha} & 1 \end{pmatrix}$$

熱的真空

$$\xi|0\rangle = \tilde{\xi}|0\rangle = 0$$
$$\langle 0|\xi^\dagger = \langle 0|\tilde{\xi}^\dagger = 0$$
$$\langle 0|A(a, a^\dagger)|0\rangle = \mathrm{Tr}[A\rho]$$

P. Danielewiecz, Ann. Phys. (N.Y.) **152**, 239 (1984).
北孝文, 物性研究 **90**, 1 (2008).



Closed Time Path法
（Schwinger-Keldysh）

出発地点はTFDと同じ

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}[\rho A] \qquad \rho = (1-p)\sum_{m=0}^{\infty} p^m |m\rangle\langle m|$$

Dyson方程式が使える形式となるために・・・

相互作用描像　Heisenberg描像

$$A(t) = U(t,-\infty) A_{\mathrm{H}}(t) U(-\infty, t)$$

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

$$U(t,t_0) = \mathrm{T}\exp\left(-i\int_{t_0}^{t} ds\, H_{\mathrm{int}}(s)\right)$$

時間順序積

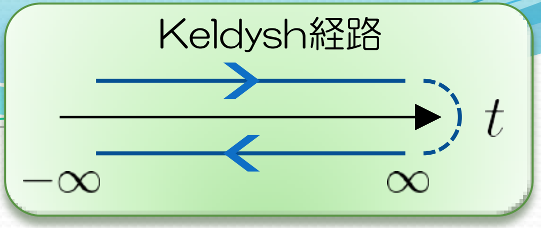
$$\begin{aligned}\langle A_{\mathrm{H}}(t)\rangle &= \langle U(-\infty,\infty)U(\infty,t)A(t)U(t,-\infty)\rangle \\ &= \cancel{\langle S^{-1} T[A(t) S]\rangle} \\ &= \langle T_c[A(t)S_c]\rangle\end{aligned}$$

$$S = \mathrm{T}\exp\left(-i\int_{-\infty}^{\infty} ds\, H_{\mathrm{int}}(s)\right)$$

$$S_c = \mathrm{T}_c\exp\left(-i\int_c ds^c\, H_{\mathrm{int}}(s^c)\right)$$

$\langle A_{\mathrm{H}}(t)\rangle = \langle T_c[S_c A(t)]\rangle$ ＋ Wickの定理 ⇒ Dyson方程式が使える形式
ただしKeldysh経路が必要

Keldysh Green関数



Green関数とDyson方程式　　　時間がKeldysh経路上にあるのがポイント

$$G(x_1^c, x_2^c) = -i\langle T_c[\psi_{\mathrm{H}}(x_1^c)\psi_{\mathrm{H}}^\dagger(x_2^c)]\rangle$$

$$G(x_1^c, x_2^c) = \Delta(x_1^c, x_2^c) + \int_c dy_1^3 dy_2^3 dt_1^c dt_2^c \; \Delta(x_1^c, y_1^c)\, \Sigma(y_1^c, y_2^c)\, G(y_2^c, x_2^c)$$

x_1, x_2 が往路にあるのか復路にあるのかで場合分け
これで、時間経路が普通に戻る
しかしその代償として、Green関数が２×２行列になる

２×２行列のGreen関数（KeldyshのGreen関数）とDyson方程式

$$G(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} G^c(x_1,x_2) & G^<(x_1,x_2) \\ G^>(x_1,x_2) & G^{\tilde{c}}(x_1,x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\langle T[\psi_{\mathrm{H}}(x_1)\psi_{\mathrm{H}}^\dagger(x_2)]\rangle & -i\langle \psi_{\mathrm{H}}^\dagger(x_2)\psi_{\mathrm{H}}(x_1)\rangle \\ -i\langle \psi_{\mathrm{H}}(x_1)\psi_{\mathrm{H}}^\dagger(x_2)\rangle & -i\langle \tilde{T}[\psi_{\mathrm{H}}(x_1)\psi_{\mathrm{H}}^\dagger(x_2)]\rangle \end{pmatrix}$$

$$G(x_1, x_2) = \Delta(x_1, x_2) + \int dy_1^4 dy_2^4 \; \Delta(x_1, y_1)\, \tau_3 \Sigma(y_1, y_2)\, \tau_3 G(y_2, x_2)$$

$\hat{H}_{\rm int} = H_{\rm int} - \tilde{H}_{\rm int}$

TFDでは？

TFDの相互作用描像を定義。　ハミルトニアンはハット付き！

$$A(t) = \hat{U}(t,-\infty)A_{\rm H}(t)\hat{U}(-\infty,t) \qquad \hat{U}(t,t_0) = {\rm T}\exp\left(-i\int_{t_0}^{t} ds\ \hat{H}_{\rm int}(s)\right)$$

時間順序積でまとまるか？

$$\hat{S} = {\rm T}\exp\left(-i\int_{-\infty}^{\infty} ds\ \hat{H}_{\rm int}(s)\right)$$

$$\langle 0|A_{\rm H}(t)|0\rangle = \langle 0|\hat{S}^{-1}{\rm T}[A(t)\hat{S}]|0\rangle$$

$\alpha = 1$ ならば $\langle 0|(A - \tilde{A}^\dagger) = 0$

$\Rightarrow$ $\langle 0|\hat{H}_{\rm int}(t) = 0$

$\Rightarrow$ $\langle 0|\hat{S}^{-1} = 1$

平衡では任意の α でも
Feynman図法が使える
（p が特別な形をしている為）

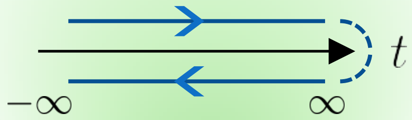
非平衡では $\alpha = 0, 1$ が必要

T. S. Evans *et al.*, J. Math. Phys. **33**, 370 (1992).

$\langle 0|A_{\rm H}|0\rangle = \langle 0|{\rm T}[A\hat{S}]|0\rangle$ ＋ Wickの定理 $\Rightarrow$ Dyson方程式が使える形式！
Keldysh経路は不要
ただし、特定の α を選ぶ必要あり

$$\hat{H}_{\rm int} = H_{\rm int} - \tilde{H}_{\rm int}$$

Keldysh経路



TFDのGreen関数

$$\langle 0|\mathrm{T}[\psi(x_1)\tilde{\psi}(x_2)\hat{S}]|0\rangle = \langle 0|\mathrm{T}[\tilde{\psi}(x_2)\,\tilde{S}]\;\mathrm{T}[\psi(x_1)\,S]|0\rangle$$

チルダと非チルダは交換

$$= \langle 0|\tilde{\mathrm{T}}[\psi^\dagger(x_2)\,S]\;\mathrm{T}[\psi(x_1)\,S]|0\rangle$$

熱的状態条件
$$\langle 0|(a - \tilde{a}^\dagger) = 0$$

$$= \langle U(-\infty,t_2)\psi^\dagger(x_2)U(t_2,\infty)\;U(\infty,t_1)\psi(x_1)U(t_1,-\infty)\rangle$$

非チルダ演算子のみなので

$$= \langle \mathrm{T}_c[\psi(x_1^+)\psi^\dagger(x_2^-)S_c]\rangle$$

CTPのGreen関数になった！

- Keldysh経路が自然に現れる
- TFDとCTPの2×2のGreen関数が全て対応する

$$S = \mathrm{T}\exp\left(-i\int_{-\infty}^{\infty} ds\; H_{\rm int}(s)\right)$$
$$\tilde{S} = \mathrm{T}\exp\left(i\int_{-\infty}^{\infty} ds\; \tilde{H}_{\rm int}(s)\right)$$

TFDの $\tilde{A}$ はＣＴＰの「復路の $A^\dagger$ 」である

ただし、$\alpha = 1$に限る！！
ただし、平衡の場合に限る！！

非平衡へ！

時間依存する分布関数へ

$$a(t) = U(t, -\infty) a_{\mathrm{H}}(t) U(-\infty, t)$$

相互作用描像　Heisenberg描像

ここまでは熱平衡を扱ってきた

- トレース公式とLiouville方程式の書き換えに過ぎない
- CTP形式と一対一対応が付く

分布関数

- 非摂動の粒子分布　$n = \langle a^\dagger a \rangle$　平衡ならBose-Einstein分布
- Heisenbergの粒子分布　$n_{\mathrm{H}} = \langle a_{\mathrm{H}}^\dagger a_{\mathrm{H}} \rangle$　観測される分布

非平衡へどう移行するか？

(a) 時間依存する n を考える。そして、その時間依存性を自己無動着に決定する。
n_{H} は n を使って求める。（例えば、摂動計算などで）

(b) nを時間依存させない。 n が出てこないように式変形する。（ n を見ない）
n_{H}は時間依存するものとする。

非平衡へ！

$$a(t) = U(t,-\infty)a_{\mathrm{H}}(t)U(-\infty,t)$$

相互作用描像　Heisenberg描像

非平衡へどう移行するか？

(a) 時間依存する n を考える。そして、その時間依存性を自己無動着に決定する。
n_{H} は n を使って求める。（例えば、摂動計算などで）

(b) nを時間依存させない。 n が出てこないように式変形する。（ n を見ない）
n_{H}は時間依存するものとする。

CTP

(b) を採用。

Kadanoff-Baym方程式、Wigner表示、勾配展開、Φ微分近似。

導出されるもの：n_{H}に対する量子輸送方程式

TFD

(a) を採用。

ただし(b)を採用することもできる。（結果はCTPとまったく同じになる）

導出されるもの： n に対する量子輸送方程式

(a), (b)どちらを採用しているのか？　それがCTPとTFDの大きな分かれ目

(a)のアイデアを採用するとどうなるか？　それをこれから見ていきます

$$n = \langle a^\dagger a \rangle = \frac{p}{(1-p)}$$

密度演算子の時間変化

熱平衡と同じ構造の密度行列を仮定

$$\rho = (1-p)\sum_m p^m |m\rangle\langle m|$$

ただし、時間依存する非平衡分布

$$n \to n(t)$$
$$p \to p(t)$$

- $\dot{n} \neq 0$ とする。ただし密度演算子は平衡系と同じ構造を持つと仮定。
- n は現時点では未知。その時間依存性は後で自己無撞着に決める。
- 時間に対してある種の粗視化をしていること対応
（Initial correlationがない所だけを通って来ていると仮定）

熱的真空が時間依存しないような
相互作用ハミルトニアンを選ぶ必要がある。

非平衡TFDの構造

$$n = \langle a^\dagger a \rangle = p/(1-p)$$
$$n_{\mathrm{H}} = \langle a^\dagger_{\mathrm{H}} a_{\mathrm{H}} \rangle \neq n$$

熱的真空

$\langle 0|, \quad |0\rangle$

時間依存しない

→

熱的真空を消す演算子

$$i\frac{d}{dt}\xi^\mu = \left[\xi^\mu,\ \hat{H}_0\right]$$

相互作用描像の
Heisenberg方程式

→

時間依存する
熱的Bogoliubov変換
$$\xi^\mu(t) = B^{\mu\nu}(t)a^\nu(t)$$

もともとの演算子

$$i\frac{d}{dt}a^\mu = \left[a^\mu,\ \hat{H}_0 - \hat{Q}\right]$$

相互作用描像の
Heisenberg方程式

非摂動ハミルトニアン	摂動ハミルトニアン	熱的カウンター項
$\hat{H}_0 - \hat{Q}$	$\hat{H}_{\mathrm{int}} + \hat{Q}$	$\hat{Q}(t) = -i\,\bar{a}^\mu(t)\left[\dot{B}^{-1}(t)B(t)\right]^{\mu\nu}a^\nu(t)$

熱的真空が時間依存しないために必要

$n(t)$ の時間依存性に起因

まだ $\dot{n}$ が決まっていない！！

何らかの方法で $\dot{n}$ を決定する必要がある。

$$a^\mu = \begin{pmatrix} a \\ \tilde{a}^\dagger \end{pmatrix} \qquad \xi^\mu = \begin{pmatrix} \xi \\ \tilde{\xi}^\dagger \end{pmatrix}$$

$$B^{\mu\nu} = \sqrt{1+n}\, e^{s\tau_3}\begin{pmatrix} 1 & -p^\alpha \\ -p^{1-\alpha} & 1 \end{pmatrix}$$

非平衡TFDでもFeynman図法がつかえるか？

α, s の自由度をどうするか？

以上がクリア出来たら計算ができる

例えば $\dot{n}_{\mathrm{H}}$ に対する方程式

平衡TFDとの違い

非摂動分布が時間依存

⬇

熱的カウンター項 $\hat{Q}$ 　　（チルダ・非チルダのcross termを含む）

⬇

$\hat{S} = S\,\tilde{S}$ と分解できない

⬇

Keldysh経路にまとまらない 　　❌TFDの $\tilde{A}$ はKeldysh経路の「復路の $A^\dagger$」

非平衡への拡張のアイデア

(a) n を時間依存させる ・・・ TFDの方法。CTPでは難しい？

(b) 　は時間依存しない ・・・ CTPの方法。TFDでも可

伝搬関数

$$\xi^\mu = \begin{pmatrix} \xi \\ \tilde{\xi}^\dagger \end{pmatrix} \qquad a^\mu = \begin{pmatrix} a \\ \tilde{a}^\dagger \end{pmatrix}$$

$$\bar{\xi}^\mu = \begin{pmatrix} \xi^\dagger & -\tilde{\xi} \end{pmatrix} \qquad \bar{a}^\mu = \begin{pmatrix} a^\dagger & -\tilde{a} \end{pmatrix}$$

演算子が２重項だから、伝搬関数は２×２行列

相互作用描像　　Heisenberg描像

aの伝搬関数

非摂動伝搬関数 $\Delta^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = -i\langle 0|\mathrm{T}\left[a^\mu_{\ell_1}(t_1)\,\bar{a}^\nu_{\ell_2}(t_2)\right]|0\rangle$

全伝搬関数 $G^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = -i\langle 0|\mathrm{T}\left[a^\mu_{\mathrm{H},\ell_1}(t_1)\,\bar{a}^\nu_{\mathrm{H},\ell_2}(t_2)\right]|0\rangle$

ξの伝搬関数

非摂動伝搬関数 $d^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = -i\langle 0|\mathrm{T}\left[\xi^\mu_{\ell_1}(t_1)\,\bar{\xi}^\nu_{\ell_2}(t_2)\right]|0\rangle$

全伝搬関数 $g^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = -i\langle 0|\mathrm{T}\left[\xi^\mu_{\mathrm{H},\ell_1}(t_1)\,\bar{\xi}^\nu_{\mathrm{H},\ell_2}(t_2)\right]|0\rangle$

$$d^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = \delta_{\ell_1\ell_2}\begin{pmatrix} -i\theta(t_1-t_2) & 0 \\ 0 & i\theta(t_2-t_1) \end{pmatrix}^{\mu\nu} e^{-i\omega_{\ell_1}(t_1-t_2)}$$

両者の関係

$$\Delta^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = B^{-1,\mu\mu'}_{\ell_1}(t_1)\, d^{\mu'\nu'}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2)\, B^{\nu'\nu}_{\ell_2}(t_2)$$

$$G^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = B^{-1,\mu\mu'}_{\ell_1}(t_1)\, g^{\mu'\nu'}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2)\, B^{\nu'\nu}_{\ell_2}(t_2)$$

因果律・時間の向き

具体的な a の非摂動伝搬関数の構造

$$\Delta^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = B^{-1,\mu\mu'}_{\ell_1}(t_1)\, d^{\mu'\nu'}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2)\, B^{\nu'\nu}_{\ell_2}(t_2)$$

$$\Delta^{\mu\nu}(t_1,t_2) = -ie^{-i\omega(t_1-t_2)}\Big[\theta(t_1-t_2)R^{\mu\nu}(t_1,t_2)+\theta(t_2-t_1)A^{\mu\nu}(t_1,t_2)\Big]$$

$R^{\mu\nu}(t_1,t_2)$　$t_2 \to t_1$ への粒子の伝搬

$A^{\mu\nu}(t_1,t_2)$　$t_1 \to t_2$ への粒子の伝搬

時間の向きを作る
因果律の要請
$R^{\mu\nu}(t_2)$　$A^{\mu\nu}(t_1)$
となれ！

$$\alpha = 1$$

$$s = \log\sqrt{1+n}$$

α, s 自由度が固定される

- マクロな量(　)に対する熱的な因果律
- 時間の向きを作るある種の粗視化
- Dyson方程式、Feynman図法が使える
- 未来の情報を使わずに、物理量が計算できる

次ページ以降で詳しく…

$$\hat{H}_I = \hat{H}_{\rm int} + \hat{Q} \qquad \hat{S} = \mathrm{T}\exp\left(-i\int_{-\infty}^{\infty} ds\, \hat{H}_I(s)\right)$$

因果律は一旦忘れて

Feynman図法が使えるための条件

T積でまとまるか？

$$\langle 0|A_{\rm H}|0\rangle = \langle 0|\mathrm{T}[A\hat{S}]|0\rangle$$

平衡TFDと何が違うか？

- nがBose-Einstein分布でない
- $\hat{Q}$ の存在

★ 条件を満たす自由度の取り方は2つある

相互作用描像とHeisenberg描像が一致する時刻

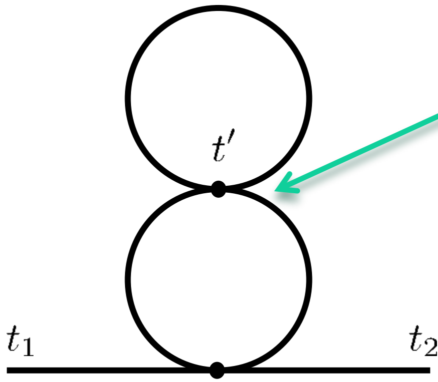
因果律の要請から出てきたものと同じ

$t_0 = -\infty$ の場合　$\langle 0|A_{\rm H}|0\rangle = \langle 0|\hat{S}^{-1}\,\mathrm{T}[A\hat{S}]|0\rangle$ ➡ $\langle 0|\hat{H}_I = 0$ なら良い ➡ $\alpha = 1$, $s = \log\sqrt{1+n}$

$t_0 = \infty$ の場合　$\langle 0|A_{\rm H}|0\rangle = \langle 0|\mathrm{T}[A\hat{S}]\,\hat{S}^{-1}|0\rangle$ ➡ $\hat{H}_I|0\rangle = 0$ なら良い ➡ $\alpha = 0$, $s = -\log\sqrt{1+n}$

ダイアグラム計算

内部結節点の時間積分



$$\int_{-\infty}^{\infty} dt'$$

もし積分の上端が ∞ ならば

未来の $n(t)$ を知っていないと計算できない！

$t_0 = -\infty$

$\alpha = 1$

$s = \log\sqrt{1+n}$

$$\int_{-\infty}^{\max(t_1, t_2)} dt'$$

積分は外線の時刻より未来には及ばない。
過去の情報だけで計算できる。

$t_0 = \infty$

$\alpha = 0$

$s = -\log\sqrt{1+n}$

$$\int_{\min(t_1, t_2)}^{\infty} dt'$$

積分は外線の時刻より過去には及ばない。
未来の情報だけで計算される。

因果律のまとめ

どちらを選ぶか？
＝時間の向きを決める

Feynman図法が使える場合：

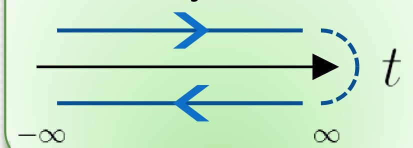
$$t_0 = -\infty \qquad \alpha = 1 \qquad s = \log\sqrt{1+n}$$

または

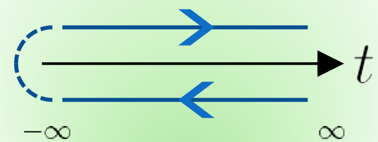
$$t_0 = \infty \qquad \alpha = 0 \qquad s = -\log\sqrt{1+n}$$

Keldysh経路の言葉で云うと

Keldysh経路



または



過去の情報のみに依存
エントロピー増大
物理的な時間の向き

未来の情報のみに依存
エントロピー減少
時間逆向き

$$\Delta^{\mu\nu}(t_1,t_2) = -ie^{-i\omega(t_1-t_2)}\Big[\theta(t_1-t_2)R^{\mu\nu}(t_1,t_2) + \theta(t_2-t_1)A^{\mu\nu}(t_1,t_2)\Big]$$

因果律の要請： $R^{\mu\nu}(t_2),\ A^{\mu\nu}(t_1)$ となれ！

以後は

$$t_0 = -\infty \qquad \alpha = 1 \qquad s = \log\sqrt{1+n}$$

とする

伝搬関数の構造

Cf. 相互作用描像

$$\left(\begin{array}{ll} \langle 0|\xi^\dagger = 0 & \langle 0|\tilde{\xi}^\dagger = 0 \\ \xi|0\rangle = 0 & \tilde{\xi}|0\rangle = 0 \end{array} \right)$$

$t_0 = -\infty$

$\alpha = 1$

$s = \log\sqrt{1+n}$

$$B = \begin{pmatrix} 1+n & -n \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

相互作用ハミルトニアン

$\langle 0|\hat{H}_I = 0$

$\hat{H}_I|0\rangle \neq 0$

Heisenberg描像

$\langle 0|\xi_{\mathrm{H}}^\dagger = 0 \qquad \langle 0|\tilde{\xi}_{\mathrm{H}}^\dagger = 0$

$\xi_{\mathrm{H}}|0\rangle \neq 0 \qquad \tilde{\xi}_{\mathrm{H}}|0\rangle \neq 0$

ξ の全伝搬関数

遅延

$$g^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = \begin{pmatrix} g^{11}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) & g^{12}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) \\ 0 & g^{22}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) \end{pmatrix}$$

先進

$$\left(\begin{array}{l} g^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = -i\langle 0|\mathrm{T}\left[\xi^\mu_{\mathrm{H},\ell_1}(t_1)\ \bar{\xi}^\nu_{\mathrm{H},\ell_2}(t_2)\right]|0\rangle \\ G^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = -i\langle 0|\mathrm{T}\left[a^\mu_{\mathrm{H},\ell_1}(t_1)\ \bar{a}^\nu_{\mathrm{H},\ell_2}(t_2)\right]|0\rangle \end{array} \right)$$

a の全伝搬関数

$$G^{\mu\nu}(t_1,t_2) = B^{-1,\mu\mu'}(t_1)\ g^{\mu'\nu'}(t_1,t_2)\ B^{\nu'\nu}(t_2)$$

上三角行列を熱的Bogoliubov変換した構造

時間依存！

Cf. Keldysh変換

$$G(t_1,t_2) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} G^R(t_1,t_2) & G^K(t_1,t_2) \\ 0 & G^A(t_1,t_2) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

・似ているけど違う。

・定義の順番が逆。TFDでは $g \to G$

Dyson方程式

Dyson方程式で自由エネルギーを定義

a の自由エネルギー

$$G^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = \Delta^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) + \sum_{m_1 m_2}\int ds_1 ds_2\; \Delta^{\mu\mu'}_{\ell_1 m_1}(t_1,s_1)\Sigma^{\mu'\nu'}_{m_1 m_2}(s_1,s_2)\, G^{\nu'\nu}_{m_2\ell_2}(s_2,t_2)$$

$$g^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = d^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) + \sum_{m_1 m_2}\int ds_1 ds_2\; d^{\mu\mu'}_{\ell_1 m_1}(t_1,s_1)\, S^{\mu'\nu'}_{m_1 m_2}(s_1,s_2)\, g^{\nu'\nu}_{m_2\ell_2}(s_2,t_2)$$

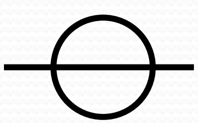
ξ の自由エネルギー

伝搬関数と同じ構造

$$S^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = \begin{pmatrix} S^{11}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) & S^{12}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) \\ 0 & S^{22}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) \end{pmatrix}$$

$$\Sigma^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = B^{-1,\mu\mu'}_{\ell_1}(t_1) S^{\mu'\nu'}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) B^{\nu'\nu}_{\ell_2}(t_2)$$

自己エネルギーは摂動で計算する

例えば、  ならば $\Sigma(t_1,t_2) = c\,\Delta(t_1,t_2)\Delta(t_1,t_2)\Delta(t_2,t_1)$

２つの分布関数の関係

- 非摂動の粒子分布 $n = \langle 0|a^\dagger a|0\rangle$ Bose-Einstein分布
- Heisenbergの粒子分布 $n_{\mathrm{H}} = \langle 0|a_{\mathrm{H}}^\dagger a_{\mathrm{H}}|0\rangle$ 観測される分布

n_{H}を ξ_{H} の言葉で書いてみると

$$\langle 0|a_{\mathrm{H}}^\dagger a_{\mathrm{H}}|0\rangle = \langle 0|\{\tilde{\xi}_{\mathrm{H}} + (1+n)\xi_{\mathrm{H}}^\dagger\}\{\xi_{\mathrm{H}} + n\tilde{\xi}_{\mathrm{H}}^\dagger\}|0\rangle$$
$$= \langle 0|\tilde{\xi}_{\mathrm{H}}\xi_{\mathrm{H}}|0\rangle + n\langle 0|\tilde{\xi}_{\mathrm{H}}\tilde{\xi}_{\mathrm{H}}^\dagger|0\rangle$$

$$\Rightarrow \quad n_{\mathrm{H},\ell}(t) = n_\ell(t) - ig_{\ell\ell}^{12}(t,t)$$

まだ $n_\ell(t)$ が未知。
非摂動ハミルトニアンに未知パラメータ $\dot{n}_\ell(t)$ が入っている。
まだ形式的な計算しかできていない！

逆に、$\dot{n}_\ell(t)$ を決める方程式があれば、なんでも計算できる

繰り込み条件

を決めるため

Chu-Umezawaの繰り込み条件

$$g^{12}_{\ell\ell}(t,t) = 0$$

非摂動伝搬関数 $d^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = \begin{pmatrix} d^{11}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) & 0 \\ 0 & d^{22}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) \end{pmatrix}$

全伝搬関数 $g^{\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = \begin{pmatrix} g^{11}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) & g^{12}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) \\ 0 & g^{22}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) \end{pmatrix}$

H. Chu and H. Umezawa, Int. J. Mod. Phys. A **10**, 1693 (1995).

- 同時刻では $g^{\mu\nu}_{\ell\ell}$ が $d^{\mu\nu}_{\ell\ell}$ と同じ構造を持つことを要請
- 低次ではある種のon-shell繰り込みになっている
- $\dot{n}_\ell(t)$ に対する方程式が決まる = 量子輸送方程式
- 全次数で正しいわけではない！不完全

$n_{\mathrm{H},\ell}(t) = n_\ell(t) - i g^{12}_{\ell\ell}(t,t)$ ⇒ $n_{\mathrm{H},\ell}(t) = n_\ell(t)$ を要請している

しかし高次では一般に $n_{\mathrm{H},\ell}(t) \neq n_\ell(t)$

でも逆に最低次ではよさそう

最低次のon-shell繰り込み

Dyson方程式 $g = d + dSg$ より

$$g^{12}_{\ell\ell}(t,t) = \sum_{m_1 m_2} \int ds_1 ds_2\; g^{11}_{\ell m_1}(t,s_1) S^{12}_{m_1 m_2}(s_1,s_2)\, g^{22}_{m_2 \ell}(s_2,t)$$

全伝搬関数

近似

$$\simeq \sum_{m_1 m_2} \int ds_1 ds_2\; d^{11}_{\ell m_1}(t,s_1) S^{12}_{m_1 m_2}(s_1,s_2)\, d^{22}_{m_2 \ell}(s_2,t)$$

非摂動伝搬関数

$$d^{11}_{\ell_1 \ell_2}(t_1,t_2) = -i\delta_{\ell_1\ell_2}\theta(t_1-t_2)e^{-i\omega_{\ell_1}(t_1-t_2)}$$

$$d^{22}_{\ell_1 \ell_2}(t_1,t_2) = \quad i\delta_{\ell_1\ell_2}\theta(t_2-t_1)e^{-i\omega_{\ell_1}(t_1-t_2)}$$

$$= 2i\mathrm{Im} \int_{-\infty}^{t} ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2\; S^{12}_{\ell\ell}(s_1,s_2)\, e^{i\omega_\ell(s_1-s_2)}$$

平衡なら $\displaystyle = \int_{-\infty}^{t} ds\; S^{12}_{\ell\ell}(k_0)\Big|_{k_0=\omega_\ell}$ 　　 $S^{12}_{\ell\ell}(k_0)$: $S^{12}_{\ell\ell}(t_1-t_2)$ のFourier変換

$= 0$

衝突積分。平衡分布なら自動的に0

量子輸送方程式

非平衡系に $g^{12}_{\ell\ell}(t,t) = 0$ を課す

最低次では
$$\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{t} ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2\; S^{12}_{\ell\ell}(s_1,s_2)\, e^{i\omega_\ell(s_1-s_2)} = 0$$

摂動ハミルトニアン

$$\hat{H}_I = \hat{H}_{\mathrm{int}} + \hat{Q}$$

熱的カウンター項

非摂動分布関数 $n_\ell(t)$ が時間依存することに由来

相互作用項

$$\hat{Q}(t) = -i\,\bar{a}^\mu(t)\left[\dot{B}^{-1}(t)B(t)\right]^{\mu\nu} a^\nu(t)$$

自己エネルギー

$$S = S^{\mathrm{int}} + S^{Q}$$

低次なら、S^{int} と S^{Q} に分解できる
(相互作用項)　(熱的カウンター項)

$$S^{Q;\mu\nu}_{\ell_1\ell_2}(t_1,t_2) = -i\dot{n}_{\ell_1}(t_1)\delta_{\ell_1\ell_2}\delta(t_1-t_2)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}^{\mu\nu}$$

量子輸送方程式

$$\dot{n}_\ell(t) = 2\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{t} ds\; S^{12,\,\mathrm{int}}_{\ell\ell}(t,s)\, e^{i\omega_\ell(t-s)}$$

- 非摂動分布関数に対する閉じた方程式
- 過去の分布に依存する（非Markov型）
- 未来の分布には依存しない（因果律）

あとは、具体的に $S^{12,\,\mathrm{int}}_{\ell\ell}$ を計算すればよい。

調和トラップ系

調和トラップ
に捕捉された
2体相互作用
するBose気体

ex) 冷却原子系

ハミルトニアン

$$H = \sum_{\ell} \omega_\ell a^\dagger_\ell a_\ell + \frac{U}{2} \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3\ell_4} g_{\ell_1\ell_2;\ell_3\ell_4} a^\dagger_{\ell_1} a^\dagger_{\ell_2} a_{\ell_3} a_{\ell_4}$$

量子輸送方程式

エネルギー保存

$$\dot{n}_\ell(t) = 4U^2 \int_{-\infty}^{t} ds \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3} g^2_{\ell_1\ell_2;\ell_3\ell} \cos\Big[(\omega_\ell - \omega_{\ell_1} - \omega_{\ell_2} + \omega_{\ell_3})(t-s)\Big]$$
$$\times \Big[n_{\ell_1} n_{\ell_2} (1 + n_{\ell_3})(1 + n_\ell) - (1 + n_{\ell_1})(1 + n_{\ell_2}) n_{\ell_3} n_\ell\Big]_s$$

粒子の衝突

ポイント

- non-Markov型　　メモリー効果
- エネルギーの揺らぎ　　時間エネルギーの不確定性関係（少しの間ならエネルギー保存しなくても良い）

Markov近似

$$\omega_\ell = \Omega(\ell + 1/2)$$

量子輸送方程式

$$\dot{n}_\ell(t) = 4U^2 \int_{-\infty}^{t} ds \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3} g^2_{\ell_1\ell_2;\ell_3\ell} \cos\Big[\big(\omega_\ell - \omega_{\ell_1} - \omega_{\ell_2} + \omega_{\ell_3}\big)\,(t-s)\Big]$$
$$\times \left[n_{\ell_1} n_{\ell_2}(1+n_{\ell_3})(1+n_\ell) - (1+n_{\ell_1})(1+n_{\ell_2})n_{\ell_3}n_\ell\right]_s$$

を $s \to t$ へ近似　　メモリー効果をなくす

見ている時間の粗さより、
メモリーの切れる時間が十分短いと仮定

量子Boltzmann方程式

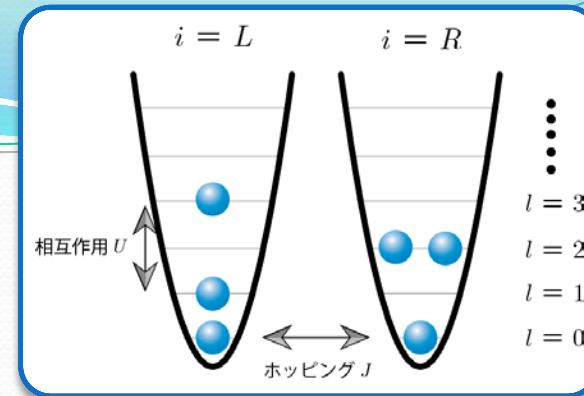
- Markov型
- エネルギーを厳密に保存

$$\dot{n}_\ell(t) = \frac{4\pi U^2}{\Omega} \sum_{\ell_1\ell_2\ell_3} g^2_{\ell_1\ell_2;\ell_3\ell}\, \delta_{\ell_1+\ell_2,\ell_3+\ell}$$
$$\times \left[n_{\ell_1} n_{\ell_2}(1+n_{\ell_3})(1+n_\ell) - (1+n_{\ell_1})(1+n_{\ell_2})n_{\ell_3}n_\ell\right]_t$$

良く知られた方程式
TFD以外の方法でも導出さている

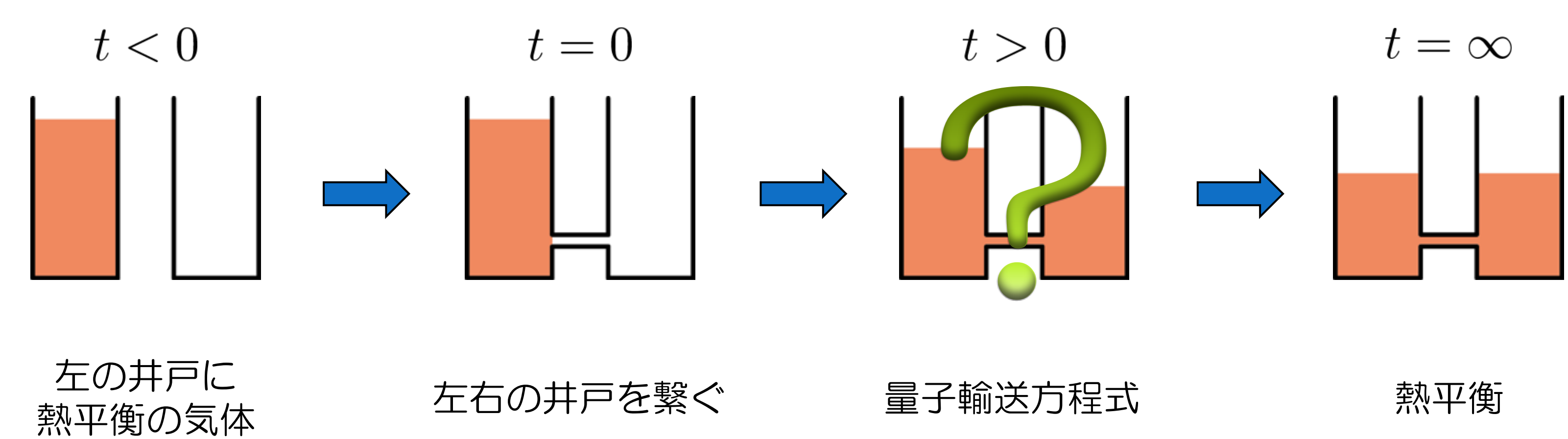
M. Holland *et al.*, Int. J. Mod. Phys. **A9**, 1153 (1994).
D. Jaksch *et al.*, Phys. Rev. A **56**, 575 (1997).

二重井戸系

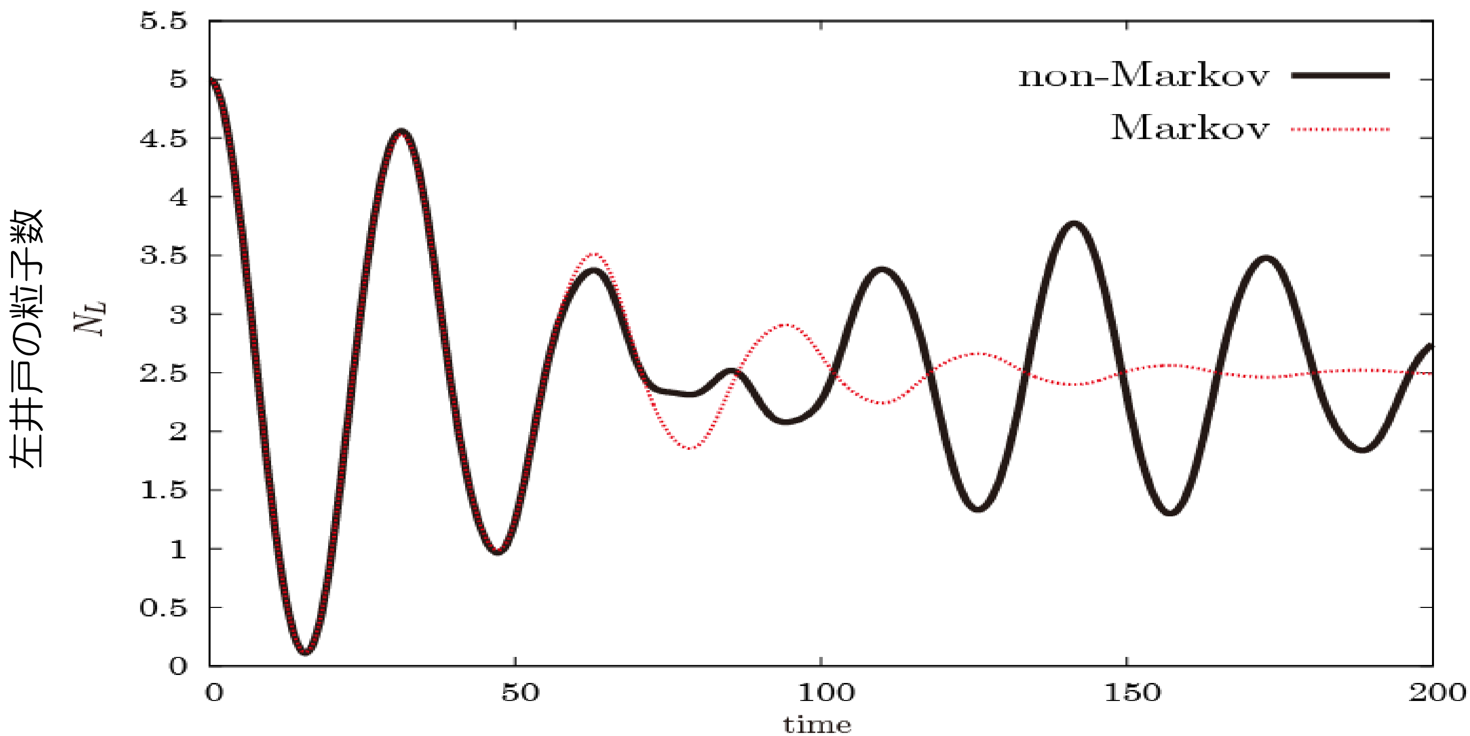


ハミルトニアン

$$H = -J \sum_{\ell} \left(a^{\dagger}_{\ell L} a_{\ell R} + a^{\dagger}_{\ell R} a_{\ell L} \right) + \sum_{\ell} \sum_{i=L,R} \omega_{\ell} a^{\dagger}_{\ell i} a_{\ell i} + \frac{U}{2} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4} \sum_{i=L,R} g_{\ell_1 \ell_2 ; \ell_3 \ell_4} a^{\dagger}_{\ell_1 i} a^{\dagger}_{\ell_2 i} a_{\ell_3 i} a_{\ell_4 i}$$



数値計算結果(preliminary)



- 平衡に近づいては遠ざかる→やがて熱平衡に
- Markov近似すると単純な減衰振動
- 粒子数を増やすと、差が少なくなる

その他の応用例

- 捕捉された中性原子系
  - 蒸発冷却を想定した非平衡緩和過程
  - Bose-Einstein凝縮体が存在する場合
    - 自発的に対称性が破れた真空上の準粒子描像
    - Landau不安定性、動的不安定性で凝縮体が崩壊する

Y.N, T. Sunaga, M. Mine, M. Okumura, Y.Y, Ann. Phys. **325**, 426 (2010).
Y.N and Y.Y, Ann. Phys. **326**, 1070 (2011).

- 相対論的な中性スカラー場
  - 定式化
  - 量子輸送方程式の導出

Y. Mizutani, T. Inagaki, Y.N, Y. Y, arXiv:1105.5952 (2011).

非平衡TFDの特徴と課題

- 明確な準粒子描像に基づく
  - $\xi_\ell, \tilde{\xi}_\ell$ が (倍加された)Fock空間を作る
  - 有限サイズ系ならば、スペクトルは離散的
  - 自発的に対称性が破れた系への応用

- 非平衡TFDはCTP法とは等価な理論ではない

- 別の繰り込み条件の可能性
  - Chu-Umezawaの繰り込み条件は最低次では良い
  - 新しい繰り込み条件？（研究中）

まとめ

- 平衡TFD
  - 倍加したFock空間の純粋状態（熱的真空 $|0\rangle\!\rangle$）
    - 熱的Bogoliubov変換、ξ 演算子の導入
    - 超演算子形式による対応付け $\rho A^\dagger \to \tilde{A}|\rho\rangle\!\rangle$
  - CTPとの同等性 $\tilde{A}(t) \leftrightarrow A^\dagger(t_-)$

- 非平衡TFD
  - 非平衡分布関数を時間依存させる、というアイデア
  - 時間依存しない熱的真空
    - 時間依存するBogoliubov変換 $B^{\mu\nu}(t)$、熱的カウンター項$\hat{Q}(t)$
  - 因果律の要請により α, s 自由度を固定
  - Chu-Umezawaの繰り込み条件 $g^{12}(t,t)=0$

- 量子輸送方程式
  - 非Markov型、エネルギーが揺らぐ
  - Markov近似すると量子Boltzmann方程式に