超演算子形式から見た非平衡Thermo Field Dynamicsの熱的真空の構造

2012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　山中由也

早大 基幹理工 電子光システム

概要

平衡系なら $f_{\rm eq} = e^{-\beta\omega}$

■ 非平衡Thermo Filed Dynamicsの出発点

1パラメータ $f(t)$ で決まる特別な形の密度行列

$$\hat{\rho}_0 = (1 - f(t)) \sum_{m=0}^{\infty} f^m(t) \big| m \big\rangle \big\langle m \big|$$

この特別な形になっているから、
自由度を2倍するだけで純粋状態で記述できる

$$\langle A(t) \rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_0 A(t)] = \big\langle 0 \big| A(t) \big| 0 \big\rangle$$

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

■ 本発表では

ある基本的な要請から、密度行列がこの形に制限されることを示す。

超演算子形式

■ **超演算子**（演算子に対する演算子）

$A,\ B\ \in$ 演算子

$$\hat{O} : A \mapsto B \quad \Rightarrow \quad \hat{O}|A\rangle\!\rangle = |B\rangle\!\rangle$$

■ **内積**

$$\langle\!\langle A|B\rangle\!\rangle = \mathrm{Tr}[A^\dagger B] = \sum_m \langle m|A^\dagger B|m\rangle$$

⇒ Liouville空間

簡単のため1-mode　ボソン系を扱う

多モード、フェルミオン系への一般化は容易

$$[a, a^\dagger] = 1$$

$$|m\rangle \ : \ a^\dagger a|m\rangle = m|m\rangle$$

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

Schumutz流の超演算子形式

■ 演算子 $|m\rangle\langle n|$ の超演算子形式

$$|m,n\rangle\!\rangle \equiv \Big| |m\rangle\langle n| \Big\rangle$$

$$\langle\!\langle m,n| \equiv \Big\langle |n\rangle\langle m|$$

■ Liouville空間の完全正規直交系

$$\langle\!\langle m,n|m',n'\rangle\!\rangle = \delta_{m,m'}\ \delta_{n,n'}$$

$$\sum_{m,n} |m,n\rangle\!\rangle\langle\!\langle m,n| = 1$$

■ 左から作用する演算子、右から作用する演算子

$$\check{a}\ :\ X \mapsto aX \qquad \tilde{a}\ :\ X \mapsto Xa^\dagger$$

$$\check{a}^\dagger\ :\ X \mapsto a^\dagger X \qquad \tilde{a}^\dagger\ :\ X \mapsto Xa$$

2-mode のFock空間の代数

$$[\check{a},\check{a}^\dagger] = [\tilde{a},\tilde{a}^\dagger] = 1 \quad \text{others} = 0$$

$$\check{a}|m,n\rangle\!\rangle = \sqrt{m}|m-1,n\rangle\!\rangle \qquad \tilde{a}|m,n\rangle\!\rangle = \sqrt{n}|m,n-1\rangle\!\rangle$$ など

Liouville-von Neumann方程式

■ Schrödinger描像の密度行列演算子に対して

$$i\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \left[H_S, \rho_S(t)\right] = H_S\rho_S(t) - \rho_S(t)H_S$$

$$\left(\hbar = 1\right)$$

■ Liouville-von Neumann方程式の超演算子形式

$$i\frac{d}{dt}|\rho_S(t)\rangle\rangle = \left(\check{H}_S - \tilde{H}_S\right)|\rho_S(t)\rangle\rangle \equiv \hat{H}_S|\rho_S(t)\rangle\rangle$$

$$\left(\hat{H}_S = \check{H}_S - \tilde{H}_S\right)$$

■ 熱的な期待値の超演算子形式

$$\mathrm{Tr}[A_S\rho_S(t)] = \langle\langle I|A_S(t)|\rho_S(t)\rangle\rangle$$

$$\left(\langle\langle I| = \sum_m \langle\langle m, m|\right)$$

Schrödinger描像から相互作用描像へ

非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_u(t)$ を選び、相互作用描像へ移行する

■ 相互作用描像

$$i\frac{d}{dt}\hat{U}_0(t,t_0) = \hat{U}_0(t,t_0)\,\hat{H}_u(t)$$

$$A(t) = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)A_S\hat{U}_0(t,t_0)$$

$$\hat{H}_u(t) \neq \omega(\breve{a}^\dagger\breve{a} - \tilde{a}^\dagger\tilde{a})$$

これをどう決めるか？

■ Liouville空間の生成消滅演算子

$$\breve{a}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)\breve{a}_S\hat{U}_0(t,t_0) \qquad i\frac{d}{dt}\breve{a}(t) = \left[\breve{a}(t),\hat{H}_u(t)\right]_-$$

$$\tilde{a}(t) = \hat{U}_0^{-1}(t,t_0)\tilde{a}_S\hat{U}_0(t,t_0) \qquad i\frac{d}{dt}\tilde{a}(t) = \left[\tilde{a}(t),\hat{H}_u(t)\right]_-$$

$$\hat{H}_u(t) = \hat{H}_u\big(\breve{a}(t),\cdots;n(t),\omega(t)\big)$$

$$n(t) = \langle a^\dagger(t)a(t)\rangle$$
$$= \langle\!\langle I\big|\breve{a}^\dagger(t)\breve{a}(t)\big|\rho(t)\rangle\!\rangle$$

非摂動表現のための3つの基本要請

A) 各時刻において準粒子描像が存在すること
- $\hat{\rho}_0(t)$と$\hat{H}_u(t)$の存在

B) 熱的因果律
- 未来の$n(t)$が現在の微視的な運動に影響しないこと

C) $t=\infty$で熱平衡になること
- 熱力学の基本法則

この要請に従う、$\hat{\rho}_0(t)$ は？$\hat{H}_u(t)$ は？

この要請だけでどこまで決まるか？

基本要請A

以下では、**自発的な対称性の破れ**は無いものとする！

■ Liouville空間上での準粒子描像

unperturbed　Schrödinger描像において

$$\hat{H}_{uS}(t) = \eta_1(t)\check{a}_S\tilde{a}_S + \eta_2(t)\check{a}_S^\dagger\tilde{a}_S^\dagger + \eta_3(t)\check{a}_S^\dagger\check{a}_S + \eta_4(t)\tilde{a}_S^\dagger\tilde{a}_S + \eta_5(t)$$

（双線形で位相変換対称性の破れてない場合の一般形）

Liouville空間が定義される

$$|\rho_0(t)\rangle\!\rangle = \sum_m p_m(t)|m,m\rangle\!\rangle \qquad i\frac{d}{dt}|\rho_0(t)\rangle\!\rangle = \hat{H}_{uS}(t)|\rho_0(t)\rangle\!\rangle$$

パラメータの数　$\eta_i \quad (i=1,\cdots,5) \qquad p_m(t) \quad (m=0,1,\cdots)$

■ 密度行列に対する条件

- エルミート性　$\rho_0^\dagger(t) = \rho_0(t)$
- 規格化　$\mathrm{Tr}[\rho_0(t)] = 1$
- 正値性　$\langle\varphi|\rho_0(t)|\varphi\rangle \geq 0$ for any $|\varphi\rangle$

$$p_m^*(t) = p_m(t)$$
$$\sum_m p_m(t) = 1$$
$$p_m \geq 0$$

$$\left(\hat{H}_u\right)^\sim = -\hat{H}_u$$
$$\langle\!\langle I|\hat{H}_u = 0$$

5つの複素パラメータ

$\eta_i(t) \quad (i = 1, \cdots, 5)$

$\Rightarrow$

3つの実パラメータ

$n(t), \omega(t), \gamma(t)$

- $\eta_1(t) = i\{\dot{n}(t) + \gamma(t)\}$
- $\eta_2(t) = -\eta_5(t) = i\left\{\dot{n}(t) + \frac{n(t)}{1+n(t)}\gamma(t)\right\}$
- $\eta_3(t) = -\eta_4^*(t) = \omega(t) - i\left\{\dot{n}(t) + \frac{1+2n(t)}{2(1+n(t))}\gamma(t)\right\}$
- $n(t) = \sum_m m p_m(t)$

非摂動ハミルトニアン

$$\hat{H}_{uS}(t) = \eta_1(t)\breve{a}_S\tilde{a}_S + \eta_2(t)\breve{a}_S^\dagger\tilde{a}_S^\dagger + \eta_3(t)\breve{a}_S^\dagger\breve{a}_S + \eta_4(t)\tilde{a}_S^\dagger\tilde{a}_S + \eta_5(t)$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{uS}(t) = {} & \omega(t)\left(\breve{a}_S^\dagger\breve{a}_S - \tilde{a}_S^\dagger\tilde{a}_S\right) + i\dot{n}(t)\left(\breve{a}_S\tilde{a}_S + \breve{a}_S^\dagger\tilde{a}_S^\dagger - \breve{a}_S^\dagger\breve{a}_S - \tilde{a}_S^\dagger\tilde{a}_S - 1\right) \\ & + i\gamma(t)\left(\breve{a}_S\tilde{a}_S + \frac{n(t)}{1+n(t)}\breve{a}_S^\dagger\tilde{a}_S^\dagger - \frac{1+2n(t)}{2(1+n(t))}\left\{\breve{a}_S^\dagger\breve{a}_S + \tilde{a}_S^\dagger\tilde{a}_S\right\} - 1\right)\end{aligned}$$

相互作用描像へ移行

非摂動ハミルトニアン

$$\hat{H}_u(t)=\omega(t)\Big[\breve{a}^\dagger(t)\breve{a}(t)-\tilde{a}^\dagger(t)\tilde{a}(t)\Big]+i\dot{n}(t)\Big[\breve{a}(t)\tilde{a}(t)+\breve{a}^\dagger(t)\tilde{a}^\dagger(t)-\breve{a}^\dagger(t)\breve{a}(t)-\tilde{a}^\dagger(t)\tilde{a}(t)-1\Big]$$
$$+i\gamma(t)\left[\breve{a}(t)\tilde{a}(t)+\frac{n(t)}{1+n(t)}\breve{a}^\dagger(t)\tilde{a}^\dagger(t)-\frac{1+2n(t)}{2(1+n(t))}\left\{\breve{a}^\dagger(t)\breve{a}(t)+\tilde{a}^\dagger(t)\tilde{a}(t)\right\}-1\right]$$

$\omega(t)$の部分を取り除く変換

$$\breve{a}(t)=e^{-i\int^t\omega(s)ds}\ \breve{\alpha}(t) \qquad \breve{a}^\dagger(t)=e^{i\int^t\omega(s)ds}\ \breve{\alpha}^\dagger(t)$$
$$\tilde{a}(t)=e^{i\int^t\omega(s)ds}\ \tilde{\alpha}(t) \qquad \tilde{a}^\dagger(t)=e^{-i\int^t\omega(s)ds}\ \tilde{\alpha}^\dagger(t)$$

α-演算子に対する非摂動ハミルトニアン：$\hat{H}_{\alpha u}(t)$

$$i\frac{d}{dt}\breve{\alpha}(t)=\Big[\breve{\alpha}(t),\hat{H}_{\alpha u}(t)\Big]$$

$$\hat{H}_{\alpha u}(t)=i\dot{n}(t)\Big[\breve{\alpha}(t)\tilde{\alpha}(t)+\breve{\alpha}^\dagger(t)\tilde{\alpha}^\dagger(t)-\breve{\alpha}^\dagger(t)\breve{\alpha}(t)-\tilde{\alpha}^\dagger(t)\tilde{\alpha}(t)-1\Big]$$
$$+i\gamma(t)\left[\breve{\alpha}(t)\tilde{\alpha}(t)+\frac{n(t)}{1+n(t)}\breve{\alpha}^\dagger(t)\tilde{\alpha}^\dagger(t)-\frac{1+2n(t)}{2(1+n(t))}\left\{\breve{\alpha}^\dagger(t)\breve{\alpha}(t)+\tilde{\alpha}^\dagger(t)\tilde{\alpha}(t)\right\}-1\right]$$

基本要請B　～熱的因果律～

■ α -演算子に対する伝搬関数　$A_i(t) = \breve{a}(t)\,,\ \breve{a}^\dagger(t)\,,\ \tilde{a}(t)\,,\ \tilde{a}^\dagger(t)$

$$\begin{aligned}\Delta(t_1,t_2) &= -i\langle\!\langle I|\mathrm{T}[A_1(t_1)A_2(t_2)]|\rho_0\rangle\!\rangle \\ &= -i\theta(t_1-t_2)\langle\!\langle I|A_1(t_1)A_2(t_2)|\rho_0\rangle\!\rangle - i\theta(t_2-t_1)\langle\!\langle I|A_2(t_2)A_1(t_1)|\rho_0\rangle\!\rangle\end{aligned}$$

未来の $n(t)\,,\ \gamma(t)$ 等が現在に影響しない

⇒ $\langle\!\langle I|A_i(t)$ が $n(t)\,,\ \gamma(t)$ に依存しない

⇒ $\langle\!\langle I|\dot{\breve{\alpha}}(t) = \langle\!\langle I|\dot{\breve{\alpha}}^\dagger(t) = \langle\!\langle I|\dot{\tilde{\alpha}}(t) = \langle\!\langle I|\dot{\tilde{\alpha}}^\dagger(t) = 0$

⇒ $\gamma(t) = 0$

非摂動ハミルトニアンのパラメータだった

補足：TFDにおける$\gamma(t)=0$

$\alpha=1$表現の熱的Bogoliubov変換の一般形

$$B^{\mu\nu}=e^{s(t)\sigma_3}\sqrt{1+n(t)}\begin{pmatrix}1 & -\frac{n(t)}{1+n(t)}\\ -1 & 1\end{pmatrix}^{\mu\nu}$$

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

$$\check{\xi}|0\rangle=0\qquad \tilde{\xi}|0\rangle=0$$

$$\xi^\mu=B^{\mu\nu}a^\nu$$

$$s(t)=\log\sqrt{1+n(t)}$$

$\Longleftrightarrow$ 本発表の言葉で云うと $\gamma(t)=0$

$\hat{Q}(t)\Longleftrightarrow\hat{H}_{\alpha u}(t)$

$$B^{\mu\nu}=\begin{pmatrix}1+n(t) & -n(t)\\ -1 & 1\end{pmatrix}^{\mu\nu}$$

平衡系ならsは何にとっても良い

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

$\{p_m(t)\}$の特別な解の集合

$\gamma(t) = 0$

α-演算子に対するハイゼンベルグ方程式より

$$\frac{d}{dt}\left\{\breve{\alpha}(t) - \tilde{\alpha}^\dagger(t)\right\} = \frac{d}{dt}\left\{\tilde{\alpha}(t) - \breve{\alpha}^\dagger(t)\right\} = 0$$

$$\frac{d}{dt}\left\{\big(1 + n(t)\big)\breve{\alpha}(t) - n(t)\tilde{\alpha}^\dagger(t)\right\} = \frac{d}{dt}\left\{\big(1 + n(t)\big)\tilde{\alpha}(t) - n(t)\breve{\alpha}^\dagger(t)\right\} = 0$$

$$\dot{p}_m(t) = \dot{n}(t)\Big\{(m+1)p_{m+1}(t) - (2m+1)p_m(t) + mp_{m-1}(t)\Big\}$$

$$n(t) = \sum_m mp_m(t) \qquad 1 = \sum_m p_m(t)$$

$q_m(t) = \big(1 + n(t)\big)p_{m+1}(t) - n(t)p_m(t)$ と定義して、書き換えると

$\{p_m(t)\}$の特別な解の集合

$$\dot{q}_m(t) = \dot{n}(t)\Big\{(m+2)q_{m+1}(t) - 2(m+1)q_m(t) + mq_{m-1}(t)\Big\}$$

$$\sum_m q_m = -\big(1+n(t)\big)p_0(t) + 1 \qquad \sum_m mq_m = \big(1+n(t)\big)p_0(t) - 1$$

- $q_m(t) = 0 \quad \text{for all } t\,,\ m$ となる$\{p_m(t)\}$は解である
- ある時刻で $q_m(\tau) = 0$ ならば、任意の時刻 t で $q_m(t) = 0$

$$\begin{pmatrix} \dot{p}_m(t) = \dot{n}(t)\Big\{(m+1)p_{m+1}(t) - (2m+1)p_m(t) + mp_{m-1}(t)\Big\} \\ q_m(t) = \big(1+n(t)\big)p_{m+1}(t) - n(t)p_m(t) \end{pmatrix}$$

基本要請C ～ $t=\infty$ で熱平衡になること ～

■ 熱平衡では

$$|\rho_0\rangle\!\rangle = \sum_m p_{\mathrm{eq},m} |m,m\rangle\!\rangle$$

$$p_{\mathrm{eq},m} = (1-f_{\mathrm{eq}}) f_{\mathrm{eq}}^m$$

$$f_{\mathrm{eq}} = e^{-\beta\omega}$$

$\Rightarrow$

$$q_{\mathrm{eq},m} = 0$$

$$q_m(t) = (1+n(t))p_{m+1}(t) - n(t)p_m(t)$$

■ 非平衡系において

- $q_m(t) \neq 0$ ならば、$q_m(t=\infty) \neq 0$ $\Rightarrow$ $q_m(t=\infty) \neq q_{\mathrm{eq},m}$
- 基本要請C $\Rightarrow$ $q_m(t) = 0$ $\Rightarrow$ $\dfrac{p_{m+1}(t)}{p_m(t)} = \dfrac{n(t)}{1+n(t)} \equiv f(t)$

  $\Rightarrow$ $p_m(t) = (1-f(t))\, f^m(t)$ という等比分布

まとめ

■ 3つの基本要請

- 各時刻において準粒子描像が存在すること
- 熱的因果律
- $t = \infty$ で熱平衡になること

$$\big|\rho_0(t)\rangle\!\rangle = \big(1 - f(t)\big) \sum_m f^m(t) \big| m, m \rangle\!\rangle$$

$$\hat{H}_u(t) = \omega(t)\Big\{\breve{a}(t)\breve{a}^\dagger(t) - \tilde{a}^\dagger(t)\tilde{a}(t)\Big\} - i\dot{n}(t)\Big\{\tilde{a}(t) - \breve{a}^\dagger(t)\Big\}\Big\{\tilde{a}^\dagger(t) - \breve{a}(t)\Big\}$$

■ 今後の展望

- $\dot{n}(t)$ を決める繰り込み条件の、超演算子形式からの見通しは？
- 自発的対称性の破れがある場合への拡張