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

中村祐介, 山中由也
早大基幹理工電子光システム

1 はじめに

実時間正準場の理論形式である Thermo Field Dynamics(TFD) は、空間の自由度を倍加することによって熱的な混合状態期待値を、倍加された空間における純粋状態（熱的真空）の期待値として表現する形式である [1, 2]。TFD では密度演算子の情報は全て熱的真空にとって代わられるが、その際密度演算子がある特別な構造を持っていることを仮定していた。本研究では超演算子形式 [3] における準粒子描像という概念から、我々が用いている非平衡 TFD 形式を導き、非平衡 TFD では仮定であった密度演算子の特別な構造が、より基本的な要請から自然に得られることを示す。なお本研究では自発的対称性が破れていない場合のみを扱う。

本稿では表記簡単化の為、1 モードの Bose 粒子系のみを記す。Fermi 粒子系、多モードの系への拡張は容易である。

2 超演算子形式

本章では Schmutz による超演算子形式 [3] を簡単にレビューする。

生成消滅演算子 $a,\, a^\dagger$ の粒子数状態 $\{|m\rangle\}$:

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}} a^{\dagger,m}|0\rangle \qquad \langle m|m'\rangle = \delta_{mm'}\,, \qquad \sum_m |m\rangle\langle m| = 1 \tag{1}$$

で張られる Fock 空間 $\mathcal{H}$ を考える。$\mathcal{H}$ に作用する線形演算子の集合は Liouville 空間と呼ばれる線形空間 $\bar{\mathcal{H}}$ をなす。$\bar{\mathcal{H}}$ の要素を $|A\rangle\!\rangle$ の様に二重ブラケットで表記することにし、その内積を $\langle\!\langle A|B\rangle\!\rangle = \mathrm{Tr}[A^\dagger B]$ と定義する。$\bar{\mathcal{H}}$ の完全正規直交系は $\{|m,n\rangle\!\rangle = ||m\rangle\langle n|\rangle\!\rangle\}$:

$$\langle\!\langle m,n|m',n'\rangle\!\rangle = \delta_{mm'}\delta_{nn'}\,, \qquad \sum_{m,n} |m,n\rangle\!\rangle\langle\!\langle m,n| = 1 \tag{2}$$

である。$\mathcal{H}$ 上の演算子 A を別の演算子 B に変換する超演算 $\hat{O} : A \mapsto B$ は、超演算子形式では $\hat{O}|A\rangle\!\rangle = |B\rangle\!\rangle$ と表記される。超演算 $\check{a},\, \check{a}^\dagger,\, \tilde{a},\, \tilde{a}^\dagger$ をそれぞれ

$$\check{a} : A \mapsto aA\,, \qquad \check{a}^\dagger : A \mapsto a^\dagger A\,, \qquad \tilde{a} : A \mapsto Aa^\dagger\,, \qquad \tilde{a}^\dagger : A \mapsto Aa \tag{3}$$

と定義すると

$$\check{a}|m,n\rangle\!\rangle = \sqrt{m}|m-1,n\rangle\!\rangle\,, \qquad \check{a}^\dagger|m,n\rangle\!\rangle = \sqrt{m+1}|m+1,n\rangle\!\rangle\,, \tag{4}$$

$$\tilde{a}|m,n\rangle\!\rangle = \sqrt{n}|m,n-1\rangle\!\rangle\,, \qquad \tilde{a}^\dagger|m,n\rangle\!\rangle = \sqrt{n+1}|m,n+1\rangle\!\rangle \tag{5}$$

及び交換関係

$$[\check{a},\check{a}^\dagger] = 1\,, \qquad [\tilde{a},\tilde{a}^\dagger] = 1\,, \qquad \text{otherwise} = 0 \tag{6}$$

が成立する。従って $|m,n\rangle\!\rangle$ は $\check{a},\tilde{a}$ に対する Fock 空間とみなすことも出来る：

$$|m,n\rangle\!\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!\,n!}} \left(\check{a}^\dagger\right)^m \left(\tilde{a}^\dagger\right)^n |0,0\rangle\!\rangle \tag{7}$$

3 Liouville 空間における非摂動表現と準粒子描像

Schödinger 描像における Liouville-von Neumann 方程式

$$i\frac{d}{dt}\rho_S(t) = [H_S, \rho_S(t)] \tag{8}$$

で記述される熱的な系を考える。超演算子形式では Liouville-von Neumann 方程式を

$$i\frac{d}{dt}\big|\rho_S(t)\rangle\!\rangle = \hat{H}_S\big|\rho_S(t)\rangle\!\rangle \tag{9}$$

と表すことが出来る。ただし $\hat{H}_S = \check{H}_S - \tilde{H}_S$ である。また熱的な期待値は

$$\mathrm{Tr}[A_S\rho_S(t)] = \langle\!\langle I\big|A_S(t)\big|\rho_S(t)\rangle\!\rangle \tag{10}$$

と書かれる。ここで $\langle\!\langle I\big| = \sum_m \langle\!\langle m, m\big|$ である。

続いてある非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_u(t)$ を選び、相互作用描像を定義する：

$$i\frac{d}{dt}\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\hat{H}_u(t)\,, \qquad \check{a}(t) = \hat{U}^{-1}(t)\check{a}_S(t)\hat{U}(t)\,, \qquad \tilde{a}(t) = \hat{U}^{-1}(t)\tilde{a}_S(t)\hat{U}(t)\,, \tag{11}$$

Liouville 空間や密度演算子は相互作用描像の $\{\check{a}, \tilde{a}\}$-演算子を通して構築されるため、$\hat{H}_u(t)$ の選び、準粒子描像を明確に定義することが重要である。しかし熱的状況（特に非平衡系）においてその選択は自明ではない。我々は以下の 3 つ基本的な要請を課すことによって、それらを決定していく。

(a) 各時刻において準粒子描像が存在すること

(b) 未来のマクロな量が現在に影響を及ぼさない、という熱的な因果律

(c) $t = \infty$ で熱平衡になること

基本要請 (a) により、自発的対称性が破れていない場合の非摂動ハミルトニアンは $\check{a}\tilde{a}$, $\check{a}^\dagger\tilde{a}^\dagger$, $\check{a}^\dagger\check{a}$, $\tilde{a}^\dagger\tilde{a}$ と c 数の線形結合で書けなければならない。また密度演算子は一般的に $\big|\rho_0(t)\rangle\!\rangle = \sum p_m(t)\big|m, m\rangle\!\rangle$ と書けると仮定する。ここで密度演算子が (i) エルミート性 $\rho_0^\dagger(t) = \rho_0$、(ii) 規格化 $\mathrm{Tr}[\rho_0(t)] = 1$、(iii) 正値性 $\langle\varphi\big|\rho_0(t)\big|\varphi\rangle \geq 0$ for any $\big|\varphi\rangle$ を満たしていることを要請すると

$$p_m(t) = p_m^*(t)\,, \qquad \sum_m p_m(t) = 1\,, \qquad p_m(t) \geq 0\,, \tag{12}$$

$$\Big(\hat{H}_u(t)\Big)^\sim = -\hat{H}_u(t)\,, \qquad \langle\!\langle I\big|\hat{H}_u(t) = 0 \tag{13}$$

という制約が付く。これにより相互作用描像における $\hat{H}_u(t)$ は 3 つの実パラメータ $n(t)$, $\omega(t)$, $\gamma(t)$ を用いて一般的に

$$\begin{aligned}\hat{H}_u(t) &= \omega(t)\left(\check{a}^\dagger\check{a} - \tilde{a}^\dagger\tilde{a}\right) + i\dot{n}(t)\left(\check{a}\tilde{a} + \check{a}^\dagger\tilde{a}^\dagger - \check{a}^\dagger\check{a} - \tilde{a}^\dagger\tilde{a} - 1\right)\\ &\quad + i\gamma(t)\left(\check{a}\tilde{a} + \frac{n(t)}{1+n(t)}\check{a}^\dagger\tilde{a}^\dagger - \frac{1+2n(t)}{2(1+n(t))}\left\{\check{a}^\dagger\check{a} + \tilde{a}^\dagger\tilde{a}\right\} - 1\right)\end{aligned} \tag{14}$$

と書くことが出来る。これらのパラメータのうち $\omega(t)$ はミクロな量である励起エネルギーと解釈できるが、残りの 2 つはマクロな量である。特に $n(t)$ は粒子分布 $\langle\!\langle I\big|a^\dagger a\big|\rho_0\rangle\!\rangle$ そのものである。

$A_i = \check{a}, \check{a}^\dagger, \tilde{a}, \tilde{a}^\dagger$ と置き、非摂動伝搬関数

$$\Delta(t_1, t_2) = -i\langle\!\langle I \big| \mathrm{T}[A_1(t_1)A_2(t_2)] \big| \rho_0 \rangle\!\rangle$$
$$= -i\theta(t_1 - t_2)\langle\!\langle I \big| A_1(t_1)A_2(t_2) \big| \rho_0 \rangle\!\rangle - i\theta(t_2 - t_1)\langle\!\langle I \big| A_2(t_2)A_1(t_1) \big| \rho_0 \rangle\!\rangle \qquad (15)$$

を考える。基本要請 (b) が満たされてる為には、式 (15) の右辺第 1 項からは $n(t_1), \gamma(t_1)$、第 2 項からは $n(t_2), \gamma(t_2)$ の寄与が消えなくてはならない。そのことより $\gamma(t) = 0$ でなくてはならないことが導かれる。

以上により非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_u(t)$ の構造が得られた。$\hat{H}_u(t)$ は励起エネルギー $\omega(t)$ と粒子分布 $n(t)$ をパラメータに持つ。さらにこの構造と Heisenberg 方程式により $p_m(t)$ の従う方程式として

$$\dot{p}_m(t) = \dot{n}(t)\Big\{(m+1)p_{m+1}(t) - (2m+1)p_m(t) + mp_{m-1}(t)\Big\} \qquad (16)$$

を得る。ここで $q_m(t) = \sqrt{m+1}\,\{(1+n(t))p_{m+1}(t) - n(t)p_m(t)\}$ として書き換えると

$$\dot{q}_m(t) = \dot{n}(t)\sqrt{m+1}\,\Big\{\sqrt{m+2}\,q_{m+1}(t) - 2\sqrt{m+1}\,q_m(t) + \sqrt{m}\,q_{m-1}(t)\Big\} \qquad (17)$$

を得る。ところで熱平衡系では $p_m^{\mathrm{eq}} = (1-e^{-\beta\omega})e^{-\beta\omega m}$ であるので、$q_m^{\mathrm{eq}} = 0$ である。従って基本要請 (c) を満たすためには、全ての m に対して $q_m(\infty) = 0$ であることが必要である。そのためには有限の時間 t においても $q_m(t) = 0$ でなくてはいけないことが式 (17) より示される。$q_m(t) = 0$ よりすぐさま $p_{m+1}(t)/p_m(t) = n(t)/(1+n(t)) \equiv f(t)$、つまり $p_m(t)$ は $p_m(t) = (1-f(t))f^m(t)$ という等比分布であることが分かる。

4 結論

3 つの基本要請を置くことにより非摂動ハミルトニアンと密度演算子が

$$\hat{H}_u(t) = \omega(t)\left(\check{a}^\dagger\check{a} - \tilde{a}^\dagger\tilde{a}\right) + i\dot{n}(t)\left(\check{a}\tilde{a} + \check{a}^\dagger\tilde{a}^\dagger - \check{a}^\dagger\check{a} - \tilde{a}^\dagger\tilde{a} - 1\right) \qquad (18)$$

$$\big|\rho_0(t)\rangle\!\rangle = \big(1 - f(t)\big)\sum_m f^m(t)\big|m, m\rangle\!\rangle \qquad (19)$$

となることが導かれた。非平衡 TFD の言葉でいうと、式 (18) の第 1 項は自由ハットハミルトニアン、第 2 項は熱的カウンター項、また式 (19) は $\alpha = 1$ 表現における熱的真空そのものである。特に密度演算子の等比分布性 ($p_m(t) \propto f^m(t)$) は非平衡 TFD では仮定であったが、本研究ではそれをより基本的で自然な仮定である 3 つの基本要請から導くことに成功した。非摂動ハミルトニアンの残った 2 つのパラメータは、非平衡 TFD において自己エネルギーに対する自己無動着な繰り込み条件などによって決定されるパラメータである [2, 4]。この手続きも本研究で用いた超演算子形式からの視点を用いれば、より自然に導けるかもしれない。また、本研究の方法を自発的対称性のある場合へ拡張していくことも今後の課題である。

参考文献

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

[2] H. Chu and H. Umezawa, Int. J. Mod. Phys. **A10**, 1693 (1995).

[3] M. Schmutz, Z. Physik B **30**, 97 (1978).

[4] Y. Nakamura, T. Sunaga, M. Mine, M. Okumura, and Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) **325**, 426 (2010); Y. Nakamura and Y. Yamanaka, *ibid.* **326**, 2070 (2011).