

2重井戸型ポテンシャルに捕捉された冷却原子気体の非平衡初期分布緩和過程に対する非平衡 Thermo Field Dynamics

中村祐介, 桑原幸朗, 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り、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の期待値として表現する形式である [1, 2]。我々は超演算子形式 [3] における準粒子描像という概念から非平衡 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した [4]。この際非摂動ハミルトニアン構造も同時に決定され、非摂動ハミルトニアンに許されるパラメータは時間依存する2つの実パラメータのみであることが導かれた。その2つのパラメータはそれぞれ粒子分布の時間変化および準粒子エネルギーと解釈される。本研究では、仮定した要請の一部を見直し、非摂動ハミルトニアンに準粒子の寿命と解釈できる第三のパラメータが許されることを示す。さらにこのもとの、2重井戸型ポテンシャルに捕捉された冷却原子気体系の非平衡緩和過程に対する数値計算を行う。

2 超演算子形式から非平衡 Thermo Field Dynamics へ

最初に論文 [4] で導入された超演算子形式の方法を簡単にレビューする。本稿では表記簡単化の為、1モードの Bose 粒子系の場合のみを記す。Fermi 粒子系、多モードの系への拡張は容易である。

生成消滅演算子 a, a^\dagger の粒子数状態 $\{|m\rangle\}$ 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 $|A\rangle$ の様に二重ブラケットで表記することにし、その内積を $\langle\langle A|B\rangle\rangle = \text{Tr}[A^\dagger B]$ と定義する。 \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 $\hat{O}|A\rangle = |B\rangle$ と表記される。超演算 $\check{a}, \check{a}^\dagger, \tilde{a}, \tilde{a}^\dagger$ をそれぞれ

$$\check{a}: A \mapsto aA, \quad \check{a}^\dagger: A \mapsto a^\dagger A, \quad \tilde{a}: A \mapsto Aa^\dagger, \quad \tilde{a}^\dagger: A \mapsto Aa \quad (1)$$

と定義すると

$$\check{a}|m, n\rangle = \sqrt{m}|m-1, n\rangle, \quad \check{a}^\dagger|m, n\rangle = \sqrt{m+1}|m+1, n\rangle, \quad (2)$$

$$\tilde{a}|m, n\rangle = \sqrt{n}|m, n-1\rangle, \quad \tilde{a}^\dagger|m, n\rangle = \sqrt{n+1}|m, n+1\rangle \quad (3)$$

及び交換関係

$$[\check{a}, \check{a}^\dagger] = 1, \quad [\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger] = 1, \quad \text{otherwise} = 0 \quad (4)$$

が成立する。ただし $|m, n\rangle \equiv ||m\rangle\langle n|$ である。超演算子形式では熱的な期待値は $\text{Tr}[A\rho] = \langle\langle I|A|\rho\rangle\rangle$ と書くことが出来る。ここで $\langle\langle I| = \sum_m \langle\langle m, m|$ である。さらに $|m, n\rangle$ は \check{a}, \tilde{a} に対する Fock 空間とみなすことも出来る：

$$|m, n\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!n!}} (\check{a}^\dagger)^m (\tilde{a}^\dagger)^n |0, 0\rangle \quad (5)$$

この見方では倍加された Fock 空間 $\{|m, n\rangle\}$ 上の純粋状態 $\langle\langle I|, |\rho\rangle\rangle$ の内積によって熱的期待値が記述されている。これが TFD の形式である。

Schrödinger 描像における Liouville-von Neumann 方程式 $i\frac{d}{dt}\rho_S(t) = [H_S, \rho_S(t)]$ 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 $i\frac{d}{dt}|\rho_S(t)\rangle\rangle = \hat{H}_S|\rho_S(t)\rangle\rangle$ と表すことが出来る。ただし $\hat{H}_S = \check{H}_S - \tilde{H}_S$ である。

次に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：

$$i\frac{d}{dt}\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\hat{H}_u(t), \quad \check{a}(t) = \hat{U}^{-1}(t)\check{a}_S\hat{U}(t), \quad \tilde{a}(t) = \hat{U}^{-1}(t)\tilde{a}_S\hat{U}(t), \quad (6)$$

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、 $\hat{H}_u(t)$ を選び、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。これらは以下の3つ基本的な要請を課すことによって決定することが出来る：(a) 各時刻において準粒子描像が存在する。(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が成立する。(c) $t = \infty$ で熱平衡になる。

要請 (a) より、密度行列がエルミート性、正值性、規格化が任意の時間で保証されていなくてはならない。その為には非摂動ハミルトニアンが

$$\hat{H}_u = \omega \left(\check{a}^\dagger \check{a} - \tilde{a}^\dagger \tilde{a} \right) + i \left\{ \zeta_1 \check{a} \tilde{a} + \zeta_2 \check{a}^\dagger \tilde{a}^\dagger + \zeta_3 \left(\check{a}^\dagger \tilde{a} + \tilde{a}^\dagger \check{a} \right) - \zeta_2 \right\} \quad (7)$$

となっている必要がある。ただし

$$\zeta_1 = \dot{n} + \kappa, \quad \zeta_2 = \dot{n} + \frac{n}{1+n}\kappa, \quad \zeta_3 = -\dot{n} - \frac{1+2n}{2(1+n)}\kappa \quad (8)$$

である。つまり3つの実数パラメータ $(\dot{n}, \omega, \kappa)$ を含んでいる。このうち \dot{n} は分布関数の時間微分、 ω は準粒子エネルギーであることがすぐ分かるが、 κ の物理的意味は非自明であった。

ここで以下の伝搬関数を考える：

$$\Delta(t_1, t_2) = -i \langle\langle I | T \left[\hat{A}_1(t_1) \hat{A}_2(t_2) \right] | \rho \rangle\rangle \quad (9)$$

$$= -i\theta(t_1 - t_2) \langle\langle I | \hat{A}_1(t_1) \hat{A}_2(t_2) | \rho \rangle\rangle - i\theta(t_2 - t_1) \langle\langle I | \hat{A}_2(t_2) \hat{A}_1(t_1) | \rho \rangle\rangle \quad (10)$$

ただし \hat{A} は $\check{a}, \check{a}^\dagger, \tilde{a}, \tilde{a}^\dagger$ の何れかである。T積の為、後の時刻の演算子が $\langle\langle I |$ に掛かることに注意する。従って要請 (b) を守るためには、 $\langle\langle I | \hat{A}(t)$ がマクロな量に依存してはいけない。

先行研究 [4] では ω は微視的な量であり、 \dot{n} は巨視的な量であることを前提とした。また κ の物理的な意味は非自明であったが、非摂動ハミルトニアンの虚部に現れることから \dot{n} と同様、巨視的な量であると解釈した。 $\langle\langle I | \hat{A}(t)$ が κ と \dot{n} に依存しないためには、 $\kappa = 0$ が必要であることがすぐ分かる。このようにして非摂動ハミルトニアンが ω, \dot{n} の2つのパラメータしか持たないと結論付けた。

3 非摂動ハミルトニアンの第3のパラメータ

パラメータ κ を

$$\gamma = 2(1+n)\kappa \quad (11)$$

と γ に置き換え、更に式 (7) に熱的 Bogoiubov 変換

$$\xi^\mu = B^{\mu\nu} a^\nu, \quad \bar{\xi}^\mu = \bar{a}^\nu B^{-1,\nu\mu}, \quad B^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1+n & -n \\ -1 & 1 \end{pmatrix}^{\mu\nu} \quad (12)$$

を施す。ここで $A^\mu = \begin{pmatrix} A & \tilde{A}^\dagger \end{pmatrix}^t$, $\bar{A}^\nu = \begin{pmatrix} A^\dagger & -\tilde{A} \end{pmatrix}$ という熱的2重項表記を用いている。すると式 (7) は

$$\hat{H}_u = (\omega - i\gamma)\xi^\dagger\xi - (\omega + i\gamma)\bar{\xi}^\dagger\bar{\xi} + i\dot{n}\xi^\dagger\bar{\xi}^\dagger \quad (13)$$

となる。相互作用描像の a 演算子に関する Heisenberg 方程式 $i\partial_t a^\mu = [a^\mu, \hat{H}_u]$ と ξ の定義 (12) より $i\partial_t \xi^\mu = [\xi^\mu, \hat{H}_u - i\dot{n}\xi^\dagger\bar{\xi}^\dagger]$ であり、これを解くと

$$\xi(t) = \xi e^{\int^t ds [-i\omega(s) - \gamma(s)]}, \quad \xi^\dagger(t) = \xi^\dagger e^{\int^t ds [i\omega(s) + \gamma(s)]} \quad (14)$$

となっている。従って γ は準粒子の寿命の逆数と解釈できる微視的な量である。《 $I|\hat{A}$ は γ には依存していないので、熱的因果律に対する要請 (b) は $\gamma \neq 0$ を許している。このようにして非摂動ハミルトニアンに第 3 のパラメータ γ が許されるようになった。正しい解釈として、熱的期待値 $\langle\langle I|\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t)|\rho\rangle\rangle$ で制限される $n(t)$ やその時間微分 $\dot{n}(t)$ は巨視的な量であり、 ω, κ のようにその種の制限のない量は微視的な量であると見做せば良い。

式 (13) から分かる通り非摂動ハミルトニアンは非エルミートである。しかしブラ $\langle\langle I|$ とケット $|\rho_0\rangle\rangle$ は共役の関係にないため、ハミルトニアンが非エルミートであっても物理量が複素数にはならない。物理量の実性に必要なのは $\langle\langle I|\hat{H}_u = 0$ であって、これは $\gamma \neq 0$ であっても成立している。このようにして、TFD では準粒子の寿命という概念を相互作用描像のレベルで自然に取り入れることが出来る。

4 2重井戸型模型に対する数値計算

前章で得られた γ の効果を確認するために、以下の様な冷却 Bose 原子気体に対する単純な 2 重井戸型模型を考える：

$$H = -J \sum_{\ell} \left(\psi_{L\ell}^\dagger \psi_{R\ell} + \psi_{R\ell}^\dagger \psi_{L\ell} \right) + \sum_{\ell} \nu_{\ell} \left(\psi_{L\ell}^\dagger \psi_{L\ell} + \psi_{R\ell}^\dagger \psi_{R\ell} \right) + \frac{U}{2} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4} g_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4} \left(\psi_{L\ell_1}^\dagger \psi_{L\ell_2}^\dagger \psi_{L\ell_3} \psi_{L\ell_4} + \psi_{R\ell_1}^\dagger \psi_{R\ell_2}^\dagger \psi_{R\ell_3} \psi_{R\ell_4} \right). \quad (15)$$

ここで J は井戸間のホッピング項、 U は井戸内の相互作用定数、 ℓ は井戸内の準位である。各井戸は 1 次元調和振動子で作られ、その励起エネルギーは $\nu_{\ell} = \Omega(\ell + 1/2)$ である。相互作用項には井戸内の準位に応じた係数 $g_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4} = \int dz u_{\ell_1}(z) u_{\ell_2}(z) u_{\ell_3}(z) u_{\ell_4}(z)$ が掛かっている。ここで $u_{\ell}(z)$ は調和振動子の固有関数である。

冷却原子系の非平衡初期分布の緩和に関する典型的な実験を模すために、 $t < 0$ では $J = 0$ であり、系は全ての粒子が左の井戸に集まっているものとする。そして $t = 0$ で瞬間的に J を正にし、系を非平衡にする。このように用意した状態を初期条件とし、非平衡 TFD を用いて導出した量子輸送方程式を解いた結果を Fig. 1 に示す。 γ の効果によって粒子が時間の経過に伴って左右の井戸に均等に分配し、緩和していくことが分かる。一方 $\gamma = 0$ とした計算では緩和しない。 γ を非摂動ハミルトニアンに取り入れることが、緩和現象を記述するにあたって重要である。

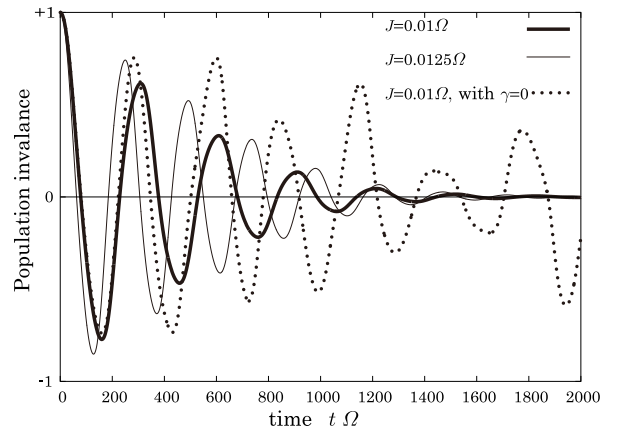


Fig. 1: 左右の井戸の粒子数の偏りの時間変化。+1 は全ての粒子が左の井戸に、-1 は全ての粒子が右の井戸に、0 は左右均等に存在していることを示している。点線は非摂動ハミルトニアンにおいて $\gamma = 0$ とした場合の計算結果である。

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. A* **10**, 1693 (1995).
- [3] M. Schmutz, *Z. Physik B* **30**, 97 (1978).
- [4] Y. Nakamura and Y. Yamanaka, *Ann. Phys. (N.Y.)* **331**, 51 (2013).