熱的状況下の自由度二重化

山中 由也[1]、中村 祐介[2]、桑原 幸朗[3]
早稲田大学基幹理工学部

1 はじめに

本発表では、非平衡 TFD（Thermo Field Dynamics）[1, 2, 3] の理論構造や妥当性をより深いレベルから理解することを目指して、二つの話題を紹介する。一つは密度行列の立場から、それを超演算子形式にしてどのような物理的条件下で非平衡 TFD に至るかという内容で [3]、もう一つは最近 Galley によって提唱された自由度を二重化する古典力学の定式化 [4] を場の量子論に拡張することによって非平衡 TFD が導かれること [5] である。

熱的状況下の実時間形式場の量子論としては、CTP（Closed Time Path あるいは Keldysh-Schwinger method とも呼ばれる）[6] と TFD が知られている。どちらも"自由度を倍加"して 2×2-行列プロパゲーターが用いられることから、同等な理論と受け取られがちであるが、決してそうではない。時間依存演算子の量子論期待値は、相互作用描像で通常の T-積の期待値とならないが、CTP では時間の往路→復路である Keldysh 経路上で順に並べる T_c-積導入することによって T_c-積の期待値としている $\langle\psi_H(t)\rangle = \langle S^{-1}\mathrm{T}\,[\psi(t)S]\rangle = \langle \mathrm{T}_c\,[\psi(t)S_c]\rangle$（$S$ は通常の、また S_c は Keldysh 経路上の S-行列演算子である）。往路上の演算子 ψ_1、復路上の演算子 ψ_2 と表すとき、$\left[\psi_1(t), \psi_2^\dagger(t)\right]_\mp \neq 0$ のように一般にお互い（反）交換しない。つまり、CPT は時間軸の二重化であって、本質的な自由度の二重化ではない。

非平衡 TFD の重要な要素は次の 4 つである : (ア) 自由度の二重化（$a \to a\,, \tilde{a}$ のようにチルド演算子を導入）、(イ) 物理量は時間依存しない熱的真空の期待値、(ウ) 未定の時間依存個数分布 $n(t)$ の導入、(エ) 相互作用描像で 2×2-行列プロパゲーターに基づく Feynman diagram method で計算された因果グリーン関数に対する繰り込み条件から $n(t)$ に対する量子輸送方程式の導出。(ア) の自由度二重化の理由は、幾何分布の混合状態期待値（$\rho_0 = (1 \mp f)\sum_m f^m|m\rangle$、平衡系なら $f = e^{-\beta\omega}$）を熱的真空（$\langle 0_{\mathrm{th}}| = \sum_m \langle m, \tilde{m}|\,, |0_{\mathrm{th}}\rangle = (1 \mp f)\sum_m f^m|m, \tilde{m}\rangle$）による純粋状態期待値で表すことができると、これまで説明されてきた。

$$\langle F(a, a^\dagger)\rangle = \mathrm{Tr}\left[\rho_0 F(a, a^\dagger)\right] = \langle 0_{\mathrm{th}}|F(a, a^\dagger)|0_{\mathrm{th}}\rangle\,.$$

倍加された演算子は同時刻で（反）交換する（$[a(t), \tilde{a}(t)]_\mp = \cdots = 0$）するので、明らかに自由度の二重化である。

2 超演算子形式から非平衡 TFD へ

上の議論で幾何分布という制限は重要である。それなら非平衡 TFD でなぜその分布に限られるのか。また、非平衡 TFD で $n(t)$ の導入は時間依存 Bogoliubov 変換で実現されるが、Bogolibov 変換には非自明なパラメーターが存在し、$n(t)$ 以外の 2 つのパラメーターがなぜ固定されて現れないのか。こうした点は、本質的には密度演算子形式である超演算子形式から非平衡 TFD を導くことによって明らかになる。

その導出の詳細は参考文献 [3] に譲る。位相変換対称性を有しかつ自発的にも破れていない系の超演算子形式に対して、次の三つの要請だけで非平衡 TFD が導出される。(r1) 各時刻に準粒子描像が成り

[1]e-mail address: yamanaka@waseda.jp
[2]e-mail address: nakamura@aoni.waseda.jp
[3]e-mail address: a.kuwahara1224@asagi.waseda.jp

立ち、時間と共に変化する非摂動 $\rho_0(t)$ が存在する。(r2)（thermal causality） 因果グリーン関数において巨視的量であるである $n(t)$ は未来（過去）の微視的運動に影響する（しない）。(r3) 長時間経過後、系は熱平衡に緩和する。

(r1) は、非摂動表現が時間と共に変更されるという相互作用描像の新たな定式化である。また、$\rho_0(t)$ の存在を前提に、次のように TFD の熱的真空に対応させる。

$$\rho_0(t) = \sum_m p_m(t)|m\rangle\langle m| \to |0_{\rm th}\rangle\,, \qquad \sum_m |m\rangle\langle m| \to \langle 0_{\rm th}|$$

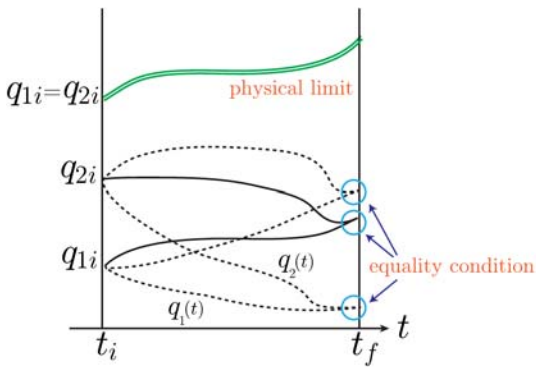
これは Bogolibov 変換に現れる一つのパラメータ $\alpha(t)$ を $\alpha(t) = 1$ と固定することにあたる [1]。また、この固定によって Feynman diagram method の使用が可能となる。(r2) によって、残り一つのパラメーターが定められ、結局非摂動ハミルトニアンの虚部は $\dot{n}$ に比例する項だけになる。最後に (r3) は $t = \infty$ で成り立つ $p_{m+1}(\infty)/p_m(\infty) = f(\infty)$（$m$ に依存しない）という関係を意味するが、それを使うと任意の時刻で $p_{m+1}(t)/p_m(t) = f(t)$ 成り立つこと、即ち幾何分布となることがが証明される [3]。

この超演算子形式の議論から、非平衡 TFD の定式化が導かれることを示した。それは時間とともに変化する幾何分布を持つ密度行列 $\rho_0(t)$ を非摂動状態に採用した理論となっている。

3 Galley の古典力学から非平衡 TFD へ

最近非保存（散逸）系に対する古典解析力学として、自由度を二重化した Hamilton 原理が Galley によって提唱された [4]。彼の主張は次のようなものである：通常の Hamilton 原理は作用 $S[q]$ に対して、初期時刻 t_i と終期時刻 t_f における仮想変位 $\delta q(t_i) = \delta q(t_f) = 0$ という境界値条件として与えられるが、その原理から導かれる運動方程式は初期値問題として解かれる。しかし、対象系と環境系からなる全体系を考え、環境系を消去して対象系のみの有効理論を導く際、全体系の Hamilton 原理から出発し、初期条件の下で運動方程式を解いて環境系変数を消去して得られる対象系の有効理論（非保存系）ではもはや Hamilton 原理は成立しない。この問題の根源は、Hamilton 原理が終期時刻の座標も用いて定式化されていることにある。

彼は初期時刻の座標だけを用いる次の Hamilton 原理を提案した。(c1)（時間経路二重化） 経路を $t_i \to t_f \to t_i$ とする。($t_i \to t_f$ の座標 $q_1(t)$、$t_f \to t_i$ の座標を $q_2(t)$ と表す。) (c2)（初期条件） $t = t_i$ で条件を課す: $q_1(t_i) = q_{1i}$、$q_2(t_i) = q_{2i}$（一般に $q_{1i} \neq q_{2i}$ である）。(c3)（equality condition） $t = t_f$ では固定しないが、すべての仮想経路で $q_1(t_f) = q_2(t_f)$、$\dot{q}_1(t_f) = \dot{q}_2(t_f)$ とする。(c4)（physical limit） 導かれる運動方程式の解の内で $q_1^{\rm sol}(t) = q_2^{\rm sol}(t)$ だけが物理的解である。



Galley の Hamilton 原理の重要な点は、初期条件だけが固定されていることと自由度が二重化されていることである。(c1) から CTP 同様の時間軸の二重化と結論するのは間違いである。実際ラグランジアン $\hat{L} = L(q_1, \dot{q}_1) - L(q_2, \dot{q}_2)$、一般化運動量 $p_\mu = \varepsilon_\mu \frac{\partial \hat{L}}{\partial \dot{q}_\mu}$ ($\mu = 1, 2$) とから得られるハミルトン形式で次のようにポアソン括弧 $\{\{A, B\}\} = \sum_\mu \varepsilon_\mu \left(\frac{\partial A}{\partial q_\mu}\frac{\partial B}{\partial p_\mu} - \frac{\partial A}{\partial p_\mu}\frac{\partial B}{\partial q_\mu} \right)$ ($\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = -1$) を定義すると、$\{\{q_\mu, p_{\mu'}\}\} = \varepsilon_\mu \delta_{\mu\mu'}\,, \{\{q_\mu, q_{\mu'}\}\} = \{\{p_\mu, p_{\mu'}\}\} = 0$ となる。この結論には条件 (C) が本質的であり、結果は q_1 と q_2 が独立な自由度で、自由度二重化になっている。

この新しい Hamilton 原理を場の量子論系に拡張する。これまで CTP や TFD で”自由度を倍加”は量子期待値計算が起源であったのに反し、ここでは既に古典レベルで自由度が二重化されている。場の量子論系への拡張では、equality condition (c3) と physical limit (c4) をどのように実現するかがポイントである。我々は次の 5 つの要請を置くと、得られる理論が非平衡 TFD に他ならないことを示した [5] : (R1)

物理量 A_H（添え字の H は Heisenberg 描像演算子を示す）は独立な $\langle\Psi_b|$ と $|\Psi_k\rangle$ の行列要素 $\langle\Psi_b|A|\Psi_k\rangle$ で与えられる。(R2) $q_{1H}(t) \leftrightarrow q_{2H}(t)$ と入れ替える操作を記号 ~ で表すことにする。physical limit を、次のように因果グリーン関数が ~ の下で不変であることに対応させる。

$$(\langle\Psi_b|\mathrm{T}[q_{1H}(t_1)p_{1H}(t_2)\cdots]|\Psi_k\rangle)^{\sim} = \langle\Psi_b|\mathrm{T}[q_{2H}(t_1)p_{2H}(t_2)\cdots]|\Psi_k\rangle$$

(R3) equality condition は、次のような $\langle\Psi_b|$ に対する終期時刻演算子による状態条件で実現することとする。

$$\langle\Psi_b|\left\{\begin{array}{c} q_{1H}(t_f) \\ p_{1H}(t_f) \end{array}\right\} = \langle\Psi_b|\left\{\begin{array}{c} q_{2H}(t_f) \\ p_{2H}(t_f) \end{array}\right\}$$

(R4) 前節 (r2) と同じ thermal causality を要請する。(R5) 前節 (r3) と同じ、熱平衡への緩和を要請する。

(R1)〜(R3) の要請で前節の (r1)、即ち各時刻に準粒子描像が成り立ち、時間と共に変化する非摂動密度行列が存在する定式化と等価な理論を導くことが出来る。さらに、(R4) と (R5) を追加して非平衡 TFD を導く議論は、前節で (r2) と (r3) を要請したものと同じである。

4　まとめ

本論文の議論で、密度演算子形式に対応させるならば、非平衡 TFD は各時刻最適な粒子描像に対応するように時間と共に変化する非摂動表現を取る形式ということが明らかになった。さらに推し進めて、自由度二重化の古典力学の場の理論への拡張という視点に立つなら、非平衡 TFD には密度行列が存在する前提も不要となる。マクロ変化のミクロダイナミクスへの影響の制限である thermal causality と熱力学法則である熱平衡への緩和という二つの物理的要請が、非平衡 TFD 成立について決定的役割を担っている。

参考文献

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

[2] Y. Nakamura and Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) 326 (2011) 1070.

[3] Y. Nakamura and Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) 331 (2013) 51.

[4] C. R. Galley, Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 174301.

[5] Y. Kuwahara, Y. Nakamura and Y. Yamanaka, "From Classical Mechanics with Doubled Degrees of Freedom to Quantum Field Theory for Nonconservative Systems", to be published in Phys. Lett. **A** （arXiv:1307.1235 [quant-ph]).

[6] J. Schwinger, J. Math. Phys. 2 (1961) 407; L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP 20 (1965) 1018; L. P. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics*, (Benjamin, New York, 1962); P. Danielewiecz, Ann. Phys. (N.Y.) 152 (1984) 239; K. Chou, Z. Su, B. Hao and L. Yu, Phys. Reports 118 (1985) 1; T. Kita, 物性研究 90 (2008) 1; Prog. Theor. Phys. 123 (2010) 581-658.