Soryushiron Kenkyu

Nelson's Stochastic Quantization in Thermo Field Dynamics

小林恵太, 山中由也 [A]
早大理工学研究所, 早大基幹理工電子光システム [A]

量子化法のひとつとして Nelson 流確率過程量子化が知られている [1]. この方法は Schrödinger 方程式と等価な体系であり, 粒子の運動は Ito 型の確率微分方程式により記述されることになる. Nelson 流確率過程量子化の熱的状況への拡張は, 調和振動子ポテンシャル中の粒子に対し, 論文 [2] において現象論的に行われた. 本研究では Thermo Field Dynamics[3] を用いることにより Nelson 流確率過程量子化の熱的状況下への拡張を行う. Thermo Field Dynamics では密度行列を純粋状態として扱うことが可能であり, 密度行列の時間発展を Liuville-von Neumann 方程式と等価な TFD 型の Schrodinger 方程式により扱うことが可能となる. 我々は Nelson 流確率過程を拡張し TFD 型の Schrodinger 方程式と等価な体系となるように定式化した [4]. また Nelson 流確率過程における有限温度での不確定性について論じる.

Nelson の量子力学では二つの要請: (I) 時間前向き、後向きに独立な確率微分方程式, (II) Newton-Nelson 運動方程式, から成り立っており, これら二つの要請から Schrödinger 方程式を導出することができる。我々は Thermo Field Dynamics(TFD) の手法をに Nelson の量子力学に適用することにより, Nelson の量子力学を熱的状況下に拡張する. TFD では倍加された Hilbert 空間 ($\mathcal{H} \to \hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}$) を用いて定式化される. 倍加された Hilbert 空間上の状態ベクトル

$$|\Psi\rangle = \sum_n f_n |u_n, \tilde{u}_n\rangle \,, \tag{1}$$

を用いると, 物理量の期待値は以下のように表される.

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \sum_n f_n^2 \langle u_n|A|u_n\rangle = Tr[\rho A] \,, \tag{2}$$

$$\rho = \sum_n f_n^2 |u_n\rangle\langle u_n| \,, \tag{3}$$

式 (2) は倍加された Hilbert 空間を用いて混合状態を記述できることを表しており, 実際に TFD は量子統計力学と等価な結果を与える. また, TFD の枠組みではチルダ・ノンチルダ粒子間の量子相関により熱揺らぎが現れると解釈できる. 状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の時間発展は以下の TFD 型の Schrödinger 方程式 $i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = (H - \tilde{H})|\Psi(t)\rangle$ に従う. TFD 型の Schrödinger 方程式は Liouville-von Neumann 方程式 $i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}\rho(t)$ と等価である. 我々は Nelson の量子力学を用いて座標表示での TFD 型の Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{x},\tilde{\boldsymbol{x}},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x},t) + \frac{\hbar^2}{2m}\tilde{\nabla}^2 - V(\tilde{\boldsymbol{x}},t)\right]\Psi(\boldsymbol{x},\tilde{\boldsymbol{x}},t) \,, \tag{4}$$

の導出を行う. ここで, チルダ・ノンチルダ自由度の Heisenberg 方程式, $i\hbar\frac{d}{dt}\tilde{A} = [\tilde{A}, H - \tilde{H}] = -[\tilde{A}, \tilde{H}]$, $i\hbar\frac{d}{dt}A = [A, H - \tilde{H}] = [A, H]$ から, チルダ自由度はノンチルダ自由度に対し時間逆向きの振る舞いをすることになる.

出発点として $\boldsymbol{x}(t)$,$\tilde{\boldsymbol{x}}(t)$ は時間前向き発展に対しては, 以下の確率微分方程式に従うとする.

$$d\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t),t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\boldsymbol{W} \,, (d\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}(t+dt) - d\boldsymbol{x}(t)) \,, \tag{5}$$

$$d\tilde{\boldsymbol{x}}(t) = \tilde{\boldsymbol{b}}_*(\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t),t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\tilde{\boldsymbol{W}}_* \,, (d\tilde{\boldsymbol{x}}(t) = \tilde{\boldsymbol{x}}(t) - d\tilde{\boldsymbol{x}}(t-dt)) \,. \tag{6}$$

また時間後ろ向き発展に対しては以下の確率微分方程式に従うものとする.

$$d\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{b}_*(\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t),t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\boldsymbol{W}_* \,, (d\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}(t) - d\boldsymbol{x}(t-dt)) \,, \tag{7}$$

$$d\tilde{\boldsymbol{x}}(t) = \tilde{\boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t),t)dt + \sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\tilde{\boldsymbol{W}} \,, (d\tilde{\boldsymbol{x}}(t) = \tilde{\boldsymbol{x}}(t+dt) - d\tilde{\boldsymbol{x}}(t)) \,. \tag{8}$$

NII-Electronic Library Service

Soryushiron Kenkyu

ここで $d\boldsymbol{W}, d\tilde{\boldsymbol{W}}_*, d\boldsymbol{W}_*, d\tilde{\boldsymbol{W}}$ はそれぞれ独立なガウス型ホワイトノイズである．チルダ自由度の時間逆向きの振る舞いを再現するために，チルダ粒子 $\tilde{\boldsymbol{x}}(t)$ は時間逆向きに振る舞うように設定する．そのため時間前向き微分，後ろ向き微分を新たに以下のように定義する．

$$\bar{D}f(\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t),t) = \lim_{dt\to 0+} E\left[\frac{f(\boldsymbol{x}(t+dt),\tilde{\boldsymbol{x}}(t),t+dt)-f(\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t-dt),t)}{dt}\middle|\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t)\right], \tag{9}$$

$$\bar{D}_*f(\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t),t) = \lim_{dt\to 0+} E\left[\frac{f(\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t+dt),t)-f(\boldsymbol{x}(t-dt),\tilde{\boldsymbol{x}}(t),t-dt)}{dt}\middle|\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t)\right]. \tag{10}$$

$E[\cdots|\boldsymbol{x}(t),\tilde{\boldsymbol{x}}(t)]$ は条件付き期待値である．更に，Newton-Nelson 方程式

$$m\boldsymbol{a} = -\nabla(V-\tilde{V}), \tag{11}$$

$$\boldsymbol{a}(t) = \frac{\bar{D}_*\bar{D}+\bar{D}\bar{D}_*}{2}\boldsymbol{x}(t) \tag{12}$$

を要請する．以上の要請から次の運動学的方程式，力学的方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{u} = -\frac{\hbar}{2m}\left(\nabla^2-\tilde{\nabla}^2\right)\boldsymbol{v}-\nabla(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v}+\tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\tilde{\boldsymbol{v}}), \tag{13}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{v} = \frac{\hbar}{2m}\left(\nabla^2-\tilde{\nabla}^2\right)\boldsymbol{u}+(\boldsymbol{u}\cdot\nabla-\tilde{\boldsymbol{u}}\cdot\tilde{\nabla})\boldsymbol{u}-(\boldsymbol{v}\cdot\nabla+\tilde{\boldsymbol{v}}\cdot\tilde{\nabla})\boldsymbol{v}-\frac{1}{m}\nabla(V-\tilde{V}) \tag{14}$$

を得る．ここで $\boldsymbol{u}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{b}_*)$ ，$\boldsymbol{v}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{b}_*)$ ，$\tilde{\boldsymbol{u}}=\frac{1}{2}(\tilde{\boldsymbol{b}}-\tilde{\boldsymbol{b}}_*)$ ，$\tilde{\boldsymbol{v}}=\frac{1}{2}(\tilde{\boldsymbol{b}}+\tilde{\boldsymbol{b}}_*)$ である．運動学的方程式，力学的方程式は TFD 型の Schrödinger 方程式と等価である．実際に $\boldsymbol{u}=\frac{\hbar}{m}\nabla\mathrm{Re}\ln\Psi$，$\tilde{\boldsymbol{u}}=\frac{\hbar}{m}\tilde{\nabla}\mathrm{Re}\ln\Psi$，$\boldsymbol{v}=\frac{\hbar}{m}\nabla\mathrm{Im}\ln\Psi$，$\tilde{\boldsymbol{v}}=\frac{\hbar}{m}\tilde{\nabla}\mathrm{Im}\ln\Psi$ と変数変換することにより，TFD 型 Schrödinger 方程式を導出することができる．

具体的に TFD 形式による Nelson 量子力学を調和振動子中の粒子の運動に適用する．TFD 型 Schrödinger 方程式は以下で与えられる．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,\tilde{x},t)=\left(H-\tilde{H}\right)\Psi(x,\tilde{x},t), \qquad H=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\omega^2 m}{2}x^2\right). \tag{15}$$

有限温度における TFD 型 Schrödinger 方程式の平衡解は解析的に以下の形で与えられ

$$\Psi_{\mathrm{eq}}(x,\tilde{x})=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{(x^2+\tilde{x}^2)\cosh(\beta\hbar\omega/2)-2x\tilde{x}}{2\sinh(\beta\hbar\omega/2)}\right), \tag{16}$$

対応する確率微分方程式は以下のようになる．

$$d\boldsymbol{x}(t) = -\omega\left(x(t)\frac{\cosh(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}-\tilde{x}(t)\frac{1}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}\right)dt+\sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\boldsymbol{W}, \quad (d\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{x}(t+dt)-d\boldsymbol{x}(t)), \tag{17}$$

$$d\tilde{\boldsymbol{x}}(t) = \omega\left(\tilde{x}(t)\frac{\cosh(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}-x(t)\frac{1}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}\right)dt+\sqrt{\frac{\hbar}{m}}d\tilde{\boldsymbol{W}}_*, \quad (d\tilde{\boldsymbol{x}}(t)=\tilde{\boldsymbol{x}}(t)-d\tilde{\boldsymbol{x}}(t-dt)). \tag{18}$$

我々の確率微分方程式では熱揺らぎは速度場項に現れていることが解る．また絶対零度 $\beta\to\infty$ の極限では通常の Nelson の確率微分方程式が再現される．図 1 に $(\boldsymbol{x},\tilde{\boldsymbol{x}})$ 平面でのサンプルパスを示した．温度が高くなると $\boldsymbol{x}$ 粒子，$\tilde{\boldsymbol{x}}$ 粒子の間に強い相関が現れることが解る．これは TFD において熱揺らぎが $\boldsymbol{x}$ 粒子，$\tilde{\boldsymbol{x}}$ 粒子の量子相関として現れることを反映している． 図 2 には TFD 型 Schrödinger 方程式から解析的に求めた有限温度における粒子の確率分布 (図 2-A) と多数回の施行によりサンプルパスから作成したヒストグラムを示した．両者はよく一致していることが確かめられる．

最後に Nelson 量子力学における不確定性関係について触れる．前向き運動量 $\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{b}$，後ろ向き運動量 $\boldsymbol{p}_*=m\boldsymbol{b}_*$ 分散と粒子の位置 $\boldsymbol{x}(t)$ の分散 には次の不等式が成り立つことが証明できる [5]．

$$\sqrt{\mathrm{Var[x_i]}}\sqrt{\mathrm{Var}[(p_i-p_{*i})/2]}\geq\frac{\hbar}{2}. \tag{19}$$

NII-Electronic Library Service

Soryushiron Kenkyu

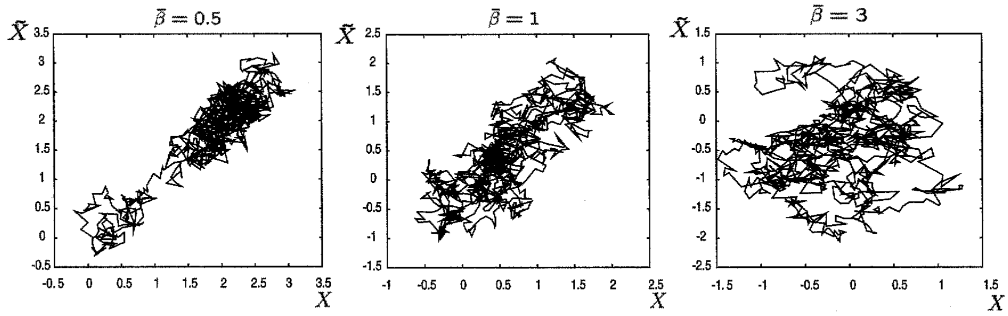

図 1: The typical sample path on $(X,\tilde{X})$ plane for $\bar{\beta}=0.5$, $\bar{\beta}=1$ and $\bar{\beta}=3$ with $\bar{\beta}=\hbar\omega\beta$ and $X=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$.

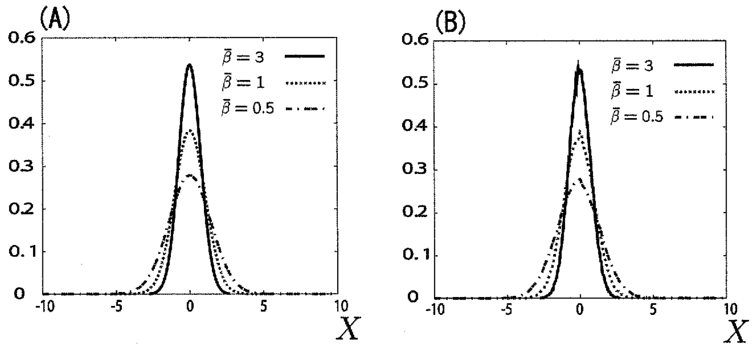

図 2: Figure (A): The analytic solutions of the probability distribution for $\bar{\beta}=3$, $\bar{\beta}=1$ and $\bar{\beta}=0.5$ with $\bar{\beta}=\hbar\omega\beta$ and $X=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$. Figure (B): The probability distribution which is obtained numerically from 10^5 sample paths of the non-tilde and tilde stochastic equations.

この不等式がNelsonの量子力学における位置と運動量の不確定性関係を表している．いま位置と運動量の不確定性の積 $\sqrt{\mathrm{Var}[\mathrm{x_i}]}\sqrt{\mathrm{Var}[(p_i-p_{*i})/2]}$ を有限温度調和振動子ポテンシャル中の確率微分方程式から計算すると以下の関係式を得る．

$$\sqrt{\mathrm{Var}[\mathrm{x_i}]}\sqrt{\mathrm{Var}[(p_i-p_{*i})/2]}=\frac{\hbar}{2}+\hbar n \quad \left(n=\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right). \tag{20}$$

有限温度における不確定性関係は量子揺らぎ $\frac{\hbar}{2}$ と熱揺らぎ $\hbar n$ から成り立つことが解る．この結果は有限温度における不確定性関係 [3] と一致しており，我々の定式化は量子統計力学の結果を再現するものであることが解る．

参考文献

[1] Nelson E 1966 *Phys. Rev.* **150** 1079

[2] Ruggiero P and Zannetti M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **48** 963.

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

[4] K.Kobayashi and Y.Yamanaka WU-HEP-10-07,arXiv: 1007.3603v1[quant-phy]

[5] Falco D, Martino S, and Siena S 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 181

NII-Electronic Library Service