 物性研究・電子版 Vol. 4, No. 2, 042601（2015年5月号）

修士論文

熱浴と接触する系に対する非平衡 Thermo Field Dynamics と射影演算子法

早稲田大学大学院 基幹理工学研究科 電子光システム学専攻
山中研究室

今井 良輔

物性研究・電子版 Vol. 4, No. 2, 042601（2015年5月号）

目次

第 1 章　はじめに　1

第 2 章　超演算子形式　3
2.1　Liouville 空間　3
2.2　超演算子　4
2.3　Liouville-von Neumann 方程式　5
2.4　熱的真空　6

第 3 章　射影演算子法　8
3.1　射影演算子法と縮約密度演算子　8
3.2　摂動展開　11
3.3　Reservior model での解析　12

第 4 章　非平衡 Thermo Field Dynamics による reservior model の解析　14
4.1　ハミルトニアンと時間発展方程式　14
4.2　伝搬関数と自己エネルギー　16
4.3　On-shell 自己エネルギーとくりこみ条件　17
4.4　射影演算子法との比較　19
4.5　くりこみ条件の選び方による差異　20

第 5 章　まとめ　21

参考文献　24

第 1 章

はじめに

場の量子論に忠実な非平衡理論は広範囲に適応可能な普遍的な枠組みを与えるものであり、その範囲は物性物理・凝縮系物理にとどまらず、素粒子論や宇宙論、応用分野では量子光学や量子デバイス設計まで及ぶ。その一方で、場の量子論で記述される系の非平衡過程の理論は確立されておらず、研究の余地が多くある。

量子論に基づいた非平衡過程の解析として量子開放系に対する量子マスター方程式の方法が確立されている。これは多体量子力学を基礎にした方法で、物性物理に限らず量子情報などの分野でも広く用いられる。量子開放系で興味があるのは環境系と相互作用する注目系の緩和過程であり、このダイナミクスを記述する量子マスター方程式を体系的に導出する方法の一つとして、Nakajima, Zwanzig らによる射影演算子法 [1–4] がある。射影演算子法では全体系から環境系の情報を消去する射影演算子を導入し、注目系の縮約密度演算子の時間発展を取り出すことで量子マスター方程式を得ることができる。

多体量子力学ではなく場の量子論に基づいた試みとしては、Keldysh-Schwinger 法とも称される Closed time path 法 (CTP) [5–7] や非平衡 Thermo Field Dynamics (非平衡 TFD) [8] がある。CTP と非平衡 TFD はともに熱平衡系に対する場の量子論 (熱場の量子論) を基盤とし、非平衡過程まで記述できるように拡張をしたものであるが、両者の非平衡の記述の仕方には違いがある。CTP では密度演算子の時間発展を陽に扱わずに相空間上の分布関数の時間発展を計算する。このとき、場の量子論で本質的な役割であるはずの準粒子のエネルギーは明確に定義されない。一方で非平衡 TFD は密度演算子の時間発展を時間依存熱的 Bogoliubov 変換によって取り扱う形式となっていて、非平衡状況下であっても準粒子エネルギー等が明確に定義されている。その特徴から粒子描像の変化を伴う相転移を記述できると期待されており、これまでに非平衡 TFD が用いられた例として、冷却原子系で Bose-Einstein 凝縮が起きたときの凝縮相と非凝縮励起の時間変化と量子輸送方程式の統一的な導出 [9,10] がある。このような利点を持つ非平衡 TFD であるが、非自明な部分が残されている。非平衡 TFD では平衡系から拡張により粒子数の時間変化分等に依存したカウンター項が非摂動ハミルトニアンに現れる。そのカウンター項は on-shell 自己エネルギーに対するくりこみ条件を課すことで決定されるが、くりこみ条件の定め方は一意ではなく、適切なくりこみ条件を選び出す必要がある。その選び方は未だに決着しておらず理論を構成する上での課題となっている。特に量子開放系に対してどのようなくりこみ条件を選ぶべきかは明らかではない。

特に近年、準粒子エネルギーを複素数に取るようなくりこみ条件が提案されている [11]。量子論では

演算子の期待値が物理量の観測値に対応するために、その観測値が実であることを反映して物理量に対応する演算子がエルミート演算子であることが要請される。そこで準粒子エネルギーを複素数に取ると非摂動ハミルトニアンが非エルミート演算子になってしまう。そのため通常の場の量子論ではエネルギーカウンター項として取り入れる準粒子エネルギーの補正は実数に限定される。しかし、非平衡 TFD では冷却原子系の緩和過程の数値解析において準粒子エネルギーの補正を実数に限定すると様々な不都合が起じることが報告されている [11, 12]。例として Double-well model で平衡状態への緩和が起こらないことや、Bose-Hubbard model で時間発展後の粒子数が負の数となってしまうことが挙げられる。これらの問題を解決するためには、準粒子エネルギーの補正に虚数も含むようなくりこみをすればよいことが数値解析によって確認されている [11, 12]。数値解析の結果そのものは準粒子エネルギーを複素数に取るくりこみを支持しているように思えるが、その物理的な意味が明確ではないためにくりこみ条件の選び方として決着するに至っていない。

そこで本論文では量子開放系を扱う射影演算子法と非平衡 TFD を比較することで、くりこみ条件の選び方について調べる。特に射影演算子法で記述されるダイナミクスと同等の結果を導くようなくりこみ条件の課し方がどのようなものか調べ、量子開放系に対するくりこみ条件を考える上での参考としたい。

本論文の構成は次の通りである。

第 2 章では非平衡 TFD や射影演算子法の具体的な議論に必要な超演算子形式を導入する。非平衡 TFD や射影演算子法では主に混合状態を扱うことになるが、超演算子形式を用いると混合状態期待値をあたかも純粋状態期待値のよう扱うことができ、計算上の見通しがよくなる。また非平衡 TFD の定式化にも大きく関わるために重要である [13]。

第 3 章では射影演算子法を用いた reservoir model の解析について述べる。射影演算子法を用いると注目系の縮約密度演算子の時間発展方程式を得ることができ、その時間発展演算子である有効ハミルトニアンを摂動計算によって求めることができることを説明する。

続いて第 4 章では非平衡 TFD を用いて reservoir model の解析を行う。非平衡 TFD ではくりこみ条件を課すことでくりこまれた非摂動ハミルトニアンが決定されることを説明し、そのくりこまれた非摂動ハミルトニアンと第 3 章で求めた有効ハミルトニアンを足がかりとして、非平衡 TFD と射影演算子法の比較を行う。

第 5 章ではこれらの結果についてのまとめを述べる。

《修士論文》 物性研究・電子版 Vol. 4, No. 2, 042601（2015年5月号）

第 2 章

超演算子形式

本章では非平衡 TFD や射影演算子法の具体的な議論に必要な超演算子形式についての導入を Schmutz [14] や Nakamura *et al.* [13] の方法に従って行う。先ず、線形演算子を要素とする Liouville 空間を構成し、そこでの状態ベクトルの Dirac 記法を導入する。さらに Liouville 空間上に作用する超演算子を用いることで、Liouville-von Neumann 方程式が Schrödinger 方程式のように書けることを示す。また、熱平衡系の密度演算子から熱的真空と熱的真空に対する生成消滅演算子を定義し、それらをもとにFock 空間を構成できることを示す。

2.1 Liouville 空間

次の交換関係を満たす演算子 a_i $(i = 1, 2, \dots)$ とそのエルミート共役 $a_i^\dagger$ を導入する。

$$\left[a_i, a_j^\dagger\right] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = \left[a_i^\dagger, a_j^\dagger\right] = 0 \tag{2.1}$$

a に対して $a\,|0\rangle = 0$ を満たす状態 $|0\rangle$ を a の真空とよぶ。$|0\rangle$ に対して $a^\dagger$ を繰り返し作用させ

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_i \frac{1}{\sqrt{n_i!}}\left(a_i^\dagger\right)^{n_i} |0\rangle \tag{2.2}$$

のように作られる状態 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ は正規直交完全系をなす。

$$\langle m_1, m_2, \dots | n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_i \delta_{m_i n_i}, \qquad \sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle\langle n_1, n_2, \dots| = 1 \tag{2.3}$$

$|n_1, n_2, \dots\rangle$ を $|n\rangle$ と省略して書く。$\{|n\rangle\}$ を基底とする空間 $\mathcal{H}$ は Hilbert 空間となる。

$\mathcal{H}$ 上の線形演算子 O は

$$O = \sum_{mn} |m\rangle\langle m|O|n\rangle\langle n| = \sum_{mn} O_{mn}\,|m\rangle\langle n| \qquad (O_{mn} = \langle m|O|n\rangle) \tag{2.4}$$

と書くことができる。すると演算子 $\{|m\rangle\langle n|\}$ を基底として演算子 O を展開した形になっている。このように $\mathcal{H}$ 上の線形演算子の空間 $\bar{\mathcal{H}}$ を考えることができ、$\bar{\mathcal{H}}$ を Liouville 空間と呼ぶ。$\bar{\mathcal{H}}$ の元 A, B に

対して複素数を定める写像

$$(A,B)_{\bar{\mathcal{H}}} = \mathrm{tr}\big[A^{\dagger}B\big] \quad \big(A,B \in \bar{\mathcal{H}}\big) \tag{2.5}$$

を $\bar{\mathcal{H}}$ の内積として導入する。このとき $\bar{\mathcal{H}}$ は Hilbelt 空間となり、$\{|m\rangle\langle n|\}$ が正規直交完全系を成すことが

$$(|m\rangle\langle n|\,, |m'\rangle\langle n'|)_{\bar{\mathcal{H}}} = \prod_i \delta_{m_i m_i'}\delta_{n_i n_i'}, \qquad \sum_{m,n} |m\rangle\langle n|\,(|m\rangle\langle n|\,,\bullet)_{\bar{\mathcal{H}}} = I\bullet \ \ (I\text{は恒等演算子}) \tag{2.6}$$

となることからわかる。$\bar{\mathcal{H}}$ のベクトルに対しても Dirac 記法 ($A \to |A\rangle\rangle, |m\rangle\langle n| \to ||m\rangle\langle n|\rangle\rangle = |m,n\rangle\rangle$ など) を用いると、

$$\langle\langle m,n|m',n'\rangle\rangle = \prod_i \delta_{m_i m_i'}\delta_{n_i n_i'}, \qquad \sum_{m,n} |m,n\rangle\rangle\langle\langle m,n| = I \tag{2.7}$$

と書くことができる。

2.2 超演算子

Liouville 空間 $\bar{\mathcal{H}}$ から $\bar{\mathcal{H}}$ への線形写像を超演算子と呼ぶ。チェック超演算子 $\check{a}_i$ とチルダ超演算子 $\tilde{a}_i$ を

$$\check{a}_i\,|m,n\rangle\rangle = |a_i\,|m\rangle\langle n|\rangle\rangle \tag{2.8}$$
$$\tilde{a}_i\,|m,n\rangle\rangle = \left|\,|m\rangle\langle n|\,a_i^{\dagger}\right\rangle\!\!\right\rangle \tag{2.9}$$

と定める。さらに $\check{a}_i$ と $\tilde{a}_i$ のエルミート共役を $\check{a}_i^{\dagger}$ と $\tilde{a}_i^{\dagger}$ を

$$\langle\langle m,n|\,\check{a}_i^{\dagger} = \langle\langle a_i\,|m\rangle\langle n|| \tag{2.10}$$
$$\langle\langle m,n|\,\tilde{a}_i^{\dagger} = \left\langle\!\!\left\langle |m\rangle\langle n|\,a_i^{\dagger}\right|\right. \tag{2.11}$$

で定める。すると (2.8), (2.9), (2.10), (2.11) と (2.5) から

$$\check{a}_i^{\dagger}\,|m,n\rangle\rangle = \left|a_i^{\dagger}\,|m\rangle\langle n|\right\rangle\!\!\right\rangle \tag{2.12}$$
$$\tilde{a}_i^{\dagger}\,|m,n\rangle\rangle = ||m\rangle\langle n|\,a_i\rangle\rangle \tag{2.13}$$

となる。以上の結果から超演算子 $\check{a}_i, \check{a}_i^{\dagger}, \tilde{a}_i, \tilde{a}_i^{\dagger}$ は次の交換関係を満たすことが示される。

$$\left[\check{a}_i, \check{a}_j^{\dagger}\right] = \left[\tilde{a}_i, \tilde{a}_j^{\dagger}\right] = \delta_{ij}, \qquad (\text{otherwise}) = 0 \tag{2.14}$$

後の計算のために

$$A(a,a^{\dagger}) = \sum_{m,n} C_{mn}\big(a^{\dagger}\big)^m (a)^n \qquad (C_{mn}\text{は複素数}) \tag{2.15}$$

で表される演算子 A と任意の演算子 B の積が、$|B\rangle\!\rangle$ に対する超演算子の作用としてどのように表現されるかを求める。先ず積 AB を定義にしたがって変形すると

$$|AB\rangle\!\rangle = \left|\sum_{m,n} C_{mn}\left(a^\dagger\right)^m (a)^n B\right\rangle\!\!\right\rangle = \sum_{m,n} C_{mn}\left(\check{a}^\dagger\right)^m (\check{a})^n |B\rangle\!\rangle = A(\check{a},\check{a}^\dagger)\,|B\rangle\!\rangle \tag{2.16}$$

となる。このように A が左から B に作用する場合は、A の中身を $a \to \check{a},\ a^\dagger \to \check{a}^\dagger$ と形式的に書き換えて作られる超演算子が $|B\rangle\!\rangle$ に作用するように表記できる。同様に積 $BA^\dagger$ について求めると

$$\left|BA^\dagger\right\rangle\!\!\right\rangle = \left|B\sum_{m,n} C^*_{mn}\left(a^\dagger\right)^n (a)^m\right\rangle\!\!\right\rangle = \sum_{m,n} C^*_{mn}\left(\tilde{a}^\dagger\right)^m (\tilde{a})^n |B\rangle\!\rangle = A^*(\tilde{a},\tilde{a}^\dagger)\,|B\rangle\!\rangle \tag{2.17}$$

となる。ただし A^* は A を展開したときのすべての係数について複素共役をとったものを表す。(2.16) と (2.17) から次のチルダ共役則が導かれる。

$$\left(\check{A}_1\check{A}_2\right)^\sim = \tilde{A}_1\tilde{A}_2 \tag{2.18}$$

$$\left(c_1\check{A}_1 + c_2\check{A}_2\right)^\sim = c_1^*\tilde{A}_1 + c_2^*\tilde{A}_2 \tag{2.19}$$

$$\left(\check{A}_1^\dagger\right)^\sim = \tilde{A}_1^\dagger \tag{2.20}$$

$$\left(\tilde{A}_1\right)^\sim = \check{A}_1 \tag{2.21}$$

$(\check{A}_1, \check{A}_2$は任意の超演算子、$c_1, c_2$は任意の複素数$)$

チルダ共役則を用いると $A^*(\tilde{a},\tilde{a}^\dagger)$ と $A(\check{a},\check{a}^\dagger)$ の関係は

$$A^*(\tilde{a},\tilde{a}^\dagger) = \left\{A(\check{a},\check{a}^\dagger)\right\}^\sim \tag{2.22}$$

と書くことができるので

$$\left|BA^\dagger\right\rangle\!\!\right\rangle = \left\{A(\check{a},\check{a}^\dagger)\right\}^\sim |B\rangle\!\rangle \tag{2.23}$$

となる。このように $A^\dagger$ が B に右から作用する場合は、$A(\check{a},\check{a}^\dagger)$ のチルダ共役が $|B\rangle\!\rangle$ に作用するように表記できる。上の説明では演算子 A が $a, a^\dagger$ のみで書かれる場合を扱ったが、A が $a_i, a_i^\dagger$ $(i = 1, 2, \ldots)$ で書かれる場合にも簡単に拡張できる。

2.3 Liouville-von Neumann 方程式

混合状態を含めた一般的な状態は $\mathcal{H}$ 上の線形演算子である密度演算子で表現することができる。具体的には、純粋状態 $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \cdots \in \mathcal{H}$ と重み $\{p_k \mid 0 \le p_k \le 1,\ \sum_k p_k = 1\}$ を用いると密度演算子 $\rho(t)$ は

$$\rho(t) = \sum_k p_k\,|\phi_k(t)\rangle\langle\phi_k(t)| \tag{2.24}$$

と書くことができ、このとき物理量 $O(a, a^\dagger)$ の期待値は

$$\mathrm{tr}[O\rho] = \langle\!\langle I|O\rho\rangle\!\rangle = \langle\!\langle I|\,\check{O}\,|\rho\rangle\!\rangle \tag{2.25}$$

$$\check{O} = O(\check{a},\check{a}^\dagger) \tag{2.26}$$

と計算される。状態 $|\phi_k\rangle$ の時間発展は Schrödinger 方程式

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi_k(t)\rangle = H|\phi_k(t)\rangle \tag{2.27}$$

で記述されるとする。ただし、このハミルトニアン H は演算子 $a, a^\dagger$ で書かれているとする。すると密度演算子 $\rho(t)$ の時間発展は

$$\begin{aligned} i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(t) &= \sum_k \left\{ p_k\left(i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi_k(t)\rangle\right)\langle\phi_k(t)| + p_k|\phi_k(t)\rangle\left(i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\phi_k(t)|\right)\right\} \\ &= H\left(\sum_k p_k|\phi_k(t)\rangle\langle\phi_k(t)|\right) - \left(\sum_k p_k|\phi_k(t)\rangle\langle\phi_k(t)|\right)H^\dagger \\ &= H\rho(t) - \rho(t)H^\dagger \end{aligned} \tag{2.28}$$

に従うことがわかる。この時間発展方程式は Liouville-von Neumann 方程式と呼ばれる。この方程式は演算子の時間発展方程式であるので、超演算子形式を用いると見通しが良くなる。そこで、(2.16) と (2.23) の結果を用いると

$$\begin{aligned} i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\rho(t)\rangle\rangle &= |H\rho(t)\rangle\rangle - |\rho(t)H^\dagger\rangle\rangle \\ &= \check{H}|\rho(t)\rangle\rangle - \tilde{H}|\rho(t)\rangle\rangle \end{aligned} \tag{2.29}$$

と書くことができる。ここで $\check{H}$ は H の中身を $a \to \check{a},\ a^\dagger \to \check{a}^\dagger$ と形式的に書き換えた超演算子であり、$\tilde{H}$ はそのチルダ共役である。ここでハットハミルトニアン $\hat{H}$ を

$$\hat{H} \equiv \check{H} - \tilde{H} \tag{2.30}$$

と新たに定義する。すると Liouville-von Neumann 方程式は

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\rho(t)\rangle\rangle = \hat{H}|\rho(t)\rangle\rangle \tag{2.31}$$

と Schrödinger 方程式のような表式で書くことができる。

2.4 熱的真空

ここまで密度演算子の具体的な形は指定せずに議論してきたが、熱平衡系の密度演算子 ρ_0 を選ぶとその構造を用いて $|\rho_0\rangle\rangle$ を真空とするFock 空間を構成することができる。ここでは説明を簡単にするために単一モードの場合を扱う。複数モードの場合には容易に拡張できる。

逆温度 β の平衡系の場合、密度演算子 ρ_0 は

$$\rho_0 = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \qquad Z = \mathrm{tr}\big[e^{-\beta H}\big], \qquad H = \omega a^\dagger a \tag{2.32}$$

で与えられる。完全系 (2.7) を用いると、

$$|\rho_0\rangle\rangle = \sum_{m,n}|m,n\rangle\rangle\langle\langle m,n|\rho_0\rangle\rangle = (1-f)\sum_m f^m|m,m\rangle\rangle \tag{2.33}$$

となる。 ここで f は Boltzmann 因子 $f = e^{-\beta\omega}$ である。表記を簡単にするため 2 重項表記 [15]

$$O^{\mu} = \begin{pmatrix} \check{O} \\ \tilde{O}^{\dagger} \end{pmatrix}^{\mu}, \qquad \bar{O}^{\nu} = \begin{pmatrix} \check{O}^{\dagger} & -\tilde{O} \end{pmatrix}^{\nu} \tag{2.34}$$

を導入する。更に新たな超演算子 $\xi^{\mu}, \bar{\xi}^{\nu}$ を熱的 Bogoliubov 変換 [8,16]

$$\xi^{\mu} = B_n^{\mu\nu} a^{\nu}, \qquad \bar{\xi}^{\nu} = \bar{a}^{\mu} B_n^{-1,\mu\nu} \tag{2.35}$$

$$B_n^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1+n & -n \\ -1 & 1 \end{pmatrix}^{\mu\nu}, \qquad B_n^{-1,\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & n \\ 1 & 1+n \end{pmatrix}^{\mu\nu} \qquad \left(n = \frac{f}{1-f} \right) \tag{2.36}$$

で導入する。簡便な表記のために、同じ添字 (μ や ν など) が繰り返し現れた場合には暗黙的にその添字について和を取ることを約束する。この超演算子は

$$\xi^{\mu} \left|\rho_0\right\rangle\!\rangle = 0, \qquad \langle\!\langle I \right| \bar{\xi}^{\nu} = 0 \tag{2.37}$$

$$\left[\xi^{\mu}, \bar{\xi}^{\nu}\right] = \delta_{\mu\nu}, \qquad \left[\xi^{\mu}, \xi^{\nu}\right] = \left[\bar{\xi}^{\mu}, \bar{\xi}^{\nu}\right] = 0 \tag{2.38}$$

という性質を持つので、$\langle\!\langle I| \,, |\rho_0\rangle\!\rangle$ を真空とする Fock 空間を構成することができる。これら真空を熱的真空と呼ぶ。そういった事情から、非平衡 TFD の文脈では $\langle\!\langle I| \,, |\rho_0\rangle\!\rangle$ をそれぞれ $\langle 0| \,, |0\rangle$ と書くことも多い。本論文（特に第 4 章) でも誤解のない限り $\langle 0| \,, |0\rangle$ の記述を用いる。

第 3 章

射影演算子法

本章では初めに射影演算子法の概要について説明する。そして注目系のダイナミクスを記述するtime convolution less 型 master 方程式の導出を行う。このmaster 方程式を厳密に解くのは困難であり、具体的な問題を解くには近似を用いる必要がある。そこで今回は摂動展開する手法を概観し、具体的に reservior model において計算を行った結果を示す。

3.1 射影演算子法と縮約密度演算子

量子開放系の問題を考える場合、散逸の効果をどのように取り入れるかは大きな問題である。なぜならば、通常の量子論における時間発展は、ハミルトニアンを生成子とするユニタリー変換によって記述されるからである。時間発展がユニタリー変換で記述されるならば系は時間反転対称性を備えることになり、散逸の効果は入り得ない。そこで全体系を閉じた系として通常の量子論の方法で扱い、その上で注目したい部分系のダイナミクスを射影演算子を使って引き出す方法が採られる。これが射影演算子法 [1–4] と呼ばれる方法である。このとき抽出された注目系の密度演算子を縮約密度演算子を呼ぶ。射影演算子法を使うと、最終的に注目系の縮約密度演算子で閉じた時間発展方程式を得ることができ、これを量子 master 方程式と呼ぶ。特に今回求める式は時間の畳み込み積分を含まない表式であることから time convolution less 型 master 方程式と呼ぶ [3, 4]。

ハミルトニアン H が注目系からなる部分 H_a、環境系からなる部分 H_R、注目系と環境系の相互作用からなる部分 H_{aR} の和で書けるとする。

$$H = H_a + H_R + \lambda H_{aR} \tag{3.1}$$

λ は注目系と環境系の相互作用の結合の強さを表す係数である。密度演算子 $\rho(t)$ の時間発展は Liouville-von Neumann 方程式 (2.31)

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\rho(t)\rangle\!\rangle_S = \hat{H}\,|\rho(t)\rangle\!\rangle_S \tag{3.2}$$

$$\hat{H} = \check{H} - \tilde{H} \tag{3.3}$$

に従う。添字の S は Schrödinger 描像であることを表す。ここで、

$$|\rho(t)\rangle\!\rangle_S = e^{-i\hat{H}_0 t}\,|\rho(t)\rangle\!\rangle_I \tag{3.4}$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_a + \hat{H}_R \tag{3.5}$$

の関係を用いて相互作用描像 (添字 I で表すとする) に移ると、

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\rho(t)\rangle\!\rangle_I = \lambda\hat{H}_{aR}(t)\,|\rho(t)\rangle\!\rangle_I \tag{3.6}$$

となる。両描像の一致する時刻を t_0 とする。相互作用描像で異なる時刻の $|\rho(t)\rangle\!\rangle_I$ は、

$$|\rho(t)\rangle\!\rangle_I = U(t,t_0)\,|\rho(t_0)\rangle\!\rangle_I \tag{3.7}$$

$$U(t_1,t_2) = \mathrm{T}\exp\left[-i\lambda\int_{t_2}^{t_1} ds\hat{H}_{aR}(s)\right] \tag{3.8}$$

で結ばれる。T は時間順序積を表す。以下では相互作用描像を示す添字 I を省略して表記する。

射影演算子法では次のような射影演算子 P, Q を導入する。

$$P = |\rho_R\rangle\!\rangle\langle\!\langle I_R| \tag{3.9}$$

$$Q = 1 - P \tag{3.10}$$

$$P^2 = P, \qquad Q^2 = Q \tag{3.11}$$

この $|\rho_R\rangle\!\rangle$ は環境系における熱平衡の規格化された密度演算子であるとする。また、$\langle\!\langle I_R|$ は $\langle\!\langle I_R|A\rangle\!\rangle = \mathrm{tr}_R[A]$ のように環境系の部分トレースを取る操作に対応する。したがって、P を $|\rho(t)\rangle\!\rangle$ に作用すると

$$P\,|\rho(t)\rangle\!\rangle = |\rho_R\rangle\!\rangle\,\langle\!\langle I_R|\rho(t)\rangle\!\rangle = |\rho_a(t)\rangle\!\rangle \otimes |\rho_R\rangle\!\rangle \tag{3.12}$$

のように全体系の密度演算子 $|\rho(t)\rangle\!\rangle$ から注目系の縮約密度演算子 $|\rho_a(t)\rangle\!\rangle$ を得られる。目標は $|\rho_a(t)\rangle\!\rangle$ の時間発展方程式を得ることである。そこで (3.6) と (3.11) から

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P\,|\rho(t)\rangle\!\rangle = \lambda P\hat{H}_{aR}(t)P\,|\rho(t)\rangle\!\rangle + \lambda P\hat{H}_{aR}(t)Q\,|\rho(t)\rangle\!\rangle \tag{3.13}$$

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}Q\,|\rho(t)\rangle\!\rangle = \lambda Q\hat{H}_{aR}(t)P\,|\rho(t)\rangle\!\rangle + \lambda Q\hat{H}_{aR}(t)Q\,|\rho(t)\rangle\!\rangle \tag{3.14}$$

を得る。(3.13) の第 2 項を消去するために、次のような $\mathcal{G}(t,t_0), |\rho'(t)\rangle\!\rangle$ を導入する。

$$\mathcal{G}(t,t_0) = \mathrm{T}\exp\left[-i\lambda\int_{t_0}^{t} dsQ\hat{H}_{aR}(s)Q\right] \tag{3.15}$$

$$Q\,|\rho(t)\rangle\!\rangle = \mathcal{G}(t,t_0)Q\,|\rho'(t)\rangle\!\rangle \tag{3.16}$$

すると、

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathcal{G}(t,t_0)Q\,|\rho'(t)\rangle\!\rangle\right) = \lambda Q\hat{H}_{aR}(t)Q\mathcal{G}(t,t_0)Q\,|\rho'(t)\rangle\!\rangle + \mathcal{G}(t,t_0)i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}Q\,|\rho'(t)\rangle\!\rangle \tag{3.17}$$

が得られる。一方で (3.14) から

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathcal{G}(t,t_0)Q\,|\rho'(t)\rangle\!\rangle\right) = i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}Q\,|\rho(t)\rangle\!\rangle = \lambda Q\hat{H}_{aR}(t)P\,|\rho(t)\rangle\!\rangle + \lambda Q\hat{H}_{aR}Q\,|\rho(t)\rangle\!\rangle \tag{3.18}$$

となる。(3.17) と (3.18) 比較すると、

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}Q\left|\rho'(t)\right\rangle\!\rangle = \lambda\mathcal{G}(t_0,t)Q\hat{H}_{aR}(t)P\left|\rho(t)\right\rangle\!\rangle \tag{3.19}$$

となる。上式を積分し、(3.16) を用いてさらに整理すると

$$Q\left|\rho(t)\right\rangle\!\rangle = \mathcal{G}(t,t_0)Q\left|\rho(t_0)\right\rangle\!\rangle + \mathcal{S}(t)\left|\rho(t)\right\rangle\!\rangle \tag{3.20}$$

が得られる。ただし

$$\mathcal{S}(t) = -i\lambda\int_{t_0}^{t} ds\mathcal{G}(t,s)Q\hat{H}_{aR}(s)PU(s,t) \tag{3.21}$$

である。$P+Q=1$ を用いて変形すると

$$Q\left|\rho(t)\right\rangle\!\rangle = \{1-\mathcal{S}(t)\}^{-1}\{\mathcal{G}(t,t_0)Q\left|\rho(t_0)\right\rangle\!\rangle + \mathcal{S}(t)P\left|\rho(t)\right\rangle\!\rangle\} \tag{3.22}$$

となり、これを (3.13) に代入すると

$$\begin{aligned} i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle \otimes \left|\rho_R\right\rangle\!\rangle) &= \lambda P\hat{H}_{aR}(t)\{1-\mathcal{S}(t)\}^{-1}P\left|\rho(t)\right\rangle\!\rangle + \lambda P\hat{H}_{aR}(t)\{1-\mathcal{S}(t)\}^{-1}\mathcal{G}(t,t_0)Q\left|\rho(t)\right\rangle\!\rangle \\ &= i\hat{\mathcal{K}}(t)\left(\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle \otimes \left|\rho_R\right\rangle\!\rangle\right) + i\left|\mathcal{I}(t)\right\rangle\!\rangle \otimes \left|\rho_R\right\rangle\!\rangle \end{aligned} \tag{3.23}$$

$$\hat{\mathcal{K}}(t) \equiv -i\left\langle\!\langle I_R\right|\lambda\hat{H}_{aR}(t)\{1-\mathcal{S}(t)\}^{-1}\left|\rho_R\right\rangle\!\rangle \tag{3.24}$$

$$\left|\mathcal{I}(t)\right\rangle\!\rangle \equiv -i\left\langle\!\langle I_R\right|\lambda\hat{H}_{aR}(t)\{1-\mathcal{S}(t)\}^{-1}\mathcal{G}(t,t_0)Q\left|\rho(t_0)\right\rangle\!\rangle \tag{3.25}$$

となる。ここで

$$Q\left|\rho(t_0)\right\rangle\!\rangle = (1-P)\left|\rho(t_0)\right\rangle\!\rangle = \left|\rho(t_0)\right\rangle\!\rangle - \left|\rho_a(t_0)\right\rangle\!\rangle \otimes \left|\rho_R\right\rangle\!\rangle \tag{3.26}$$

であるが時刻 $t=t_0$ で注目系と熱浴間の相関が無いと仮定すると

$$\left|\rho(t_0)\right\rangle\!\rangle = \left|\rho_a(t_0)\right\rangle\!\rangle \otimes \left|\rho_R\right\rangle\!\rangle \tag{3.27}$$

と書くことができるので $Q\left|\rho(t_0)\right\rangle\!\rangle = 0$ となる。従って $\left|\mathcal{I}(t)\right\rangle\!\rangle = 0$ となり、$\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle$ の時間発展は

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle = i\hat{\mathcal{K}}(t)\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle \tag{3.28}$$

となる。Schrödinger 描像では、

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle_S = \left\{\hat{H}_0 + i\hat{\mathcal{K}}_S(t)\right\}\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle_S \tag{3.29}$$

$$\hat{\mathcal{K}}_S(t) = e^{-i\hat{H}_0 t}\hat{\mathcal{K}}(t)e^{i\hat{H}_0 t} \tag{3.30}$$

となる。このように、非摂動ハミルトニアンに $i\hat{\mathcal{K}}$ という項が加わって相互作用の影響を取り入れる形式になっている。有効ハミルトニアンを $\hat{H}_{e,S}(t) = \hat{H}_0 + i\hat{\mathcal{K}}_S(t)$ で定義すると、$\left|\rho_S(t)\right\rangle\!\rangle_S$ の時間発展方程式は

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle_S = \hat{H}_{e,S}(t)\left|\rho_a(t)\right\rangle\!\rangle_S \tag{3.31}$$

のように書ける。

3.2 摂動展開

$\hat{\mathcal{K}}(t)$ をそのまま評価するのは困難なので、λ が十分小さいとして摂動展開することを考える。$\hat{\mathcal{K}}(t)$ を λ の次数ごとに展開すると

$$\hat{\mathcal{K}}(t) = -i\sum_{n=0}^{\infty} \langle\langle I_R|\, \lambda \hat{H}_{aR}(t) \left\{\mathcal{S}(t)\right\}^n |\rho_R(t_0)\rangle\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}(-i\lambda)^n \hat{\mathcal{K}}^{(n)}(t) \tag{3.32}$$

となる。$\hat{\mathcal{K}}(t)$ を λ で展開した時の n 次の項を $\hat{\mathcal{K}}^{(n)}(t)$ とした。同様に $\mathcal{S}(t)$ を展開する。

$$\mathcal{S}(t) = \sum_{n=0}^{\infty}(-i\lambda)^n \mathcal{S}^{(n)}(t) \tag{3.33}$$

$\mathcal{S}^{(n)}(t)$ を具体的に求めると

$$\mathcal{S}^{(1)}(t) = \int_{t_0}^{t} ds Q\hat{H}_{aR}(s)P \tag{3.34}$$

$$\mathcal{S}^{(2)}(t) = \int_{t_0}^{t} ds \int_{s}^{t} ds' Q\hat{H}_{aR}(s')Q\hat{H}_{aR}(s)P + \int_{t_0}^{t} ds \int_{s}^{t} ds' Q\hat{H}_{aR}(s)P\hat{H}_{aR}(s') \tag{3.35}$$

$\hat{\mathcal{K}}^{(n)}(t)$ を具体的に求めると

$$\hat{\mathcal{K}}^{(1)}(t) = \langle\langle I_R|\, \hat{H}_{aR}(t)\, |\rho_R(t_0)\rangle\rangle \tag{3.36}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{K}}^{(2)}(t) &= \langle\langle I_R|\, \hat{H}_{aR}(t)\mathcal{S}^{(1)}(t)\, |\rho_R(t_0)\rangle\rangle \\
&= \int_{t_0}^{t} ds\, \langle\langle I_R|\hat{H}_{aR}(t)Q\hat{H}_{aR}(s)P|\rho_R(t_0)\rangle\rangle \\
&= \int_{t_0}^{t} ds\, \langle\langle I_R|\hat{H}_{aR}(t)\hat{H}_{aR}(s)|\rho_R(t_0)\rangle\rangle \\
&\quad - \langle\langle I_R|\hat{H}_{aR}(t)|\rho_R(t_0)\rangle\rangle \int_{t_0}^{t} ds\, \langle\langle I_R|\hat{H}_{aR}(s)|\rho_R(t_0)\rangle\rangle
\end{aligned} \tag{3.37}$$

$$\hat{\mathcal{K}}^{(3)}(t) = \langle\langle I_R|\, \hat{H}_{aR}(t) \left[\left\{\mathcal{S}^{(1)}(t)\right\}^2 + \mathcal{S}^{(2)}(t)\right] |\rho_R(t_0)\rangle\rangle \tag{3.38}$$

$$\vdots$$

と表される。λ が十分小さいとして $\mathcal{O}(\lambda^2)$ までを残して後は落とすと

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{K}}(t) = -i\lambda\, \langle\langle I_R|\, \hat{H}_{aR}(t)\, |\rho_R(t_0)\rangle\rangle - \lambda^2 \int_{t_0}^{t} dt'\, \langle\langle I_R|\, \hat{H}_{aR}(t)\hat{H}_{aR}(t')\, |\rho_R(t_0)\rangle\rangle& \\
- \lambda^2\, \langle\langle I_R|\, \hat{H}_{aR}(t)\, |\rho_R(t_0)\rangle\rangle \int_{t_0}^{t} ds\, \langle\langle I_R|\, \hat{H}_{aR}(s)\, |\rho_R(t_0)\rangle\rangle&
\end{aligned} \tag{3.39}$$

となる。

3.3 Reservior model での解析

Reservior model は量子開放系のシンプルなモデルであり、ハミルトニアンは

$$H = \omega a^\dagger a + \sum_k \Omega_k R_k^\dagger R_k + \sum_k \lambda(R_k^\dagger a + a^\dagger R_k) \tag{3.40}$$

で与えられる [17–19]。単一モードの注目系 a と熱浴 R_k が結合定数 λ で相互作用している系であり、相互作用の過程においても熱浴は熱平衡状態にあるとする。また k は熱浴内部の準位である。ハットハミルトニアンは、

$$\hat{H} = H - \tilde{H} = \omega \bar{a}^\mu a^\mu + \sum_k \Omega_k \bar{R}_k^\mu R_k^\mu + \sum_k \lambda(\bar{R}_k^\mu a^\mu + \bar{a}^\mu R_k^\mu) \tag{3.41}$$

である。ここではハットハミルトニアンの非摂動部、摂動部として、

$$\hat{H}_a = \omega \bar{a}^\mu a^\mu, \qquad \hat{H}_R = \sum_k \Omega_k \bar{R}_k^\mu R_k^\mu, \qquad \hat{H}_{aR} = \sum_k \lambda(\bar{R}_k^\mu a^\mu + \bar{a}^\mu R_k^\mu) \tag{3.42}$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_a + \hat{H}_R \tag{3.43}$$

ととる。

この具体的な $\hat{H}_{aR}$ の定義を用いて (3.39) を計算する。まず a, R_k に熱的 Bogoliubov 変換 (2.35) を行い、熱的真空に対する生成消滅演算子 ξ, Ξ_k を定義する。

$$\xi^\mu = B_{n(t)}^{\mu\nu} a^\nu, \qquad \bar{\xi}^\nu = \bar{a}^\mu B_{n(t)}^{-1,\mu\nu} \tag{3.44}$$

$$\Xi_k^\mu = B_{N_k}^{\mu\nu} R_k^\nu, \qquad \bar{\Xi}_k^\nu = \bar{R}_k^\mu B_{N_k}^{-1,\mu\nu} \tag{3.45}$$

このとき a 側の Bogoliubov 変換のパラメータである粒子数 $n(t)$ は

$$n(t) \equiv \langle\!\langle I | a^\dagger(t) a(t) | \rho \rangle\!\rangle \tag{3.46}$$

で定義されていて、時間に依存している。一方で R 側の Bogoliubov 変換のパラメータである粒子数 N_k は

$$N_k \equiv \langle\!\langle I_R | R_k^\dagger(t) R_k(t) | \rho_R \rangle\!\rangle \tag{3.47}$$

で定義され、時間に依存せず Bose-Einstein 分布に従っている仮定する。$\hat{H}_{aR}$ の具体的な定義から $\hat{H}_{aR}$ をひとつしか含まない

$$\langle\!\langle I_R | \, \hat{H}_{aR}(t) \, | \rho_R \rangle\!\rangle \tag{3.48}$$

はすべて 0 となるので、結局

$$i\hat{\mathcal{K}}(t) = -i\lambda^2 \int_{t_0}^{t} ds \, \langle\!\langle I_R | \, \hat{H}_{aR}(t) \hat{H}_{aR}(s) \, | \rho_R \rangle\!\rangle \tag{3.49}$$

を計算すればよい。(3.42) を代入すると

$$
\begin{aligned}
i\hat{\mathcal{K}}(t) = -i\lambda^2 \sum_k \int_{t_0}^{t} ds \big(a(t) - \tilde{a}^\dagger(t)\big)\Big\{\langle\!\langle I_R|\, R_k^\dagger(t) R_k(s)\,|\rho_R\rangle\!\rangle\, a^\dagger(s) - \langle\!\langle I_R|\, \tilde{R}_k(t)\tilde{R}_k^\dagger(s)\,|\rho_R\rangle\!\rangle\, \tilde{a}(s)\Big\} \\
+ \big(a^\dagger(t) - \tilde{a}(t)\big)\Big\{\langle\!\langle I_R|\, R_k(t) R_k^\dagger(s)\,|\rho_R\rangle\!\rangle\, a(s) - \langle\!\langle I_R|\, \tilde{R}_k^\dagger(t)\tilde{R}_k(s)\,|\rho_R\rangle\!\rangle\, \tilde{a}^\dagger(s)\Big\} \quad (3.50)
\end{aligned}
$$

ここで、

$$
\langle\!\langle I_R|\, R_k^\dagger(t) R_k(t')\,|\rho_R\rangle\!\rangle = N_k e^{-i\Omega_k(t-t')} \quad (3.51)
$$

$$
\langle\!\langle I_R|\, R_k(t) R_k^\dagger(t')\,|\rho_R\rangle\!\rangle = (1+N_k) e^{-i\Omega_k(t-t')} \quad (3.52)
$$

であることと、

$$
a(t') = a(t) e^{-i\omega(t-t')} \quad (3.53)
$$

の関係を用いて a の時刻を t に揃えると、

$$
\begin{aligned}
i\hat{\mathcal{K}}(t) = -\sum_k \Big[F_k^*(t)\big(a(t) - \tilde{a}^\dagger(t)\big)\big\{N_k a^\dagger(t) - (N_k+1)\tilde{a}(t)\big\} \\
+ F_k(t)\big(a^\dagger(t) - \tilde{a}(t)\big)\big\{(N_k+1)a(t) - N_k \tilde{a}^\dagger(t)\big\}\Big] \quad (3.54)
\end{aligned}
$$

ここで (3.44) の関係を用いて ξ で書き直すと

$$
i\hat{\mathcal{K}}(t) = \sum_k F_k(t)\xi^\dagger(t)\xi(t) - \sum_k F_k^*(t)\tilde{\xi}^\dagger(t)\tilde{\xi}(t) + \sum_k (F_k(t) - F_k^*(t))(n(t) - N_k)\xi^\dagger(t)\tilde{\xi}^\dagger(t) \quad (3.55)
$$

$$
F_k(t) = -ig^2 \int_{t_0}^{t} ds\, e^{i(\omega-\Omega_k)(t-s)} \quad (3.56)
$$

となる。Schrödinger 描像では

$$
\begin{aligned}
i\hat{\mathcal{K}}_S(t) &= ie^{-i\hat{H}_0 t}\hat{\mathcal{K}}(t)e^{i\hat{H}_0 t} && (3.57)\\
&= \sum_k F_k(t)\xi^\dagger\xi - \sum_k F_k^*(t)\tilde{\xi}^\dagger\tilde{\xi} + \sum_k (F_k(t) - F_k^*(t))(n(t) - N_k)\xi^\dagger\tilde{\xi}^\dagger && (3.58)
\end{aligned}
$$

と表される。したがって、縮約密度演算子に対する有効ハミルトニアン $\hat{H}_{e,S}(t)$ は

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{e,S}(t) &= \hat{H}_0 + i\hat{\mathcal{K}}_S(t) && (3.59)\\
&= \{\omega + \sum_k F_k(t)\}\xi^\dagger\xi - \{\omega + \sum_k F_k^*(t)\}\tilde{\xi}^\dagger\tilde{\xi} + 2i\mathrm{Im}\sum_k F_k(t)\{n(t) - N_k\}\xi^\dagger\tilde{\xi}^\dagger + \hat{H}_{R,S} && (3.60)
\end{aligned}
$$

と求まった。

第 4 章

非平衡 Thermo Field Dynamics による reservior model の解析

非平衡 Thermo Field Dynamics [8] は平衡系に対する場の量子論の一形式である Thermo Field Dynamics [16] を非平衡系に拡張したものである。TFD は粒子分布 n に依存した Bogoliubov 変換を用いた形式で、その粒子分布が時間依存するように拡張すると非平衡 TFD となる。その時間依存性はカウンター項の未知関数 $\dot{n}(t)$ として現れる。非平衡 TFD には Feynman ダイアグラム法を用いた体系的な摂動計算が実行できるという利点があり、on-shell 自己エネルギーを定義できる。カウンター項と共に導入される $\dot{n}(t)$ などの未知関数は on-shell 自己エネルギーに対するくりこみによって決定される。本章では、初めにカウンター項を導入したのち、更に摂動計算により自己エネルギーを求める。そして、非平衡系での on-shell 自己エネルギーを定義してくりこみ条件を課す。そうして得られるくりこまれた非摂動ハミルトニアンと射影演算子法とを比較し、更にくりこみ条件の選び方の影響がどのように現れるかについて述べる。

4.1 ハミルトニアンと時間発展方程式

本章では reservoir model(第 3.3 節を参照) を非平衡 TFD で解析する。非平衡 TFD では $\hat{H}$ を非摂動部 $\hat{H}_U$ と摂動部[*1] $\hat{H}_I$ に

$$\hat{H} = \hat{H}_U + \hat{H}_I \tag{4.1}$$

$$\hat{H}_U = \hat{H}_a + \hat{H}_R + \delta\hat{H} - \hat{Q} \tag{4.2}$$

$$\hat{H}_I = \hat{H}_{aR} - \delta\hat{H} + \hat{Q} \tag{4.3}$$

[*1] 前章で用いた相互作用描像を表す添字 I とは異なるので注意

のようにカウンター項 $\delta\hat{H}, \hat{Q}$ を導入する [11]。$\delta\hat{H}$ はエネルギーカウンター項で

$$\delta\hat{H} = \delta\hat{H}_R + i\delta\hat{H}_I \tag{4.4}$$

$$\delta\hat{H}_R(t) = \delta\omega(t)\bar{a}^\mu a^\mu = \delta\omega(t)\bar{\xi}^\mu\xi^\mu \tag{4.5}$$

$$\delta\hat{H}_I(t) = -\gamma(t)\epsilon^\mu\bar{\xi}^\mu\xi^\mu \tag{4.6}$$

とする。ϵ^μ は $\epsilon^1 = 1, \quad \epsilon^2 = -1$ である。$\hat{Q}$ は熱的 Bogoliubov 変換のパラメータである粒子数 n が時間に依存することによって現れるカウンター項であり

$$\hat{Q} = i\dot{n}\bar{a}^\mu \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}^{\mu\nu} a^\nu = i\dot{n}\bar{\xi}^\mu \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^{\mu\nu} \xi^\nu \tag{4.7}$$

で与えられる。このように熱的カウンター項 $\hat{Q}$ を含めると ξ の時間発展演算子を ξ について対角的にとることになり、粒子数 n が時間発展する場合においても $\xi(t)$ に対する安定した真空 $|0\rangle$ を定義することができる。これらのカウンター項に含まれる $\dot{n}(t), \omega(t), \gamma(t)$ はこの段階では未知の関数であり、後に説明するくりこみ条件によって決定される。

相互作用描像での $a^\mu(t)$ の時間発展方程式は

$$\begin{aligned} i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a^\mu(t) &= \left[a^\mu(t), \hat{H}_U\right] \\ &= \left[a^\mu(t), \hat{H}_a + \delta\hat{H}_R + i\delta\hat{H}_I - \hat{Q}\right] \end{aligned} \tag{4.8}$$

となり、ここから熱的 Bogoliubov 変換

$$\xi^\mu = B_n^{\mu\nu} a^\nu, \qquad \bar{\xi}^\nu = \bar{a}^\mu B_n^{-1,\mu\nu} \tag{4.9}$$

$$B_{n(t)}^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1+n(t) & -n(t) \\ -1 & 1 \end{pmatrix}^{\mu\nu}, \qquad B_{n(t)}^{-1,\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & n(t) \\ 1 & 1+n(t) \end{pmatrix}^{\mu\nu} \tag{4.10}$$

を通じて定義される $\xi(t)$ の時間発展方程式を求めると

$$\begin{aligned} i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\xi^\mu(t) &= \left[\xi^\mu(t), \hat{H}_a + \delta\hat{H}_R + i\delta\hat{H}_I\right] \\ &= (\omega + \delta\omega - i\epsilon^\mu\gamma)\,\xi^\mu(t) \end{aligned} \tag{4.11}$$

を得る。$n(t)$ の時間依存性によって $a^\mu(t)$ と $\xi^\mu(t)$ の時間発展演算子が $\hat{Q}$ だけ異なっていることに注意。(4.11) を形式的に解くことで $\xi^\mu(t)$ の時間発展方程式は

$$\xi^\mu(t) = \xi^\mu e^{-i\int^t ds\{\omega+\delta\omega(s)-i\epsilon^\mu\gamma(s)\}} \tag{4.12}$$

$$\bar{\xi}^\mu(t) = \bar{\xi}^\mu e^{i\int^t ds\{\omega+\delta\omega(s)+i\epsilon^\mu\gamma(s)\}} \tag{4.13}$$

と求まる。したがって任意の時刻 t において

$$\xi^\mu(t)\,|0\rangle = 0 \tag{4.14}$$

$$\langle 0|\,\bar{\xi}^\nu(t) = 0 \tag{4.15}$$

$$\left[\xi^\mu(t), \bar{\xi}^\nu(t)\right] = \delta_{\mu\nu} \tag{4.16}$$

$$[\xi^\mu(t), \xi^\nu(t)] = \left[\bar{\xi}^\mu(t), \bar{\xi}^\nu(t)\right] = 0 \tag{4.17}$$

を成立するため、粒子数 $n(t)$ が時間依存するような状況においても ξ 粒子を準粒子とする描象を定義することができる。

4.2 伝搬関数と自己エネルギー

a, R 演算子の全伝搬関数と非摂動伝搬関数

$$G^{\mu\nu}(t_1,t_2) = -i \langle 0| \mathrm{T} \left[a^{\mu}_{H}(t_1)\bar{a}^{\nu}_{H}(t_2)\right] |0\rangle \tag{4.18}$$
$$\Delta^{\mu\nu}(t_1,t_2) = -i \langle 0| \mathrm{T} \left[a^{\mu}(t_1)\bar{a}^{\nu}(t_2)\right] |0\rangle \tag{4.19}$$
$$G^{\mu\nu}_{R}(k_1,t_1;k_2,t_2) = -i \langle 0| \mathrm{T} \left[R^{\mu}_{k_1,H}(t_1)\bar{R}^{\nu}_{k_2,H}(t_2)\right] |0\rangle \tag{4.20}$$
$$\Delta^{\mu\nu}_{R}(k_1,t_1;k_2,t_2) = -i \langle 0| \mathrm{T} \left[R^{\mu}_{k_1}(t_1)\bar{R}^{\nu}_{k_2}(t_2)\right] |0\rangle \tag{4.21}$$

および ξ, Ξ 演算子の全伝搬関数と非摂動伝搬関数

$$g^{\mu\nu}(t_1,t_2) = -i \langle 0| \mathrm{T} \left[\xi^{\mu}_{H}(t_1)\bar{\xi}^{\nu}_{H}(t_2)\right] |0\rangle \tag{4.22}$$
$$d^{\mu\nu}(t_1,t_2) = -i \langle 0| \mathrm{T} \left[\xi^{\mu}(t_1)\bar{\xi}^{\nu}(t_2)\right] |0\rangle \tag{4.23}$$
$$g^{\mu\nu}_{\Xi}(k_1,t_1;k_2,t_2) = -i \langle 0| \mathrm{T} \left[\Xi^{\mu}_{k_1,H}(t_1)\bar{\Xi}^{\nu}_{k_2,H}(t_2)\right] |0\rangle \tag{4.24}$$
$$d^{\mu\nu}_{\Xi}(k_1,t_1;k_2,t_2) = -i \langle 0| \mathrm{T} \left[\Xi^{\mu}_{k_1}(t_1)\bar{\Xi}^{\nu}_{k_2}(t_2)\right] |0\rangle \tag{4.25}$$

を上のように定義する。ただし添字の H は Heisenberg 描像を表す。Dyson 方程式

$$G^{\mu\nu}(t_1,t_2) = \Delta^{\mu\nu}(t_1,t_2) + \int ds_1 ds_2 \Delta^{\mu\mu'}(t_1,s_1)\Sigma^{\mu'\nu'}(s_1,s_2)G^{\nu'\nu}(s_2,t_2) \tag{4.26}$$
$$g^{\mu\nu}(t_1,t_2) = d^{\mu\nu}(t_1,t_2) + \int ds_1 ds_2 d^{\mu\mu'}(t_1,s_1)S^{\mu'\nu'}(s_1,s_2)g^{\nu'\nu}(s_2,t_2) \tag{4.27}$$

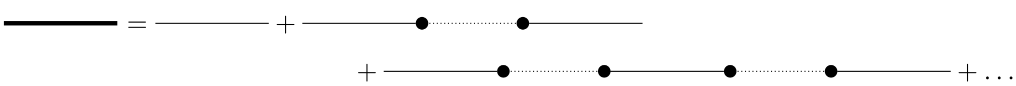
より、自己エネルギー $\Sigma^{\mu\nu}(t_1,t_2), S^{\mu\nu}(t_1,t_2)$ を定める。$\Sigma^{\mu\nu}(t_1,t_2)$ と $S^{\mu\nu}(t_1,t_2)$ の間には熱的 Bogoliubov 変換 (4.10) を通じて

$$S^{\mu\nu}(t_1,t_2) = B^{\mu\mu'}_{n(t)}\Sigma^{\mu'\nu'}(t_1,t_2)B^{-1,\nu'\nu}_{n(t)} \tag{4.28}$$

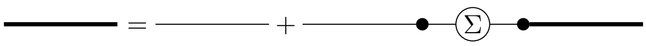
の関係が成立する。また Feynman ダイアグラム法のための記法を以下ように定義しておく。

$G =$, $\Delta =$, $\Delta_R =$ (4.29)

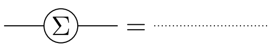
Feynman ダイアグラム法で全伝搬関数 G を展開すると

 (4.30)

となる。一方で Dyson 方程式

 (4.31)

とを比較すると、自己エネルギー Σ は

 (4.32)

となる。これはすべての次数を取り入れた厳密な自己エネルギーとなっていることがわかる。摂動ハミルトニアン中の項 $\hat{H}_{aR}$ の自己エネルギーへの寄与は

$$\Sigma^{\hat{H}_{aR},\mu\nu}(t_1,t_2) = \lambda^2 \sum_{k_1 k_2} \Delta_R^{\mu\nu}(k_1,t_1;k_2,t_2)$$
$$= -i\lambda^2 \sum_k e^{-i\Omega_k(t_1-t_2)} \left[\theta(t_1-t_2)\begin{Bmatrix}1\\1\end{Bmatrix}^\mu \begin{Bmatrix}1+N_k\\-N_k\end{Bmatrix}^\nu + \theta(t_2-t_1)\begin{Bmatrix}N_k\\1+N_k\end{Bmatrix}^\mu \begin{Bmatrix}1\\-1\end{Bmatrix}^\nu\right] \tag{4.33}$$

となる。更に Bogoliubov 変換によって $S^{\mu\nu}$ を求めると

$$S^{\hat{H}_{aR},\mu\nu}(t_1,t_2) = -i\lambda^2 \sum_k e^{-i\Omega_k(t_1-t_2)}$$
$$\times \left[\theta(t_1-t_2)\begin{Bmatrix}1\\0\end{Bmatrix}^\mu \begin{Bmatrix}1\\n(t_2)-N_k\end{Bmatrix}^\nu + \theta(t_2-t_1)\begin{Bmatrix}N_k-n(t_1)\\1\end{Bmatrix}^\mu \begin{Bmatrix}0\\-1\end{Bmatrix}^\nu\right]$$

となる。他にもカウンター項からの自己エネルギーへの寄与があり、以下のようになる。

$$S^{-\delta\hat{H},\mu\nu}(t_1,t_2) = \delta(t_1-t_2)\delta_{\mu\nu}[-\delta\omega(t_1) + i\epsilon^\mu\gamma(t_1)] \tag{4.34}$$

$$S^{\hat{Q},\mu\nu}(t_1,t_2) = -i\delta(t_1-t_2)\dot{n}(t_1)\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}^{\mu\nu} \tag{4.35}$$

4.3 On-shell 自己エネルギーとくりこみ条件

非平衡 TFD ではカウンター項に含まれる未知関数 $\dot{n}(t), \omega(t), \gamma(t)$ を決定するために、on-shell 自己エネルギーに対するくりこみ条件を課す [11, 13]。そのためにまずは自己エネルギーにおける on-shell の定義を行う。

平衡系の場合、自己エネルギーは 2 時刻の差で書けるため自己エネルギーの k_0 表現を Fourier 変換を通じて

$$S^{\mu\nu}[k_0] = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau S^{\mu\nu}(\tau) e^{ik_0\tau} \tag{4.36}$$

のようにとる。on-shell は k_0 は非摂動伝搬関数 $d(t)$ の k_0 表現 $d[k_0]$ の極 $k_0 = \omega$ によって定める。したがって、平衡系での on-shell 自己エネルギーは

$$S^{\mu\nu}[\omega] = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau S^{\mu\nu}(\tau) e^{i\omega\tau} \tag{4.37}$$

となる。

一方で非平衡系の場合は自己エネルギーが 2 時刻の差でまとまらないため k_0 表現そのものが自明ではない。ここでは因果律を守るように非平衡に拡張した k_0 表現 [13] を採用し

$$S^{\mu\nu}[t,k_0] = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left[\theta(\tau)S^{\mu\nu}(t,t-\tau)e^{i\int_{t-\tau}^{t} ds\{k_0(s)\}}\right.$$
$$\left. +\theta(-\tau)S^{\mu\nu}(t+\tau,t)\, e^{i\int_t^{t+\tau} ds\{k_0(s)\}}\right] \tag{4.38}$$

とする。非平衡においても平衡系に倣って非摂動伝搬関数 $d(t_1,t_2)$ の k_0 表現 $d[t,k_0]$ を発散させる $k_0(t)=\omega+\delta\omega(t)+i\gamma(t)$ を on-shell として定めると、on-shell 自己エネルギーは

$$\begin{aligned}\mathsf{S}^{\mu\nu}(t) &= S^{\mu\nu}[t,\omega+\delta\omega(t)+i\gamma(t)]\\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \Big[\, \theta(\tau)S^{\mu\nu}(t,t-\tau)e^{i\int_{t-\tau}^{t} ds\{\omega+\delta\omega(s)+i\gamma(s)\}}\\ &\qquad + \theta(-\tau)S^{\mu\nu}(t+\tau,t)\, e^{i\int_{t}^{t+\tau} ds\{\omega+\delta\omega(s)-i\gamma(s)\}}\Big]\end{aligned} \tag{4.39}$$

となる。On-shell 自己エネルギーを具体的に求めると

$$\begin{aligned}\mathsf{S}^{\hat{H}_{aR},\mu\nu}(t) &= \begin{pmatrix}\sum_k J_k(t) & 2i\,\mathrm{Im}\sum_k J_k(t)\{n(t)-N_k\}\\ 0 & \sum_k J_k^*(t)\end{pmatrix}^{\mu\nu}\\ J_k(t) &= -i\lambda^2\int_{t_0}^{t} ds\, e^{i\int_s^t d\tau\{\omega+\delta\omega(\tau)+i\gamma(\tau)-\Omega_k\}}\\ \mathsf{S}^{-\delta\hat{H},\mu\nu}(t) &= \begin{pmatrix}-\delta\omega(t)+i\gamma(t) & 0\\ 0 & -\delta\omega(t)-i\gamma(t)\end{pmatrix}^{\mu\nu}\\ \mathsf{S}^{\hat{Q},\mu\nu}(t) &= \begin{pmatrix}0 & -i\dot{n}(t)\\ 0 & 0\end{pmatrix}^{\mu\nu}\end{aligned} \tag{4.40}$$

となる。

くりこみ条件として on-shell 自己エネルギー $\mathsf{S}^{\mu\nu}(t)$ に対して

$$\begin{aligned}\mathsf{S}^{12}(t) &= 0\\ \mathrm{Re}\,\mathsf{S}^{11}(t) &= 0\\ \mathrm{Im}\,\mathsf{S}^{11}(t) &= 0\end{aligned} \tag{4.41}$$

を課す [11, 13]。すると未知関数 $\dot{n}(t),\omega(t),\gamma(t)$ が

$$\dot{n}(t) = 2\,\mathrm{Im}\sum_k J_k(t)\{n(t)-N_k\} \tag{4.42}$$

$$\delta\omega(t) = \mathrm{Re}\sum_k J_k(t) \tag{4.43}$$

$$\gamma(t) = -\,\mathrm{Im}\sum_k J_k(t) \tag{4.44}$$

のように求まる。したがって非摂動ハミルトニアン $\hat{H}_U(t)$ は

$$\begin{aligned}\hat{H}_u(t) &= \{\omega+\sum_k J_k(t)\}\xi^\dagger\xi - \{\omega+\sum_k J_k^*(t)\}\tilde{\xi}^\dagger\tilde{\xi}\\ &\quad + 2i\mathrm{Im}\sum_k J_k(t)\{n(t)-N_k\}\xi^\dagger\tilde{\xi}^\dagger + \hat{H}_R\end{aligned} \tag{4.45}$$

に定まる。

$\delta\omega(t)$ や $\gamma(t)$ が小さいとして on-shell の時間依存性を無視した場合は、単純に ω を on-shell とみなすことになる。このときの on-shell 自己エネルギーは

$$\mathsf{S}^{\mu\nu}(t) = S^{\mu\nu}[t,\omega] = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\,\big[\,\theta(\tau)S^{\mu\nu}(t,t-\tau)e^{i\omega\tau} + \theta(-\tau)S^{\mu\nu}(t+\tau,t)\, e^{i\omega\tau}\big] \tag{4.46}$$

《修士論文》 物性研究・電子版 Vol. 4, No. 2, 042601（2015年5月号）

となる。この定義のもとで on-shell 自己エネルギーを具体的な形は

$$
\begin{aligned}
\mathsf{S}^{\hat{H}_{aR},\mu\nu}(t) &= \begin{pmatrix} \sum_k F_k(t) & 2i\,\mathrm{Im}\sum_k F_k(t)\{n(t)-N_k\} \\ 0 & \sum_k F_k^*(t) \end{pmatrix}^{\mu\nu} \\
F_k(t) &= -i\lambda^2 \int_{t_0}^{t} ds\, e^{i(\omega-\Omega_k)(t-s)} \\
\mathsf{S}^{-\delta\hat{H},\mu\nu}(t) &= \begin{pmatrix} -\delta\omega(t)+i\gamma(t) & 0 \\ 0 & -\delta\omega(t)-i\gamma(t) \end{pmatrix}^{\mu\nu} \\
\mathsf{S}^{\hat{Q},\mu\nu}(t) &= \begin{pmatrix} 0 & -i\dot{n}(t) \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^{\mu\nu}
\end{aligned}
\tag{4.47}
$$

となる。(4.40) と比較すると、$\mathsf{S}^{\hat{H}_{aR},\mu\nu}(t)$ に含まれる積分 $J_k(t), F_k(t)$ のみが異なっていることがわかる。先と同様のくりこみ条件 (4.41) を課して、非摂動ハミルトニアンを求めると

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_u(t) = \{\omega + \sum_k F_k(t)\}\xi^\dagger\xi - \{\omega + \sum_k F_k^*(t)\}\tilde{\xi}^\dagger\tilde{\xi} \\
+ 2i\mathrm{Im}\sum_k F_k(t)\{n(t)-N_k\}\xi^\dagger\tilde{\xi}^\dagger + \hat{H}_R
\end{aligned}
\tag{4.48}
$$

となる。

4.4 射影演算子法との比較

前節で on-shell の時間依存性を無視して求めた (4.48) は、射影演算子法で求めた縮約密度演算子に対する有効ハミルトニアン (3.59) と同じ形をとることがわかる。そこで非平衡 TFD と射影演算子法のそれぞれの方法で物理量 A の期待値を求め、両者を比較する。

非平衡 TFD で物理量 A の期待値は、

$$
\langle A\rangle_{\mathrm{TFD}} = {}_H\langle\!\langle 1|\, A_H(t)\, |\rho\rangle\!\rangle_H = {}_H\langle\!\langle 1|\, A_I(t)\ \mathrm{T}\exp\left[-i\int dsH_I(s)\right] |\rho\rangle\!\rangle_H \tag{4.49}
$$

となる。そこで、摂動の 0 次を求めると、

$$
\begin{aligned}
\langle A\rangle_{\mathrm{TFD},0} &= {}_H\langle\!\langle 1|\, A_I(t)\, |\rho\rangle\!\rangle_H \\
&= {}_H\langle\!\langle 1|\, e^{i\int_{-\infty}^{t} ds\hat{H}_U(s)} A_S e^{-i\int_{-\infty}^{t} ds\hat{H}_U(s)}\, |\rho\rangle\!\rangle_H \\
&= {}_H\langle\!\langle 1|\, A_S e^{-i\int_{-\infty}^{t} dsH_u(s)}\, |\rho\rangle\!\rangle_H
\end{aligned}
\tag{4.50}
$$

となる。一方で射影演算子法を用いて期待値を計算すると、

$$
\begin{aligned}
\langle A\rangle_{\mathrm{PO}} &= {}_S\langle\!\langle 1|\, A_S\, |\rho_a(t)\rangle\!\rangle_S \\
&= {}_H\langle\!\langle 1|\, A_S e^{-i\int_{-\infty}^{t} dsH_{e,S}(s)}\, |\rho_a\rangle\!\rangle_H
\end{aligned}
\tag{4.51}
$$

となる。従って、$\langle A\rangle_{\mathrm{TFD},0} = \langle A\rangle_{\mathrm{PO}}$ となる。すなわち、射影演算子法で求まる物理量の期待値は非平衡 TFD でくりこんだ後の 0 次の期待値に等しくなることが示された。

4.5 くりこみ条件の選び方による差異

前節の結果は、エネルギーカウンター項として

$$\delta\hat{H} = \delta\hat{H}_R + i\delta\hat{H}_I \tag{4.52}$$

$$\delta\hat{H}_R = \delta\omega(t)\bar{\xi}^\mu\xi^\mu \tag{4.53}$$

$$\delta\hat{H}_I = -\gamma(t)\epsilon^\mu\bar{\xi}^\mu\xi^\mu \tag{4.54}$$

を選び、くりこみ条件

$$\mathrm{Re}\,\mathsf{S}^{11}(t) = 0 \tag{4.55}$$

$$\mathrm{Im}\,\mathsf{S}^{11}(t) = 0 \tag{4.56}$$

を課した結果であった。このことによって、準粒子のくりこまれたエネルギーは複素数となる。しかし、通常の場の量子論ではハミルトニアンのエルミート性を壊してしまうため、非摂動ハミルトニアンの定義に複素数のエネルギーをとることはない。一方で非平衡 TFD における非摂動ハミルトニアンは熱的カウンター項の導入によって既に非エルミートな形式となっていて、非エルミートを前提とした議論が可能である。

ここでは非摂動ハミルトニアンに含める準粒子エネルギーを実数に限った場合に何が起こるのかを見てみる。実数に限るにはエネルギーカウンター項として

$$\delta\hat{H} = \delta\hat{H}_R = \delta\omega(t)\bar{\xi}^\mu\xi^\mu \tag{4.57}$$

と選んで、on-shell 自己エネルギーに対するくりこみ条件として

$$\mathrm{Re}\,\mathsf{S}^{11}(t) = 0 \tag{4.58}$$

と選べばよい。するとくりこまれた非摂動ハミルトニアンとして

$$\begin{aligned}\hat{H}_u(t) = \{\omega + \mathrm{Re}\sum_k F_k(t)\}\xi^\dagger\xi - \{\omega + \mathrm{Re}\sum_k F_k^*(t)\}\tilde{\xi}^\dagger\tilde{\xi} \\ + 2i\mathrm{Im}\sum_k F_k(t)\{n(t) - N_k\}\xi^\dagger\tilde{\xi}^\dagger + \hat{H}_R\end{aligned} \tag{4.59}$$

が得られる。すると右辺の第一項と第二項で準粒子エネルギーの補正として現れる $\sum_k F_k(t)$ 部からの寄与が実部に限定されていることがわかる。一方で射影演算子法で得られた有効ハミルトニアン (3.59) には実部だけでなく虚部からの寄与も含まれていているので、このくりこまれた非摂動ハミルトニアンを用いて物理量の期待値を求めたとしても、どの次数においても射影演算子法と一致することはない。準粒子エネルギーに虚数の補正を加えるのは通常の場の量子論の見方では異常な方法であるが、量子開放系を扱う射影演算子法においては自然に含まれる形式になっていることがわかった。もちろんこの結果は reservoir model に限定されたものだが、開放系に非平衡 TFD を用いる際のくりこみ条件の選び方における一つの指針になるであろうと思われる。

第 5 章

まとめ

本論文では量子開放系に対する非平衡 TFD でのくりこみ条件を調べるために、reservoir model において射影演算子法と非平衡 Thermo Field Dynamics の比較を行った。

第 2 章では超演算子形式を導入し、熱的真空が通常の密度演算子と対応することや、熱的 Bogoliubov 変換によって導入される ξ 超演算子と熱的真空によってFock 空間が構成できることを確認した。

第 3 章では射影演算子法を用いた reservoir model の解析について述べた。具体的には全体系の密度演算子から環境系の情報を消すような射影演算子法を導入し、縮約密度演算子の閉じた時間発展方程式を得られることを述べた。縮約密度演算子に対する時間発展演算子は有効ハミルトニアンと考えることができ、その有効ハミルトニアンは摂動展開によって求められることを説明した。そして具体的に reservoir model での導出を行い、縮約密度演算子に対する有効ハミルトニアンの表式を得た。

第 4 章では非平衡 TFD を用いて reservoir model の解析を行い、第 3 章で行った射影演算子法との比較を行った。非平衡 TFD では熱的カウンター項やエネルギーカウンター項を導入することで、ξ 超演算子と熱的真空によって作られるFock 空間が任意の時刻においても安定的に定義されることを見た。その上で伝搬関数を導入し、Dyson 方程式を通じて定義される自己エネルギーを計算した。そして平衡 TFD における自己エネルギーに対する on-shell くりこみに倣った非平衡 TFD での on-shell くりこみを導入し、具体的なくりこみ条件を課すことで非摂動ハミルトニアンを決定した。そこで第 3 章で求めた有効ハミルトニアンとの比較をした結果、射影演算子法で求める有効ハミルトニアンが非平衡 TFD のくりこんだ後の非摂動ハミルトニアンと同じ形をとることがわかり、非平衡 TFD での摂動の 0 次と射影演算子法での相互作用の 2 次までを含めた有効ハミルトニアンに含めた形式で物理量の期待値が一致することがわかった。更に両者の物理量の期待値が一致するくりこみ条件について考察を行い、非平衡 TFD で提案されているくりこみ条件のひとつである準粒子エネルギーの虚部を非摂動ハミルトニアンの定義に含める方法が射影演算子法において自然に達成されていることがわかった。このことから、非平衡 TFD で量子開放系を扱う場合には非摂動ハミルトニアンにエネルギーの虚部の補正を加えるようなくりこみ条件を課すことが自然であることが示唆されると結論した。

本論文では射影演算子法と非平衡 TFD の比較から両者間に類似があることを示したが、あくまで摂動の次数の範囲を限定した解析であり、高次では異なった結果になることが予想される。非平衡 TFD は Feynman 図法を用いた体系的な摂動計算が可能である一方、射影演算子法にはそのような計算が困難なために高次の直接の比較は難しい。また、今回は量子開放系に注目した解析を行ったが非平衡 TFD

自体は孤立系にも適応可能な理論であることを強調しておく。非平衡 TFD では孤立系と開放系を一貫した方法で扱うことができるため、射影演算子法が有効でない孤立系においても熱緩和を記述できる理論として期待され、冷却原子系に対する解析例も存在する [9–12]。しかし、理論的な側面では他の非平衡を記述する理論との関係がすべて明確になっているとは言えず、特に対応するものが無いような孤立系において理論としての位置づけをどのように明確にしていくかは今後の課題である。

謝辞

本研究を遂行するにあたり、多くの方々のお世話になりました。山中由也教授には熱心にご指導をいただきました。研究の内容についてだけでなく、研究に向かう心構えなど多くのことを学ばせて頂きました。中村祐介氏は、何も知らなかったにも関わらず非平衡 TFD をやりたいと言い始めた私に多くの指導をしてくださいました。桑原幸朗氏にはご自身の非平衡 TFD や量子輸送方程式の研究の経験にもとづいた多くの助言を頂きました。また、私のくだらない疑問や些細な議論にも丁寧につきあってくださり、理解を深めることができました。高橋淳一氏は広い視野から様々な情報を提供してくださり、目の前のことで視野の狭くなりがちな私にとって、とても良い刺激となりました。同期の對馬護人氏、帆足正樹氏とはゼミや研究での議論を通して知識を深めることができました。また、永井康裕氏、北原康貴氏、檜垣亮佑氏とは、開放系や量子輸送方程式に関する議論を通じて多くの知識や示唆を頂きました。お世話になった山中研究室の皆様に改めて感謝致します。

参考文献

[1] S. Nakajima, Prog. Theor. Phys. **20**, 948 (1958).
[2] R. Zwanzig, J. Chem. Phys. **33**, 1338 (1960).
[3] T. Arimitsu and H. Umezawa, Prog. Theor. Phys. **77**, 32 (1987).
[4] H. P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, 2007).
[5] J. Schwinger, J. Math. Phys. **2**, 407 (1961).
[6] L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP **20**, 1307 (1965).
[7] L. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics: Green's Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems* (W.A. Benjamin, 1962).
[8] H. Umezawa, *Advanced Field Theory: Micro, Macro, and Thermal Physics* (AIP, 1993).
[9] Y. Nakamura, T. Sunaga, M. Mine, M. Okumura, and Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) **325**, 426 (2010).
[10] Y. Nakamura and Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) **326**, 1070 (2011).
[11] Y. Nakamura, Y. Kuwahara, and Y. Yamanaka, Nonequilibrium thermo field dynamics for thermal relaxation process of confined cold atomic gas, in *JPS Conference Proceedings* Vol. 1, 2014.
[12] Y. Kuwahara, Y. Nakamura, and Y. Yamanaka, Numerical analysis of quantum transport equation for bose gas in one dimensional optical lattice, in *JPS Conference Proceedings* Vol. 1, 2014.
[13] Y. Nakamura and Y. Yamanaka, Ann. Phys. (N.Y.) **331**, 51 (2013).
[14] M. Schmutz, Z. Phys. B **30**, 97 (1978).
[15] H. Chu and H. Umezawa, Int. J. Mod. Phys. A **9**, 1703 (1994).
[16] H. Umezawa, *Thermo Field Dynamics and Condensed States* (Elsevier Science Ltd, 1982).
[17] T. Arimitsu, M. Guida, and H. Umezawa, Europhys. Lett. **3** (1987).
[18] T. Arimitsu, H. Umezawa, Y. Yamanaka, and N. Papastamatiou, Physica A **148**, 27 (1988).
[19] H. Umezawa and Y. Yamanaka, Adv. Phys. **37**, 531 (1988).