7. 以上のように，原子核においても「進化の力学」という立場は極めて重要な観点であり，集団運動の従う力学を，その分化・発生から成長・進化を通じ消滅・散逸していく動力学的機構として捉えられる状況が明確になりつつあると云えよう。しかもこのような統一的理解を可能としているのは，原子核が有限な系であるという事が重要であるように思われる。

Quantum Field Theory of Thermal Diffusion

学習院大学　江　沢　　洋
明治大学　中　村　孔　一
明星大学　渡　辺　敬　二

1. はじめに

温度が不均一な系の非可逆過程すなわち熱伝導や熱拡散の問題を場の理論に基づいて扱うことが我々の目的である。これらの非可逆過程は今まで多くの人々により論じられたが，それはmaster equationとかBoltzmann方程式によるものであり場の理論を出発点とする理論はまだ完成されていない。

系の温度の不均一さは初期条件として次のようにして導入される[1]。はじめに系は均一な温度 T_0 にあると仮定し，ある時刻 $t=-T$において温度を $\beta_0=1/kT_0 \rightarrow \beta_0+\beta_a(X)$ と変化させる。ここで $\beta_a(X)$ は場所の関数で $|\beta_a(X)| \ll \beta_0$ とする。系の化学ポテンシャル μは温度が不均一になった直後も場所によらない一定値にしておく。この初期条件を与えて系を放置したとき拡散流や熱流が時間の関数としてどのように変化するかを調べる。

ここではthermo field dynamics を温度勾配のあるボース粒子からなる系に適用することにより熱拡散の問題を考える。まず時刻 $t=-T$以前には粒子間の相互作用がないと仮定しthermal stateを構成する。時刻 $t=-T$に相互作用を入れ $t=T$に切ることにする。current を $J_\mu(x)$ とするとその平均値$\langle J_\mu(x)\rangle$は不均一な温度の系に対し0と異る値をもつ。Zubarevは一種類の粒子のみからなる系に対しては熱拡散がないことを示しているが,[2] 我々の初期条件は彼の条件とは異っており熱拡散流が実際に存在し得ることに注意しておく必要がある。

Sec. 2ではthermo field dynamicsによる$\langle J_\mu(x)\rangle$の表式を与える。相互作用表示をSec. 3に導入し，Gell-Mann Lowの方法を用いることにより$\langle J_\mu(x)\rangle$がFeynman diagramにより計算されることを示す。Sec. 4では相互作用のあるボース粒子の系に対し一体Green関数，self energy，補正されたポテンシャルのDyson方程式を導きその近似解を構成する。$\langle J_\mu(x)\rangle$ が拡散方程式を満すことをSec. 5で示す。

2. Thermo field dynamics

Thermal state $|\beta>$ ($\beta=1/kT$, Tは系の温度）はthermal vacuum $|0)\otimes|0)$に演算子を作用させることにより構成することができる：

$$|\beta>=\exp[iB(\beta)]\,|0)\otimes|0) \tag{2.1}$$

ここで$B(\beta)$はthermal doublet $\Phi(x)=\begin{pmatrix}\phi_1(x)\\ \phi_2(x)\end{pmatrix}$を用いて次式により表わされる：

$$B(\beta)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int\Phi^{\cdot}\left(X+\frac{3}{2}\right)\tau_2\Phi\left(X-\frac{3}{2}\right)\theta(\vec{\xi},\beta)\,d^3\xi\,d^3X \tag{2.2}$$

$X=(\vec{X},-T)$, $\xi=(\vec{\xi},0)$ またτ_2はPauli行列の第二成分である。θはBogoliubovの角度に対応し，そのFourier 変換$\theta(k,\beta)$は分布関数を用いて表わされる。

$$\sinh^2\theta(k,\beta)=1/(e^{\beta\omega_k}-1) \tag{2.3}$$

$\omega_k=\dfrac{k^2}{2m}-\mu$, μは系の化学ポテンシャルである。系の温度を$\beta_0\to\beta_0+\beta_a(X)$と変化させると$\theta$は

$$\theta(\xi,\beta)\to\theta(\xi,\beta+\beta_a(X))=\theta(\xi,\beta)+\frac{\partial\theta}{\partial\beta}\beta_a(X)$$

となる。(2.2)で与えられたBが変化するのでthermal state $|\beta>$は次のようになる：

$$|\beta+\beta_a>=(1-i\Gamma[\beta_a,-T])\,|\beta> \tag{2.4}$$

ここでΓは

$$\Gamma[\beta_a,-T]=\int\Phi^{\dagger}\left(X+\frac{\xi}{2},-T\right)\tau_2\Phi\left(X-\frac{\xi}{2},-T\right)g(\xi,\beta)\beta_a(X)\,d^3\xi\,d^3X \tag{2.5}$$

で与えられる。また$g=-\dfrac{\partial\theta}{\partial\beta}$である。

Thermo field dynamicsにおいてはthermal stateは自由場で構成されるので相互作用は時刻$-T$以後に入れる必要がある。ここでは$t=-T$で粒子間の相互作用を入れ$t=T$で切ることにする。Current $J_\mu(x)$の期待値を計算しその時間依存性を調べる。

3. 相互作用表示

Thermo field dynamicsでは系のHamiltonianはthermal doublet ϕ_k $(k=1,2)$で書かれる。すなわち

$$\mathcal{H}=\sum_{k=1}^{2}\varepsilon_k\int H(\phi_k(x))\,d^3x,\quad \varepsilon_k=(-1)^{k-1}. \tag{3.1}$$

相互作用表示を導入するために$\mathcal{H}$を自由Hamiltonian $\mathcal{H}_0$と相互作用Hamiltonian $\mathcal{H}'$に分離して

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}'$と書く。Heisenberg 表示の current $\mathbf{J}_\mu(x)$ はunitary 変換により相互作用表示の current $J_\mu(x)$ と次式により関連づけられる：

$$\mathbf{J}_\mu(x) = U^\dagger(t, -T) J_\mu(x) U(t, -T) \tag{3.2}$$

Uは

$$i \frac{dU}{dt} = \lambda \mathcal{H}'(t) U \tag{3.3}$$

の解で初期条件 $U(-T, -T) = I$ を満すものである。(2.4) を用いると$<\mathbf{J}_\mu(x)>$は次のようになる。

$$<\mathbf{J}_\mu(x)> = <\beta + \beta_a | \mathbf{J}_\mu(\mathbf{x}, t) | \beta + \beta_a>$$

$$= 2\,\mathrm{Im}\{<\beta| U^\dagger(t, -T) J_\mu(\vec{x}, t) U(t_1 - T) \Gamma[\beta_a, -T] |\beta>\} + 0(\beta_a^2) \tag{3.4}$$

ここで$<\beta| U^\dagger(t, -T) J_\mu(\vec{x}, t) U(t, -T) |\beta>$ は温度が均一なときの期待値で時間に依らない量なので略した。(3.4) は Gell-Mann Low の方法を用いると T-積に書くことができる。すなわち bra-vector を

$$<\beta| = <\beta| U(T, -T) / <\beta| U(T, -T) |\beta> \tag{3.5}$$

とすると，

$$<\mathbf{J}_\mu(x)> = 2\,\mathrm{Im}\{<\beta| T\{U(T, -T) J_\mu(\mathbf{x}, t) \Gamma[\beta_a, -T]\} |\beta>_c\} \tag{3.6}$$

となる。添字 c は連結部分をとることを意味する。

U(T, −T) として (3.3) の解を用いると

$$<\mathbf{J}_\mu(x)> = 2\,\mathrm{Im}\Big[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n$$

$$<\beta| T\{\mathcal{H}'(t_1) \cdots \mathcal{H}'(t_n) J_\mu(\mathbf{x}, t) \Gamma[\beta_a, -T]\}) \beta>_c\Big] \tag{3.7}$$

となり，$<\mathbf{J}_\mu(x)>$ を Feynman diagram を用いて計算することができる。ここでTは十分大きいものと仮定した。

4. Self consistent approximation

相互作用のあるボース粒子の系に対し前節で述べた方法を適用して$<\mathbf{J}_\mu(x)>$を計算する。系の Hamiltonianとして次のものをとる：

$$H = H_0 + \lambda H',$$

ここで,

$$H_0 = \int : \phi^\dagger(x, t)\left(-\frac{1}{2m}\Delta - \mu\right)\phi(x, t) : d^3x, \tag{4.1}$$

また相互作用Hamiltonianとして平行移動により不変なseparable potentialを仮定する。

$$H' = \frac{1}{2}\int d^3z\, d^3x_1\, d^3x_2\, d^3x_3\, d^3x_4\, u(x_1 - z)\, u(x_2 - z)\, u(z - x_3)\, u(z - x_4)$$
$$: \phi^\dagger(x_1)\phi^\dagger(x_2)\phi(x_3)\phi(x_4) : \tag{4.2}$$

ここではcurrentとして粒子の流れを考えることにする。すなわち

$$J_0(x, t) = : \phi_1^\dagger(x, t)\phi_1(x, t) :$$
$$J_l(x, t) = : \frac{1}{2mi}\left(\phi_1^\dagger(x, t)\frac{\partial\phi_1(x, t)}{\partial x_l} - \frac{\partial\phi_1^\dagger(x, t)}{\partial x_l}\phi_1(x, t) : \right. \tag{4.3}$$
$$(l = 1, 2, 3)$$

をとる。ϕの添字はthermo field dynamicsにおける第一成分をあらわしている。一体Green関数 $\Delta^{\alpha\beta}$, self energy $\Sigma^{\alpha\beta}$, polarization tensor $\Pi^{\alpha\beta}$および補正されたpotential $V^{\alpha\beta}$に対するDyson方程式は図1に示された近似をすると

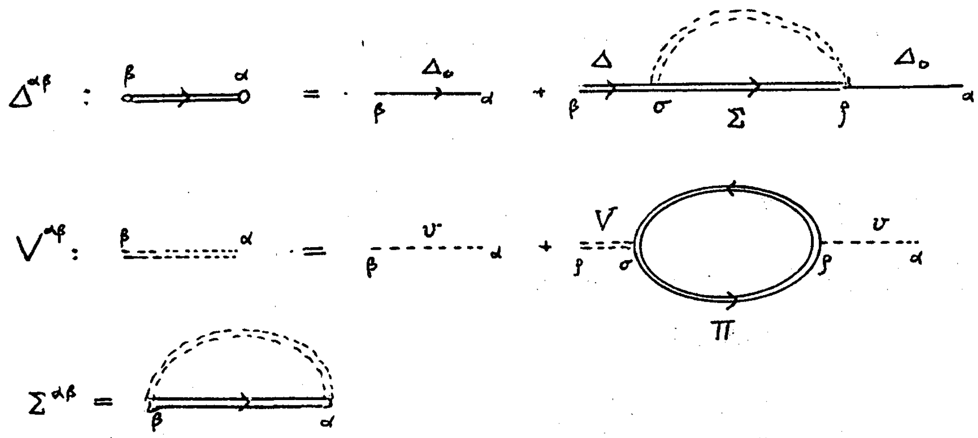

図1 Δ, Σ, Π, V に対するDyson方程式。
Δ_0は自由場のGreen関数をあらわす。

次の式で与えられる。

$$\Delta^{\alpha\beta}(p) = \Delta_0^{\alpha\beta}(p) - \sum_{\rho,\sigma}\Delta_0^{\alpha\rho}(p)\Sigma^{\rho\sigma}(p)\Delta^{\sigma\beta}(p) \tag{4.4a}$$

$$V^{\alpha\beta}(p_1, p_2) = (\tau_3)_{\alpha\beta}\, u(p_1)\, u(p_2) - i\lambda\sum_{\rho,\sigma}(\tau_3)_{\alpha\rho}\Pi^{\rho\sigma}(k)\, V^{\sigma\beta}(p_1, p_2) \tag{4.4b}$$

$$\Pi^{\alpha\beta}(p) = -\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4q\, u^2\left(q + \frac{p}{2}\right)u^2\left(q - \frac{p}{2}\right)\Delta^{\alpha\beta}\left(q + \frac{p}{2}\right)\Delta^{\beta\alpha}\left(q - \frac{p}{2}\right) \tag{4.4c}$$

$$\Sigma^{\alpha\beta}(p) = -\frac{i\lambda}{(2\pi)^4}\int d^4q\, V^{\alpha\beta}(p, q)\, u(p)\, u(q)\, \Delta^{\alpha\beta}(q). \tag{4.4d}$$

この方程式の解を求めるために更に次の近似を行う。

$$\Pi^{\alpha\beta}(\mathrm{p}) \approx \Pi^{\alpha\beta}(0) \tag{4.5}$$

$\Pi^{\alpha\beta}(0)$ は次のような簡単な行列になることが示される。

$$(\Pi^{\alpha\beta}(0)) = \kappa \begin{pmatrix} 1, 1 \\ 1, 1 \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

ここで κ はある定数である。(4.5) の近似のもとで (4.4a)−(4.4b) を解くために self energy を Pauli 行列 τ_i ($i = 1, 2, 3$) と単位行列 τ_0 を用いて $\Sigma(\mathrm{p}) = \sum_{k=0}^{3} \sigma_k \tau_k$ とあらわすと，σ_k は次の積分方程式にしたがうことが示される：

$$\sigma_k(\mathrm{p}) = \frac{\lambda^2\kappa}{2(2\pi)^3} u^2(\mathrm{p}) \int d^3q \frac{u^2(q)\,\sigma_k(q)}{\sqrt{\sigma_1^2(q) + \sigma_2^2(q) - \sigma_0^2(q)}}, \quad (k = 1, 2, 3)$$

$$\sigma_0(\mathrm{p}) = \frac{i\lambda}{2(2\pi)^3} u^2(\mathrm{p}) \int d^3q \frac{u^2(q)\,\sigma_0(q)}{\sqrt{\sigma_1^2(q) + \sigma_2^2(q) - \sigma_0^2(q)}} \tag{4.7}$$

この方程式の解は $\sigma_k(\mathrm{p}) = i\,u^2(\mathrm{p})\, s_k$ ($k = 0, 1, 2, 3$) の形になることが直ちに分かる。s_k は定数で次の式を満す。

$$\sqrt{s_0^2 - s_1^2 - s_2^2} = \frac{\lambda^2\kappa}{2(2\pi)^3} \int d^3q\, u^2(q) \equiv \gamma \tag{4.8}$$

$$s_3 = \frac{i\lambda s_0}{2(2\pi)^3} \int d^3q\, u^2(q) \tag{4.9}$$

ここで $s_0^2 - s_1^2 - s_2^2 > 0$ であることを仮定した。また κ と s_k は次式により関係づけられる。

$$\kappa = \frac{s_1^2 + s_2^2}{4(2\pi)^3\gamma} \int d^3q\, u^2(q) \tag{4.10}$$

一体 Green 関数はこの近似では次の形になる。

$$\Delta(\mathrm{p}) = \frac{W_+}{p_0 - \omega_p + \sigma_3(\mathrm{p}) + i\gamma u^2(\mathrm{p})} + \frac{W_-}{p_0 - \omega_p + \sigma_3(\mathrm{p}) - i\gamma u^2(\mathrm{p})} \tag{4.11}$$

ここで $W_\pm$ は次式で与えられる定行列である。

$$W_+ = \frac{1}{2\gamma} \begin{pmatrix} \gamma + s_0, & -s_1 + i s_2 \\ -s_1 - i s_2, & -\gamma + s_0 \end{pmatrix}, \quad W_- = -\frac{1}{2\gamma} \begin{pmatrix} \gamma - s_0, & s_1 - i s_2 \\ s_1 + i s_2, & -\gamma - s_0 \end{pmatrix} \tag{4.12}$$

5．熱拡散

前節で求めたGreen関数を用いて(4.3)で与えられるcurrentの期待値を計算しよう。その期待値は2体Green関数

$$S_{\alpha\beta}(x, y)=\langle\beta|T\{U(T, -T)\phi_\alpha(x)\phi_\beta(y)\Gamma[\beta_a, -T]\}|\beta\rangle \tag{5.1}$$

を用いて次のように表わせる。

$$\langle J_0(x, t)\rangle=2\,\mathrm{Im}[S_{11}(x, x)]$$

$$\langle J_l(x, t)\rangle=\lim_{y\to x}\left[2\,\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{2mi}\left(\frac{\partial}{\partial x_l}-\frac{\partial}{\partial y_l}\right)S_{11}(x, y)\right\}\right] \tag{5.2}$$

$$(l=1, 2, 3)$$

あるいは$S_{\alpha\beta}(x, y)$のFourier変換$\hat{S}_{\alpha\beta}(p, k)$を用いて

$$\langle J_l(x, t)\rangle=\frac{1}{[(2\pi)^4]^2}\int\frac{p_l}{m}\,\hat{S}_{11}(p, k)\,e^{ikx}d^4p\,d^4k \tag{5.3}$$

とあらわせる。

二体Green関数はBS方程式を解くことにより得られる。BS方程式に対しVをkernelとし，一体Green関数を補正されたΔとするladder近似を行う。VとΔはself consistentな条件(4.4a)－(4.4d)を満すように定められる。(4.11)に示したようにΔは

$$\Delta(p)=\Delta_+(p)+\Delta_-(p)$$

のようにretardedとadvanced項の和に書くことができる。self consistentに定めたΔとVは図2に示した“直交”関係が成立つことに注意する。その結果BS方程式も図3に示されたようにretardedとadvancedに分離される。

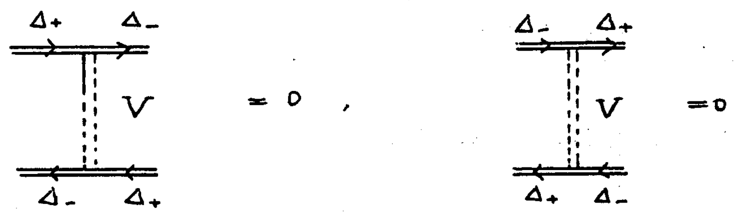

図2　Green関数の直交関係

Separable potentialを用いた結果BS方程式の解は次の様な簡単な表式で表わせる。

$$\int dp_0\,\hat{S}_{\alpha\beta}(p, k)=-2\pi i\beta_a(k)\,e^{-ik_0T}\,u\left(p+\frac{k}{2}\right)u\left(p-\frac{k}{2}\right)$$

$$\cdot\left[(\tau_3W_+\tau_2W_-\tau_3)X_+(p,k)+(\tau_3W_-\tau_2W_+\tau_3)X_-(p, k)\right] \tag{5.4}$$

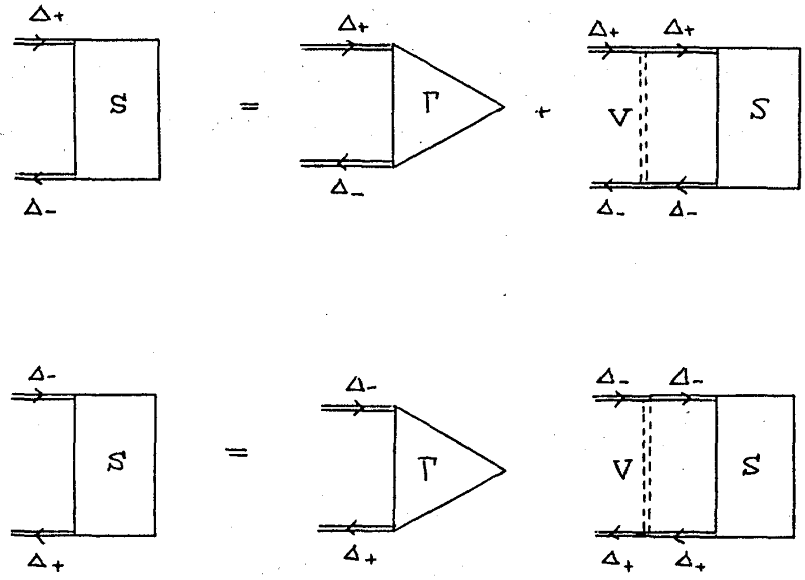

図3　2体Green関数に対するBS方程式

ここで

$$X_I(p,k) = \frac{X_I^0(k)}{1 \mp \frac{i\lambda^2\kappa}{(2\pi)^3}\int d^3p \frac{u^2(p+\frac{k}{2})\,u^2(p-\frac{k}{2})}{k_0-\frac{p\cdot k}{m} \pm i\gamma\,\{u^2(p+\frac{k}{2})+u^2(p-\frac{k}{2})\}}} \tag{5.5}$$

$$X_\pm^0(k) = \pm\, i\,\frac{\lambda^2\kappa}{(2\pi)^3}\int d^3p \frac{g(p)\,u(p+\frac{k}{2})\,u(p-\frac{k}{2})}{k_0-\frac{p\cdot k}{m} \pm i\gamma\,\{u^2(p+\frac{k}{2})+u^2(p-\frac{k}{2})\}} \tag{5.6}$$

である。

(5.5)よりγがself consistencyの条件(4.8)を満すとき$X_I(k)$は$k\to 0$で発散することが分かる。$\int dp_0 S_{\alpha\beta}(p, k)$は$k=0$を特異点とするが，それは極ではなくcutである。

$\Pi^{\alpha\beta}$に対し(4.5)の近似を行った結果一体Green関数が(4.11)で与えられ$W_\pm$は定行列となる。相互作用が十分弱いと仮定し我々の近似について検討しよう。このときは$W_\pm$は自由場のそれに十分近いと考えられるので

$$W_\pm(p) \approx \begin{pmatrix} c_p^2, & c_p d_p \\ c_p d_p, & d_p^2 \end{pmatrix},\quad W_-(p) \approx -\begin{pmatrix} d_p^2, & c_p d_p \\ c_p d_p, & c_p^2 \end{pmatrix},$$

とあらわせる。ここでc_p, d_pは(2.3)の$\theta(p,\beta)$を用いて$c_p = \mathrm{coh}\,\theta(p,\beta)$, $d_p = \sinh\theta(p,\beta)$で与えられる。$|p| \ll \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \equiv \Lambda_\beta$なるときは$W_\pm$を定行列で近似することができる。自由場のGreen関数を用いて$V(p, q)$を評価すると，BS方程式の中間状態の積分は$|p| > \Lambda_\beta$からの寄与が小さいこと

が示される。したがって図3に示されたBS方程式は自然なcut off Λ_βを含み，そのcut off内で我々のself consistentな解が有効であると考えられる。以上の考察から(5.5)にあらわれる積分はΛ_βでcut offされるものと考えてよく，その結果$X_I(k)$は拡散型の極を持ちkが十分小さいとき次式であらわせる。

$$X_+(k) = \frac{iA}{k_0 + iDk^2}, \quad X_-(k) = (X_+(k))^* \tag{5.7}$$

ここで

$$A = 2\gamma \int d^3p\, g(p) / \int_{|q|<\Lambda_\beta} d^3p\, 1 \tag{5.8}$$

$$D\delta_{ln} = \frac{\gamma}{4} \cdot \frac{\int_{|q|<\Lambda_\beta} d^3p\, 1 \left\{ \frac{\partial^2 W(q)}{\partial q_l \partial q_n} + \frac{2q_l q_n}{\gamma^2 m^2} W^3(q) \right\} W(q)^{-2}}{\int_{|q|<\Lambda_\beta} d^3p\, 1} \tag{5.9}$$

ここで$W(q) = 1/u(q)^2$である。

熱拡散流$\langle J_\mu(x) \rangle$は(5.4)，(5.7)を(5.3)に代入することにより計算される。この式においてk_0積分を留数定理を用いて実行すると，$t+T>0$なので，複素k_0面の下半面にある極のみが寄与する。その結果$\langle J_\mu(x) \rangle$は拡散方程式にしたがう。我々のHamiltonianは時間反転に対し不変であり,二体Green関数$\hat{S}_{11}(p, k)$もretardedとadvanced項の和になるのでT-不変な形をしている。$\langle J_\mu(x) \rangle$が時間反転に対し不変でない拡散型の方程式を満すのは$t+T>0$ととることにより時間の向きを過去から未来の方向に指定したからに他ならない。

通常，微視的な系から出発して巨視的量を求めるためにはcoarse grainingの手続きを必要とする。我々の問題では温度$\beta_a(x)$が巨視的な尺度で変化するのでそのFourier変換は小さいkの値に限られている。熱拡散型の特異点を導くためにkは十分小さいと仮定したが，その仮定がcoarse grainingと考えることができる。

cut off依存性など未解決の点もあるが,我々の計算は熱伝導や熱拡散の方程式を場の理論に基づくfirst principleから出発して導き出す可能性を示唆するものである。

参考文献

1) H. Ezawa, Progress in Quantum Field Theory, Ed. by H. Ezawa and S. Kamefuchi, Chap. 13, Elsevier Science Publishers B.V. 1986.

2) D. N. Zubarev, Nonequilibrium Statistical Thermodynamics Chap Ⅳ §19.2. Plenum Publishing Corporation (1974).