# 時間依存のハートレー・フォック理論による混合状態の記述

関西大：　栗山　惇，山村正俊
Coimbra：　J. da Providencia,　C. Fiolhais

## §1．はじめに

近年の原子核構造の研究では，低い励起状態のみならず，高い励起状態にも興味が注がれている．この小論では，高い励起状態の記述がおそらく可能であると考えられる方法を報告する．通常，核構造論では運動エネルギーと相互作用エネルギーの和である次のようなハミルトニアンからスタートする：

$$H=\Sigma_{ij}\ t_{ij}c_i^*c_j+\Sigma_{ijkl}\ v_{ijkl}c_i^*c_j^*c_lc_k\ . \tag{1.1}$$

ここで，$c_i$，$c_i^*$ は単一粒子状態 i のフェルミオンの消滅，生成演算子であって，次の反交換関係に従う．

$$\{c_i\ ,c_j^*\}=\delta_{ij}\ ,\ \{c_i\ ,c_j\}=\{c_i^*,c_j^*\}=0. \tag{1.2}$$

核構造で問題にする物理量は低い励起状態では個々の状態に関する量が詳しく測定されている．従って，低い励起状態は純粋状態として記述され，次のようなシュレディンガー方程式に従う：

$$i\,\partial_t|p(t)\rangle=H|p(t)\rangle. \tag{1.3}$$

上の方程式をどのように取り扱うかをめぐって，これまで様々なモデルやアイディアが提案されてきている．しかし，励起エネルギーが高くなってくると，状態密度が増加して，個々の状態に関する知識は得ることができず，様々な状態の統計的に平均されたものが研究の対象になってくる．その意味で，混合状態として記述する必要がでてくる．純粋状態は次のようなシュレディンガー方程式 (1.3) に従うことは常識である．それでは，高励起状態を記述するための混合状態はどのような方程式に従うのであろうか？ そして，その方程式をどのように取り扱ったらよいのであろうか？ この小論で，1つの試みを紹介する．

## §2．混合状態の従う方程式

Thermo Field Dynamics Formalism (TFD)[1] の考えに従って，同じ次元の2つの空間を用意して，それらを c－空間，d－空間と呼ぶことにする．原子核の構造を問題にする場合には，それは孤立系であるから，原理的にはc－空間のだけで記述されるはずである．しかし，後に分るように，TFD を用いると極めて好都合である．いま，2つの空間を構成する規格化された直交系を次の記号で表すことにする：

$$\text{c}-空間\quad \{|p\rangle\}\quad \langle p|q\rangle=\delta_{pq}\,,\quad \text{d}-空間\quad \{|p\rangle\rangle\}\quad \langle\langle p|q\rangle\rangle=\delta_{pq}\,. \tag{2.1}$$

この2つの空間の積空間の中で時間に依存する次のような状態ベクトルを考える：

$$|m(t)\rangle\rangle=\Sigma_p\, W_p|p(t)\rangle\times|p\rangle\rangle,\quad \Sigma_p\,|W_p|^2=1,\quad \langle p(t)|p(t)\rangle=1. \tag{2.2}$$

ここで，$W_p$ ,$|p\rangle\rangle$ は時間に依存しないとする．$\{|p(t)\rangle\}$ は直交系である必要はないが，$|p\rangle\rangle$ と一対一対応するとする．また，$|p(t)\rangle$ は以下の方程式に従う．

$$i\,\partial_t|p(t)\rangle=H|p(t)\rangle. \tag{2.3}$$

証明は省略するが，上のような条件の下では,状態 $|m(t)\rangle\rangle$ の従う方程式は純粋状態の場合と同じく，以下で与えられる：

$$i\,\partial_t|m(t)\rangle\rangle=H|m(t)\rangle\rangle. \tag{2.4}$$

c－空間の中の演算子 O の状態 $|m(t)\rangle\rangle$ に関する期待値を計算すると,次のようになる：

$$\langle\langle m(t)|O|m(t)\rangle\rangle=\Sigma_p\,|W_p|^2\,\langle p(t)|O|p(t)\rangle=\mathrm{Tr}(D(t)O), \tag{2.5}$$

$$D(t)=\Sigma_p\,|p(t)\rangle|W_p|^2\langle p(t)|,\qquad (\,\mathrm{Tr}D(t)=1\,) \tag{2.6}$$

$$-i\,dD(t)/dt=[D(t),H], \tag{2.7}$$

関係 (2.7) はよく知られたリュービーユ・ノイマン方程式で,$D(t)$ は密度行列である．興味があるのは,状態 $|m(t)\rangle\rangle$ に関する O の量子力学的期待値の計算が自動的に統計的平均値を与えることである．このことから,状態 $|m(t)\rangle\rangle$ は混合状態を表すとみなしてよい．また,混合状態が従わなければならない方程式は (2.4) 式で与えられることも分ったことになる．

d－空間の中の演算子 $\tilde{O}$ の期待値は，(2.4) 式を用いると，

$$i\,d/dt\,(\langle\langle m(t)|\tilde{O}|m(t)\rangle\rangle)=\langle\langle m(t)|[\tilde{O},H]|m(t)\rangle\rangle=0 \tag{2.8}$$

になる.これは $\langle\langle m(t)|\tilde{O}|m(t)\rangle\rangle$ は時間に依存してはならないことを意味する.以下に報告する方法は $\langle\langle m(t)|\tilde{O}|m(t)\rangle\rangle$ が時間に依存しないことが考察の中心になる．

## §３．純粋状態を扱う１つの方法 ── 時間依存のハートレー・フォック理論

純粋状態を記述するための１つの一般的方法として Time-Dependent Hartree-Fock

Theory (TDHF) が挙げられる．そして，TDHF について，うまい変数を導入して古典力学のハミルトン形式の中で系を記述することにしてしまう方法が丸森，益川，坂田，栗山によって，提案されている.[2] この方法はこの研究会で報告を行った橋本，松尾らによって様々な展開をみせている．また，この小論の報告者の山村，栗山によっても多少観点を変えた展開がなされてきている.[3]

まず，その取扱いの復習からはじめよう．純粋状態については変分

$$\delta\int\langle p(t)|\,i\,\partial_t-H\,|p(t)\rangle dt=0 \tag{3.1}$$

において，試行関数 $\delta|p(t)\rangle$ を任意にとれば，シュレディンガー方程式 (1.3) が求まることはよく知られている．これに対する１つの近似として TDHF がある．時間依存のスレーター行列式の範囲内で上の変分より (1.3) 式の近似解を求めようとする考えである．

時間依存のスレーター行列式 $|p(t)\rangle$ の表し方には次のようなものがある：

$$|p(t)\rangle=U(t)|0\rangle\ ,\ |0\rangle=c^*_{h_1}\cdots c^*_{h_N}|\phi\rangle.\quad(\ c_i|\phi\rangle=0\ ) \tag{3.2}$$

ここで，$U(t)$ は１体演算子に関係するユニタリー演算子で，例えば，次の形が最もポピュラーである：

$$U(t)=\exp\Sigma_{ph}\ (a_p^*b_h^*\Gamma_{hp}-b_h a_p\Gamma_{hp}^*), \tag{3.3}$$

$$c_i=a_p\ (\ i=p\ :\ \text{粒子}\ ),\ b_h^*\ (\ i=h\ :\ \text{空孔}\ ). \tag{3.4}$$

$\Gamma_{hp}$ , $\Gamma_{hp}^*$ は変分 (3.1) から時間依存を決める方程式が得られるパラメーターである．パラメーター $\Gamma$ の時間依存性が分れば，時間依存のスレーター行列式が得られる．すなわち，シュレディンガー方程式 (1.3) の近似解が求められる．

それでは，$\Gamma$ の時間依存性はどのように決定したらよいかを考察しよう．まず，正準変数とみなすことができる別のパラメーター ( $Q_r$ , $P_r$ ) を導入する．従って，パラメーター $\Gamma$ の ( $Q_r$ , $P_r$ )－依存性，( $Q_r$ , $P_r$ ) の時間依存性の決定がなされれば問題は解けたことになる．( $Q_r$ , $P_r$ ) の時間依存性の決定は次の変分に依る：

$$\delta\int\mathbf{L}\,dt=0\ ,\quad \mathbf{L}=\langle p(t)|\,i\,\partial_t-H\,|p(t)\rangle. \tag{3.5}$$

もし，$\mathbf{L}$ が $\mathbf{L}=\Sigma_r\ \mathbf{P}_r\dot{\mathbf{Q}}_r-\mathbf{H}+\dot{\mathbf{S}}$ のような形に表すことができるならば，$\mathbf{L}$ は古典力学に現れるラグランジュアンと考えることができる．また，$\mathbf{H}=\langle p(t)|H|p(t)\rangle$ はハミルトニアンとみなすことができる．この要請から，パラメーター $\Gamma$ の ( $Q_r$ , $P_r$ )－依存性を決定する条件が次のように導かれる：

$$\begin{cases}\langle p(t)|\,i\,\partial_{Q_r}|p(t)\rangle=\mathbf{P}_r+\partial_{Q_r}\mathbf{S}, \\ \langle p(t)|\,i\,\partial_{P_r}|p(t)\rangle=\partial_{P_r}\mathbf{S}.\end{cases}\quad(\ \mathbf{S}=S(\mathbf{Q},\mathbf{P})) \tag{3.6}$$

また，正準変数（$Q_r$，$P_r$）の時間依存性を決定する条件は次のように与えられる：

$$\dot{Q}_r = \partial_{P_r} H, \qquad \dot{P}_r = -\partial_{Q_r} H, \qquad H = H(Q, P). \tag{3.7}$$

上の方程式は古典力学に現れるハミルトンの運動方程式そのものである．このようにすれば，関係（3.6）を媒介にして，時間依存のシュレディンガー方程式を解く量子力学の問題はハミルトンの運動方程式を解く古典力学の問題に解消されてしまうことが分る．

## §４．混合状態を扱う１つの方法

変分（3.5）と同じ考えに従って，次のような変分を考える：

$$\delta \int \langle\langle m(t) | i \partial_t - H | m(t) \rangle\rangle dt = 0. \tag{4.1}$$

試行関数 $\delta | m(t) \rangle\rangle$ を任意にとれば，純粋状態の場合と同様にして，以下の方程式が導かれる：

$$i \partial_t | m(t) \rangle\rangle = H | m(t) \rangle\rangle. \tag{4.2}$$

スレーター行列式（3.2）を変分の試行関数とすれば，TDHF が得られたことの応用を考えよう．積空間の中で時間依存のスレーター行列式をつくることができるならば，そのスレーター行列式を $| m(t) \rangle\rangle$ とみたてることで，TDHF がそのまま適用できることを思い付く．そこで，先ずスレーター行列式をつくることを考える．

c－空間，d－空間の中で次のような直交系を定義する：

$$\begin{aligned} | i_1 \cdots i_L \rangle &= 1/\sqrt{L!} \cdot c_{i_1}^* \cdots c_{i_L}^* | \phi \rangle, \quad (c, c^* ：\text{フェルミ演算子}) \\ | i_1 \cdots i_L \rangle\rangle &= 1/\sqrt{L!} \cdot d_{i_1}^* \cdots d_{i_L}^* | \phi \rangle\rangle. \quad (d, d^* ：\text{フェルミ演算子}) \end{aligned} \tag{4.3}$$

$|\phi\rangle$，$|\phi\rangle\rangle$ は $c_i |\phi\rangle = d_i |\phi\rangle\rangle = 0$ を満たす．これらのフェルミ演算子から，Static Hartree-Fock Theory での粒子・空孔演算子に対応するフェルミ演算子を定義する：

$$\begin{aligned} a_i^* &= u_i c_i^* - v_i d_i, \qquad u_i = \sqrt{1 - n_i}, \quad v_i = \sqrt{n_i}, \\ b_i &= v_i c_i^* + u_i d_i, \qquad u_i^2 + v_i^2 = 1. \end{aligned} \tag{4.4}$$

$n_i$ は一定値で，なんらかの手段で決められたとする．また，$(a, a^*)$ は粒子，$(b, b^*)$ は空孔演算子である．$a_i |0\rangle\rangle = b_i |0\rangle\rangle = 0$ を満たす真空 $|0\rangle\rangle$ は次のような形になる：

$$|0\rangle\rangle = \Pi_i \ (u_i + v_i c_i^* d_i^*) | \phi \rangle \times | \phi \rangle\rangle. \tag{4.5}$$

真空 $|0\rangle\rangle$ に関する演算子 $c_i^* c_j$ , $d_j^* d_i$ の期待値は以下で与えられる：

$$\langle\langle 0|c_i^* c_j|0\rangle\rangle = n_i \delta_{ij}\ ,\quad \langle\langle 0|d_j^* d_i|0\rangle\rangle = n_i \delta_{ij}\ . \tag{4.6}$$

また，演算子 $c_i^* c_j$ , $d_j^* d_i$ は次のような形に表される：

$$c_i^* c_j = n_i \delta_{ij} + F_{ij}\ ,\quad d_j^* d_i = n_i \delta_{ij} + \widetilde{G}_{ij}\ , \tag{4.7}$$

$$\begin{aligned} F_{ij} &= u_i v_j a_i^* b_j^* + v_i u_j b_i a_j + u_i u_j a_i^* a_j - v_i v_j b_j^* b_i\ , \\ \widetilde{G}_{ij} &= v_i u_j a_i^* b_j^* + u_i v_j b_i a_j - v_i v_j a_i^* a_j + u_i u_j b_j^* b_i\ . \end{aligned} \tag{4.8}$$

$n_i$ は状態 $|0\rangle\rangle$ の単一粒子状態 $i$ の占有確率，$F_{ij}$ はそのまわりの揺らぎを表す．

## §5．混合状態を表す時間依存のスレーター行列式

混合状態を表す時間依存のスレーター行列式として，次の形を採用する：

$$|m(t)\rangle\rangle = U(t)|0\rangle\rangle,\quad (\ U(t)：\text{ユニタリー}\ ) \tag{5.1}$$

$$U(t) = \exp \Sigma_{ij}\ (a_i^* b_j^* \Gamma_{ji} - b_i a_j \Gamma_{ij}^*). \tag{5.2}$$

パラメーター $\Gamma$ の ( $\mathbf{Q}_r$ , $\mathbf{P}_r$ )－依存性を決定する条件として，次のものを選ぶ：

$$\Gamma_{ji} = [\sin^{-1}\sqrt{\mathbf{C}\mathbf{C}^+}\cdot\sqrt{\mathbf{C}\mathbf{C}^+}^{-1}\cdot\mathbf{C}]_{ji} = [\mathbf{C}\cdot\sqrt{\mathbf{C}^+\mathbf{C}}^{-1}\cdot\sin^{-1}\sqrt{\mathbf{C}^+\mathbf{C}}]_{ji}\ . \tag{5.3}$$

このように選ぶと，$\mathbf{C}_{ij}$ , $\mathbf{C}_{ij}^*$ は

$$\begin{aligned} \langle\langle m(t)|\partial/\partial\mathbf{C}_{ij}|m(t)\rangle\rangle &= +\mathbf{C}_{ij}^*/2, \\ \langle\langle m(t)|\partial/\partial\mathbf{C}_{ij}^*|m(t)\rangle\rangle &= -\mathbf{C}_{ij}/2, \end{aligned} \qquad (\ \mathbf{S} = -1/2\cdot\Sigma_{ij}\ \mathbf{P}_{ij}\mathbf{Q}_{ij}\ ) \tag{5.4}$$

を満たす．ただし，$\mathbf{C}_{ij} = (\mathbf{Q}_{ij} + i\,\mathbf{P}_{ij})/\sqrt{2}$ , $\mathbf{C}_{ij}^* = (\mathbf{Q}_{ij} - i\,\mathbf{P}_{ij})/\sqrt{2}$ であり，以下のポアソン括弧式に従う正準変数である．

$$i\,[\mathbf{C}_{ij}\ ,\mathbf{C}_{kl}^*]_P = \delta_{ik}\delta_{jl}\ ,\ i\,[\mathbf{C}_{ij}\ ,\mathbf{C}_{kl}]_P = i\,[\mathbf{C}_{ij}^*,\mathbf{C}_{kl}^*]_P = 0. \tag{5.5}$$

ただし，$[\mathbf{A},\mathbf{B}]_P$ はポアソン括弧である：

$$[\mathbf{A},\mathbf{B}]_P = \Sigma_{ij}\ (\partial\mathbf{A}/\partial\mathbf{Q}_{ij}\cdot\partial\mathbf{B}/\partial\mathbf{P}_{ij} - \partial\mathbf{B}/\partial\mathbf{Q}_{ij}\cdot\partial\mathbf{A}/\partial\mathbf{P}_{ij}). \tag{5.6}$$

TDHF によれば，1体演算子に関係する物理量の期待値は以下の結果を用いると，全て求めることができる：

$$
\begin{aligned}
&\langle\langle m(t)|a_i^* b_j^*|m(t)\rangle\rangle=\Sigma_k\ \mathbf{C}_{jk}^*(\sqrt{1-\mathbf{C}^+\mathbf{C}})_{ik}\,,\\
&\langle\langle m(t)|b_i a_j|m(t)\rangle\rangle=\Sigma_k\ (\sqrt{1-\mathbf{C}^*\mathbf{C}^T})_{ki}C_{kj}\,,\\
&\langle\langle m(t)|a_i^* a_j|m(t)\rangle\rangle=\Sigma_k\ \mathbf{C}_{ki}^*\mathbf{C}_{kj}\,,\\
&\langle\langle m(t)|b_j^* b_i|m(t)\rangle\rangle=\Sigma_k\ \mathbf{C}_{jk}^*\mathbf{C}_{ik}\,.
\end{aligned}
\tag{5.7}
$$

$c_i^* c_j$ , $d_j^* d_i$ の期待値は次のように表される：

$$
\begin{aligned}
&\langle\langle m(t)|c_i^* c_j|m(t)\rangle\rangle=n_i\delta_{ij}+\langle\langle m(t)|F_{ij}|m(t)\rangle\rangle,\\
&\langle\langle m(t)|d_j^* d_i|m(t)\rangle\rangle=n_i\delta_{ij}+\langle\langle m(t)|\widetilde{G}_{ij}|m(t)\rangle\rangle.
\end{aligned}
\tag{5.8}
$$

すなわち，$\mathbf{C}$，$\mathbf{C}^*$ の関数で表すことができる．粒子数演算子と交換する全ての物理量の期待値は，ウィックの定理により $\langle\langle m(t)|c_i^* c_j|m(t)\rangle\rangle$ の積の和で表されるから，$\mathbf{C}$，$\mathbf{C}^*$ の関数になることが分る．従って，$\mathbf{C}$，$\mathbf{C}^*$ の時間依存性が分れば，$Tr(D(t)O)$ が求められる．

## §6．拘束系のディラック理論の適用

さて，(5.1) で与えられる $|m(t)\rangle\rangle$ の構造をもう少しくわしく診てみよう．そのために，$|m(t)\rangle\rangle$ を以下のように変形する：

$$
|m(t)\rangle\rangle=\Sigma_{i_1\cdots i_L}\ \Gamma_{i_1\cdots i_L}(t)\ |i_1\cdots i_L(t)\rangle\times|i_1\cdots i_L\rangle\rangle. \tag{6.1}
$$

係数 $\Gamma_{i_1\cdots i_L}(t)$ は一般に時間に依存し，$|i_1\cdots i_L(t)\rangle$ は時間依存のシュレディンガー方程式の厳密解ではない．従って，厳密解の場合には恒等的に時間に無関係である $\langle\langle m(t)|\widetilde{O}|m(t)\rangle\rangle$ がいまの場合は一般に時間に依存する．そこで，次のことを要請する．

$$
d/dt\,(\langle\langle m(t)|\widetilde{O}|m(t)\rangle\rangle)=0.\quad(\text{時間に依存しない}) \tag{6.2}
$$

この要請はこれからの議論にとって基本的である．

要請 (6.2) をもっと詳しく考察しよう．演算子 $\widetilde{O}$ の一般形は $d_{j_1}^*\cdots d_{j_L}^*\times d_{i_M}\cdots d_{i_1}$ の一次結合で与えられる．この演算子の期待値はウィックの定理によって，次のように表される：

$$\langle\langle m(t)|d_{j_1}^{*}\cdots d_{j_L}^{*}\,d_{i_M}\cdots d_{i_1}|m(t)\rangle\rangle$$

$$= \begin{cases} 0, & (L\neq M) \\ \Sigma\Pi\ \langle\langle m(t)|d_j^{*}d_i|m(t)\rangle\rangle. & (L=M) \end{cases} \tag{6.3}$$

従って，$\langle\langle m(t)|d_j^{*}d_i|m(t)\rangle\rangle$ が時間に依存しないことを要請すれば十分である．そこで，純粋状態へスムースに移行するように，

$$\langle\langle m(t)|d_j^{*}d_i|m(t)\rangle\rangle = n_i\,\delta_{ij}\,, \tag{6.4}$$

すなわち，

$$\langle\langle m(t)|\widetilde{G}_{ij}|m(t)\rangle\rangle\ (=\mathbf{G}_{ij})\ =0 \tag{6.5}$$

を要請する．$\mathbf{G}_{ij}$ は $\mathbf{C},\mathbf{C}^{*}$ の関数である．

関係 (6.5) は正準変数 $\mathbf{C}_{ij}$ ,$\mathbf{C}_{ij}^{*}$ でつくられる位相空間の中で,条件 (6.5) に従う部分多様体上にいま考察している系はあることを意味する.従って,ディラックに従って,[4] 関係 (6.5) は弱等号記号を使って,拘束条件として以下のように記すべきである：

$$\mathbf{G}_{ij} \approx 0. \tag{6.6}$$

$\mathbf{G}_{ij}$ には次の性質がある：

$$\mathbf{G}_{ij}^{*} = \mathbf{G}_{ji}\,, \tag{6.7}$$

$$(\mathbf{G}_{ij}\,,\mathbf{G}_{kl})_P = \delta_{il}\,\delta_{jk}(n_j - n_i) + \delta_{il}\mathbf{G}_{kj} - \delta_{jk}\mathbf{G}_{il}\,. \tag{6.8}$$

ただし，$(\mathbf{A},\mathbf{B})_P$ は次で定義されるポアソン括弧である：

$$(\mathbf{A},\mathbf{B})_P = \Sigma_{ij}\ (\partial\mathbf{A}/\partial\mathbf{C}_{ij}\cdot\partial\mathbf{B}/\partial\mathbf{C}_{ij}^{*} - \partial\mathbf{B}/\partial\mathbf{C}_{ij}\cdot\partial\mathbf{A}/\partial\mathbf{C}_{ij}^{*}). \tag{6.9}$$

$\mathbf{G}_{ij}$ は,また，次のように2つの場合に分けて考えると便利である：

$$\mathbf{G}_{ij} = \begin{cases} q_{ij}\,, & (n_i = n_j) \quad (\,q_{ij} \approx 0:\text{第1種拘束条件}\,) \\ \xi_{ij}\,. & (n_i \neq n_j) \quad (\,\xi_{ij} \approx 0:\text{第2種拘束条件}\,) \end{cases} \tag{6.10}$$

それぞれ，第１種，第２種拘束条件と呼ぶことができるのは次の関係から明かである：

$$(q_{ij}, q_{kl})_P \approx 0,\ (q_{ij}, \xi_{kl})_P \approx 0,\ (\xi_{ij}, \xi_{kl})_P \approx \delta_{il}\,\delta_{jk}(n_j - n_i). \tag{6.11}$$

第１種拘束はゲージ条件と呼ばれる拘束を付加することで第２種にすることができる．

それでは，そのゲージ条件（ $p_{ij} \approx 0$ と記す ）をつくってみよう．$p_{ij}$ の添字 $ij$ は $n_i = n_j$ の場合に限られるのは自明であろう．また，$p_{ij}$ は次の性質を持てばよいことも説明の必要はなかろう：

$$(p_{ij}, p_{kl})_P \approx 0, \ (p_{ij}, q_{kl})_P \approx \delta_{il}\delta_{jk}, \ (p_{ij}, \xi_{kl})_P \approx 0. \tag{6.12}$$

具体的な形は次のように与えられる．

$$p_{ij} = p_{ij}' + \Sigma_{mn} \ m_{ij,nm} q_{mn} + \Sigma_{mn} \ n_{ij,nm} \xi_{mn} . \tag{6.13}$$

ただし，右辺に現れる量は次のように定義される：

$$\begin{aligned} m_{ij,nm} &= \Sigma_{rs} \ 1/2(n_r - n_s)\cdot(p_{ij}', \xi_{rs})_P (p_{nm}', \xi_{sr})_P , \\ n_{ij,nm} &= 1/(n_m - n_n)\cdot(p_{ij}', \xi_{nm})_P , \end{aligned} \tag{6.14}$$

$$p_{ij}' = \Sigma_{mn} \ (1+\phi)^{-1}{}_{ij,nm} p_{mn}{}^0, \tag{6.15}$$

$$p_{ij}{}^0 = 1/(2u_i v_i)\cdot(\mathbf{C}_{ij} - \mathbf{C}_{ji}{}^*), \quad ( n_i = n_j ) \tag{6.16}$$

$$(p_{ij}{}^0, q_{kl})_P = \delta_{il}\delta_{jk} + \phi_{ij,kl} \ ( = ( 1+\phi)_{ij,kl} ). \tag{6.17}$$

次に，正準変数（ $\mathbf{Q}_r$ ,$\mathbf{P}_r$ ）の時間依存性を決定する条件を求めよう．変分 (4.1) より，次の方程式が導かれる．

$$i\,\dot{\mathbf{C}}_{ij} = (\mathbf{C}_{ij}, \mathrm{H})_D , \ i\,\dot{\mathbf{C}}_{ij}{}^* = (\mathbf{C}_{ij}{}^*, \mathrm{H})_D , \ \mathbf{H} = \mathrm{H}(\mathbf{C}, \mathbf{C}^*). \tag{6.18}$$

ただし，$\mathbf{C}_{ij}$ ,$\mathbf{C}_{ij}{}^*$, $(\mathbf{A}, \mathbf{B})_D$ は以下で定義される：

$$\mathbf{C}_{ij} = (\mathbf{Q}_{ij} + i\,\mathbf{P}_{ij})/\sqrt{2} , \ \mathbf{C}_{ij}{}^* = (\mathbf{Q}_{ij} - i\,\mathbf{P}_{ij})/\sqrt{2}, \tag{6.19}$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}, \mathbf{B})_D \approx (\mathbf{A}, \mathbf{B})_P &- \Sigma_{ij} \ 1/(n_i - n_j)\cdot(\mathbf{A}, \xi_{ij})_P (\xi_{ji}, \mathbf{B})_P \\ &- \Sigma_{ij} \ \{(\mathbf{A}, q_{ij})_P (p_{ji}, \mathbf{B})_P - (\mathbf{A}, p_{ij})_P (q_{ji}, \mathbf{B})_P\}. \end{aligned} \tag{6.20}$$

(6.20) で与えられる $(\mathbf{A}, \mathbf{B})_D$ はディラック括弧と呼ばれる．上の方程式を与えられた初期条件で解くことで，$\mathbf{C}$，$\mathbf{C}^*$ の時間依存性が分り，$|m(t)\rangle\rangle$ が求まる．また，期待値 $\langle\langle m(t)|O|m(t)\rangle\rangle$，すなわち，$Tr(D(t)O)$ を計算することができる．以上のようにすれば，混合状態を記述するための TDHF の正準形式をディラックの拘束系の正準理論を用いることでつくることができることが分る．もちろん，運動方程式 (6.18) を解くことが必須である．

## §7．おわりに

以上のように，混合状態を記述する方法を考案することができるが，これまで，この方法にもとずいて報告者で行ってきている研究ならびそれに関連することを箇条書きしてみると以下のようである．

1．混合状態に対する集団部分多様体の理論：

ある特定の自由度だけを陽に取り上げる方法で，純粋状態の記述で展開された集団部分多様体の方程式が求められている．[5)]

2．乱雑位相近似：

最低次数の近似解を求めるもので，核理論では３つの論文が出されている．第１は田辺によるもので，[6)] シュレディンガー方程式は $i\partial_t|m(t)\rangle\rangle = H|m(t)\rangle\rangle$ からスタートしている．２番目は初田によって発表されたものであって，[7)] 出発のシュレディンガー方程式は $i\partial_t|m(t)\rangle\rangle = (H-\widetilde{H})|m(t)\rangle\rangle$ である．第３は報告者によるもので，[8)] この報告でも強調したように，$i\partial_t|m(t)\rangle\rangle = H|m(t)\rangle\rangle$ からスタートするが，拘束条件があるのが特徴である．この３つの論文で得られた結果の比較は文献 8) にあるので，それを参照願いたい．

3．ボソン展開（古典論）：

拘束条件を自動的に満たす正準変数による混合状態の記述を考えたもので，この報告ではディラックの正準形式になっているが，再び，ハミルトンの正準形式に戻すのがアイディアの骨子である．現在この報告で述べたことを含めて論文を準備中である．近い内に，プログレスに投稿の予定である．

4．$n_i$ が時間依存するような場合への拡張：

この報告では孤立系としての原子核を想定しているが，他の原子核が接近してくるような系を考えることも核理論としては重要な問題である．そのような系の記述を狙ったもので，現在ほぼ検討を済ませている．

## 謝　辞

本研究会で，私どもの研究を報告する機会が与えられたこと，また，この研究会で，違った分野でも似た考えでアプローチしている様々な問題があることを知ることができ，大いに今後の研究の糧が得られた点で，研究会の世話人，特に筑波大学の有光敏彦氏，橋本幸男氏に感謝致します．

## 参考文献

1) Y.Takahashi and H.Umezawa, Collect.Phenom. 2(1975), 55.
H.Umezawa, H.Matumoto and M.Tachiki, Thermo Field Dynamics and Condensed States ( North Holland, Amsterdam, 1982).
T.Arimitsu and H.Umazawa, Prog.Theor.Phys. 77(1987), 32.
2) T.Marumori, H.Masukawa, F.Sakata and A.Kuriyama, Prog.Theor.Phys. 64(1980), 1294.
3) M.Yamamura and A.kuriyama, Prog.Theor.Phys.Suppl. No.93(1987).
4) P.A.M.Dirac, Can.J.Math. 2(1950), 129.
5) M.Yamamura, J.da Providencia, A.Kuriyama and C.Fiolhais, Prog.Theor.Phys. 81 (1989), 1198.
6) K.Tanabe, Phys.Rev. C37(1988), 2802.
7) T.Hatsuda, Nucl.Phys. A492(1989), 187.
8) M.Yamamura, J.da Providencia, A.Kuriyama and C.Fiolhais, Prog.Theor.Phys. 83 (1990), No.4.