量子核形成における
集団自由度の有効量子論

中村卓史
日本大学生産工学部 教養・基礎科学系
275 千葉県習志野市新栄 1-11-1
email: nakamura@mmm.cit.nihon-u.ac.jp

概 要

量子液体における量子核形成の定量的な理論を確立するための第一歩として、量子核形成を記述する最も単純な模型である単一自由度模型 (droplet model) に対応した有効量子論を場の理論から導出する。

1 はじめに

近年、^{3}He 過飽和の ^{3}He-^{4}He 混合液や負圧下での液体 ^{4}He の相転移が量子核形成によって引き起こされていることを示唆する実験結果がでている。[1, 2, 3] ^{3}He-^{4}He 混合液の場合、熱による核形成が殆ど起こらない程の低温において、混合液から ^{4}He 成分をスーパーリークによって取りだして ^{3}He が過飽和の準安定な溶液をつくると、ある時間をおいて相分離が自発的に起こる事が実験的に確かめられている。この系は極めてクリーンな系であると考えられており、^{3}He-^{4}He の相分離は Homogeneous な量子核形成[1] によって引き起こされているものと期待されている。

これらの量子核形成はマクロあるいはメゾスコピックな量子トンネル現象であると考えられており、その解析には単一自由度の Lifshitz-Kagan の現象論やそれに基づいて他の自由度の影響も考慮した理論 [4, 5] が、微視的な裏付けの無いまま用いられているのが現状である。このような理論では、形成される核 (以下バブル) が球対称であり界面の厚さが半径に比べて無視できる程小さいとし、さらに力学自由度である半径をあたかも微視的な粒子の座標のように量子化している。即ち、単一自由度模型の場合 Feynman kernel を次のように書くことに相当する：

$$\prod_t \int \frac{dR(t)}{\sqrt{2\pi i\hbar \Delta t/M(R(t))}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int dt\left(\frac{1}{2}M(R)\dot{R}^2 - U(R)\right)\right\}, \tag{1}$$

ここで、R はバブルの半径である。核形成は多体問題であるので、このように集団自由度 R

[1] Homogeneous な量子核形成とは、均一に準安定相にある媒質中に安定相の核が外的要因 (容器の壁、宇宙線等) の助けなしに量子的な揺らぎのみで核形成が起こる現象のことを言う。

とそれ以外の自由度に明確に分ける事ができるかどうかは自明ではない。本論文では、場の理論から (1) の形の有効理論を導き出す事によって、それがある極限において可能である事を示す。

以下では、$d+1$ 次元の実スカラー場から物理的に意味のある集団自由度(バブルの膨張収縮)と微小な揺らぎを表す自由度を分け、揺らぎの自由度を積分消去することによって単一自由度の理論を導き出す。実スカラー場では ^{3}He-^{4}He 混合液や液体^{4}He のモデルにはなり得ないが、ここでは最も単純な場の理論を考え前述の手法を確立する事を目指す。

2 場の模型

次の Lagrangian で与えられる $d+1$ 次元実スカラー場の理論を考える：

$$L\{\phi(\cdot,t)\} = \int d^d x \frac{1}{2}\dot{\phi}^2(x,t) - V\{\phi(\cdot,t)\}. \tag{2}$$

ここで、ポテンシャルエネルギーは

$$V\{\phi(\cdot)\} = \int d^d \boldsymbol{x} \{\frac{1}{2}(\nabla\phi(\boldsymbol{x}))^2 + \mathcal{U}(\phi(\boldsymbol{x}))\} \tag{3}$$

と書ける。L や V の後の $\{\cdot\}$ はそれが空間座標 $\boldsymbol{x}$ の関数の汎関数であることを示す。場のポテンシャル $\mathcal{U}(\phi)$ は少し傾いた二重井戸型ポテンシャルだとする。つまり、高い方の井戸の底(準安定相)に相当する場の値を ϕ_+、低い方(安定相)を ϕ_- とすると

$$\mathcal{U}(\phi_+) - \mathcal{U}(\phi_-) = \varepsilon \tag{4}$$

となる。本論文では準安定相と安定相の間のエネルギー密度の差 ε の小さい極限を考える。

波動汎関数 $\Psi\{\phi\}$ の時間発展を決める Feynman kernel は経路積分の形式で

$$\int \mathcal{D}\phi(\boldsymbol{x},t) \exp\left(\frac{i}{g^2}\int dt L\{\phi(\cdot,t)\}\right) \tag{5}$$

と書ける。ここで、 g^2 は無次元化されたプランク定数あるいはカップリングコンスタントの2乗、即ち半古典近似の展開パラメータである。積分測度は

$$\mathcal{D}\phi(\boldsymbol{x},t) = \prod_{t=t_{\rm ini}}^{t_{\rm fin}-\Delta t} \prod_k \frac{d\phi_k(t)}{\sqrt{2\pi i g^2 \Delta t}} \tag{6}$$

とし、ϕ_k は $\phi(\boldsymbol{x})$ の Fourier 係数；

$$\phi(\boldsymbol{x},t) = \sum_k \phi_k(t) e_k(\boldsymbol{x}), \quad \int d^d\boldsymbol{x}\ e_k(\boldsymbol{x}) e_l(\boldsymbol{x}) = \delta_{kl}, \tag{7}$$

とする。

以下の議論は $\phi(\boldsymbol{x})$ を $\{e_k(\boldsymbol{x})\}$ で張られる空間 ($\mathcal{F}$ と呼ぶことにする) に住むベクトルとして見るとわかりやすい。空間 $\mathcal{F}$ に属する任意のベクトルを $|\phi>$ と表し、異なる基底における $|\phi>$ の表現を

$$\phi(\boldsymbol{x}) = <\boldsymbol{x}\,|\,\phi>, \quad \phi_k = <e_k\,|\,\phi>, \tag{8}$$

とする。ただし、

$$< \boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{y} >= \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}), \quad < e_k \mid e_l >= \delta_{kl}, \quad < \boldsymbol{x} \mid e_k >= e_k(\boldsymbol{x}). \tag{9}$$

(注：ここでの braket は量子力学的な状態を表すものではない。)

3 Valley に沿った変数変換

このセクションでは、断熱極限で寄与が最も大きくなる空間的な場のコンフィギュレーションのファミリーを見つける事によってバブルの膨張収縮に対応する集団自由度を場の自由度のなかから取りだす。具体的には、関数空間 $\mathcal{F}$ の中に V の値がまわりに比べて小さい筒上の領域が存在し (この領域を valley と呼ぶことにする。)、断熱極限において系の時間発展はこの valley 沿いに起こると考えられる[2] 。以下 V にはただ一つの valley が存在すると仮定し、この valley に沿ったダイナミクスを考える。これは核形成過程においてバブルが一つだけ発生することに対応しており、半古典近似が成り立つ状況において有効な仮定である。

任意の実数パラメータ q で vally 上の点を表わし、その点に対応する場のコンフィギュレーションを $\phi_q(\boldsymbol{x})$ と書く。数学的には [6]

$$\mathbf{D}_q \mid G_q >= \lambda_0(q) \mid G_q >, \tag{10}$$

で定義される。ここで、

$$< e_i \mid \mathbf{D}_q \mid e_j >= \left.\frac{\partial^2 V}{\partial\phi_i \partial\phi_j}\right|_{\phi=\phi_q}, \quad < e_j \mid G_q >= \left.\frac{\partial V}{\partial\phi_j}\right|_{\phi=\phi_q}, \tag{11}$$

そして $\lambda_0(q)$ は $\mathbf{D}_q$ の最小の固有値であり、$\mathbf{D}_q$ のスペクトルを次のように書くことにする：

$$\mathbf{D}_q \mid n;\ q >_0 = \lambda_n(q) \mid n;\ q >_0 \quad ただし \ \ n=0,1,2,3,\cdots. \tag{12}$$

ここで、$\mid n;\ q >_0$ は規格化された $\mathbf{D}_q$ の固有ベクトル (principal direction) である。幾何学的には、$V\{\phi\}$ で決まる" 表面" 上で曲率が最小 ($\lambda_0(q)$) になる方向が gradient ベクトルの方向と一致する点を valley 上にあると定義するということになる。数値計算[3] の結果、valley 沿いの場のコンフィギュレーションはさまざまな大きさのバブルに対応しており、valley は鞍点（臨界核）を通ることがわかった。

上で定義された valley 上の集団自由度以外に、バブルの並進運動の自由度も場の自由度から分離する必要がある。バブルの中心座標を $s=(s_1,s_2,\cdots,s_d)$ と書き、ある時間 t におけるベクトル $\mid \phi(t) >$ を $Q(t) \equiv (q(t),\ s(t))$ で指定されるバブルのコンフィギュレーション $\mid \phi_{Q(t)} >$ の周りで展開すると

$$\mid \phi(t) >= \ \mid \phi_{Q(t)} > + \mid \xi(t) >, \quad ただし \quad < \boldsymbol{x} \mid \phi_Q >= \phi_q(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{s}) \tag{13}$$

[2] バブルの並進運動の自由度はここでは考慮に入れていない。次のセクションで議論に取り入れる。
[3] ϕ^4 ポテンシャルの場合のみ行ったが、結果自体はより一般的だとおもわれる [8]。

となる。これらの集団自由度は $\mathcal{F}$ 中のある多様体上の点を指定し、その単位接ベクトルは

$$|\,\phi_{Q,\,Q_\alpha}>\equiv B_\alpha^{-1}(q)\frac{\partial}{\partial Q_\alpha}\,|\,\phi_Q>\quad \text{ただし}\ \ \alpha=0,1,\cdots,d, \tag{14}$$

で与えられる。ここで、$(Q_0,Q_1,\cdots,Q_d)=(q,s_1,\cdots,s_d)$ とした。規格化定数 $B_\alpha(q)$ は s によらない。さらに、$\phi_Q(x)$ は $\mathrm{O}(d)$ 対称性を持つため$\partial/\partial s_\alpha\equiv-\partial/\partial x_\alpha$ なので $1\le\alpha\le d$ の $B_\alpha(q)$ は全て等価である。同じ理由から接ベクトル (14) はお互いに直交する。

次に、もとのデカルト座標系 $(\phi_1,\phi_2,\cdots)$ を valley に沿った、一般に曲がった座標系 $(q,s_1,\cdots,s_d,\xi_{d+1},\cdots)$ に変換する。式 (13) で Q を力学変数として見ると、ξ の自由度と一部重複していることになるので、Q の自由度を $|\,\xi>$ の中から取り除く必要がある。そのために $|\,\xi>$ を新たな基底 $|\,n;\ Q>$ で展開する：

$$|\,\xi>=\sum_{n=0}\xi_n\,|\,n;\ Q>,\quad \text{ただし}\quad |\,n;\ Q>=\mathbf{R}_Q\,|\,n;\ Q>_0\,. \tag{15}$$

ここで、$\mathbf{R}_Q$ は以下の性質を持つ回転行列である：

$$|\,\alpha;\ Q> \quad = \ |\,\phi_{Q,\,Q_\alpha}>, \tag{16}$$

$$<n;\ Q\,|\,\mathbf{D}_Q\,|\,m;\ Q> \quad =\omega_n^2(q)\delta_{n,m}, \tag{17}$$

$$<m;\ Q\,|\,\frac{\partial}{\partial Q_\alpha}\,|\,n;\ Q> \quad =0. \tag{18}$$

ただし、

$$m,n>d,\quad 0\le\alpha\le d. \tag{19}$$

式 (17) が成り立つのは式 (11) より $\mathbf{D}_Q$ が対称行列なので、下から $d+1$ 番目のモード (16) までを取り除いた行列も対称であり、故に $n>d$ の部分のみの回転で対角化可能である。条件 (18) は異なる q の座標系間の回転を最小にすることに相当し、新しい座標系で書かれた理論の表現を簡略にする。

経路積分 (5) に対してこの変数変換を実行するために以下の恒等式を考える:

$$1=\int\prod_{\alpha=0}^{d}dQ_\alpha\delta\big(<\phi_{Q,\,Q_\alpha}\,|\,(\,|\,\phi>-\,|\,\phi_Q>)\big)\Delta_Q, \tag{20}$$

ここで Δ_Q は Fadeev-Popov の行列式である；

$$\Delta_Q=\prod_{\alpha=0}^{d}B_\alpha(q)\Big(1+\mathcal{O}(\Big\|\,|\,\phi>-\,|\,\phi_Q>\Big\|)\Big). \tag{21}$$

先ず、式 (20) を経路積分のすべてのタイムスライスに挿入する。次に、式 (13) によって変数変換を行うことによって、デルタ関数の引数が $\xi_\alpha,\ 0\le\alpha\le d$ となる。従って、式 (20) の右辺は ξ_α を Q_α で置き換え、さらにこの変数変換の Jacobian を与える。ξ_α を積分して消去することによって経路積分が g と ε の最低次が (1) の形、つまり $q,s,\{\xi_n\}$ が正準量子化されている事に対応している [8]:

$$\prod_t\int\frac{dq(t)}{\sqrt{2\pi ig^2\Delta t/M(q(t))}}\frac{d^ds(t)}{\Big(\sqrt{2\pi ig^2\Delta t/\mu(q(t))}\Big)^d}\prod_{n>d}\frac{d\xi_n(t)}{\sqrt{2\pi ig^2\Delta t}}e^{\frac{i}{g^2}\int dtL} \tag{22}$$

ここで、Lagrangian L は [7]

$$L(q,s,\{\xi_n\}) = \frac{1}{2}M(q)\dot{q}^2 + \frac{1}{2}\mu(q)|\dot{s}|^2 - U_0(q) + \sum_{n>d}\frac{1}{2}(\dot{\xi}_n^2 - \omega_n^2(q)\xi_n^2) \tag{23}$$

で与えられ、$M(q)$ はバブルの成長に対する慣性質量、$\mu(q)$ は並進運動の慣性質量、そして $U_0(q)$ は valley 沿いのポテンシャルエネルギーである：

$$M(q) \quad = B_0^2(q), \tag{24}$$

$$\mu(q) \quad = B_\alpha^2(q) \quad \text{ただし} \quad 1 \le \alpha \le d, \tag{25}$$

$$U_0(q) \quad = V\{\phi_q(x-s)\} = V\{\phi_q(x)\}. \tag{26}$$

q と s がバブルの巨視的な運動を記述する集団自由度であり、$\{\xi_n\}$ はバブルの微視的な揺らぎを表す自由度、いわゆる環境である。この近似の範囲内では集団自由度と環境の自由度との間の相互作用は環境調和振動子の q によった固有振動数を通してのみ存在する。

4 単一バブルの量子力学

経路積分 (22) の s によった部分は厳密に積分でき、

$$(2\pi i g^2\Theta(t_{\rm fin}))^{-d/2}\exp\left(\frac{|s(t_{\rm fin}) - s(t_{\rm ini})|^2}{2ig^2\Theta(t_{\rm fin})}\right) \tag{27}$$

ただし、

$$\Theta(t) = \int_{t_{\rm ini}}^{t}\frac{d\tilde{t}}{\mu(q(\tilde{t}))} \tag{28}$$

となる。式 (27) は $q(t)$ の関数形によっているが、均一な媒質中での核形成を考えるうえでは確率振幅全体に係る定数と見ることができる。なぜなら初期状態（$t = t_{\rm ini}$ における波動汎関数）はバブルの中心 s にはよらず、さらに式 (27) を s について積分したものは 1 になるので、任意の時間における状態が s によらないことがわかる。

次に、$\{\xi_n\}$ あるいは環境の自由度を断熱近似を用いて消去することを考える。s によった部分を除いた有効 Lagrangian は二つの部分にわける事ができ、環境は各々のモードが独立した調和振動子として見ることができるので確率振幅は

$$\int \mathcal{D}q\exp\left(\frac{i}{g^2}\int dt L_{\rm sys}(q)\right)\prod_{n>d}\int\mathcal{D}\xi_n\exp\left(\frac{i}{g^2}\int dt L_{\rm env}^{(n)}(\xi_n;q)\right) \tag{29}$$

と書ける。集団自由度の特徴的時間が環境のそれ $(1/\omega_{d+1}(q))$ に比べて十分大きい断熱極限において[4] $t = t_{\rm ini}$ に環境が基底状態にあるとすると、環境の状態は変わらずに、q の時間発展は

$$\int \mathcal{D}q\exp\left(\frac{i}{g^2}\int dt L_{\rm adiabatic}(q)\right) \tag{30}$$

[4] ε が小さい極限と同等である事を示すことができる [8]。

で表される。ただし、Lagrangian は

$$L_{\mathrm{adiabatic}}(q) = \frac{1}{2}M(q)\dot{q}^2 - U_0(q) - \sum_n \varepsilon_0^{(n)}(q) \tag{31}$$

であり、q にたいするポテンシャルに環境の基底エネルギーが繰り込まれている。q のパラメタリゼーションは任意なので、バブルの半径 R と一致するようにとれば[5]、経路積分 (30) は $U_0(q)$ に対する量子補正を除いて (1) に等しい。

5 結論

半古典および断熱近似の成り立つ状況において、実スカラー場の理論 (2) から Lifshitz-Kagan 型の有効理論 (30) が導出されることが示された。この有効理論の意味するところは、量子核形成を "巨視的" 集団自由度 q があたかも微視的な粒子の座標のようにポテンシャル障壁をトンネルすると見る事ができるということである。つまり、上で用いた近似が成り立つ状況においては、たとえバブルが巨視的であろうともその振舞いは極めて量子的であり、この様な状況のもとで核形成が観察されたとすれば、それは巨視的に区別可能な量子状態の重ね合わせを見たことになる。

参考文献

[1] 佐藤武郎、森下将史、小方正史、物性研究 55 (1990) 271.

[2] T. Satoh, M. Morishita, S. Katoh, K. Hatakeyama and M. Takashima, Physica B197 (1994) 397.

[3] H.J. Maris, S. Balibar, and M.S. Pettersen, J. Low Temp. Phys. 93 (1993) 1069.

[4] I.M. Lifshitz and Yu. Kagan, Zh. Eksp. Teor. Fiz 62 (1972) 385 [Sov. Phys. - JETP 35 (1972) 206].

[5] T. Nakamura, Y. Kanno and S. Takagi, Phys. Rev. B51 (1995) 8446, and references therein.

[6] H. Aoyama and H. Kikuchi, Nucl. Phys. B369 (1992) 235.

[7] J.L. Gervais and A. Jevicki, Nucl. Phys. B110 (1976) 93.

[8] 中村卓史、博士論文 1997.

[5] 様々な異なる定義を考える事ができるが、薄膜極限では全てが一致する。