

General Properties between Canonical Correlation and the Independent-Oscillator Model on a Partial *-Algebra

廣川 真男 (日立製作所・基礎研究所)

1 序.

ここで扱う independent-oscillator (IO) モデルは, 1959年の Magalinskij の論文 [M59] に現れ, 1980年代には, Caldeira, Leggett[CL81]; Hakim, Ambegaokar[HA85]; Ford, Kac[FK87]; Grabert, Schramm, Ingold[GSI87] などの論文において, IO モデルは議論されている. Ford, Lewis そして O'Connell は 1988年に, 今まで物理で提案され, よく使われてきたモデルの物理的欠点を修正する手法に着目すると, 実は IO モデルが導き出されていることを発見した [FLO88]. そこで, ここでは IO モデルが持つ一般的かつ数学的特性を導き出す.

IO モデルは, 多数の独立した熱浴の粒子に囲まれた量子系の粒子のモデルである. そして, 熱浴の粒子はそれぞれ量子系の粒子に, あたかもバネでつながっているような感じである. その系のハミルトニアンは

$$H_{IO} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_{j=1}^{\infty} \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 (q_j - x)^2 \right] \quad (1)$$

で与えられる. ここで, x と p は, それぞれ量子系の粒子の質量 m を持った, 座標と運動量の演算子である. 一方, q_j と p_j は, それぞれ, 質量 m_j を持った熱浴の j 番目の粒子の座標と運動量の演算子である. もちろん, 通常の正準交換関係:

$$[x, p] = i\hbar, \quad [q_j, p_{j'}] = i\hbar \delta_{jj'} \quad (2)$$

がある. $V(x)$ は量子系の粒子に関する外場の力のポテンシャル・エネルギーである.

論文の中で Ford, Lewis と O'Connell は, 他の熱浴のモデルは一般に IO モデルと関係があることを示し, IO モデルが重宝なモデルであることを主張した [FLO88]. 彼らは, IO モデルのハミルトニアン H_{IO} から, 一般化された量子 Langevin 方程式:

$$\frac{d}{dt} p(t) + \int_{-\infty}^t ds \mu(t-s) \frac{p(s)}{m} + V'(x) = F(t) \quad (3)$$

が導きだされることを示した¹. ここで, プライム ' は x に関する導関数を示す. $F(t)$ は平均ゼロの, 演算子値のランダムな力で, その平均は記憶関数 $\mu(t)$ によって特徴付けられる: $F(t)$ の対称化積相関関数²は,

$$\frac{1}{2} \langle F(t)F(s) + F(s)F(t) \rangle_B = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \hbar m_j \omega_j^3 \coth(\hbar \omega_j / 2kT) \cos[\omega_j(t-s)] \quad (4)$$

¹この式は, 彼らの論文 [FLO88] にある (2.1) を運動量で記述したものである.

²久保亮五によって導入された相関関数で, 例えば, 戸田盛和・久保亮五編集: 岩波講座現代の物理学の基礎 5 「統計物理学」の p347 参照のこと.

で与えられ、 $F(t)$ の非同時時間の交換関係は、

$$[F(t), F(s)] = -i \sum_{j=1}^{\infty} \hbar m_j \omega_j^3 \sin[\omega_j(t-s)] \quad (5)$$

で与えられる。ここで、演算子 O に対して、 $\langle O \rangle_B$ は、

$$\langle O \rangle_B \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\text{tr}(O e^{-H_B/kT})}{\text{tr}(e^{-H_B/kT})} \quad (6)$$

を意味するが、このときに使われるハミルトニアン H_B は

$$H_B \stackrel{\text{def}}{=} \sum_j \left[\frac{1}{2m_j} p_j^2 + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 q_j^2 \right] \quad (7)$$

である。もちろん k は Boltzmann 定数で、 T は絶対温度である。

記憶関数の Fourier-Laplace 変換は、

$$[\mu](z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\infty} dt e^{itz} \mu(t) = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^{\infty} m_j \omega_j^2 \left[\frac{1}{z - \omega_j} + \frac{1}{z + \omega_j} \right] \quad (8)$$

が $\Im z > 0$ に対して成り立つ。

さらに、Li, Ford と O'Connell は、Monoliu と Kittel の Brown 運動の Langevin の理論における相関を調べた仕事 [MK79] を彼らの一般化された Langevin 方程式の観点から調べ、Monoliu と Kittel の仕事を一般化している [LFO93]。

このシンポジウムでは、有限体積の熱浴に接した平衡状態にある量子系の粒子を考える。以下、簡単のために Planck 定数を $\hbar = 1$ としておく。 $H_{q,p,s}$ を今考えている系を支配する任意のハミルトニアンで、 $e^{-\beta H_{q,p,s}}$ がトレース・クラス³の演算子とする。ここで $\beta \equiv 1/kT$ 。 $H_{q,p,s}$ は $H_{q,p,s} = p^2/2m + V(x) + H_{q,s} + H_{\text{int}}$ なる形を持つ、 $H_{q,s}$ は熱浴のハミルトニアンで、 H_{int} は量子系の粒子と熱浴との間の相互作用である。ここで、もちろん、 $H_{q,s} + H_{\text{int}}$ の形は分からないとする。運動量 p に対する、カノニカル相関関数⁴ $R_p(t_1, t_2)$ は

$$R_p(t_1, t_2) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\beta \text{tr}(e^{-\beta H_{q,p,s}})} \int_0^{\beta} d\lambda \text{tr} \left(e^{-(\beta-\lambda)H_{q,p,s}} e^{iH_{q,p,s}t_1} p e^{-iH_{q,p,s}t_1} e^{-\lambda H_{q,p,s}} e^{iH_{q,p,s}t_2} p e^{-iH_{q,p,s}t_2} \right)$$

で定義される。今回はまず、ある条件を満足する任意の p と $H_{q,p,s}$ に対して、Heisenberg 演算子 $p(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{iH_{q,p,s}t} p e^{-iH_{q,p,s}t}$ が⁵、量子揺動力 $I(t)$ を持った、(3) と似た形の量子 Langevin 方程式を満たすことを証明する（§2の主定理の中の (15) を参照のこと）。また、記憶関数 $\mu(t)$ が導いた Langevin 方程式の揺動 - 散逸定理とカノニカル相関関数 $R_p(t_1, t_2)$ を特徴付けること（§2の主定理の中の (17) と (18) を参照のこと）、そしてさらに、 $I(t)$ の対称化積相関関数が (4) と (5) と同様な表現を持つことを示す（§2の主定理の中の (19) と (20) を参照のこと）。

³ある Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の有界演算子 A がトレース・クラスとは、 \mathcal{H} の任意の完全正規直交基底 $\{\varphi_n\}_n$ に対して、

$\sum_n \langle \varphi_n, \sqrt{A^* A} \varphi_n \rangle < \infty$ となることである。

⁴久保亮五らによって導入された相関関数で、例えば、戸田盛和・久保亮五編集：岩波講座現代の物理学の基礎 5「統計物理学」の p333 参照のこと。この相関関数は、森肇の名も取って、久保・森内積、また、欧米では Bogoliubov 内積と呼ばれることもある。

2 結果.

まず, カノニカル相関関数と Liouville 空間を導入し, 主定理を説明するために少々一般的枠組から入る.

有限体積の熱浴に接した平衡状態にある量子系の粒子を考える. 従って, 系の状態空間が可分な無限次元 Hilbert 空間で与えられる. それを $\mathcal{F}_{q,p,s}$ と書くことにする. そして $\mathcal{F}_{q,p,s}$ の自然な内積を $(\cdot, \cdot)_{q,p,s}$ と表す.

今 x と p をそれぞれ量子系の粒子の質量 m を持った, 座標と運動量の演算子とする. 一方, q_j と p_j は, それぞれ, 質量 m_j を持った熱浴の j 番目の粒子の座標と運動量の演算子である. このとき座標と運動量の演算子の定義より正準交換関係 (2) を満たす. $V(x)$ は量子系の粒子に関する外場の力のポテンシャル・エネルギーである.

今考えている系に対して, 或ハミルトニアン $H_{q,p,s}$ が存在しているわけであるが, このハミルトニアンは $H_{q,p,s} = p^2/2m + V(x) + H_{q,s} + H_{\text{int}}$ で与えられる, ただし $H_{q,s}$ は熱浴のハミルトニアンを表し, H_{int} は量子系の粒子と熱浴の相互作用である. 先にも述べたように $H_{q,s} + H_{\text{int}}$ の形は分からない. 従って $H_{q,p,s}$ は非 2 次形式的かもしれない, しかし $\mathcal{F}_{q,p,s}$ 上に作用する自己共役演算子として実現さる. 今, 平衡系を考えているから,

$$(A.1) \quad e^{-\tau H_{q,p,s}} \text{ はトレース・クラス } (\tau \in (0, \beta)),$$

と仮定できる. この条件は, $H_{q,p,s}$ のスペクトルは純離散的で, $H_{q,p,s}$ の固有ベクトル $\{\varphi_n | n \in \mathbb{N}^*\}$ が $\mathcal{F}_{q,p,s}$ の完全正規直交基底となる, という事実をもたらす. ここで, $\mathbb{N}^* \stackrel{\text{def}}{=} \{0, 1, \dots\}$. $H_{q,p,s}$ の固有値 λ_n ($n \in \mathbb{N}^*$) を $H_{q,p,s}\varphi_n = \lambda_n\varphi_n$ かつ $0 \leq \lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \lambda_{n+1} \leq \dots \nearrow \infty$ のように表すことができる.

ハミルトニアン $H_{q,p,s}$ に対して, Liouville 空間 $\mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ を構成することができる. $\mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ は基本的に $\mathcal{F}_{q,p,s}$ に作用する適当な演算子の集合である. $\mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ には久保森内積

$$\langle A; B \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\beta Z(\beta)} \int_0^\beta d\lambda \text{tr}((e^{-(\beta-\lambda)H_{q,p,s}} A^*)^{-1} (e^{-\lambda H_{q,p,s}} B)^{-1}), \quad A, B \in \mathbf{T}(H_{q,p,s})$$

が導入されている. ここで, $\mathbf{T}(H_{q,p,s})$ は, 完備化して $\mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ を構成する前の適当な条件を満たす演算子より成る集合であり, $\|A\|_{H_{q,p,s}} \stackrel{\text{def}}{=} \langle A; A \rangle^{1/2}$ でノルムを定義しておく.

Heisenberg 演算子 $p(t) \equiv e^{iH_{q,p,s}t} p e^{-iH_{q,p,s}t}$ を導入するために, ハミルトニアン $H_{q,p,s}$ から決まる Liouville 演算子 $\mathcal{L}_{q,p,s}$ を定義しておく.

適当な演算子 A に対して, Liouville 演算子 $\mathcal{L}_{q,p,s}$ は交換子積 $\mathcal{L}_{q,p,s} A \stackrel{\text{def}}{=} [H_{q,p,s}, A] = H_{q,p,s} A - A H_{q,p,s}$ によって基本的に定義される⁵. このとき, Liouville 演算子 \mathcal{L} は $\mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ に作用する自己共役演算子となる [H93b, H94a, H95].

任意の $A \in \mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ に対して, A の Heisenberg 演算子 $A(t)$ は $\mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ 上で

$$A(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{i\mathcal{L}_{q,p,s}t} A$$

と与えられる. 全ての $A \in \mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ に対してではないが, 基本的に

$$e^{i\mathcal{L}_{q,p,s}t} A = e^{iH_{q,p,s}t} A e^{-iH_{q,p,s}t}$$

⁵ 正確には, この演算子の定義域を確定しなければならない. これは講演で触れる. また, Liouville 空間 $\mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ に適当な完全正規直交系を導入して, これを用いて Liouville 演算子 \mathcal{L} を定義する別の簡単な方法もあるが, これについても講演中に触れたい. [H93b, H95] を参照のこと.

となる⁶.

演算子 A に対して, カノニカル自己相関関数は,

$$R_A(t) \stackrel{\text{def}}{=} R_A(0, t) \equiv \langle A(0); A(t) \rangle$$

と定義される. そこで, 運動量演算子 p に対するカノニカル自己相関関数を $R_p(t)$ で表すことにする. ここで関数 $[R_p](z)$ ($z \in \mathbb{C}$ with $\Im z > 0$) を Fourier-Laplace 変換を用いて

$$[R_p](z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\infty dt e^{itz} R_p(t).$$

のように定義する.

$[R_p](z)$ の各極は, $H_{q,p,s}$ の二つの固有値の差でなければならないことが分かる. そこで, $[R_p](z)$ の正の極全体の集合を \mathbf{P}_+^R で表し, 負の極全体の集合を \mathbf{P}_-^R で表すことにする.

ここで, 技術的な理由により⁷,

$$(A.2) \quad \mathbf{P}_+^R = \{\varepsilon_k \mid k = 0, 1, \dots\} \text{ with } \inf_{k \in \mathbb{N}^*} (\varepsilon_{k+1} - \varepsilon_k) > 0$$

$$\text{さらに, } \mathbf{P}_-^R = \{\eta_k \mid k = 0, 1, \dots\} \text{ with } \inf_{k \in \mathbb{N}^*} (\eta_k - \eta_{k+1}) > 0$$

を仮定する.

さらに最後に残り二つの仮定を設ける:

$$(A.3) \quad p \in \mathbf{T}(H_{q,p,s}) \text{ で, } \sum_{k=0}^{\infty} \left(\lim_{z \rightarrow \varepsilon_k} \frac{1}{i} (z - \varepsilon_k) [R_p](z) \right) \varepsilon_k^2 < \infty, \quad \text{かつ,}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left(\lim_{z \rightarrow \eta_k} \frac{1}{i} (z - \eta_k) [R_p](z) \right) (-\eta_k)^2 < \infty.$$

$$(A.4) \quad \lim_{z \rightarrow 0; z \in \mathbb{C}^+} z [R_p](z) = 0, \quad \text{where } \mathbb{C}^+ \stackrel{\text{def}}{=} \{z \in \mathbb{C} \mid \Im z > 0\}.$$

ここで, よく知られた関係⁸ を使って, 対称化積相関関数を定義する.

任意の $R_A(t)$ ($A \in \mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$) に対して, $R_A(t)$ は連続で正定値故, Bochner の定理により, ただ一つの測度 Δ_A^{can} が存在して

$$R_A(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\omega} \Delta_A^{\text{can}}(d\omega)$$

となる. そこで, $A \in \mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ に対して対称化積相関関数 $S_A(t)$ を

$$S_A(t) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\omega} \beta E_\beta(\omega) \Delta_A^{\text{can}}(d\omega), \quad (9)$$

で定義する. ここで, $E_\beta(\omega)$ は, 絶対温度 $T = 1/k\beta$ での振動数 ω の調和振動子の平均エネルギーである:

$$E_\beta(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2} \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2}.$$

(今, $\hbar = 1$ と置いていたことに注意されたい.)

また, $A \in \mathbf{X}_c(H_{q,p,s})$ に対して, 応答関数 $P_A(t)$ を

$$P_A(t) \stackrel{\text{def}}{=} -\beta \frac{d}{dt} \langle A; A(t) \rangle \quad (10)$$

⁶[H93a, H93b, H94a] を参照のこと.

⁷ $[R_p](z)$ の極から集積点を除去したいためである.

⁸久保の論文 [K57] の Theorem 3 を参照のこと.

で定義しておく.

久保-森内積を持った Liouville 空間 $X_c(H_{q,p,s})$ とは別に, 通常の Liouville 空間 $X_\beta(H_{q,p,s})$ を得ることができる. $X_\beta(H_{q,p,s})$ の内積は,

$$\langle A|B \rangle \stackrel{\text{def}}{=} Z(\beta)^{-1} \text{tr} \left(\left\{ \left(A e^{-\beta H_{q,p,s}/2} \right)^{-1} \right\}^* \left\{ \left(B e^{-\beta H_{q,p,s}/2} \right)^{-1} \right\} \right) \quad (11)$$

で与えられる. このとき, やはり Liouville 演算子 $\mathcal{L}^{q,p,s}$ が $X_\beta(H_{q,p,s})$ に作用する自己共役演算子として定義される. そこで $X_\beta(H_{q,p,s})$ の要素となる Heisenberg 演算子 $e^{i\mathcal{L}^{q,p,s}t} A$ ($A \in X_\beta(H_{q,p,s})$) を $X_c(H_{q,p,s})$ の要素である Heisenberg 演算子 $A(t)$ と区別するために,

$$A[t] \stackrel{\text{def}}{=} e^{i\mathcal{L}^{q,p,s}t} A \quad (12)$$

と書くことにする. また, 以下, $Z(\beta)^{-1} \text{tr} \left(O e^{-\beta H_{q,p,s}} \right)$ を $\langle O \rangle$ で表すことにする.

もちろん, よく知られた関係は, 二つの Liouville 空間上の次の関係となる: もし A が $\mathcal{F}_{q,p,s}$ に作用する対称演算子で $A \in X_c(H_{q,p,s})$ かつ $A \in X_\beta(H_{q,p,s})$ ならば,

$$S_A(t) = \frac{1}{2} \langle AA[t] + A[t]A \rangle. \quad (13)$$

応答関数に関してもよく知られた関係は保存される: もし A が $\mathcal{F}_{q,p,s}$ に作用する対称演算子で $A \in X_c(H_{q,p,s})$ かつ $A \in X_\beta(H_{q,p,s})$ ならば,

$$P_A(t) = -i \langle [A, A[t]] \rangle. \quad (14)$$

主定理は,

THEOREM [H96]: ハミルトニアン $H_{q,p,s}$ と運動量の演算子 p が仮定 (A.1), (A.2), (A.3) そして (A.4) を満たすとせよ. すると, 関数 $[R_p](z)$ は複素平面上の有理型関数に拡張され, $[R_p]$ の正の零点全体の集合 $\{\omega_j\}_{j=1}^\infty$ は

$$\omega_j \in (\varepsilon_{j-1}, \varepsilon_j), \quad \varepsilon_j > 0, \quad j \in \mathbf{N}.$$

のように数え上げられる. IO モデルのハミルトニアンを

$$H_{IO} = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \sum_{j=1}^{\infty} \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 (q_j - x)^2 \right],$$

で与えることにせよ. ただし, m_j は

$$m_j = \frac{2mR_p(0)}{\omega_j^2 i [R_p]'(\omega_j)}$$

で与える. このとき, ある記憶関数 $\kappa_\tau(t)$ と量子揺動力 $I(t)$ が存在して, 運動量演算子の Heisenberg 演算子 $p(t)$ は Liouville 空間 $X_c(H_{q,p,s})$ 上で次の量子 Langevin 方程式を満たす:

$$\frac{d}{dt} p(t) + \lim_{\tau \uparrow t} \int_{-\infty}^{\tau} ds \kappa_\tau(t-s) \frac{p(s)}{m} = I(t). \quad (15)$$

さらに, 次の関係が成り立つ:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \kappa_\tau(t) = \mu(t), \quad t > 0, \quad (16)$$

揺動 - 散逸関係：

$$\frac{R_p(0)}{m} \mu(t) = \langle I(0); I(t) \rangle, \quad t \in \mathbf{R}, \quad (17)$$

$$\langle p; I(t) \rangle = 0, \quad t \in \mathbf{R},$$

そして

$$[R_p](z) = R_p(0) \frac{1}{-iz + [\mu](z)/m}, \quad z \in \mathbf{C} \setminus \{\omega_j\}_{j=1}^{\infty}, \quad (18)$$

ただし、ここで $\mu(t)$ は H_{IO} の記憶関数である.

さらに、 $I(t)$ の対称化積相関関数 $S_I(t)$ は

$$S_I(t) = \frac{1}{2kT} \sum_{j=1}^{\infty} m_j \omega_j^3 \coth\left(\frac{\omega_j}{2kT}\right) \cos(\omega_j t) \quad (19)$$

となり、応答関数 $P_I(t)$ は

$$P_I(t) = \frac{\beta R_p(0)}{m} \sum_{j=1}^{\infty} m_j \omega_j^3 \sin(\omega_j t) \quad (20)$$

となる.

REMARK: (3) と (15) の類似性, (13) を通して (4) と (19) の類似性, (14) を通して (5) と (20) の類似性に注意されたい. ただし、今 $\hbar = 1$ としていた.

参考文献

- [CL81] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **46**, 211 (1981)
- [FK87] G. W. Ford and M. Kac, J. Stat. Phys. **46**, 803 (1987)
- [FLO88] G. W. Ford, J. T. Lewis and R. F. O'Connell, Phys. Rev. A, **37**, 4419 (1988)
- [F75] D. Forster, *Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry and correlation functions*, (Benjamin, 1975)
- [GSI87] H. Grabert, P. Schramm and G. -L. Ingold, Phys. Rev. Lett. **58**, 1285 (1987)
- [HA85] V. Hakim and V. Ambegaokar, Phys. Rev. A, **32**, 423 (1985)
- [H93a] M. Hirokawa, Ann. Phys. (N.Y.), **223**, 1-36 (1993)
- [H93b] M. Hirokawa, Ann. Phys. (N.Y.), **224**, 301-340 (1993)
- [H94a] M. Hirokawa, Ann. Phys. (N.Y.), **229**, 354-383 (1994);
ERRATUM, Ann. Phys. **235**, 240-241 (1994)

- [H94b] M. Hirokawa, Ann. Phys. (N.Y.), **234**, 185-210 (1994)
- [H95] M. Hirokawa, “*An inverse problem for the rotating wave approximation and long-time behavior of the canonical correlation function in an infinite volume limit*,” (submitted in J. Math. Soc. Japan);
京都大学数理解析研究所講究録 **923**, p68-p86 (1995)
- [H96] M. Hirokawa, J. Math. Phys., **37**, 121-146 (1996)
- [K57] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan **12** 570 (1957)
- [LFO93] X. L. Li, G. W. Ford and R. F. O’Connell, Am. J. Phys. **61**, 924 (1993)
- [M59] V. B. Magalinskij, Sov. Phys. JETP, **36**, 1381 (1959)
- [MK79] A. Manoliu and C. Kittel, Am. J. Phys. **47**, 678 (1979)
- [M65a] H. Mori, Prog. Theo. Phys. **33**, 423 (1965)
- [M65b] H. Mori, Prog. Theo. Phys. **34**, 399 (1965)
- [O86] Y. Okabe, Hokkaido Mathematical Journal **15**, 163 (1986)