

Reconsideration of Mori's Theory of Generalized Brownian Motion and Its Application

廣川 真男

日立製作所 基礎研究所

For every system with a passably general Hamiltonian of a quantum harmonic oscillator coupled to infinitely many scalar bosons, we estimate Heisenberg pictures of the annihilation and creation operators, describing the quantum harmonic oscillator, from only data on the autocorrelation function of the operators such that the pictures restore their autocorrelation functions to original ones, by reconsidering Mori's theory of generalized Brownian motion. And we then investigate the Liouville space and Liouville operator associated with the estimation.

1 序.

以下の議論において, 無限個のスカラー・ボソンにカップリングした量子調和振動子の有限体積内での平衡系を扱う. 従って, ここで扱うモデルは, 熱浴中を通過させたレーザーを観測したときに考えられる「熱浴による振動と相互作用するレーザーの中のフォトン」,

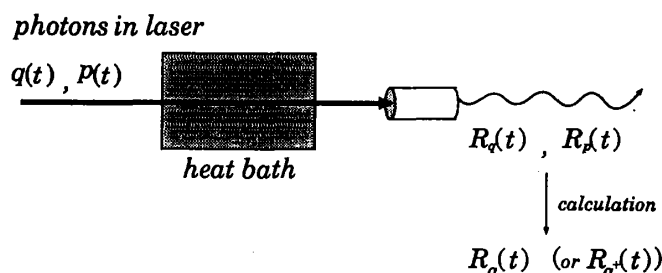


fig.1

そして, 材料表面上にレーザーを照射させたときに観測されるだろう「材料表面上のフォノンと相互作用するレーザーの中のフォトン」

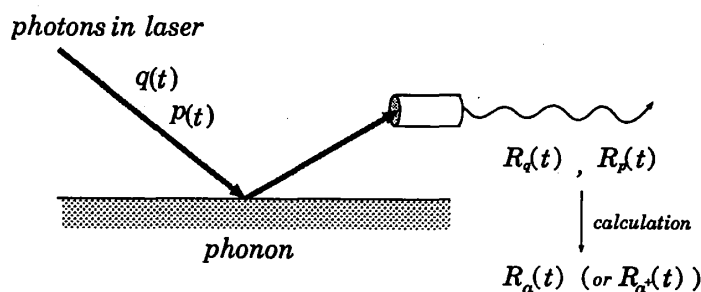


fig.2

等を想定できるのではないだろうか？(数学系の人間が想定しているだけであるので、専門家の御意見を伺いたいところではあるが.)

このような系に対して、その系を支配するハミルトニアン H が存在し、量子調和振動子を記述する消滅演算子 a と生成演算子 a^+ のハイゼンベルグ描像 $e^{iHt}ae^{-iHt}$ と $e^{iHt}a^+e^{-iHt}$ をそれぞれ考えることができる。ただし、ここでプランク定数を $\hbar = 1$ としておく。このとき、ここで扱う問題は次のように説明される：まず、今考えている系の演算子値のハミルトニアン H の形は分からないものとする。従って、2次でないハミルトニアンの可能性は排除されていない。また、今考えている系の量子調和振動子に対する消滅演算子（または、生成演算子）のカノニカル自己相関関数 $R_a(t)$ （または $R_{a^+}(t)$ ）, [1, 2, p. 96] を何らかの観測から計算できたとする。このとき、スカラー値のカノニカル自己相関関数 $R_a(t)$ （または $R_{a^+}(t)$ ）のデータのみから、演算子値のハミルトニアン H 及び消滅演算子と生成演算子のハイゼンベルグ描像を元々のカノニカル自己相関関数 $R_a(t)$ と $R_{a^+}(t)$ を同時に復元するように推定できるであろうか？

この小論では、有効な近似として良く知られる回転波近似 (RWA) [3, 4] という2次のハミルトニアン $H(x, y)$ を使って、ハミルトニアン H を推定してみる。この RWA は2次のハミルトニアンであるから、諸々の $R_a(t)$ と $R_{a^+}(t)$ に関する計算を1粒子の場合に帰着し簡単にするという利点がある [5, §V]：

$$H(x, y) \stackrel{\text{def}}{=} x_0 a^+ a + \sum_{k=1}^{\infty} x_k b_k^+ b_k + \sum_{k=1}^{\infty} (y_k a^+ b_k + y_k^* b_k^+ a), \quad (1)$$

$$x \stackrel{\text{def}}{=} (x_0, x_1, x_2, \dots), \quad y \stackrel{\text{def}}{=} (y_1, y_2, \dots).$$

ここで、 b_k と b_k^+ ($k \in \mathbb{N}$) は、それぞれ、無限個のスカラー・ボソンの消滅演算子と生成演算子を表し、 x_0 と x_k ($k \in \mathbb{N}$) は、それぞれ、量子調和振動子と無限個のスカラー・ボソンの正の振動数を表す。さらにカップリング・コンスタントは複素数 y_k ($k \in \mathbb{N}$) で表す。ただし、 c^* は $c \in \mathbb{C}$ の複素共役を意味する。

もし、まあまあ一般的なハミルトニアン H の推定を2次のハミルトニアン $H(x, y)$ によってする系統的数学的方法を知っていたなら、その方法は歓迎されるのではないだろうか？何故なら、良く知られた扱い易い $H(x, y)$ を使うだけでよいのだから。この小論で $H(x, y)$ の様々な性質を主張するつもりはない、逆に、むしろ $H(x, y)$ の様々な性質からの恩恵を受けることで、上で述べた推定の方法の一つの主張として述べたい。

この RWA に対して、相互作用の部分で演算子 $a^+ b_k^+$ と $a b_k$ が省ける理由は、次のように説明されると聞く：演算子 $a^+ b_k^+$ と $a b_k$ をフリー・パート $x_0 a^+ a + \sum_{k=1}^{\infty} x_k b_k^+ b_k$ の摂動とみたとき、それぞれの演算子 $a^+ b_k^+$ と $a b_k$ とに付随して、 $\exp[i(x_0 + x_k)]$ と $\exp[-i(x_0 + x_k)]$ なる振動を得る。もし $(x_0 + x_k)^{-1}$ の値が物理現象の実験の観測時間より十分短ければ、 $\exp[i(x_0 + x_k)]$ と $\exp[-i(x_0 + x_k)]$ なる振動によって生じる効果は実験観測に影響しない。従って、無視できない値 $|x_0 - x_k|^{-1}$ の影響をもたらす演算子 $a^+ b_k$ と $b_k^+ a$ の効果が残る。

(数学系の人間の頭で理解している話なので、是非、専門家の助言を頂きたいところでもあるが.)

ここで次の事実を注意しておく。今手元には $R_a(t)$ (もしくは $R_{a+}(t)$) のスカラーなデータのみ持っているとしているので、密度演算子を正確に把握するのは難しいと考えられる。また、 $R_a(t)$ (または $R_{a+}(t)$) のスカラーなデータのみしかないということにより、 b_k と $b_k^\dagger$ ($k \in \mathbb{N}$) の時間発展は、まるでノイズの振舞いのように推定されるであろう。結局、 $R_a(t)$ (もしくは $R_{a+}(t)$) のスカラーなデータのみしか持たない観測者は、相互作用ハミルトニアン演算子値の効果を正確に把握することはできないだろう。従って、推定されるべき系の密度演算子に対して相互作用項の形の推定から生じる不確実さを減らすために、手持ちのデータから推定できる密度演算子 $e^{-\beta H_0(x)}$ を使う。ここで β は絶対温度の逆数とした。

$$H_0(x) \stackrel{\text{def}}{=} x_0 a^\dagger a + \sum_{k=1}^{\infty} x_k b_k^\dagger b_k. \quad (2)$$

そこで、考えるべき問題を言い替えると、系のハミルトニアン H の形が分からないときに、カノニカル自己相関関数 $R_a(t)$ (または $R_{a+}(t)$) のスカラー値のデータのみを用いて元々の $R_a(t)$ と $R_{a+}(t)$ を復元するように、パラメータ x_0, x_k, y_k ($k \in \mathbb{N}$) を決定することができるか? という問題になる。すなわち、次の x, y そして c に関する方程式を解くことになる：

$$\begin{aligned} R_a(t) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{tr}(e^{-\beta H})} \int_0^\beta d\lambda \text{tr} \left(e^{-(\beta-\lambda)H} a^\dagger e^{-\lambda H} e^{iHt} a e^{-iHt} \right) \\ &= \frac{c}{\text{tr}(e^{-\beta H_0(x)})} \int_0^\beta d\lambda \text{tr} \left(e^{-(\beta-\lambda)H_0(x)} a^\dagger e^{-\lambda H_0(x)} e^{iH(x,y)t} a e^{-iH(x,y)t} \right) \\ R_{a+}(t) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{tr}(e^{-\beta H})} \int_0^\beta d\lambda \text{tr} \left(e^{-(\beta-\lambda)H} a e^{-\lambda H} e^{iHt} a^\dagger e^{-iHt} \right) \\ &= \frac{c}{\text{tr}(e^{-\beta H_0(x)})} \int_0^\beta d\lambda \text{tr} \left(e^{-(\beta-\lambda)H_0(x)} a e^{-\lambda H_0(x)} e^{iH(x,y)t} a^\dagger e^{-iH(x,y)t} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

次のことを注意しておく。もし (3) で $H_0(x)$ の代わりに $H(x, y)$ を使うと幾つかの難しい点が出てくる (§II の注意を参照のこと)。

さて、以上のように考えてくると次の問題に気が付く。ハイゼンベルグ描像 $e^{iHt} a e^{-iHt}$ と $e^{iHt} a^\dagger e^{-iHt}$ は、あるリューヴィル空間 [5, 6, 7, 8, 9, 10] の元として行動し、リューヴィル演算子 $\mathcal{L} \stackrel{\text{def}}{=} [H, \cdot]$ に対して $e^{i\mathcal{L}t} a = e^{iHt} a e^{-iHt}$ そして $e^{i\mathcal{L}t} a^\dagger = e^{iHt} a^\dagger e^{-iHt}$ となる。ハミルトニアン H を $H(x, y)$ で、密度演算子 $e^{-\beta H}$ を $e^{-\beta H_0(x)}$ で推定したときに、推定されたハイゼンベルグ描像 $e^{iH(x,y)t} a e^{-iH(x,y)t}$ と $e^{iH(x,y)t} a^\dagger e^{-iH(x,y)t}$ が属すべきリューヴィル空間、そして $[H(x, y), \cdot]$ で定義されるリューヴィル演算子は如何なるものか? この小論では、そのようなリューヴィル空間とリューヴィル演算子をも推定し、それらを正確に定義し数学的性質についてもふれる。

$R_a(t)$ (または $R_{a+}(t)$) のデータのみからハミルトニアンを推定しようとする試みは次のような理由による。一般的な解釈によると、実際の量子的物理現象に対して実験観測者が観測できるのは、観測量 (例えば、位置の演算子 $q = (a + a^+)/\sqrt{2}$ と運動量の演算子 $p = i(a - a^+)/\sqrt{2}$) の相関函数、だといわれる。今考えている問題は消滅演算子と生成演算子のハイゼンベルグ描像の推定であるので、観測量の相関函数から $R_a(t)$ または $R_{a+}(t)$ が計算できたところから出発する。(観測量自身についても議論することは可能である。観測量は数学的に自己共役性を持つので、ここで議論する結果より少々面白いものが得られるが、それについては次の機会にゆずる。) つまり、観測者の手元に得られる物理系のデータは、せいぜいスカラーな量である相関函数 $R_a(t)$ または $R_{a+}(t)$ であって、消滅演算子と生成演算子の演算子値のハイゼンベルグ描像を直接手にすることはできないし、ましてやその物理系の演算子値のハミルトニアン自身を直接手にすることはできないことになる。従って、ハミルトニアンを $R_a(t)$ (または $R_{a+}(t)$) から推定しようという試みは重要であろう。

この問題を解くために、森の一般化されたブラウン運動の理論 [11, 1, 12, 13] を再考する。そして、その結果を今考えている問題に適用してみる。RWA の相互作用を持った $H(x, y)$ で H を推定すると、 $H(x, y)$ の 2 次の形が森の理論の中の諸々の計算を簡単してくれる。それは、諸々の計算を 1 粒子のものに帰着してくれるからである [5, §V]。

統計物理の中の重要な仕事として、森の理論は、観測量のハイゼンベルグ描像の力学からブラウン運動のランジュヴァン方程式を抜き出すという問題に対する解答を与えるために展開された [11, 1]。その森のランジュヴァン方程式 (memory kernel equation という場合もある) は、彼の理論を記述し、時間発展、すなわち、時間描像を決定する。この方程式は、森の振動数、記憶函数、揺動項の三つのコンポーネントから成り、第 2 種揺動 - 散逸定理を導き出す。森のランジュヴァン方程式は、ハイゼンベルグの運動方程式を分解して得られるが、このことが今考えている問題を解くために価値を持つてくる。

著者は、[5, 10] において、カノニカル自己相関函数から森のランジュヴァン方程式を導き出す方法を示した。すなわち、[5, 10] では、消滅演算子や生成演算子のような各量子演算子に対して、そのカノニカル自己相関函数から森の振動数、記憶函数、揺動項を決定し表現する数学的方法が与えられている。三つのコンポーネントを実際に表現してみると、森の振動数と記憶函数は、カノニカル自己相関函数のみを用いて完全に記述できることが分かる。しかしながら、森の揺動項をカノニカル自己相関函数のみから決定することは難しいことが分かる [10, Theorem 5.7]。そこで、平均ゼロのガウス型の量子揺動力 [3] で、森の理論の中の次の二つの点が保存されるように、森の揺動項を推定してみる。その二つの点とは、時間発展の初期値と新しく推定された揺動項の間の直交性が成り立つことと、第 2 種揺動 - 散逸定理が元々の記憶函数と新しく推定された揺動項の間に成り立つことである。この時点で、推定された揺動力を揺動項とする修正された森のランジュヴァン方程式を得る。従ってその方程式を解くという行為の可能性が出てくる。実際、その方程式は解けて、解はハイゼンベルグ描像の形の表現を持ち、そのときのハミルトニアンは RWA の形で与えられる。すな

わち、この方程式を解く過程を通して、パラメータ x_0, x_k, y_k ($k \in \mathbb{N}$) が決まるのである。

ところで、おそらくここで紹介する方法は、オーソドックスなものには見えないかもしれないが、理論的なベースとなるものは妥当なものと理解されるのではないだろうか。それは、[14] の中にある量子化に関係した次の視点の中に見ることができる。量子力学を定式化するとき、シュレディンガー方程式から出発するのではなく、ハイゼンベルグの運動方程式に基礎を置く立場がある。すなわち、まず、いかなる正準座標も運動量も全く分からないとする。ハミルトニアン H についても言うまでもなく、その形は分からないとする。物理系を記述する変数を $A(t)$ で表そう、このとき $A(t)$ が正準座標かどうかは、当然分からない。このとき、ハイゼンベルグの運動方程式

$$\frac{d}{dt}A(t) = i[H, A(t)], \quad t \in \mathbb{R},$$

を解くことによって、ハミルトニアン H と $A(t)$ の量子演算子としての性質を同時に決めるのである。すなわち、考え方はハイゼンベルグの運動方程式から出発する量子化の視点であり、エネルギーと振動数との間のボーアの関係に基礎を置いている。この考え方をすることによって、森のランジュヴァン方程式を推定することはハイゼンベルグの運動方程式を推定することを意味するから、「この推定された運動方程式から出発すれば、ハミルトニアンを推定することができそうだな」と思うのは自然であろう。実際、このように試みると、その系の量子調和振動子を記述する消滅演算子と生成演算子の推定されたハイゼンベルグ描像を得る。さらに、系の推定されたハミルトニアンが RWA の形で得られるのである。しかも推定された消滅演算子と生成演算子のハイゼンベルグ描像のカノニカル自己相関関数が、元のカノニカル自己相関関数をそれぞれ復元するようにである。以上の事実が、その推定に付随するリューヴィル空間とリューヴィル演算子の様子とともに、定理 2.5 において数学の定理の形で証明される。これらの結果は森の理論の中で、2 次の形を持った回転波近似 (RWA) の理論的かつ数学的有效性を保証する。

2 主定理のステートメント.

この章では主定理の結果を説明する。この章の最初の部分、§2.1 は、[15, 16] に従ってフォック空間と、量子調和振動子と無限個のスカラー・ボソンの消滅演算子と生成演算子の数学的定義を述べる。従って、以上は物理で良く知られた道具が数学的に書かれて行くだけなので、この最初の部分をとばし、§2.2 で導入されるボゴリューボフ内積を持ったリューヴィル空間の定義の部分から読まれても構わない。

2.1 数学的準備.

複素ヒルベルト空間 $l^2(\mathbb{N})$ を

$$l^2(\mathbb{N}) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ (c_k; k \in \mathbb{N}) \in \mathbb{C}^{\mathbb{N}} \mid \sum_{k=1}^{\infty} |c_k|^2 < \infty \right\}$$

で与える. 各 $f \in C \oplus l^2(N)$ に対して, f を $(f_0, f_1, f_2, \dots)$ で表す, すなわち, $f = (f_0, f_1, f_2, \dots)$. ただし, ここで $f_0 \in C$ そして $(f_1, f_2, \dots) \in l^2(N)$. $C \oplus l^2(N)$ の内積 $(\cdot, \cdot)_l$ を $(f, g)_l \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{\infty} f_k^* g_k$ ($f, g \in C \oplus l^2(N)$) によって与える. ここで, c^* は $c \in C$ の複素共役を表す. $C \oplus l^2(N)$ 上の対称フォック空間を $\mathcal{F}_S(C \oplus l^2(N))$ で表すことにする. 対称フォック空間の定義は, $\mathcal{F}_S(C \oplus l^2(N)) \stackrel{\text{def}}{=} \bigoplus_{n=0}^{\infty} S_n(C \oplus l^2(N))^n$ で与えられるが, ここで各 $n \in N$ に対して, $S_n(C \oplus l^2(N))^n$ は, n 個の $C \oplus l^2(N)$ の対称テンソル積で, $S_0(C \oplus l^2(N))^0 \stackrel{\text{def}}{=} C$ と定義される ([15, p. 53, Example 2] 参照). さらに, 各 $n \in \{0\} \cup N$ に対し S_n によって $S_n(C \oplus l^2(N))^n$ 上への直交射影を表す ([15, p. 53, Example 2] 参照). 任意の $f \in C \oplus l^2(N)$ に対して, 線形演算子 $B^+(f) : S_n(C \oplus l^2(N))^n \rightarrow S_{n+1}(C \oplus l^2(N))^{n+1}$ を $B^+(f)\Psi \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{n+1} S_{n+1}(f \otimes \Psi)$ ($\Psi \in S_n(C \oplus l^2(N))^n$) で定義する. $\mathcal{F}_F(C \oplus l^2(N))$ をある $n_0 \in \{0\} \cup N$ が存在して $\Psi^{(n)} = 0$ ($n_0 \leq n$) となるような $\mathcal{F}_S(C \oplus l^2(N))$ の元 $\Psi = \{\Psi^{(n)}\}_{n=0}^{\infty}$ 全体の集合とする. $\mathcal{F}_F(C \oplus l^2(N))$ が $\mathcal{F}_S(C \oplus l^2(N))$ で稠密となることはよく知られている (例えば, [16, p. 68] 参照).

各 $f \in C \oplus l^2(N)$ に対して, $\mathcal{F}_F(C \oplus l^2(N))$ 上の線形演算子 $A^+(f)$ を $(A^+(f)\Psi)^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} B^+(f)\Psi^{(n-1)}$ ($n \in N$); $(A^+(f)\Psi)^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} 0$ ($n = 0$) で定義する. このとき, $A^+(f)$ は, その定義域が稠密になるように定義される. そこで, $A(f) \stackrel{\text{def}}{=} \overline{A^+(f)^* [\mathcal{F}_F(C \oplus l^2(N))]}$ とおく. ただし, $A^+(f)^*$ は $A^+(f)$ の共役演算子である. 演算子 $A^+(f)$ と $A(f)$ は $\mathcal{F}_F(C \oplus l^2(N))$ を不変にし, 次の正準交換関係を $\mathcal{F}_F(C \oplus l^2(N))$ 上で満たす:

$$\begin{cases} [A(f), A(g)] = 0 = [A^+(f), A^+(g)], \\ [A(f), A^+(g)] = (f, g)_l, \end{cases} \quad f, g \in C \oplus l^2(N) \quad (4)$$

ただし, $[A, B] \stackrel{\text{def}}{=} AB - BA$ とする.

$\{e_k | k \in \{0\} \cup N\}$ を $C \oplus l^2(N)$ の $e_k \stackrel{\text{def}}{=} (0, 0, \dots, 0, \underbrace{1}_{(k+1)\text{th}}, 0, \dots)$ で与えられる完全正規直交系とする. このとき, 量子調和振動子と無限個のスカラー・ボソンの消滅演算子と生成演算子が次のように定義できる:

$$\begin{cases} a \stackrel{\text{def}}{=} A(e_0), & a^+ \stackrel{\text{def}}{=} A^+(e_0), \\ b_k \stackrel{\text{def}}{=} A(e_k), & b_k^+ \stackrel{\text{def}}{=} A^+(e_k), \end{cases} \quad k \in N. \quad (5)$$

演算子 a と a^+ は, 物理的には, 量子調和振動子の, それぞれ, 消滅演算子と生成演算子を表し, 同様に, 演算子 b_k と b_k^+ ($k \in N$) は, 無限個のスカラー・ボソンの消滅演算子と生成演算子を表す.

2.2 リューヴィル空間.

以後簡単のため, 対称フォック空間 $\mathcal{F}_S(C \oplus l^2(N))$ を単に $\mathcal{F}$ と書くことにする, さらに, $\mathcal{F}$ の内積を $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{F}}$ と書くことにする. さて, ここで, 有限体積内にある無限個のスカラー・

ボソンの場にカップリングした量子調和振動子から成る、平衡状態にある系を考える。そして、その系は、形の分からないハミルトニアン $H = H(a, a^+; b_k, b_k^+, k \in \mathbb{N})$ によって支配されているとする。このハミルトニアン H は、フォック空間 $\mathcal{F}$ 上の自己共役演算子として実現される。今、平衡状態を想定している訳であるから、 H は $\mathcal{F}$ に作用する自己共役演算子で、各 $\tau \in (0, \beta]$ に対して $e^{-\tau H}$ がトレース・クラスの演算子（すなわち、任意の $\mathcal{F}$ の完全正規直交系 $\{\varphi_n\}$ に対して、 $\sum_n (\varphi_n, e^{-\tau H} \varphi_n)_{\mathcal{F}} < \infty$ となること、従って、 $e^{-\tau H}$ の固有値の総和が有限）になることを仮定する。ここで、 β は逆温度である。この仮定により、 H のスペクトルは純離散的（スペクトルは孤立点である固有値のみから成り、各固有値に対する固有空間の次元は有限である、つまり、縮退は起こっても有限）であり、 H の固有ベクトル全体 $\{|n\rangle | n \in \{0\} \cup \mathbb{N}\}$ は $\mathcal{F}$ の完全正規直交系になる。以後、 H の固有値 λ_n ($n \in \{0\} \cup \mathbb{N}$) を $H|n\rangle = \lambda_n|n\rangle$ で $0 \leq \lambda_n \leq \lambda_{n+1}$ であるように添字をとるとする。また、ここでさらに $\inf(\lambda_{n+1} - \lambda_n) > 0$ を仮定する。

ハミルトニアン H に対して $\mathcal{F}$ に作用する、ある量子演算子からなる集合を含むリューヴィル空間 $X_c(H)$ を構成することができる [5, 10, 17]。以下、その構成の仕方を説明する：集合 $\{|n\rangle | n \in \{0\} \cup \mathbb{N}\}$ の線形結合全体を $\mathbf{D}$ で表すことにする。すなわち、 $\mathbf{D} \stackrel{\text{def}}{=} \text{L.h.}[\{|n\rangle | n \in \{0\} \cup \mathbb{N}\}]$ 。以後、集合 S の線形結合全体を $\text{L.h.}[S]$ と書くことにする。明らかに、 $\mathbf{D}$ は $\mathcal{F}$ で稠密である。さらに、 $\mathbf{B}(\mathbf{D}, \mathcal{F})$ によって $\mathbf{D}$ から $\mathcal{F}$ への有界演算子全体を表す。 $\mathbf{B}(\mathbf{D}, \mathcal{F})$ の各元 A は、 $\mathcal{F}$ 上の有界演算子全体の集合 $\mathbf{B}(\mathcal{F})$ の中の元への唯一つの拡張を持つ。この A の拡張を A^- と書き、さらに、演算子 A^* の定義域を $\mathbf{D}$ に制限して得られる演算子 $A^*[\mathbf{D}]$ を A^+ で表すことにする。

さて、まず、量子演算子のクラス $\mathbf{T}(H)$ を定義する。このクラスは次の条件を満たす量子演算子 A 全体からなる集合である：

(T.1) 各演算子の定義域は $\mathbf{D}$ に等しく、各演算子の共役演算子の定義域は $\mathbf{D}$ を含む（すなわち、 $\mathbf{D}(A) = \mathbf{D}$ かつ $\mathbf{D}(A^*) \supset \mathbf{D}$ 、ここで $\mathbf{D}(B)$ は各演算子 B の定義域を表す）；

(T.2) 任意の $\tau \in (0, \beta]$ に対して、演算子 $e^{-\tau H} A$ と $A e^{-\tau H}$ は $\mathbf{B}(\mathbf{D}, \mathcal{F})$ に属し、さらに、演算子 $(e^{-\tau H} A)^-$ と $(A e^{-\tau H})^-$ は $\mathcal{F}$ 上のヒルベルト-シュミット型の演算子となる。ここで、演算子 B がヒルベルト-シュミット型であるとは、 $B^* B$ がトレース・クラスになることを言う。

ここで、演算子の非有界性に注意しなくてはならない。それは、フェルミオンのような有界演算子とボソンのような非有界演算子に対する観測量の測定精度の極限に違いがあることが知られているからである [18, 19, 20]。また、非有界演算子に対して、それらの定義域の問題は非常にデリケートである。従って、条件 (T.1) を設けた。条件 (T.2) はボゴリューボフ内積の収束に関するものである [5, 10, 2, p. 96]。

さらにここで, $\mathbf{T}(H)$ は線形空間になることを注意しておく. すると, ボゴリューボフ内積 $\langle \cdot; \cdot \rangle_H$ (もしくは, 久保 - 森内積とも言う) は,

$$\langle A; B \rangle_H \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\beta Z(\beta)} \int_0^\beta d\lambda \operatorname{tr}((e^{-(\beta-\lambda)H} A^*)^-(e^{-\lambda H} B)^-), \quad A, B \in \mathbf{T}(H), \quad (6)$$

のようにして導入される. ただし, $Z(\beta) \stackrel{\text{def}}{=} \operatorname{tr}(e^{-\beta H})$ である. $\langle \cdot; \cdot \rangle_H$ が $\mathbf{T}(H)$ の内積になることを示すのは簡単である [5]. この内積によってノルム $\|A\|_H \stackrel{\text{def}}{=} \langle A; A \rangle_H^{1/2}$ を導入しておく. このとき, $\mathbf{T}(H)$ をノルム $\|\cdot\|_H$ で完備化することで得たヒルベルト空間がリューヴィル空間 $\mathbf{X}_c(H)$ である. このとき, $\mathbf{X}_c(H)$ が partial $*$ -algebra with a unit [5, Proposition 3.14] になっていることを注意しておく. さらに, $\mathbf{X}_c(H)$ の元は必ずしも $\mathcal{F}$ に作用する演算子にならないことにも注意されたい. また, J. Naudts 等が KMS-状態を持ったフォン・ノイマン代数を完備化して構成したヒルベルト空間上で, 一般的な線形応答の理論の議論を行なっていることも注意しておく [21]. 同様にこの小論においても, ボゴリューボフ内積で完備化して構成したヒルベルト空間上, すなわちリューヴィル空間上で森の理論を扱う.

今, 任意の $\tau \in (0, \beta]$ に対して $e^{-\tau H}$ がトレース・クラスの演算子になるという条件の下で a, a^+, b_k , そして b_k^+ ($k \in \{0\} \cup \mathbf{N}$) で構成されるハミルトニアンによって支配される系を考えているので, $a \in \mathbf{T}(H)$ という仮定は自然であろう. そこで, この小論では, 消滅演算子 a は空間 $\mathbf{T}(H)$ に属すると仮定する:

(Assumption 1) $a \in \mathbf{T}(H)$.

あるクラスの演算子 A に対して, リューヴィル演算子 $\mathcal{L}$ を $\mathcal{L}A \stackrel{\text{def}}{=} [H, A]$ で定義することができる [5, Lemma 3.8]. このとき, リューヴィル演算子 $\mathcal{L}$ の定義域 $D(\mathcal{L})$ は, 稠密な部分空間 $\mathcal{D}$ を含むのだが, この $\mathcal{D}$ は, $\mathbf{T}(H)$ の元 A で, HA と AH が $\mathbf{T}(H)$ に属し, さらに, 任意の $x \in \mathcal{D}$ に対して $Ax, A^+x, HAx, HA^+x, AHx$, そして A^+Hx が $\mathcal{D}$ に属するような全ての A からなる集合である [5, Lemmas 3.7 and 3.8].

簡単な計算により,

$$\begin{cases} D(\Phi_{m,n}) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{D}, \\ \Phi_{m,n}|p\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \beta^{1/2} Z(\beta)^{1/2} W_{m,n}^{1/2} \langle n|p\rangle |m\rangle, \quad m, n, p \in \{0\} \cup \mathbf{N} \end{cases} \quad (7)$$

(ただし,

$$W_{m,n} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{\lambda_n - \lambda_m}{e^{-\beta\lambda_m} - e^{-\beta\lambda_n}} & \text{if } \lambda_m \neq \lambda_n, \\ \beta^{-1} e^{\beta\lambda_m} & \text{if } \lambda_m = \lambda_n. \end{cases} \quad (8)$$

で定義しておく) で与えられる線形演算子 $\Phi_{m,n} : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}$, $m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}$ は $\mathcal{L}$ の固有ベクトルになり, $\mathbf{X}_c(H)$ の完全正規直交基底をなし

$$\mathcal{L}\Phi_{m,n} = (\lambda_m - \lambda_n)\Phi_{m,n}, \quad m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}, \quad (9)$$

$$\Phi_{m,n}^+ = \Phi_{n,m}, \quad m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}, \quad (10)$$

$$\Phi_{m,n} \Phi_{k,l} = \beta^{1/2} Z(\beta)^{1/2} W_{k,l}^{1/2} W_{l,m}^{-1/2} W_{m,n}^{1/2} \delta_{nk} \Phi_{m,l}, \quad k, l, m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}, \quad (11)$$

なる性質を持つことが分かる. ここで, δ_{pq} はクロネッカーのデルタであり,

$$\Phi_{m,n}|p\rangle = \beta^{1/2} Z(\beta)^{1/2} W_{m,n}^{1/2} \delta_{np}|m\rangle, \quad m, n, p \in \{0\} \cup \mathbf{N} \quad (12)$$

[10, Proposition 3.9] となる. さらに,

$$W_{m,n} > 0, \quad m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}, \quad (13)$$

$$W_{m,n} = W_{n,m}, \quad m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N} \quad (14)$$

を注意しておく.

任意の $A \in \mathcal{D}$ と $t \in \mathbf{R}$ に対して, 時間発展 $A(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{i\mathcal{L}t} A$ はハイゼンベルグ描像 $e^{iHt} A e^{-iHt}$ に一致する [5, Proposition 3.13]. 完全正規直交基底 $\Phi_{m,n}$, ($m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}$) を用いることにより, リューヴィル演算子 $\mathcal{L}$ のスペクトル全体の集合は $\lambda_m - \lambda_n$ ($m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}$) から成る集合となる [10, Proposition 4.1], すなわち,

$$\sigma(\mathcal{L}) = \sigma_p(\mathcal{L}) = \{\lambda_m - \lambda_n \mid m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}\}, \quad (15)$$

ここで, 仮定 $\inf(\lambda_{n+1} - \lambda_n) > 0$ により, 今議論している場合では, スペクトルの集合 $\sigma(\mathcal{L})$ に集積点が無いことに注意されたい.

森の一般化されたブラウン運動の理論を消滅演算子 a が属するリューヴィル空間 $X_c(H)$ に適用することで, 時間発展 $a(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{i\mathcal{L}t} a$ ($t \in \mathbf{R}$) は, もし a がリューヴィル演算子 $\mathcal{L}$ の定義域に属しているならば (すなわち, $a \in D(\mathcal{L})$), 森のランジュヴァン方程式で与えられる. そこで, まず, a に対する森の振動数 ω_a そして揺動項 I_a を

$$\omega_a \stackrel{\text{def}}{=} -\langle a; \mathcal{L}a \rangle_H \langle a; a \rangle_H^{-1}, \quad (16)$$

(上の定義では, 森自身の振動数の定義と±の符号を変えている [11, 1])

$$I_a(t) \stackrel{\text{def}}{=} i e^{i\mathcal{L}_1 t} (1 - \Pi_0) \mathcal{L}a, \quad t \in \mathbf{R}, \quad (17)$$

で定義する. ただし, Π_0 は a が生成する閉部分空間 $X_c^a(H)$ 上への直交射影演算子である. すなわち, $\Pi_0 X_c(H) = X_c^a(H) \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\{\alpha a \in X_c(H) \mid \alpha \in \mathbf{C}\}}$ [5, 10]. ここで, $X_c(H)$ の部分空間 S の閉包を $\bar{S}$ と書いた. そして, $\mathcal{L}_1$ は, ヒルベルト空間 $(1 - \Pi_0)X_c(H)$ に作用する自己共役演算子で, $A \in D(\mathcal{L}_1) \stackrel{\text{def}}{=} D(\mathcal{L}) \cap (1 - \Pi_0)X_c(H)$ に対して $\mathcal{L}_1 A \stackrel{\text{def}}{=} (1 - \Pi_0) \mathcal{L}A$ で定義される [13].

ここで, もし $\mathcal{L}_1$ が点スペクトルのみを持つならば, $\mathcal{L}_1$ のスペクトルに関する性質が扱い易くなる.

そこで、この小論では次の条件を仮定しておく：

(Assumption 2) $(1 - \Pi_0)\mathcal{L}(1 - \Pi_0)$ は点スペクトルのみを持つ。

$a(t)$ に対する森のランジュヴァン方程式は、もし a が $D(\mathcal{L})$ に属していれば、次の形を持つ：

$$\frac{d}{dt}a(t) = -i\omega_a a(t) - \int_0^t ds \phi_a(t-s)a(s) + I_a(t), \quad t \in \mathbf{R}. \quad (18)$$

この方程式から、第2種揺動・散逸定理を使って与えられた森の記憶函数 $\phi_a(t)$ の存在が分かる。つまり、森の記憶函数 $\phi_a(t)$ は、森の揺動項 $I_a(t)$ の相関函数と第2種揺動・散逸定理で関係付けられる：

$$\langle a; a \rangle_H \phi_a(t) = \langle I_a(0); I_a(t) \rangle_H, \quad t \in \mathbf{R}, \quad (19)$$

そしてこのとき、 a と $I_a(t)$ ($t \in \mathbf{R}$) との間の直交性が成り立つ、すなわち、

$$\langle a; I_a(t) \rangle_H = 0, \quad t \in \mathbf{R}. \quad (20)$$

自己相関函数 $\langle a; a(t) \rangle_H$ を $R_a(t)$ で表すことにする。このとき、(18) と (20) から

$$\frac{d}{dt}R_a(t) = -i\omega_a R_a(t) - \int_0^t ds \phi_a(t-s)R_a(s), \quad t \in \mathbf{R} \quad (21)$$

が導かれる。

リユーヴィル空間 $X_c(H)$ を

$$X_c^+(H) \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\text{L.h.}[\{\Phi_{m,n} | \lambda_m > \lambda_n\}]}, \quad (22)$$

$$X_c^-(H) \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\text{L.h.}[\{\Phi_{m,n} | \lambda_m < \lambda_n\}]}, \quad (23)$$

$$X_c^0(H) \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\text{L.h.}[\{\Phi_{m,n} | \lambda_m = \lambda_n\}]}, \quad (24)$$

で定義される三つの閉部分空間 $X_c^\pm(H)$ そして $X_c^0(H)$ に分解しておく。すなわち、

$$X_c(H) = X_c^+(H) \oplus X_c^-(H) \oplus X_c^0(H) \quad (25)$$

となり、従って $X_c^+(H)$, $X_c^-(H)$, そして $X_c^0(H)$ 上への直交射影演算子 P_+ , P_- , そして P_0 をそれぞれ定義することができる。

ここで、新しい用語を用意しておく。一般に観測量は自己共役演算子とみなされる。量子調和振動子に関する観測量は、位置の演算子 $q \stackrel{\text{def}}{=} (a^+ + a)/\sqrt{2}$ や運動量の演算子 $p \stackrel{\text{def}}{=} i(a^+ - a)/\sqrt{2}$ がある。例えば、これらの位置の演算子 q と運動量の演算子 p が任意の $t \in \mathbf{R}$ に対して $\langle p; e^{i\mathcal{L}t} q \rangle_H = 0$ なる条件を満たせば、 $R_a(t)$ を $R_q(t) \stackrel{\text{def}}{=} \langle q; e^{i\mathcal{L}t} q \rangle_H$ と

$R_p(t) \stackrel{\text{def}}{=} \langle p; e^{i\mathcal{L}t} p \rangle_H$ から $R_a(t) = (R_q(t) + R_p(t))/2$ ($t \in \mathbf{R}$) のように求めることができる. $R_q(t)$ と $R_p(t)$ を観測し, $R_a(t)$ を計算するとき, 有限体積内の実験で得られる有限自由度をもった任意有限個のデータの極限として $R_q(t)$ や $R_p(t)$, そして, $R_a(t)$ を近似的に構成しなければならない. この過程を次のように表現してみよう.

まず, a_N ($N \in \mathbf{N}$) を $a_N \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{m,n=0}^N \langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H \Phi_{m,n}$ で定義する. $N \rightarrow \infty$ としたとき, $\mathbf{X}_c(H)$ において $a_N \rightarrow a$ となることは明らかである. いくつかのある観測量の自己相関関数から $R_a(t)$ が計算でき, $\lim_{N \rightarrow \infty} \ddot{R}_{a_N}(0)$ が存在するとき, $R_a(t)$ が観測により有限近似的な計算が可能ということにする. ただし, $R_{a_N}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \langle a_N; e^{i\mathcal{L}t} a_N \rangle_H$.

このとき, 消滅演算子 a に関して次の補題が示される.

補題 2.1. $R_a(t)$ が観測により有限近似的な計算が可能ならば, $\mathcal{L}a = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{L}a_N$ であり, 消滅演算子 a はリューヴィル演算子 $\mathcal{L}$ の定義域に属する. すなわち, $a \in D(\mathcal{L})$.

証明. 今 $\lim_{N \rightarrow \infty} \ddot{R}_{a_N}(0)$ とする. すると, $0 < \sum_{m,n} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 |\lambda_m - \lambda_n|^2 < \infty$ を得, これにより $\{\mathcal{L}a_N | N \in \mathbf{N}\}$ が $\mathbf{X}_c(H)$ の中のコーシー列になることが分かる. $\mathcal{L}$ は閉演算子であるから, $\mathcal{L}a = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{L}a_N$ と $a \in D(\mathcal{L})$ を得る.

Q.E.D.

ここで二つの函数 $[R_a](z)$ と $[\phi_a](z)$ ($z \in \mathbf{C}$ with $\Im z > 0$) を

$$[R_a](z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\infty dt e^{itz} R_a(t) \quad (26)$$

$$[\phi_a](z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\infty dt e^{itz} \phi_a(t) \quad (27)$$

によって定義しておく.

$R_a(t)$ のフーリエ-ラプラス変換の極が正であるか否かが, 消滅演算子が属するクラスを決める.

補題 2.2. $[R_a](z)$ の極が全て正ならば, 消滅演算子は $\mathcal{P}_-\mathbf{X}_c(H)$ に属する.

証明. 展開 $a = \sum_{m,n} \langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H \Phi_{m,n}$ により,

$$[R_a](z) = i \sum_{m,n} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 (z + \lambda_m - \lambda_n)^{-1}$$

を得る. 従って, 今 $[R_a](z)$ の極が全て正であると仮定されているから, $\lambda_m - \lambda_n \geq 0$ ならば $\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H = 0$ となる. すると $a \in \mathcal{P}_-\mathbf{X}_c(H)$ となる.

Q.E.D.

補題 2.2 により, もし $[R_a](z)$ の極が全て正ならば, 森の振動数 ω_a
 $= -\langle a; \mathcal{L}a \rangle_H \cdot \langle a; a \rangle_H^{-1}$ は正となる. このとき, 函数 $D_a(z)$ ($z \in \mathbf{C}$ with $\Im z > 0$) を

$$D_a(z) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{i\omega_a R_a(0)}{z[R_a](z) - iR_a(0)} \quad (28)$$

で定義する. もし $\lim_{z \rightarrow 0} D_a(z)$ が存在するならば, $D_a(0)$ を

$$D_a(0) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{z \rightarrow 0} D_a(z) \quad (29)$$

で定義しておく.

次に, $\lambda_m - \lambda_n \neq 0$ となる各 $\Phi_{m,n}$ が縮退していない場合に, 二つの事実 (**Fact a**) と (**Fact b**) を示す. ここで, (**Fact a**) と (**Fact b**) は, あるいくつかの $\Phi_{m,n}$ が縮退している場合にも示せることを注意しておく ([10] を参照).

最初に, 展開 $a = \sum_{m,n} \langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H \Phi_{m,n}$ を使って,

$$R_a(t) = \sum_{m,n} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 \exp[it\lambda_{m,n}] \quad (\lambda_{m,n} \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_m - \lambda_n)$$

を示すことができる. 従って,

$$z[R_a](z) - iR_a(0) = -i \sum_{m,n} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 \frac{\lambda_{m,n}}{z + \lambda_{m,n}}. \quad (30)$$

(21) のフーリエ - ラプラス変換をとることで,

$$[R_a](z) = \frac{R_a(0)}{i\omega_a - iz + [\phi_a](z)} \quad (31)$$

を得る. (28), (29), そして (31) から, 次の等式が成り立つことが分かる:

$$D_a(z) - D_a(0) = \frac{i\omega_a z}{[\phi_a](z) + \omega_a}. \quad (32)$$

(Assumption 2) で $\mathcal{L}\Pi_0$ の定義域は, $\Pi_0\mathcal{L}$ の定義域を含み, $\Pi_0\mathcal{L}$ の定義域の中の各 A に対して $\mathcal{L}\Pi_0 A = \Pi_0\mathcal{L}A$ であるから, よく知られた数学の事実から, $\mathcal{L}_1$ の固有ベクトル $\Psi_{m,n}$ ($m, n = 1, 2, \dots$) が存在して, $\mathcal{L}_1\Psi_{m,n} = \mu_{m,n}\Psi_{m,n}$ となる. ここでは, 縮退していない $\Psi_{m,n}$ ($m, n = 1, 2, \dots$) に対して証明を試みる. 縮退している場合にも証明は可能である ([10] 参照). 展開 $(1 - \Pi_0)\mathcal{L}a = \sum_{m,n} \langle \Psi_{m,n}; (1 - \Pi_0)\mathcal{L}a \rangle_H \Psi_{m,n}$ を使うと, $\phi_a(t) = \langle a; a \rangle_H^{-1} \sum_{m,n} |\langle \Psi_{m,n}; (1 - \Pi_0)\mathcal{L}a \rangle_H|^2 \exp[it\mu_{m,n}]$ を得る. 従って,

(**Fact a**) $D_a(z)$ と $[R_a](z)$ は, それぞれの極を除いて複素平面上に拡張可能である. そして, $D_a(z)$ の全ての零点からなる集合は, $[R_a](z)$ の全ての極からなる集合と等しい. さらに, ε が $[R_a](z)$ の極ならば, $\pm\varepsilon$ はリユーヴィル演算子 $\mathcal{L}$ の固有値である.

(**Fact b**) $\lim_{z \rightarrow 0} [R_a](z) \neq 0$ ならば, $[\phi_a](z)$ もまた, その極を除いて複素平面上に拡張される. そして, $z = 0$ を除いた $D_a(z) - D_a(0)$ の全ての零点からなる集合は, $[\phi_a](z)$ の全ての極からなる集合に等しい. さらに, γ が $[\phi_a](z)$ の極ならば, $-\gamma$ は射影されたリユーヴィル演算子 $\mathcal{L}_1$ の固有値である.

(Fact a) そして $\inf(\lambda_{n+1} - \lambda_n) > 0$ なる仮定により, $D_a(z)$ の零点全体の集合 (すなわち, $[R_a](z)$ の極全体の集合) を $\{\varepsilon_p > 0 | p = 0, 1, \dots\}$ で表し, $\varepsilon_p < \varepsilon_{p+1}$ となるようにとり, さらに, $z = 0$ を除く $D_a(z) - D_a(0)$ の零点全体の集合 (すなわち, $[\phi_a](z)$ の極全体の集合) を $\{\gamma_k | k = 1, 2, \dots\}$ で表し, $\gamma_k < \gamma_{k+1}$ としておくことができる.

次の補題を示すのは易しい.

補題 2.3. $R_a(t)$ が観測により有限近似的な計算が可能で, $[R_a](z)$ の極が全て正ならば, $\lim_{z \rightarrow 0} [R_a](z) \neq 0$ が存在する.

証明. 補題 2.1, 2.2 で示したように, 消滅演算子 a は $\mathcal{P}\text{-}\mathbf{X}_c(H) \cap \mathcal{D}(\mathcal{L})$ に属している. 今, $\inf(\lambda_{n+1} - \lambda_n) > 0$ なる仮定をしていたことを注意しておく. また, (Fact a) により, $\inf \{\lambda_n - \lambda_m | \langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H \neq 0\} = \varepsilon_0$ をも得る. 従って,

$$[R_a](z) = \sum_{m,n \text{ with } \lambda_m - \lambda_n < 0} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 \frac{1}{z + (\lambda_m - \lambda_n)}$$

を得る. (Fact a) に注意すれば,

$$\sum_{m,n \text{ with } \lambda_m - \lambda_n < 0} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 \left| \frac{1}{(\lambda_m - \lambda_n)} \right| \leq \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{m,n \text{ with } \lambda_m - \lambda_n < 0} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2$$

となる. この不等式とワイエルシュトラスのM-テストを使うと,

$$\lim_{z \rightarrow 0} [R_a](z) = \sum_{m,n \text{ with } \lambda_m - \lambda_n < 0} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 \frac{1}{(\lambda_m - \lambda_n)} \neq 0$$

を得る.

Q.E.D.

補題 2.3 により, もし $R_a(t)$ が観測により有限近似的な計算が可能で, $[R_a](z)$ の全ての極が正ならば,

$$D_a(0) = -\omega_a. \quad (33)$$

実は等式 $\omega_a = -D_a(0) \sum_{p=0}^{\infty} 1/D'_a(\varepsilon_p)$ が成り立つので ([10, Theorem 5.7]), $\sum_{p=0}^{\infty} 1/D'_a(\varepsilon_p) = 1$ となることを注意しておく.

ここで, $\lim_{z \rightarrow 0} [R_a](z) \neq 0$ で, $\lambda_m - \lambda_n \neq 0$ となる各 $\Phi_{m,n}$ が縮退していないという条件の下で, いくつかの表現を示しておく. (Fact a) により, 各 $\Phi_{m,n}$ に対して, ある ε_p が存在して $\lambda_{m,n} = -\varepsilon_p$ となる. 従って,

$$\begin{aligned} |\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 &= \lim_{z \rightarrow \varepsilon_p} \frac{1}{i} (z - \varepsilon_p) \int_0^{\infty} dt e^{itz} R_a(t) \\ &= R_a(0) \lim_{z \rightarrow \varepsilon_p} \frac{D_a(z) + \omega_a}{z} \times \frac{z - \varepsilon_p}{D_a(z) - D_a(\varepsilon_p)} = \omega_a R_a(0) \frac{1}{\varepsilon_p D'_a(\varepsilon_p)} > 0 \end{aligned} \quad (34)$$

を $D_a(z)$ の定義 (28) と (29), $D_a(\varepsilon_p) = 0$ となる事実, そして留数定理から得られる. 従って, (28), (29), (30), (34), そして $\lim_{z \rightarrow 0} [R_a](z) \neq 0$ 故 $D_a(0) = -\omega_a$ が成り立つことを基に,

$$D_a(z) = -\frac{iR_a(0)D_a(0)}{z \int_0^\infty dt e^{itz} R_a(t) - iR_a(0)} = \left(\sum_p \frac{1}{(z - \varepsilon_p) D'_a(\varepsilon_p)} \right)^{-1} \quad (35)$$

を得る. 方程式 (34) と $D_a(0) = -\omega_a$ は次の表現をもたらす:

$$R_a(t) = -R_a(0)D_a(0) \sum_p \exp[-it\varepsilon_p] \frac{1}{\varepsilon_p D'_a(\varepsilon_p)}. \quad (36)$$

(35) と (36) は縮退する $\Phi_{m,n}$ が存在しても証明することができることを注意する ([10] 参照).

(Fact b) によって, 各 $\Psi_{m,n}$ に対してある γ_k が存在して, $\mu_{m,n} = -\gamma_k$ が成り立つ. 従って, (34) と同様にして,

$$\begin{aligned} | \langle \Psi_{m,n}; (1 - \Pi_0) \mathcal{L}a \rangle_H |^2 &= \lim_{z \rightarrow \gamma_k} \frac{1}{i} (z - \gamma_k) \int_0^\infty dt e^{itz} \phi_a(t) \\ &= -D_a(0) \lim_{z \rightarrow \gamma_k} z \times \frac{z - \gamma_k}{(D_a(z) - D_a(0)) - (D_a(\gamma_k) - D_a(0))} = -D_a(0) \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} > 0 \end{aligned} \quad (37)$$

を (32) と $D_a(\gamma_k) - D_a(0) = 0$ であることから得る.

以下からの話しは, $R_a(t)$ は, 観測により有限近似的な計算が可能で, $[R_a](z)$ の極が全て正であるとする. すると, $a \in \mathcal{P}_- \mathbf{X}_c(H) \cap D(\mathcal{L})$ で, $\lim_{z \rightarrow 0} [R_a](z) \neq 0$, そしてさらに, $\mathcal{L}\Pi_0 \supset \Pi_0 \mathcal{L}$ であること (Assumption 2) を仮定する.

森の振動数 ω_a と記憶函数 $\phi_a(t)$ は次のような表現を持つ:

$$\omega_a = \frac{i\dot{R}_a(0)}{R_a(0)}, \quad (38)$$

$$\phi_a(t) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\omega_a \gamma_p}{D'_a(\gamma_p)} e^{-it\gamma_p}, \quad t \in \mathbf{R}. \quad (39)$$

ただし, ここで, 森の記憶函数は, $(1 - \Pi_0) \mathcal{L}a$ の展開と方程式 (37) を用いて得られる. さらに, [10, Theorem 5.7] から, 森のランジュヴァン方程式は $R_a(t)$ のデータを使って書き下す事ができる:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} a(t) &= iD_a(0) \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{D'_a(\varepsilon_p)} \cdot a(t) + D_a(0) \int_0^t ds \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\gamma_p}{D'_a(\gamma_p)} e^{-i(t-s)\gamma_p} a(s) \\ &\quad - iD_a(0) \sum_{p^*} \sum_{q_p^*} \langle \tilde{\Phi}(p^*, q_p^*); a \rangle_H \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \cdot \frac{1}{\gamma_k - \varepsilon_{p^*}} e^{-i\gamma_k t} \tilde{\Phi}(p^*, q_p^*). \end{aligned} \quad (40)$$

(40) において、森の揺動項 $I_a(t)$ は

$$I_a(t) = i\omega_a \sum_{p^*} \sum_{q_p^*} \langle \tilde{\Phi}(p^*, q_p^*); a \rangle_H \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \cdot \frac{1}{\gamma_k - \varepsilon_{p^*}} e^{-i\gamma_k t} \tilde{\Phi}(p^*, q_p^*), \quad (41)$$

で与えられている。ただし、 $\tilde{\Phi}(p^*, q_p^*)$ ($p^*, q_p^* \in \{0\} \cup \mathbb{N}$) をリューヴィル演算子 $\mathcal{L}$ の固有ベクトルで $\langle \tilde{\Phi}(p^*, q_p^*); a \rangle_H \neq 0$, $\mathcal{L}\tilde{\Phi}(p^*, q_p^*) = -\varepsilon_{p^*} \tilde{\Phi}(p^*, q_p^*)$ となるものを表すとする。 γ_k ($k \in \mathbb{N}$) を $\gamma_k \in (\varepsilon_{k-1}, \varepsilon_k)$ ($k \in \mathbb{N}$) となるように決めることができる [10, Proposition 5.4 (c)]。

式 (38) と (39) は完全に $R_a(t)$ のみの言葉で表現されている。従って、森の振動数と記憶関数は自己相関関数 $R_a(t)$ のみのデータを使って書き下すことができるのである。他方、式 (41) は、森の揺動項は $R_a(t)$ のみの言葉で表現することは難しいことを物語っている。それは、リューヴィル演算子 $\mathcal{L}$ の固有ベクトル $\tilde{\Phi}(p^*, q_p^*)$ ($p^*, q_p^* \in \{0\} \cup \mathbb{N}$) が使われ、今ハミルトニアン H の形が分からないのだから、当然、固有ベクトル $\tilde{\Phi}(p^*, q_p^*)$ ($p^*, q_p^* \in \{0\} \cup \mathbb{N}$) の形も知りようがないからである。

今、消滅演算子と生成演算子で記述される無限個のスカラー・ボソンの場にカップリングした量子調和振動子の系（つまり、 a と a^+ とで量子調和振動子、そして、 b_k と b_k^+ ($k \in \mathbb{N}$) とでスカラー・ボソンを表現していた）を扱っていたので、森の揺動項 $I_a(t)$ は、少なくとも b_k と b_k^+ に依っているであろう。従って、森の揺動項 $I_a(t)$ は、 b_k と b_k^+ ($k \in \mathbb{N}$) を変数の一部とする演算子値の関数であると言える。しかしながら、森の揺動項に b_k と b_k^+ がどのような影響をもたらすかは、今の手持ちの情報では正確に把握はできない。そこで、 $I_a(t)$ に対する b_k と b_k^+ の演算子値の効果を $I_a(t)$ と関係を持つある適当なスカラーな量で置き換えることを試みる。ここで、表現 (39) と第2種揺動・散逸定理 (19) を思い出そう。すると、 $I_a(t)$ に対する b_k と b_k^+ の演算子値の効果を振動数 $\gamma_k > 0$ を持ったスカラー・ボソンの振動と係数 $(\omega_a \gamma_k / D'_a(\gamma_k))^{1/2}$ ($k \in \mathbb{N}$) とで見積もることができるだろう。何故なら、第2種揺動・散逸定理 (19) から、森の揺動項の振動数とそれらの係数をそれぞれ $\gamma_k > 0$ と $(\omega_a \gamma_k / D'_a(\gamma_k))^{1/2}$ ($k \in \mathbb{N}$) とみなせそうだから。この $I_a(t)$ の推定は一種の森の揺動項の粗視化になるのかもしれない。このようにして、とにかく、推定された森の揺動項 $I_a^{[m]}(t)$ が

$$I_a^{[m]}(t) \stackrel{\text{def}}{=} -i \sum_{k=1}^{\infty} \exp[-it\gamma_k] \left(\omega_a \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \right)^{1/2} b_k, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (42)$$

のように得られた。

消滅演算子 a に関して、 $I_a(t)$ に対する b_k の演算子値の効果のみを考えることにする。生成演算子 a^+ に対して、推定された森の揺動項 $I_{a^+}^{[m]}(t)$ を $I_{a^+}^{[m]}(t) \stackrel{\text{def}}{=} (I_a^{[m]}(t))^+$ によって定義しておく。すると、

$$I_{a^+}^{[m]}(t) = i \sum_{k=1}^{\infty} \exp[it\gamma_k] \left(\omega_a \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \right)^{1/2} b_k^+, \quad t \in \mathbb{R} \quad (43)$$

を得る. これらの推定された森の揺動項を使って, 二本の修正された森のランジュヴァン方程式をそれぞれ a と a^+ に対してたてることができる:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}a_{[m]}(t) = -i\omega_a a_{[m]}(t) - \int_0^t ds \phi_a(t-s)a_{[m]}(s) + I_a^{[m]}(t), & t \in \mathbf{R}, \\ a_{[m]}(0) = a, \end{cases} \quad (44)$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}a_{[m]}^+(t) = i\omega_a a_{[m]}^+(t) - \int_0^t ds \phi_a^*(t-s)a_{[m]}^+(s) + I_{a^+}^{[m]}(t), & t \in \mathbf{R}, \\ a_{[m]}^+(0) = a^+, \end{cases} \quad (45)$$

ここで, $\phi_a^*(t)$ は $\phi_a(t)$ の複素共役を示す.

まずは, これらの新しい修正された森のランジュヴァン方程式を解かなければならない. そのために, 最初の仕事は, これらの修正された森のランジュヴァン方程式がどのリューヴィル空間で解かれるか? そのリューヴィル空間を決めなければならない. リューヴィル空間は, 推定された森の揺動項 $I_a(t)$ と $I_{a^+}(t)$ が平均 0 のガウス型量子揺動項 [3] とみなせるように導入してみる. つまり, そうすることによって, これからの計算を楽にしたい訳である.

注意. (3) において $H_0(x)$ の代わりに $H(x, y)$ を使ってみよう. すると, [5, (70), Theorem 5.3(e)] により, 次の x, y そして c に関する方程式を解かねばならない:

$$\begin{aligned} R_a(t) &= c\beta^{-1}(e_0, h^{-1}e^{-it\mathbf{h}}e_0)_{l^2} \\ &= c\beta^{-1} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{e^{-it\varepsilon_p(x,y)}}{\varepsilon_p(x,y)D'_{x,y}(\varepsilon_p(x,y))}. \end{aligned}$$

ここで, $\mathbf{h}$ は $\mathbf{C} \oplus l^2(\mathbf{N})$ に作用する自己共役演算子で

$$\begin{aligned} \mathbf{h} &\stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{h}_0 + (\gamma, \cdot)_{l^2} e_0 + (e_0, \cdot)_{l^2} \gamma, \\ \mathbf{h}_0 e_k &\stackrel{\text{def}}{=} x_k e_k, \quad k \in \{0\} \cup \mathbf{N}, \\ \gamma &\stackrel{\text{def}}{=} (0, y_1^*, y_2^*, \dots) \in \mathbf{C} \oplus l^2(\mathbf{N}), \end{aligned}$$

のように定義される. また, 函数 $D_{x,y}$ は,

$$D_{x,y}(z) \stackrel{\text{def}}{=} z - x_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|y_k|^2}{x_k - z}, \quad z \in \mathbf{C} \setminus \{x_1, x_2, \dots\}.$$

さらに, $\varepsilon_p(x, y) \in (x_p, x_{p+1})$ ($p \in \{0\} \cup \mathbf{N}$) は $D_{x,y}$ の全ての零点を表す. 一方, (36) により

$$R_a(t) = -R_a(0)D_a(0) \sum_{p=0}^{\infty} \frac{e^{-it\varepsilon_p}}{\varepsilon_p D'_a(\varepsilon_p)}$$

となる. 従って, 全ての $p \in \{0\} \cup \mathbf{N}$ に対して

$$\begin{cases} \varepsilon_p(x, y) = \varepsilon_p, \\ \beta R_a(0)D_a(0)\varepsilon_p(x, y)D'_{x,y}(\varepsilon_p(x, y)) = c\varepsilon_p D'_a(\varepsilon_p), \end{cases} \quad (46)$$

となるように x, y そして c を決めなければならない. しかしながら, (46) を $x = (x_0, x_1, x_2, \dots)$, $y = (y_1, y_2, \dots)$ と c について解くことは容易ではないだろう.

従って、§1の序の中で述べた方針に従って、消滅演算子と生成演算子のハイゼンベルグ描像、そしてハミルトニアンを推定し、さらにそのときのリューヴィル空間とリューヴィル演算子を調べて行く。

そこで、まず、

$$H_0^{[m]} \stackrel{\text{def}}{=} \omega_a a^+ a + \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k b_k^+ b_k \quad (47)$$

で定義して新しい自由ハミルトニアンを $H_0^{[m]}$ で推定する。つまり、 $H_0^{[m]} = H_0(\omega)$, $\omega = (\omega_a, \gamma_1, \gamma_2, \dots)$ 。この $H_0^{[m]}$ に関して次の補題を得る。

補題 2.4. 新しい自由ハミルトニアン $H_0^{[m]}$ は、フォック空間 $\mathcal{F}$ に作用する自己共役演算子として定義される。さらに、もし $\prod_{p=0}^{\infty} (1 - \exp[-\tau \varepsilon_p])^{-1}$ が各 $\tau \in (0, \beta]$ に対して成り立つならば、演算子 $e^{-\tau H_0^{[m]}}$ はトレース・クラスの演算子になる。

証明. $H_0^{[m]}$ がフォック空間 $\mathcal{F}$ に作用する自己共役演算子として定義されることはよく知られている。例えば、その証明は [5, §. IV.] にある。 $\gamma_k \in (\varepsilon_{k-1}, \varepsilon_k)$ で $\varepsilon_k < \varepsilon_{k+1}$ のように γ_k を順番付けていたから [10, Proposition 5.4 (c)],

$$\prod_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 - \exp[-\tau \gamma_k]} \leq \prod_{p=0}^{\infty} \frac{1}{1 - \exp[-\tau \varepsilon_p]} < \infty, \quad \tau \in (0, \beta]$$

となる。これは、演算子 $e^{-\tau H_0^{[m]}}$ が各 $\tau \in (0, \beta]$ に対してトレース・クラスとなることを意味する。

Q.E.D.

補題 2.4 は、自由ハミルトニアン $H_0^{[m]}$ に対して、リューヴィル空間 $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ がちょうど $\mathbf{X}_c(H)$ のようにつくれることを保証するものである。修正された森のランジュヴァン方程式 (44) と (45) をこのリューヴィル空間 $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ の上で解く。

では次に、ここで RWA のポテンシャルを与えてみる。このポテンシャルはリューヴィル空間 $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ 上の修正された森のランジュヴァン方程式の推定された揺動項を反映するようにしたい。RWA のそのポテンシャル $H_I^{[m]}$ は

$$H_I^{[m]} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\omega_a \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \right)^{1/2} (a^+ b_k + b_k^+ a) \quad (48)$$

によって与えられる。[10, Propositions 2.8 (c) and 2.8 (e)] が $D_a(0) = -\omega_a$, そして

$$\frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} > 0, \quad k \in \mathbf{N}, \quad (49)$$

$$0 < \sum_{k=1}^{\infty} \left(-D_a(0) \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \right) < \infty \quad (50)$$

を保証するので、このポテンシャル $H_I^{[m]}$ は、フォック空間に作用する対称演算子になる ([5, §. IV]) .

最後に RWA の全ハミルトニアン $H_{\text{RWA}}^{[m]}$ を

$$\begin{aligned} H_{\text{RWA}}^{[m]} &\stackrel{\text{def}}{=} H_0^{[m]} + H_I^{[m]} \\ &= \omega_a a^+ a + \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k b_k^+ b_k + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\omega_a \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \right)^{1/2} (a^+ b_k + b_k^+ a) \end{aligned} \quad (51)$$

で定義する. すなわち, $H_{\text{RWA}}^{[m]} = H(\omega, \delta)$, $\delta = \left(\left(\omega_a \frac{\gamma_1}{D'_a(\gamma_1)} \right)^{1/2}, \left(\omega_a \frac{\gamma_2}{D'_a(\gamma_2)} \right)^{1/2}, \dots \right)$.

以上により、主定理のステートメントを語ることができる：

定理 2.5. 今、形の分からないハミルトニアン H に支配されている無限個のスカラー・ボソンの場にカップリングした量子調和振動子から成る任意の平衡状態にある量子系を考える. もし実験等で次の条件 (i), (ii), (iii) を満たす自己相関関数 $R_a(t)$ を何らかの実験的観測から計算したとしよう；

(i) $R_a(t)$ は観測により有限近似的な計算が可能,

(ii) $[R_a](z)$ の全ての極が正,

(iii) $\prod_{p=0}^{\infty} (1 - \exp[-\tau \varepsilon_p])^{-1} < \infty$ ($\tau \in (0, \beta]$) が成り立つ.

このとき、基本的に $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} \stackrel{\text{def}}{=} [H_{\text{RWA}}^{[m]}, \cdot]$ で定義される (正確な定義は (60)) リューヴィル演算子 $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}$ は $X_c(H_0^{[m]})$ 上の自己共役演算子と成り、消滅演算子 a のハイゼンベルグ描像は, $a_{[m]}(t) = e^{i\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}t} a = e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]}t} a e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]}t}$ のように推定され, $e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]}t} a e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]}t}$ は、修正された森のランジュヴァン方程式 (44) の $X_c(H_0^{[m]})$ 上での一つの解となり、そして次の再構成の関係式

$$\frac{R_a(t)}{\omega_a R_a(0)} = \frac{1}{\text{tr}(e^{-\beta H_0^{[m]}})} \int_0^{\beta} d\lambda \text{tr} \left(e^{-(\beta-\lambda)H_0^{[m]}} a^+ e^{-\lambda H_0^{[m]}} a_{[m]}(t) \right), \quad t \in \mathbf{R} \quad (52)$$

を満たす.

さらに、生成演算子 a^+ のハイゼンベルグ描像は $a_{[m]}^+(t) = e^{i\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}t} a^+ = e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]}t} a^+ e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]}t}$ のように推定され, $e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]}t} a^+ e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]}t}$ は、修正された森のランジュヴァン方程式 (45) の $X_c(H_0^{[m]})$ 上での一つの解となり、

$$\frac{R_{a^+}(t)}{\omega_a R_{a^+}(0)} = \frac{1}{\text{tr}(e^{-\beta H_0^{[m]}})} \int_0^{\beta} d\lambda \text{tr} \left(e^{-(\beta-\lambda)H_0^{[m]}} a e^{-\lambda H_0^{[m]}} a_{[m]}^+(t) \right), \quad t \in \mathbf{R} \quad (53)$$

なる再構成の関係式が成り立つ. ただし, $R_{a^+}(t)$ は元の生成演算子 a^+ の自己相関関数 $\langle a^+, a^+(t) \rangle_H$ である.

リューヴィル空間 $X_c(H)$ は $X_c(H_0^{[m]}) = X_c^{q.h.o.}(H_0^{[m]}) \oplus X_c^{s.b.}(H_0^{[m]})$ に同値である。

$$X_c(H_0^{[m]}) \cong X_c^{q.h.o.}(H_0^{[m]}) \oplus X_c^{s.b.}(H_0^{[m]}).$$

ただし, $X_c^{q.h.o.}(H_0^{[m]})$ は, a と a^+ が張る $X_c(H_0^{[m]})$ の部分空間で, $X_c^{s.b.}(H_0^{[m]})$ は $X_c^{q.h.o.}(H_0^{[m]})$ の直交補空間である. このとき,

$$\begin{aligned} a, a^+ &\in X_c^{q.h.o.}(H_0^{[m]}), \\ b_k, b_k^+, I_a^{[m]}(t), I_{a^+}^{[m]}(t) &\in X_c^{s.b.}(H_0^{[m]}), \quad k \in \mathbb{N} \end{aligned}$$

が成り立つ. すなわち, この推定を通して, リューヴィル空間は, 量子調和振動子から成る系 $X_c^{q.h.o.}(H_0^{[m]})$ とスカラー・ボソンから成る外力の系 $X_c^{s.b.}(H_0^{[m]})$ との直和とみなせ, このとき, $X_c^{q.h.o.}(H_0^{[m]})$ に及ぼす $X_c^{s.b.}(H_0^{[m]})$ の影響は, 基本的に $[H_I^{[m]}, \cdot]$ で定義される (正確な定義は (57)) リューヴィル演算子の摂動に支配され, そして, この二つの系は森の理論によってつながる.

定理 2.5 の結果は森の理論の中で, 2 次の形を持った回転波近似 (RWA) の理論的かつ数学的有效性を保証する. この定理 2.5 の証明は, この小論の最後に付けた APPENDIX もしくは [22] を見られたい. また, この小論で書いた結果の一般化は, [23] を見られたい.

3 結び.

定理 2.5 において, 各無限個のスカラー・ボソンにカップリングした量子調和振動子の系に対して, 量子調和振動子の消滅演算子の自己相関函数のデータのみから, 森の一般化されたブラウン運動の理論を再考することによって, 量子調和振動子を記述する消滅演算子と生成演算子のハイゼンベルグ描像を推定し, このとき, 推定されたハイゼンベルグ描像が元の自己相関函数を復元することを示した. 定理 2.5 は, [5, §VI. DISCUSSION] での結果の拡張であり, そして [10, §VI. DISCUSSION] の中で与えた問題 (i), (ii) そして (iii) に対する解答である.

この小論の観点から特に重要なことは, たとえ実際に系を支配しているハミルトニアン $H = H(a, a^+; b_k, b_k^+)$ の形が分からなくとも, 消滅演算子のカノニカル自己相関函数のデータのみから修正された森のランジュヴァン方程式 (44) と (45) をたてることができ, さらにそれらの解を与えることができる. しかも, それぞれの解は RWA で与えられたハミルトニアンに関するハイゼンベルグ描像で得られることである. そしてこの推定の精度の保証は定理 2.5 で示した再構成関係が行なう. すなわち, 無限個のスカラー・ボソンにカップリングした量子調和振動子に対して, 観測されたスカラー値の時間発展 (すなわち, カノニカル自己相関函数) のみから演算子値の時間発展が, 一種の粗視化を通して, ハイゼンベルグ描像の形で推定され得られることである.

この推定は次の事実に基づいていることに注意されたい. ある観測とそれに基づく $R_a(t)$ (もしくは $R_{a+}(t)$) の計算を通して, 実際のリューヴィル空間 $\mathbf{X}_c(H)$ は, 量子調和振動子から成る系とスカラー・ボソンから成る外力の系との直和とみなされる. そして, その二つの系は森の理論によって結び付けられている.

4 APPENDIX (主定理の証明).

In this section, we prove our main theorem. We assume that $R_a(t)$ is computable by finitely approximable observation, and all poles of $[R_a](z)$ are positive. We further assume that $\prod_{p=0}^{\infty} (1 - \exp[-\tau \varepsilon_p])^{-1} < \infty$ ($\tau \in (0, \beta]$) holds. Thus, we have $a \in \mathbf{X}_c^-(H) \cap D(\mathcal{L})$, and $\lim_{z \rightarrow 0} [R_a](z) \neq 0$, as well as $\mathcal{L}\Pi_0 \supset \Pi_0\mathcal{L}$ by (Assumption 2).

Let $\{|n^{(0)}\rangle \mid n \in \{0\} \cup \mathbf{N}\} \subset D(H_0^{[m]})$ be a complete orthonormal basis satisfying $H_0^{[m]}|n^{(0)}\rangle = \lambda_n^0|n^{(0)}\rangle$ with $0 \leq \lambda_n^0 \leq \lambda_{n+1}^0$. We set $\mathbf{D}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \text{L.h.}[\{|n^{(0)}\rangle \mid n \in \{0\} \cup \mathbf{N}\}]$.

We define linear operators $\Phi_{m,n}^0 : \mathbf{D}_0 \rightarrow \mathbf{D}_0, m, n \in \mathbf{N}^*$ by

$$\begin{cases} D(\Phi_{m,n}^0) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{D}_0, \\ \Phi_{m,n}^0 x \stackrel{\text{def}}{=} \beta^{1/2} Z(\beta)^{1/2} (W_{m,n}^0)^{1/2} \langle n^{(0)} | p^{(0)} \rangle |m^{(0)}\rangle, \quad m, n, p \in \{0\} \cup \mathbf{N}, \end{cases} \quad (54)$$

where

$$(W_{m,n}^0) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{\lambda_n^0 - \lambda_m^0}{e^{-\beta\lambda_m^0} - e^{-\beta\lambda_n^0}} & \text{if } \lambda_m^0 \neq \lambda_n^0, \\ \beta^{-1} e^{\beta\lambda_m^0} & \text{if } \lambda_m^0 = \lambda_n^0. \end{cases} \quad (55)$$

For certain operators A in $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$, we can define the Liouville operator $\mathcal{L}_0^{[m]}$ as $\mathcal{L}_0^{[m]} A \stackrel{\text{def}}{=} [H_0^{[m]}, A]$. Then we obtain the following lemma.

Lemma A.1. If $\prod_{p=0}^{\infty} (1 - \exp[-\tau \varepsilon_p])^{-1}$ holds for every $\tau \in (0, \beta]$, then the annihilation and creation operators a and a^+ belong to the Liouville space $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$, they also belong to $D(\mathcal{L}_0^{[m]})$, i.e., $a, a^+ \in D(\mathcal{L}_0^{[m]}) \subset \mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$.

We now define a linear operator $\mathcal{L}_I^{[m]}$ acting in $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ by

$$\begin{cases} D(\mathcal{L}_I^{[m]}) \stackrel{\text{def}}{=} \{A \in \mathbf{T}(H_0^{[m]}) \mid H_I^{[m]} A, H_I^{[m]} A^+ \in \mathbf{T}(H_0^{[m]})\}, \\ \mathcal{L}_I^{[m]} A \stackrel{\text{def}}{=} H_I^{[m]} A - (H_I^{[m]} A^+)^+, \quad A \in D(\mathcal{L}_I^{[m]}). \end{cases} \quad (56)$$

Since $(\Phi_{m,n}^0)^+ = \Phi_{n,m}^0$ by (10), and $\Phi_{m,n}^0$ can be extended to a unique bounded operator $(\Phi_{m,n}^0)^-$, we have $(H_I^{[m]} \Phi_{m,n}^0)^* \supset ((\Phi_{m,n}^0)^+)^- H_I^{[m]} = (\Phi_{n,m}^0)^- H_I^{[m]}$, which implies that $H_I^{[m]} \Phi_{m,n}^0$ satisfies condition (T.1). Moreover, equality (12) implies that $H_I^{[m]} \Phi_{m,n}^0$ satisfies condition (T.2). Thus, $H_I^{[m]} \Phi_{m,n}^0 \in \mathbf{T}(H_0^{[m]})$ and $H_I^{[m]} (\Phi_{m,n}^0)^+ = H_I^{[m]} \Phi_{n,m}^0 \in \mathbf{T}(H_0^{[m]})$ hold for each $m, n \in \{0\} \cup \mathbf{N}$. Therefore, we obtain $\Phi_{m,n}^0 \in D(\mathcal{L}_I^{[m]})$. By using this

fact and equality (12), we can prove that $\langle \Phi_{\mu,\nu}^0; \mathcal{L}_I^{[m]} \Phi_{m,n}^0 \rangle_{H_0^{[m]}} = \langle \mathcal{L}_I^{[m]} \Phi_{\mu,\nu}^0; \Phi_{m,n}^0 \rangle_{H_0^{[m]}}$. Thus, we have that $\mathcal{L}_I^{[m]}$ is symmetric. Here, we denote the closure of the linear hull of $\left\{ a/\|a\|_{H_0^{[m]}}, b_k/\|b_k\|_{H_0^{[m]}} \mid k = 1, 2, \dots \right\}$ by $\mathbf{Y}_c(H_0^{[m]})$. Let $\mathcal{P}_Y$ be the orthogonal projection onto $\mathbf{Y}_c(H_0^{[m]})$, and we define a linear operator $\mathcal{L}_I^{[m],-}$ acting in $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ by

$$\begin{cases} D(\mathcal{L}_I^{[m],-}) \stackrel{\text{def}}{=} D(\mathcal{L}_I^{[m]}), \\ \mathcal{L}_I^{[m],-} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{P}_Y^* \mathcal{L}_I^{[m]} \mathcal{P}_Y A, \quad A \in D(\mathcal{L}_I^{[m],-}). \end{cases} \quad (57)$$

Now, we suppose that $A \in \mathbf{Y}_c(H_0^{[m]})$. For each $M, N \in \mathbf{N}$ with $1 < M < N$, we can estimate $\|\mathcal{L}_I^{[m]}(A_N - A_M)\|_{H_0^{[m]}}^2$ as

$$\|\mathcal{L}_I^{[m]}(A_N - A_M)\|_{H_0^{[m]}}^2 \leq \sum_{k=M+1}^N \left| \left\langle \frac{b_k}{\|b_k\|_{H_0^{[m]}}}; A \right\rangle_{H_0^{[m]}} \right|^2 \cdot \sum_{k=M+1}^N \left(\omega_a(0) \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \right) \rightarrow 0$$

as $M \rightarrow \infty$, where we used equality (33) and inequality (50). The closedness of $\mathcal{L}_I^{[m]}$ implies that $A \in D(\mathcal{L}_I^{[m]})$ and $\mathcal{L}_I^{[m]}A = s\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{L}_I^{[m]}A_N \in \mathbf{Y}_c(H_0^{[m]})$; and we have $\mathcal{L}_I^{[m]}A = \mathcal{L}_I^{[m],-}A$. Therefore, we obtain that

$$\mathbf{Y}_c(H_0^{[m]}) \subset D(\mathcal{L}_I^{[m]}), \quad (58)$$

$$\mathcal{L}_I^{[m]}A = \mathcal{L}_I^{[m],-}A, \quad A \in \mathbf{Y}_c(H_0^{[m]}). \quad (59)$$

By (58), we have $\mathcal{L}_I^{[m],-} \subset (\mathcal{L}_I^{[m],-})^*$. By applying (59), we can show that $\mathcal{L}_I^{[m],-}$ can expand to a bounded symmetric operator on $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$. Then we denote the closure of $\mathcal{L}_I^{[m],-}$ by the same symbol. Now, we can define a Liouville operator $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}$ by a perturbation of $\mathcal{L}_0^{[m]}$ by $\mathcal{L}_I^{[m],-}$, i.e.,

$$\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}_0^{[m]} + \mathcal{L}_I^{[m],-}. \quad (60)$$

Expressions (58) and (59) can be used to prove the following:

$$\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}A = H_{\text{RWA}}^{[m]}A - AH_{\text{RWA}}^{[m]}[D_0] \quad (61)$$

for every $A \in \mathbf{Y}_c(H_0^{[m]})$. We note $a \in D(\mathcal{L}_0^{[m]})$ by Lemma A.1, so $a \in D(\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]})$ by (58). Therefore, we consider Mori's memory kernel equation for $e^{it\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}}a$ on $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$. Then by applying Mori's theory, with orthogonality among a, a^+, b_k, b_k^+ ($k \in \mathbf{N}$) in $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$, and expression (61), to a and $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}$, we can prove that Mori's memory kernel equation for $e^{it\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}}a$ on $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ is identical to (44). Namely, we define a new Mori's frequency, fluctuation and memory function with respect to the annihilation operator a in the Liouville

space $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ as

$$\omega_a^0 \stackrel{\text{def}}{=} -\langle a; \mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} a \rangle_{H_0^{[m]}} \cdot \langle a; a \rangle_{H_0^{[m]}}^{-1}, \quad (62)$$

$$I_a^0(t) \stackrel{\text{def}}{=} i e^{it\mathcal{L}_1^{[m]}} \mathcal{L}_1^{[m]} a, \quad t \in \mathbf{R}, \quad (63)$$

$$\phi_a^0(t) \stackrel{\text{def}}{=} \langle I_a^0(0); I_a^0(t) \rangle_{H_0^{[m]}} \cdot \langle a; a \rangle_{H_0^{[m]}}^{-1}, \quad t \in \mathbf{R}, \quad (64)$$

where

$$\begin{cases} D(\mathcal{L}_1^{[m]}) \stackrel{\text{def}}{=} (1 - \Pi_0^0) \mathbf{X}_c(H_0^{[m]}) \cap D(\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}), \\ \mathcal{L}_1^{[m]} x \stackrel{\text{def}}{=} (1 - \Pi_0^0) \mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} x, \quad x \in D(\mathcal{L}_1^{[m]}). \end{cases}$$

Here Π_0^0 denotes the orthogonal projection operator on the closed subspace of $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$, which is generated by a . Then, we have by Mori's theory

$$\frac{d}{dt} e^{it\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}} a = -i\omega_a^0 e^{it\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}} a - \int_0^t ds \phi_a^0(t-s) e^{is\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}} a + I_a^0(t), \quad t \in \mathbf{R}. \quad (65)$$

We note here the following facts. Using (61) and simple calculation yield results of calculations for $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} a$ and $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} b_k$. Then, since $a, b_1, b_2, \dots$ intersect each other orthogonally in $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$, $\mathcal{L}_1^{[m]} b_k = -\gamma_k b_k$ holds. Thus, we have $\omega_a^0 = -\langle a; \mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} a \rangle_{H_0^{[m]}} \langle a; a \rangle_{H_0^{[m]}}^{-1} = \omega_a$ by the definition of Mori's frequency for a and $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}$, and obtain that $I_a^{[m]}(t) = I_a^0(t) \in \mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ for all $t \in \mathbf{R}$. Therefore, we obtain that (44) is equal to (65), so that $e^{it\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]}} a$ is a solution of (44) on $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$. Since $a \in D(\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]})$, we obtain $e^{i\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} t} a = e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]} t} a e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]} t}$ by [10, Proposition 3.7]. Then, by taking the Fourier-Laplace transformation for $\langle a; e^{i\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} t} a \rangle_{H_0^{[m]}}$, and based on (44) and $\langle a; b_k \rangle_{H_0^{[m]}} = 0$ ($k \in \mathbf{N}$), we obtain for $z \in \mathbf{C}^+$

$$\int_0^\infty dt e^{itz} \langle a; e^{i\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} t} a \rangle_{H_0^{[m]}} = i \langle a; a \rangle_{H_0^{[m]}} \left\{ z - \omega_a - \sum_{k=1}^\infty \left(\omega_a \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \right) \frac{1}{z - \gamma_k} \right\}^{-1}.$$

By taking the Fourier-Laplace transformation for (21), we have

$$[R_a](z) = i R_a(0) \left\{ z - \omega_a - \sum_{k=1}^\infty \left(\omega_a \frac{\gamma_k}{D'_a(\gamma_k)} \right) \frac{1}{z - \gamma_k} \right\}^{-1}.$$

It is also easy to show that $\langle a; a \rangle_{H_0^{[m]}} = (\beta \omega_a)^{-1}$. Therefore, by (36) we get

$$[R_a](z) = i R_a(0) \omega_a \sum_{p=0}^\infty \frac{1}{\varepsilon_p(z - \varepsilon_p) D'_a(\varepsilon_p)} = R_a(0) \beta \omega_a^2 \int_0^\infty dt e^{itz} \langle a; e^{i\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} t} a \rangle_{H_0^{[m]}}.$$

The above expressions imply the relation (52).

We shall now prove the rest of our theorem. For instance, it is shown that $e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]} t} a^+ e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]} t}$ is a solution of (45) by considering the adjoint operator of $e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]} t} a e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]} t}$ and (44).

Furthermore, we keep in mind the following facts: The norm equalities which mean $\langle a; a \rangle_{H_0^{[m]}} = \langle a^+; a^+ \rangle_{H_0^{[m]}}$ and $\langle b_k; b_k \rangle_{H_0^{[m]}} = \langle b_k^+; b_k^+ \rangle_{H_0^{[m]}}$ ($k \in \mathbb{N}$), and the orthogonalities among a, a^+, b_k, b_k^+ ($k \in \mathbb{N}$) in $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$ hold. And we can calculate $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} a^+$ and $\mathcal{L}_{\text{RWA}}^{[m]} b_k^+$. These facts imply that Equation (45) holds.

Here we prove the following important lemma:

Lemma A.2.

- (a) For each $m, n \in \{0\} \cup \mathbb{N}$, $|\langle \Phi_{m,n}; a \rangle_H|^2 = |\langle \Phi_{n,m}; a^+ \rangle_H|^2$ holds.
- (b) The creation operator a^+ belongs to $\mathbf{X}_c^+(H)$.
- (c) For every $t \in \mathbb{R}$, $R_{a^+}(t) = R_a(-t)$.
- (d) For every $t \in \mathbb{R}$, $\dot{R}_{a^+}(t) = -\dot{R}_a(-t)$.

Since $e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]}t} a^+ e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]}t}$ is a solution of the modified Mori's memory kernel equation (45) on $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$, by (45) we have for $R_{a^+}^{[m]}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \langle a^+; e^{iH_{\text{RWA}}^{[m]}t} a^+ e^{-iH_{\text{RWA}}^{[m]}t} \rangle_{H_0^{[m]}}$

$$\frac{d}{dt} R_{a^+}^{[m]}(t) = i\omega_a R_{a^+}^{[m]}(t) - \int_0^t ds \phi_a^*(t-s) R_{a^+}^{[m]}(s). \quad (66)$$

By (21), and Lemma A.2, parts (c) and (d), we have

$$\frac{d}{dt} R_{a^+}(t) = i\omega_a R_{a^+}(t) + \int_0^{-t} ds \phi_a(-t-s) R_a(s) = i\omega_a R_{a^+}(t) - \int_0^t ds \phi_a(-(t-s)) R_{a^+}(s)$$

Additionally, by (39), $D_a(0) = -\omega_a$, and (49), we get the fact of $\phi_a(-(t-s)) = \phi_a^*(t-s)$, so we have

$$\frac{d}{dt} R_{a^+}(t) = i\omega_a R_{a^+}(t) - \int_0^t ds \phi_a^*(t-s) R_{a^+}(s). \quad (67)$$

In the same way as $R_a(t)$, by using (66), (67), and $\langle a^+; a^+ \rangle_{H_0^{[m]}} = \langle a; a \rangle_{H_0^{[m]}} = (\beta\omega_a)^{-1}$, we obtain (53). The correspondence of $\Phi_{m,n}$ to $\Phi_{m,n}^0$ implies that $\mathbf{X}_c(H)$ is equivalent to $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$. And we note that a, a^+, b_k 's, and b_k^+ 's intersect orthogonally each other in $\mathbf{X}_c(H_0^{[m]})$. Hence it follows that the last part of the theorem holds. The above arguments imply the last part of our main theorem.

参考文献

- [1] H. Mori, *Prog. Theo. Phys.* **34**: 399 (1965)
- [2] O. Bratteli and D. W. Robinson, *Operator algebras and Quantum Statistical Mechanics II*, (Springer-Verlag, New York, 1981)
- [3] K. Lindenberg and J. West, *Phys. Rev. A*, **30**: 568 (1984)
- [4] I. Braun, *Physica*, **129A**: 262 (1985)

- [5] M. Hirokawa, *Ann. Phys.* **224**: 301 (1993)
- [6] U. Fano, *J. Mod. Phys.* **29**: 74 (1957)
- [7] J. A. Crawford, *Nuovo Cimento* **5**: 689 (1958)
- [8] M. Schutz, *Z. Phys.* **B30**: 97 (1978)
- [9] T. Arimitsu and H. Umezawa, *Prog. Theor. Phys.* **77**: 32 (1987)
- [10] M. Hirokawa, *Mori's memory kernel equation in equilibrium quantum systems in finite volumes*, *Ann. Phys.* (in press)
- [11] H. Mori, *Prog. Theo. Phys.* **33**: 423 (1965)
- [12] D. Forster, *Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry and correlation functions*, (Benjamin, 1975)
- [13] Y. Okabe, *Hokkaido Mathematical Journal* **15**: 163 (1986)
- [14] 高橋 康, 物性研究者のための 場の量子論 I, (培風館, 1984)
- [15] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics Vol.I: Functional Analysis*, (Academic Press, New York, 1972)
- [16] 江沢 洋, 新井 朝雄, 場の量子論と統計物理, (日本評論社, 1988)
- [17] M. Hirokawa, *Ann. Phys.* **223**: 1 (1993)
- [18] H. Araki and M. Yanase, *Phys. Rev.* **120**: 622 (1960)
- [19] M. Ozawa, *Phys. Rev. Lett.* **67**: 1956 (1991)
- [20] H. Ezawa, in *Quantum Control and Measurement*, edited by H. Ezawa and Y. Murayama, (North-Holland, Amsterdam, 1993)
- [21] J. Naudts, A. Verbeure and R. Weder, *Comm. Math. Phys.* **44**: 87 (1975)
- [22] M. Hirokawa, *A method of estimating the Heisenberg picture of a quantum harmonic oscillator coupled to infinitely many scalar bosons from its autocorrelation function*, **ARL Research Report No.93-008**
- [23] M. Hirokawa, *A mathematical relation between the potential of the rotating wave approximation and an estimation of the fluctuation in Mori's theory*, (to appear in *Ann. Phys.*)