4P104

時間依存変分法における拘束条件の正則性

（室蘭工大）〇太田勝久

[1] 序 : 先に我々は拘束条件付きの時間依存変分法 (TDVP) の理論を展開し、量子力学系においても、古典力学に類似した拘束系力学系を構成出来ることを示した [1]。本発表では、さらに拘束条件により凍結される運動自由度に要請される２つの必要条件、すなわち 正規性条件 (Regularity Condition) と第２類性条件 (Second-class Condition) を示す。

[2] Regularity Condition - 凍結対象自由度が満たすべき静的条件 -

1. TDVP パラメータ拘束
実 TDVP パラメータ $\{\alpha_i(t)\}_{i=1,N}$ により波動関数の時間発展 $|\Psi(t,x)\rangle = |\Psi\,(\alpha(t),x)\rangle$ を記述する。そしてさらに $\{\alpha_i\}_{i=1,N}$ の関数である $\{f_a(\alpha)\}_{a=1,M}$ を用いた拘束条件を考える。

$$f_a \;\; := \;\; f_a(\alpha_1,\cdots,\alpha_N) \; = \; 0, \qquad (a=1,\cdots,M \; \leq \; N)\,. \tag{1}$$

これより、変分自由度 $\{\delta\alpha_i\}_{i=1,N}$ への拘束は

$$\delta f_a \;\; = \;\; \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial f_a}{\partial \alpha_i}\right) \delta\alpha_i \; = \; 0\,. \tag{2}$$

となる。そこでまず独立な拘束条件が M 次元であることからの要請として、古典力学での Regularity Condition[2] と同じく

$$Rank \left[\left.\left(\frac{\partial f_a}{\partial \alpha_i}\right)\right|_0 : (M\times N) \right] \;\; = \;\; Rank \left[\left.\left(\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{\alpha}}\right)\right|_0 \right] \; = \; M\,. \tag{3}$$

が要請される。ここで $|_0$ は拘束空間 ($\Sigma_0 \; := \; \{\alpha_i,\; (i=1,\cdots,N) \mid f_a(\alpha)=0,\;\; (a=1,\cdots,M)\}$) 上での値を示す。さらに TDVP では、対応する凍結空間を構成する接基底の独立性も新たに要請される。すなわち、局所接基底展開

$$|\delta\Psi_f\rangle \;\; = \;\; \sum_{a=1}^{M} \left.\left|\frac{\partial \Psi}{\partial f_a}\right\rangle\right|_0 \delta f_a \; = \; 0\,. \tag{4}$$

において、次式が新たな Regularity Condition として要請される。

$$Indep.\ Dim. \left[\left\{ \left.\left|\frac{\partial \Psi}{\partial f_a}\right\rangle\right|_0 \right\}_{a=1,M} \right] \;\; = \;\; M\,. \tag{5}$$

2. TDVP 期待値拘束

$$\xi_a(\alpha_1,\cdots,\alpha_N) \;\; := \;\; \left\langle \Psi(\alpha,x) \middle| \hat{\xi}_a \middle| \Psi(\alpha,x) \right\rangle \; = \; 0, \qquad (a=1,\cdots,M \; \leq \; N)\,. \tag{6}$$

では、その変分自由度への拘束は

$$\delta\xi_a \;\; = \sum_{i=1}^{N} \left.\left(\frac{\partial \xi_a}{\partial \alpha_i}\right)\right|_0 \delta\alpha_i = \sum_{i=1}^{N} \left[\left.\left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_i} \middle| \hat{\xi}_a \middle| \Psi \right\rangle\right|_0 + \left.\left\langle \Psi \middle| \hat{\xi}_a \middle| \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha_i} \right\rangle\right|_0 \right] \delta\alpha_i = \; 0\,. \tag{7}$$

となる。やはり独立な拘束条件が M 次元であることより

$$Rank\left[\left(\frac{\partial\xi_a}{\partial\alpha_i}\right)\bigg|_0 : (M\times N)\right] \;=\; Rank\left[\left(\frac{\boldsymbol{\partial\xi}}{\boldsymbol{\partial\alpha}}\right)\bigg|_0\right] = M\,. \tag{8}$$

が Regularity Condition として要請される。ただし、Eq.(7) で拘束空間上の "固有値関係式"

$$\left(\left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}\middle|\hat{\xi}_a\middle|\Psi\right\rangle\bigg|_0 + \left\langle\Psi\middle|\hat{\xi}_a\middle|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}\right\rangle\bigg|_0\right) \;=\; 0, \quad for\ ^{\forall}i\,. \tag{9}$$

が成立する場合には、Eq.(6) は常に Irregular な拘束条件となる。

[3] Second-class Condition - 凍結対象自由度が満たすべき動的条件 -

The TDVP Lagrangian: $L := <\Psi(\alpha,x)|(i\hbar\partial_t - \hat{H})|\Psi(\alpha,x)>$ を用いた Euler's 方程式は、

$$\sum_{j=1}^{N}\sigma_{ij}\,\dot{\alpha}_j \;=\; \frac{\partial H(\alpha)}{\partial\alpha_i}, \qquad \sigma_{ij} \;:=\; i\hbar\left(\left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}\middle|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_j}\right\rangle - \left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_j}\middle|\frac{\partial\Psi}{\partial\alpha_i}\right\rangle\right). \tag{10}$$

これより Generalized Poisson bracket (GPB) は次式となる。

$$\{r,s\}_{\boldsymbol{\sigma}^{-1}} \;:=\; \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial r}{\partial\alpha_i}\left(\boldsymbol{\sigma}^{-1}\right)_{ij}\frac{\partial s}{\partial\alpha_j}\,. \tag{11}$$

1. Lagrange 未定乗数法により凍結自由度 $\{f_a(\alpha)=0\}_{a=1,M}$ を考慮すると、拡大ハミルトニアン $H_{EX}(\alpha) := H(\alpha)+\sum_{a=1}^{M}\lambda_a f_a(\alpha)$ を用いた拘束条件の整合性条件 [1] より

$$\boldsymbol{\lambda} \;=\; -\left(\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}\}_{\boldsymbol{\sigma}^{-1}}|_0\right)^{-1}\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{H}\}_{\boldsymbol{\sigma}^{-1}}|_0\,. \tag{12}$$

   従って、未定乗数 $\{\lambda_a\}_{a=1,M}$ が決定され得るような凍結自由度 $\{f_a(\alpha)=0\}_{a=1,M}$ では、それらの成す Poisson 括弧行列の正則性

$$Rank\left[\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}\}_{\boldsymbol{\sigma}^{-1}}|_0\right] \;=\; M\,. \tag{13}$$

   が Second-class Condition として要請される。

2. 特に TDVP パラメータ $\{z_i^*(t), z_i(t)\}_{i=1,n}$ $(N=2n)$ に関して解析的な試行関数 $|\Psi(z,x)\rangle$ による期待値拘束では、$C_{ij} = \left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial z_i}\middle|\frac{\partial\Psi}{\partial z_j}\right\rangle$ を用いた Complex generalized Poisson bracket (CGPB) で

$$\begin{aligned}\{\xi_a,\xi_b\}_{\boldsymbol{\sigma}^{-1}} &= \{<\Psi(z,x)|\hat{\xi}_a|\Psi(z,x)>, <\Psi(z,x)|\hat{\xi}_b|\Psi(z,x)>\}_{CGPB}\\ &:= \frac{1}{i\hbar}\sum_{i,j=1}^{n}\left[\frac{\partial<\Psi|\hat{\xi}_a|\Psi>}{\partial z_i}\left(\boldsymbol{C}^{-1}\right)_{ij}\frac{\partial<\Psi|\hat{\xi}_b|\Psi>}{\partial z_j^*} - \frac{\partial<\Psi|\hat{\xi}_a|\Psi>}{\partial z_i^*}\left[\left(\boldsymbol{C}^{-1}\right)^t\right]_{ij}\frac{\partial<\Psi|\hat{\xi}_b|\Psi>}{\partial z_j}\right]\\ &= \frac{1}{i\hbar}<\Psi|[\hat{\xi}_a,\hat{\xi}_b]|\Psi>\,.\end{aligned} \tag{14}$$

   が成立する。従って、波動関数 $|\Psi(z,x)\rangle$ が固有関数であるか否かに関わらず、可換演算子の期待値拘束間においては Second-class Condition を満たすことは出来ない。

[1] K. Ohta, Phys. Rev. **A70**, 022503 (2004), **A73**, 044502 (2006).

[2] M. H. Henneaux, C. Teitelboim, *Quantization of Gauge Systems* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1992).