

拘束条件付き時間依存変分法 － TDVP パラメータ表示における拘束条件の分類－

(室蘭工大) 太田 勝久

[1] 序：時間依存変分法 (TDVP) に拘束条件を導入した場合、Dirac 拘束系古典力学におけるのと類似の拘束条件の分類およびその取り扱いが可能である事を示した [1]。しかしながら、一般の近似波動関数における変分試行関数形においては、必ずしも exact 解と同等な拘束条件の分類がなされ得ない。本研究ではその場合に導入される新たな第 2 次拘束条件を示し、その処理法について示す。

[2] パラメータ表示 TDVP：

変分パラメータ $\{z_i(t), z_i^*(t)\}_{i=1,M}$ に関して解析的な TDVP 試行関数

$$|\Psi(z)\rangle = |\Psi(z_1, z_2, \dots, z_M)\rangle, \quad |\delta\Psi\rangle = \sum_{i=1}^M \delta z_i \left| \frac{\partial\Psi}{\partial z_i} \right\rangle, \quad (C)_{ij} = \left\langle \frac{\partial\Psi}{\partial z_i} \left| \frac{\partial\Psi}{\partial z_j} \right\rangle \quad (1)$$

を用い、互いに独立なエルミート拘束条件 $2L$ 個と規格化条件 ($M > 2L + 2$)

$$g_0(z, z^*) = \langle \Psi | \hat{1} | \Psi \rangle - 1 = 0, \quad g_i(z, z^*) = \langle \Psi | \hat{g}_i | \Psi \rangle = 0 \quad (i = 1, 2L) \quad (2)$$

を考える。すなわち、未定乗数 $\lambda_0(t), \{\lambda_i(t)\}_{i=1,2L}$ を用いて次の拘束系ハミルトニアンを導入する。

$$K = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle + \sum_{j=0}^{2L} \lambda_j g_j = \langle \Psi | \hat{H}' | \Psi \rangle + \lambda_0 g_0 \quad (3)$$

TDVP 定常作用原理から、任意のエルミート演算子 $\hat{A}$ の期待値の時間変化は

$$\frac{dA(z, z^*)}{dt} = \frac{d\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \{A, K\}_{GP} \quad (4)$$

と計算される。ここで一般化された Poisson 括弧として次式を用いた。

$$\{a, b\}_{GP} = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \left[\frac{\partial a}{\partial z_i} (C^{-1})_{ij} \frac{\partial b}{\partial z_j^*} - \frac{\partial b}{\partial z_i} (C^{-1})_{ij} \frac{\partial a}{\partial z_j^*} \right] \quad (5)$$

[3] 拘束条件の分類と未定乗数の決定：

1. 接基底系の局所完全性が成立する場合

今、接基底系 $\left\{ \left| \frac{\partial\Psi}{\partial z_i} \right\rangle \right\}_{i=1,M}$ が局所的に完全かつ独立であるとする

$$\sum_{i,j=1}^M \left| \frac{\partial\Psi}{\partial z_i} \right\rangle (C^{-1})_{ij} \left\langle \frac{\partial\Psi}{\partial z_j} \right| = \hat{1} \quad (6)$$

が成立し、任意のエルミート演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して、

$$\{\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle, \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle\}_{GP} = \langle \Psi | [\hat{A}, \hat{B}]_- | \Psi \rangle \quad (7)$$

となることが証明される。すなわち、拘束条件の第 1 類、第 2 類の分類結果は exact な Schrödinger 方程式での結果と等しくなる [1]。

2. 近似波動関数: 接基底系の局所完全性が成立しない場合 (第1類量の擬似的第2類化)

一般の第1類量、すなわちハミルトニアンおよび全ての拘束条件演算子と可換なエルミート演算子であっても、近似波動関数においてはその期待値は運動の恒数とは一般にならない。従って、新たな第2次拘束条件と共に擬似的に第2類拘束条件化して処理せねばならない。代表的な第1類量として、波動関数の規格化条件についてその処理法を述べる。

(a) 規格化条件の擬似的第2類化

規格化条件に対する未定乗数 λ_0 を導入したハミルトニアンは

$$K = \langle \Psi | \hat{H}' | \Psi \rangle + \lambda_0 g_0 \quad (8)$$

これより、規格化条件の時間変化は

$$\frac{dg_0(z, z^*)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \{g_0, K\}_{GP} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \langle \Psi | \hat{1} | \Psi \rangle, \langle \Psi | \hat{H}' | \Psi \rangle \right\}_{GP} \quad (9)$$

右辺は局所完全基底系を用いておれば、Eq.(7) から $[\hat{1}, \hat{H}']_- = \hat{0}$ となり恒等的にゼロとなる。しかしながら、近似波動関数においては Eq.(6) が一般に成立せず、右辺はノンゼロであり、Eq.(9) は新たな第2次拘束条件としてゼロ値に拘束されなければならない。すなわち、

$$h_0(z, z^*) = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \langle \Psi | \hat{1} | \Psi \rangle, \langle \Psi | \hat{H}' | \Psi \rangle \right\}_{GP} = 0 \quad (10)$$

従って、拘束系ハミルトニアンは

$$K = \langle \Psi | \hat{H}' | \Psi \rangle + \lambda_0 g_0 + \mu_0 h_0 \quad (11)$$

となり、整合性条件から未定乗数は以下のように決定される。

$$\lambda_0 = -\frac{\left\{ h_0, \langle \Psi | \hat{H}' | \Psi \rangle \right\}_{GP}}{\{h_0, g_0\}_{GP}}, \quad \mu_0 = 0 \quad (12)$$

(b) 一方、全体 (複素) 位相因子として独立な変分自由度 z_1 が分離される試行関数

$$|\Psi(z)\rangle = |\Psi(z_1, z_2, \dots, z_M)\rangle = z_1 |\Phi(z_2, \dots, z_M)\rangle \quad (13)$$

では、近似波動関数においても規格化条件の第1類性は保持される。すなわち任意のエルミート演算子 $\hat{A}$ について

$$\left\{ \langle \Psi | \hat{1} | \Psi \rangle, \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \right\}_{GP} = 0 \quad (14)$$

が恒等的に成立することが証明される。従って、規格化条件に対応する未定乗数 λ_0 は任意不定となり、

$$\lambda_0(t) = \Lambda(t) \quad (15)$$

というゲージ固定条件を導入して処理される。また Euler 方程式から $z_1(t)$ は

$$z_1(t) = \frac{1}{\sqrt{\langle \Phi | \Phi \rangle}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int^t \frac{\langle \Phi | \frac{i\hbar}{2} (\vec{\partial}_\tau - \overleftarrow{\partial}_\tau) - \hat{H} - \Lambda | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} d\tau \right] \quad (16)$$

と計算される。