

量子熱浴中の2準位系

July 2009, Y. Kayanuma

I. FEYNMAN の解きほぐし定理

一般に、時間に依存するハミルトニアン $H(t)$ により駆動される Schrödinger 方程式 (以下 $\hbar = 1$ とする)

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

の解を

$$|\psi(t)\rangle = \exp_+[-i \int_0^t H(\tau) d\tau] |\psi(0)\rangle \quad (2)$$

と表わす. (2) 式は time-ordered exponential $\exp_+[\dots]$ の定義を与えているだけ (すなわち (2) 式の右边が (1) 式の解であるということ) であって, (1) 式と (2) 式は全く等価である. time-ordered exponential は形式的摂動展開ができて

$$\exp_+[-i \int_0^t H(\tau) d\tau] = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^t d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1} \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 H(\tau_n) H(\tau_{n-1}) \cdots H(\tau_1) \quad (3)$$

とも書ける. この式は両辺を t で微分して, 両辺が同じ微分方程式を満たすことを示せばよいから簡単に証明できる.

また, (2) 式の Hermite 共役を

$$\langle \psi(t) | = \langle \psi(0) | \exp_-[i \int_0^t H(\tau) d\tau] \quad (4)$$

で表わす. $\exp_+[-i \int_0^t H(\tau) d\tau]$ はユニタリ演算子だから

$$\exp_-[i \int_0^t H(\tau) d\tau] = \{\exp_+[-i \int_0^t H(\tau) d\tau]\}^{-1}$$

が成り立つ.

いま, $H(t)$ が $H(t) = A(t) + B(t)$ と二つの項からなるとき, つぎの定理が成り立つ.

[Feynman's disentangling theorem]

$$\exp_+[-i \int_0^t \{A(\tau) + B(\tau)\} d\tau] = \exp_+[-i \int_0^t A(\tau) d\tau] \exp_+[-i \int_0^t \tilde{B}(\tau) d\tau] \quad (5)$$

ただし,

$$\tilde{B}(\tau) \equiv \exp_-[i \int_0^\tau A(\sigma) d\sigma] B(\tau) \exp_+[-i \int_0^\tau A(\sigma') d\sigma'] \quad (6)$$

である。証明は (5) の両辺を t で微分し、同じ Schrödinger 方程式 (と初期条件) を満足することを示せばよい。

解きほぐし定理は、必ずしも可換でない演算子 $A(t)$ と $B(t)$ の指数関数を「解きほぐして」くれるように見えるが、実際にはほとんど同値変形をしているに過ぎない。ただし、以下に示すように $\tilde{B}(\tau)$ が簡単な形で求まるときは役に立つ。

II. 有用な公式

A, B を非可換な演算子, $[A, B] = AB - BA$ とするとき, 次の 2 つの補題は重要である。
(補題 1) $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$ のとき, すなわち $[A, B]$ が A, B の空間で c -数とみなせるとき

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B]. \quad (7)$$

(証明) $f(t) = e^{tA} B e^{-tA}$ において, $f(t)$ が微分方程式 $df/dt = [A, B]$ と初期条件 $f(0) = B$ を満たすことから直ちに $e^A B e^{-A} = f(1) = B + [A, B]$ が従う。

(7) より

$$e^A e^B e^{-A} = e^{e^A B e^{-A}} = e^{[A, B]} e^B. \quad (8)$$

すなわち

$$e^A e^B = e^{[A, B]} e^B e^A. \quad (9)$$

また, Feynman の解きほぐし定理より

$$e^{A+B} = e^{\int_0^1 (A+B) dt} = e^A \exp_+ \left[\int_0^1 \tilde{B}(\tau) d\tau \right]. \quad (10)$$

ここで

$$\tilde{B}(\tau) = e^{-A\tau} B e^{A\tau} = B - [A, B]\tau$$

だから

$$e^{A+B} = e^{-\frac{1}{2}[A, B]} e^A e^B = e^{\frac{1}{2}[A, B]} e^B e^A. \quad (11)$$

(補題 2) c を c -数として, $[A, B] = cB$ のとき

$$e^A B e^{-A} = e^c B. \quad (12)$$

(証明) $f(t) = e^{tA} B e^{-tA}$ において $df/dt = cf(t)$ より $f(t) = e^{ct} B$. $t = 1$ において証明終わり。

(例) b^\dagger, b をボソンの生成・消滅演算子とする. 複素数 α に対して $U(\alpha) = e^{\alpha b^\dagger - \alpha^* b}$ とおけば $U(\alpha)^\dagger b U(\alpha) = b + \alpha$. ボソンの真空状態を $|0\rangle$ として $|\alpha\rangle \equiv U|0\rangle$ とすれば $b|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$. すなわち $|\alpha\rangle$ はコヒーレント状態である. また, (11) より

$$e^{\alpha b^\dagger - \alpha^* b} = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha b^\dagger} e^{-\alpha b}.$$

III. WICK の定理

$b_k^\dagger, b_k, (k = 1, 2, \dots, N)$ を独立なボソンの生成・消滅演算子とする. すなわち

$$[b_k, b_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}. \quad (13)$$

それ以外の組み合わせの交換子は 0. また, A_1, A_2, \dots, A_{2n} を

$$A_j = \sum_k \left(\alpha_k^{(j)} b_k + \beta_k^{(j)} b_k^\dagger \right) \quad (14)$$

で定義する. ただし $\alpha_k^{(j)}, \beta_k^{(j)}$ は任意の複素数.

$$[A_i, A_j] = (i, j) \quad (15)$$

とおけば, あきらかに (i, j) は c -数である. ハミルトニアン H を

$$H = \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k, \quad (16)$$

カノニカル平均を

$$\langle \dots \rangle = \text{Tr} \{ \dots e^{-\beta H} \} / \text{Tr} e^{-\beta H}, \quad \beta = 1/k_B T \quad (17)$$

とすれば次の定理が成り立つ.

[Wick の定理]

$$\langle A_1 A_2 \dots A_{2n} \rangle = \sum_{\text{allpairs}} \langle A_{j_1} A_{j_2} \rangle \dots \langle A_{j_{2n-1}} A_{j_{2n}} \rangle \quad (18)$$

ここで, \sum_{allpairs} はすべての可能な pair の組み合わせの積にわたる和を表わす. ただし, $j_{2m-1} < j_{2m}$ すなわち演算子の順序を変えない.

(証明)

$$\langle A_1 A_2 \dots A_{2n} \rangle = \sum_{j=2}^{2n} \langle A_1 A_j \rangle \langle A_2 \dots (j) \dots A_{2n} \rangle \quad (19)$$

を示せば十分である. ただし (j) は A_j の項が抜けていることを表わす. これを示すために (15) を用いて A_1 を右に移してゆけば (これを contraction をとるという)

$$\begin{aligned} \langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle &= (1, 2) \langle A_3 A_4 \cdots A_{2n} \rangle + (1, 3) \langle A_1 A_4 \cdots A_{2n} \rangle \\ &+ \cdots + (1, 2n) \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n-1} \rangle + \langle A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

ここでとくに $A_1 = b_k$ の場合を考えると「有用な公式」(12) より

$$e^{\beta H} b_k e^{-\beta H} = e^{-\beta \omega_k} b_k$$

だから

$$\langle A_2 A_3 \cdots A_{2n} A_1 \rangle = \langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle e^{-\beta \omega_k}. \quad (21)$$

よって

$$(1 - e^{-\beta \omega_k}) \langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle = \sum_{j=2}^{2n} (1, j) \langle A_2 A_3 \cdots (j) \cdots A_{2n} \rangle. \quad (22)$$

とくに

$$(1 - e^{-\beta \omega_k}) \langle A_1 A_j \rangle = (1, j)$$

だから

$$\frac{(1, j)}{1 - e^{-\beta \omega_k}} = \langle A_1 A_j \rangle. \quad (23)$$

よって

$$\langle A_1 A_2 \cdots A_{2n} \rangle = \sum_{j=2}^{2n} \langle A_1 A_j \rangle \langle A_2 \cdots (j) \cdots A_{2n} \rangle. \quad (24)$$

$A_1 = b_k^\dagger$ のときも, 同様に上式が示せる. 上式は A_1 について線形だから,

$$A_1 = \sum_k \left(\alpha_k^{(1)} b_k + \beta_k^{(1)} b_k^\dagger \right)$$

に対しても成立する. (証明終わり)

一般に (18) のような性質をもった統計変数を Gauss 型変数という. $1, 2, \dots$ が時系列を表わしているときに, この時系列を「確率過程」とよび, Gauss 型確率過程を Gauss 過程とよぶ. ボソンの量子性は順序を保つべしという要請に表わされている. ここではボソンについて Wick の定理を導いたが, フェルミオンについても類似が成り立つ.

Gauss 過程は, (18) に示されているように, 高次の相関関数が 2 次の相関関数のみの情報によって記述されるという重要な性質を持っている. 実際, 次の関係が成り立つ.

(補題) A_j を (14) のタイプの演算子とする. このとき

$$\left\langle \exp \left[\sum_{j=1}^N A_j \right] \right\rangle = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle A_i A_j \rangle \right]. \quad (25)$$

(証明) exponential を展開して期待値をとると, ゼロでないのは A_j の偶数次の項のみであるから

$$\begin{aligned} \left\langle \exp \left[\sum_{j=1}^N A_j \right] \right\rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_{2n}} \langle A_{i_1} A_{i_2} \cdots A_{i_{2n}} \rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_{2n}} \sum_{\text{allpairs}} \langle A_{i_m} A_{i_n} \rangle \end{aligned} \quad (26)$$

すべての pair の組み合わせからの寄与は同じだから, Z_n を $2n$ 個のものから n 個の pair を作る場合の数として

$$(26) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} Z_n \left(\sum_{i_1} \sum_{i_2} \langle A_{i_1} A_{i_2} \rangle \right)^n. \quad (27)$$

$Z_n = (2n)!/2^n n!$ を代入して, n について足し上げれば補題の結果を得る. (証明終わり)

IV. 量子摩擦の標準モデル

2 準位系 $|1\rangle, |2\rangle$ とフォノンの熱浴からなる系を考える.

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_I, \\ H_0 &= H_1 |1\rangle\langle 1| + H_2 |2\rangle\langle 2|, \\ H_I &= \Delta |2\rangle\langle 1| + \Delta^* |1\rangle\langle 2|. \end{aligned} \quad (28)$$

ここで H_1, H_2 はフォノンのハミルトニアンで, 次のように与えられるものとする ($\hbar = 1$).

$$H_1 = \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k, \quad (29)$$

$$H_2 = H_1 + \epsilon + V, \quad (30)$$

$$V = \sum_k \alpha_k \omega_k (b_k + b_k^\dagger). \quad (31)$$

Δ は $|1\rangle$ と $|2\rangle$ の間を結ぶ何らかの相互作用であるが, とりあえず定数としておく. ϵ は $|1\rangle$ と $|2\rangle$ のエネルギー差, V は $|1\rangle$ と $|2\rangle$ の電子状態の違いから来るフォノン系の安定配置の

ずれを表わす相互作用項, α_k は無次元の相互作用定数である. k に関する和は結晶の自由度 ($\approx 10^{22}$) ほどの基準振動にわたるものとする.

このタイプのハミルトニアンは, 光応答だけでなく, 様々な場面で遭遇する量子摩擦を表現する典型である. スピン-ボソンモデルともよばれる. 非対角相互作用 H_I によって電子系が遷移するときにフォノン系が位相の乱れとエネルギーの散逸を引き起こす. 次節で見ると, このモデルではフォノン系の応答は 2 次の相関関数

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle V(t)V(0) \rangle e^{i\omega t} dt \quad (32)$$

によって完全に規定されるというよい性質を持っている. ただし, $V(t)$ は V の Heisenberg 表示

$$V(t) = \exp(iH_1 t) V \exp(-iH_1 t)$$

$\langle \dots \rangle$ は密度行列 $\rho = \exp(-\beta H_1) / \text{Tr} \exp(-\beta H_1)$ によるカノニカル平均を表わす. $J(\omega)$ は相互作用のスペクトル密度関数とよばれる. II 節の (12) 式において, $A = iH_1 t$, $B = V$ とおけば

$$V(t) = \sum_k \alpha_k \omega_k (b_k e^{-i\omega_k t} + b_k^\dagger e^{i\omega_k t})$$

が出るから,

$$J(\omega) = \sum_k \alpha_k^2 \omega_k^2 [(n_k + 1)\delta(\omega - \omega_k) + n_k \delta(\omega + \omega_k)] \quad (33)$$

と求められる. ただし $n_k = 1 / \{\exp(\beta \omega_k) - 1\}$ はフォノンの数期待値である. とくに $T = 0$ では $J(\omega)$ は結合定数の重みをかけたフォノンの状態密度となる.

状態 $|1\rangle$ での熱平衡状態から $|2\rangle$ へ遷移したときのエネルギー散逸の大きさ ΔE は, $J(\omega)$ の -1 次モーメント

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) \omega^{-1} d\omega \quad (34)$$

で与えられる. $2\Delta E$ は光吸収と発光のピークエネルギーの差を与え, Stokes シフトとよばれる. また, フォノンによるエネルギー差の揺らぎの大きさ D は 0 次のモーメント

$$D^2 = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) d\omega \quad (35)$$

で与えられる. これは光吸収スペクトルの幅の目安となる. フォノン系との相互作用の大きさの目安は無次元量

$$S = \sum_k \alpha_k^2 \quad (36)$$

で与えられる。 S は Huang-Rhys 因子ともよばれている。フォノンの代表的なエネルギーを $\bar{\omega}$ とすると、およそ $\Delta E = S\bar{\omega}$ である。

ΔE と D は独立ではなくて「揺動散逸定理」により結ばれている。

$$D^2 \simeq 2k_B T^* \Delta E. \quad (37)$$

ただし、 T^* は（ここでは \hbar を回復し） $k_B T^* = (\hbar\bar{\omega}/2) \coth(\hbar\bar{\omega}/2k_B T)$ で与えられる「有効温度」である。 $T \rightarrow 0$ で $k_B T^* \rightarrow \hbar\bar{\omega}/2$ に注意。 (37) は、エネルギーの揺らぎ D が、エネルギーの散逸 ΔE と $k_B T^*$ との幾何平均で与えられることを言っており、「揺らぎ」と「散逸」についての Einstein の関係の一つとも理解できる。

(37) から、フォノン熱浴の作用として大きく二つの極限的状況が存在することがわかる。

(1) 高温弱結合：

$$S \rightarrow 0, \quad k_B T \rightarrow \infty, \quad \text{with } D = \text{finite}. \quad (38)$$

このとき、 $\Delta E \rightarrow 0$ だからフォノン場の影響は2準位間のエネルギー差をランダムに揺らすことにより、位相の緩和のみを引き起こすことになる。

(2) 低温強結合：

$$S \gg 1, \quad k_B T \rightarrow 0. \quad (39)$$

このとき

$$\bar{\omega} \ll D \simeq \sqrt{S}\bar{\omega} \ll \Delta E \quad (40)$$

となるので、ゼロ点振動からくる大きな揺らぎ D と、それにもまして大きなエネルギー緩和 ΔE が支配的となる。

V. 相関関数

標準モデルを用いて、量子熱浴中での2準位系の時間発展を調べてみよう。時刻 $t = 0$ に電子系が $|1\rangle$ にいてフォノン系は H_I の熱平衡状態にあったとする。 H_I によって $|1\rangle$ と $|2\rangle$ の間の飛び移り（トンネル遷移）が始まり、時刻 t において $|2\rangle$ に移っている確率 $P(t)$ はどのようなになるだろうか？全系の波動関数を $|\Psi(t)\rangle$ とすればI節でやったように、

$$|\Psi(t)\rangle = \exp_+ \left[-i \int_0^t H(\tau) d\tau \right] |\Psi(0)\rangle \quad (41)$$

と書ける。われわれはフォノン系は観測しないので、初期状態についてはカノニカル平均を、終状態についてはフォノン自由度についての和をとる。 $P(t)$ は以下のように与えら

れる.

$$P(t) = \left\langle \left\{ \exp_- \left[i \int_0^t H(\tau') \tau' \right] \right\}_{1,2} \left\{ \exp_+ \left[-i \int_0^t H(\tau') \tau' \right] \right\}_{2,1} \right\rangle, \quad (42)$$

ただし, $\{\dots\}_{i,j}$ は電子状態に関する期待値 $\langle i | \dots | j \rangle$ を, また $\langle \dots \rangle$ はフォノンに関するカノニカル平均を表わす.

解きほぐし定理より,

$$\exp_+[-i \int_0^t H(\tau) d\tau] = \exp[-i \int_0^t H_0 d\tau] \exp_+[-i \int_0^t \tilde{H}_I(\tau) d\tau]. \quad (43)$$

ただし

$$\tilde{H}_I(\tau) = e^{iH_0\tau} H_I e^{-iH_0\tau} = \Delta e^{iH_2\tau} |2\rangle \langle 1| e^{-iH_1\tau} + \Delta^* e^{iH_1\tau} |1\rangle \langle 2| e^{-iH_2\tau}. \quad (44)$$

したがって

$$P(t) = \left\langle \left\{ \exp_- \left[i \int_0^t \tilde{H}_I(\tau') \tau' \right] \right\}_{1,2} \left\{ \exp_+ \left[-i \int_0^t \tilde{H}_I(\tau') \tau' \right] \right\}_{2,1} \right\rangle, \quad (45)$$

ここで形式的摂動展開 (3) を用いる. \exp_+ と \exp_- を \tilde{H}_I の無限級数に展開し期待値をとると, $|\Delta|^2$ の n 次 ($n = 0, 1, 2, \dots$) の項だけが残ることはすぐに分かる. 時間積分の変数を取り直すと $P(t)$ は次のように整理できる.

$$P(t) = - \sum_{n=1}^{\infty} (-|\Delta|^2)^n L^{(n)}(t), \quad (46)$$

ただし

$$\begin{aligned} L^{(n)}(t) &= \sum_{m=1}^n \int_0^t d\tau_{2m-1} \int_0^{\tau_{2m-1}} d\tau_{2m-2} \cdots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \int_0^t d\tau_{2m} \int_0^{\tau_{2m}} d\tau_{2m+1} \cdots \int_0^{\tau_{2n-1}} d\tau_{2n} \\ &\times F(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n}) \end{aligned} \quad (47)$$

ここで

$$\begin{aligned} F(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n}) &= \langle \Lambda(\tau_{2n}) \Lambda^\dagger(\tau_{2n-1}) \Lambda(\tau_{2n-2}) \cdots \Lambda(\tau_2) \Lambda^\dagger(\tau_1) \rangle \\ \Lambda(\tau) &= e^{iH_1\tau} e^{-iH_2\tau} \end{aligned} \quad (48)$$

この式は一見複雑だが, FIG.1 のような Feynman 図形を描いてみればよく分かる. 上のプロパゲータでは, 系は時刻 $t = 0$ から $t = \tau_1$ まで $|1\rangle$ で進み, τ_1 で $|2\rangle$ に遷移, 時刻 τ_2 で $|1\rangle$ に遷移し \dots と変化して t で $|2\rangle$ に終わる. 下のプロパゲータも同様である.

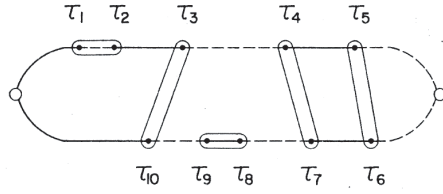
解きほぐし定理より

$$e^{-iH_2\tau} = e^{-i(\epsilon+H_1)\tau} \exp_+[-i \int_0^\tau V(\sigma)d\sigma].$$

定数 ϵ の項は trivial なのでとりあえず省略すると

$$F(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n}) = \left\langle \exp_+[-i \int_0^{\tau_{2n}} V(\sigma_{2n})d\sigma_{2n}] \exp_-[i \int_0^{\tau_{2n-1}} V(\sigma_{2n-1})d\sigma_{2n-1}] \right. \\ \left. \dots \exp_+[-i \int_0^{\tau_2} V(\sigma_2)d\sigma_2] \exp_-[i \int_0^{\tau_1} V(\sigma_1)d\sigma_1] \right\rangle. \quad (49)$$

ここで一般化された time-ordering operator \mathbf{T} を導入する. \mathbf{T} は (49) の time-ordered exponential の並びを全て保存する命令である. \mathbf{T} の中では \exp_\pm は普通の exponential のように扱ってよいので



$$F(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n}) = \left\langle \mathbf{T} \exp(-iK) \right\rangle \quad (50)$$

FIG. 1: 2 経路のプロパゲータに対する Feynman 図形. この図は $n = 5, m = 3$ の例

ただし

$$K = \sum_{j=1}^{2n} (-1)^j \int_0^{\tau_j} V(\sigma_j)d\sigma_j \quad (51)$$

と書いてよい.

$$\exp[-iK] = 1 - iK - \frac{1}{2}K^2 + \frac{(-i)^3}{3!}K^3 + \dots,$$

と展開し, $V(\sigma_j)$ たちが Gauss 変数であることを思い出すと

$$F(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n}) = \exp[-\frac{1}{2}\langle \mathbf{T}K^2 \rangle] \\ = \exp[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2n} \sum_{j=1}^{2n} (-1)^{i+j} \int_0^{\tau_i} d\sigma_i \int_0^{\tau_j} d\sigma_j \langle \mathbf{T}V(\sigma_i)V(\sigma_j) \rangle]. \quad (52)$$

\mathbf{T} の意味に注意して上式を計算すれば, (ϵ の項も含めて)

$$F(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n}) = \exp \left[-i\epsilon \sum_{j=1}^{2n} (-1)^j \tau_j + \sum_{i=2}^{2n} \sum_{j=1}^{i-1} (-1)^{i+j} G(\tau_i - \tau_j) \right] \quad (53)$$

ただし

$$G(t) = \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\sigma \langle V(\tau)V(\sigma) \rangle \\ = \int d\omega J(\omega) [(1 - e^{-i\omega t})\omega^{-2} - it\omega^{-1}] \quad (54)$$

と求まる.

VI. 量子コヒーレンスの破れ

ここで求めた多時間の相関関数は、フォノン系を熱浴として trace out したことにより、propagator の各 vertex 間に $G(\tau_i - \tau_j)$ で記述される相関が生じることを意味している。ここで、フォノンの揺らぎによる位相緩和の効果を見ておこう。高温 and/or 強結合の極限では次の定理が成り立つ。

[Pairing-off Theorem]

高温 and/or 強結合極限 ($D \gg \bar{\omega}$) では、FIG.1 の propagator において、 $2n$ 個の vertex 同士が 2 つずつ D^{-1} 以下に接近した pair を作った配置のみが、ゼロでない値を持つ。

(証明) 相関関数 $F(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n})$ の指数部の実部を $R(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n})$ とおく。

$$R(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n}) = \text{Re} \sum_{i=2}^{2n} \sum_{j=1}^{n-1} (-1)^{i+j} G(\tau_i - \tau_j). \quad (55)$$

簡単な計算により

$$R(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{2n}) = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) \omega^{-2} \left| \sum_{j=1}^{2n} (-1)^j e^{i\omega\tau_j} \right|^2 \quad (56)$$

この右辺は非正値であり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega J(\omega) \omega^{-2} \simeq D^2 / \bar{\omega}^2 \gg 1$$

なので、

$$\left| \sum_{j=1}^{2n} (-1)^j e^{i\omega\tau_j} \right| \leq \bar{\omega} / D \quad (57)$$

でない限り絶対値の大きな負の量になってしまう。(57) を満足するのは pairing-off 条件を満たす配置のみである。(証明終わり)

FIG.1 から分かるように、系の時間発展を表わす propagator は上下の経路を持ち、横軸(時間)を固定してみると、電子状態として $|1\rangle\langle 1|$ や $|2\rangle\langle 2|$ のように対角型で推移する時間と $|1\rangle\langle 2|$ や $|2\rangle\langle 1|$ のような非対角型で推移する時間とがある。pairing-off 条件は、強い位相緩和のためほとんど常に対角型の状態だけが生き残ることを意味している。これは、熱浴自由度との相互作用により、重ね合わせ状態が破れて量子力学的世界から古典力学の世界が立ち現れるメカニズムの一側面である。