

山梨大学大学院

医工農学総合教育部

論文博士学位論文

内因性及び外因性の量子緩和理論に対する
統一解釈へ向けた数理物理学的研究

森下 天平

2024年3月

目次

1	序論	1
1.1	研究の背景	1
1.2	研究の目的	5
1.3	本論文の構成	5
2	量子力学の可逆性	7
2.1	外因 (extrinsic) と内因 (intrinsic)	7
2.2	ユニタリー量子力学	10
3	散逸理論の基礎	15
3.1	Lindblad 型量子マスター方程式	15
3.1.1	van Hove 極限による運動方程式の導出	15
3.2	Thermo field dynamics	23
3.2.1	Thermo field dynamics の理論構造	23
3.2.2	Schmidt 分解 (特異値分解) との関係性	25
4	Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics	30
4.1	SEAQT の背景と基本概念	30
4.2	変分原理による運動方程式の導出	32
4.2.1	単一系における SEAQT 運動方程式	32
4.2.2	複合系における SEAQT 運動方程式	36
4.3	SEA の幾何学的描像	39
4.4	無限状態数系	40
4.4.1	Hypo equilibrium state	40
5	Coherent mixed state の導入とその有効性	42
5.1	CM state の構成	42
5.2	SEAQT における定式化	44
5.3	数値解析と考察	48
5.3.1	TLS ポピュレーション, フォノン系個数期待値	48
5.3.2	エントロピーダイナミクス	56
5.4	summary	59
6	コヒーレントフォノン支援による非共鳴励起移動	60
6.1	モデルの構成と基本性質	61
6.2	SEAQT における定式化	63
6.3	解析結果と考察	67
6.4	summary	72

7	内因理論と外因理論の統一的解釈	75
7.1	$\hat{\gamma}$ と $ \Psi\rangle$ の定義及び関係性	75
7.1.1	密度演算子のゲージ不変性	76
7.1.2	数理物理的同型性	77
7.2	幾何学的統一性	80
7.3	時間発展に関する統一的分析	90
7.3.1	可逆過程の統一的記述	90
7.4	超準空間 ${}^*\mathcal{H}$ における可逆性	94
7.4.1	超準空間 ${}^*\mathcal{H}$ における van Hove 極限の解釈	95
7.4.2	超準空間 ${}^*\mathcal{H}$ における基底ベクトル	97
8	結論	100
	参考文献	102
	本研究に関する発表	111
	付録	112
A	時間-エネルギーの不確定性関係と可逆項の導出	112
B	2次ゆらぎ項の展開	113
C	平均場近似を用いない定式化	115
D	多様体の定義	117
E	超実数の構築	118
F	$\hat{\gamma}$ と $ \Psi\rangle$ の同型性	120
G	Gel'fand-Naimark-Segal 構成	121

概要

概要量子系における不可逆な散逸緩和現象の理論的定式化は、量子デコヒーレンスや熱平衡化など、量子情報デバイスの開発において大きな課題となる諸現象の理解に不可欠であり、量子情報物理学や非平衡統計力学といった分野において非常に重要なトピックである。量子力学の基本原則であるユニタリー性と矛盾し、新たな理論的枠組みの必要性を示唆するこれらの現象の背後には、混合状態を通じた情報の非自明性を提供する「Reservoir」という概念が存在する。本研究の主要な目的は、Steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics (SEAQT) という理論フレームワークを用いて、量子系における不可逆な散逸緩和現象の深い理解とその新たな定式化を達成することにある。SEAQT は孤立系のエントロピー生成率を最大化する理論であり、断熱系のエントロピー非減少という熱力学の第二法則に一致するダイナミクスを提供する。この理論は内因性量子熱力学 (Intrinsic Quantum Thermodynamics, IQT) の枠内で孤立系の内因的不可逆性に対する深い理解を可能にする。具体的な目的としては、SEAQT の実効面と概念面双方の問題を深く掘り下げて考察し、解決策を見出す。実効面では、SEAQT の枠組みを用いて無限状態数系の相互作用ダイナミクスの数値解析に関する新たな手法:CM state を開発し、その有効性を検証する。この検証により、量子コヒーレンスの長寿命化などの現象を明らかにされ、SEAQT 理論の実践的応用に新たな可能性をもたらされる。また、概念面では、SEAQT(内因理論) と従来の熱浴緩和理論 (外因理論) の間の数学的構造を詳細に分析し、双方の状態代数 $\hat{\gamma}$ と $|\Psi\rangle$ の対応関係に関する議論を通して、これらの状態代数を同一視できることを示す。これらの結果は、非平衡熱力学の全体的な理解を大幅に進展させ、量子デバイスの開発に新たなアプローチを提供する可能性がある。また、概念面における研究により示された内因性及び外因性の量子緩和理論に対する統一解釈の結果は、理論と実践をつなぐ重要な役割を果たしている。これらの研究による新しい理解と洞察は、量子系の散逸緩和現象に対する理解を一層深め、量子情報技術のさらなる進展に寄与することが期待される。

1 序論

1.1 研究の背景

量子デコヒーレンスや熱平衡化など、量子系における不可逆な散逸緩和現象の定式化は、量子情報物理学や非平衡統計力学などの分野において極めて重要な位置を占めている。散逸緩和現象は、一般的に対象となる系と外部の環境との相互作用によって起こる不可逆現象であり、対象の量子系が、周囲の環境との相互作用を介してエネルギーあるいは情報を散逸させることを意味する。この散逸メカニズムは現代の物理学や技術の進展において中心的に議論されている [1-5]。量子デコヒーレンスは、量子相関の急速な喪失を引き起こす現象で、これは量子情報デバイスの開発において大きな問題となっている。例えば、量子計算の領域における量子ビットの情報喪失、すなわち、外部環境の影響によって量子的情報を損なってしまう現象などが挙げられる。この現象は高度な量子情報デバイスの設計、また理想的な動作において非常に重要で深刻な問題として注目されている。さらに近年、量子孤立系における熱平衡化現象が観測され、新たな問題として浮上してきている [6-8]。孤立した量子系では、通常、緩和や他の不可逆な現象が生じないとされており、このような現象の発生は従来の理解を再考する必要性を示唆している。固有状態熱化仮説 (Eigenstate Thermalization Hypothesis: ETH [8]) など、この問題を解決するための様々なアプローチが提案されており、基礎理論的な側面、先進技術の実践的領域どちらにおいてもその重要性が高まっている。

このような背景のもと、量子系の不可逆過程、すなわち散逸緩和ダイナミクスの記述と定式化は非常に重要であり、同時に多くの難問を孕んでいる。この問題の主要な困難さは、量子系のダイナミクスを規定する量子力学のユニタリー性に根ざしている。ユニタリー量子力学の基本的な運動方程式は時間反転対称性を保持しており、それゆえに基本的に可逆である。このため、量子デコヒーレンスや熱平衡化など、量子系における不可逆な散逸緩和現象を検討する際、不可逆性因子として新たな概念、Reservoir を系に導入する必要がある。この Reservoir は、現在考察している全体系における「見ていない領域」、または「認識できない領域」を示す [9, 10]。一般に、特定の物理系に関する情報（統計的重みも含む）がすべて既知である場合、情報の散逸の余地はなく、物理系のダイナミクスは可逆的（非散逸）であると考えられる。この既知的状態は、量子力学でいうところの純粋状態に相当する。Reservoir が想定された状態は混合状態に相当し、状態の確率的混合性が対象系の情報に非自明性の余地を生ずる。よく知られているように、不可逆過程である熱平衡化によって系が行きつく

マイクロカノニカル分布やカノニカル分布といった終状態は、密度演算子の混合状態によって記述される。従って、力学系の不可逆過程・散逸緩和ダイナミクスを適切に記述するためには、散逸の要因として混合状態が孕む非自明性が必須であり、その影響を定式化する必要が生じる。

この定式化に関して、従来の考え方では、Reservoir を自由度が無限の外部環境、すなわち熱浴系と見なす。ある注目量子系において、それ単体の孤立系では可逆的となるが、外部熱浴との相互作用を考えることによって開放系としての注目系に外因的不可逆性が現れる。ここでは、Reservoir の「見えない」という概念は無限自由度性、あるいは粗視化された自由度に相当し、熱浴との相互作用を繰り込んだ注目系の散逸ダイナミクスが摂動論的に定式化される (cf. 射影演算子法 [13–20], van Hove 極限 [11, 12])。この考え方の立場をまとめると、今見ている注目系が孤立系である場合、その状態の情報は統計的重みも含めれば全て分かっているため可逆的であるが、Reservoir である外部環境 (熱浴) と注目系が相関することで、注目系の情報に散逸の余地が生じる。具体的な定式化としてよく知られている運動方程式として、Lindblad 型量子マスター方程式が挙げられる [21–34]。開放量子系の密度演算子のダイナミクスを記述するための方程式であり、密度演算子の固有値が時間の全ての点で正であること (完全正值性) を保証しながら、対象系の非ユニタリーな散逸過程を記述できる。

また、場の量子論のフレームワークにおいて Thermo field dynamics (TFD) と呼ばれる熱場の量子論が知られている [35–41]。有限温度での量子場論を扱う一つの方法で、量子統計力学と場の理論を統合する試みであり、量子場の温度依存性や、対象系と周囲の環境との関係性をどのように理論的に取り扱うかという問いに対して、新しい視点を提供する。基本的なアイデアは、複製された Hilbert 空間を導入することである。即ち、元の物理系の Hilbert 空間と、それに対応する複製 Hilbert 空間 (チルダ空間) を導入する。元の物理系は混合状態の密度演算子として用意されるため統計的 (熱的) 性質を孕んでおり、チルダ空間では元の系の熱的相関が扱われる。この方法の優れた点は、有限温度の混合状態が、二つの Hilbert 空間上の純粋状態として表されることである。これにより TFD では、純粋状態にのみ適用できるファインマンダイアグラムを用いて、熱的效果を持つ系の摂動展開を効率的に計算することができる。さらに近年では、二つの Hilbert 空間上の熱的純粋状態ベクトルを用いて、ベクトル間の距離やノルムから量子エンタングルメントを評価するといった研究も行われている。これにより、TFD は量子系の理解を深化し、新しい研究の道を開いている。

このような不可逆過程の取り扱い手法は非常に広く知られており、実験結果との比較検討からもある程度の成功を収めている。しかし従来より、注目系と熱浴が強く結合する場合、系と熱浴の相互作用が十分弱いという前提条件が成り立たず、摂動論

的な理論は適用できないことが知られている。さらに、注目系が開放系であることを前提としているため量子孤立系の緩和現象 [6–8] を議論することが困難であるという問題や、動的な環境の影響 [42–50] を効果的にモデリングするのが難しいという問題も存在する。

従来の不可逆過程の取り扱いには限界が存在する中で、Steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics (SEAQT) という自発的不可逆過程の散逸緩和理論が、近年注目を集め始めている [51–53, 55–66]。SEAQT は、孤立系内のエントロピー生成が常に最大化されるという SEA 仮説に立脚し、変分原理によって量子系の基本運動方程式を新しく構築・導出する。この理論は、断熱系（孤立系）におけるエントロピーの非減少というマクロ熱力学の第二法則と一貫したマイクロ量子系のダイナミクスを記述することができる。SEAQT はその理論構造から、強結合系や非線形系、動的な環境の問題をより効果的かつ自然に取り扱うことができる一般的なフレームワークを提供し、物理系の非平衡ダイナミクスをモデル化する際に広範な適用性を持っている。SEAQT の理論における注目すべき概念的側面は、Reservoir を外部環境として捉える従来の開放系理論とは異なり、Reservoir を対象とする孤立系の内部に位置づける点にある。このアプローチは内因性量子熱力学 (Intrinsic Quantum Thermodynamics (IQT)) と呼ばれる理論体系のもとで展開される。IQT では、量子孤立系が内因的な不可逆性を潜在的に持つという立場を取る。「内因的」という表現は非常に抽象的であるが、これは、我々がある対象系を観測したときに、系の全ての情報を完全に認識することができるか、という問題に帰着する。外因的には、対象系における認識できない情報の非自明性は必ず外部環境との相関に依るものと考えられる。従って、仮に外部との相関を完全に消し去った孤立系の情報は常に自明 (純粋状態) であり Reservoir は介在し得ない。一方 IQT においては、ある対象系を観測した際の情報の非自明性は、必ずしも外因的ではないとする。つまり、どれだけ完全な孤立系を想定したとしても対象系の非自明性を消し去ることは出来ず、Reservoir 概念が残存する。この抽象的な概念を非外因的な Reservoir、即ち内因的と呼んでいるのである。ここに、孤立系という状態に対する理解の差が存在する。外因的には、状態の混合性は必ず外部系との相関に由来するため、孤立系であれば必ず対象系は純粋状態である。しかし内因的な立場では、あらゆるスケールの孤立系に対して、排除不能な本質的非自明性が想定されるため、孤立系であっても対象系は混合状態として存在する。この考え方は、孤立系の状態を表す密度演算子 $\hat{\rho}$ の固有値が時間に依存し、異なる純粋度、異なるエントロピーの領域を動き得るとする主張であり、古くは 1976 年に、G. N. Hatsopoulos, E. P. Gyftopoulos らによって「より広い運動学 (Broader kinematics)」または「拡張状態領域仮説 (The augmented state domain ansatz)」として提唱された [67]。この立場の実効的な利点は、

Reservoir に新しく物理構造を与える必要がないことと、自発的な不可逆過程が想定されることから、外因理論のように不可逆性を発現させるための摂動展開や粗視化操作が必要ないことにある。ただし、IQT では内因的な不可逆性が非自明であるため、この内的影響が対象系のダイナミクスにどのように現れるかを、何らかの指標を持って定める必要がある。この指標が前述した SEA 仮説であり、これによって定式化された具体的な IQT 理論が即ち SEAQT なのである。

さて、上述の通り SEAQT は熱力学の第二法則と一致し、他の一般的な非平衡理論との互換性も備える [53] 優れた理論である。しかしながら、SEAQT は無限状態数を持つ物理系（例：フォノン、フォトンなどのボソン系）に対して、その運動方程式の構造上、厳密な解析が難しいという数値解析の問題を抱えている [65]。これは、孤立系全体のエントロピー生成に焦点を当てる必要があるため、あらゆる物理量の解析に際して、系全体の全状態情報を厳密に必要とすることによる。通常の量子力学において用いられる無限状態数系の解析手法、例えば無限状態数系の自由度を縮約し有限状態数系のダイナミクスに繰り込む方法などはここでは適用できない。この課題を解決するため、Hypo-equilibrium state (HE) 近似 [56–58, 60] という理論手法が近年提案された。この手法では、対象とする無限状態数系のヒルベルト空間を有限個に直交直和分解 [68] し、分割した部分状態毎に異なる熱平衡状態的分布 (HE state) を課す。HE 近似によって、分割された状態に関する有限個の変数を用いて系全体のダイナミクスを記述でき、SEAQT での無限状態数系の近似計算が可能となる（詳細は第 3 章を参照）。ただしこの方法では、密度演算子とハミルトニアンが共通の固有状態を持つ必要があり、従って密度演算子とハミルトニアンが常に可換となるため、モデル系の複雑な相互作用過程を適切に取り入れた数値解析ができないという適用限界が存在する。このため、SEAQT によって、無限状態数系を含む系の複雑な相互作用過程を記述するための新しい数値解析手法の開発が求められている。

更に、SEAQT には、概念的な面で解決すべきいくつかの問題が存在している。理論の基礎となる SEA 仮説の正当性や、IQT が主張する内因的な不可逆性の正体・物理的解釈など、これら特異かつ根本的な基礎的概念についての明確で包括的な説明が不足しており、これにより理論の完全な理解が妨げられている。従って、基本的な理論構造に関して更なる深い洞察が必要であると考えられる。また、SEAQT と他の外因理論との関係性は、未だ十分に探求されていない重要なテーマである。これらの理論間の接点や相違点、およびそれらがどのように関連または対立するのかについての理解は、全体としての非平衡熱力学の理解を大きく前進させる可能性がある。そして、この外因理論との関係性の議論は、内因理論と外因理論の構造を抽象化によって統一的に解釈するという試みに繋がる。内因と外因という、一見して完全に対立して見え

る二つの散逸緩和理論は、しかし、対象系の観測において情報の非自明性が存在するという不可逆性の起源は共通であり、そして両理論がひどく異なって見える原因である内的因子と外的熱浴自由度は、我々が認識できる標準空間においては「見えない」ものである。従って、ある種の抽象的なフレームワークを用いることで、これら両理論の状態代数を包括的に取り扱うことができる可能性がある。

1.2 研究の目的

本研究の主要な目的は、SEAQTにおける実効面と概念面双方の問題を深く掘り下げて考察し、解決策を見出すことである。

まず実効的面では、無限状態数系の相互作用ダイナミクスをSEAQTによって数値解析するための新たな定式化および近似手法を開発する。HE近似の直交直和分解の構造を下地にして、密度演算子とハミルトニアンが非可換性を保持する一般的な場合に対する近似的状態構造を構築する。この新たな構造の効果を検証するために、具体的なモデル系にこれを適用し、その結果からモデルの複雑な相互作用ダイナミクスがどの程度適切に表現されるかを評価する。これにより、評価したモデルにおいて、SEAQTの枠組み内で自発的な散逸プロセスがどのように発現しているかを明らかにする。

概念面では、内因理論であるSEAQT(IQT)と、外因理論である熱浴散逸理論との間に存在する関連性や対応関係を解明することを目的とする。両理論の状態代数を抽象的な幾何学空間で表現することにより、これらの理論の間での同型性や対応関係を深く探求する。この研究の過程で、内因理論と外因理論の間の状態代数を介した潜在的な対応構造を構築する。さらに、この対応関係を基盤として、システムの不可逆性の発現メカニズムを統一的に理解し、内因理論の非自明な側面に対する物理的解釈を導き出すことも目指す。

1.3 本論文の構成

本論文は、全8章から構成されている。第1章では、研究の背景と目的について述べ、問題の所在と研究の重要性を明確にする。具体的な研究の方向性や目標についても、この章で総括的に触れる。第2章では、量子力学の可逆性について説明する。外因と内因の議論、及びユニタリー量子力学のよく知られた特性について詳細に解説する。第3章では、従来の散逸理論の基礎について説明する。Lindblad型量子

マスター方程式とその具体例, さらには Thermo field dynamics の理論構造を解説する. これらの理論の構造や概念的理解は, 後続の章の議論の基盤となる. 第4章では, Steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics (SEAQT) について, その背景と基本概念を解説する. また, 変分原理に基づいた運動方程式の導出や, 複合系における SEAQT 運動方程式についても検討し, さらに, 後続の章で重要となる SEAQT の状態代数の幾何学空間における表現についても説明する. 最後に, 既存理論である Hypo-equilibrium state について説明し, その理論構造と適用限界を議論する. 第5, 6章は, SEAQT の実効的側面に焦点を当てた研究の詳細と結果がまとめられる. 第5章では, 新しい計算手法である Coherent mixed state (CM state) の導入とその有効性について深く検討する. 第6章では, 重要かつ複雑な相互作用モデルである, コヒーレントフォノンに支援された非共鳴 ET を考察する. 前章で導入された CM state を用いて, SEAQT に基づくモデルの定式化と解析を行う. 第7章は, SEAQT の概念的側面に焦点を当てた研究の詳細と結果がまとめられる. 内因理論と外因理論の統一的解釈に関して深い議論を展開する. 具体的な関係性の定義及びその意義, 双対空間の内因的解釈, 超準解析による解釈など, 幅広いトピックにわたる探求を行う. 最終章である第8章では, 本研究を総括し, 得られた結果とその意義について考察する. また, 今後の研究の方向性についても言及する.

2 量子力学の可逆性

2.1 外因 (extrinsic) と内因 (intrinsic)

量子系の散逸緩和理論は、外因 (extrinsic) と内因 (intrinsic) の2つに大別することができる。外因理論とは、不可逆性の原因である Reservoir を孤立系の外部に想定する、開放系を前提とした従来の熱浴散逸理論である (図 1(a))。一方、内因理論は従来の量子力学とは立場を変え、孤立系それ自体に不可逆性が潜在することを前提とする。即ち、内因的 Reservoir である (図 1(b))。

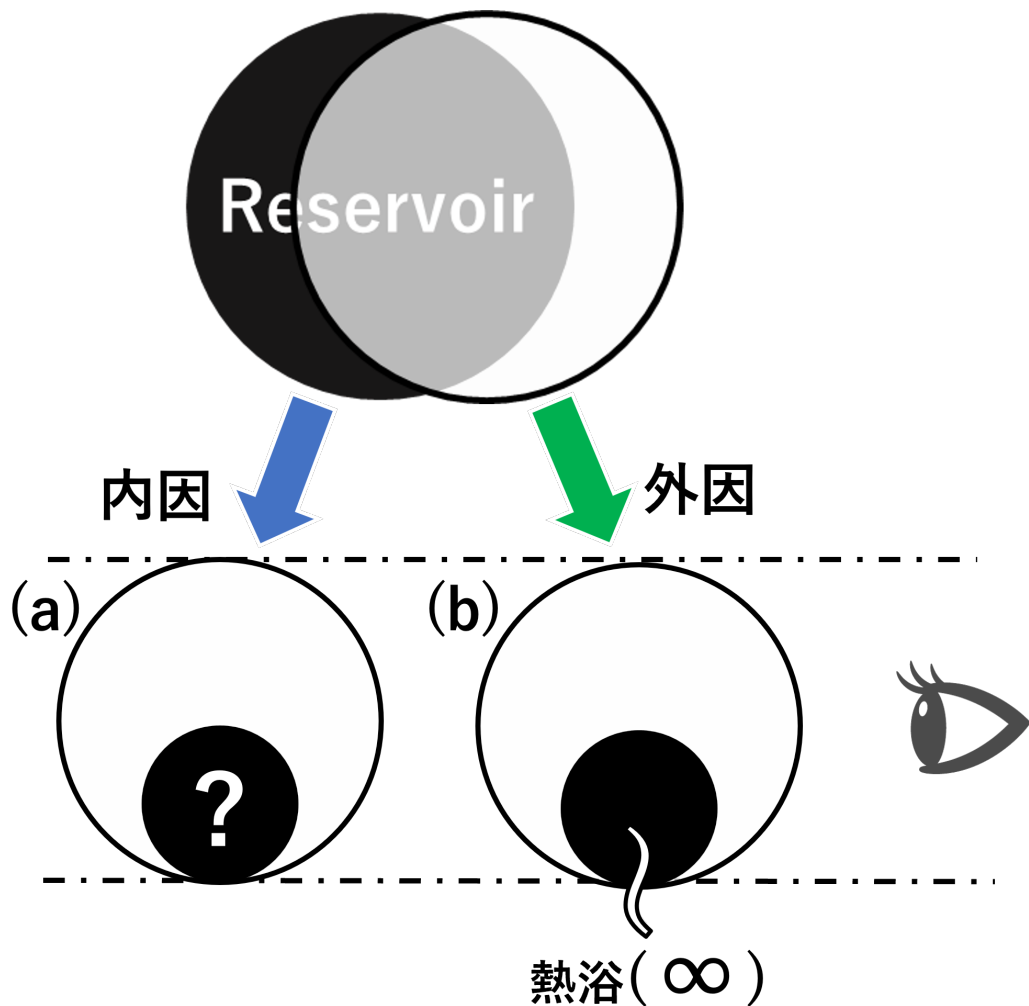


図 1: Reservoir の概念図. (a) 左下が内因 Reservoir, (b) 右下が外因 Reservoir.

2 量子力学の可逆性

図 2-2 に外因理論と内因理論の関係を示す. どちらの立場も, 共に対象系の状態を表す状態密度演算子 $\hat{\rho}$ の時間微分, 即ち運動方程式から出発する. 最初の分岐は, $\hat{\rho}$ の固有値 p_k が時間に依存するかによって決まる. $dp_k/dt = 0$ となる場合, 状態の時間発展は非散逸 (可逆) 過程を示す. このことは次のような簡単な計算から理解できる. $dp_k/dt = 0$ より, $\hat{\rho}$ の固有状態表示の時間微分は

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \sum_{k=1}^N p_k \frac{d(|\phi_k\rangle\langle\phi_k|)}{dt} \quad (1a)$$

$$= \sum_{k=1}^N p_k \left(\frac{d|\phi_k\rangle}{dt} \langle\phi_k| + |\phi_k\rangle \frac{d\langle\phi_k|}{dt} \right) \quad (1b)$$

$$= \sum_{k=1}^N \frac{d|\phi_k\rangle}{dt} \langle\phi_k|\hat{\rho} + \hat{\rho} \sum_{k=1}^N |\phi_k\rangle \frac{d\langle\phi_k|}{dt} \quad (1c)$$

のように展開できる. ここで, 固有値の個数 N は, 対象系ヒルベルト空間の次元を M とすると $N \leq M$ となる. N は 0 でない固有値 p_k の個数であるため, 1 つ以上の 0

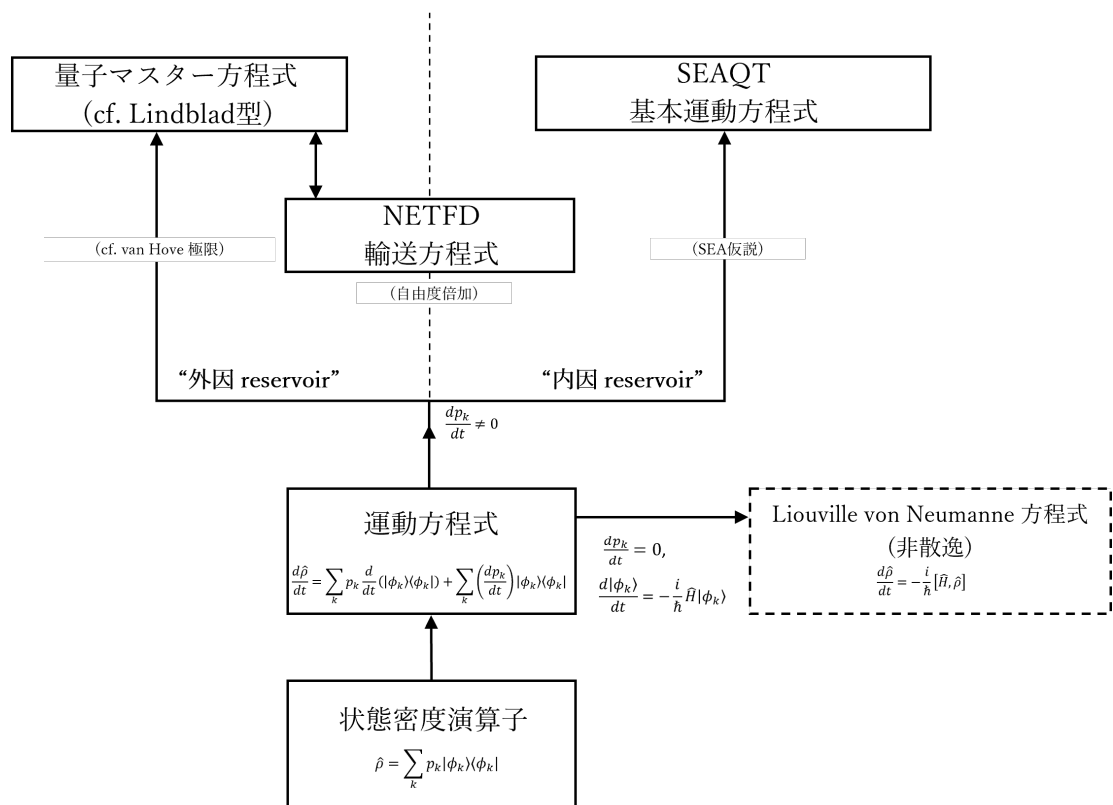


図 2: 内因・外因 Reservoir で区別した散逸理論の体系. NETFD は Non-Equilibrium Thermo Field Dynamics (非平衡熱場ダイナミクス) の略.

固有値が存在する場合は $N < M$ である。従って、 $N < M$ において $\hat{B} = \sum_{k=1}^N |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$ という演算子は $\hat{\rho}\hat{B} = \hat{B}\hat{\rho}$ 及び $\hat{B}^2 = \hat{B}$ を満たす射影演算子である (N 個の集合 $\{|\phi_k\rangle\}$ が完全系ではないため、恒等演算子ではない)。具体的に、あらゆる k に対して時間依存の Schrödinger 方程式

$$\frac{d|\phi_k\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\phi_k\rangle \quad (2)$$

を規定すると、Liouville-von Neumann 方程式

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (3)$$

が再現される。

一方、 $dp_k/dt \neq 0$ である場合、対象系の状態には散逸 (不可逆性) の余地が生じる。なお $dp_k/dt \neq 0$ においても、 p_k が時間に依存する要因が Reservoir ではなく、対象系と動的な部分系との自明な相互作用である場合、対象系の時間発展は非ユニタリーではあるが可逆過程を示す。この時、 p_k の時間発展は周期的となることが期待される。またこのような場合、対象系と動的部分系を含む全体の純粋状態は Schrödinger 方程式に従いユニタリーに時間発展する。

状態の時間発展が不可逆となるためには、 $dp_k/dt \neq 0$ の要因を外因ないし内因 Reservoir として考える必要がある。図 2-2 の中央点線より左側が外因 Reservoir、即ち熱浴による散逸理論であり、van Hove 極限といった粗視化操作を介して Lindblad 型量子マスター方程式と呼ばれる対象系に関する散逸緩和運動方程式が導かれる [11, 12]。中央点線より右側が内因 Reservoir を前提とする IQT 理論であり、さらに非自明な不可逆性に SEA 仮説を課すと SEAQT 基本運動方程式が導かれる。中央点線に跨る NETFD は Non-equilibrium thermo field dynamics (非平衡 TFD) [35–41] の略である、TFD は場の量子論のフレームワークにおける有限温度理論であり、本来は純粋状態のみを扱う場の理論と、量子統計力学を統合した理論である。非平衡 TFD はその名の通り、熱平衡状態で定義された TFD を非平衡な時間発展領域へ拡張した散逸緩和理論である。一般的に NETFD は外因 Reservoir 理論と考えられるが、一方で、場の無限自由度性が熱浴全体を内包し、孤立系の散逸として確立し得るという主張が存在する [35]。よってここでは、NETFD を外因と内部 Reservoir 理論の両方へ跨るような位置に置いている。なお NETFD から得られる輸送方程式と、van Hove 極限等から導出される Lindblad 量子マスター方程式は、低次の摂動展開の下で一致する事が知られているため [40]、両者を矢印で結んである。SEAQT と NETFD を結ぶ矢印は今のところ考えられていない。次節では、上述した内容について詳細な議論を展開する。具体的には量子力学が

可逆的である要因 (密度演算子固有値の時間不変性) に関して詳述し、量子系の散逸緩和過程を記述するための外因・内因それぞれのアプローチをここで簡単に概説する。従来の外因理論については第3章、内因理論に関しては第4章においてそれぞれ詳細な議論が行われる。

2.2 ユニタリー量子力学

一般的に、状態の可逆性及び不可逆性は、状態の無秩序性の指標であるエントロピー s によって説明することができる。例えばマクロな物質において、高温物質と低温物質を接触させた場合、やがて物質全体 (断熱系) の温度は均されて一定となる。この過程において、高温側と低温側で分かれていた秩序が一様に乱され、物質全体の無秩序性、即ちエントロピー s が上昇 (生成) している。これは経験的に不可逆過程であり、マクロ熱力学により理論的に記述できる。一方、量子効果が存在するようなミクロな物質系においては、熱揺らぎによって量子相関が消失する量子デコヒーレンスという現象が存在する。量子相関はある種の秩序と見なせるため、この過程においてもエントロピー s が上昇すると考えられる。そしてこのミクロスケール現象も、経験的に不可逆過程であることが知られている。古典的なマクロ系におけるエントロピー生成を ds と書いたとき、マクロ熱力学の文脈では $ds = dQ/T$ と定義される。ここで dQ は、温度 T の物質に加えられる熱エネルギーの変化量である。熱力学第二法則から、任意の状態変化において断熱系全体のエントロピー生成は必ず $ds \geq 0$ となり、 $ds > 0$ を満たす状態変化が不可逆過程である。第二法則を仮定することにより、熱力学は不可逆過程の記述を可能としている。ただし、熱力学は一般的に、温度 T が定義できるような熱平衡状態での議論のみが可能であり、状態が時々刻々と変化する状況を扱う、いわゆる非平衡熱力学は未だ確立されていないのが現状である。

状態が時々刻々変化する、いわゆるダイナミクスは力学によって記述される。特にミクロ系、即ち量子系のダイナミクスは量子力学によって定式化される。

量子系におけるエントロピーは、以下の式で定義される von Neumann エントロピー

$$s(\hat{\rho}) = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \quad (4a)$$

$$= -k_B \sum_{k=1}^N p_k \ln p_k \quad (4b)$$

によって表現される。ここで k_B は Boltzmann 定数である。密度演算子 $\hat{\rho}$ の固有値 p_k は一般的に、状態が固有状態ベクトル $|\phi_k\rangle$ である確率と解釈されるため、その値は

$p_k \geq 0$ となること (正值性), そして総和が $\sum_k p_k = 1$ となること (確率保存則) が課される. 式 (4b) より, $p_k = 1$ である純粋状態のとき von Neumann エントロピーは常に 0 となり, $0 < p_k < 1$ の混合状態において von Neumann エントロピーは正值を取る. なお von Neumann エントロピーは, エントロピー演算子を

$$\hat{S} = -k_B \hat{B} \ln \hat{\rho} \quad (5)$$

と定義したときの期待値として $s(\hat{\rho}) = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{S}) = \langle \hat{S} \rangle$ と表現される. また演算子 \hat{B} は先の 2.1 節にも登場したが,

$$\hat{\rho} \hat{B} = \hat{B} \hat{\rho}, \quad (6a)$$

$$\hat{B}^2 = \hat{B} \quad (6b)$$

を満たす射影演算子である. \hat{B} は $\hat{\rho}$ と共通の固有状態を有しており,

$$\hat{B} = \sum_{k=1}^M b_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (7a)$$

$$= \sum_{k=1}^N |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (7b)$$

と書ける. ただし, M は完全系を成すベクトル $|\phi_k\rangle$ の個数, N は 0 でない p_k の個数 ($N \leq M$) であり, \hat{B} の固有値 b_k は $1 \leq k \leq N$ において 1, $N < k \leq M$ において 0 の値を取る. これは言い換えると, \hat{B} は $p_k \neq 0$ であるとき固有値が 1, $p_k = 0$ であるとき固有値が 0 となるバイナリ的な射影演算子である [52]. エントロピー演算子 \hat{S} の定義に \hat{B} が含まれているのは, $p_k = 0$ のときに $\ln p_k$ の発散によってエントロピー演算子が定義不能となってしまうことを避けるためである.

式 (4b) の定義式から分かる通り, von Neumann エントロピー $s(\hat{\rho})$ は密度演算子の固有値 p_k のみに依存する. 従って, p_k が時間不変であれば $s(\hat{\rho})$ も時間不変となる. 実際, $dp_k/dt = 0$ における一般的な運動方程式である式 (1c) を用いて $s(\hat{\rho})$ の時間発展

を計算すると,

$$\frac{ds(\hat{\rho})}{dt} = -k_B \text{Tr} \left(\frac{d\hat{\rho}}{dt} \ln \hat{\rho} \right) - k_B \text{Tr} \left(\hat{\rho} \frac{d \ln \hat{\rho}}{dt} \right) \quad (8a)$$

$$= -k_B \text{Tr} \left(\left(\sum_{k=1}^N \frac{d|\phi_k\rangle}{dt} \langle \phi_k| \hat{\rho} + \hat{\rho} \sum_{k=1}^N |\phi_k\rangle \frac{d\langle \phi_k|}{dt} \right) \ln \hat{\rho} \right) - k_B \sum_{k=1}^N p_k \langle \phi_k| \frac{d \ln \hat{\rho}}{dt} |\phi_k\rangle \quad (8b)$$

$$= -k_B \sum_{k'=1}^M \langle \phi_{k'}| \left(\sum_{k=1}^N \frac{d|\phi_k\rangle}{dt} \langle \phi_k| \hat{\rho} + \hat{\rho} \sum_{k=1}^N |\phi_k\rangle \frac{d\langle \phi_k|}{dt} \right) \ln \hat{\rho} |\phi_{k'}\rangle - k_B \sum_{k=1}^N p_k \frac{d \ln p_k}{dt} \quad (8c)$$

$$= -k_B \sum_{k=1}^N \left(\langle \phi_k| \frac{d|\phi_k\rangle}{dt} + \frac{d\langle \phi_k|}{dt} |\phi_k\rangle \right) p_k \ln p_k - k_B \sum_{k=1}^N \frac{dp_k}{dt} \quad (8d)$$

$$= -k_B \sum_{k=1}^N \left(\frac{d\langle \phi_k|\phi_k\rangle}{dt} \right) p_k \ln p_k - k_B \frac{d \text{Tr}(\hat{\rho})}{dt} = 0 \quad (8e)$$

となっている. 従って, 対象系の不可逆過程を記述するには $dp_k/dt \neq 0$ の場合を考察する必要がある. ここで, 密度演算子 $\hat{\rho}$ のより一般的で形式的な時間発展を計算してみる. 固有状態ベクトル $|\phi_k\rangle$ の時間発展を一般的に

$$\frac{d|\phi_k\rangle}{dt} = \sum_{k'=1}^M D_{k'}^{(k)} |\phi_{k'}\rangle \quad (9)$$

と書くことにする. 可逆的な場合, 即ち $dp_k/dt = 0$ 及び $D_{k'}^{(k)} = \langle \phi_{k'}|(-i\hat{H}/\hbar)|\phi_k\rangle$ としたとき, 式(9)は

$$\frac{d|\phi_k\rangle}{dt} = \sum_{k'=1}^M \langle \phi_{k'}| \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \right) |\phi_k\rangle |\phi_{k'}\rangle \quad (10a)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \sum_{k'=1}^M |\phi_{k'}\rangle \langle \phi_{k'}| \hat{H} |\phi_k\rangle \quad (10b)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\phi_k\rangle \quad (10c)$$

と書けるため, 式(2)の時間依存の Schrödinger 方程式となり, 式(3)の Liouville-von Neumann 方程式が再現される. ここで, $dp_k/dt \neq 0$ 及び, 式(9)に対して非自明な演算子 \hat{d} を用いて $D_{k'}^{(k)} = \langle \phi_{k'}|(-i\hat{H}/\hbar + \hat{d})|\phi_k\rangle$ と書くと, $\hat{\rho}$ の時間発展方程式は

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + (\hat{d}\hat{\rho} + \hat{\rho}\hat{d}^\dagger) + \sum_{k=1}^M \frac{dp_k}{dt} |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (11)$$

と形式的に記述できる. 式(4a)で定義された $s(\hat{\rho})$ の時間発展は, 直接的には式(11)の

右辺第3項によって記述される．右辺第1項はしばしば Hamiltonian 項と呼ばれ [52], $\hat{\rho}$ の固有値を常に不変に保つ可逆項である．一方右辺第2項は, 非自明な演算子 \hat{d} の性質によっては, dp_k/dt を介して $s(\hat{\rho})$ に影響を与える．可能性がある．更に, \hat{d} は他の物理量の時間発展へ影響する．具体的に, ハミルトニアン \hat{H} の期待値の時間発展は

$$\frac{d\langle\hat{H}\rangle}{dt} = \text{Tr}\left(\frac{d\hat{\rho}}{dt}\hat{H}\right) \quad (12a)$$

$$= \sum_{k=1}^M \frac{dp_k}{dt} \langle\phi_k|\hat{H}|\phi_k\rangle + \sum_{k=1}^M p_k \langle\phi_k|(\hat{H}\hat{d} + \hat{d}^\dagger\hat{H})|\phi_k\rangle \quad (12b)$$

と書ける．仮に, 対象系の時間発展に対してエネルギー保存則 $d\langle\hat{H}\rangle/dt = 0$ を課す場合, \hat{d} が無ければ $dp_k/dt = 0$ とするしかないため, エネルギー散逸を伴わない純粋なディフュージング過程を記述するには非自明な演算子 \hat{d} が必須となる．

$p_k = 1$, 即ち純粋状態 $\hat{\rho} = |\phi\rangle\langle\phi|$ であるとき, 式 (11) の右辺第3項は常に消える．また, 純粋状態における確率保存則を式 (11) から考えると,

$$\langle\phi|\frac{d\hat{\rho}}{dt}|\phi\rangle = \langle\phi|(\hat{d} + \hat{d}^\dagger)|\phi\rangle = 0 \quad (13)$$

が課される．従って, $\hat{d} = 0$ あるいは $\hat{d} = -\hat{d}^\dagger$ が要求されるが, $\hat{d} = 0$ である場合, $\hat{\rho}$ の時間発展は式 (3) の Liouville-von Neumann 方程式に帰着される． $\hat{d} = -\hat{d}^\dagger$ である場合, 任意のエルミート演算子 \hat{h} によって $\hat{d} = i\hat{h}$ と書けるため, 時間発展は $d\hat{\rho}/dt = (-i/\hbar)[\hat{H} + \hat{h}, \hat{\rho}]$ と書ける．更にエネルギー保存則を課す場合, $[\hat{H}, \hat{h}] = 0$ が課されハミルトニアンと同じ固有状態を \hat{h} は持つようになり, ハミルトニアンに内包される．どちらにせよ, これは可逆的なユニタリーダイナミクスである．

従来のユニタリー量子力学では, 密度演算子の固有値を単なる統計的重みと解釈し, 真の状態と呼べるものは $|\phi_k\rangle$ であると考えため [52], 固有値 p_k のみに依存する物理量は常に時間不変となる．具体的には, 式 (4b) で表される von Neumann エントロピーや, 純粋度 $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \sum_k p_k^2$ といった物理量は時間変化しない．純粋度 $\text{Tr}(\hat{\rho}^2)$ は, 対象系の状態がどれだけ純粋状態に近いかを表す指標であり, 純粋度の減少は即ち情報の散逸を示す．故に, von Neumann エントロピーや純粋度の時間不変性は, 対象系全体における情報の非散逸性を意味する．一般的に量子力学の基本運動方程式は, 対象系の孤立系状態が $dp_k/dt = 0$ であることを前提に式 (3) の形で書かれるため, 例えば量子相関情報が散逸する量子デコヒーレンスや, von Neumann エントロピーが上昇しやがて飽和する熱平衡化といった不可逆な散逸緩和ダイナミクスを記述することが出来ない．従って, 量子系の不可逆過程を議論するためには, 固有値 p_k が不可逆

2 量子力学の可逆性

的に時間依存するための要因として、何らかの形で Reservoir の概念を理論に導入する必要がある。

3 散逸理論の基礎

本章では、従来の散逸理論の基礎に焦点を当てて詳しく検討する。特に、熱浴として知られる外的 Reservoir の概念に注目する。外因的な視点で考慮すると、熱浴は通常の物理系と変わらず密度演算子やハミルトニアンで記述できるが、この環境の自由度は無限大とみなされる。熱浴と注目系における一方向的な相互作用の結果として、注目系は不可逆なダイナミクスを示すようになる。この背景を踏まえ、Lindblad 型量子マスター方程式 (Lindblad-QME) を導出する。この方程式は開放量子系の動的な振る舞いを描写する際の主要な手法として知られている。2.1.1 節では、この方程式の導出を van Hove 極限によって行い、続く 2.1.2 節では Lindblad 型方程式を簡単なモデルに適用した計算例から、その有用性や制約について考察する。次に、2.2 節では Thermo field dynamics (TFD) の理論構造の基礎を考察する。TFD は有限温度の場の量子論の一つであり、熱的状态を純粋状態ベクトルの形式で扱うことができる。この理論の核心や、Schmidt 分解との関連性について議論する。本章によって散逸理論の基礎的側面を明確にし、次章の Steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics (SEAQT) へのアプローチの基盤を築く。

3.1 Lindblad 型量子マスター方程式

3.1.1 van Hove 極限による運動方程式の導出

Lindblad-QME は外因理論の視点に基づく散逸緩和運動方程式である。直感的には、注目系と熱浴環境系による複合孤立系を考え、熱浴環境を我々は知ることが出来ない (環境情報の粗視化) とした上で、全体系から注目系の情報を抜き出す (部分縮約) という操作を行う。導出する方法はいくつか存在するが [13–20]、純粋に数学的な導出方法として van Hove 極限を用いたものがよく知られている [11, 12]。

具体的な導出過程は以下の通りである。まず、全体系のハミルトニアン \hat{H}_{tot} を次

のように想定する [11].

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H} \otimes \hat{I}_E + \hat{I} \otimes \hat{H}_E + \lambda \hat{V}, \quad (14a)$$

$$\hat{H} = \sum_m E_m |m\rangle \langle m|, \quad (14b)$$

$$\hat{H}_E = \int_0^\infty d\omega \hbar \omega \hat{b}_\omega^\dagger \hat{b}_\omega, \quad (14c)$$

$$\hat{V} = i\hbar \sum_{m,n} \int_0^\infty d\omega (g_{mn}(\omega) |m\rangle \langle n| \otimes \hat{b}_\omega - g_{mn}^*(\omega) |n\rangle \langle m| \otimes \hat{b}_\omega^\dagger). \quad (14d)$$

式(14b)の \hat{H} は我々が知ることできる系:注目系の自由ハミルトニアンであり, 注目系の密度演算子を $\hat{\rho}$ とする. 任意時刻の密度演算子 $\hat{\rho}(t)$ は一般に混合状態であるが, この混合性は外部環境系との相関に起因すると見なされる(外因性). 即ち, 全体系の状態ベクトルを $|\Psi(t)\rangle$ と書くと, 環境系自由度の部分縮約 $\text{Tr}_E(\cdot)$ を用いて $\hat{\rho}(t) = \text{Tr}_E(|\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|)$ と記述できる. 今, 環境系の自由ハミルトニアンは式(14c)の \hat{H}_E のような形で想定され, 連続なモード ω を持つボソン系であるとしている. 即ち, 生成(消滅)演算子 $\hat{b}_\omega^\dagger(\hat{b}_\omega)$ は交換関係 $[\hat{b}_\omega, \hat{b}_{\omega'}^\dagger] = \delta(\omega - \omega')$ を満たす. 積分形のハミルトニアンにおける被積分因子の次元はエネルギー密度となるため, 本来は適切な次元を持つ定数が積分の外に掛けられるが, ここでの議論には関与しないため表記上は省略する. 注目系と環境系の相関は, 式(14d)の形の相互作用ハミルトニアン \hat{V} によって生成される. \hat{V} は, 連続モード環境における相互作用ハミルトニアンの一般的な表式であり, $g_{mn}(\omega)$ は $\omega < 0$ において $g_{mn}(\omega) = 0$ を満たす任意の相互作用定数である. $g_{mn}(\omega)$ を具体的に設定することにより, 様々な形の相互作用を再現できる. また, 式(14a)において \hat{V} に乘じられている λ は相互作用の強さを表す定数である.

式(14a)-(14d)のハミルトニアンに基づき, van Hove 極限を用いた Lindblad-QME の導出を行う.

先ず, 時間発展演算子 $\hat{U}_{\text{tot}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{\text{tot}} t}$ によって, 時刻 t における状態ベクトルは $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}_{\text{tot}}(t) |\Psi(0)\rangle$ と表せる. 任意の演算子 \hat{X} の期待値は $\langle \hat{X} \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{X} | \Psi(t) \rangle$ と書けるため, 自由ハミルトニアン $\hat{H}_0 = \hat{H} \otimes \hat{I}_E + \hat{I} \otimes \hat{H}_E$ による時間発展演算子 $\hat{U}_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$ を用いると,

$$\langle \hat{X} \rangle = \langle \Psi(0) | \hat{U}_{\text{tot}}^\dagger(t) \hat{X} \hat{U}_{\text{tot}}(t) | \Psi(0) \rangle \quad (15a)$$

$$= \langle \Psi(0) | \hat{U}_{\text{tot}}^\dagger(t) \hat{U}_0(t) \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{X} \hat{U}_0(t) \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{U}_{\text{tot}}(t) | \Psi(0) \rangle \quad (15b)$$

$$= \langle \tilde{\Psi}(t) | \tilde{X}(t) | \tilde{\Psi}(t) \rangle \quad (15c)$$

のように変形ができる. ただし, $\tilde{X}(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{X} \hat{U}_0(t)$, $|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{U}_{\text{tot}}(t) |\Psi(0)\rangle =$

$\hat{U}_0^\dagger(t)|\Psi(t)\rangle$ はそれぞれ相互作用描像における演算子及び状態ベクトルである。 $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ の時間発展方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\Psi}(t)\rangle = i\hbar \left(\frac{d\hat{U}_0^\dagger(t)}{dt} \hat{U}_{\text{tot}}(t) + \hat{U}_0^\dagger(t) \frac{d\hat{U}_{\text{tot}}(t)}{dt} \right) |\Psi(0)\rangle \quad (16a)$$

$$= \left(-\hat{H}_0 \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{U}_{\text{tot}}(t) + \hat{U}_0^\dagger(t) (\hat{H}_0 + \lambda \hat{V}) \hat{U}_{\text{tot}}(t) \right) |\Psi(0)\rangle \quad (16b)$$

$$= \lambda \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{V} \hat{U}_{\text{tot}}(t) |\Psi(0)\rangle \quad (16c)$$

$$= \lambda \left(\hat{U}_0^\dagger(t) \hat{V} \hat{U}_0(t) \right) \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{U}_{\text{tot}}(t) |\Psi(0)\rangle \quad (16d)$$

$$= \lambda \tilde{V}(t) |\tilde{\Psi}(t)\rangle \quad (16e)$$

と書ける。 $\tilde{V}(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{V} \hat{U}_0(t)$ は相互作用描像における相互作用ハミルトニアンであり、

$$\tilde{V}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0 \hat{I}_E + \hat{I}_E \hat{H}_0)t} \hat{V} e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_0 \hat{I}_E + \hat{I}_E \hat{H}_0)t} \quad (17a)$$

$$= i\hbar \sum_{m,n} \left(|m\rangle \langle n| \otimes \int_0^\infty d\omega g_{mn}(\omega) e^{-i(\omega - \omega_{mn})t} \hat{b}_\omega - h.c. \right) \quad (17b)$$

$$= i\hbar \sum_{m,n} \left(|m\rangle \langle n| \otimes \tilde{B}_{mn}(t) - |n\rangle \langle m| \otimes \tilde{B}_{mn}^\dagger(t) \right) \quad (17c)$$

のように書ける。ただし、 ω_{mn} は注目系の自由ハミルトニアンにおける固有エネルギー差 $\hbar\omega_{mn} = E_m - E_n$ を表している。また、演算子 $\tilde{B}_{mn}(t)$ は

$$\tilde{B}_{mn}(t) = \int_0^\infty d\omega g_{mn}(\omega) e^{-i(\omega - \omega_{mn})t} \hat{b}_\omega \quad (18)$$

と定義した演算子であり、 $\tilde{B}_{mn}(t)$ と $\tilde{B}_{m'n'}^\dagger(t')$ の交換関係を

$$[\tilde{B}_{mn}(t), \tilde{B}_{m'n'}^\dagger(t')] = \int_0^\infty d\omega d\omega' g_{mn}(\omega) g_{m'n'}^*(\omega') e^{-i(\omega - \omega_{mn})t} e^{i(\omega' - \omega_{m'n'})t'} [\hat{b}_\omega, \hat{b}_{\omega'}^\dagger] \quad (19a)$$

$$= \left(\int_{-\infty}^\infty d\omega g_{mn}(\omega) g_{m'n'}^*(\omega) e^{-i(\omega - \omega_0)(t-t')} \right) e^{i(\omega_{mn} - \omega_{m'n'}) \frac{t+t'}{2}} \quad (19b)$$

$$= \left(\int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega) e^{-i(\omega - \omega_0)(t-t')} \right) e^{i(\omega_{mn} - \omega_{m'n'}) \frac{t+t'}{2}} \quad (19c)$$

のように書くことができる。ただし式(37)から式(38a)への変形においては、 $\omega < 0$ において $g_{mn}(\omega) = 0$ であることを用いて積分範囲を $-\infty \leq \omega \leq \infty$ に変更し、 $[\hat{b}_\omega, \hat{b}_{\omega'}^\dagger] = \delta(\omega - \omega')$ を代入することで計算を行った。また、 $\omega_0 = (\omega_{mn} + \omega_{m'n'})/2$ である。式(39)では $\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega) = 2\pi g_{mn}(\omega) g_{m'n'}^*(\omega)$ と置いており、 2π が掛けられているのは後の計算のための便宜である。

式 (16a)–(16e) より, 時刻 t における相互作用描像の全体系状態ベクトルは $|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \tilde{U}^{(\lambda)}(t)|\tilde{\Psi}(0)\rangle$ と表せる. ただし $\tilde{U}^{(\lambda)}(t)$ は相互作用描像における時間発展演算子であり,

$$\tilde{U}^{(\lambda)}(t) = \mathbf{T} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t ds \lambda \tilde{V}(s)} \right] \quad (20)$$

と書ける. $\mathbf{T}[\cdot]$ は時間順序積である. $\tilde{U}^{(\lambda)}(t)$ の時間発展方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} \tilde{U}^{(\lambda)}(t) = \lambda \tilde{V}(t) \tilde{U}^{(\lambda)}(t) \quad (21a)$$

$$= i\hbar \lambda \sum_{mn} \left(|m\rangle \langle n| \otimes \tilde{B}_{mn}(t) - |n\rangle \langle m| \otimes \tilde{B}_{mn}^\dagger(t) \right) \tilde{U}^{(\lambda)}(t) \quad (21b)$$

と書くことができる. ここで, 式 (21b) の両辺を λ^2 で割り, 時間のスケール変換 $\lambda^2 t = \tau$ を行くと,

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} \tilde{U}^{(\lambda)}\left(\frac{\tau}{\lambda^2}\right) = i\hbar \sum_{mn} \left(|m\rangle \langle n| \otimes \frac{1}{\lambda} \tilde{B}_{mn}\left(\frac{\tau}{\lambda^2}\right) - |n\rangle \langle m| \otimes \frac{1}{\lambda} \tilde{B}_{mn}^\dagger\left(\frac{\tau}{\lambda^2}\right) \right) \tilde{U}^{(\lambda)}\left(\frac{\tau}{\lambda^2}\right) \quad (22)$$

と書くことができ, 更に $\tilde{U}^{(\lambda)}(\tau/\lambda^2) = \tilde{\mathcal{U}}(\tau)$, $(1/\lambda) \tilde{B}_{mn}(\tau/\lambda^2) = \tilde{b}_{mn}(\tau)$ と置き換えて,

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} \tilde{\mathcal{U}}(\tau) = i\hbar \sum_{mn} \left(|m\rangle \langle n| \otimes \tilde{b}_{mn}(\tau) - |n\rangle \langle m| \otimes \tilde{b}_{mn}^\dagger(\tau) \right) \tilde{\mathcal{U}}(\tau) \quad (23a)$$

$$= \tilde{\mathcal{V}}(\tau) \tilde{\mathcal{U}}(\tau) \quad (23b)$$

のように書き表せる. ただし,

$$\tilde{\mathcal{V}}(\tau) = i\hbar \sum_{mn} \left(|m\rangle \langle n| \otimes \tilde{b}_{mn}(\tau) - |n\rangle \langle m| \otimes \tilde{b}_{mn}^\dagger(\tau) \right) \quad (24)$$

である. 演算子 $\tilde{b}_{mn}(\tau)$, $\tilde{b}_{m'n'}^\dagger(\tau')$ ($\tau' = \lambda^2 t'$) は, 式 (37)–(39) より, 交換関係を

$$[\tilde{b}_{mn}(\tau), \tilde{b}_{m'n'}^\dagger(\tau')] = \frac{1}{\lambda^2} \left[\tilde{B}_{mn}\left(\frac{\tau}{\lambda^2}\right), \tilde{B}_{m'n'}^\dagger\left(\frac{\tau'}{\lambda^2}\right) \right] \quad (25a)$$

$$= \frac{1}{\lambda^2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega) e^{-i\frac{\omega-\omega_0}{\lambda^2}(\tau-\tau')} \right) e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\frac{\tau+\tau'}{2\lambda^2}} \quad (25b)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\lambda^2} \Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega) e^{-i\frac{\omega-\omega_0}{\lambda^2}\mathcal{T}} \right) e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\frac{\tau+\tau'}{2\lambda^2}} \quad (25c)$$

と書くことができる. ただし, $\mathcal{T} = \tau - \tau'$ である. ここで $(\omega - \omega_0)/\lambda^2 = x$ と置くと,

$\omega = \omega_0 + \lambda^2 x$ 及び $dx = d\omega/\lambda^2$ より, 式 (25c) は

$$[\tilde{b}_{mn}(\tau), \tilde{b}_{m'n'}^\dagger(\tau')] = \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0 + \lambda^2 x) e^{-ix\mathcal{T}} \right) e^{i(\omega_{mn} - \omega_{m'n'}) \frac{\tau + \tau'}{2\lambda^2}} \quad (26)$$

と書ける. また, 式 (26) 右辺における被積分関数 $\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0 + \lambda^2 x) e^{-ix\mathcal{T}}$ は, テイラー展開 $\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0 + \lambda^2 x) = \sum_{k=0}^{\infty} (\lambda^2 x)^k [\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0)]^{(k)}/k!$ を用いて

$$\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0 + \lambda^2 x) e^{-ix\mathcal{T}} = \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\lambda^2 x)^k}{k!} [\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0)]^{(k)} \right\} e^{-ix\mathcal{T}} \quad (27a)$$

$$= \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\lambda^2)^k}{k!} [\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0)]^{(k)} \left(i \frac{\partial}{\partial \mathcal{T}} \right)^k \right\} e^{-ix\mathcal{T}} \quad (27b)$$

のように変形できる. ただし, $[\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0)]^{(k)}$ は $\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0)$ の k 階導関数である. また式 (27b) では $(i\partial/\partial\mathcal{T})^k e^{-ix\mathcal{T}} = x^k e^{-ix\mathcal{T}}$ であることを用いている. 式 (27b) を式 (26) に代入すると,

$$[\tilde{b}_{mn}(\tau), \tilde{b}_{m'n'}^\dagger(\tau')] = \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{[\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0)]^{(k)}}{k!} \left(i\lambda^2 \frac{\partial}{\partial \mathcal{T}} \right)^k \right\} \quad (28a)$$

$$\times \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{-ix\mathcal{T}} \right) e^{i(\omega_{mn} - \omega_{m'n'}) \frac{\tau + \tau'}{2\lambda^2}} \quad (28b)$$

$$= \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{[\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega_0)]^{(k)}}{k!} \left(i\lambda^2 \frac{\partial}{\partial \mathcal{T}} \right)^k \right\} \delta(\mathcal{T}) e^{i(\omega_{mn} - \omega_{m'n'}) \frac{\tau + \tau'}{2\lambda^2}} \quad (28c)$$

と書き表すことができる. 式 (28c) ではデルタ関数の定義式

$$\delta(\mathcal{T}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{-ix\mathcal{T}} \quad (29)$$

を用いている.

さて, 注目系における任意の演算子 \hat{A} の期待値は, 相互作用描像における全体系状態ベクトル $|\tilde{\Psi}(\tau)\rangle$ が $|\tilde{\Psi}(\tau)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(\tau) |\Psi(\tau)\rangle$ と書けることを用いて,

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}(\tau) \hat{A}) \quad (30a)$$

$$= \text{Tr}(\text{Tr}_E(|\Psi(\tau)\rangle \langle \Psi(\tau)|) \hat{A}) \quad (30b)$$

$$= \text{Tr}_{\text{tot}}(|\Psi(\tau)\rangle \langle \Psi(\tau)| \hat{A} \otimes \hat{I}_E) \quad (30c)$$

$$= \text{Tr}_{\text{tot}}(|\tilde{\Psi}(\tau)\rangle \langle \tilde{\Psi}(\tau)| \hat{U}_0^\dagger(\tau) \hat{A} \otimes \hat{I}_E \hat{U}_0(\tau)) \quad (30d)$$

$$= \text{Tr}_{\text{tot}}(|\tilde{\Psi}(\tau)\rangle \langle \tilde{\Psi}(\tau)| \tilde{A}(\tau) \otimes \hat{I}_E) \quad (30e)$$

のように変形ができる。ただし、 $\tilde{A}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}$ である。更に、 $\tilde{U}^{(\lambda)}(\tau/\lambda^2) \rightarrow \tilde{\mathcal{U}}(\tau)$ において $|\tilde{\Psi}(\tau)\rangle = \tilde{\mathcal{U}}(\tau)|\Psi(0)\rangle$ と書けることを用いると、

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}_{\text{tot}} (|\Psi(0)\rangle \langle \Psi(0)| \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) \tilde{A}(\tau) \otimes \hat{I}_E \tilde{\mathcal{U}}(\tau)) \quad (31a)$$

$$= \langle \Psi(0)| \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) \tilde{A}(\tau) \otimes \hat{I}_E \tilde{\mathcal{U}}(\tau) |\Psi(0)\rangle \quad (31b)$$

というように書き下すことができる。

ここで、 $\hat{A} = |n\rangle\langle m|$ を式 (31b) に代入すると、

$$\langle n| \langle m| \rangle = \langle \Psi(0)| \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} |n\rangle \langle m| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} \otimes \hat{I}_E \tilde{\mathcal{U}}(\tau) |\Psi(0)\rangle \quad (32a)$$

$$= \langle \Psi(0)| \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) |n\rangle \langle m| \otimes \hat{I}_E \tilde{\mathcal{U}}(\tau) |\Psi(0)\rangle e^{-i\omega_{mn}\tau} \quad (32b)$$

と書ける。更に、 $\langle n| \langle m| \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} |n\rangle \langle m|) = \langle m| \hat{\rho} |n\rangle = \rho_{nm}(\tau)$ と書けるため、式 (32b) は注目系密度行列の mn 成分に等しい。また、注目系密度演算子は $\hat{\rho}(\tau) = \sum_{mn} \rho_{mn}(\tau) |m\rangle \langle n|$ と展開でき、相互作用描像 $\tilde{\rho}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} \hat{\rho}(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}$ においては

$$\tilde{\rho}(\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} \sum_{mn} \rho_{mn}(\tau) |m\rangle \langle n|(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} \quad (33a)$$

$$= \sum_{mn} \rho_{mn}(\tau) e^{i\omega_{mn}\tau} |m\rangle \langle n| \quad (33b)$$

と書けるため、式 (32b) と式 (33b) より

$$\langle m| \tilde{\rho}(\tau) |n\rangle = \langle \Psi(0)| \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) |n\rangle \langle m| \otimes \hat{I}_E \tilde{\mathcal{U}}(\tau) |\Psi(0)\rangle \quad (34)$$

である。従って、式 (34) の時間発展を計算できれば注目系密演算子の運動方程式を導くことができる。

van Hove 極限の方法では、式 (34) の時間発展方程式を微小量 λ について摂動展開し、時間スケール変換 $\lambda^2 t = \tau$ において極限 $\lambda \rightarrow 0$, $t \rightarrow \infty$ (τ 有限) を取ることで時間の粗視化を行い、Lindblad-QME を導出する。

式 (23b) より, 式 (34) の時間発展は

$$\frac{d}{d\tau} \langle m | \tilde{\rho}(\tau) | n \rangle = \langle \Psi(0) | \frac{d\tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau)}{dt} | n \rangle \langle m | \otimes \hat{I}_E \tilde{\mathcal{U}}(\tau) | \Psi(0) \rangle \quad (35a)$$

$$+ \langle \Psi(0) | \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) | n \rangle \langle m | \otimes \hat{I}_E \frac{d\tilde{\mathcal{U}}(\tau)}{dt} | \Psi(0) \rangle \quad (35b)$$

$$= \frac{i}{\hbar} (\langle \Psi(0) | \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) \tilde{\mathcal{V}}(\tau) | n \rangle \langle m | \otimes \hat{I}_E \tilde{\mathcal{U}}(\tau) | \Psi(0) \rangle) \quad (35c)$$

$$- \langle \Psi(0) | \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) | n \rangle \langle m | \otimes \hat{I}_E \tilde{\mathcal{V}}(\tau) \tilde{\mathcal{U}}(\tau) | \Psi(0) \rangle) \quad (35d)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(0) | \tilde{\mathcal{U}}^\dagger(\tau) [\tilde{\mathcal{V}}(\tau), | n \rangle \langle m | \otimes \hat{I}_E] \tilde{\mathcal{U}}(\tau) | \Psi(0) \rangle \quad (35e)$$

と書ける. 式 (35e) 中の交換関係は,

$$[\tilde{\mathcal{V}}(\tau), | n \rangle \langle m | \otimes \hat{I}_E] = i\hbar \sum_{m'n'} [| m' \rangle \langle n' | \otimes \tilde{b}_{m'n'}(\tau) - h.c., | n \rangle \langle m | \otimes \hat{I}_E] \quad (36a)$$

$$= i\hbar \sum_{m'n'} (| m' \rangle \langle m | \otimes \tilde{b}_{m'n'}(\tau) \delta_{n'n} \quad (36b)$$

$$- | n' \rangle \langle m | \otimes \tilde{b}_{m'n'}^\dagger(\tau) \delta_{m'n} \quad (36c)$$

$$- | n \rangle \langle n' | \otimes \tilde{b}_{m'n'}(\tau) \delta_{mm'} \quad (36d)$$

$$- | n \rangle \langle m' | \otimes \tilde{b}_{m'n'}^\dagger(\tau) \delta_{mm'}) \quad (36e)$$

$$= i\hbar \sum_{m'} (| m' \rangle \langle m | \otimes (\tilde{b}_{m'n}(\tau) - \tilde{b}_{nm'}^\dagger(\tau)) \quad (36f)$$

$$- | n \rangle \langle m' | \otimes (\tilde{b}_{mm'}(\tau) - \tilde{b}_{m'm}^\dagger(\tau))) \quad (36g)$$

のように書き下すことができる.

ここで, 導出における条件として, 初期状態 $|\Psi(0)\rangle$ において注目系と環境系が無相関であることを課す. 即ち, $|\Psi(0)\rangle = |\phi(0)\rangle \otimes |\phi(0)\rangle_E$ と書けるとする. また, ここでは簡単な場合として, 環境系の初期状態が真空状態 $|\phi(0)\rangle_E = |0\rangle_E$ であると仮定する. このとき, 演算子 $\tilde{b}_{mn}(\tau)$ と $\tilde{\mathcal{U}}(\tau)$ に関して, その交換関係 $[\tilde{b}_{mn}(\tau), \tilde{\mathcal{U}}(\tau)]$ を計算すると,

$$[\tilde{b}_{mn}(\tau), \tilde{\mathcal{U}}(\tau)] = - \sum_{m'n'} \int_0^\tau d\tau' [\tilde{b}_{mn}(\tau), \tilde{b}_{m'n'}^\dagger(\tau')] | n' \rangle \langle m' | \tilde{\mathcal{U}}(\tau) \quad (37)$$

と書けることが分かる. 従って, 式 (36g) を式 (35e) に代入し, 式 (37) から $\tilde{b}_{mn}(\tau)$ と $\tilde{\mathcal{U}}(\tau)$ の置換を行って整理することで, 式 (35e) から Lindblad-QME を導くことができる. ただし, この際に最も重要な操作として行われるのが van Hove 極限 $\lambda \rightarrow 0 (\tau < \infty)$

である．具体的には，計算の過程で登場する記憶項に対して，

$$\int_0^{\tau/\lambda^2} dT \exp(-i(\omega - \omega_0)T) \rightarrow \int_0^{\infty} dT \exp(-i(\omega - \omega_0)T) \quad (38a)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_0^{\infty} dT \exp(-i(\omega - \omega_0 - i\epsilon)T) \quad (38b)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{-i}{\omega - \omega_0 - i\epsilon} \quad (38c)$$

$$= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{\epsilon - i(\omega - \omega_0)}{(\omega - \omega_0)^2 + \epsilon^2} \quad (38d)$$

$$= \pi\delta(\omega - \omega_0) - i\mathcal{P}\frac{1}{\omega - \omega_0} \quad (38e)$$

のような粗視化計算ができる．式(38b)から導入される極限 $\lim_{\epsilon \rightarrow +0}$ は，特異点 $\omega - \omega_0 = 0$ を避けるために，エネルギーを虚数軸へわずかにずらして計算を行う複素積分の手法である．式(38d)の実部 $\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{\epsilon}{(\omega - \omega_0)^2 + \epsilon^2}$ は $\epsilon \rightarrow +0$ において， $\omega - \omega_0 = 0$ のとき 0 ， $\omega - \omega_0 \neq 0$ のとき ∞ に発散するためデルタ関数 $\pi\delta(\omega - \omega_0)$ と見なせる．また，式(38d)の虚部における記号 \mathcal{P} は，この項を含む積分を実行する際に主値積分

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left(\int_{-\infty}^{\omega_0 - \epsilon} d\omega \frac{\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega)}{\omega - \omega_0} + \int_{\omega_0 + \epsilon}^{\infty} d\omega \frac{\Gamma_{m'n'}^{mn}(\omega)}{\omega - \omega_0} \right) \quad (39)$$

を行う，という意味である．実部 $\pi\delta(\omega - \omega_0)$ に依存する項(虚数エネルギー $-i\epsilon$ に起因)が注目系の散逸過程を記述する．式(38d)の虚部は最終的に注目系の自由ハミルトニアンに組み込まれ，密度演算子 $\hat{\rho}$ との交換関係を為すため，散逸過程を記述しない(ラムシフト)．

結果として，式(14a)-(14d)のハミルトニアンにおける Lindblad-QME は，

$$\frac{d\hat{\rho}}{d\tau} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H} + \hat{\Delta}, \hat{\rho}] + \sum_{k,m,l,n} \delta_{\omega_{km}, \omega_{ln}} \Gamma_{km,ln}(\omega_{km}) \left(\hat{L}_{ln}^\dagger \hat{\rho} \hat{L}_{km} - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_{km} \hat{L}_{ln}^\dagger, \hat{\rho} \} \right) \quad (40)$$

と導出される．ただしラムシフト項 $\hat{\Delta}$ は，注目系自由ハミルトニアン \hat{H} と同じ固有状態を持つことから，エネルギーの基準を適切に取り直すことで常に無視できる．ここで， $km \rightarrow i$ ， $ln \rightarrow j$ ， $A_{ij} = \delta_{\omega_{km}, \omega_{ln}} \Gamma_{km,ln}$ と置き換えると，式(40)は

$$\frac{d\hat{\rho}}{d\tau} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_{i,j} A_{ij} \left(\hat{L}_j^\dagger \hat{\rho} \hat{L}_i - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_i \hat{L}_j^\dagger, \hat{\rho} \} \right) \quad (41)$$

と書ける．

以上のように，ここでは van Hove 極限 $\lambda^2 t = \tau$ ($\lambda \rightarrow 0, t \rightarrow \infty, \tau < \infty$) を用いた Lindblad 型 QME の導出過程を詳述した．この手法は，導出過程において物理的過程

を根拠とした恣意的操作をほぼ含まないため、数学的に非常に厳密である。必要となる物理的仮定は、(i) 熱浴系と見なす物理系ヒルベルト空間が非可算無限個であること、(ii) 注目系と熱浴系が初期時刻 $t = 0$ において相関を持たないこと、(iii) van Hove 極限を取れる前提として相互作用が非常に弱いことである。仮定 (i) は、式 (38e) に生じるデルタ関数を適切に処理するために、積分形の相互作用ハミルトニアンが必要となるためである。ただし可算自由度ヒルベルト空間の下、離散的な熱浴系の自由ハミルトニアン及び相互作用ハミルトニアンから議論を開始したとしても、導出過程の式 (38a) に相当する部分においてスペクトル密度関数を導入することで計算を進めることが可能である。例えば、次のような可算無限自由度の熱浴系における自由ハミルトニアン、相互作用ハミルトニアンを考える。

$$\hat{H}_E = \sum_{i=0}^{\infty} \hbar \omega_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \otimes \hat{I}_i, \quad (42a)$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = i\hbar \sum_{m,n} \sum_{i=0}^{\infty} g_{mn,i} |m\rangle \langle n| \otimes \hat{b}_i \otimes \hat{I}_i - h.c. \quad (42b)$$

ただし、生成消滅演算子の交換関係は

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger] = \delta_{i,i'}, \quad [\hat{b}_i, \hat{b}_{i'}] = 0, \quad [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_{i'}^\dagger] = 0$$

を満たす。式 (42a), (42b) のように離散モードの \hat{H}_E , \hat{H}_{int} に基づき上述した van Hove 極限の計算過程を進めると、

$$\sum_i g_{mn,i}^2 \delta(\omega_i - \omega_0)$$

という項が生じるため、これを白色雑音的なデルタ関数形のスペクトル密度関数 [70,71]

$$J_{mn}(\omega_0) = \sum_i g_{mn,i}^2 \delta(\omega_i - \omega_0)$$

とすることで、式 (41) の Lindblad 型 QME と一致する。

3.2 Thermo field dynamics

3.2.1 Thermo field dynamics の理論構造

Thermo field dynamics (TFD) は、場の量子論の枠組みで量子系の熱的・統計的な性質振る舞いを議論する熱場の量子論 (あるいは有限温度の場の量子論) と呼ばれる諸理

論の一つである [35–41]. TFD の特徴として, 実時間形式であること, また生成消滅演算子に基づく準粒子描像に立脚していることが挙げられ, これにより物理的解釈や量子力学との互換性において秀でた理論となっている. 特筆すべきは理論の構築において, チルダ空間と呼ばれる, 元のヒルベルト空間 \mathcal{H} と同じ自由度の空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ を導入する点である. このチルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ は, 次のような形で具体的に現れる.

今, 我々に見えている物理系の密度演算子 $\hat{\rho}$ を

$$\hat{\rho} = \sum_k p_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (43)$$

と書けると想定する. p_k , $|\phi_k\rangle$ は固有値, 固有ベクトルである. 式 (43) を用いると, 任意のエルミート演算子 \hat{A} の期待値は $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \sum_k p_k \langle k|\hat{A}|k\rangle$ と書けるが, この期待値の表式を次のように変形する.

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_k p_k \langle \phi_k|\hat{A}|\phi_k\rangle \quad (44a)$$

$$= \sum_k p_k^\alpha p_k^{1-\alpha} \langle \phi_k|\hat{A}|\phi_k\rangle \quad (44b)$$

$$= \sum_{k,k'} p_k^{1-\alpha} \langle \phi_{k'}|\hat{A}p_k^\alpha |\phi_k\rangle \langle \phi_k| |\phi_{k'}\rangle \quad (44c)$$

$$= \sum_{k'} p_k^{1-\alpha} \langle \phi_{k'}|\hat{A}\left(\sum_k p_k^\alpha |\phi_k\rangle \langle \phi_k|\right)|\phi_{k'}\rangle. \quad (44d)$$

ただし式 (44b) では, 密度演算子の固有値が正定値であることから $p_k = p_k^\alpha p_k^{1-\alpha}$ と分解できることを用いた. α は任意の実数である. ここで, 式 (44d) に対して次のような置換を行う.

$$\sum_{k'} p_k^{1-\alpha} \langle \phi_{k'}|\hat{A}\left(\sum_k p_k^\alpha |\phi_k\rangle \langle \phi_k|\right)|\phi_{k'}\rangle \quad (45a)$$

$$\rightarrow \left(\sum_{k'} p_k^{1-\alpha} \langle \phi_{k'}|\otimes \langle \tilde{\phi}_{k'}|\right) (\hat{A} \otimes \tilde{I}) \left(\sum_k p_k^\alpha |\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_k\rangle\right). \quad (45b)$$

ここでは, 次のような置換を行っている.

$$\sum_k p_k^\alpha |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \rightarrow \sum_k p_k^\alpha |\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_k\rangle, \quad (46a)$$

$$\sum_{k'} p_{k'}^{1-\alpha} \langle \phi_{k'} | (\cdots) | \phi_{k'} \rangle \rightarrow \sum_{k'} p_{k'}^{1-\alpha} \langle \phi_{k'} | \otimes \langle \tilde{\phi}_{k'} | (\cdots), \quad (46b)$$

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A} \otimes \tilde{I}. \quad (46c)$$

密度演算子のケットベクトル $|\phi_k\rangle$ の共役ブラベクトル $\langle \phi_k|$ をヒルベルト空間のケットベクトル $|\tilde{\phi}_k\rangle$ に置き換えることで、 \mathcal{H} の演算子 $|\phi_k\rangle\langle \phi_k|$ は、より大きな空間 $\mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}$ におけるケットベクトル $|\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_k\rangle$ と見なされる。導入された空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ と元の空間 \mathcal{H} の自由度は同じであるため、 $\mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}$ は元の空間に比べて自由度が倍化された空間となっている。従って、式 (46a)-(46c) の置換を自由度倍加と呼ぶ。この置換の意図は、混合状態における期待値 $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A})$ を、純粋状態における期待値形式で表現することにある。即ち、 $\sum_k p_k^\alpha |\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_k\rangle = |\rho\rangle$ 、 $\sum_{k'} p_{k'}^{1-\alpha} \langle \phi_{k'}| \otimes \langle \tilde{\phi}_{k'}| = \langle \rho'|$ と置いて、

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \langle \rho' | \hat{A} \otimes \tilde{I} | \rho \rangle \quad (47)$$

と記述することができる。式 (47) の純粋状態期待値をによって場の演算子間の伝搬関数を定義し、ファインマンダイアグラムを用いることで、混合状態 (即ち有限温度) における物理量の計算を場の量子論の枠組みで行うことが可能となる。

より詳細には、伝搬関数計算を可能とするために、純粋状態 $|\rho\rangle$ 及び $\langle \rho'|$ を真空として扱う必要があるため、Bogoliubov 変換によって各々の空間 \mathcal{H} 、 $\tilde{\mathcal{H}}$ の生成 (消滅) 演算子 \hat{a}^\dagger (\hat{a})、 \tilde{a}^\dagger (\tilde{a}) を組み合わせ、 $\mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}$ における消滅演算子を用意することになる (準粒子描像)。このとき、新たな真空と見なされる状態 $|\rho\rangle$ 及び $\langle \rho'|$ を熱的真空、Bogoliubov 変換を熱的 Bogoliubov 変換と呼ぶ。本誌では、自由度倍加操作という TFD 理論の特徴的な構造にのみ着目し、TFD を用いた具体的な数値解析を行うということはない。従って、熱的 Bogoliubov 変換の詳細や、数値解析を行うためのファインマンダイアグラムを用いた計算、各種繰り込み操作等に関しては、文献 [35] などを参照すると良い。以下では、本論文で重要となる TFD の理論構造について、具体的には行列 (演算子) 特異値分解と、無限自由度のヒルベルト空間における真空の非同値性について説明する。

3.2.2 Schmidt 分解 (特異値分解) との関係性

TFD で行われる自由度倍加の操作は、Schmidt 分解 (あるいは特異値分解) という操作と深い関係にある。

Schmidt 分解とは、あるヒルベルト空間 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_E$ における純粋状態ベクトル $|\Psi\rangle$ は常に、

$$|\Psi\rangle = \sum_k \sigma_k |\phi_k\rangle \otimes |\phi_k\rangle_E \quad (48)$$

のように分解することができる、というものである。具体的には、次のように分解が行われる。純粋状態ベクトル $|\Psi\rangle$ は一般に

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1, j=1}^{M, N} c_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle_E \quad (49)$$

と書ける。 c_{ij} は複素係数、 $\{|i\rangle\}$ ($i = 1, \dots, M$), $\{|j\rangle_E\}$ ($j = 1, \dots, N$) はそれぞれヒルベルト空間 \mathcal{H} , \mathcal{H}_E における正規直交基底ベクトルである。ここで、複素係数 c_{ij} を $M \times N$ の複素行列 C における (ij) 成分として見ると、 C は

$$C = U\Sigma V \quad (50)$$

と分解することができる。 U , V はそれぞれ $M \times M$, $N \times N$ のユニタリ行列である。 Σ は正の実数 σ_k を対角項に持ち、非対角項が全て 0 である $M \times N$ 行列であり、即ち $M < N$ においては

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \sigma_M & 0 & \cdots \end{bmatrix}, \quad (51)$$

$M > N$ においては

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \sigma_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}, \quad (52)$$

$M = N$ においては σ_k を対角項に持つ対角行列となる。また、 σ_k^2 は行列 CC^\dagger (あるいは $C^\dagger C$) の半正定値な固有値となっており、 C に対して一意である。任意の行列に対して、式 (50) の分解は常に可能であり、この行列分解を特異値分解、 σ_k を特異値と呼ぶ。

任意のユニタリ演算子 U , V の成分をそれぞれ u_{ik} , v_{kj} と書くと、特異値分解

の式 (50) の成分表示は

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^a u_{ik} \sigma_k v_{kj} \quad (53)$$

と書くことができる. a は $\sigma_k \neq 0$ を満たす σ_k の個数であり, 行列 Σ のランクに対応する ($M \leq N$ ならば $a \leq M$, $M \geq N$ ならば $a \leq N$). 式 (53) を式 (49) に代入すると, $|\Psi\rangle$ は

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1, j=1}^{M, N} \left(\sum_{k=1}^a u_{ik} \sigma_k v_{kj} \right) |i\rangle \otimes |j\rangle_{\text{E}} \quad (54a)$$

$$= \sum_{k=1}^a \sigma_k \left(\sum_{i=1}^M u_{ik} |i\rangle \right) \otimes \left(\sum_{j=1}^N v_{kj} |j\rangle_{\text{E}} \right) \quad (54b)$$

$$= \sum_{k=1}^a \sigma_k |\phi_k\rangle \otimes |\phi_k\rangle_{\text{E}} \quad (54c)$$

と変形でき, 式 (48) の形となる. ただし $|\phi_k\rangle = \sum_{i=1}^M u_{ik} |i\rangle$, $|\phi_k\rangle_{\text{E}} = \sum_{j=1}^N v_{kj} |j\rangle_{\text{E}}$ である. また, u_{ik} , v_{kj} がユニタリ行列の成分であることから, $|\phi_k\rangle$, $|\phi_k\rangle_{\text{E}}$ は正規直行性 $\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle =_{\text{E}} \langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle_{\text{E}} = \delta_{kk'}$ を満たすことが分かる. また, 全体状態密度演算子 $|\Psi\rangle \langle \Psi|$ を部分縮約すると, ヒルベルト空間 \mathcal{H} の密度演算子が

$$\hat{\rho} = \text{Tr}_{\text{E}} (|\Psi\rangle \langle \Psi|) \quad (55a)$$

$$= \sum_{k, k'=1}^a \sigma_k \sigma_{k'} |\phi_k\rangle \langle \phi_{k'}| \text{Tr}_{\text{E}} (|\phi_k\rangle_{\text{E}} \langle \phi_{k'}|_{\text{E}}) \quad (55b)$$

$$= \sum_{k=1}^a \sigma_k^2 |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (55c)$$

と書けるため, 特異値 σ_k は固有値の平方根 $\sqrt{p_k}$ に等しい. 以上のように, 任意のヒルベルト空間 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_{\text{E}}$ における純粋状態 (式 (49)) は常に Schmidt 分解によって, 特異値 $\sigma_k = \sqrt{p_k}$ を係数とした基底の線形結合で記述することができる. 更に, 重要なこととして, 式 (55a) では \mathcal{H}_{E} の基底を用いて部分縮約を行ったが, \mathcal{H} の基底を用いて全体状態密度演算子 $|\Psi\rangle \langle \Psi|$ の部分縮約を行うと, ヒルベルト空間 \mathcal{H}_{E} における密度演算子 $\hat{\rho}_{\text{E}}$ が

$$\hat{\rho}_{\text{E}} = \text{Tr} (|\Psi\rangle \langle \Psi|) \quad (56a)$$

$$= \sum_{k, k'=1}^a \sigma_k \sigma_{k'} \text{Tr} (|\phi_k\rangle \langle \phi_{k'}|) |\phi_k\rangle_{\text{E}} \langle \phi_{k'}|_{\text{E}} \quad (56b)$$

$$= \sum_{k=1}^a \sigma_k^2 |\phi_k\rangle_{\text{E}} \langle \phi_k|_{\text{E}} \quad (56c)$$

という形で得られる。\$\hat{\rho}_E\$ の次元は \$\mathcal{H}_E\$ の次元 \$N\$ であるため、\$\hat{\rho}_E\$ の固有ベクトルの個数は最大 \$N\$ である。即ち \$M < N\$ において、一般的に \$|\phi_k\rangle_E\$ は \$\hat{\rho}_E\$ の固有ベクトルではない。しかし、系全体が純粋状態ベクトル \$|\Psi\rangle\$ であると固定することで、次元 \$N (> M)\$ のヒルベルト空間 \$\mathcal{H}_E\$ における \$\hat{\rho}_E\$ は、\$\mathcal{H}\$ における \$\hat{\rho}\$ の非零固有値の個数 \$a (\leq M)\$ によって、式 (56c) の直交状態の形で常に表すことができることを、Schmidt 分解は示している。

ここで、TFD の自由度倍加操作との関係性を説明するが、すぐに分かるように Schmidt 分解によって生じる直交状態ベクトル \$|\phi_k\rangle_E\$ が、チルダ空間 \$\tilde{\mathcal{H}}\$ の状態ベクトル \$|\tilde{\phi}_k\rangle\$ に相当する。状態ベクトル空間 \$\{|\tilde{\phi}_k\rangle\}\$ は、\$\mathcal{H}\$ における \$\hat{\rho} = \sum_k p_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k|\$ のブラ空間 \$\{|\phi_k\rangle\}\$ の対応物である。従って、TFD 状態ベクトル \$|\rho\rangle\$ における Schmidt 分解は、\$v_{kj} \rightarrow \tilde{u}_{kj}\$ として、次のように書ける。

$$|\rho\rangle = \sum_{i=1, j=1}^M \left(\sum_{k=1}^M u_{ik} \sigma_k \tilde{u}_{kj} \right) |i\rangle \otimes |\tilde{j}\rangle \quad (57a)$$

$$= \sum_{k=1}^M \sigma_k \left(\sum_{i=1}^M u_{ik} |i\rangle \right) \otimes \left(\sum_{j=1}^M \tilde{u}_{kj} |\tilde{j}\rangle \right) \quad (57b)$$

$$= \sum_{k=1}^M \sigma_k |\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_k\rangle. \quad (57c)$$

ただし \$\sigma_k = \sqrt{p_k}\$ であり、これは式 (46a), (46b) の \$p_k^\alpha\$ 及び \$p_k^{1-\alpha}\$ において \$\alpha = 1/2\$ とする表現である (ユニタリー表現)。これは、密度演算子 \$\hat{\rho}\$ の描像において、以下のような特異値分解に相当する。

$$\sqrt{\hat{\rho}} = \sum_{i=1, j=1}^M (\sqrt{\hat{\rho}})_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (58a)$$

$$= \sum_{i=1, j=1}^M \left(\sum_{k=1}^M u_{ik} \sigma_k u_{kj}^* \right) |i\rangle \langle j| \quad (58b)$$

$$= \sum_{k=1}^M \sigma_k \left(\sum_{i=1}^M u_{ik} |i\rangle \right) \left(\sum_{j=1}^M \langle j| u_{kj}^* \right) \quad (58c)$$

$$= \sum_{k=1}^M \sigma_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k|. \quad (58d)$$

これは即ち、対角化操作そのものである。固有状態ベクトル \$|\phi_k\rangle\$ には、エルミート共役関係 \$(|\phi_k\rangle)^\dagger = \langle \phi_k|\$ が成り立つため、チルダ空間 \$\tilde{\mathcal{H}}\$ の直交状態ベクトル \$|\tilde{\phi}_k\rangle\$ は、\$\tilde{\mathcal{H}}\$ における密度演算子の固有状態ベクトルに一致する。式 (57a)–(57c) の Schmidt 分解より、TFD 状態ベクトル \$|\rho\rangle\$ は、一般的な純粋状態ベクトル \$|\Psi\rangle\$ の特別な場合であることが分かる。即ち、ヒルベルト空間 \$\mathcal{H}_E\$ が、エルミート共役関係 \$(|\phi_k\rangle)^\dagger = \langle \phi_k|\$ を反

映した, \mathcal{H} から一意に決まるヒルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ であるような特別な外部系として, $\tilde{\mathcal{H}}$ を実在的に解釈することが可能である.

この結果は, 第7章で詳細に検討する SEAQT における状態代数演算子 $\hat{\gamma}$ の動的な挙動を理解する上で, 重要な洞察を提供することが期待される. TFD の基本的な枠組みとその Schmidt 分解との関係性についての本節の議論を背景に, 次節では SEAQT の理論とその特性について深く探る.

4 Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics

本章では, Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics (SEAQT) という, SEA 仮説 [51–53,55–66] に基づいた内因的不可逆性を記述する理論体系の導入を行う. SEA 仮説は内部 Reservoir の詳細な構造を必要としないため, SEAQT の定式化では新たに外部系の物理構造を定義することは不要である. また, SEAQT はエントロピー生成の非減少が常に保証されるため, マクロ熱力学の第二法則と整合した理論として自然に構築される. 本章では, SEAQT の基本的な定式化・運動方程式の導出を行い, 簡単なモデルの数値解析を行うことによって理論の特徴や記述される具体的ダイナミクスに関して議論する. さらに, 無限状態数系の取り扱いが難しいという課題にも触れ, この点を解決するために開発された従来の手法である Hypo equilibrium state の構成と適用限界について説明する.

4.1 SEAQT の背景と基本概念

外的 Reservoir (熱浴) を前提とする散逸緩和理論において, 熱浴系は物理的な構造を持つものとして扱われ, その影響を対象系の運動方程式に繰り込むことにより不可逆性が記述される. 一方で IQT のアプローチは, 内因不可逆性 (内的 Reservoir) の具体的な構造を明確にするのではなく, その影響がどのように表れるかを仮説をもとに定めている. このため, 内因不可逆性の具体的な構造は明らかではなく, 実態すら定かではない. これは, マクロ熱力学がエネルギーの不可逆的な側面を熱として扱うが, 熱の本質には触れないのと同じ考え方である. 図 1 の左下に示されている「？」という部分に直接的には触れず, その影響がどのように現れるかのみを考慮している. Steepest-Entropy-Ascent (SEA) という考え方は, 孤立系内のすべての散逸緩和過程が孤立系内部の自由度や物理量, 因果関係などの構造にのみ依存して最適化されるというものである [52]. 図 3 に示されている「渦」と「箱」のイメージでは, ある瞬間に渦を箱に閉じ込め, 完全に隔離してしまう. ユニタリー量子力学の観点では, 箱の中の渦は時間が経過しても永遠に消えない. 一方, IQT の立場では, 箱の中の渦は時間とともに質量を保持しながらゆっくりと消えていく. この渦の消失や変化は, 孤立した箱の内部構造だけに依存するとされる. エントロピーの上昇として考えれば, 孤立系でのエントロピー生成が最大となるのが SEA である.

SEA 仮説は「孤立系内の内因的散逸において, エントロピー生成率が最大化される」という主張である. IQT に基づく散逸は孤立系内で発生する現象であり, 従ってこの散逸過程は孤立系内の物理量や部分系間の相関のみに依存して進行する. そし

て、その過程がエントロピー生成率を常に最大化する最適な経路をとるべきであると、SEA 仮説は示唆している。即ち SEAQT では、孤立系の内部自由度の制約のもと、エントロピー生成率が最大となる条件を量子力学の基本に置き、基本運動方程式を導出する。

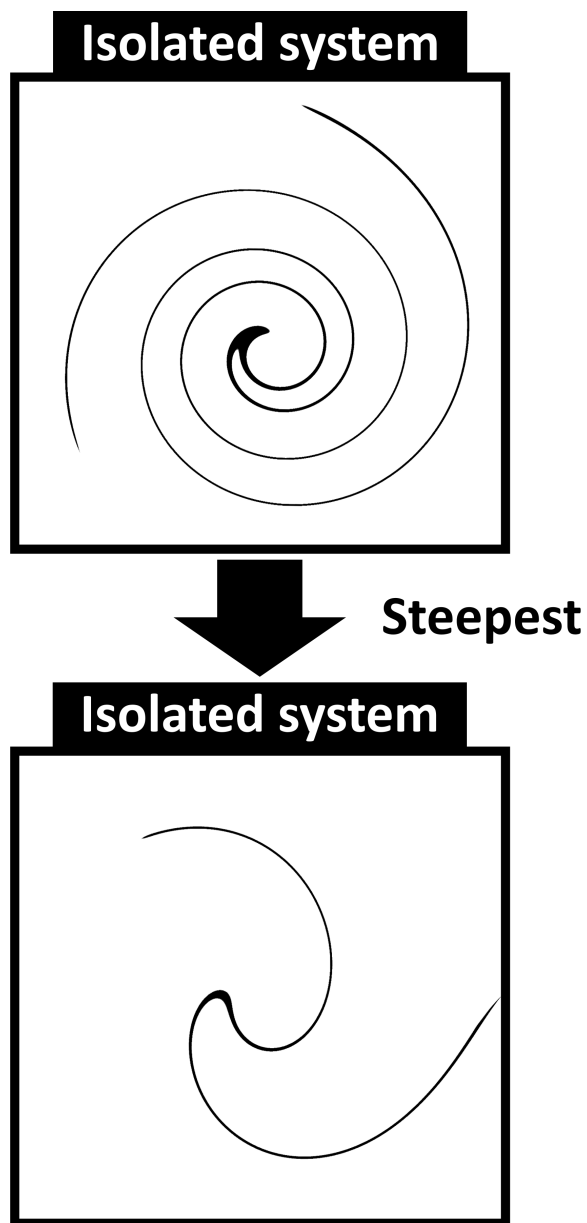


図 3: SEA 仮説の直感的解釈

4.2 変分原理による運動方程式の導出

4.2.1 単一系における SEAQT 運動方程式

ここでは先ず、系が単一系であるときの SEAQT 運動方程式の導出について説明する [52,53]. 単一系とは、その系の中に部分系と見做せる内部構造が存在しないような全体系である (部分系が存在する複合全体系における議論は小節 2.1.2 で行う).

密度演算子 $\hat{\rho}$ は、任意の非エルミート演算子 $\hat{\gamma}$ によって

$$\hat{\rho} = \hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger \quad (59)$$

と書ける. 式 (59) は、密度演算子のエルミート性と固有値の正值性を満たす一般的表式である [52,53,72–74]. SEAQT では、状態代数を $\hat{\gamma}$ として運動方程式の導出を行う. これにより、固有値 (確率) の正值性が常に担保されながら理論が構築される. 式 (59) から、密度演算子の時間発展は

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\rho}}{dt} &= \left(\frac{d\hat{\gamma}}{dt}\right)\hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma}\left(\frac{d\hat{\gamma}^\dagger}{dt}\right) \\ &= \hat{\Pi}\hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma}\hat{\Pi}^\dagger \end{aligned} \quad (60)$$

のように一般的に書ける. $\hat{\Pi} = d\hat{\gamma}/dt$ は状態の時間発展を表す. SEAQT では、 $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}_H + \hat{\Pi}_D$ と分解し、 $\hat{\Pi}_H\hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma}\hat{\Pi}_H^\dagger = -i[\hat{H}, \hat{\rho}]/\hbar$ とすることで運動方程式の可逆項 (Hamiltonian 項) を再現する [52]. このとき、 $\hat{\Pi}_H$ はエネルギー–時間の不確定性関係より $\hat{\Pi}_H = -i\hat{H}\hat{\gamma}/\hbar$ と定まる (Appendix A 参照).

SEA 仮説から $\hat{\Pi}_D$ が決定される. 具体的には、「系が満たすべき保存物理量期待値の時間不変性」及び「エントロピー生成率の最大化」より、 $\hat{\Pi}_D$ を求める. ここで、任意の演算子 \hat{A} , \hat{B} の内積 $(\hat{A}|\hat{B})$ を

$$(\hat{A}|\hat{B}) = \frac{1}{2}\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}^\dagger + \hat{A}^\dagger\hat{B}) \quad (61)$$

のように定義する [52]. これは Hilbert-Schmidt 内積 $\langle \hat{A}|\hat{B} \rangle = \text{Tr}(\hat{A}^\dagger\hat{B})$ の実部であり、 $(\hat{A}|\hat{B}) = (\hat{B}|\hat{A})$ より対称的である. この演算子内積を用いると、任意のエルミート演算子 \hat{X} の期待値 $\langle \hat{X} \rangle$, 及び $\langle \hat{X} \rangle$ の時間発展はそれぞれ,

$$\langle \hat{X} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{X}) = \frac{1}{2}\text{Tr}(\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger\hat{X} + \hat{\gamma}^\dagger\hat{X}\hat{\gamma}) = (\hat{\gamma}|\hat{X}\hat{\gamma}) \quad (62a)$$

$$\frac{d\langle\hat{X}\rangle}{dt} = \text{Tr}(\hat{H}\hat{\gamma}^\dagger\hat{X} + \hat{H}^\dagger\hat{X}\hat{\gamma}) = 2(\hat{H}|\hat{X}\hat{\gamma}) = 2(\hat{H}_H|\hat{X}\hat{\gamma}) + 2(\hat{H}_D|\hat{X}\hat{\gamma}) \quad (62b)$$

と記述できる。即ち、期待値は状態代数 $\hat{\gamma}$ と演算子 $\hat{X}\hat{\gamma}$ の内積、期待値の時間発展は状態の時間発展 \hat{H} と演算子 $\hat{X}\hat{\gamma}$ の内積となる。これより SEA 仮説は、保存物理量演算子の集合を $\{\hat{C}_i\} = \{\hat{C}_0, \hat{C}_1, \dots\}$ ($[\hat{H}, \hat{C}_i] = 0$)、エントロピー演算子を $\hat{S} = -k_B \hat{B} \ln \hat{\rho}$ として、「内積 $(\hat{H}_D|\hat{C}_i\hat{\gamma}) = 0$ ($\forall i$)」及び「内積 $(\hat{H}_D|\hat{S}\hat{\gamma})$ の最大化」と表現できる。これは、

$$\begin{aligned} & \text{maximize } (\hat{H}_D|\hat{S}\hat{\gamma}) \\ & \text{subject to } (\hat{H}_D|\hat{C}_i\hat{\gamma}) = 0 \quad (\forall i), \quad \sqrt{(\hat{H}_D|\hat{H}_D)} \leq \frac{1}{\lambda_{\min}} \quad (\lambda_{\min} > 0) \end{aligned} \quad (63)$$

という $(\hat{H}_D|\hat{S}\hat{\gamma})$ の条件付き最大化問題であるので、変分原理である Lagrange の未定乗数法を解くことによって \hat{H}_D を求めることができる。制約条件 $\sqrt{(\hat{H}_D|\hat{H}_D)} \leq 1/\lambda_{\min}$ ($\lambda_{\min} > 0$) は、 \hat{H}_D のノルムが発散しないための条件である。なお可逆項を再現する \hat{H}_H に関しては、 $[\hat{H}, \hat{C}_i] = 0$ を満たす $\{\hat{C}_i\}$ に対し常に $(\hat{H}_H|\hat{C}_i\hat{\gamma}) = 0$ かつ $(\hat{H}_H|\hat{S}\hat{\gamma}) = 0$ が成り立っている。

考えるべき方程式は

$$(\hat{H}_D|\hat{S}\hat{\gamma}) - \sum_{i=0} f_i (\hat{H}_D|\hat{C}_i\hat{\gamma}) - f \left((\hat{H}_D|\hat{H}_D) - \frac{1}{\lambda^2} \right) = 0 \quad (64)$$

と書ける。ただし $\sqrt{(\hat{H}_D|\hat{H}_D)} = 1/\lambda \leq 1/\lambda_{\min}$ であり、 $\{f_i\}$, f は未定乗数である。式 (64) を \hat{H}_D で変分を取ることで \hat{H}_D が求まる。演算子内積の式 (61) で導入された形式 $|\hat{A}\rangle$ がベクトルと見做せることを用いると、ベクトル $|\hat{H}_D\rangle$ による変分を行うことができる。式 (64) の両辺に $\partial/\partial|\hat{H}_D\rangle$ を作用すると、演算子内積の対称性 $(\hat{A}|\hat{B}) = (\hat{B}|\hat{A})$ を考慮して、

$$|\hat{S}\hat{\gamma}\rangle - \sum_{i=0} f_i |\hat{C}_i\hat{\gamma}\rangle - 2f |\hat{H}_D\rangle = 0 \quad (65)$$

となる。従って、

$$|\hat{\Pi}_D\rangle = \frac{1}{2f} \left| \hat{S}\hat{\gamma} - \sum_{i=0} f_i \hat{C}_i \hat{\gamma} \right\rangle \quad (66a)$$

$$= -\frac{k_B}{2f} \left| \hat{B} \ln \hat{\rho} \hat{\gamma} + \sum_{i=0} \frac{f_i}{k_B} \hat{C}_i \hat{\gamma} \right\rangle \quad (66b)$$

$$= -\frac{1}{2\tau} \left| \hat{B} \ln \hat{\rho} \hat{\gamma} + \sum_{i=0} \beta_i \hat{C}_i \hat{\gamma} \right\rangle \quad (66c)$$

となり、SEA 仮説に基づく $\hat{\Pi}_D$ が

$$\hat{\Pi}_D = -\frac{1}{2\tau} \left(\hat{B} \ln \hat{\rho} + \sum_{i=0} \beta_i \hat{C}_i \right) \hat{\gamma} \quad (67)$$

と求められる。ただし、 $f_i/k_B = \beta_i$ 、 $f/k_B = \tau$ であり、 τ は時間の次元を持ち、緩和時間と呼ばれる。式 (66b) 及び $\hat{\Pi}_H = -i\hat{H}\hat{\gamma}/\hbar$ を式 (60) に代入することで、SEAQT 運動方程式

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{1}{2\tau} \{\hat{D}, \hat{\rho}\}, \quad (68a)$$

$$\hat{D} = \hat{B} \ln \hat{\rho} + \sum_{i=0} \beta_i \hat{C}_i \quad (68b)$$

が導出される。 $\{\cdot, \cdot\}$ は反交換関係であり、式 (66a) の右辺第二項は散逸項と呼ばれる。保存物理量演算子 $\{\hat{C}_i\}$ は、元に必ず恒等演算子 \hat{I} を含む： $\hat{I} \in \{\hat{C}_i\}$ 。これは、確率保存則 $(\hat{\gamma}|\hat{I}\hat{\gamma}) = (\hat{\gamma}|\hat{\gamma}) = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ が常に成り立つためである。未定乗数 f_i は以下のように具体的に求めることができる。式 (60) の右辺のベクトル $|\hat{S}\hat{\gamma} - \sum_{i=0} f_i \hat{C}_i \hat{\gamma}\rangle$ とベクトル $|\hat{C}_j \hat{\gamma}\rangle \in \{|\hat{C}_i \hat{\gamma}\rangle\}$ の内積を取ると、 $(\hat{C}_j \hat{\gamma}|\hat{\Pi}_D) = 0$ より、

$$(\hat{C}_j \hat{\gamma}|\hat{S}\hat{\gamma}) = \sum_{i=0} (\hat{C}_j \hat{\gamma}|\hat{C}_i \hat{\gamma}) f_i \quad (69)$$

と書ける。式 (69) は次のように行列とベクトルによって

$$\begin{bmatrix} (\hat{C}_0 \hat{\gamma}|\hat{S}\hat{\gamma}) \\ (\hat{C}_1 \hat{\gamma}|\hat{S}\hat{\gamma}) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\hat{C}_0 \hat{\gamma}|\hat{C}_0 \hat{\gamma}) & (\hat{C}_0 \hat{\gamma}|\hat{C}_1 \hat{\gamma}) & \cdots \\ (\hat{C}_1 \hat{\gamma}|\hat{C}_0 \hat{\gamma}) & (\hat{C}_1 \hat{\gamma}|\hat{C}_1 \hat{\gamma}) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (70)$$

と表現でき、行列

$$\Lambda = \begin{bmatrix} (\hat{C}_0\hat{\gamma}|\hat{C}_0\hat{\gamma}) & (\hat{C}_0\hat{\gamma}|\hat{C}_1\hat{\gamma}) & \cdots \\ (\hat{C}_1\hat{\gamma}|\hat{C}_0\hat{\gamma}) & (\hat{C}_1\hat{\gamma}|\hat{C}_1\hat{\gamma}) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (71)$$

は Gram 行列と呼ばれる。このとき、 f_i は Cramer の公式より

$$f_i = \frac{\begin{vmatrix} (\hat{C}_0\hat{\gamma}|\hat{C}_0\hat{\gamma}) & (\hat{C}_0\hat{\gamma}|\hat{C}_1\hat{\gamma}) & \cdots & (\hat{C}_0\hat{\gamma}|\hat{C}_{i-1}\hat{\gamma}) & (\hat{C}_0\hat{\gamma}|\hat{S}\hat{\gamma}) & (\hat{C}_0\hat{\gamma}|\hat{C}_{i+1}\hat{\gamma}) & \cdots \\ (\hat{C}_1\hat{\gamma}|\hat{C}_0\hat{\gamma}) & (\hat{C}_1\hat{\gamma}|\hat{C}_1\hat{\gamma}) & \cdots & (\hat{C}_1\hat{\gamma}|\hat{C}_{i-1}\hat{\gamma}) & (\hat{C}_1\hat{\gamma}|\hat{S}\hat{\gamma}) & (\hat{C}_1\hat{\gamma}|\hat{C}_{i+1}\hat{\gamma}) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}}{|\Lambda|} \quad (72)$$

と具体的に求まる。ただし、式(72)右辺の分子は、Gram 行列 Λ の i 列成分をベクトル

$$\begin{bmatrix} (\hat{C}_0\hat{\gamma}|\hat{S}\hat{\gamma}) \\ (\hat{C}_1\hat{\gamma}|\hat{S}\hat{\gamma}) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (73)$$

で置き換えた行列の行列式である。 $\hat{C}_0 = \hat{I}$ とすると、 f_0 は

$$f_0 = \langle \hat{S} \rangle - \sum_{i=1} f_i \langle \hat{C}_i \rangle \quad (74)$$

と書き下せることが分かる。従って式(68b)は、 $\beta_i = f_i/k_B$ より

$$\hat{D} = \Delta \left(\sum_{i=1} \beta_i \hat{C}_i - \frac{1}{k_B} \hat{S} \right) \quad (75)$$

という形で書くこともできる。 $\Delta = \hat{\cdot} - \langle \hat{\cdot} \rangle \hat{I}$ は揺らぎである。未定乗数 $f = k_B \tau$ は一般的には定まらないが、緩和時間 τ を系によって定まる任意定数として置くことが多い [55, 65, 66]。あるいは、エネルギー-時間の不確定性関係から最小の τ を定めるといふ提案も存在している [52]。式(68a)-(68b)の SEAQT 運動方程式を用いて実際に系の時間発展を計算する際は、系に適した保存物理量の有限個のセット $\{\hat{C}_i\}$ を定める。典型的には、エネルギー保存則を考慮して $\{\hat{C}_i\} = \{\hat{I}, \hat{H}\}$ と定めて基本的な議論を行う [52, 55, 65, 66]。この場合、式(75)は、 $\beta_1 = \beta$ と置いて、

$$\hat{D} = \beta \Delta \left(\hat{H} - \frac{1}{k_B \beta} \hat{S} \right) \quad (76)$$

と書くことができる。 β は

$$\beta = \frac{\langle \{\Delta\hat{S}, \Delta\hat{H}\} \rangle}{2k_B \langle \Delta\hat{H}, \Delta\hat{H} \rangle} \quad (77)$$

という形をしている。式 (76) 右辺の演算子 $\hat{H} - \hat{S}/k_B\beta$ は、熱力学における Helmholtz の自由エネルギー $F = U - TS$ (U : 内部エネルギー, T : 温度, S : エントロピー) とよく似た形をしているが、実際に β は、系が熱平衡状態 $\hat{\rho}_{\text{te}} = \exp(-\hat{H}/k_B T) / \text{Tr}(\exp(-\hat{H}/k_B T))$ のとき逆温度 $\beta = 1/k_B T := \beta_{\text{te}}$ に一致する。故に SEAQT において、 β は非平衡逆温度関数としばしば呼ばれる。

4.2.2 複合系における SEAQT 運動方程式

系の内部構造として部分系が存在する場合は、系内における部分系間の相関・相互作用を考慮する必要がある [52,55]。具体的には、無相関状態における因果律的要請である。部分系 A と B からなる複合系の密度演算子 $\hat{\rho}$ は、部分縮約によって $\text{Tr}_B(\hat{\rho}) = \hat{\rho}_A$ 及び $\text{Tr}_A(\hat{\rho}) = \hat{\rho}_B$ というように部分系密度演算子を記述することができ、部分系 A の時間発展 $d\hat{\rho}_A/dt$ は当然 B の物理量に依存し得る。しかし部分系 A, B が無相関 $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$ である場合は、部分系 $\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B$ はそれぞれ独立した単一系であるため、その運動方程式は単一系の式 (68a)-(68b) と必然的に一致する必要がある。

即ち部分系構造を持つ複合系の運動方程式は、この因果律的要請を満たしている必要がある。運動方程式の可逆項 $-i[\hat{H}, \hat{\rho}]/\hbar$ はこの要請を初めから満たしており、無相関である $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$ かつ $\hat{H} = \hat{H}_A \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_A \otimes \hat{H}_B$ において、 $\text{Tr}_J([\hat{H}, \hat{\rho}]) = [\hat{H}_J, \hat{\rho}_J]$ ($J = A, B, \bar{J} \neq J$) と書ける。従って、式 (68a) の右辺第二項—SEA 仮説に基づく散逸項—は、式 (68b) の \hat{D} を、依存する物理量を明記して $\hat{D} = \hat{D}(\hat{\rho}, \{\hat{C}_i\})$ と書いたとき、無相関状態 $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$ かつ $\hat{C}_i = \hat{C}_{Ai} \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_A \otimes \hat{C}_{Bi}$ においては $\text{Tr}_J(\{\hat{D}(\hat{\rho}, \{\hat{C}_i\}), \hat{\rho}\}) = \{\hat{D}(\hat{\rho}_J, \{\hat{C}_{Ji}\}), \hat{\rho}_J\}$ を満たしている必要がある (分離性条件 [52])。故に散逸項は、部分系間に相関や相互作用がある場合は $\text{Tr}_J(\{\hat{D}(\hat{\rho}, \{\hat{C}_i\}), \hat{\rho}\}) \neq \{\hat{D}(\hat{\rho}_J, \{\hat{C}_{Ji}\}), \hat{\rho}_J\}$ であり、無相関状態である場合は自然に「分離」するという構造を持っていなければならない。この要請は、式 (60) における $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}_H + \hat{\Pi}_D$ を

$$\hat{\Pi}_D \hat{\gamma}^\dagger = \sum_{J=1}^M \hat{\Pi}_{DJ} \hat{\gamma}_J^\dagger \otimes \hat{\rho}_J \quad (78)$$

と与えることで満たされる [52]。 M は部分系の数、 $\hat{\gamma}_J \hat{\gamma}_J^\dagger = \hat{\rho}_J$ である。 \bar{J} は J 以外の全ての部分系を表す添え字であり、従って $\otimes \hat{\rho}_{\bar{J}} = \otimes \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{\rho}_{J-1} \otimes \hat{\rho}_{J+1} \otimes \cdots \otimes \hat{\rho}_M$

である．式 (78) を用いて内積 $(\hat{\Pi}_D|\hat{C}_i\hat{\gamma})$, $(\hat{\Pi}_D|\hat{S}\hat{\gamma})$ を書き下すと，

$$(\hat{\Pi}_D|\hat{C}_i\hat{\gamma}) = \frac{1}{2}\text{Tr}((\hat{\Pi}_D\hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma}\hat{\Pi}_D^\dagger)\hat{C}_i) \quad (79a)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{J=1}^M\text{Tr}((\hat{\Pi}_{DJ}\hat{\gamma}_J^\dagger + \hat{\gamma}_J\hat{\Pi}_{DJ}^\dagger)\otimes\hat{\rho}_J\hat{C}_i) \quad (79b)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{J=1}^M\text{Tr}_J((\hat{\Pi}_{DJ}\hat{\gamma}_J^\dagger + \hat{\gamma}_J\hat{\Pi}_{DJ}^\dagger)\text{Tr}_J(\hat{I}_J\otimes\hat{\rho}_J\hat{C}_i)) \quad (79c)$$

$$= \sum_{J=1}^M(\hat{\Pi}_{DJ}|\text{Tr}_J(\hat{I}_J\otimes\hat{\rho}_J\hat{C}_i)\hat{\gamma}_J) \quad (79d)$$

$$= \sum_{J=1}^M(\hat{\Pi}_{DJ}|(\hat{C}_i)^{(J)}\hat{\gamma}_J), \quad (79e)$$

同様に，

$$(\hat{\Pi}_D|\hat{S}\hat{\gamma}) = \sum_{J=1}^M(\hat{\Pi}_{DJ}|\text{Tr}_J(\hat{I}_J\otimes\hat{\rho}_J\hat{S})\hat{\gamma}_J) \quad (80a)$$

$$= \sum_{J=1}^M(\hat{\Pi}_{DJ}|(\hat{S})^{(J)}\hat{\gamma}_J) \quad (80b)$$

となる．ただし， $(\hat{C}_i)^{(J)} = \text{Tr}_J(\hat{I}_J\otimes\hat{\rho}_J\hat{C}_i)$, $(\hat{S})^{(J)} = \text{Tr}_J(\hat{I}_J\otimes\hat{\rho}_J\hat{S})$ は部分系 J において局所的に認識される全体系演算子 (Locally perceived overall-system operator [52, 55] : LPO) である．即ち式 (78) を与えると，式 (63) における条件付き最大化問題の目的関数： $(\hat{\Pi}_D|\hat{S}\hat{\gamma})$ と束縛関数： $(\hat{\Pi}_D|\hat{C}_i\hat{\gamma})$ は各々，部分系 J の時間発展 $|\hat{\Pi}_{DJ}$ と LPO ベクトルとの内積の総和という形に書くことができる．ここで，無相関状態 $\hat{\rho} = \hat{\rho}_J \otimes \hat{\rho}_{\bar{J}}$ かつ $\hat{C}_i = \sum_{J=1}^M \hat{C}_{Ji} \otimes \hat{I}_{\bar{J}}$ を LPO に代入すると， $(\hat{C}_i)^{(J)}$, $(\hat{S})^{(J)}$ はそれぞれ

$$(\hat{C}_i)^{(J)} = \text{Tr}_J\left(\hat{I}_J\otimes\hat{\rho}_{\bar{J}}\sum_{J=1}^M\hat{C}_{Ji}\otimes\hat{I}_{\bar{J}}\right) \quad (81a)$$

$$= \hat{C}_{Ji} + \sum_{\bar{J}}\langle\hat{C}_{\bar{J}i}\rangle\hat{I}_{\bar{J}} \quad (81b)$$

$$(\hat{S})^{(J)} = -k_B (\hat{B} \ln(\hat{\rho}_J \otimes \hat{\rho}_{\bar{J}}))^{(J)} = -k_B \left(\hat{B} \sum_{J=1}^M (\ln \hat{\rho}_J) \otimes \hat{I}_{\bar{J}} \right)^{(J)} \quad (82a)$$

$$= -k_B \text{Tr}_J \left(\hat{I}_J \otimes \hat{\rho}_{\bar{J}} (\hat{B}_J \otimes \hat{B}_{\bar{J}}) \sum_{J=1}^M (\ln \hat{\rho}_J) \otimes \hat{I}_{\bar{J}} \right) \quad (82b)$$

$$= -k_B \left(\hat{B}_J \ln \hat{\rho}_J + \sum_{\bar{J}} \langle \hat{B}_{\bar{J}} \ln \hat{\rho}_{\bar{J}} \rangle \hat{I}_J \right) \quad (82c)$$

$$= \hat{S}_J + \sum_{\bar{J}} \langle \hat{S}_{\bar{J}} \rangle \hat{I}_J \quad (82d)$$

と書き下せる．ただし式 (82a) では $\ln(\hat{\rho}_J \otimes \hat{\rho}_{\bar{J}}) = \sum_{J=1}^M (\ln \hat{\rho}_J) \otimes \hat{I}_{\bar{J}}$ と書けることを，式 (82b) では $\hat{B} = \hat{B}_J \otimes \hat{B}_{\bar{J}}$ と常にかけることをそれぞれ用いた ($\otimes \hat{B}_{\bar{J}} = \otimes \hat{B}_1 \otimes \hat{B}_2 \otimes \dots \otimes \hat{B}_{J-1} \otimes \hat{B}_{J+1} \otimes \dots \otimes \hat{B}_M$)．このとき，部分系 J の確率保存則 ($\hat{\Pi}_{DJ} \hat{I}_{\bar{J}} = 0$) より，内積 ($\hat{\Pi}_{DJ} (\hat{C}_i)^{(J)} \hat{\gamma}_J$), ($\hat{\Pi}_{DJ} (\hat{S})^{(J)} \hat{\gamma}_J$) は

$$(\hat{\Pi}_{DJ} (\hat{C}_i)^{(J)} \hat{\gamma}_J) = (\hat{\Pi}_{DJ} \hat{C}_{Ji} \hat{\gamma}_J), \quad (83a)$$

$$(\hat{\Pi}_{DJ} (\hat{S})^{(J)} \hat{\gamma}_J) = (\hat{\Pi}_{DJ} \hat{S}_J \hat{\gamma}_J) \quad (83b)$$

となって独立した単一系の形となる．これより，式 (78) を要請することで，部分系同士が無相関である場合は自然に単一系の運動方程式が導かれる．

複合系の部分系間に相関・相互作用のある一般的な場合は，次のようにして全体系の SEAQT 運動方程式が導出される．導出方法は単一系における議論と同様であり，式 (78) の分離性条件を要請した上で，内積 ($\hat{\Pi}_D |\hat{S} \hat{\gamma}$) の最大化問題を拘束条件 ($\hat{\Pi}_D |\hat{C}_i \hat{\gamma}$) = 0 の下で解くのである．ただし式 (79e), (80b) より，条件付き最大化問題を

$$\begin{aligned} & \text{maximize } (\hat{\Pi}_{DJ} (\hat{S})^{(J)} \hat{\gamma}_J) \\ & \text{subject to } (\hat{\Pi}_{DJ} (\hat{C}_i)^{(J)} \hat{\gamma}_J) = 0 \quad (\forall i), \quad \sqrt{(\hat{\Pi}_{DJ} \hat{\Pi}_{DJ})} \leq \frac{1}{\lambda_{Jmin}} \quad (\lambda_{Jmin} > 0) \end{aligned} \quad (84)$$

と設定する．即ち式 (79e), (80b) における総和の各項について考え， $\partial/\partial |\hat{\Pi}_{DJ}$) による変分を取ることでベクトル $|\hat{\Pi}_{DJ}$) の形を求める．結果は，単一系で行った議論と同様にすると，

$$\hat{\Pi}_{DJ} = -\frac{1}{2\tau_J} \left((\hat{B} \ln \hat{\rho})^{(J)} + \sum_{i=0} \beta_{Ji} (\hat{C}_i)^{(J)} \right) \hat{\gamma}_J \quad (85)$$

となる．式 (85) を式 (78) に代入することで，式 (60) 及び $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}_H + \hat{\Pi}_D$ より，複合系

の SEAQT 運動方程式が

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \sum_{J=1} \frac{1}{2\tau_J} \{\hat{D}_J, \hat{\rho}_J\} \otimes \hat{\rho}_J, \quad (86a)$$

$$\hat{D}_J = (\hat{B} \ln \hat{\rho})^{(J)} + \sum_{i=0} \beta_{Ji} (\hat{C}_i)^{(J)} \quad (86b)$$

と求まる.

4.3 SEA の幾何学的描像

小節 2.1.1, 2.1.2 では, 式 (61) と定義した演算子内積を用いて変分問題を設定し, SEAQT 運動方程式を導出した. 演算子内積の定義は, 即ち演算子を幾何ベクトルとして解釈し扱えることを示している. これより, SEA 仮説を図 4 のように幾何ベクトル空間上で視覚的に表現し解釈することができる.

ただし, 可逆項を構成する \hat{H}_H は省略している. \mathcal{M} はリーマン多様体であり, 状態ベクトル $|\hat{\gamma}\rangle$ の時間軌道が埋め込まれている. $|\hat{\gamma}\rangle$ 軌道上のある時刻における点で接空間 (超平面) が張られており, $|\hat{H}_D\rangle$ は接空間に属する $|\hat{\gamma}\rangle$ 軌道の接ベクトルである. SEA 仮説における保存物理量不変の制約は, 接ベクトル $|\hat{H}_D\rangle$ が属する超平面が常に保存量ベクトルのセット $\{|\hat{C}_i\hat{\gamma}\rangle\}$ と直交していることに相当する. さらにエントロピー生成率の最大化は, 前小節の議論よりエントロピーベクトル $|\hat{S}\hat{\gamma}\rangle$ と接ベクトル $|\hat{H}_D\rangle$ の内積が最大であるという要請で表現されるため, 幾何ベクトル空間上では, エントロピーベクトルの超平面への射影ベクトル $|\hat{S}\hat{\gamma} - \sum_i f_i \hat{C}_i\hat{\gamma}\rangle$ と接ベクトル $|\hat{H}_D\rangle$ が同方向であるという条件で可視化できる. 即ち, SEA 仮説から幾何学的に定められる接ベクトル $|\hat{H}_D\rangle$ は, エントロピーベクトルを射影したベクトルのスカラー倍 $c|\hat{S}\hat{\gamma} - \sum_i f_i \hat{C}_i\hat{\gamma}\rangle$

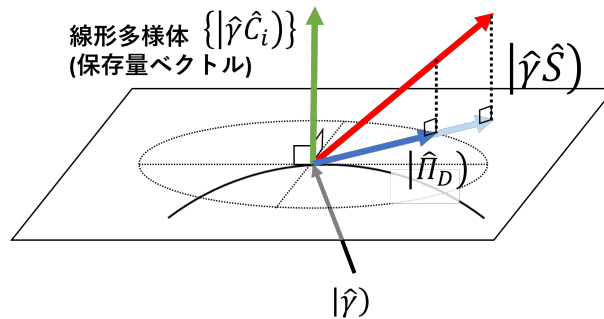


図 4: SEA 仮説の幾何学的解釈

であり、変分原理による帰結である式 (66a) と一致する ($c = 1/2f$).

このような SEA の幾何学的描像は、SEA 仮説及び SEAQT 運動方程式の構造を視覚情報から直感的に理解する表現方法として非常に有効である。また、第 3 章において、SEAQT の状態代数と外因的状态代数の同型性を議論する際にも、幾何ベクトル空間の表現が有用となる。

4.4 無限状態数系

自発的な散逸項を構成する式 (75) 及び (86b) は、エントロピー演算子 $\hat{S} = -k_B \hat{B} \ln \hat{\rho}$ を陽に含んでいる。この項が組み込まれていることで、SEAQT 基本運動方程式は SEA 仮説に従う状態の時間発展を記述することが出来るが、しかし密度演算子の対数で書かれた特殊な形は、そのままでは計算において取り扱うことが出来ない。従って、SEAQT に基づく数値解析を行う際には $\hat{B} \ln \hat{\rho}$ を

$$\hat{B} \ln \hat{\rho} = \hat{B} \sum_k^N \ln p_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (87)$$

のように固有値展開する。ここで、 $\hat{B} \ln \hat{\rho}$ の固有値、及び固有状態は $\hat{\rho}$ と共通であることに注意して $\hat{\rho}$ の固有値 p_k 、固有状態ベクトル $|\phi_k\rangle$ を用いており、 N は孤立対象系の固有状態数を表している。式 (88) 右辺の表式は、演算子が \log の外へ出ているため、密度演算子から p_k 、 $|\phi_k\rangle$ を求めることが出来れば、 $\hat{B} \ln \hat{\rho}$ が計算可能となる。

4.4.1 Hypo equilibrium state

近年、この困難を回避する近似手法が提案された。[56–58] この近似では、系全体の空間が有限 N 個の部分空間に分解され、各部分空間に属する状態は仮想的な平衡状態、Hypo equilibrium (HE) state に近似される。具体的には式 (61) で定義されたヒルベルト空間と密度演算子が直交直和分解 [68] によって分割され、各分割状態が異なるに HE state に割り当てられる。HE state は、SEAQT フレームワークの適用を無限状態数系にまで拡張する。

ここでは、密度演算子は次のように表される。

$$\hat{\rho} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} \hat{\rho}_k \quad (88)$$

$$\hat{\rho}_k = p_k \sum_i d_i \frac{e^{-\beta_k \varepsilon_i}}{Z_k} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_i d_i e^{-\alpha_k - \beta_k \varepsilon_i} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (89)$$

ここで、系のハミルトニアン \hat{H} のエネルギー固有値問題は解かれ、 i 番目のエネルギー固有値 ε_i と対応するエネルギー固有状態 $|\psi_i\rangle$ および縮退度 d_i が既知であるとする。また、添え字 k によって指定される部分空間では、 p_k は全空間を分割する際の重み（分割比率）であり、 $\sum_{k=0}^{N-1} p_k = 1$ を満たす。 β_k は逆温度、 Z_k は分配関数である。実際の計算では、式 (89) における変数 α_k および β_k の時間発展を計算する。式 (68a) および (68b) の SEAQT 時間発展方程式を使用して、 α_k および β_k の時間発展方程式は次のように導かれる。

$$\frac{d\alpha_k}{dt} = -\frac{1}{2\tau} (\alpha_k - \alpha), \quad (90a)$$

$$\frac{d\beta_k}{dt} = -\frac{1}{2\tau} (\beta_k - \beta). \quad (90b)$$

ここで、 β は式 (77) で定義される非平衡逆温度であり、 α はその式形から非平衡 Mathieu 関数と呼ばれる [51, 55]。式 (90a) は、変数 α_k と β_k が α と β の値に収束し、均一になるダイナミクスを示す。これにより、系のダイナミクスを、 N 個の分割空間の α_k および β_k の時間変化として記述できる。ただし、HE state 近似には適用限界がある。HE state の密度演算子は \hat{H} のエネルギー固有状態 $\{|\psi_i\rangle\}$ によって対角化されるため、 $[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$ が常に成立する。そのため、Hamiltonian 項で記述される相互作用過程を適切に扱うことができない。従って、 $[\hat{H}, \hat{\rho}] \neq 0$ を満たす SEAQT フレームワークでの計算手法を開発する必要がある。

5 Coherent mixed state の導入とその有効性

量子系における不可逆な散逸緩和現象の理論的及び実験的研究は、第1章で述べたように、多岐にわたる分野: 量子情報科学, 非平衡統計力学, 量子光学科学, 量子ナノデバイスへの応用といった分野で重要な役割を果たしている [1-5, 10, 25, 35, 49, 50]. 例えば, 超高真空, 極低温における強相関 1 次元ボーズ気体の熱平衡化現象 [6, 7] は, 孤立量子系が自発的に緩和するかという問題を提起しており, 固有状態熱化仮説 (Eigenstate Thermalization Hypothesis, ETH) などの新しいアプローチが研究されている. [8] このように, 量子系における非平衡ダイナミクスの理解は, 現代の量子科学技術の中心的課題である. 特に, 動的な環境と強く相互作用する状況下での散逸過程の理論的記述は, 従来手法においては難しい問題として挙げられる [75, 76]. SEAQT は, こういった一般性のある非平衡ダイナミクスの理解を深めるための方法論として期待されている. しかしながら, 前章にて言及したように, 無限の状態数を持つ系, 特に光子やフォノンのようなボソン系の数値解析的取り扱いが課題となっている. HE state は大量の占有数 (状態数) を持つ系を SEAQT の枠組みで近似解析する手法として提案されたが, その前提条件は前述のように一定の制約を持つ. これに対して本章では, HE state の制約を克服し, 無限状態数を持つ系の全空間を既知の分割状態で表現できるような新しい方法, coherent mixed (CM) state を提案する [65, 66].

5.1 CM state の構成

HE state の手法が下地とする構造は, 多状態数系の (可分) ヒルベルト空間を有限個の直和空間に分割す直交直和分解という操作であった. HE state は分割空間を相異なる熱平衡状態とする近似であり, 各々の分割空間における逆温度 β_k を有限個の変数として, 近似的な数値解析を可能にする. 一方, 本章で提案をする CM state は, 有限個の異なるコヒーレント状態 $|\alpha_k\rangle$ ($k = 0, 1, \dots, N-1$) を用いて直交分割空間を構築する. コヒーレント状態はボソン系の消滅演算子 \hat{b} の固有状態 $\hat{b}|\alpha_k\rangle = \alpha_k|\alpha_k\rangle$ であるが, これは無限個のフォック基底状態の線形結合として次のように構成される.

$$|\alpha_k\rangle = e^{-\frac{|\alpha_k|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha_k^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (91)$$

即ち, 無限状態数系の状態が, 各 k 毎に 1 つの $\alpha_k = |\alpha_k| e^{i\theta_k}$ によって記述される. 従って, 適切に CM state を構築することで, 有限 $2N$ 個の変数 $|\alpha_k|, \theta_k$ による状態の記述が可能になると考えられる.

まず, N 個のコヒーレント状態を用いて, 一般的な CM state の密度演算子 $\hat{\rho}$ を次のように定義する.

$$\hat{\rho} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} \hat{\rho}_k, \quad (92)$$

$$\hat{\rho}_k = c_k |c_k\rangle \langle c_k|. \quad (93)$$

$\hat{\rho}$ は直交状態 $|c_k\rangle$ によって直交直和分解される. $|c_k\rangle$ は $\langle c_k | c_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$ を満たす状態ベクトルであり, Gram-Schmidt 直交正規化を用いるなどして, $|\alpha_k\rangle$ の任意の線形結合として記述できる. これにより, CM state がハミルトニアンとの非可換性を一般的に保持していることが示される.

次に, SEAQT 運動方程式に含まれるエントロピー演算子 $\hat{S} = -k_B \hat{B} \ln \hat{\rho}$ を, CM state の密度演算子によって書き下す. 射影演算子 \hat{C} を $\hat{C} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} |c_k\rangle \langle c_k|$ と定義すると, $\hat{C}^2 = \hat{C}$ および $\hat{C}\hat{\rho} = \hat{\rho}\hat{C} = \hat{\rho}$ が満たされる. また, $\hat{B}^2 = \hat{B}$ および $\hat{B}\hat{\rho} = \hat{\rho}\hat{B} = \hat{\rho}$ より, $\hat{C}\hat{B} = \hat{B}\hat{C} = \hat{B}$ も満たされる. これらの性質から, \hat{S} は次のように展開できる:

$$\hat{S} = -k_B \hat{B} \hat{C} \ln \hat{\rho} = -k_B \hat{B} \sum_{x=1}^{\infty} \frac{(-1)^{x-1}}{x} (\hat{\rho} - \hat{C})^x \quad (94a)$$

$$= -k_B \sum_{x=1}^{\infty} \frac{(-1)^{x-1}}{x} \bigoplus_{k=0}^{N-1} \hat{B}_k (\hat{\rho}_k - |c_k\rangle \langle c_k|)^x \quad (94b)$$

$$= -k_B \sum_{x=1}^{\infty} \frac{(-1)^{x-1}}{x} \bigoplus_{k=0}^{N-1} (c_k - 1)^x \hat{B}_k |c_k\rangle \langle c_k| \quad (94c)$$

$$= -k_B \bigoplus_{k=0}^{N-1} \ln c_k \hat{B}_k |c_k\rangle \langle c_k|. \quad (94d)$$

ここで, $\hat{\rho} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} \hat{\rho}_k$ および $\hat{B} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} \hat{B}_k$ を用いている. 今, SEAQT の運動方程式は CM state の密度演算子に基づき記述されるため, 上記の定式化により無限状態数を持つ任意の部分系を含む複雑な相互作用モデルのダイナミクスを数値的に調査することができる. 本章では, 最小の分割数である $N = 2$, かつ $|\alpha_k\rangle$ の描像における分割率が等確率である場合, 即ち

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|\alpha_0\rangle \langle \alpha_0| + |\alpha_1\rangle \langle \alpha_1|) \quad (95)$$

と書ける場合を議論する [77–80]. ここで, $c_0 = c_+$, $c_1 = c_-$, $|c_0\rangle = |c_+\rangle$, $|c_1\rangle = |c_-\rangle$ である. 式 (95) の条件を満たす c_{\pm} と $|c_{\pm}\rangle$ は, 次のように書くことができる:

$$c_{\pm} = \frac{1 \pm |\langle \alpha_0 | \alpha_1 \rangle|}{2} \quad (96a)$$

および

$$|c_{\pm}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{c_{\pm}}} \left(|\alpha_1\rangle \pm \frac{\langle \alpha_0 | \alpha_1 \rangle}{|\langle \alpha_0 | \alpha_1 \rangle|} |\alpha_0\rangle \right). \quad (96b)$$

ここで、 $\langle c_+ | c_+ \rangle = \langle c_- | c_- \rangle = 1$, $\langle c_+ | c_- \rangle = 0$ である。改めて、本章での目的は、HE state では取り扱うことができなかつたハミルトニアン項が、SEAQT が記述する自発的な散逸緩和過程に対しどのように影響するかを明らかにすることである。このため、最小の分割数による表現の場合を考慮すればここでは充分と判断する。

5.2 SEAQT における定式化

我々の定式化の有効性を検証するために、図 5 のモデル系を CM state を用いた SEAQT によって数値解析する。このモデルは、動的な局所フォノン系と相互作用する 2 準位系 (TLS) で構成されている。モデルのハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$\hat{H} = \hat{H}_T \otimes \hat{I}_p + \hat{H}_p \otimes \hat{I}_T + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (97a)$$

$$\hat{H}_T = \hbar\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar V (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (97b)$$

$$\hat{H}_p = \hbar\omega_p \hat{b}^\dagger \hat{b}, \quad (97c)$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hbar g \hat{a}^\dagger \hat{a} \otimes (\hat{b} + \hat{b}^\dagger). \quad (97d)$$

ここで、 \hat{H}_T および \hat{H}_p はそれぞれ、TLS とフォノン系の自由ハミルトニアンであり、 \hat{I}_T および \hat{I}_p は恒等演算子である。 \hat{H}_{int} は TLS とフォノン系間の相互作用ハミルトニアンを表す。 \hat{a}^\dagger , \hat{a} と \hat{b}^\dagger , \hat{b} は、それぞれ TLS とフォノン系の生成消滅演算子であり、 $\hbar\omega$ と $\hbar\omega_p$ は各系の固有エネルギーである。 $\hbar g$ は TLS とフォノン系間の相互作用エネルギーを示す。また、TLS の基底状態と励起状態は $\hbar V$ によって相互作用する。これは単一 TLS に対するレーザー照射を単純にモデル化したものである。

我々の定式化に基づき、上記のモデル系のダイナミクスは以下のように議論される。複合系の SEAQT の運動方程式である式 (86a), (86b) に基づき、TLS の自由度に関して部分縮約を行った後のフォノン系密度演算子 $\hat{\rho}_p$ の時間発展方程式が次のように得られる。

$$\frac{d\hat{\rho}_p}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_p, \hat{\rho}_p] - \frac{i}{\hbar} \text{Tr}_{\text{TLS}}([\hat{H}_{\text{int}}, \hat{\rho}]) - \frac{1}{2\tau_p} \{\hat{d}_{M_p}, \hat{\rho}_p\}. \quad (98)$$

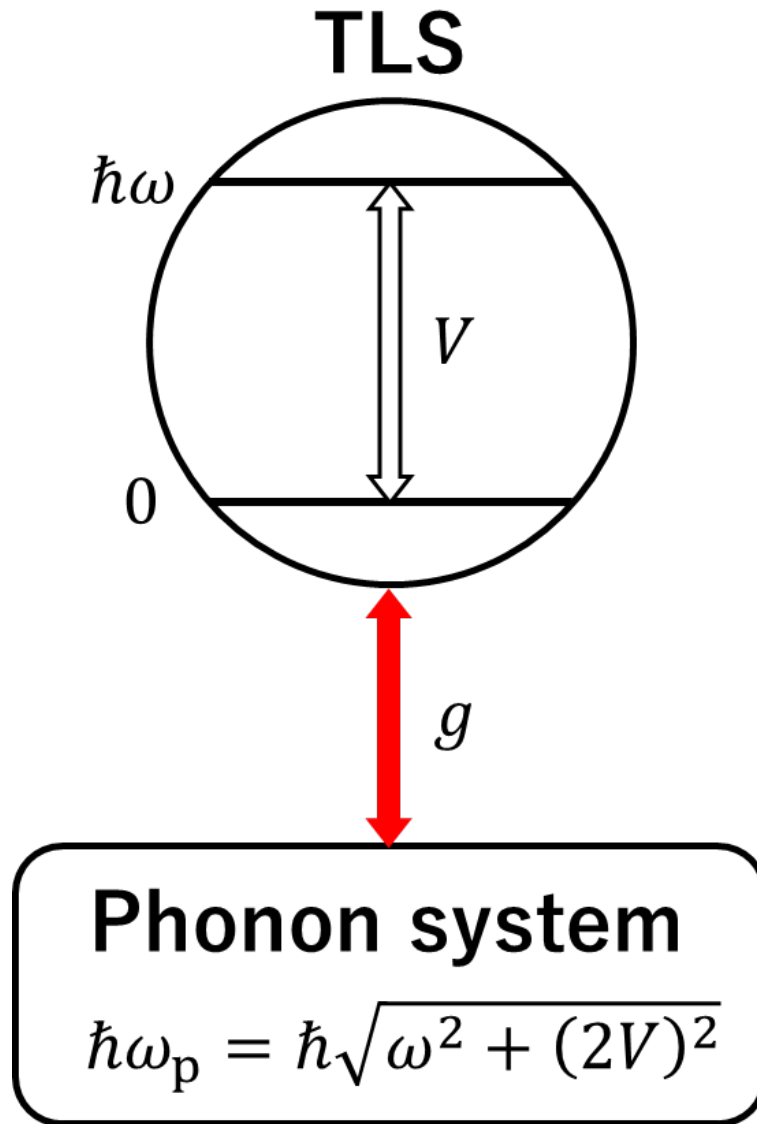


図 5: 本研究で考慮されるモデルの概念図示. 2 準位系 (TLS) と動的フォノン系は hg によって相互作用する. また, TLS の基底状態と励起状態は $\hbar V$ によって相互作用しており, これは TLS に対するレーザー照射を単純にモデル化している. 動的フォノン系の周波数 ω_p は, TLS のエネルギー差 $\hbar\omega$ における Rabi 周波数 $\Omega = \sqrt{\omega^2 + (2V)^2}$ と共鳴している.

ここで, τ_p と \hat{d}_{Mp} はそれぞれフォノン系の内部緩和時間と自発散逸項を表す. 本章では, より使いまわしの良い CM state として位相混合状態 $\alpha_0 = |\alpha|e^{i\theta_0}$ および $\alpha_1 = |\alpha|e^{i\theta_1}$ を採用する. 関心のある相互作用過程における CM state の有効性を議論するのに十分であると考えためである. この結果, ノルム $|\alpha|$, 位相 θ_0 , θ_1 という 3 つの変数によって 2 分割の CM state を記述でき, さらにこれらは物理的変数 $\langle \hat{b} \rangle = (\alpha_0 + \alpha_1)/2 = |\alpha|(e^{i\theta_0} + e^{i\theta_1})/2$ および $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle = |\alpha|^2$ に置き換えて扱われる. さらに, 具体的な数値解

析を実行するために、相互作用ハミルトニアン \tilde{H}_{int} に平均場近似を適用する。

$$\tilde{H}_{\text{int}} = \hbar g \left\{ \hat{a}^\dagger \hat{a} (\langle \hat{b} \rangle + \langle \hat{b}^\dagger \rangle) \otimes \hat{I}_p + \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) \otimes \hat{I}_T - \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle (\langle \hat{b} \rangle + \langle \hat{b}^\dagger \rangle) \hat{I} \right\}, \quad (99)$$

また、式 (99) の右辺の各項は、それぞれの自由ハミルトニアンに内包される。すると、全体のハミルトニアンは次のように書き直される。

$$\hat{H} = \tilde{H}_T \otimes \hat{I}_p + \tilde{H}_p \otimes \hat{I}_T - \hbar g' (\langle \hat{b} \rangle + \langle \hat{b}^\dagger \rangle) \hat{I}. \quad (100a)$$

このとき、

$$\tilde{H}_T = \hbar \omega' \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar V (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (100b)$$

$$\tilde{H}_p = \hbar \omega_p \hat{b}^\dagger \hat{b} + \hbar g' (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) \quad (100c)$$

と書け、 $\omega' = \omega + g (\langle \hat{b} \rangle + \langle \hat{b}^\dagger \rangle)$ および $g' = g \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$ である。相互作用ハミルトニアンの各項がそれぞれの部分系の自由ハミルトニアンに内包されているため、任意時刻における全体系の密度演算子 $\hat{\rho}$ は、 $\hat{\rho} = \hat{\rho}_T \otimes \hat{\rho}_p$ として記述でき、 $\ln \hat{\rho} = \ln \hat{\rho}_T \otimes \hat{I}_p + \ln \hat{\rho}_p \otimes \hat{I}_T$ 書くことができる。初期時刻にそれぞれの部分系間に相関がない場合、 $\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_T(0) \otimes \hat{\rho}_p(0)$ となる。故に、フォノン系の運動方程式は以下のように簡略化される。

$$\frac{d\hat{\rho}_p}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_p, \hat{\rho}_p] + \frac{1}{2\tau_p} \{\hat{d}_p, \hat{\rho}_p\}, \quad (101a)$$

$$\hat{d}_p = \hat{B}_p \ln \hat{\rho}_p + \alpha_p \hat{I}_p + \beta_p \tilde{H}_p. \quad (101b)$$

ここで、射影演算子 \hat{B}_p は $\hat{B}_p \hat{\rho}_p = \hat{\rho}_p \hat{B}_p$ を満たし、 α_p と β_p は

$$\alpha_p = \frac{1}{k_B} (\langle \hat{S}_p \rangle - \langle \tilde{H}_p \rangle k_B \beta_p), \quad (101c)$$

$$\beta_p = \frac{1}{k_B} \frac{\langle \{\Delta \hat{S}_p, \Delta \tilde{H}_p\} \rangle}{2 \langle \Delta \tilde{H}_p \Delta \tilde{H}_p \rangle} \quad (101d)$$

と、それぞれ与えられる。 $\langle \hat{S}_p \rangle$ および $\langle \tilde{H}_p \rangle$ は期待値を示し、 $\Delta \hat{S}_p$ および $\Delta \tilde{H}_p$ は対応する物理量演算子の揺らぎである。さて、文献 49,50 によると、TLS と結合する動的フォノン系にはコヒーレントフォノン効果とインコヒーレントフォノン効果という 2 つのタイプの相互作用過程への寄与が存在する。次節にてエネルギーパラメータの設

定を行うが、本章ではコヒーレントフォノン効果が現れるエネルギーパラメータが選択される。コヒーレントフォノン系のダイナミクスは $\langle \hat{b} \rangle$ ($\langle \hat{b}^\dagger \rangle$) によって記述されるため、平均場近似 $\hat{a}^\dagger \hat{a} \otimes (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) \sim \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle (\langle \hat{b} \rangle + \langle \hat{b}^\dagger \rangle)$ はこの効果を有効に記述できると考えられる。コヒーレントフォノンと励起子系 (TLS) の共同的相互作用過程に関しては、次節においてより詳細に議論されるが、本章における目的は、HE state では取り扱うことができなかったハミルトニアン項が、散逸緩和過程へ与える影響を明らかにすることで、SEAQT の枠組みにおける CM state の有効性を調査することである。平均場近似は最低次の近似であるが、コヒーレントフォノンが寄与するダイナミクスにおいては、本目的は達成され则认为られる。最終的に、CM state におけるフォノン系の運動方程式が以下のように得られる。

$$\frac{d\langle \hat{b} \rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (\omega_p \langle \hat{b} \rangle + g') + D_b, \quad (102a)$$

$$\frac{d\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} g' (\langle \hat{b} \rangle - \langle \hat{b}^\dagger \rangle) - (D_b + D_b^*), \quad (102b)$$

$$D_b = -\frac{\hbar \beta_p}{2\tau_p \omega_p} \left\{ \omega_p \langle \hat{b} \rangle + g' + 2g' (\langle \Delta \hat{b} \Delta \hat{b} \rangle + \langle \Delta \hat{b}^\dagger \Delta \hat{b} \rangle) \right\}, \quad (102c)$$

D_b (D_b^*) は自発散逸項を表し、 $\Delta \hat{b}$ と $\Delta \hat{b}^\dagger$ はそれぞれ $\Delta \hat{b} = \hat{b} - \langle \hat{b} \rangle \hat{I}_p$ および $\Delta \hat{b}^\dagger = \hat{b}^\dagger - \langle \hat{b}^\dagger \rangle \hat{I}_p$ として定義される。なお、式 (102c) 中の項 $\langle \Delta \hat{b} \Delta \hat{b} \rangle$ および $\langle \Delta \hat{b}^\dagger \Delta \hat{b} \rangle$ は、Appendix A に示されているように、変数 $\langle \hat{b} \rangle$ 、 $\langle \hat{b}^\dagger \rangle$ および $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle$ によって書き表すことができるため、式 (102a)-(102c) は閉じた形式となっている。次に、TLS の運動方程式は以下のように得られる。

$$\frac{d\hat{\rho}_T}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_T, \hat{\rho}_T] - \frac{1}{2\tau_T} \{\hat{d}_T, \hat{\rho}_T\}, \quad (103a)$$

$$\hat{d}_T = \hat{B}_T \ln \hat{\rho}_T + \alpha_T \hat{I}_T + \beta_T \tilde{H}_T, \quad (103b)$$

$$\alpha_T = \frac{1}{k_B} (\langle \hat{S}_T \rangle - \langle \tilde{H}_T \rangle k_B \beta_T), \quad (103c)$$

$$\beta_T = \frac{1}{k_B} \frac{\langle \{\Delta \hat{S}_T, \Delta \tilde{H}_T\} \rangle}{2 \langle \Delta \tilde{H}_T \Delta \tilde{H}_T \rangle}. \quad (103d)$$

$\langle \hat{S}_T \rangle$ および $\langle \tilde{H}_T \rangle$ は期待値を示し、 $\Delta \hat{S}_T$ および $\Delta \tilde{H}_T$ は前述のように揺らぎを表す。TLS 密度演算子 $\hat{\rho}_T$ の時間発展は、系のポピュレーション、量子コヒーレンス、エントロピーのダイナミクスを記述する。以上の定式化から、動的な局所フォノン系と相互作用する TLS からなる複合系のダイナミクスを、SEAQT によって議論することが

できる。

5.3 数値解析と考察

動的フォノン系の固有周波数 ω_p が TLS における Rabi 周波数 $\Omega = \sqrt{\omega^2 + (2V)^2}$ との共振条件を満たす場合、Rabi 振動における大きな振幅の振動が予想される [49, 50]. 本章では、前節までで述べた新しい定式化をモデル系に適用し、その有効性を数値解析の結果から議論する。

相互作用の結合定数 $\hbar V$ および $\hbar g$ は、TLS のエネルギー差 $\hbar\omega$ で規格化し、 $\hbar V/\hbar\omega = \hbar g/\hbar\omega = 0.20$ と定める。一方、フォノンの周波数 ω_p は、Rabi 周波数と共振する場合を想定し、 $\omega_p = \Omega$ とする。部分系におけるそれぞれの内部緩和時間は、 $\tau_l/\omega = \tau/\omega = 10$; ($l = T, p$) として等しく設定する。TLS ポピュレーションおよびコヒーレンスの初期値は、それぞれ $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle = 0.80$ および $\langle \hat{a} \rangle = 0$ として設定する。一方、フォノン系に関しては、 $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle = 1.00$ および、 $\langle \hat{b} \rangle = (\alpha_0 + \alpha_1)/2 = |\alpha| (e^{i\theta_0} + e^{i\theta_1})/2$ と書き下した描像において、 $|\alpha| = 1$, $\theta_0 = \pi/6$, $\theta_1 = \pi/3$ とそれぞれ設定する。

また、以下では特に明示されていない場合、上記で設定した各パラメータが共通して用いられる。

5.3.1 TLS ポピュレーション、フォノン系個数期待値

まず、提案された SEAQT の枠組みに基づく定式化で、部分系間の相互作用が TLS ポピュレーション及びフォノン系個数期待値のダイナミクスにおいて適切に取り扱われるかを議論する。図 6 は、2つの部分系間の相互作用が有る場合 ($g/\omega = 0.20$) と無い場合 ($g/\omega = 0$) での TLS ポピュレーション、及びフォノン系個数期待値の時間発展を表している。ただしここでは、ダイナミクスへ現れる相互作用の効果と、相互作用の有無における違いを明確に示すために、運動方程式の散逸項が無視された可逆過程を図 6 では表している (これは、CM state の定式化が無限状態数系を含む複合系の相互作用効果を適切に記述できるかどうかを始めに評価するためであり、SEAQT に基づく自発散逸過程に関してはこれ以後に詳細に評価される)。図 6 において、部分系間に相互作用がない場合、TLS ポピュレーションは周期的な Rabi 振動を示しているが、フォノン系の個数期待値は時間発展を通して一定値である。一方、相互作用が考慮されると、双方のダイナミクスは Rabi 周波数で振動し、部分系間の相互作用によって振幅が大きく変調される。これは開放系理論によって得られる結果と一致して

おり, CM state がコヒーレントフォノンとの相互作用を有効に記述できていると判断できる.

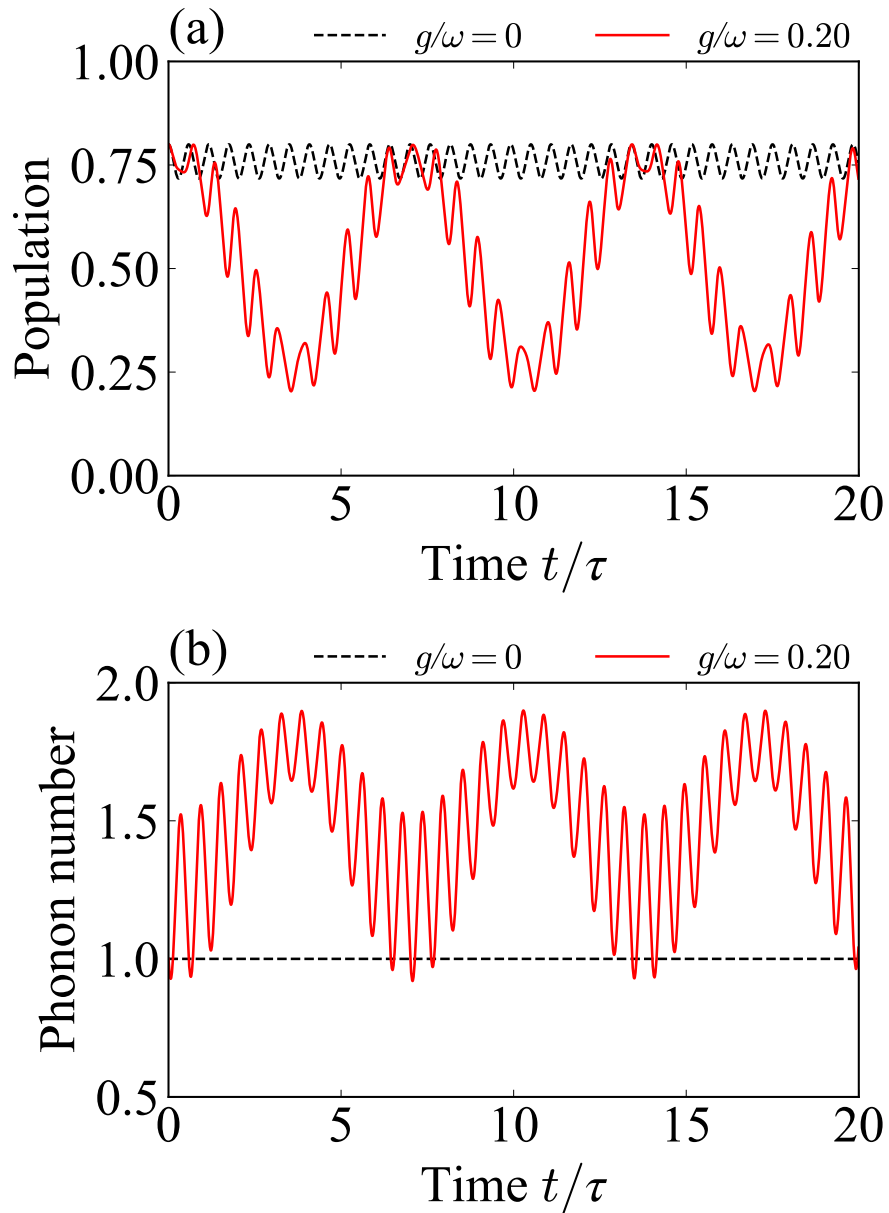


図 6: CM 近似におけるポピュレーションの時間発展で, SEAQT の散逸項を無視した場合: (a) TLS ポピュレーションと (b) フォノン個数期待値. $g = 0$ の場合のポピュレーション時間発展は黒線で表され, $g/\omega = 0.20$ の場合の時間発展は赤線で表される.

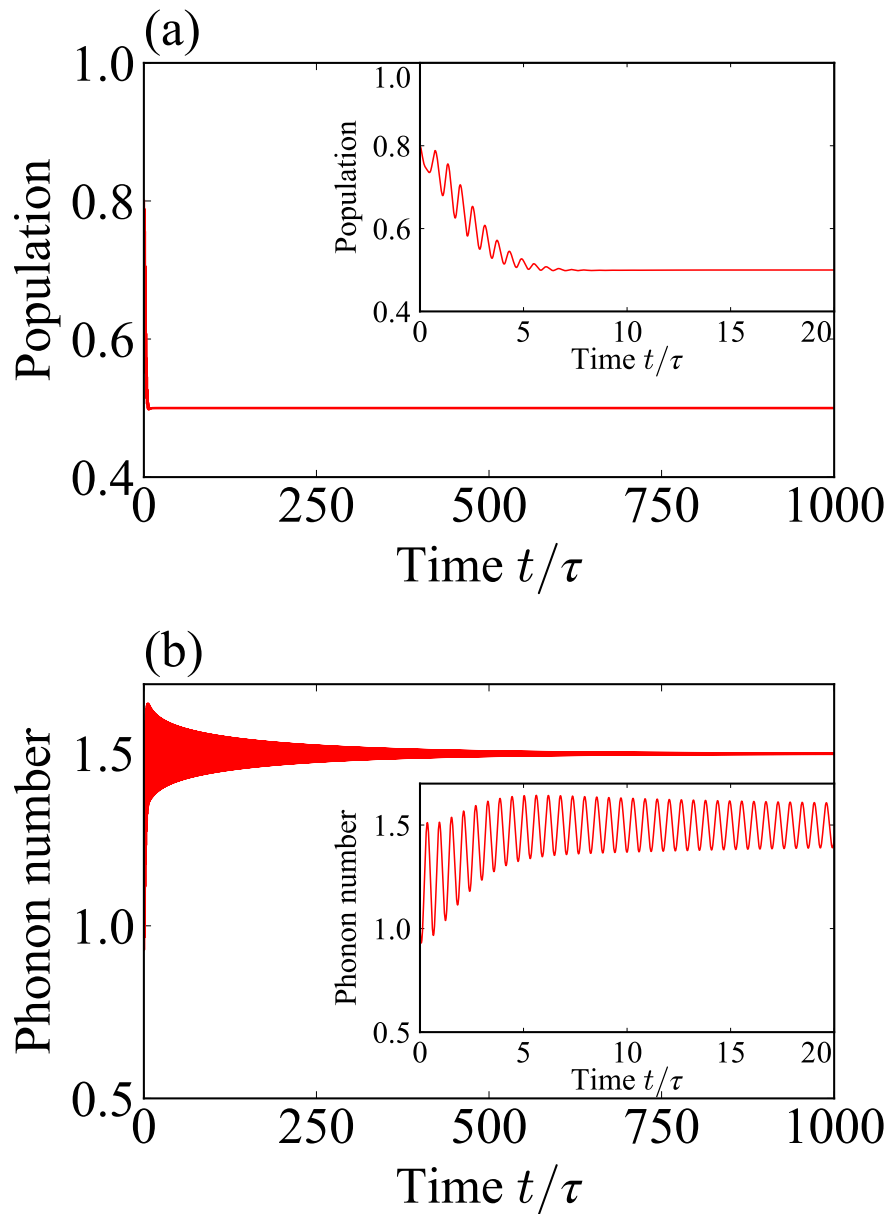


図 7: 長時間にわたる, CM 近似におけるポピュレーションの時間発展で, SEAQT の散逸項を含む場合: (a) TLS ポピュレーションと (b) フォノン個数期待値. 短期間の時間発展は, 挿入図に示される. 両系間の相互作用は, 両ケースで $g/\omega = 0.20$ と仮定される.

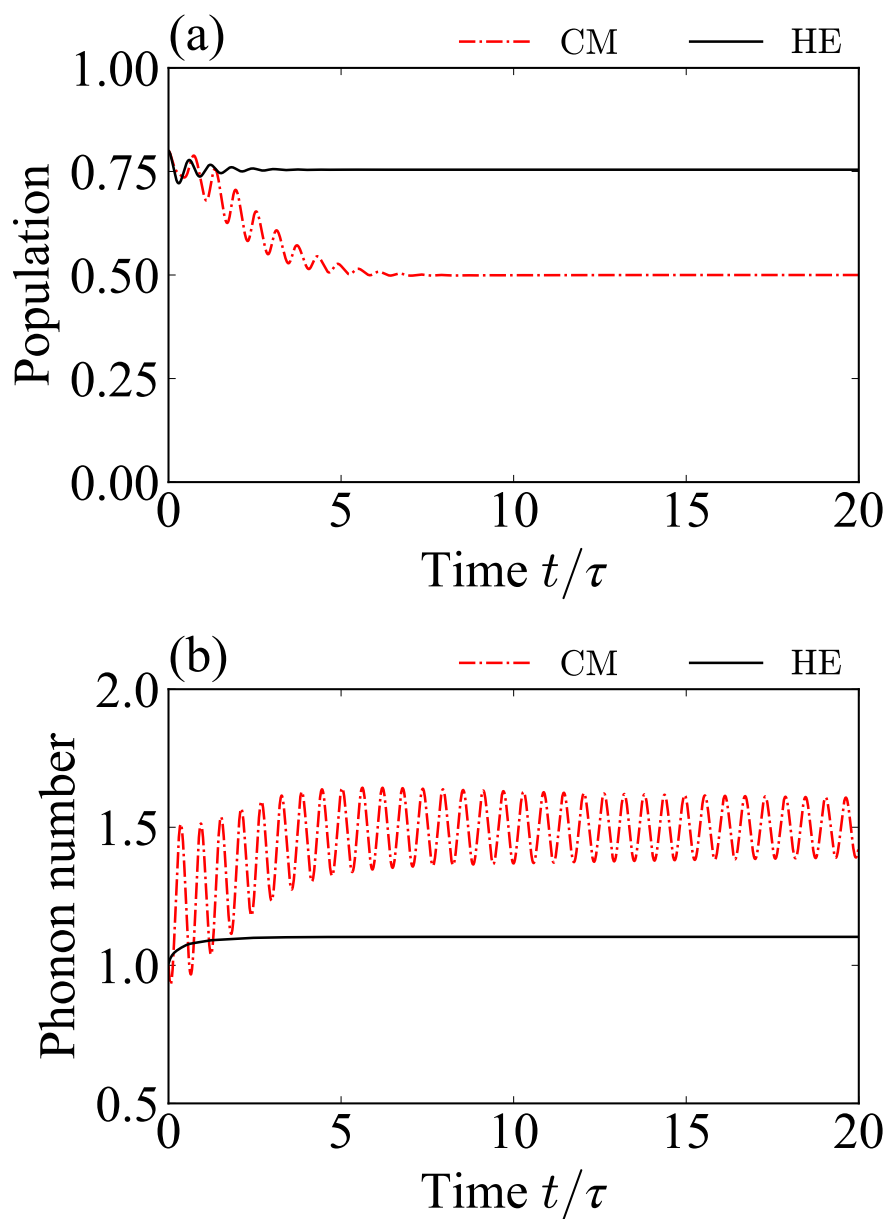


図 8: 短時間における, SEAQT における散逸項を含むフォノンサブシステムへの HE 近似を適用した場合の時間発展: (a) TLS ポピュレーションと (b) フォノン個数期待値. 黒線は HE 近似による結果を示し, 比較のための赤線は図 7 の CM 近似による結果を示す.

次に、図7は TLS ポピュレーション及びフォノン系個数期待値の、SEAQT に基づく自発的な散逸ダイナミクスを示している。TLS ポピュレーションの Rabi 振動は初期値 0.8 から収束値 0.5 に達し、フォノン系個数期待値は、TLS との相互作用により初期値 1.0 から 1.5 に収束する減衰振動がそれぞれ見て取れる。この結果は、異なる緩和速度における部分系間のエネルギー転送を示している。比較として、HE state から得られる結果（黒で示される）と、同じモデル系の CM state の結果（赤で示される）を図8に示す。明らかに、HE state における TLS ポピュレーションは迅速に 0.75 に減衰して収束し、かつフォノン系の個数期待値は変化せず、初期値 1.0 を維持している。これは、TLS が SEAQT の緩和過程に従う一方、HE state に近似したフォノン系を用いると、部分系間の相互作用を適切に扱うことができないことを表している。

ここで、TLS の量子コヒーレンスについて議論する。コヒーレンスの実部と虚部はそれぞれ、 $r_1 = \langle \hat{a} \rangle + \langle \hat{a}^\dagger \rangle$ および $r_2 = -i(\langle \hat{a} \rangle - \langle \hat{a}^\dagger \rangle)$ と記述される。図9(a)は、部分系間の相互作用が無い場合 ($g/\omega = 0$) の r_1 (赤線) および r_2 (青線) の時間発展を示している。一方、図9(b)では2つの部分系間に相互作用が有る場合 ($g/\omega = 0.20$) の量子コヒーレンスを示している。図9(a)に示されるように、Rabi 振動は量子コヒーレンスを誘起し、実部は $t = 5\tau$ で一定値 0.20 に収束する一方、虚部は 0 に収束する。これは、基底状態 $|0\rangle$ と励起状態 $|1\rangle$ 間の相関が、それらの間の相互作用 $\hbar V$ のために緩和後も残ることを意味している。一方で、図9(a)と図9(b)を比較すると、2つの部分系間の相互作用は量子コヒーレンスを約2倍の時間延長し、 r_1 と r_2 の双方とも 0 に収束する。また、コヒーレンスが長く維持されるほど Rabi 振動もより長く維持されることも見て取れる。長寿命のエンタングルメントは、TLS のエネルギー準位間隔を操作することで達成されると報告されているが、ここでの結果は、量子コヒーレンスを延長する別の可能性を示唆している。

図 10(a) は、2つの部分系間の相互作用が無い場合 ($g/\omega = 0$), 図 10(b) は相互作用が有る場合 ($g/\omega = 0.20$) のフォノンコヒーレンス $\langle \hat{b} \rangle$ の時間発展をそれぞれ示している. ここで、赤 (青) の曲線は $\langle \hat{b} \rangle$ の実部 (虚部) を表している. 図 9 および 10 に示されるように、フォノンコヒーレンスは TLS のそれよりも長く維持される. また、図 10(a) と 10(b) から、2つの部分系間に相互作用が有る場合の方が、無い場合よりもフォノンコヒーレンスを長く保持することが分かる.

ここで、フォノンコヒーレンス $\langle \hat{b} \rangle$ は、位相混合状態の CM state を使うと $\langle \hat{b} \rangle = \sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle} (e^{i\theta_0} + e^{i\theta_1})/2$ と書けるため、2つの異なるコヒーレント状態の位相: θ_0 およ

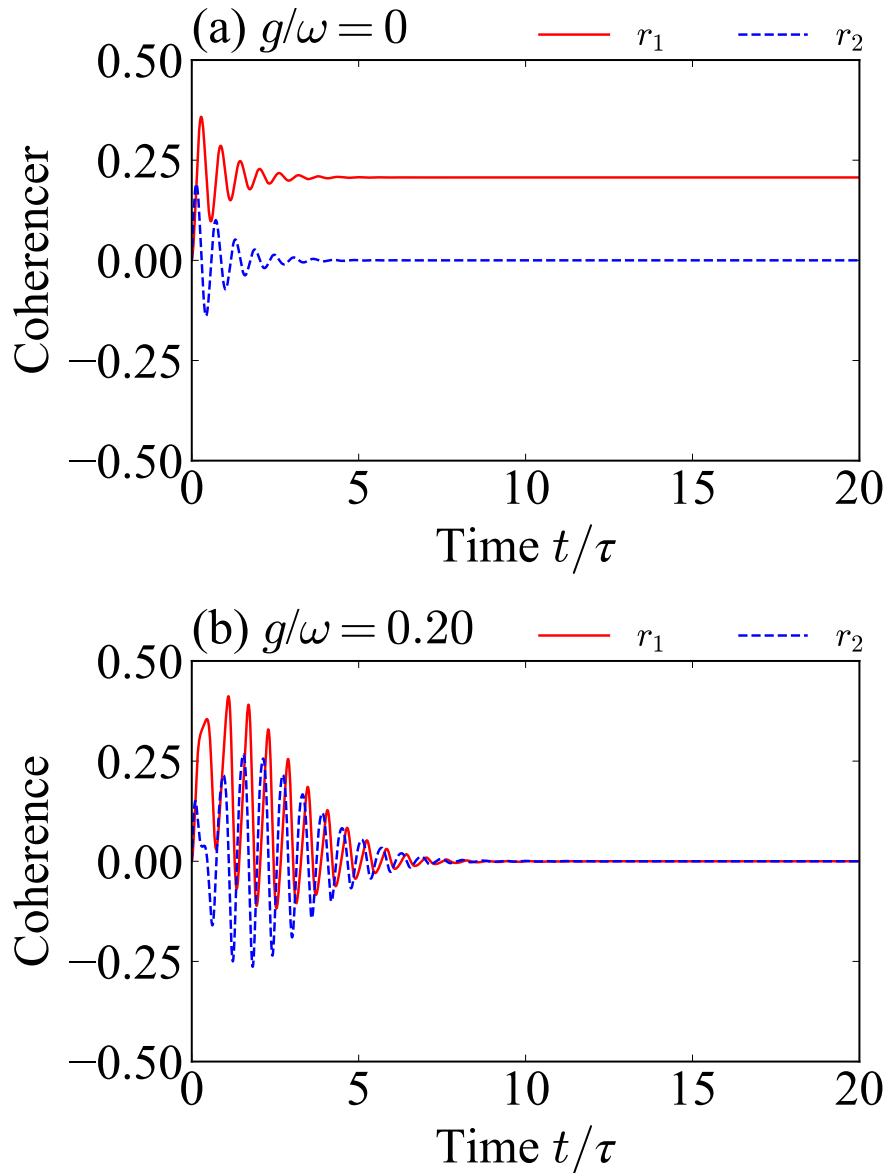


図 9: SEAQT に基づく CM 近似での TLS コヒーレンスの時間発展. コヒーレンスの実部, r_1 は赤線, 虚部, r_2 は青線で表される. 相互作用は (a) では除外され, (b) では $g/\omega = 0.20$ で明示的に含まれる.

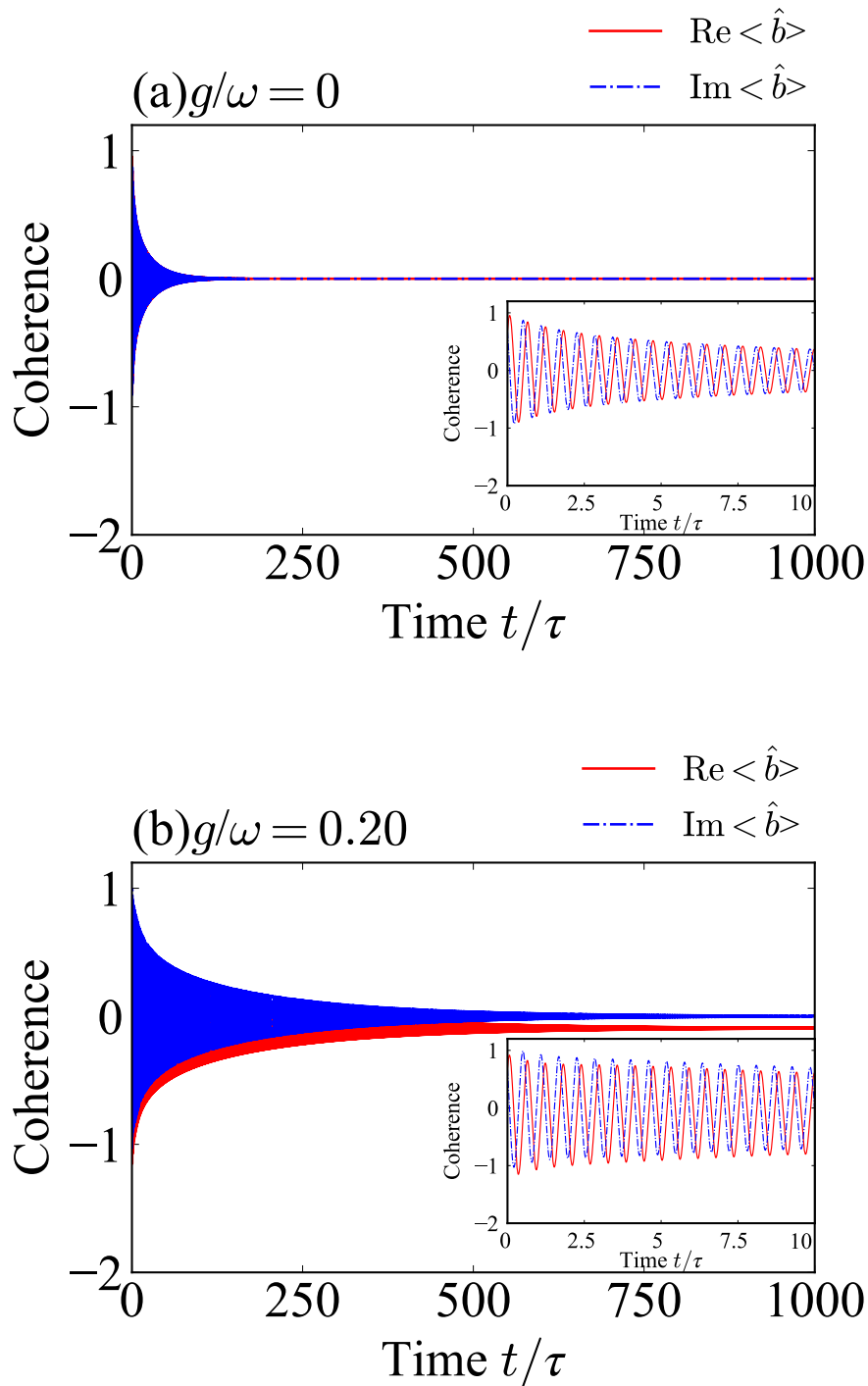


図 10: 図 9(a) および 9(b) に対応するフォノンのコヒーレンスの SEAQT 時間発展: (a) 相互作用なし, (b) $g/\omega = 0.20$. フォノンコヒーレンスの実部は赤線, 虚部は青線で表される.

び θ_1 に依存している. 図 11 は, SEAQT 緩和過程における位相差 $\theta_1 - \theta_0$ の時間発展を示す. 図 11(a) は, TLS とフォノン系間の相互作用が無い場合 ($g/\omega = 0$), 位相差は初期値の $\pi/6$ から π の飽和値へと滑らかに増加することを示している. 図 11(b) は,

相互作用を持つ場合 ($g/\omega = 0.20$) における同様の時間発展を示しており、これはより長時間、かつ振動的な緩和過程を生じている。

c_{\pm} は位相差とエントロピーに密接に関連しているため、その関係性は次節で詳しく議論される。

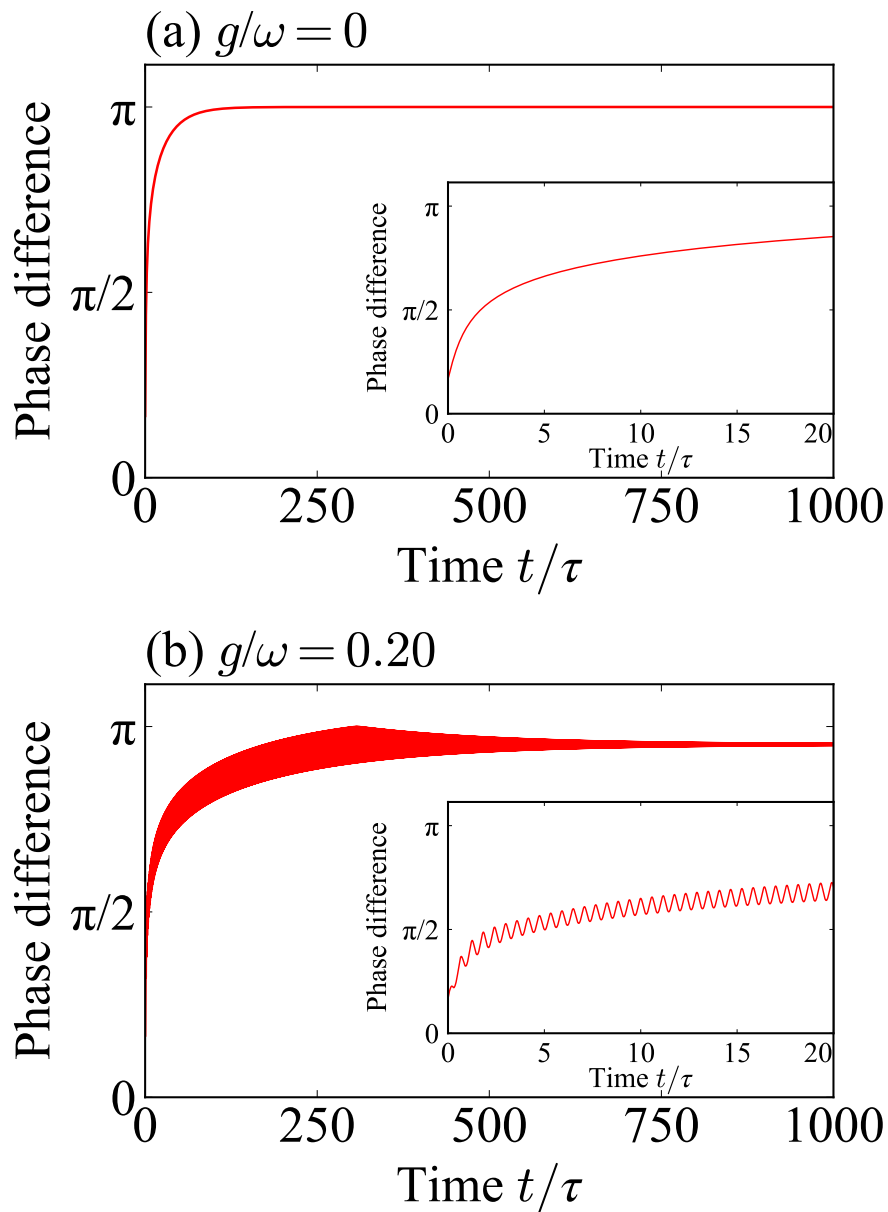


図 11: CM 近似における二つのコヒーレント状態間の位相差の時間発展: (a) 相互作用なし, (b) $g/\omega = 0.20$.

5.3.2 エントロピーダイナミクス

SEAQT 緩和過程に従って、孤立系の von Neumann エントロピーがどのように時間変化するか、平衡状態においてどのように収束するのかを調査する。図 12 には、TLS (赤線) およびフォノン系 (緑線) の von Neumann エントロピーの時間発展が示されている。ここで、点線は TLS の完全混合状態における値、即ち von Neumann エントロピーの上限値を表している。図 12 に示されるように、各部分系のエントロピーは徐々に飽和値に収束し完全なデコヒーレンスを示す。初期の一過的な時間における TLS エントロピーの増加抑制は、この間に生成される TLS コヒーレンスによるものである。

図 13 は全エントロピーの時間発展を示している。点線は全体系が熱平衡状態であるときのエントロピー値 $s^{(TE)}$ を示しているが、実際に計算されたエントロピーの飽和値は $s^{(TE)}$ よりも明らかに低い。この理由は、後述するようにフォノン系が CM state であることに起因する。

全エントロピーの挙動を、異なる状態における密度演算子間の差異を表す指標であるトレース距離のダイナミクスを介して議論する。 $\hat{\rho}(t)$, $\hat{\rho}_T(t)$ および $\hat{\rho}_p(t)$ を、全体系、各部分系の任意時刻 t における密度演算子とする。熱平衡状態における各密度演

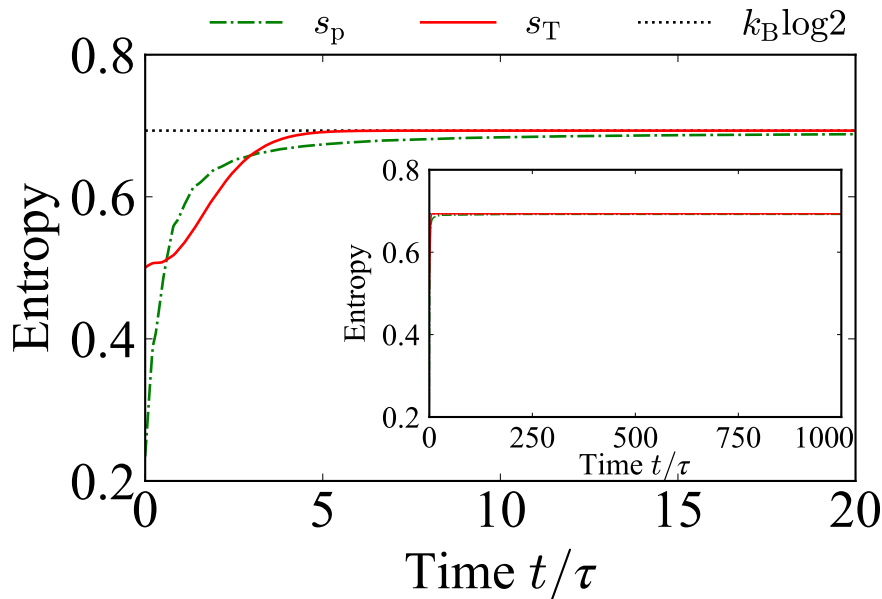


図 12: SEAQT に基づく CM 近似でのエントロピーの時間発展。TLS のエントロピーの短時間の時間発展は赤線、フォノンシステムのものは緑線で示される。長時間のエントロピーの時間発展は挿入図に示される。

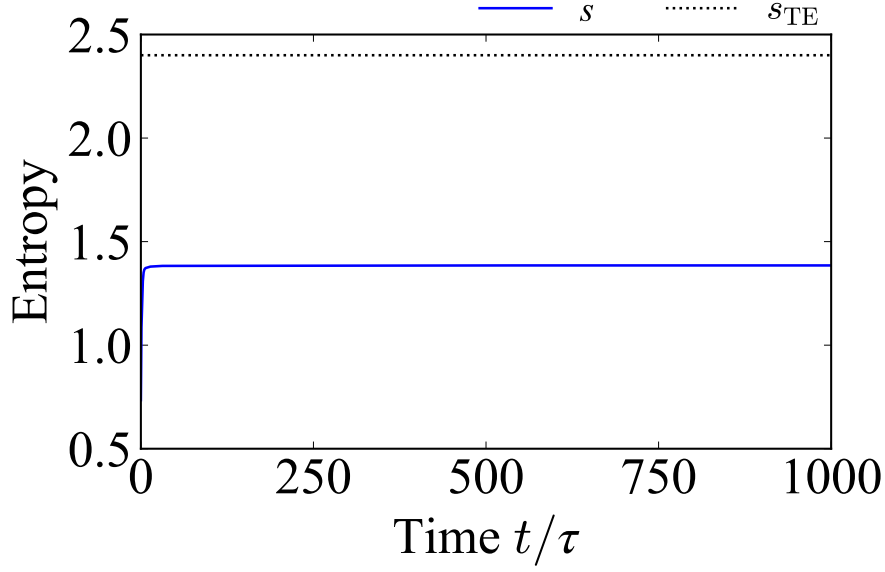


図 13: 全体系の SEAQT 時間発展におけるエントロピー（青線）および熱平衡状態のエントロピー（点線）.

算子を $\hat{\rho}^{(\text{TE})}$, $\hat{\rho}_T^{(\text{TE})}$ および $\hat{\rho}_p^{(\text{TE})}$ として、次のようにトレース距離を定義する.

$$d = \text{Tr}(|\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}_{\text{TE}}|), \quad (104a)$$

$$d_T = \text{Tr}_T(|\hat{\rho}_T(t) - \hat{\rho}_T^{(\text{TE})}|), \quad (104b)$$

$$d_p = \text{Tr}_p(|\hat{\rho}_p(t) - \hat{\rho}_p^{(\text{TE})}|). \quad (104c)$$

熱平衡状態における各密度演算子は,

$$\hat{\rho}^{\text{TE}} = \frac{e^{-\beta_{\text{TE}}\hat{H}}}{\text{Tr}(e^{-\beta_{\text{TE}}\hat{H}})}, \quad (105a)$$

$$\hat{\rho}_T^{(\text{TE})} = \frac{e^{-\beta_{\text{TE}}\hat{H}_T}}{\text{Tr}_T(e^{-\beta_{\text{TE}}\hat{H}_T})}, \quad (105b)$$

及び

$$\hat{\rho}_p^{(\text{TE})} = \frac{e^{-\beta_{\text{TE}}\hat{H}_p}}{\text{Tr}_p(e^{-\beta_{\text{TE}}\hat{H}_p})} \quad (105c)$$

と書ける. ここで, β_{TE} は熱平衡状態における逆温度である. β_{TE} は保存される全エネルギー期待値 $\langle \hat{H} \rangle(t) = \langle \hat{H} \rangle(0) = \text{Tr}(\hat{\rho}^{(\text{TE})}\hat{H})$ から一意に決定されるパラメータであり, 式 (76) の動的係数とは異なる. 図 14 には, トレース距離 d (青線), d_T (赤線), そして d_p (緑線) がプロットされており, それぞれ熱平衡状態におけるエントロピー値か

らの遠さを示している。 d_p は d_T よりも大きく、これは TLS が熱平衡状態に緩和する一方で、フォノン系は熱平衡状態には緩和しないことを示している。この理由は、CM state のフォノン系が、熱平衡状態におけるエントロピーよりも低い値に上限値を持っているためである。SEAQT 運動方程式は、初期に CM state である系が任意時刻において CM state を保つことを保証するが [Appendix], 2 分割の CM state における von Neumann エントロピーの上限値は、 $c_{\pm} = 0.5$ の場合、即ち $s_p = k_B \ln 2$ に制限される。従って、ここで計算された全体系の終状態 (平衡状態) は熱平衡状態ではない。SEAQT によって実現される終状態は、von Neumann エントロピーの生成が消失する状態であるため、例えばリットサイクルなどの動的な定常状態のように、必ずしも熱平衡状態とはならず、このような終状態は SEAQT において禁止されていない [52].

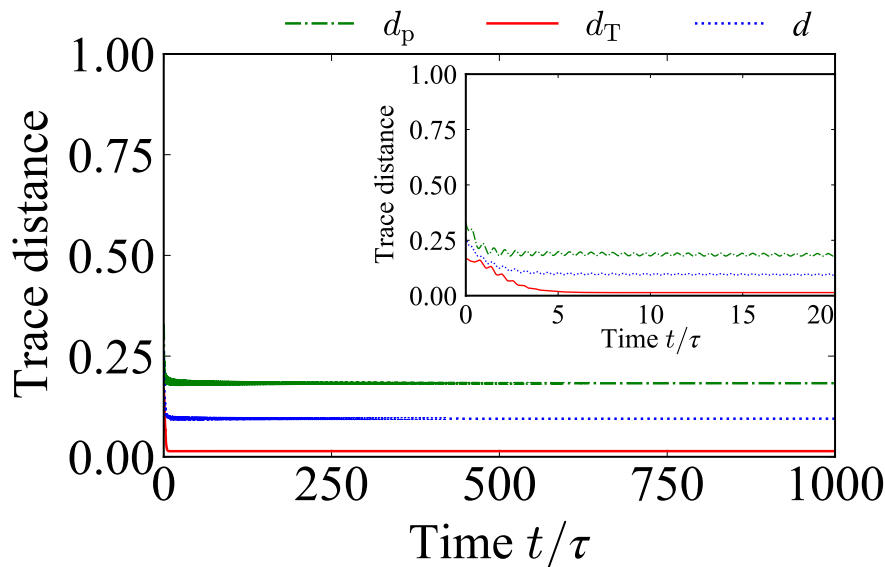


図 14: 各系の熱平衡状態に基づくトレース距離。赤い曲線は TLS のものを示し、緑の曲線はフォノンサブシステムのもの示し、青の曲線は全システムのもの示す。これは、フォノンサブシステムが熱平衡状態に緩和しないことを示唆する。各時間発展は挿入図で短時間にわたって示される。

5.4 summary

本章では、SEAQT の実践的側面が抱える課題の 1 つ、即ち量子光科学や量子ナノデバイスの応用に不可欠な光子場やフォノン場のような、無限の状態数を持つボソン系を厳密に解析することが困難であるという点に着目し、解決するために議論を行った。我々は、量子複合系の部分系間の相互作用を SEAQT の枠組みに含める新しい定式化を提案し、動的な局所フォノン系と相互作用する TLS からなるモデル系に適用した。励起子系の非平衡ダイナミクスは、動的フォノンとの相互作用や相関に依存して劇的に変化することが報告されており [81–85]、その重要性は科学と技術の両面からよく理解されている。

モデル系の定式化に基づき、ポピュレーションとエントロピーダイナミクスの数値解析を行い、提案手法である CM state を検証した。CM state に基づく運動方程式の導部分系出に際しては、相互作用ハミルトニアンに平均場近似を適用している。このため、インコヒーレントフォノンや厳密なエンタングルメント効果は無視される。これらの効果を取り入れるための平均場近似を用いない定式化については、付録 B で概説する。本章では、コヒーレントフォノンの効果が現れるエネルギーパラメータ条件を選択し、議論を。数値計算から、部分系間の相互作用がダイナミクスに適切に含まれていること、さらに長寿命の量子コヒーレンスという特異な結果を示している。TLS の自発的な散逸緩和ダイナミクスは、ポピュレーションは Rabi 周波数で振動し、そして部分系間の相互作用によって振幅が変調される。これは開放系理論から得られた数値結果と一致するものである [49, 50]。フォノン系についても同様の散逸緩和ダイナミクスが見られるが、TLS の緩和率とは異なるものであり、かつ HE state では得られない結果となっている。具体的には、HE state では扱えない 2 つの部分系間の相互作用が TLS の量子コヒーレンスを約 2 倍長くし、フォノン系のコヒーレンスは TLS の相関よりも長い時間維持される。各部分系におけるエントロピーの増大と飽和はデコヒーレンスに対応する。トレース距離の解析結果からは、TLS は熱平衡状態に緩和し、フォノン系は熱平衡状態とは異なる平衡状態に緩和することがわかった。

本章の試みに沿って、提案された定式化と結合複合系に適用された解析は、次章において詳しく議論される。

6 コヒーレントフォノン支援による非共鳴励起移動

近年、ナノファブリケーションやナノ電子/光子デバイスの開発における量子現象にかなりの注目が集まっている。それ故に、ナノスケール系の緩和過程とそのメカニズム、そしてコヒーレントダイナミクスを明確にすることは本質的に重要となる。例えば、原子、分子、量子ドット (QDs)、量子井戸 (QWs) 間の光学的近接場 (ONF) を介した励起移動 (ET) 現象はナノスケールにおける基本的な量子現象であり、その緩和ダイナミクスはナノファブリケーションやナノデバイスの動作において重要な役割を果たす。[42,44,45,81–84] また、半導体の二重 QWs におけるスピン依存 ET 現象においては、縦型光学 (LO) フォノンが局所環境として非共鳴 ET を支援するという特異な性質が報告されている。[42,44,85–87] 一般に、フォノン環境はコヒーレンスを破壊し、対象系のエネルギーや情報を散逸させるが、ナノスケール系に関する最近の研究では局所フォノン系が ET、コヒーレントダイナミクス、エンタングルメント生成を支援することが明らかにされている。[43,46–48,84] この非共鳴 ET 現象のメカニズムは理論的に研究されており [42,49,50]、2 準位系 (TLSs) 間の ET は TLSs と動的フォノン局所環境との間の位相とエネルギーを同期させることで大幅に強化されることが示されている。これらの研究は、時間依存射影演算子法 [13–20] から導出された非マルコフ型の量子マスター方程式 (QME) に基づいているが、量子ナノデバイスの機能や操作にとって本質的な緩和ダイナミクスを含む非平衡安定性に関する議論は、これらの研究の範疇を超えている。従って、非共鳴 ET とフォノンコヒーレンスとの共同現象における、不可逆的な安定化過程に関する詳細な議論が必要である。特に、コヒーレンス制御を考慮すると、フォノンコヒーレンスの緩和 (ディフェージング) が短期および長期の両方で ET 共同現象にどのように影響するかは非常に興味深い。

本章では、前章にて定式化を行った CM state による SEAQT 解析の手法を用いて、局所フォノン系に支援される非共鳴 ET 現象の緩和ダイナミクスを分析・議論する。[51–53,55–64,67] SEAQT の特筆すべきことを再度確認すると、伝統的な線形マルコフ型 QME 形式とは対照的に、量子系の非線形な緩和ダイナミクスは、SEA に従って最適な経路をたどる。これは、熱浴系の物理的構造や関連するシステムとの明確な相互作用を指定せずに行われる。[16,17,28,29] さらに、確率保存の要求のもとで導出された基本的な運動方程式は、SEAQT における密度演算子の正性を常に保証する。しかし、摂動展開法や動的リラクゼーション係数の影響のため、伝統的な非線形の進化を記述する非マルコフ型 QME では正性が必ずしも維持されるわけではない。[30–32] したがって、SEAQT の形式は、幅広い時間スケールでの緩和ダイナミクスを記述し、量子ナノ系のコヒーレンス (デコヒーレンス) 制御における主要な課題に取り組むのに

適している．具体的には，非共鳴 ET とフォノンコヒーレンスの共同現象における緩和過程および安定化プロセスのメカニズムを明らかにするのに有効である．

6.1 モデルの構成と基本性質

図 15 は，本研究で考慮されるモデルシステムの模式図である．各 TLS は，ローカルなフォノン系に結合しており，これは動的環境に支えられた非共鳴 ET モデルの最も基本的な単位である．総ハミルトニアン \hat{H} は，次のように書かれる．

$$\hat{H} = \hat{H}_T \otimes \hat{I}_p + \hat{H}_p \otimes \hat{I}_T + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (106a)$$

$$\hat{H}_T = \hbar\omega_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hbar\omega_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \otimes \hat{I}_1 + \hbar V (\hat{a}_1^\dagger \otimes \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \otimes \hat{a}_1), \quad (106b)$$

$$\hat{H}_p = \hbar\omega_{p1} \hat{b}_1^\dagger \hat{b}_1 \otimes \hat{I}_{p2} + \hbar\omega_{p2} \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_2 \otimes \hat{I}_{p1}, \quad (106c)$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hbar g_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \otimes (\hat{b}_1 + \hat{b}_1^\dagger) \otimes \hat{I}_2 \otimes \hat{I}_{p2} + \hbar g_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \otimes (\hat{b}_2 + \hat{b}_2^\dagger) \otimes \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_{p1}, \quad (106d)$$

ここで， \hat{H}_T と \hat{H}_p は，TLS およびフォノン系のハミルトニアンをそれぞれ示している． $\hat{I}_T = \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2$ および $\hat{I}_p = \hat{I}_{p1} \otimes \hat{I}_{p2}$ は，TLS およびフォノン系の恒等演算子である．TLS とフォノン系との間の相互作用ハミルトニアンは \hat{H}_{int} として表される．TLS l の生成（消滅）演算子は \hat{a}_l^\dagger (\hat{a}_l) であり，TLS l と局所的に相互作用するフォノン系 l の生成（消滅）演算子は \hat{b}_l^\dagger (\hat{b}_l) である ($l = 1, 2$)．TLS l およびフォノン系 l の固有エネルギーは，それぞれ $\hbar\omega_l$ および $\hbar\omega_{pl}$ で示され， $\hbar g_l$ は TLS l とフォノン系 l 間の相互作用エネルギーであり， $\hbar V$ は，ONF 結合のための TLS 1 と TLS 2 間の ET に起因

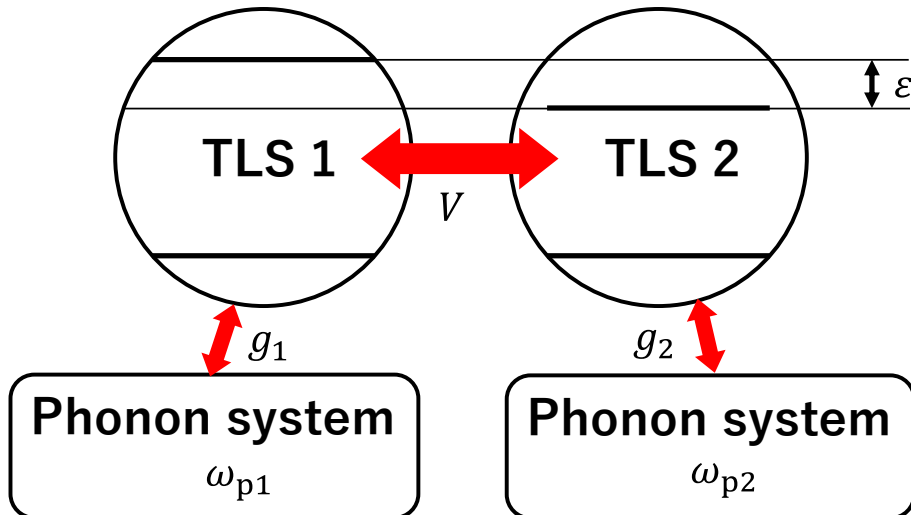


図 15: 2TLS と動的局所フォノン系の結合モデル．2つの TLS は ONF を介して相互作用する．各フォノン系はそれぞれ TLS1, 2 と局所的に相互作用する．各 TLS とフォノン系はナノ構造内に閉じ込められている．

する2つの TLS 間の相互作用エネルギーである。

フォノン系は無分散であると仮定される。これは、LO フォノンがこの現象において主要な役割を果たすという実験的な確認に基づいており、[42,85] さらに、参考文献 49,86,87 および 50 から、光学フォノン系は単一モードのフォノンによって効果的に表現することができるという示唆されている。その結果、式 (106c) および (106d) によって表されるフォノン系の自由および相互作用ハミルトニアンは無分散かつ単一モードとしている。

参考文献 42,49 および 50 によれば、Fig. 15 のモデル系において、2TLS 間の非共鳴 ET を支援するフォノン系には、インコヒーレントフォノンとコヒーレントフォノン、2種類が存在する。インコヒーレントフォノン支援が生じる条件は、2TLS のエネルギー準位分裂 $\hbar\varepsilon = \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2$ と、フォノン系の固有エネルギー $\hbar\omega_{pl}$ が共鳴するとき、即ち $\varepsilon = \omega_{pl}$ となる場合である。これは熱平衡熱浴としてのフォノン系との相互作用から生じるもので、ナノシステムやバルク材料システムで研究されてきた従来の現象である。一方、コヒーレントフォノンによる支援が非共鳴 ET を増幅するのは、Rabi 周波数 $\Omega = \sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2}$ とフォノン系の固有周波数 ω_{pl} が共鳴する場合である。これは前章における数値解析でも想定されたパラメータ条件であるが、この条件下では、TLS の Rabi 振動がフォノンのコヒーレンスと同期し、共振を起こす。図 16 にこの条件下におけるモデル系の相互作用過程の概念図が示されているが、これは非平衡動的環境との相互作用を考慮することでのみ確認できる、量子的性質を持つ特異な現象である。本章では、この動的なコヒーレントフォノンによる相互作用過程に焦点を当て、SEAQT による緩和過程を議論する。

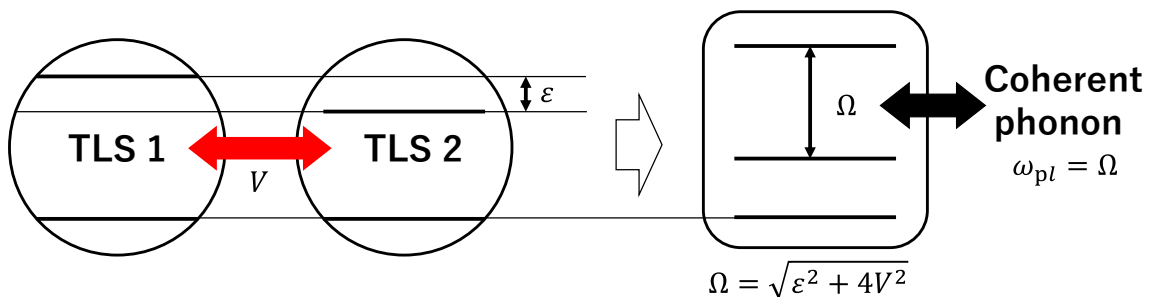


図 16: コヒーレントフォノン支援効果による非共鳴 ET 増強メカニズムの概念図。2つの TLS が結合し、エネルギー準位の Rabi 分裂が起こる。TLS ポピュレーションの Rabi 振動とコヒーレントフォノンの振動は、Rabi 周波数と各フォノン系の固有周波数が共鳴すると同期し、結果として非共鳴 ET を増強する。

具体的定式化の第一のステップとして、2TLS とフォノン系との間の相互作用ハミルトニアンに平均場近似を行う:

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{\text{int}} = & \hbar g_1 \left\{ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \left(\langle \hat{b}_1 \rangle + \langle \hat{b}_1^\dagger \rangle \right) \otimes \hat{I}_2 \otimes \hat{I}_p + \langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \rangle \left(\hat{b}_1 + \hat{b}_1^\dagger \right) \otimes \hat{I}_T \otimes \hat{I}_{p2} \right\} \\ & + \hbar g_2 \left\{ \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \left(\langle \hat{b}_2 \rangle + \langle \hat{b}_2^\dagger \rangle \right) \otimes \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_p + \langle \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \rangle \left(\hat{b}_2 + \hat{b}_2^\dagger \right) \otimes \hat{I}_T \otimes \hat{I}_{p1} \right\} \\ & - \sum_{l=1,2} \hbar g_l \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \rangle \left(\langle \hat{b}_l \rangle + \langle \hat{b}_l^\dagger \rangle \right) \hat{I}.\end{aligned}\quad (107)$$

そして、全体のハミルトニアンは以下のように書き直される:

$$\hat{H} = \tilde{H}_T \otimes \hat{I}_p + \tilde{H}_p \otimes \hat{I}_T, \quad (108a)$$

$$\tilde{H}_T = \hbar \omega'_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hbar \omega'_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \otimes \hat{I}_1 + \hbar V \left(\hat{a}_1^\dagger \otimes \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \otimes \hat{a}_1 \right), \quad (108b)$$

$$\tilde{H}_p = \left\{ \hbar \omega_{p1} \hat{b}_1^\dagger \hat{b}_1 + \hbar g'_1 \left(\hat{b}_1 + \hat{b}_1^\dagger \right) \right\} \otimes \hat{I}_{p2} + \left\{ \hbar \omega_{p2} \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_2 + \hbar g'_2 \left(\hat{b}_2 + \hat{b}_2^\dagger \right) \right\} \otimes \hat{I}_{p1}. \quad (108c)$$

ここで、 $\omega'_l = \omega_l + g_l \left(\langle \hat{b}_l \rangle + \langle \hat{b}_l^\dagger \rangle \right)$ および $g'_l = g_l \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \rangle$ である。さらに、方程式(??)は、 $\tilde{H}_p = \tilde{H}_{p1} + \tilde{H}_{p2}$ および $\tilde{H}_{pl} = \hbar \omega_{pl} \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l + \hbar g'_l \left(\hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \right)$ として分解することができる。TLS とフォノン系との相互作用への平均場近似は、 $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \otimes \left(\hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \right) = \left\{ \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \rangle + \Delta \left(\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \right) \right\} \otimes \left\{ \langle \hat{b}_l \rangle + \langle \hat{b}_l^\dagger \rangle + \Delta \hat{b}_l + \Delta \hat{b}_l^\dagger \right\} \sim \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \rangle \left(\hat{b}_l + \hat{b}_l^\dagger \right) + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \left(\langle \hat{b}_l \rangle + \langle \hat{b}_l^\dagger \rangle \right) - \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \rangle \left(\langle \hat{b}_l \rangle + \langle \hat{b}_l^\dagger \rangle \right)$ として、揺らぎの2次の項を無視するが、共鳴フォノン動力学を記述する $\langle \hat{b}_l \rangle \left(\langle \hat{b}_l^\dagger \rangle \right)$ を考慮するには十分である。

6.2 SEAQT における定式化

式(108a)–(108c)の全ハミルトニアンに基づき、2TLSs とフォノン系の運動方程式は独立して導出することができる。また、TLS とフォノン系の間初期相関はないと仮定する。すなわち、 $\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_T \otimes \hat{\rho}_{p1} \otimes \hat{\rho}_{p2}$ である。ここで、 $\hat{\rho}_T$ は2TLSsの密度演算子であり、 $\hat{\rho}_{p1(2)}$ はフォノン系1(2)の密度演算子である。式(161)と(162)から、2TLSsのSEAQTの運動方程式は次のように得られる:

$$\frac{d\hat{\rho}_T}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[\tilde{H}_T, \hat{\rho}_T \right] - \frac{1}{2\tau_1} \left\{ \hat{d}_1, \hat{\rho}_1 \right\} \otimes \hat{\rho}_2 - \frac{1}{2\tau_2} \left\{ \hat{d}_2, \hat{\rho}_2 \right\} \otimes \hat{\rho}_1, \quad (109a)$$

$$\hat{d}_l = \left(\hat{B}_T \ln \hat{\rho}_T \right)^{(l)} + \alpha_l \hat{I}_l + \beta_l \left(\tilde{H}_T \right)^{(l)}, \quad (109b)$$

および

$$\alpha_l = -\left\langle\left(\hat{B}_T \ln \hat{\rho}_T\right)^{(l)}\right\rangle - \beta_l \left\langle\left(\tilde{H}_T\right)^{(l)}\right\rangle, \quad (110a)$$

$$\beta_l = -\frac{\left\langle\left\{\Delta\left(\hat{B}_T \ln \hat{\rho}_T\right)^{(l)}, \Delta\left(\tilde{H}_T\right)^{(l)}\right\}\right\rangle}{2\left\langle\Delta\left(\tilde{H}_T\right)^{(l)} \Delta\left(\tilde{H}_T\right)^{(l)}\right\rangle} \quad (110b)$$

また、フォノン系の運動方程式はそれぞれ、

$$\frac{d\hat{\rho}_{pl}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left[\tilde{H}_{pl}, \hat{\rho}_{pl}\right] - \frac{1}{2\tau_{pl}} \left\{\hat{d}_{pl}, \hat{\rho}_{pl}\right\}, \quad (111a)$$

$$\hat{d}_{pl} = \hat{B}_{pl} \ln \hat{\rho}_{pl} + \alpha_{pl} \hat{I}_{pl} + \beta_{pl} \tilde{H}_{pl}, \quad (111b)$$

および

$$\alpha_{pl} = -\left\langle\ln \hat{\rho}_{pl}\right\rangle - \beta_{pl} \left\langle\tilde{H}_{pl}\right\rangle, \quad (112a)$$

$$\beta_{pl} = -\frac{\left\langle\left\{\Delta \ln \hat{\rho}_{pl}, \Delta \tilde{H}_{pl}\right\}\right\rangle}{2\left\langle\Delta \tilde{H}_{pl} \Delta \tilde{H}_{pl}\right\rangle} \quad (112b)$$

となる。密度演算子 $\hat{\rho}_T$ の時間発展は、TLSs のポピュレーション、量子コヒーレンス、エントロピーダイナミクス等のあらゆる物理量を記述する。一方、フォノン系密度演算子 $\hat{\rho}_{pl}$ の時間発展は、SEAQT 運動方程式において無限状態数を取り扱うための技術を必要とする。一般に、ボソン系の時間発展は cluster-expansion truncation を用いて計算されることが多い [33, 34]。このアプローチは物理量期待値の時間発展方程式の高次相関項を、低次の相関の積で置き換える。しかしながら、SEAQT 動方程式の散逸項はエントロピー演算子 $\hat{S} = -k_B \hat{B} \ln \hat{\rho}$ を明示的に含んでおり、cluster-expansion truncation の手法によってこの項を正確に取り扱うことはできない。

この困難を避けるために、前章で導入された、状態の直交直和分解 [68] に基づく方法を用いる。密度演算子は有限 N 個の部分状態 $\hat{\rho} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} \hat{\rho}_k$ として表され、同時にエントロピー演算子は $\ln \hat{\rho} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} \ln \hat{\rho}_k$ と分解される。 $\hat{\rho}$ の次元は無限であるため、分割された状態 $\hat{\rho}_k$ の次元も無限のままである。しかし、各分割状態 $\hat{\rho}_k$ が有限個の変数のセットで特徴付けられていることから、これら有限個の変数を評価することで $\hat{\rho}$ を近似的に分析することが可能になる [56–58]。

前章で議論したように、従来手法である HE state は、ハミルトニアンと密度演算子の可換性が仮定されるため、相互作用する部分系の複雑なダイナミクスを記述することができない。

従って、本章では CM state を用いて、モデル系の数値解析を行う [65]。フォノン系における SEAQT 動方程式は、CM state の密度演算子によって書き直される。この定式化によって、無限状態数を持つ部分系と相互作用する複雑なモデル系のダイナミクスを、SEAQT フレームワークから数値的に解析することができる。

本章で議論するモデル系の局所動的フォノン系において、CM state の密度演算子は N 個の直交直和分解により次のように分解される。

$$\hat{\rho}_{pl} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} \hat{\rho}_k, \quad (113a)$$

$$\hat{\rho}_k = c_k^{(l)} |c_k^{(l)}\rangle \langle c_k^{(l)}|, \quad (113b)$$

各フォノン系 l において、それぞれ前章の定式化と同様、 $|c_k^{(l)}\rangle$ は異なるコヒーレント状態 $|\alpha_i^{(l)}\rangle$ ($i = 0, 1, \dots, N-1$) の任意の線形結合で記述され、 $\langle c_k^{(l)} | c_{k'}^{(l)} \rangle = \delta_{kk'}$ を満たす。なおコヒーレント状態は、各 l 毎に $\hat{b}^{(l)} |\alpha_i^{(l)}\rangle = \alpha_i^{(l)} |\alpha_i^{(l)}\rangle$ として定義される。 $|\alpha_i^{(l)}\rangle$ の線形結合による定式化は、CM state が一般にハミルトニアンとの非可換性を保持することを示しており、正規直交状態 $|c_k^{(l)}\rangle$ の具体的な表式は、Gram-Schmidt の正規直交化を使用して構築することができる。この場合、密度演算子は一般的に $\hat{\rho}_{pl} = \sum_{i,i'=0}^{N-1} \rho_{ii'} |\alpha_i^{(l)}\rangle \langle \alpha_{i'}^{(l)}|$ として、 $|\alpha_i^{(l)}\rangle$ の言葉で書かれる。しかし、係数 $\rho_{ii'}$ が変数の場合、 $\rho_{ii'}$ の非自明性のため、状態 $|c_k^{(l)}\rangle$ はもはや既知ではない。したがって、物理的に明瞭な描像として、 $\hat{\rho}_{pl}$ を

$$\hat{\rho}_{pl} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} c_k^{(l)} |c_k^{(l)}\rangle \langle c_k^{(l)}| = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{N} |\alpha_i^{(l)}\rangle \langle \alpha_i^{(l)}| \quad (114)$$

と記述する。式 (114) は、密度演算子 $\hat{\rho}_{pl}$ が N 個の異なるコヒーレント状態間で等分割されることを示している。このように書いたとき、 $|c_k^{(l)}\rangle$ は唯一の変数が複素値 $\alpha_i^{(l)} = |\alpha_i^{(l)}| \exp(i\theta_i^{(l)})$ である既知の状態として記述され、無限状態数の $\hat{\rho}_{pl}$ および $\hat{\rho}_k$ の数値解析は、 $2N$ 個の変数 $|\alpha_i^{(l)}|$ および $\theta_i^{(l)}$ を計算することにより可能となる。

さらに、式 (113a), (113b) の直交直和分解から、エントロピー演算子 $\hat{S}_{pl} = -k_B \hat{B}_{pl} \ln \hat{\rho}_{pl}$ は

$$\hat{S}_{pl} = -k_B \hat{B}_{pl} \ln \hat{\rho}_{pl} \quad (115a)$$

$$= -k_B \hat{B}_{pl} \bigoplus_{k=0}^{N-1} (\ln c_k^{(l)}) |c_k^{(l)}\rangle \langle c_k^{(l)}| \quad (115b)$$

として展開できる。[65] ここで必要とされるのは、 $|c_k^{(l)}\rangle$ と $\ln c_k^{(l)}$ の計算のみであり、これにより無限状態数系を含むの相互作用モデルの、SEAQT ダイナミクスを数値的に

調査することが可能となる．本章では，前章と同様，分割空間の数が $N = 2$ の場合が考慮されている．これは，この研究で興味を持っている現象の散逸緩和ダイナミクスを記述するという目的を達成するために必要な最小の数である [65]．この場合，次のように記述することができる．

$$\hat{\rho}_{\text{pl}} = c_+^{(l)} |c_+^{(l)}\rangle \langle c_+^{(l)}| \oplus c_-^{(l)} |c_-^{(l)}\rangle \langle c_-^{(l)}| \quad (116a)$$

$$= \frac{1}{2} \left(|\alpha_0^{(l)}\rangle \langle \alpha_0^{(l)}| + |\alpha_1^{(l)}\rangle \langle \alpha_1^{(l)}| \right) \quad (116b)$$

ただし， $c_0^{(l)} = c_+^{(l)}$ ， $c_1^{(l)} = c_-^{(l)}$ ， $|c_0^{(l)}\rangle = |c_+^{(l)}\rangle$ ， $|c_1^{(l)}\rangle = |c_-^{(l)}\rangle$ という対応である．式 (116b) は $N = 2$ の場合の式 (114) に相当し， $c_{\pm}^{(l)}$ および $|c_{\pm}^{(l)}\rangle$ は次のように記述できる．

$$|c_{\pm}^{(l)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{c_{\pm}^{(l)}}} \left(|\alpha_1^{(l)}\rangle \pm \frac{\langle \alpha_0^{(l)} | \alpha_1^{(l)} \rangle}{|\langle \alpha_0^{(l)} | \alpha_1^{(l)} \rangle|} |\alpha_0^{(l)}\rangle \right) \quad (116c)$$

および

$$c_{\pm}^{(l)} = \frac{1 \pm |\langle \alpha_0^{(l)} | \alpha_1^{(l)} \rangle|}{2}. \quad (116d)$$

ここで， $\alpha_0^{(l)} = |\alpha^{(l)}| \exp(i\theta_0^{(l)})$ および $\alpha_1^{(l)} = |\alpha^{(l)}| \exp(i\theta_1^{(l)})$ の形で表される位相混合状態を導入する [55, 65]．この制限もまた前章で用いた形式であるが，これらは共通のノルム $|\alpha^{(l)}|$ を持ち，異なる位相 $\theta_0^{(l)}$ と $\theta_1^{(l)}$ を持つ．この形式においては，後で議論されるフォノン系の運動方程式が，関心のある物理量に対して自然に閉じた形を取るという明確な利点があり，かつ関心のあるコヒーレントダイナミクスを議論するために十分な条件である．

時間発展を追う変数の組を，物理量 $\langle \hat{b}_l \rangle$ ($\langle \hat{b}_l^\dagger \rangle$) および $\langle \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \rangle$ に置き換えることにより，フォノン系の SEAQT 運動方程式は次のように書き下される [65]:

$$\frac{d\langle \hat{b}_l \rangle}{dt} = -i(\omega_{\text{pl}} \langle \hat{b}_l \rangle + g'_l) + D_l, \quad (117a)$$

$$\frac{d\langle \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \rangle}{dt} = ig'_l (\langle \hat{b}_l \rangle - \langle \hat{b}_l^\dagger \rangle) - \frac{g'_l}{\omega_{\text{pl}}} (D_l + D_l^*), \quad (117b)$$

$$D_l = -\frac{\hbar\beta_{\text{pl}}}{2\tau_{\text{pl}}} (\omega_{\text{pl}} \langle \hat{b}_l \rangle + g'_l + 2g'_l (\langle \Delta \hat{b}_l \Delta \hat{b}_l \rangle + \langle \Delta \hat{b}_l^\dagger \Delta \hat{b}_l \rangle)), \quad (117c)$$

ここで、 $\langle \Delta \hat{b}_l \Delta \hat{b}_l \rangle = \langle \hat{b}_l^2 \rangle - \langle \hat{b}_l \rangle^2$ および $\langle \Delta \hat{b}_l^\dagger \Delta \hat{b}_l \rangle = \langle \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \rangle - \langle \hat{b}_l^\dagger \rangle \langle \hat{b}_l \rangle$ が使用されている。

位相混合状態を使用すると、項 $\langle \Delta \hat{b}_l \Delta \hat{b}_l \rangle$ は、 $\text{Re} \langle \hat{b}_l \rangle$, $\text{Im} \langle \hat{b}_l \rangle$, および $\langle \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \rangle$ によって記述でき、式 (117a)–(117c) は閉じた形で表現される (付録を参照)。

特に、式 (117a) の右側の第 1 項 (可逆項) は、文献 42, 49, 50 において自己無撞着に決定された $\langle \hat{b}_l \rangle$ の時間発展方程式と一致し、フォノン系固有のコヒーレンス振動と TLS との同期的な相互作用効果を記述する。式 (117a) の右辺第 2 項 (式 (117c)) は SEA に基づく散逸緩和過程を示す。これは最適なエントロピー生成を伴う経路で状態の時間発展を $1/\tau_{pl}$ の速さで進めるデコヒーレンス効果を表している。更に、式 (117c) から、TLS との相互作用により、フォノン系の緩和過程は単純な線形ではなく分散 $\langle \Delta \hat{b}_l \Delta \hat{b}_l \rangle$ および共分散 $\langle \Delta \hat{b}_l^\dagger \Delta \hat{b}_l \rangle$ に依存する非線形となることが分かる。

総じて、式 (112a), (112b), および (117a)–(117c) は、図 15 に示されるモデル系の、SEAQT における緩和ダイナミクスを定量的に分析および議論するために使用できる。

6.3 解析結果と考察

ここで、数値解析を実行するための、各種パラメータと変数の初期値を設定する。各エネルギーパラメータは、 $\omega_1/\varepsilon = 1.5$, $\omega_2/\varepsilon = 0.50$, $V/\varepsilon = 0.30$, $g/\varepsilon = 0.10$ といったように 2TLS 間のエネルギー差 ε で正規化される。フォノン系の周波数 ω_{pl} は、 ω_{pl} と Rabi 周波数 Ω 間の共鳴条件が仮定される。即ち $\omega_{pl} = \Omega = \sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2}$ に設定され、これによりコヒーレントフォノンによる非共鳴 ET の支援が期待される。各部分系の内部緩和時間は、一般的には、SEAQT の理論的予測が実験結果と一致するように、または、特定の時間スケールに関して系のダイナミクスを適切に記述するように、現象論的なパラメータとして決定されることが多い [55–58]。この研究では、TLS の内部緩和時間は一定値 $\varepsilon\tau_T = \varepsilon\tau_1 = \varepsilon\tau_2 = 1.0$ として固定される。一方でフォノン系の内部緩和時間は、 $\varepsilon\tau_p = \varepsilon\tau_{p1} = \varepsilon\tau_{p2} = 10, 1.0$, および 0.20 のように、場合に分けて設定される。これら τ_p の値は、ET 伝達の時間スケールである Rabi 振動周期 (後述するエネルギーパラメータ設定 $V/\varepsilon = 0.30$ においては $\varepsilon \cdot 2\pi/\Omega = 5.39$) に関して、 $\varepsilon \cdot 2\pi/\Omega$ よりも長く、また短くなる場合での結果を比較するために設定される。2つの TLS のポピュレーションとコヒーレンスの初期値は、それぞれ $\langle \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \rangle = 0.80$, $\langle \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \rangle = 0.20$ 及び $\langle \hat{a}_l \rangle = 0$ に設定される。CM state の変数 $|\alpha^{(l)}\rangle$, $\theta_0^{(l)}$ と $\theta_1^{(l)}$ はフォノン系の物理量の初期値から決定される。具体的には、 $\langle \hat{b}_l \rangle = |\alpha^{(l)}\rangle (\exp(i\theta_0^{(l)}) + \exp(i\theta_1^{(l)}))/2 = 0$ を満たすように、 $|\alpha^{(l)}\rangle = \sqrt{\langle \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \rangle} = 1.0$ および $\theta_0^{(l)} - \theta_1^{(l)} = \pm\pi$ が選ばれる。

図 17-19 は、2つの TLS のポピュレーションとコヒーレントフォノンの時間発展を示している。図 17 は $\varepsilon\tau_p = 10$ の結果を示し、図 17(a) の短い時間スケールの振動は 2 つの TLS 間の Rabi 振動、長い時間スケールの振動は非共鳴 ET を表している。この図から、コヒーレントフォノンに支援された非共鳴 ET プロセスは、フォノン系の内部緩和時間が Rabi 振動周期よりも大きい場合は、上準位から下準位へ、そしてその逆へとおおよそ可逆的にやり取りされることが分かる。

図 18 では $\varepsilon\tau_p = 1.0$ の結果が示されており、コヒーレントフォノンは図??よりも早く緩和している。今、 $\varepsilon\tau_p$ は Rabi 振動の周期よりも短く、これによりコヒーレントフォノンの生成が抑制されている。それに伴い、非共鳴 ET が阻害されている様子が示されている。

図 19 は、 $\varepsilon\tau_p = 0.20$ の結果を示している。先ほどよりも $\varepsilon\tau_p$ が Rabi 振動周期より大分短いため、コヒーレントフォノンの十分な生成前にフォノン系が緩和してしまうことから、可逆的な非共鳴 ET はほとんど生じていないのが分かる。

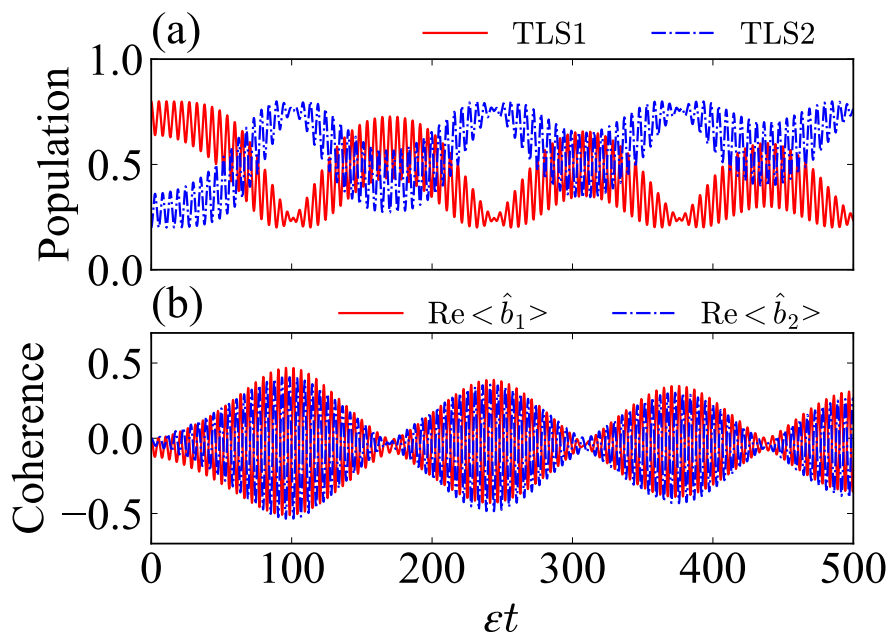


図 17: $\varepsilon\tau_p = 10$ におけるコヒーレントフォノン支援効果による非共鳴 ET ($et = 0 \sim 500$): (a) 2TLS のポピュレーションの時間発展、及び (b) フォノン系 1, 2 のコヒーレンスの実部の時間発展。

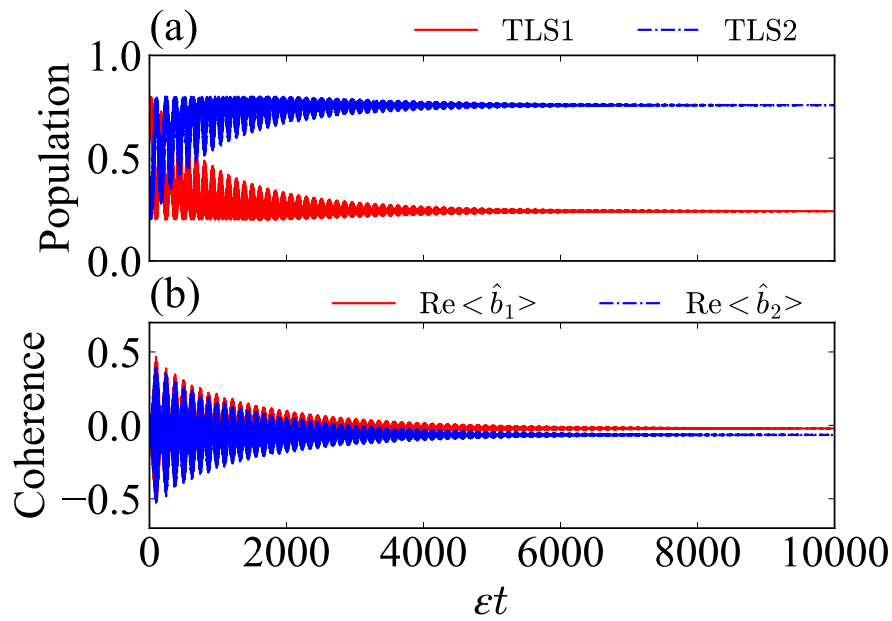


図 18: $\epsilon\tau_p = 1.0$ におけるコヒーレントフォノン支援効果による非共鳴 ET ($\epsilon t = 0 \sim 10000$): (a) 2TLS のポピュレーションの時間発展, 及び (b) フォノン系 1, 2 のコヒーレンスの実部の時間発展.

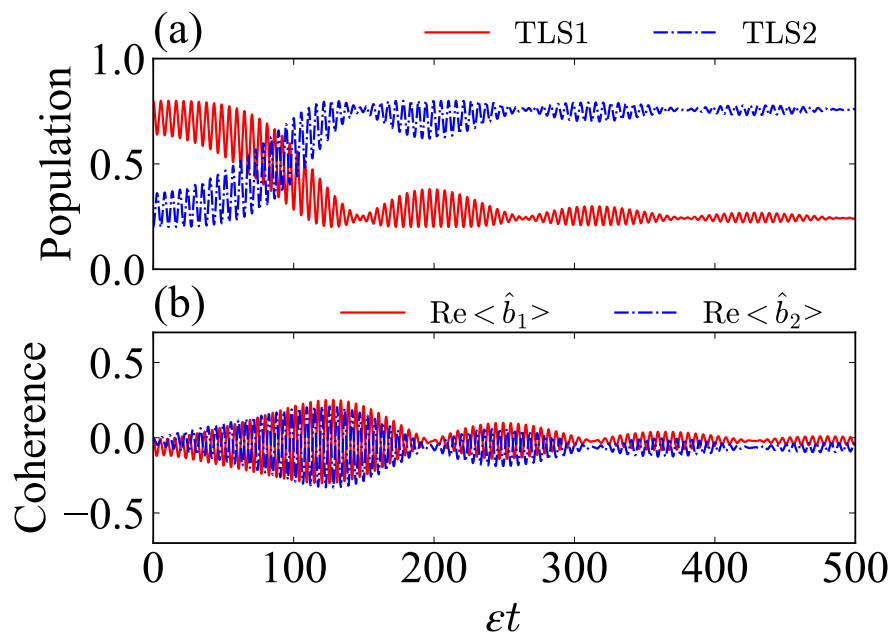


図 19: $\epsilon\tau_p = 0.20$ におけるコヒーレントフォノン支援効果による非共鳴 ET ($\epsilon t = 0 \sim 500$): (a) 2TLS のポピュレーションの時間発展, 及び (b) フォノン系 1, 2 のコヒーレンスの実部の時間発展.

次に, より長い時間スケールでの非共鳴 ET, Rabi 振動, およびコヒーレントフォノンの収束について議論する. 図 20 は $\epsilon\tau_p = 10$ の結果を示している. 図 20(a) は 2TLS の非共鳴 ET の緩和・収束を示しており, 図 20(b) ではフォノン系における誘起された

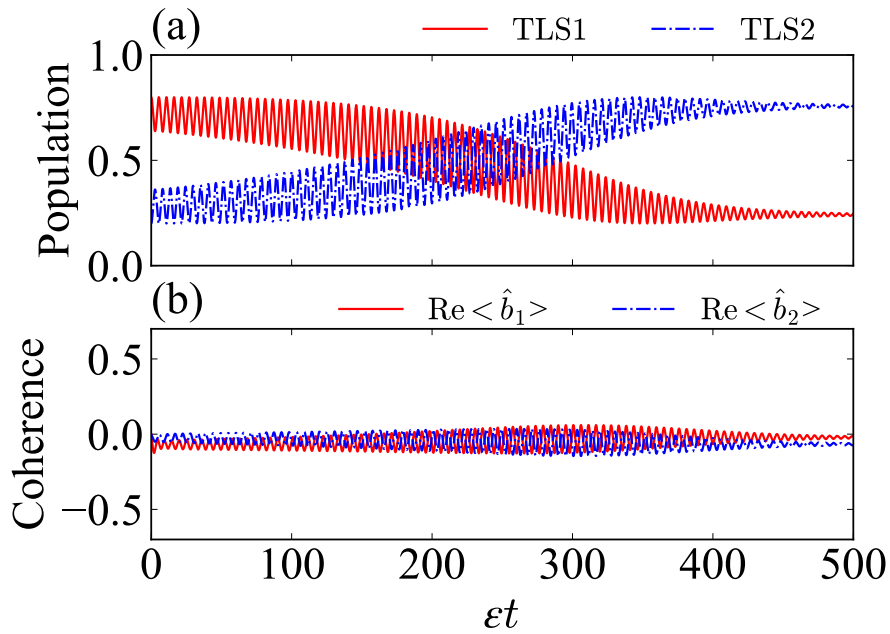


図 20: $\varepsilon\tau_p = 10$ におけるコヒーレントフォノン支援効果による非共鳴 ET の緩和過程 ($et = 0 \sim 10000$): (a) 2TLS のポピュレーションの時間発展, 及び (b) フォノン系 1, 2 のコヒーレンスの実部の時間発展.

コヒーレンスが緩和・収束する様子が示されている。特筆すべきは、TLS ポピュレーションとフォノン系コヒーレンスの緩和過程が両者同じ時間スケールで進行している点である。従来の熱浴環境における Markov 緩和過程では、一般的にデコヒーレンスはポピュレーション緩和よりもはるかに早く完了する。図 20 の結果はフォノンコヒーレンスが TLS ポピュレーションの緩和時間と同じ時間スケール程度維持できることを示している。これは端的に、両者が時間発展において互いに共鳴し増幅するためであり、動的局所フォノン環境に起源を持つ非マルコフ性の振る舞いを取り入れた SEAQT 解析の結果として予測される緩和過程である。TLS1 と 2 間の非共鳴 ET は、フォノンコヒーレンスが 0 に収束するにつれて不可逆的となっている。

次に、図 21 から、SEAQT の運動方程式から得られる全体系の全エネルギーについての議論を行う。図 21 は $\varepsilon\tau_p = 10$ の結果であるが、図 21(a) はフォノンの個数期待値の時間発展を示しており、初期値 1.0 から増加し、最終的に約 1.3 に収束している。一方図 21(b) は、全体系の全エネルギー及び各部分系のエネルギー期待値の時間発展が示されている。図 21 から、2TLS と局所フォノン系の複合孤立系における全エネルギー期待値が保存されることが確かめられる。また、各部分系におけるエネルギーに着目すると、部分系間においてエネルギーの自発的な再分配が自然に発生し、各サブシステムがより安定な状態に収束することを示している。これは SEAQT の解析に基づく新規的な知見である。

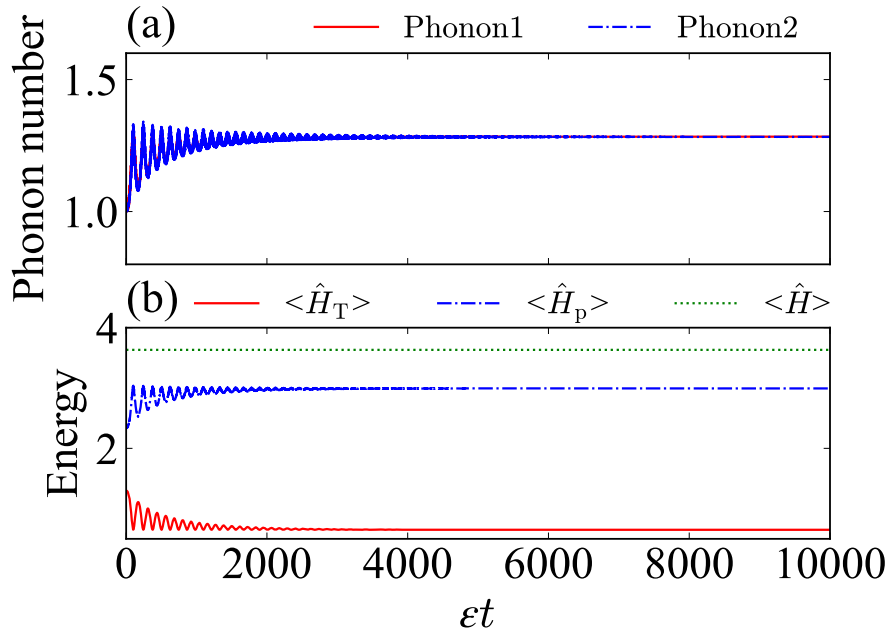


図 21: $\varepsilon\tau_p = 10$ ($\varepsilon t = 0 \sim 10000$) における, (a) フォノン系の個数期待値, および (b) 2TLS のエネルギー期待値 $\langle \hat{H}_T \rangle$, フォノン系のエネルギー期待値 $\langle \hat{H}_p \rangle$, 全体系の全エネルギー期待値 $\langle \hat{H} \rangle$ の時間発展.

最後に, TLS-フォノン系間の相互作用の有無と, コヒーレントフォノンの存在の持続性の関係について検討をする. まず, TLS との相互作用を持たない単一フォノン部分系におけるデコヒーレンス過程に関して議論を行い, 次に TLS とフォノン系間の有意な相互作用が考慮される場合のフォノンコヒーレンスの時間発展を調査して, 結果の比較を行う. このプロセスを観察するために, ここからはフォノン系に有限値の初期コヒーレンス $\langle \hat{b}_l \rangle (t=0) \neq 0$ を想定する (TLS 系などと相互作用しない単一フォノン系において, 初期 0 のコヒーレンスが自発的に誘起することはないため). 具体的な初期値の設定は, フォノン系が純粋度 $\text{Tr}(\hat{\rho}_{pl}^2)(0) = 0.90$ を満たすように値が決められる. SEAQT 解析では初期条件として混合状態が要求されるため, 適切な初期状態としてある程度純粋状態に近い初期密度演算子を, 適当な純粋度から定めるという操作がしばしば行われる. [51, 55] 個数期待値をこれまで通り $\langle \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \rangle = 1.0$ とすれば, $\text{Tr}(\hat{\rho}_{pl}^2)(0) = 0.90$ から初期値 $\langle \hat{b}_l \rangle$ は一意に決定される. 結果として, 式 (116b), および $\langle \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_l \rangle (0) = 1.0$ と $\text{Im} \langle \hat{b}_l \rangle (0) = 0$ から, $\langle \hat{b}_l \rangle (0) = 0.99$ が得られる. この値を使用して, CM state のフォノン系における図 22 のような結果が得られた.

図 22(a) は, TLS との相互作用がない単一フォノン系 ($\varepsilon\tau_p = 1.0$) のデコヒーレンス過程を示しており, 図 22(b) は, 相互作用を伴う場合 ($g/\varepsilon = 0.10$, $\omega_{pl} = \Omega$) のフォノンコヒーレンスの時間発展を示している. 図 22(a) と (b) の比較から, 図 22(b) でのフォノンコヒーレンスが明らかに, 相互作用のない結果よりも長く持続していること

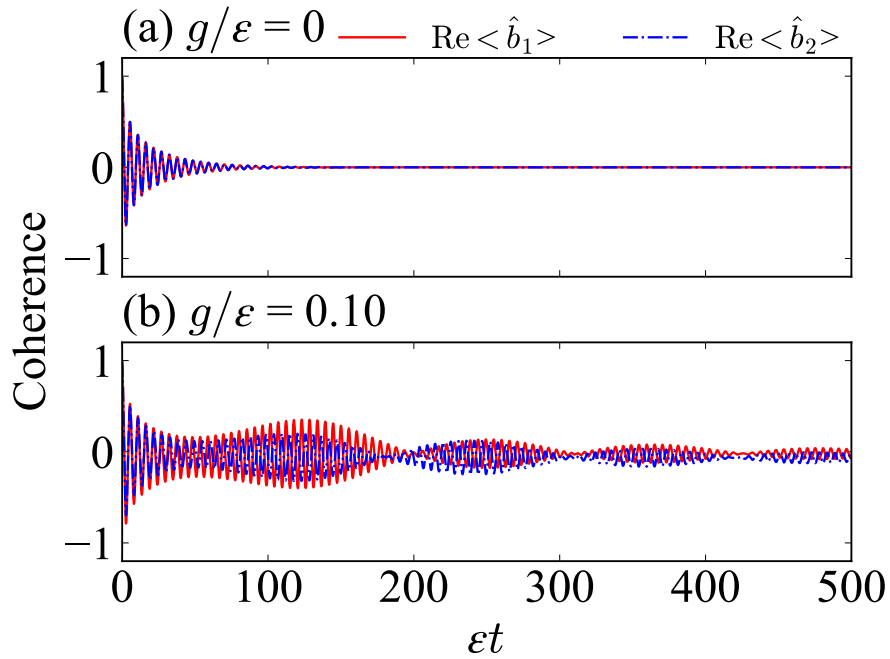


図 22: $\epsilon\tau_p = 1.0$ ($\epsilon t = 0 \sim 500$) におけるコヒーレンスフォノンの実部の緩和過程：(a) TLS との相互作用なし ($g/\epsilon = 0$, 独立した単一フォノン系), 及び (b) TLS との相互作用あり ($g/\epsilon = 0.10$, $\omega_{pl} = \Omega$ の同期状態).

がわかる。これは、TLS とフォノン系間の相互作用により、ET 振動とフォノンコヒーレンスが同期するためである。この結果は、コヒーレントフォノンの制御とその潜在的な応用に対する新しい視点を提供し、励起伝達制御を通じて各分野での応用の道を開く。コヒーレントフォノンの増強/阻害制御をレーザーや ONF によって操作するという可能性は、より安定したフォノンレーザーや超伝導キュービットのような未来の技術に貢献することができるだろう。 [86,88–91]

6.4 summary

本章では、コヒーレントフォノン環境と同期した非共鳴 ET プロセスの SEA 緩和ダイナミクスを調査した。解析は、相互作用ハミルトニアン of 平均場近似と、コヒーレント状態の位相が統計的に混合された CM state, すなわち位相混合状態によって記述される動的フォノン系の下で行われた。これらの仮定は、コヒーレントフォノンと ET の基本的な性質を取り込んだ緩和ダイナミクスを分析するのに十分な条件であると判断される [65,66]。しかし将来、インコヒーレントフォノンによる効果を組み込むためには平均場近似を超えた定式化が必要である (Appendix C)。また、より正確な議論のためには、CM state の構造、即ちフォノン系を複数のコヒーレント状態に分割

する手法において、分割数を増やすことでの精度の向上、および分割数を無限大に取ることによる一般的状態への漸近性、更には実験室での再現性といった重要な点を議論する必要があるだろう。ボソン系の分析に使用される従来の方法には、無限状態数に占有数の視点からの上限を設けて有限次元のヒルベルト空間にシステムを削減する手法が知られている。このような従来手法との比較から、CM state 近似の妥当性を検討することが出来るかもしれない。これらは今後の課題である。

本章における研究で行われた解析から、非共鳴 ET ダイナミクスとコヒーレントフォノンの散逸緩和ダイナミクスは、両者が密接に関連しあいながら同期的に進行することが分かった。具体的には、Rabi 振動の周期を考慮すると、フォノン系の内部緩和時間が十分に遅い場合には非共鳴 ET が積極的に生成され、一方フォノン系の内部緩和時間が Rabi 振動の周期よりも極端に短い場合、共振によりコヒーレントフォノンが十分に誘起する前にフォノン系が緩和し、非共鳴 ET を抑制するという結果が得られた。つまり、コヒーレントフォノンの作用とそれ自体の内部緩和プロセスが、非共鳴 ET の発生や減衰プロセスにおいて重要な役割を果たしている。例えば、フォノン系の内部緩和時間を何らかの方法で同定したり、あるいは操作するといった技術の追及が、非共鳴 ET の実現可能性を考える上で重要な知見・技術となるかもしれない。

さらに、全体的な緩和プロセスが完了するまでの長い時間スケールでは、TLS のエネルギーが不可逆的に減少するが、これはフォノン系が TLS の過剰なエネルギーをゆっくりと吸収しているからであり、この過程によって最終的に全体系を安定化するという仕組みとなっていることが判明した。これは、孤立系内で保存される全エネルギーを各サブシステムに再分配する過程である。また、この安定化プロセスの間に、2TLS のポピュレーションとフォノンのコヒーレンスの緩和と収束が同じ時間スケールで発生する。これは、励起子の非共鳴 ET とコヒーレントフォノン振動が共鳴することによる特異な結果であり、コヒーレントフォノンの長時間保持や制御といった技術の実現を期待させる。

最後の調査から、TLS の非共鳴 ET ダイナミクスとコヒーレントフォノンの同期的相互作用は、TLS との相互作用を持たない独立した単一フォノン系の場合と比較して、量子コヒーレンスの存続時間を大幅に延長することが分かった。この結果は TLS の ET とフォノンコヒーレンス振動が互いに誘起・増幅し合うことによるものである。フォノン系のコヒーレンスの制御は、フォノンレーザーの安定した出力 [86–89]、超伝導キュビットの緩和エラーと位相エラーの削減、エンタングルメント操作と量子状態の生成への応用 [90,91] など、さまざまな分野において重要であり、さらなる追求が今後の課題となるだろう。

以上、本章の結果は、環境系を含む全体を孤立系として直接記述する SEAQT 解

析によって初めて明らかにされた、量子的なナノスケールモデルにおける基本的な緩和ダイナミクスである。得られた知見は、動的な局所環境の振る舞いや、デコヒーレンス制御といった量子デバイスへの応用・開発を刺激する。

7 内因理論と外因理論の統一的解釈

本章では、SEQAT（内因理論）と従来の熱浴緩和理論（外因理論）の統一的解釈に向けた重要な議論を行う。両理論の数学的構造を厳密に解析し、抽象数学的領域においては、状態軌道の視点から両理論を同一視する可能性を探求する。このアプローチにより、内因理論と外因理論の間に存在する非自明な関連性と、状態代数の同型性が明らかにされる。

7.1 $\hat{\gamma}$ と $|\Psi\rangle$ の定義及び関係性

SEQAT 理論では、基本運動方程式の導出に際して、密度演算子 $\hat{\rho}$ を非エルミート演算子 $\hat{\gamma}$ によって $\hat{\rho} = \hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger$ と分解し、 $\hat{\gamma}$ の軌道を変分原理から定めるということを行った。本節では、内因理論の状態代数 $\hat{\gamma}$ と外因理論における全体系の状態ケット $|\Psi\rangle$ がどのように関連しているのかを詳細に調査する。本論文において $\hat{\gamma} - |\Psi\rangle$ 対応と称する関係性が、両理論の統一的解釈においてどのような役割を果たすのかを具体的に検証する。

本節の主題である「内因理論と外因理論の統一的解釈」を達成するにあたって、散逸緩和過程（時間発展）を議論する以前に考慮すべき前提がある。内因理論が主張する「孤立した混合状態¹」という概念の解釈である。外因的視点から見た物理的世界は、系が混合状態であるならば必ずその系と相関する外部系が存在し、外部系を含めた全体を孤立系として情報が補完される。即ち、内因理論における混合状態が孤立しているというのなら、その系自体のどこかに情報を補完し得る対象が必要であり、そのような対象を確立してようやく外因理論との対応構造を議論することができる。そして対応構造の統一的解釈に基づき、内因・外因両理論の散逸緩和過程を考察する準備ができる。従って本節では、両理論における状態代数 $\hat{\gamma}$ と $|\Psi\rangle$ の対応構造をはじめに議論する。具体的には、SEAQT において導入されたが、その具体的な構造や重要性が議論されていなかった非エルミート演算子 $\hat{\gamma}$ の数理物理的構造を深く掘り下げる。

混合状態と純粋状態ベクトルの対応関係と言えば、第 3.2 節で導入した密度演算子と TFD 状態ベクトルとの同値関係 $\hat{\rho} \sim |\rho\rangle = \sum_k \sigma_k |\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_k\rangle$ が考えられ、この際に導入されたチルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ を形式的な補助空間としてでなく実在的環境と捉える立場も存在する。実際、熱平衡状態（熱平衡 TFD）であれば、チルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ を熱浴環境と同定できるという数理物理的研究 [10,35] や、形式的にチルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ を熱浴環境とし

¹この意味で、文献 [52] では、 $\hat{\rho}$ は状態の統計的混合という意味合いを超えた「真の量子状態（標準量子力学の波動関数の意味で類似したもの）」であるという立場から、密度演算子ではなく「状態演算子」という呼び方に統一している。

て散逸過程を記述する試み [36,37] も存在する. しかし, 動的な TFD 状態ベクトルとして厳密に考えると, チルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ の元は空間 \mathcal{H} の元と常に対称的に動くように制約されるはずであり, 動的対象系と定常的熱浴系という対応関係を構成することは難しい. また, チルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ と \mathcal{H} の次元は必然的に同じであるから, 第 3.1.1 節で用いた van Hove 極限との整合も困難であり, TFD 状態ベクトルをそのまま内因理論の状態代数とはできない. 即ち, TFD における同値関係 $\hat{\rho} \sim |\rho\rangle = \sum_k \sigma_k |\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_k\rangle$ の構造を下地に, 元の空間 \mathcal{H} と非対称な空間を構成し, 環境系の概念的な対応物と出来ればよい.

内因理論の状態代数である非エルミート演算子 $\hat{\gamma}$ を基に, TFD 的代数の拡張を行うことで, この非対称構造を実現できることを説明する.

7.1.1 密度演算子のゲージ不変性

ある混合状態密度演算子 $\hat{\rho}$ は, 任意の非エルミート演算子 $\hat{\gamma}$ を用いて $\hat{\rho} = \hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger$ と記述することが一般的に可能である (第 4 章). 最も単純な場合, $\hat{\gamma} = \hat{\gamma}^\dagger = \sqrt{\hat{\rho}}$ と書くことができるが, $\hat{\gamma}$ は一般に非エルミートであってよく, その構造は非自明である. 具体的に, $\hat{\gamma}$ は

$$\hat{\gamma} = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{v} \quad (118)$$

と書くことができる. ただし \hat{v} は, $\hat{v}\hat{v}^\dagger = \hat{v}^\dagger\hat{v} = \hat{I}$ を満たす非自明なユニタリー演算子である必要がある (あるいは $\hat{B} = \hat{v}\hat{v}^\dagger$ が $\hat{\rho}(\hat{v}\hat{v}^\dagger) = (\hat{v}\hat{v}^\dagger)\hat{\rho}$ を満たす射影演算子であってもよいが, この点に関しては後の節で言及する). 即ち, $\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{v}\hat{v}^\dagger\sqrt{\hat{\rho}} = \sqrt{\hat{\rho}}\sqrt{\hat{\rho}} = \hat{\rho}$ と書け, $\hat{\rho} = \hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger$ を満たす. $\hat{\rho} = \hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger$ より, $\hat{\gamma}$ に右から任意の演算子 \hat{v} を作用させる変換 $\hat{\gamma} \rightarrow \hat{\gamma}\hat{v}$ に対して, 密度演算子 $\hat{\rho}$ は常に不変である. 従って, 我々が認識する物理量期待値 $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho})$ は任意の変換 $\hat{\gamma} \rightarrow \hat{\gamma}\hat{v}$ において不変である. このような性質を一般的にゲージ不変性と呼ぶ [72–74]. 即ち $\hat{\rho}$ には, $\hat{\gamma}$ の描像において \hat{v} による非自明性の余地が必ず存在する.

演算子 $\hat{\gamma}$ は, 本誌においては第 4 章の SEAQT 運動方程式の導出にて導入された概念であり, SEA 仮説は状態 $\hat{\gamma}$ の時間発展軌道を変分原理的に定める. ただし SEA 仮説は, 第 4 章で定義される演算子内積に基づいているため, 非自明項 \hat{v} とその影響が理論の中に明示的に現れることはない.

SEAQT とは無関係な文脈において, 演算子 $\hat{\gamma}$ の構造や時間発展を形式的に議論する研究は存在する. 例えば文献 [72–74] では, $\hat{\gamma}$ は「波動演算子」と呼ばれ, 一般化された状態概念として形式的に扱われる. ただし, それらの文脈において内因性や外

因理論との対応関係が具体的に論じられることは当然なく、ある種の修正 Schrödinger 方程式として一般的相互作用を有効的に記述するための形式的な枠組みとして導入されている。しかし以下の節における議論により、非自明項 \hat{v} 及び演算子 $\hat{\gamma}$ の表現が単なる形式的なものではなく、外因の状態ベクトル $|\psi\rangle$ との同型性や理論の統一的視点において必須な概念であることが示される。

7.1.2 数理解物理的同型性

非エルミート演算子 $\hat{\gamma}$ の簡単な構造を理解するために、 $\hat{\gamma}$ に対して次のように特異値分解を行う。

$$\hat{\gamma} = \sum_{i,j} \gamma_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (119a)$$

$$= \sum_{ij} \left(\sum_k u_{ik} \sqrt{p_k} v_{kj}^* \right) |i\rangle \langle j| \quad (119b)$$

$$= \sum_k \sqrt{p_k} \left(\sum_i u_{ik} |i\rangle \right) \left(\sum_j v_{kj}^* \langle j| \right) \quad (119c)$$

$$= \sum_k \sqrt{p_k} |\phi_k\rangle \langle \bar{\phi}_k|. \quad (119d)$$

$\sqrt{p_k}$ が $\hat{\gamma}$ の特異値であり、 $\hat{\rho} = \hat{\gamma} \hat{\gamma}^\dagger$ の固有値を p_k としたとき、 $\sigma_k = \sqrt{p_k}$ である。また、非エルミート性 $\hat{\gamma}^\dagger \neq \hat{\gamma}$ より、 $(|\phi_k\rangle)^\dagger \neq \langle \bar{\phi}_k|$ である。ユニタリー行列の成分 u_{ik} , v_{kj} は、 $\sum_i u_{ik} |i\rangle = |\phi_k\rangle$ 及び $\sum_j v_{kj} |j\rangle = |\bar{\phi}_k\rangle$ より、 $u_{ik} = \langle i|\phi_k\rangle$ と $v_{kj} = \langle j|\bar{\phi}_k\rangle$ を満たす。 $\hat{\gamma} \hat{\gamma}^\dagger = \sum_k p_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| = \hat{\rho}$ 及び $\hat{\gamma}^\dagger \hat{\gamma} = \sum_k p_k |\bar{\phi}_k\rangle \langle \bar{\phi}_k| = \hat{v}^\dagger \hat{\rho} \hat{v}$ より $[\hat{\gamma} \hat{\gamma}^\dagger, \hat{\gamma}^\dagger \hat{\gamma}] \neq 0$ であるため、 $\hat{\gamma}$ の行列表示は一般に対角化不可能である。

上記の特異値分解と、一般的状态ベクトル $|\Psi\rangle$ の特異値分解の式 (54a)-(54c) を比較すると、 $\langle \bar{\phi}_k| \rightarrow \otimes |\phi_k\rangle_E$ を対応させることにより、TFD の自由度倍加構造を一般化した対応関係を構築できることが予想される。

式 (118) におけるユニタリー演算子 \hat{v} の固有値分解を

$$\hat{v} = \sum_{j=1}^M \exp(i\theta_j) |j\rangle \langle j| \quad (120)$$

と書いたとき、式 (118) は

$$\hat{\gamma} = \sum_{k=1}^N \sqrt{p_k} |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \sum_{j=1}^M \exp(i\theta_j) |j\rangle \langle j| \quad (121a)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{N,M} \sqrt{p_k} \exp(i\theta_j) \langle \phi_k | j \rangle |\phi_k\rangle \langle j| \quad (121b)$$

$$= \sum_{j,k=1}^{N,M} \sqrt{p_k} \langle \phi_k | \hat{v} | j \rangle |\phi_k\rangle \langle j| \quad (121c)$$

のように展開できる。ただし、密度演算子 $\hat{\rho}$ の 0 でない固有値の数を N 、ヒルベルト空間 \mathcal{H} の次元を M としている。

一方、状態ベクトル $|\Psi\rangle$ の特異値分解は式 (53) で与えられるが、次のように、

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j=1}^M \gamma_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (122a)$$

$$= \sum_{k=1}^N \sum_{i,j=1}^M u_{ik} \sqrt{p_k} v_{kj} |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (122b)$$

$$= \sum_{k,j=1}^{N,M} \sqrt{p_k} v_{kj} |\phi_k\rangle \otimes |j\rangle \quad (122c)$$

と展開できる。式 (121c) において、 \hat{v} の非自明性から $\langle \phi_k | \hat{v} | j \rangle = v_{kj}^*$ と書くと、 $\hat{\gamma}$ と $|\Psi\rangle$ それぞれの描像において $v_{kj}^* \Leftrightarrow v_{kj} = \langle j | \hat{v}^\dagger | \tilde{\phi}_k \rangle$ という対応付けを行うことができる。従って、演算子 $\hat{\gamma}$ におけるゲージ変換自由度のユニタリ演算子 \hat{v} は、外因理論における環境系の基底変換と厳密に対応している。即ち、 $\langle \phi_k | \hat{v} | j \rangle \langle j | \Leftrightarrow \langle j | \hat{v}^\dagger | \tilde{\phi}_k \rangle (\otimes |j\rangle)$ の対応である。ここで、可換性 $[\sqrt{\hat{\rho}}, \hat{v}] = 0 \Leftrightarrow [\hat{\gamma} \hat{\gamma}^\dagger, \hat{\gamma}^\dagger \hat{\gamma}] = 0$ を満たす特別な場合を考えると、 $\hat{\gamma}$ は対角化可能となり、 $\hat{v} = \sum_k^M \exp(i\theta_k) |\phi_k\rangle \langle \phi_k|$ と書けるため

$$\hat{\gamma} = \sum_{k=1}^N \sqrt{p_k} |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \sum_{k'=1}^M \exp(i\theta_{k'}) |\phi_{k'}\rangle \langle \phi_{k'}| \quad (123a)$$

$$= \sum_{k=1}^N \sqrt{p_k} \exp(i\theta_k) |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \quad (123b)$$

と書くことができる。このとき、 $v_{kj} = v_{kk'} = \exp(-i\theta_k) \langle \tilde{\phi}_{k'} | \tilde{\phi}_k \rangle = \exp(-i\theta_k) \delta_{kk'}$ より、

外因理論の状態代数は

$$|\Psi\rangle \rightarrow \sum_{k,k'=1}^{N,M} \sqrt{p_k} \exp(-i\theta_k) \delta_{kk'} |\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_{k'}\rangle \quad (124a)$$

$$= \sum_{k=1}^N \sqrt{p_k} \exp(-i\theta_k) |\phi_k\rangle \otimes |\tilde{\phi}_k\rangle \quad (124b)$$

と書ける. 式 (56) の TFD 状態ベクトルと比較すると, 係数に添え字 k に依存する位相因子 $\exp(-i\theta_k)$ が存在する点が異なるが, 式 (124b) が属する空間はチルダ空間 $\tilde{\mathcal{H}}$ を外部系をした全体ヒルベルト空間 $\mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}$ である.

これらの数学的構造から, 対応関係 $\hat{\gamma} \ni |\Psi\rangle$ は, TFD における自由度倍加の対応構造 $\sqrt{\hat{\rho}} \ni |\rho\rangle$ を特別な場合として内包する一般化であることがわかる. 具体的には内因理論における状態代数のゲージ変換自由度 $\hat{\nu}$ の非自明性が, 外因理論における環境系の非自明性の余地として機能している.

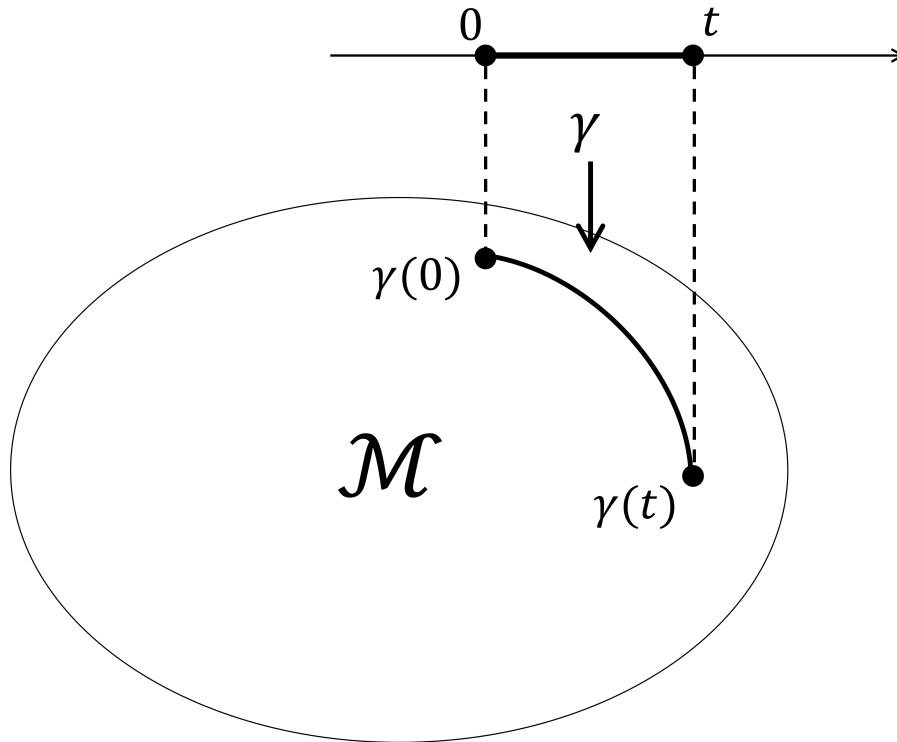


図 23: 多様体と軌道の埋め込み

7.2 幾何学的統一性

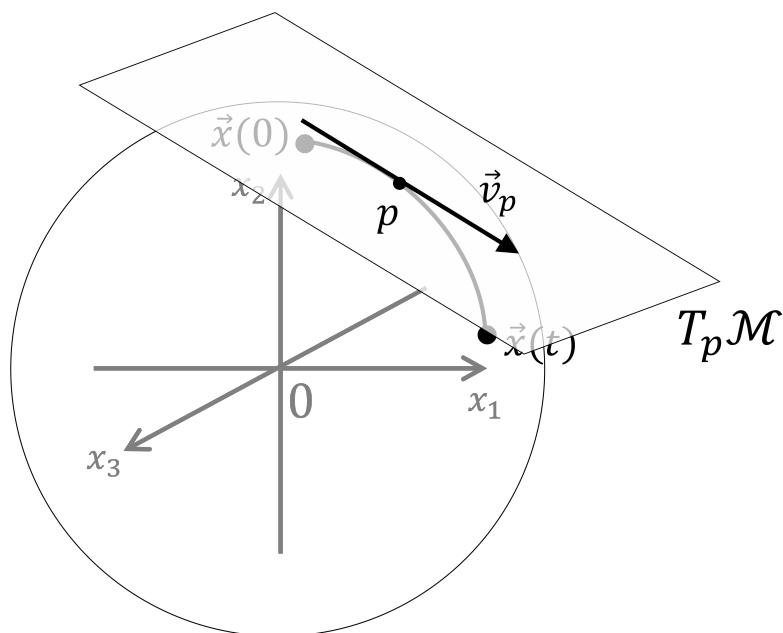
本節では、量子緩和理論における内因性と外因性の状態代数を、幾何学的な視点から俯瞰し統一的な理解を目指す。このアプローチでは、両理論の数学的枠組みを多様体として抽象的表現し、その幾何学的構造を明確にする。具体的には、多様体と接平面(接空間)の基本構造と、ヒルベルト空間の内積定義に基づき、両理論の統一性を議論する。状態空間を多様体として考えることで、物理状態の性質や連続的な変化を幾何学的に捉えることが可能となる。多様体論における厳密な定義や説明は Appendix D や文献 [54] 等を参照するとして、ここでは必要最低限の説明の下、物理直感的な説明を行う。始めに、多様体上の曲線という概念に関して、図 23 から概説する。図 23 では、実数 \mathbb{R} の閉区間 $[0, t]$ が、写像 γ によって位相空間 M へ埋め込まれている。

$$\gamma : [0, t] \rightarrow M \quad (125)$$

空間 M が多様体と呼ばれる概念である。多様体の定義には、位相空間という概念の理解・解釈に加え、「部分集合として開被覆 U_λ を持つ: $M = \bigcup_{\lambda \in \Lambda} U_\lambda$ 」こと、「 M 上の関数」の微分可能性に関する言及が必要であるが、ここでは一旦、直感的理解を優先し厳密な説明はしない。本章の文脈に沿い、多様体 M は、ある物理系のヒルベルト空間における特定の部分空間であり、 M に存在する状態 $\gamma(t)$ の挙動を幾何学的に捉えるための場であるというイメージをする。

埋め込まれた区間 $[0, t]$ は、 M 内において幾何学的な曲線 $\gamma(t)$ として視覚化される。これが曲線となる理由は、 M が位相空間であることと前述の「 M 上の関数」の微分可能性が関わるのだが、一般的に多様体が満たすべき性質として滑らかであること: 任意の領域で連続的で可微分であることが要請されるためである。直感的には、この曲線 $\gamma(t)$ は物理的状态が t の変化に沿って動く軌道を意味し、本章の文脈においては t は時間に相当する。なお、後の文脈上の都合と視覚的な分かりやすさの重視により、図 23 において曲線 $\gamma(t)$ は M の表面にあるように書いているが、一般的には M の内部を含めた全域を状態は動き得る。

ここで、具体かつ単純な例として図 24 のような、3次元ユークリッド空間上の単位球における2次元球面を、多様体として捉えた状況を考察する。即ち $M = \{(x_1, x_2, x_3); x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1\}$ であり、状態代数である位置ベクトル \vec{r} は球面上に束縛されている。一般的に、多様体は具体的な座標系に依らない抽象的空間概念であるが、抽象概念は具体化した概念を内包するため、依然として多様体として見ることができる。 $T_p M$ は M 上の点 p に接する平面であり、接空間と呼ばれる。接空間 $T_p M$ には、点 p を通る M



$$\mathcal{M} = \{(x_1, x_2, x_3); x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1\}$$

図 24: 3次元ユークリッド空間上の2次元球面を多様体 \mathcal{M} とした具体例

上のあらゆる状態軌道の接ベクトルが属する。状態軌道曲線 $\vec{x}(t)$ の (点 p における) 接ベクトル \vec{v}_p は速度ベクトルである。

図 24 では 3次元ユークリッド空間上の質点の動きを単位球面に制限したことで 2次元球面の多様体 \mathcal{M} が形成されており、今対象とする物理系の挙動を議論するには \mathcal{M} のみを考えればよい。

図 25 には、点 p を含む局所領域に注目した上で、多様体 \mathcal{M} 上の関数 f の情報が示されている。 \mathcal{M} 上の任意の関数 f は、 \mathcal{M} の各点 \vec{x} を実数 \mathbb{R} に対応させる。

$$f: \vec{x}(t) \rightarrow f(\vec{x}(t)) = f(t) \quad (126)$$

点 p 周りに書き込まれた点線は、 $f(\vec{x}(t)) = c$ と同じ値を返す異なる点 \vec{x} をつないだ等高線であり、異なる点線は異なる値 $f(\vec{x}(t))$ に相当している。一般的に値 $f(\vec{x}(t))$ は連続的であるため、実際には各点線は離散的に並んでいるのではなく、滑らかな勾配となっている。この滑らかさは、前述した「 \mathcal{M} 上の関数」の微分可能性を示している。ここで、ベクトル $\text{grad } f_p$ は点 p における関数 f の勾配ベクトルを表している。 $\text{grad } f_p$ の大きさは多様体 \mathcal{M} 上を動いたときの $f(\vec{x})$ の変化の急さに相当し、方向は等高線と常に直交する。図 26 のように、勾配ベクトル $\text{grad } f_p$ は接空間 $T_p \mathcal{M}$ に属しており、内積 $\langle \text{grad } f, \vec{v} \rangle_p \in \mathbb{R}$ は (点 p における) 方向微分と呼ばれる。勾配ベクトル

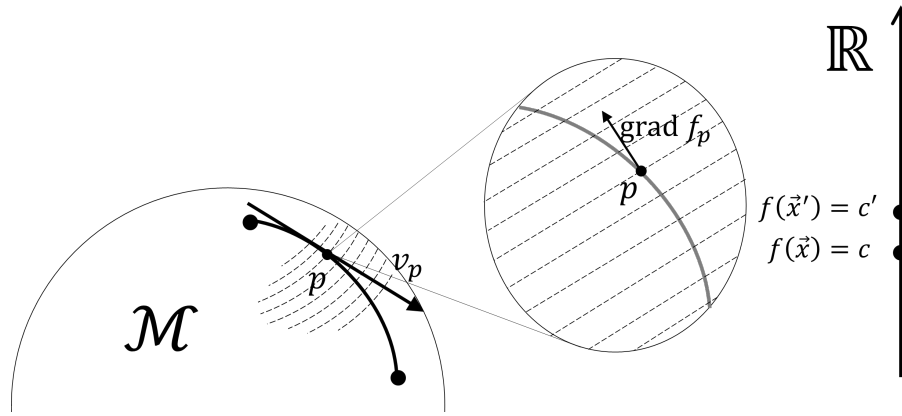


図 25: 多様体 M 上の関数 f と等高線, 勾配 $\text{grad} f$

ル $\text{grad} f_p$ は $\text{grad} f_p = df/d\vec{x} := (\partial f/\partial x_1, \partial f/\partial x_2, \partial f/\partial x_3)_p$ と書け, 接ベクトル \vec{v}_p は $\vec{v}_p = d\vec{x}/dt := (dx_1/dt, dx_2/dt, dx_3/dt)_p$ と書けることから, 内積 $\langle \text{grad} f, \vec{v} \rangle_p$ は

$$\langle \text{grad} f, \vec{v} \rangle_p = \frac{\partial f}{\partial x_1} \frac{dx_1}{dt} + \frac{\partial f}{\partial x_2} \frac{dx_2}{dt} + \frac{\partial f}{\partial x_3} \frac{dx_3}{dt} \quad (127)$$

より, f が変数 t に直接依存していない場合 ($\partial f/\partial t = 0$) の時間微分 df/dt に相当していることが分かる. 状態軌道の方が関数の等高線と平行である場合, 接ベクトル \vec{v} は常に勾配ベクトル $\text{grad} f$ と直交するため, 関数値 $f(\vec{v})$ は時間不変となる. また, 多様体 M が単位球面である状況は関数値 $c_0(\vec{v}) = \langle \vec{x}, \vec{x} \rangle_p = \|\vec{x}\| = 1$ の保存と同値であり, 勾配ベクトルは $\text{grad} c_0 = \vec{x}$ となるため, 時間不変である関数値の勾配ベクトルは接空間 $T_p M$ に属さない (直交している). さらに, ある関数値 $f(\vec{x})$ の保存も追加で課す場合, f の等高線と平行な曲線軌道に制限されることで接空間は 1 次元曲線となる. この 1 次元接空間に勾配ベクトル $\text{grad} f$ は属さない.

以上の 2 次元球面多様体 (S^2) の具体例から, 本章に関わる重要な性質として次のようなことが挙げられる.

- (i) 状態軌道の制限 (束縛条件) により非自明な多様体 M を形成できる.
- (ii) 多様体 M 上の滑らかな曲線を, 変数 t に対する状態軌道とみなせる.
- (iii) 軌道の接ベクトルと, 関数 f の勾配ベクトル $\text{grad} f$ の内積が関数値の時間微分に対応する.

ただし (iii) に関しては, 任意関数 f は一般的に, 多様体 M 外も含めたの 3 次元ユークリッド空間全体で定義され得ることに留意が必要である. 即ち, 勾配ベクトル $\text{grad} f = df/d\vec{x}$ は正確には図 27 のように, 接空間 $T_p M$ への射影ベクトル $\text{grad} f|_{T_p M}$ として認識される. 図 27 のような抽象的平面を超平面と呼ぶ. 保存する関数値の勾

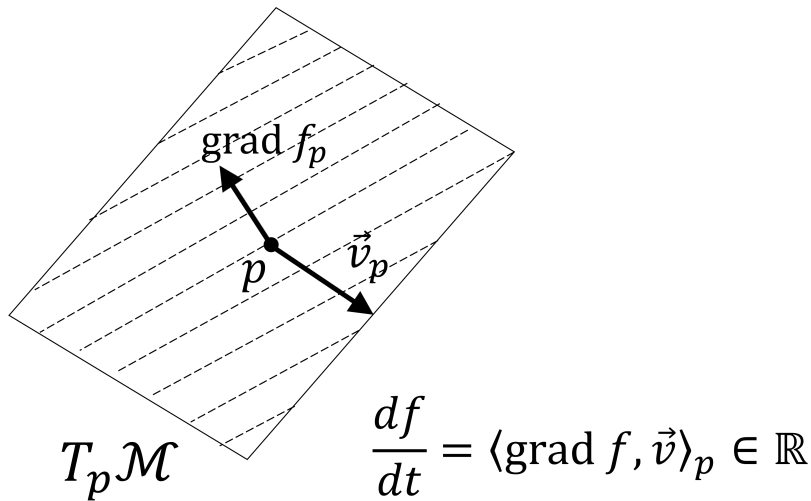


図 26: 接空間 $T_p M$ 上の接ベクトル \vec{v} と勾配ベクトル $\text{grad } f$

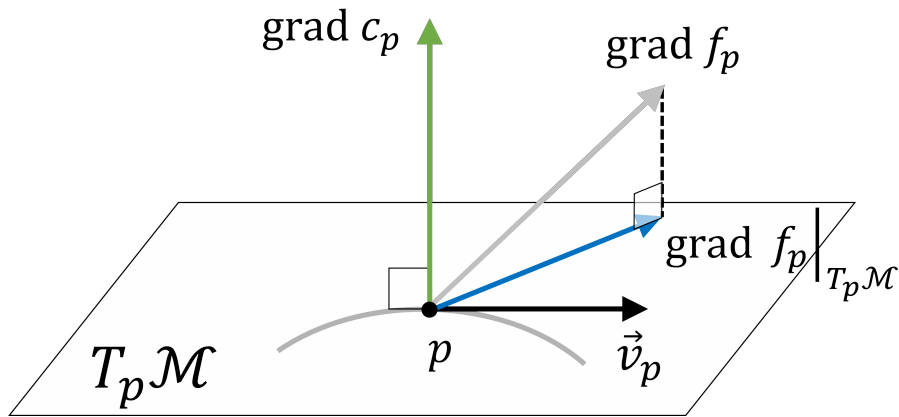


図 27: 保存関数値の超平面としての接空間 $T_p M$

配ベクトルは超平面 $T_p M$ と直交するため、超平面への射影は 0 ベクトルとなる。ここでは単純な具体例として 3 次元ユークリッド空間の単位球面というイメージのしやすい形を考えたが、任意の次元系に対して同様に定義が可能である。 $N + 1$ 次元ユークリッド空間上の単位球面を多様体 M とした場合、束縛条件を $\sum_{k=1}^N x_k^2 = 1$ とした N 次元単位球面多様体となる。

また前述したように、一般的に多様体は抽象的な空間概念である。従って具体的な座標系を指定する必要はなく、状態代数の物理的解釈も非自明である。上記の例では位置ベクトル x_k が状態代数であるが、 N 次元単位球面多様体は次のように確率空間として解釈ができる。 $p_k = x_k^2$ とすると、束縛条件 $\sum_{k=1}^N x_k^2 = \sum_{k=1}^N p_k = 1$ より確率正規化条件 (確率保存則) として解釈ができる。ただし $\sqrt{p_k} = x_k$ とした場合は $p_k \geq 0$ より球面の正の象限 $x_k \geq 0$ に制限される。このとき、内積を定義する計量はユークリッド計

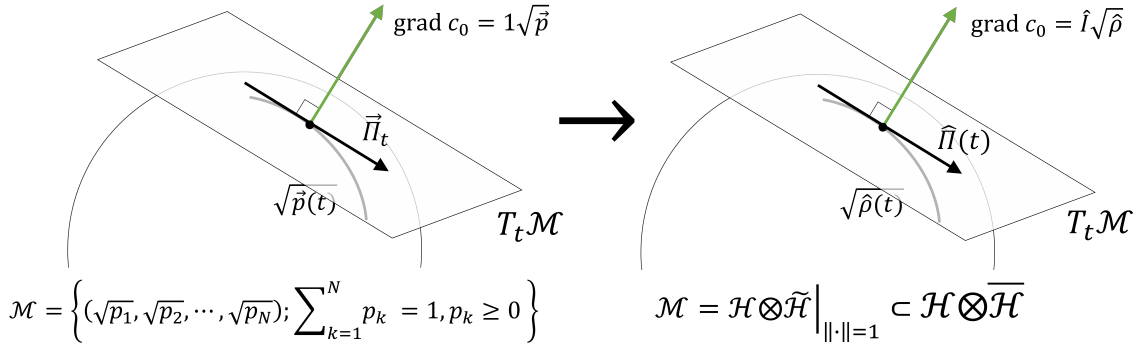


図 28: 状態代数を $\sqrt{\hat{\rho}}$ としたときの任意次元球面多様体 $\mathcal{M} = \mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}|_{\|\cdot\|=1}$. $\tilde{\mathcal{H}}$ は TFD におけるチルダ空間と同型.

量からフィッシャー情報計量へ変換される. 確率空間としての多様体 \mathcal{M} において, 関数値に相当するものは期待値 $\langle A \rangle = \sum_{k=1}^N p_k A_k \in \mathbb{R}$ となる. A は何らかの物理量代数である (物理量代数の量子的な非可換性を考慮するなら, 期待値が属する領域は複素数領域 $\langle A \rangle \in \mathbb{C}$ となる). 状態代数を確率の平方根ベクトル $\sqrt{\vec{p}} = (\sqrt{p_1}, \sqrt{p_2}, \dots, \sqrt{p_N})$ として表現すると, 期待値の勾配ベクトルは $\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \sqrt{\vec{p}}} = (\sqrt{p_1} A_1, \sqrt{p_2} A_2, \dots, \sqrt{p_N} A_N)$ と書け, 期待値は $\sqrt{\vec{p}}$ と勾配ベクトル $\text{grad } A = \frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \sqrt{\vec{p}}}$ の内積 $\langle \sqrt{\vec{p}}, \text{grad } A \rangle$ として記述される. \mathcal{M} における $\sqrt{\vec{p}}$ 軌道の接ベクトル $d\sqrt{\vec{p}}/dt := \vec{\Pi}$ は \mathcal{M} 上のある点における状態軌道の方向を示し, 方向微分を表す接空間における内積値 $\langle \sqrt{\vec{p}}, \text{grad } A|_{T_p \mathcal{M}} \rangle$ が期待値 $\langle A \rangle$ の時間変化に相当する. $\langle \sqrt{\vec{p}}, \text{grad } A|_{T_p \mathcal{M}} \rangle = 0$ となる物理量 A が保存量である [54].

ここで, 状態代数 $\sqrt{\hat{\rho}}$ の成分である確率値を $\sqrt{\hat{\rho}}$ の固有値とすることで, とした場合の表現は, 図 28 のように $\sqrt{\hat{\rho}}$ を状態代数とした幾何学的表現へ拡張できる. 球面上への束縛条件は $\|\sqrt{\hat{\rho}}\| = \sqrt{\text{Tr}(\sqrt{\hat{\rho}} \sqrt{\hat{\rho}}^\dagger)} = \sqrt{\text{Tr}(\hat{\rho})} = 1$ より, $\hat{\rho}$ の単位トレース性: $\langle \hat{I} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ に相当する. 勾配ベクトル $\text{grad } c_0$ は $\text{grad } c_0 = \frac{\delta \langle \hat{I} \rangle}{\delta \sqrt{\hat{\rho}}} = \frac{\delta(\sqrt{\hat{\rho}} \hat{I} \sqrt{\hat{\rho}})}{\delta |\sqrt{\hat{\rho}}|} = |\hat{I} \sqrt{\hat{\rho}} \rangle$ と書ける. ただし $(\sqrt{\hat{\rho}} \hat{I} \sqrt{\hat{\rho}})$ は式 (61) で定義した演算子内積である. また, $\hat{I} = \frac{d\sqrt{\hat{\rho}}}{dt}$ と任意の勾配ベクトル $\text{grad } A|_{T_p \mathcal{M}} = \hat{A} \sqrt{\hat{\rho}}$ との内積が, 式 (62b) より期待値 $\langle \hat{A} \rangle$ の時間発展を表す. 図 28 の単位球面多様体 \mathcal{M} は, 必要最低限の束縛条件として確率保存則を課した, 最も基礎的な状態確率空間となっている. 実際には, 物理系は他に任意の物理量を保存し得るため, 追加で幾つかの勾配ベクトル $\{\text{grad } \hat{c}_i\} = \{\hat{c}_i \sqrt{\hat{\rho}}\}$ ($i = 0, 1, \dots$) と直交する超平面 $T_p \mathcal{M}$ を想定すれば, 状態軌道が属するより一般的な多様体 \mathcal{M} が非自明に形成される. このように, 任意の保存量ベクトル $\{\text{grad } \hat{c}_i\}$ から形成される多様体 \mathcal{M} を, ここでは保存量不変多様体と呼ぶことにする (図 30). 第 4 章の図 4 において, 超平面が接している空間が正に保存量不変多様体 \mathcal{M} となっている.

図 28 の状態代数 $\sqrt{\hat{\rho}}$ の次元は、非対角項が独立な基底として現れるため記述する状態の次元 N よりも多くなるが、基底変換の自由度から固有状態 $\{|\phi_k\rangle\langle\phi_k|\}$ を基底に取ることで常に N 次元空間で表現ができる。

節 4.4 で幾何学的に記述された状態代数は $\sqrt{\hat{\rho}}$ ではなく、より一般的な非エルミート演算子 $\hat{\gamma}$ である。前節で詳述したように、この状態代数は $\hat{\gamma} = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{v}$ という構造から、ユニタリ演算子 \hat{v} による非自明性を含んでいる。 \hat{v} が自明 $\hat{v} = \hat{I}$ または $= \hat{B}$ である図 28 の描像は、限定された演算子空間 $\mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}_{\|\cdot\|=1}$ における TFD 状態ベクトルの状態軌道が属する多様体と同型である。ただし $\tilde{\mathcal{H}}$ はチルダ空間である。

\hat{v} が非自明であり、一般的に非可換 $[\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger, \hat{\gamma}^\dagger\hat{\gamma}] \neq 0$ である場合、確率保存則は

$$\|\hat{\gamma}\|^2 = \text{Tr}(\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger) \quad (128a)$$

$$= \sum_{i,j=1}^M |\gamma_{ij}|^2 \quad (128b)$$

$$= \sum_{i,j=1}^M \left(\text{Re}(\gamma_{ij})^2 + \text{Im}(\gamma_{ij})^2 \right) \quad (128c)$$

$$= \sqrt{\text{Tr}(\hat{\rho})} = 1 \quad (128d)$$

より、 $(2M^2 + 1)$ 次元単位球面上の軌道と見なせる。ヒルベルト空間 \mathcal{H} のエルミート共役空間を $\overline{\mathcal{H}}$ とすると、 $\hat{\gamma}$ はノルム 1 の空間 $\mathcal{H} \otimes \overline{\mathcal{H}}_{\|\cdot\|=1}$ の元である。

一方、外因代数 $|\Psi\rangle =$

$\sum_{i,j=1}^M \gamma_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$ は、規格化条件 $\sum_{i,j=1}^M |\gamma_{ij}|^2 = \sum_{i,j=1}^M \left(\text{Re}(\gamma_{ij})^2 + \text{Im}(\gamma_{ij})^2 \right) = 1$ により $\hat{\gamma}$ と同様に $(2M^2 + 1)$ 次元単位球面上の軌道と見なせる。状態代数 $|\Psi\rangle$ は、 $|i\rangle \in \mathcal{H}$, $|j\rangle \in \overline{\mathcal{H}}$ とすることで全体空間 $\mathcal{H} \otimes \overline{\mathcal{H}}_{\|\cdot\|=1}$ の元となる。即ち、内因代数 $\hat{\gamma}$ と外因代数 $|\Psi\rangle$ は、多様体 $M = \mathcal{H} \otimes \overline{\mathcal{H}}_{\|\cdot\|=1}$ 上において区別されない。幾何学的に抽象化すると、どちらの状態代数も同じ構造の多様体 M の元であり、その見かけ上の差異は元 $\{\gamma_{ij}\}$ を行列の成分として取るか、ベクトルの成分として取るかの違いである。この取り方の違いは物理的視点では外部系が存在するか否かという明確な差異を生じるが、幾何学的には依然として区別はつかず、共通して幾何ベクトル代数としての表現ができる (図 29)。内因代数 $\hat{\gamma}$ を幾何ベクトルとして扱う場合、図 4 のように $|\hat{\gamma}\rangle$ という表記が用いられる。これは式 (60) の演算子内積を取ることを前提とした表記である。

ヒルベルト空間の定義において重要なのは内積の構造であるが、状態代数 $\hat{\gamma}$, $|\Psi\rangle$

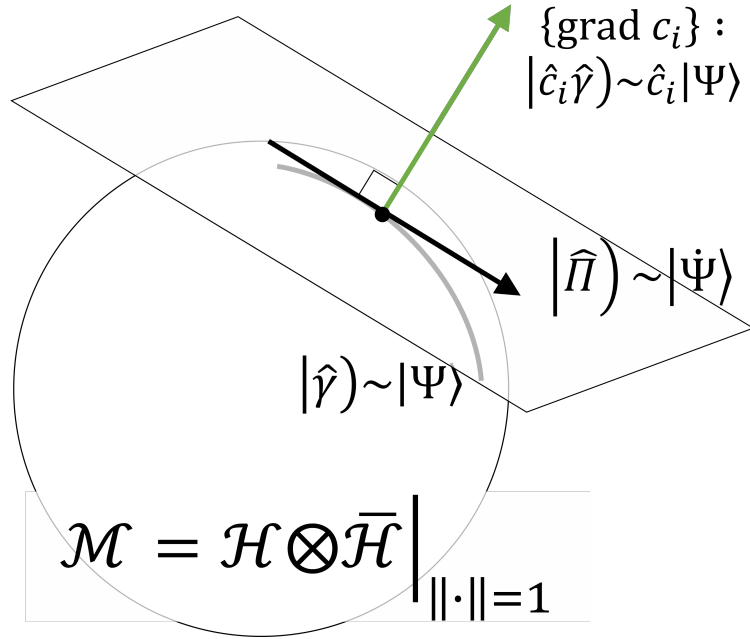


図 29: 単位球面多様体 $\mathcal{M} = \mathcal{H} \otimes \overline{\mathcal{H}}|_{\|\cdot\|=1}$ 上の状態代数 $\hat{\gamma} \sim |\Psi\rangle$ の同型性. $\overline{\mathcal{H}}$ は内因視点においては \mathcal{H} の双対空間, 外因視点においては外部系ヒルベルト空間.

には次のような共通の構造がある. \hat{A}, \hat{B} を \mathcal{H} 上の演算子として,

$$\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle = \langle \Psi | \hat{A}^\dagger \hat{B} \otimes \bar{I} | \Psi \rangle \quad (129a)$$

$$= \langle \hat{A}^\dagger \hat{B} \otimes \bar{I} \rangle \quad (129b)$$

のように内積 $\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle$ を定義できる. \bar{I} は $\overline{\mathcal{H}}$ 上の恒等演算子である. これはベクトル $\hat{A} \otimes \bar{I} | \Psi \rangle$ と $\hat{B} \otimes \bar{I} | \Psi \rangle$ の内積であり, 式 (129b) より演算子 $\hat{A}^\dagger \hat{B} \otimes \bar{I}$ の期待値に相当する. また, $|\Psi\rangle = \sum_{i,j=1}^M \gamma_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$ より,

$$\langle \hat{A}^\dagger \hat{B} \otimes \bar{I} \rangle = \sum_{i,i'}^M \langle i' | \hat{A}^\dagger \hat{B} | i \rangle \quad (130)$$

である. 一方, 内因代数 $\hat{\gamma}$ においては式 (60) の演算子内積が定義されているが,

$$\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle = (\hat{A} \hat{\gamma} \hat{B} \hat{\gamma}) \quad (131a)$$

$$= \text{Tr}(\hat{\gamma}^\dagger \hat{A}^\dagger \hat{B} \hat{\gamma}) \quad (131b)$$

$$= \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}^\dagger \hat{B}) \quad (131c)$$

$$= \langle \hat{A}^\dagger \hat{B} \rangle \quad (131d)$$

のように演算子内積を定義し直すと、式 (60) の内積は式 (131d) の実部に相当する。一般的に式 (131d) は Hilbert–Schmidt 内積と呼ばれる定義式であり、 \hat{A} 、 \hat{B} がともにエルミート演算子であるとき Hilbert–Schmidt 内積と式 (60) の演算子内積は一致する。式 (131d) はベクトル $|\hat{A}\hat{\gamma}\rangle$ と $|\hat{B}\hat{\gamma}\rangle$ の内積と見なせ、また $\hat{\gamma} = \sum_{i,j=1}^M \gamma_{ij} |i\rangle\langle j|$ を式 (131d) に代入すると、これは式 (130) の外因における内積と一致する。

ただし、演算子 $\hat{A} \otimes \bar{I}$ 及び $\hat{B} \otimes \bar{I}$ は \mathcal{H} 上にのみ有意に作用する局所演算子であり、外因的視点においては $\hat{A} \otimes \bar{B}$ のような大域的演算子が存在する。ベクトル $|\Psi\rangle$ と $\hat{A} \otimes \bar{B} |\Psi\rangle$ の内積は演算子 $\hat{A} \otimes \bar{B}$ の期待値に相当するが、次のように書き下される。

$$\langle \Psi | \hat{A} \otimes \bar{B} | \Psi \rangle = \sum_{i',j'=1}^M \gamma_{ij} \gamma_{i'j'}^* \langle i' | \hat{A} | i \rangle \langle j' | \bar{B} | j \rangle \quad (132)$$

ここで、内因代数との対応関係は $\hat{A} \otimes \bar{B} |\Psi\rangle \rightleftharpoons \hat{A}\hat{\gamma}\hat{B}^\dagger$ によって与えられ、この際の式 (131d) における内積は

$$(\hat{\gamma} | \hat{A}\hat{\gamma}\hat{B}^\dagger) = (\hat{\gamma} \hat{B} | \hat{A}\hat{\gamma}) \quad (133a)$$

$$= \text{Tr}(\hat{A}\hat{\gamma}\hat{B}^\dagger\hat{\gamma}^\dagger) \quad (133b)$$

$$= \sum_{i',j'=1}^M \gamma_{ij} \gamma_{i'j'}^* \langle i' | \hat{A} | i \rangle \langle j | \hat{B} | j' \rangle \quad (133c)$$

のように拡張される。式 (133c) は、対応関係 $\hat{A} \otimes \bar{B} |\Psi\rangle \rightleftharpoons \hat{A}\hat{\gamma}\hat{B}^\dagger$ から導かれる対応 $\langle j' | \bar{B} | j \rangle \rightleftharpoons \langle j | \hat{B} | j' \rangle$ によって一致する。このように、内因と外因の両代数はヒルベルト空間 $\mathcal{H} \otimes \bar{\mathcal{H}}$ において、適切な対応関係の下に同一視される。

以上の議論より、内因理論と外因理論を統一的に議論するための下地が構築された。即ち、内因理論が主張する「孤立した混合状態」における不足して見える情報の所在を、ユニタリー演算子 $\hat{\nu}$ の非自明性ないし $\hat{\nu}$ が作用した $\hat{\gamma} = \sum_{ij} \gamma_{ij} |i\rangle\langle j|$ の双対空間 $\langle j | \in \bar{\mathcal{H}}$ に対応させる形で、 $\hat{\gamma}$ と外因代数 $|\Psi\rangle$ を統一的に扱うことができる (同型性に関する数学的な議論は Appendix F 参照)。

次に議論すべきは、状態代数が多様体 \mathcal{M} 上を動く具体的な軌道、即ち時間発展である。多様体 \mathcal{M} 上の軌道を定める指標としては、状態空間上の最短経路を示す測地線という概念が存在する。多様体上の2点間を結ぶ最短の曲線であり、その計算は内積を取る際の計量の種類や、「最短」の解釈によって異なる。例えば、ユークリッド空間上の単位球面を多様体 \mathcal{M} とした場合、その測地線は、球の中心を通る超平面と球面の交線、即ち大円に相当する。しかし図 28 のように、多様体 \mathcal{M} 上の各点に確率値という解釈を付与した場合、単純な大円で結ばれる各確率値が最適な状態軌道となる

とは限らない。

第4章で詳述したように、SEAQTにおける最適な状態軌道は、 $\hat{\gamma}$ が属する M 上のあらゆる接空間に課される SEA 仮説から決定される。 M 上の各点にはエントロピー関数値 $s = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = \langle \hat{S} \rangle$ において、このエントロピー関係値の勾配が最も急な方向へ状態が動くように最適な経路を選ぶ。即ちエントロピー勾配ベクトル $\text{grad}s = |\hat{S}\hat{\gamma}\rangle$ と接ベクトル $|\hat{H}\rangle$ の内積が常に最大となるような方向であり、正に図4のように、接空間へ $|\hat{S}\hat{\gamma}\rangle$ を射影したベクトル (の定数 $1/2\tau$ 倍) を接ベクトルと設定する。この瞬間方向によって生じる M 上の軌道が、SEA 仮説の意味での測地線となるのである。

また、図30に示される通り、系が満たすべき保存則は確率保存則に限らず考慮され、その結果、形成される多様体 M は任意の保存量ベクトル集合 $\hat{C}_i\hat{\gamma}$ によって定義される保存量不変の多様体となる。これらの幾何学的概念を活用することで、量子緩和理論における内因性 (系内の自然なダイナミクスによる変化) と外因性 (外部からの影響による変化) を統一的に解釈することが可能になり、量子系のダイナミクスに関する幾何学的理解を深めることが期待される。この理論的枠組みの下では、状態の時間発展は特定の保存量不変多様体 M 上の軌道として捉えられ、具体的な軌道は測地線の「最適」経路をどのような視点や尺度から解釈するかによって異なる理論予測が存在すると考えられる。

状態の挙動を幾何学的により一般的に捉えた場合、内因理論である SEAQT は SEA 仮説に基づいて「最適」の尺度を明示的に定義しており、外因理論である Lindblad-QME は「最適」の尺度を明示的に定義せず、van Hove 極限による導出過程において暗黙的に設定されていると考えられる。

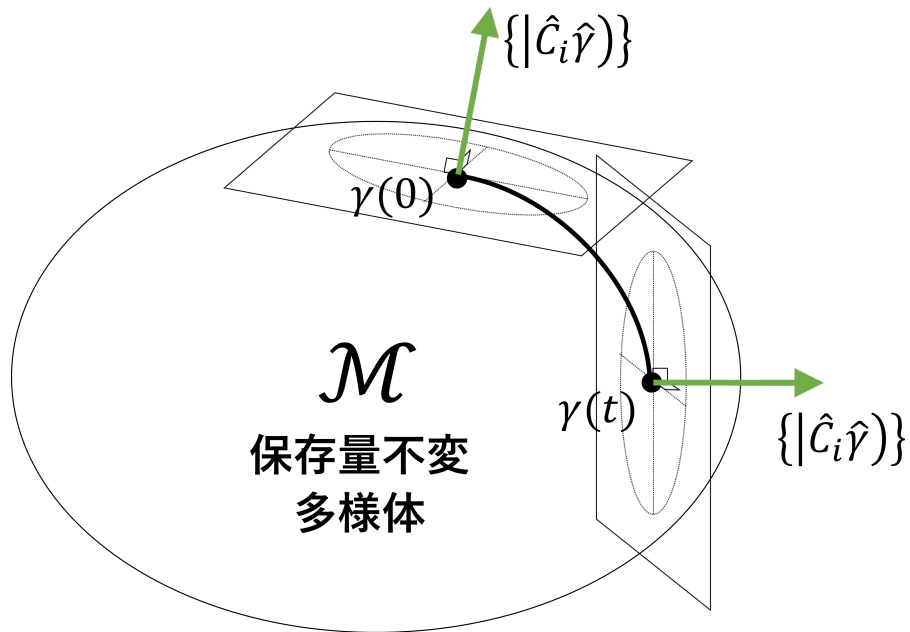


図 30: 保存量不変多様体

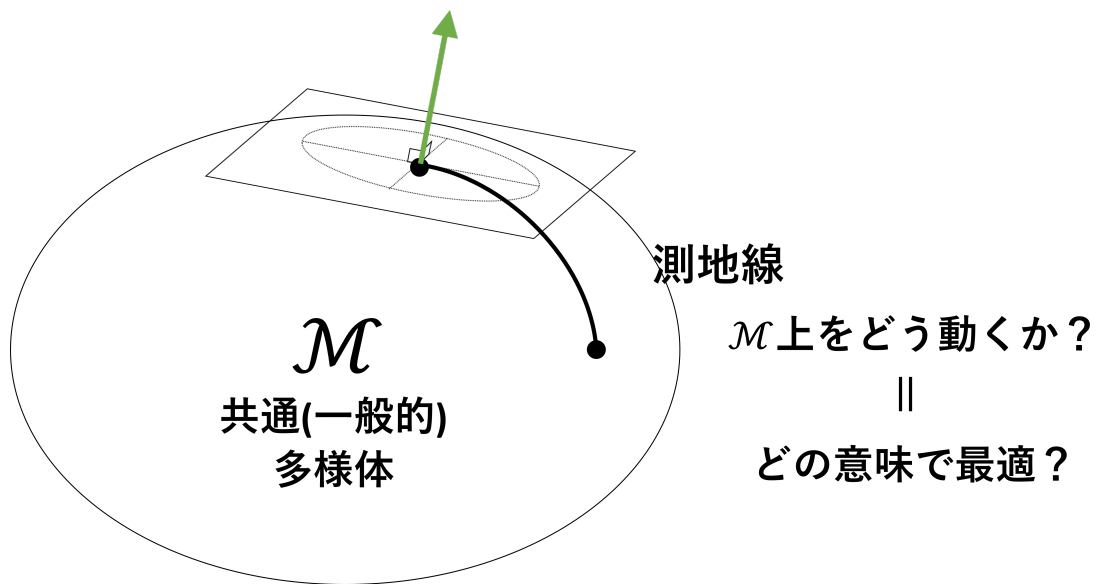


図 31: 保存量不変多様体の測地線

7.3 時間発展に関する統一的分析

7.3.1 可逆過程の統一的記述

$\hat{\gamma}$ と $|\Psi\rangle$ の同型性の下、時間発展における対応関係を考える。 $|\Psi\rangle$ は $\mathcal{H} \otimes \overline{\mathcal{H}}$ に属する一般的状态ベクトルであるが、 \mathcal{H} , $\overline{\mathcal{H}}$ 間に相互作用がない場合、

$$\frac{d|\Psi\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (\hat{H} \otimes \bar{I} + \hat{I} \otimes \overline{H}) |\Psi\rangle \quad (134)$$

という、自由ハミルトニアン $\hat{H} \otimes \bar{I} + \hat{I} \otimes \overline{H}$ による Schrödinger 方程式が考えられる。始めに、式 (134) に対応する $\hat{\gamma}$ の運動方程式の概形と、 $\hat{\rho}$ の運動方程式との対応や整合性、そして $\hat{\gamma}$ 自体の構造への影響に関して議論する。

$\hat{\gamma} \rightleftharpoons |\Psi\rangle$ 及び対応関係 $\langle \overline{\phi}_k | \rightarrow \otimes | \overline{\phi}_k \rangle$ から、直ちに次のような方程式が導かれる。

$$\frac{d\hat{\gamma}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\gamma} + \hat{\gamma}\overline{H}) \quad (135)$$

式 (135) を基に、 $\hat{\rho} = \hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger$ より $\hat{\rho}$ の時間発展方程式を求めると、

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{d\hat{\gamma}}{dt} \hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma} \frac{d\hat{\gamma}^\dagger}{dt} \quad (136a)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\rho} + \hat{\gamma}\overline{H}\hat{\gamma}^\dagger) + \frac{i}{\hbar} (\hat{\rho}\hat{H} + \hat{\gamma}\overline{H}\hat{\gamma}^\dagger) \quad (136b)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (136c)$$

となり、 $\hat{\rho}$ に関する可逆なユニタリーダイナミクスに一致する。式 (136c) は $\hat{\rho}$ の固有値 p_k を時間不変に保つため、von Neumann エントロピー $s = -k_B \sum_k^N p_k \ln p_k$ もまた時間不変である。これは非相互作用の運動方程式 (135) が $\hat{\rho}$ の固有値を変えないことに整合する。

式 (136c) を見ると、 $\hat{\rho}$ の視点からは非自明である演算子 \overline{H} の寄与がないことが分かる。一般的状态ベクトル $|\Psi\rangle$ の視点から見ると、 \overline{H} は外部系ヒルベルト空間 $\overline{\mathcal{H}}$ 上の自由ハミルトニアンに相当している。ここで、 $|\Psi\rangle \langle \Psi|$ を対象系の自由度で部分縮約することで外部系密度演算子を求めると、 $\overline{\rho} = \sum_k^N p_k |\overline{\phi}_k\rangle \langle \overline{\phi}_k|$ と書ける。また、 $\hat{\gamma}^\dagger \hat{\gamma} = \hat{\nu}^\dagger \hat{\rho} \hat{\nu} = \sum_k^N p_k |\overline{\phi}_k\rangle \langle \overline{\phi}_k|$ より、 $\hat{\gamma}^\dagger \hat{\gamma}$ は外部系密度演算子 $\overline{\rho}$ と一致し、さらに $\hat{\rho}$ を非自明なユニタリー演算子 $\hat{\nu}$ でユニタリ変換したものに相当することが分かる。即ち、 $\hat{\nu}$ の非自明性が外部系 (一般的状态ベクトルの視点) の任意性を保証している。また、

$\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger = \hat{\rho}$ と同様に $\hat{\gamma}^\dagger\hat{\gamma} = \bar{\rho}$ の時間発展を式 (135) から計算すると,

$$\frac{d\bar{\rho}}{dt} = \frac{d\hat{\gamma}^\dagger}{dt}\hat{\gamma} + \hat{\gamma}^\dagger\frac{d\hat{\gamma}}{dt} \quad (137a)$$

$$= \frac{i}{\hbar}(\bar{H}\bar{\rho} + \hat{\gamma}^\dagger\hat{H}\hat{\gamma}) - \frac{i}{\hbar}(\hat{\gamma}^\dagger\hat{H}\hat{\gamma} + \bar{\rho}\bar{H}) \quad (137b)$$

$$= \frac{i}{\hbar}[\bar{H}, \bar{\rho}] \quad (137c)$$

となる. 対応関係 $\langle\phi_k| \rightarrow \otimes|\bar{\phi}_k\rangle$ から, 式 (137c) は外部系の視点において $\langle\bar{\phi}_k|\bar{H} \rightarrow \hat{I} \otimes \bar{H}|\bar{\phi}_k\rangle$ という置換により, 外部系のユニタリ-時間発展として正しい形 $d\bar{\rho}/dt = -(i/\hbar)[\bar{H}, \bar{\rho}]$ となる. また, ユニタリ変換 $\bar{\rho} = \hat{v}^\dagger\hat{\rho}\hat{v}$ より

$$\hat{v}\frac{d\bar{\rho}}{dt}\hat{v}^\dagger = \frac{i}{\hbar}[\hat{v}\bar{H}\hat{v}^\dagger, \hat{\rho}] \quad (138)$$

と書くことができる. ここで非自明なユニタリ-演算子 \hat{v} の時間依存性を考える. $\hat{v} = \exp(i\hat{\theta})$ として \hat{v} の時間微分を計算すると, 一般的に

$$\frac{d\hat{v}}{dt} = i \int_0^1 d\lambda \exp(i(1-\lambda)\hat{\theta}) \frac{d\hat{\theta}}{dt} \exp(i\lambda\hat{\theta}) \quad (139a)$$

$$= i \int_0^1 d\lambda \exp(i(1-\lambda)\hat{\theta}) \frac{d\hat{\theta}}{dt} \exp(-i(1-\lambda)\hat{\theta}) \exp(i\hat{\theta}) \quad (139b)$$

$$= i\hat{Q}\hat{v} \quad (139c)$$

と書ける. \hat{Q} は $\hat{Q} = \int_0^1 d\lambda \exp(i(1-\lambda)\hat{\theta}) \frac{d\hat{\theta}}{dt} \exp(-i(1-\lambda)\hat{\theta})$ であり, 基本的に $\hat{Q}^\dagger = \hat{Q}$ である. 式 (139a)-(139c) の計算は, $\hat{\gamma}$ の性質等と関係のない, 一般に $[d\hat{\theta}/dt, \hat{\theta}] \neq 0$ である任意のユニタリ-演算子 $\hat{v} = \exp(i\hat{\theta})$ に対して成り立つ表式である. また同様に, \hat{v}^\dagger について

$$\frac{d\hat{v}^\dagger}{dt} = -i \int_0^1 d\lambda \exp(-i(1-\lambda)\hat{\theta}) \frac{d\hat{\theta}}{dt} \exp(-i\lambda\hat{\theta}) \quad (140a)$$

$$= -i \exp(-i\hat{\theta}) \int_0^1 d\lambda \exp(i\lambda\hat{\theta}) \frac{d\hat{\theta}}{dt} \exp(-i\lambda\hat{\theta}) \quad (140b)$$

$$= -i\hat{v}^\dagger \int_1^0 (-d\lambda) \exp(i(1-\lambda)\hat{\theta}) \frac{d\hat{\theta}}{dt} \exp(-i(1-\lambda)\hat{\theta}) \quad (140c)$$

$$= -i\hat{v}^\dagger \int_0^1 d\lambda \exp(i(1-\lambda)\hat{\theta}) \frac{d\hat{\theta}}{dt} \exp(-i(1-\lambda)\hat{\theta}) \quad (140d)$$

$$= -i\hat{v}^\dagger\hat{Q} \quad (140e)$$

と書ける．以上から $\bar{\rho} = \hat{v}^\dagger \hat{\rho} \hat{v}$ の時間微分を計算すると

$$\frac{d\bar{\rho}}{dt} = -i\hat{v}^\dagger \hat{Q} \hat{\rho} \hat{v} + \hat{v}^\dagger \frac{d\hat{\rho}}{dt} \hat{v} + i\hat{v}^\dagger \hat{\rho} \hat{Q} \hat{v} \quad (141)$$

となり，左から \hat{v} ，右から \hat{v}^\dagger を作用させると

$$\hat{v} \frac{d\bar{\rho}}{dt} \hat{v}^\dagger = \frac{d\hat{\rho}}{dt} - i\hat{Q} \hat{\rho} + i\hat{\rho} \hat{Q} \quad (142)$$

と書け，式 (138) と比較すると

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{v} \bar{H} \hat{v}^\dagger - \hbar \hat{Q}, \hat{\rho}] \quad (143)$$

となるため，式 (135) のユニタリーダイナミクスにおいて $\hat{H} = \hat{v} \bar{H} \hat{v}^\dagger - \hbar \hat{Q}$ が成り立つ．エネルギー期待値を計算すると

$$\langle \hat{H} \rangle = \text{Tr}(\hat{H} \hat{\rho}) \quad (144a)$$

$$= \text{Tr}((\hat{v} \bar{H} \hat{v}^\dagger - \hbar \hat{Q}) \hat{\rho}) \quad (144b)$$

$$= \text{Tr}(\bar{H} \hat{v}^\dagger \hat{\rho} \hat{v}) - \hbar \text{Tr}(\hat{Q} \hat{\rho}) \quad (144c)$$

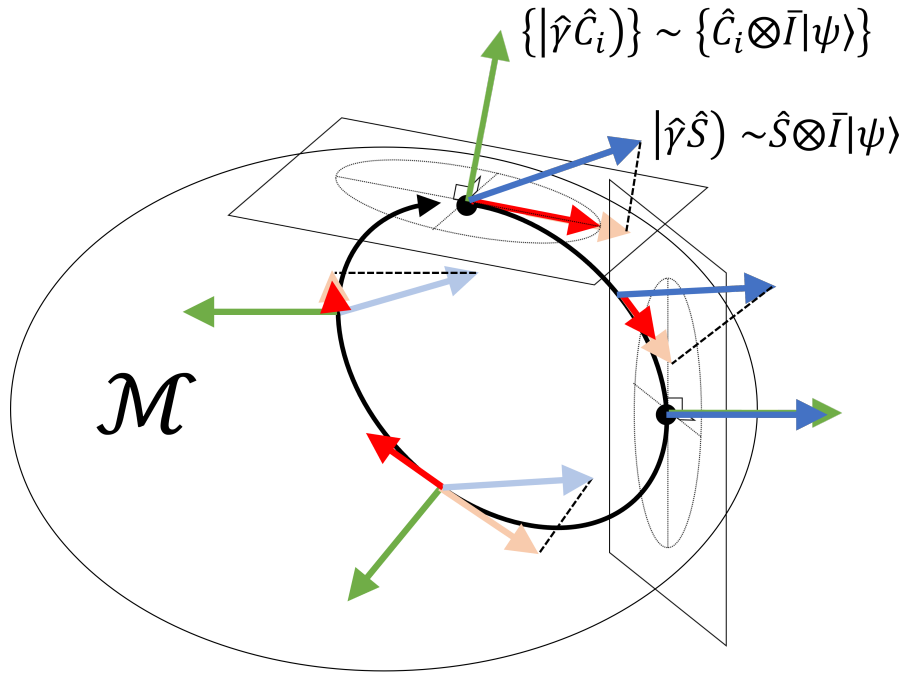
$$= \text{Tr}(\bar{H} \bar{\rho}) - \hbar \text{Tr}(\hat{Q} \hat{\rho}) \quad (144d)$$

となるため，式 (136c) 及び (137c) より，時間不変 $\langle \hat{H} \rangle = \text{Tr}(\hat{H} \hat{\rho}) = \text{const.}$ ， $\langle \bar{H} \rangle = \text{Tr}(\bar{H} \bar{\rho}) = \text{const.}$ であるから， \hat{Q} の期待値も時間不変 $\text{Tr}(\hat{Q} \hat{\rho}) = \text{const.}$ である．式 (145) から，対象系と $|\Psi\rangle$ の視点で見た) 外部系のエネルギー期待値に時間不変な非対称性があることが分かる．

最後に， $|\Psi\rangle$ の視点において，ヒルベルト空間 \mathcal{H} と $\bar{\mathcal{H}}$ の間に任意の相互作用がある場合，即ち

$$\frac{d|\Psi\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left(\hat{H} \otimes \bar{I} + \hat{I} \otimes \bar{H} + \sum_{l,m} \hat{K}_l \otimes \bar{K}_m \right) |\Psi\rangle \quad (145)$$

の場合の $\hat{\gamma}$ と $|\Psi\rangle$ の対応関係を議論する． \hat{K}_l ， \bar{K}_m は任意のエルミート演算子であり， $|\Psi\rangle$ の視点における相互作用ハミルトニアンを担う．式 (145) は，全体状態ベクトル $|\Psi\rangle$ としてはユニタリー時間発展であるが，相互作用により対象系の時間発展は非ユニタリーな可逆過程となる．従って，対象系密度演算子 $\hat{\rho}$ の固有値 p_k は時間変化し， p_k のみに依存するエントロピー s も同様に变化するが，任意時間の経過後に必ず初期値に回帰する周期的な可逆過程を示す (図 32)．これは全体系がユニタリーに時間発展することから自明に分かる帰結である．



可逆過程

図 32: 保存量不変多様体上の可逆過程

式 (145) に対応する，内因代数 $\hat{\gamma}$ の式は， $\hat{K}_l \otimes \bar{K}_m |\Psi\rangle \Leftrightarrow \hat{K}_l \hat{\gamma} \hat{K}_m^\dagger$ の対応関係より

$$\frac{d\hat{\gamma}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \left(\hat{H}\hat{\gamma} + \hat{\gamma}\bar{H} + \sum_{l,m} \hat{K}_l \hat{\gamma} \hat{K}_m^\dagger \right) \quad (146)$$

と書ける．式 (146) 及び $\hat{\rho} = \hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger$ より $\hat{\rho}$ の時間発展方程式を求めると，

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{i}{\hbar} \sum_{l,m} (\hat{K}_l \hat{\gamma} \hat{K}_m^\dagger \hat{\gamma}^\dagger - h.c.) \quad (147)$$

のように書ける．式 (147) の右辺第二項が， $\hat{\rho}$ の固有値 p_k 及びエントロピー s を周期的に変化させる．このように形式的にはあるが，内因・外因両理論の状態代数の時間変化を統一的に記述することができる．

ここで注目すべきは，式 (145) および式 (146) で記述される状態代数の非ユニタリーな可逆過程から不可逆過程がどのように生じるかという点である．外因理論ではこのメカニズムが具体化されている．第3章で述べたように，外部系を自由度無限の熱浴系として van Hove 極限を適用することにより，数学的に厳密な導出過程を通じ

て対象系の不可逆過程を記述することが可能である (Lindblad-QME). しかしながら, Lindblad-QME によって記述される不可逆過程は Markov 的であり, 環境との強結合や非平衡状態における非 Markov 的な不可逆過程を数学的に厳密な導出過程から記述する方法や, 画一的な現象論は, 外因理論にはまだ存在しない.

一方で, 内因理論, すなわち SEAQT は非平衡領域における非 Markov 的な不可逆過程を自然に記述する理論である. 従って, 内因・外因両理論において状態代数の構造および可逆過程を統一的に扱えるとしても, 外因理論における van Hove 極限のような粗視化手法とその内因的対応物から SEAQT が再現されることはない. したがって, 不可逆性の具体的な発現過程を具体的かつ統一的に記述することは, 依然として困難な課題である.

しかし, 不可逆性の具体的な発現過程を検討する前の段階として, 不可逆性が生じる原因とその発現に関する抽象的な解釈を両理論において統一的に記述できる可能性があり, この展望について次章で詳述する.

7.4 超準空間 $*\mathcal{H}$ における可逆性

これまで, 本論文では外因性と内因性の構造に関して様々な議論が行われた.

外因理論では環境系と対象系の相互作用が重要となるが, 熱浴としての環境系は一般に観測されないという状況が設定される (図 1(b)). これは無限自由度を持つ熱浴環境を我々が直接観測することが不可能なためである. 対象系のみ焦点を当てた場合は系の情報が不足して見えるが, これは外部環境が情報を持つことにより, このような対象系の状態は混合状態と呼ばれる. 環境を含めた全体系を観測できれば情報は補完されるが, 熱浴環境の大きさがこれを不可能にする. これによって理論に非自明性が必然的に生じ, van Hove 極限や Born-Markov 近似といった粗視化操作を介して環境の無限性が反映され, 対象系のダイナミクスは不可逆的に記述される. 数学的に厳密な粗視化操作は第 3 章にて詳述された van Hove 極限が知られており, この極限操作により生じる運動方程式が Lindblad-QME である. 外因理論の定式化を簡単にまとめる. van Hove 極限では, λ というパラメータが環境との相互作用の強さを表す実数として導入され, 全体系の時間発展から対象系の運動を抽出する. 最後に $\tau = \lambda^2 t$ という時間スケール変換の下 $\lambda \rightarrow 0$ の極限操作: 時間の粗視化が実行され, これにより運動方程式に散逸項が現れる. 外因理論では, 外部環境系が観測されないことに起因する非自明性が, 対象系が不可逆となる原因となる. この手法は相互作用が弱い状況で現実とよく一致するが, 問題点としては環境と強く相互作用する場合には適用できない.

次に内因理論、即ち IQT(具体的には SEAQT) では、外部系との相関がなくとも対象系が不可逆に散逸する理論である。これは物理の基本原理レベルでの不可逆な時間発展を前提としており、ミクロの世界でも物質が自発的に散逸し、エントロピーが増加すると仮定する。概念的な根幹を深く考えると、この理論では、物理系を観測する際には何か見えない情報が存在し、これが散逸の原因となる。この潜在的な非自明性が理論の前提となっている。つまり内因理論では、見ている系の情報を完全に知ることができない(図 1(a))。外因理論ではこの原因が外部系を見ない(見えない)ことにあるが、IQT では非自明性が内在していると考えられる。これにより、孤立系であっても混合状態であるという、基本原理レベルで不可逆となる。外因は環境との相関で非自明性が生じるが、内因は系自体に非自明性がある。

内因・外因の双方に共通する物理世界に対する理念は、観測される系には必ず見えない情報が存在するということである。両理論におけるこの見えない非自明性の対応関係を具体化し包括的に捉えることができれば、より一般的な対応構造の下、統一的な理論解釈ができる。そのためには、外因理論における熱浴の無限性を俯瞰できるような視点が必要であると考えられ、そのために用いる数学的道具として、本研究では超準解析 [92–94] の導入を提案する。

7.4.1 超準空間 ${}^*\mathcal{H}$ における van Hove 極限の解釈

超準解析は数学理論であり、通常は極限操作でしか扱えない無限大や無限小を、四則演算ができる代数体として使用できるように標準数学を拡張したものである [92–94]。超準解析の詳細な定義や直感的説明は Appendix E にて詳述するが、ここでの理解としては、我々が見ている標準空間における任意の実数 $x \in \mathbb{R}$ の周囲に、無数の無限小近傍点(モナド): $x \sim x \pm \epsilon$ が存在し、超実数体 ${}^*\mathbb{R}$ の元となっている。 ϵ は無限小超実数であり、 $1/\epsilon$ は無限大超実数である。この描像では $2\epsilon, 3\epsilon, \dots$ や $2/\epsilon, 3/\epsilon, \dots$ といった数やこれら同士の四則演算を考えることができ、各々の数を区別できる。標準体 \mathbb{R} を超準体 ${}^*\mathbb{R}$ に拡大する操作を超準化写像 $\mathbb{R} \xrightarrow{*} {}^*\mathbb{R}$ と呼び、逆に ${}^*\mathbb{R}$ の元を標準体 \mathbb{R} に射影する操作を標準化写像 $st(x \pm \epsilon) = x$ と呼ぶ。標準空間においては、任意の無限小超実数は全て 0 と同一視され、任意の無限大超実数は全て ∞ となる。ただし標準体 \mathbb{R} には ∞ は含まれないため、 ${}^*\mathbb{R}$ 全体を標準化した像は一般に $\mathbb{R} \cup \{\infty\}$ となる。

この議論は超準複素数体 ${}^*\mathbb{C}$ や超準空間 ${}^*\mathcal{H}$ に対して自然に拡張でき、 ${}^*\mathcal{H}$ に関しては、元であるベクトルの内積、ノルム、距離、そして空間の次元において超準数が現れる²。標準空間における無限次元ヒルベルト空間は、超準空間における * -有限空

²ただし、内積、ノルム、距離を超準化した拡張空間 ${}^*\mathcal{H}$ は、「ヒルベルト空間」が満たすべき完備性を必

間(無限大自然数 $*N$ 次元)として解釈される. このような次元の俯瞰性が, 外因理論における熱浴系を可視化して議論するための基礎となる. 外因理論における環境の非自明性は, その無限に起因しているため拡張された超準空間では熱浴を捉えることができる. 重要な超準解析的操作は標準化であり, これは超準空間での計算を標準空間に写すものである. これにより, van Hove 極限操作が標準化写像として表現される.

外因理論を超準空間で見ると, Lindblad-QME の導出過程が再解釈される. van Hove 極限の核にあたる式 (38a) を超準解析的に解釈すると, 次のような単純な計算が可能となる.

$$\int_0^{\tau/*\lambda^2} dT \exp(-i(\omega - \omega_0)T) = \int_0^{*\tau} dT \exp(-i(\omega - \omega_0)T) \quad (148a)$$

$$= \frac{i}{\omega - \omega_0} [\exp(-i(\omega - \omega_0)T)]_0^{*\tau} \quad (148b)$$

$$= \frac{\sin((\omega - \omega_0)*\tau)}{\omega - \omega_0} + i \frac{\cos((\omega - \omega_0)*\tau) - 1}{\omega - \omega_0} \quad (148c)$$

ただし $*\tau$ は無限大超実数, $*\lambda$ は無限小超実数であり, $*\tau = \tau/*\lambda^2$ ($*\tau, *\lambda \in *\mathbb{R}$) である. 式 (148c) において散逸項にかかるのは \sin の項であるが, この項は *sinc* 関数になっていることが分かる. 単純に考えれば, 標準化写像によって $*\tau \rightarrow \infty$ とするとデルタ関数 $\delta(\omega - \omega_0)$ が現れ, 第3章の式変形と合流する(ただし $\omega - \omega_0$ の大きさを考慮する必要があるが, ここでは議論しない).

ここで, 超準空間における式 (148c) は周期関数であるため, 超準空間に視点を留める限り, 計算される運動方程式は可逆過程となる(非ユニタリー). 図 33 はこの描像の概念図であるが, 超準空間における外因理論は, 無限大超実数 $*\tau$ のスケールを周期とした可逆過程と見做せる. 我々は標準空間に写された像のみを観測できるため, 標準空間では時間 ∞ で初期値に回帰する時間発展-即ち初期値へ決して回帰しない不可逆過程が自然に現れる.

標準的には見えない環境の自由度が $1/\lambda^2$ のスケールで表されるが, 標準化すると我々がいつも見る不可逆な方程式に見える. 超準空間では, 時間発展がそのままの形で記述されるため, 超準空間では系の時間発展が回帰的であるが, 標準化すると不可逆的に見える. これは回帰の周期が有限数/無限小であるためである. よって, 超準空間において環境の非自明性を可視化すると可逆なダイナミクスとなる.

研究の大枠としては, 非自明性の対応関係を超準空間で探求し, 両理論を統一的

ずしも満たさない. これは, 無限小や無限大のノルムを持つベクトルが存在するため, 任意の点列が収束するとは限らず, また収束してもその極限が空間内に存在するとは限らないためである. 従って「超準ヒルベルト空間」を議論したい場合は, $*\mathcal{H}$ のノルム上限を有界に制限 ($gal(*\mathcal{H})$) した上で, 全ての無限小以下 ($\|\cdot\| \leq \mu$) のノルムを同一視する同値類別空間を扱う必要がある: $gal(*\mathcal{H})/\mu$.

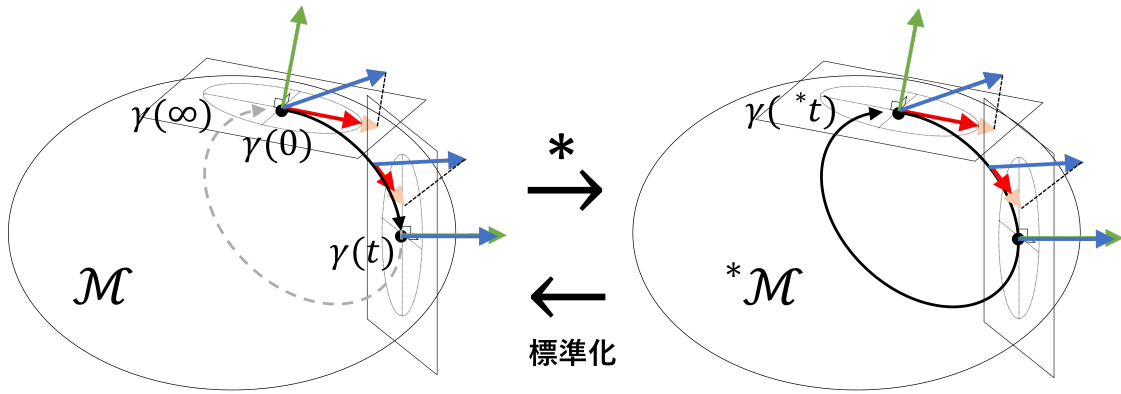


図 33: 超準空間における *-可逆過程

にまとめることが今後の展望である。統一的解釈において必要となるのは、標準化によって外因理論の散逸が現れるように、内因理論における無限性と適切な標準化を探求することである。これが発見されれば、両理論における不可逆性の発現過程を、各々の理論において無限小と見做すパラメータの選択と標準化写像にまとめることができ、超準空間において区別されない可逆過程として包括的に散逸緩和理論全体を整理することができる。

次節では、この研究の第一歩として、内因理論において無限性を自然に導入するための方法を提案する。

7.4.2 超準空間 ${}^*\mathcal{H}$ における基底ベクトル

本章の最後に、内因代数 $\hat{\gamma}$ と外因代数 $|\Psi\rangle$ のより一般的な対応関係を構築するため、超準空間における基底ベクトルの記述を導入する。

これまでの議論において、 $\hat{\gamma} = \sqrt{\hat{\rho}}\hat{\nu}$ と $|\Psi\rangle$ の間に存在する同型性は TFD における自由度倍加構造を引き継いだものであった。 $\hat{\gamma} = \sum_{i,j=1}^M \gamma_{ij} |i\rangle\langle j| \leftrightarrow \sum_{i,j=1}^M \gamma_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$ という対応関係により、両状態代数が幾何数学的に俯瞰した際に区別されない。TFD 状態ベクトルでは外部系がヒルダ空間に限定されるが、非自明なユニタリー演算子 $\hat{\nu}$ により、少なくとも同次元の対象系と外部系における両理論間の一般的な対応関係が構築されている。

この議論を、対象系と外部系の次元が異なる場合の記述を拡張する必要がある。成分 γ_{ij} を並べた行列 $\{\gamma_{ij}\}$ において、例えば対象系が N 次元で外部系が無次元の場合、行列 $\{\gamma_{ij}\}$ は $N \times \infty$ の非対称行列となる。この非対称性は、量子力学における演算子の線形性を満たさない。

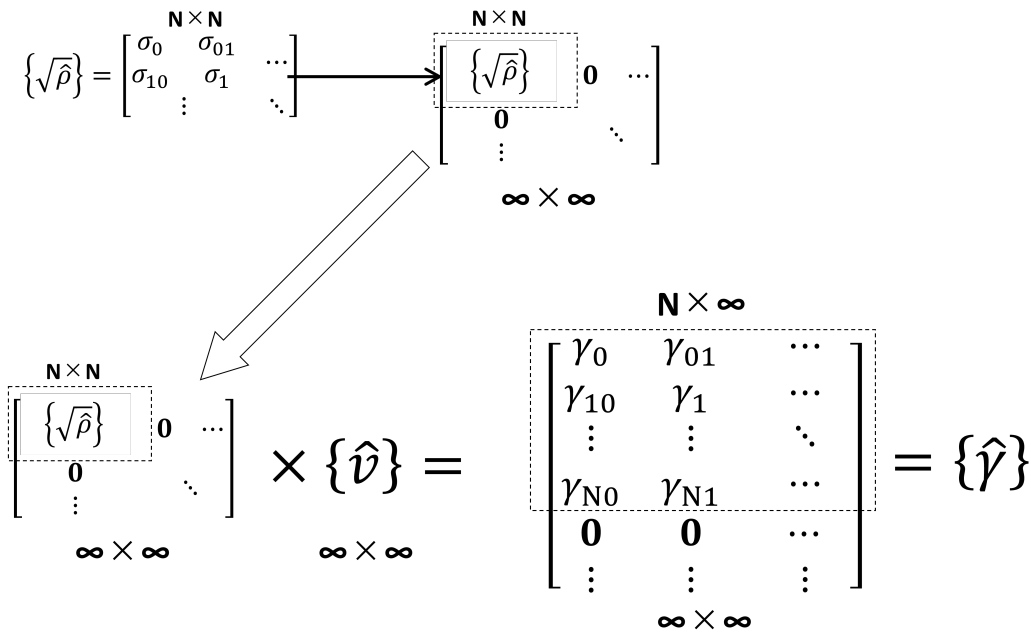


図 34: 拡大空間への対象系の埋め込み

しかし、この非対称行列を無限×無限の対称行列に埋め込むことで、上から \$N\$ 行目まで値を持つ対称行列となる。

このようにすれば、基底の数(次元)としては対称的な対象系と外部系から、問題なく \$\hat{\gamma} - |\Psi\rangle\$ 対応を構成できる。埋め込まれたことで対象系が存在する空間自体は拡大されるが、\$N \times N\$ の部分以外は全て \$0\$ としているため、少なくとも今考えている基底においては \$\hat{\rho} = \hat{\gamma}^\dagger \hat{\gamma}\$ によって再現される対象系は、拡大以前の対象系と変わらない。

ただし、このような埋め込み (embedding) は一般的に単射であり、拡大前の対象系 \$\sqrt{\hat{\rho}}\$ と拡大後の対象系は準同型であって同型でない。物理的に言うと、基底変換の自由度を考慮すれば、上から \$N\$ 行目までのみ値を持つ対称行列 \$\hat{\gamma}\$ は任意の異なる基底において \$N\$ 行以降も値を持つ可能性がある。従って、数学的な同型性を考慮するにあたって、任意の基底変換において対象系の構造を保つような仕組みが必要である。このために、超準空間における基底の \$*\$-同値性の概念を導入する。

標準空間において、任意のベクトル \$|i\rangle\$ と \$|j\rangle\$ が線形独立であるかどうかの定義式は次のように与えられる。

$$\|\exp(i\theta)|i\rangle - |j\rangle\| \neq 0. \tag{149}$$

式(149)は \$|i\rangle\$ と \$|j\rangle\$ の独立性を示しており、式(149)が \$0\$ であれば \$2\$ つのベクトルは異なる基底として計上されない。即ち式(149)を満たす異なるベクトルの組み合わせの

総数が、その系の基底の数となる。一方、標準空間において式 (149) が 0 である任意のベクトル $|i\rangle$ と $|j\rangle$ は、超準空間 ${}^*\mathcal{H}$ において次のように書くことができる: [92]

$$\|\exp(i^*\theta)|i\rangle - |j\rangle\| \sim 0 \quad (*\theta \in {}^*\mathbb{R}) \quad (150)$$

これは超準空間でのベクトル間の無限小の差異を示している。このような差異を持つベクトルの組み合わせは無限個存在し得るため、標準空間における基底数が有限 N 個であっても、超準空間においては無限個 (無限大自然数 *N) の基底を持つことができる。この非自明な基底は標準空間では見えずに、区別されず縮退する。即ち、標準化写像 st を適用すると、

$$st(\|\exp(i^*\theta)|i\rangle - |j\rangle\|) = 0 \quad (151)$$

のように無限小の差異は不可視となる。数学的には式 (150) の同値関係によって基底集合を同値類別することで、標準空間で区別可能な有限個の基底が現れる。この残った基底の数を有限 N 個とすることで、標準空間における対象系の構造を保ちながら、基底変換の任意性も考慮した上で、超準空間における $\hat{\gamma} - |\Psi\rangle$ 対応を再現できる。

このように、超準空間の導入によって、有限次元の対象系と無限次元の外部系、さらに拡張すれば無限自由度系の熱浴系を $\hat{\gamma} - |\Psi\rangle$ 対応に組み込むことが可能となる。この最も一般的な対応関係を基盤として、不可逆性の具体的発現過程や、内因理論構造の物理的解釈への展望が開かれる。

8 結論

本研究の主要な目的は、Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics (SEAQT) における実効面と概念面双方の問題を深く掘り下げて考察し、解決策を見出すことである。実効的面では、無限状態数系の相互作用ダイナミクスを SEAQT によって数値解析するための新たな定式化および近似手法を提案した。HE 近似の直交直和分解の構造を下地にして、密度演算子とハミルトニアンが非可換性を保持する一般的な場合に対する近似的状態構造を構築した。この新たな構造の効果を検証するために、具体的なモデル系にこれを適用し、その結果からモデルの複雑な相互作用ダイナミクスがどの程度適切に表現されるかを議論した。これにより、考察対象モデルにおいて、SEAQT の枠組み内で自発的な散逸プロセスがどのように発現しているかを明らかにした。

第5章では、CM state の導入とその有効性を検証することが主目的であった。この目的のため、TLS と動的な局所フォノン系との相互作用を含むモデル系に CM state を適用し、その数値解析を行った。この解析により、CM state が部分系間の相互作用を効果的に捉える能力を持ち、特に量子コヒーレンスの長寿命化という顕著な現象を明らかにすることに成功した。これは CM state が量子システムの複雑なダイナミクスを捉える上で有効なツールであることを示している。また、TLS の散逸緩和ダイナミクスの解析から、ポピュレーションの振幅が相互作用により変調される現象や、TLS とフォノン系間の相互作用が量子コヒーレンスにどのように影響を与えるか明らかとなった。これらの結果は、CM state が量子緩和理論において重要な役割を果たすことを示唆している。

第6章では、コヒーレントフォノン環境と同期した非共鳴 ET プロセスの SEA 緩和ダイナミクスを考察議論した。その結果、非共鳴 ET ダイナミクスとコヒーレントフォノンの散逸緩和ダイナミクスが、密接に関連しながら同期的に進行することが分かった。これは、TLS とフォノン系の相互作用が TLS の非共鳴 ET ダイナミクスに大きな影響を与え、量子コヒーレンスの存続時間を延長することを示している。このことは、フォノン系のコヒーレンスの制御に関する新たな知見を与え、量子デバイスの開発において重要な貢献をもたらすと考えられる。

以上の結果は、SEAQT の理論的枠組みを用いて実効的側面の問題に深く迫り、その解決に向けた新たな定式化および近似手法を開発したことを示している。これらの成果は、SEAQT 理論の実践的応用に新たな可能性をもたらし、理論と実践の橋渡しとしてのその重要性を強調している。また、これらの成果は、今後の研究方向性における重要な指針を提供し、量子デバイスの開発における新たなアプローチを開く可能

性を秘めている。

第7章では、幾何学空間上の状態軌道に着目し、SEQATと従来の熱浴緩和理論の数学的構造を詳しく分析した。本研究により、両理論における状態代数を同一視できることが明らかとなった。SEQAT理論の密度演算子 $\hat{\rho}$ の $\hat{\rho} = \hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger$ という形の分解において、非エルミート演算子 $\hat{\gamma}$ と外因理論の全体系の状態ケット $|\Psi\rangle$ が特異値分解を利用して同型であることが示され、この「 $\hat{\gamma}-|\Psi\rangle$ 対応」という新しい視点は、両理論の状態の構造の理解に役立つことが分かった。

最後に、超準解析を利用して、両理論のより一般的な対応構造を考察した。この考え方を基盤として、両理論における不可逆性の起源や、不可逆性の具体的な発現過程を議論していくことで、量子緩和理論としての統一的に解釈への新しい理解の道が開かれた。超準解析の援用により、より一層両理論の相違点や共通点、そしてその関連性について、深い理解が得られると考えられる。

今後の研究として、超準解析 (Appendix E) を活用した解釈の拡張が、両理論の更なる統一的な理論体系、具体的には、運動方程式に関連する散逸ダイナミクスの新統合理論となることが期待される。

総じて、本研究により、SEQATと熱浴緩和理論との関連性が明らかにされ、これらの理論の応用の可能性が拡がるとともに、この進展は、量子力学や物理学の分野の新しい展開が切り開かれる可能性を示唆している。

謝辞

この博士論文は、多くの方々のご支援と助言によって完成することができました。心から感謝の意を表します。まず、博士課程の3年間、ゼミでのディスカッションを通じて、多大な知識と刺激を与えてくださった先輩、同期、後輩の皆様に深く感謝いたします。皆様との議論は、この論文を形作る上で欠かせないものであり、私の研究に対する理解を深める貴重な機会でした。指導教員である石川陽先生には、研究の指針を示していただき、常に温かく、かつ厳しくご指導いただきました。先生の深い知識と経験、そして何よりも献身的なサポートに心から感謝申し上げます。また、退官された元指導教員の小林潔先生にも、研究の初期段階から今に至るまで貴重なアドバイスとサポートを頂き、感謝いたします。先生の教えから、私の研究の基盤を築くことができました。そして、学部から修士、博士課程を経て、満期退学し論文の執筆に至るまで、常に私を支え続けてくれた両親に、心より感謝しています。この論文を支えてくださったすべての方々に心からの感謝を致します。ありがとうございました。

参考文献

- [1] W. H. Zurek, “Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical,” *Rev. Mod. Phys.* **75**, 715 (2003).
- [2] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [3] C. Bennett and D. P. DiVicenzo, “Quantum information and computation,” *Nature* (London) **404**, 247 (2000).
- [4] L. Mandel and E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [5] H. J. Carmichael, *Statistical Methods in Quantum Optics I: Master Equations and Fokker-Planck Equations* (Springer, Berlin, 2002).
- [6] M. Gring, M. Kuhnert, T. Langen, T. Kitagawa, B. Rauer, M. Schreitl, I. Mazets, D. Adu Smith, E. Demler, and J. Schmiedmayer, “Relaxation and prethermalization in an isolated quantum system,” *Science* **337**, 1318 (2012).
- [7] S. Trotzky, Y. A. Chen, A. Fleisch, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, J. Eisert and I. Bloch, “Probing the relaxation towards equilibrium in an isolated strongly correlated one-dimensional Bose gas,” *Nature Phys.* **8**, 325 (2012).
- [8] E. Iyoda, K. Kaneko, and T. Sagawa, “Fluctuation theorem for many-body pure quantum states,” *Phys. Rev. Lett.* **119**, 100601 (2017).
- [9] 小嶋 泉, “エントロピー生成と van Hove limit(基研長期研究会「進化の力学への場の理論的アプローチ」報告, 研究会報告),” *物性研究* **51**, 50 (1988).
- [10] 小嶋 泉, 「量子場とミクロ・マクロ双対性」, 丸善出版 (2013).
- [11] 湯浅一哉, “Projection Operator Method for Irreversible Dynamics of Open Quantum Systems Revisited (Thermal Quantum Field Theories and Their Applications),” *素粒子論研究* **114**, C107 (2006).
- [12] A. E. Teretenkov, “Non-perturbative effects in corrections to quantum master equations arising in Bogolubov–van Hove limit,” *J. Phys. A* **54**, 265302 (2021).
- [13] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, Singapore, 1999).
- [14] H. P. Breuer and F. Petruccione, *Open Quantum Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2002).

- [15] H. P. Breuer, “Theory of Open Quantum Systems,” Isfahan-Freiburg Summer School on Quantum Science (2016).
- [16] H. P. Breuer, B. Kappler, and F. Petruccione, “Stochastic wave-function method for non-Markovian quantum master equations,” *Phys. Rev. A* **59**, 1633 (1999).
- [17] Y. Tanimura and R. Kubo, “Time evolution of a quantum system in contact with a nearly Gaussian-Markoffian noise bath,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 101 (1989).
- [18] C. R. Willis and R. H. Picard, “Time-dependent projection-operator approach to master equations for coupled systems,” *Phys. Rev. A* **9**, 1343 (1974).
- [19] O. Linden and V. May, “Application of the time-dependent projection operator technique: The nonlinear quantum master equation,” *Physica A* **254**, 411 (1998).
- [20] T. Koide, “Derivation of transport equations using the time-dependent projection operator method,” *Prog. Theor. Phys.* **107**, 525 (2002).
- [21] 久木田真吾, “特異摂動理論から見た量子開放系の摂動的手法,” (Doctoral dissertation, 名古屋大学).
- [22] 堀越篤史, “非摂動くりこみ群方程式における散逸効果,” *物性研究*, **77**, 821 (2002).
- [23] 江崎ひろみ, “物理における非マルコフ性と非マルコフ型マスター方程式の数値的解法について,” *東京工芸大学工学部紀要*, **41**, 59 (2018).
- [24] 宇佐見康二, 中村泰信, “共振器量子電気力学で強磁性体を制御する,” *日本物理学会誌*, **73**, 700 (2018).
- [25] M. Nakatani and T. Ogawa, “Quantum master equations for composite systems: Is Born–Markov approximation really valid?,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 084401 (2010).
- [26] P. Mansbach, and J. Keck, “Monte Carlo trajectory calculations of atomic excitation and ionization by thermal electrons,” *Phys. Rev.* **181**, 275 (1969).
- [27] R. G. DeVoe, and R. G. Brewer, “Observation of superradiant and subradiant spontaneous emission of two trapped ions,” *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2049 (1996).
- [28] A. Ishizaki and Y. Tanimura, “Quantum dynamics of system strongly coupled to low-temperature colored noise bath: Reduced hierarchy equations approach,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 3131 (2005).
- [29] C. H. Chou, T. Yu, and B. L. Hu, “Exact master equation and quantum decoherence of two coupled harmonic oscillators in a general environment,” *Phys. Rev. E* **77**, 011112 (2008).

- [30] D. Chruściński and A. Kossakowski, “From Markovian semigroup to non-Markovian quantum evolution,” *Europhys. Lett.* **97**, 20005 (2012).
- [31] S. T. E. F. A. N. O. Marcantoni, S. Alipour, F. A. B. I. O. Benatti, R. Floreanini, and A. T. Reza khani, “Entropy production and non-Markovian dynamical maps,” *Sci. Rep.* **7**, 12447 (2017).
- [32] V. E. Tarasov, “Quantum maps with memory from generalized Lindblad equation,” *Entropy* **23**, 544 (2021).
- [33] M. Kira, F. Jahnke, W. Hoyer, and S. W. Koch, “Quantum theory of spontaneous emission and coherent effects in semiconductor microstructures,” *Prog. Quantum Electron.* **23**, 189 (1999).
- [34] M. Kira and S. W. Koch, “Quantum-optical spectroscopy of semiconductors,” *Phys. Rev. A* **73**, 013813 (2006).
- [35] H. Umezawa, *Advanced Field Theory: Micro, Macro, and Thermal Physics* (AIP-Press, New York, 1995).
- [36] A. E. Feiguin and S. R. White, “Finite-temperature density matrix renormalization using an enlarged Hilbert space” *Phys. Rev. B* **72**, 220401 (2005).
- [37] H. Majima and A. Suzuki, “Dissipation and entropy production in open quantum systems” *J. Phys. Conf. Ser.* **258**, 012015 (2010).
- [38] Y. Hashizume and S. Masuo, “Understanding quantum entanglement by thermo field dynamics” *Physica A* **392**, 3518 (2013).
- [39] Y. Hashizume, S. Masuo and O. Soichiro, “A new perspective to formulate a dissipative thermo field dynamics” *Physica A* **419**, 506 (2013).
- [40] 今井良輔, “〈修士論文〉熱浴と接触する系に対する非平衡 Thermo Field Dynamics と射影演算子法” *物性研究・電子版* **4.2**, 1 (2015).
- [41] Y. Hashizume, M. Suzuki, T. Nakajima and S. Okamura, “Extended quantum distance on thermo-field dynamics and its applications” *Physica A* **522**, 1 (2019).
- [42] T. Suwa, A. Ishikawa, K. Uchiyama, T. Matsumoto, H. Hori, and K. Kobayashi, “Coherent-phonon-assisted excitation transfer via optical near fields in dilute magnetic semiconductor nanostructures,” *Appl. Phys. A* **115**, 39 (2014).
- [43] L. Jacak, P. Machnikowski, J. Krasnyj, and P. Zoller, “Coherent and incoherent phonon processes in artificial atoms,” *Eur. Phys. J. D.* **22**, 319 (2003).

- [44] T. Matsumoto, F. Iwasaki, S. Konaka, M. Hishikawa, S. Fukasawa, T. Muranaka, Y. Nabetani, A. Ishikawa, K. Uchiyama, K. Kobayashi, and H. Hori, “Energy relaxation process in exciton transfer between (Zn, Cd, Mn) Se and (Zn, Cd) Se quantum wells,” *Phys. Status Solidi C* **11**, 1244 (2014).
- [45] D. Prasai, A. R. Klots, A. K. M. Newaz, J. S. Niezgodna, J. N. Orfield, C. A. Escobar, A. Wynn, A. Efimov, G. K. Jennings, S. J. Rosenthal, and K. I. Bolotin, “Electrical control of near-field energy transfer between quantum dots and two-dimensional semiconductors,” *Nano Lett.* **15**, 4374 (2015).
- [46] Z. Li, B. Peng, M. L. Lin, Y. C. Leng, B. Zhang, C. Pang, P. H. Tan, B. Monserrat, and F. Chen, “Phonon-assisted electronic states modulation of few-layer PdSe₂ at terahertz frequencies,” *NPJ 2D Mater. Appl.* **5**, 87 (2021).
- [47] M. A. Antón, “Phonon-assisted entanglement between two quantum dots coupled to a plasmonic nanocavity,” *Opt. Commun.* **508**, 127811 (2022).
- [48] D. Adinehloo, W. Gao, A. Mojibpour, J. Kono, and V. Perebeinos, “Evidence for Phonon-Assisted Intertube Electronic Transport in an Armchair Carbon Nanotube Film,” *arXiv:2201.06693*.
- [49] A. Ishikawa, R. Okada, K. Uchiyama, H. Hori, and K. Kobayashi, “Quantum coherent dynamics enhanced by synchronization with nonequilibrium environments,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 054001 (2018).
- [50] K. Kobayashi and A. Ishikawa, “Quantum coherent nanodynamics by the interplay of localized photons, electron-hole pairs, and phonons,” *Prog. Quantum Electron.* **59**, 19 (2018).
- [51] G. P. Beretta, “Nonlinear model dynamics for closed-system, constrained, maximal-entropy-generation relaxation by energy redistribution,” *Phys. Rev. E* **73**, 026113 (2006).
- [52] G. P. Beretta, “Maximum entropy production rate in quantum thermodynamics,” *J. Phys. Conf. Ser.* **237**, 012004 (2010).
- [53] G. P. Beretta, “Steepest entropy ascent model for far-nonequilibrium thermodynamics: Unified implementation of the maximum entropy production principle,” *Phys. Rev. E* **90**, 042113 (2014).

- [54] G. P. Beretta, “ Essential equivalence of the general equation for the nonequilibrium reversible-irreversible coupling (GENERIC) and steepest-entropy-ascent models of dissipation for nonequilibrium thermodynamics, ” *Phys. Rev. E* **91**, 042138 (2015).
- [55] S. Cano-Andrade, G. P. Beretta, and M. R. von Spakovsky, “ Steepest-entropy-ascent quantum thermodynamic modeling of decoherence in two different microscopic composite systems, ” *Phys. Rev. A* **91**, 013848 (2015).
- [56] G. Li and M. R. von Spakovsky, “ Generalized thermodynamic relations for a system experiencing heat and mass diffusion in the far-from-equilibrium realm based on steepest entropy ascent, ” *Phys. Rev. E* **93**, 012137 (2016).
- [57] G. Li and M. R. von Spakovsky, “ Steepest-entropy-ascent quantum thermodynamic modeling of the relaxation process of isolated chemically reactive systems using density of states and the concept of hypoequilibrium state, ” *Phys. Rev. E* **94**, 032117 (2016).
- [58] G. Li and M. R. von Spakovsky, “ Steepest-entropy-ascent model of mesoscopic quantum systems far from equilibrium along with generalized thermodynamic definitions of measurement and reservoir, ” *Phys. Rev. E* **98**, 042113 (2018).
- [59] G. P. Beretta, “ The fourth law of thermodynamics: steepest entropy ascent, ” *Philos. Trans. Royal Soc. A* **378**, 20190168 (2020).
- [60] R. Yamada, M. R. von Spakovsky, and W. T. Reynolds Jr, “ Kinetic pathways of ordering and phase separation using classical solid state models within the steepest-entropy-ascent quantum thermodynamic framework, ” *Acta Mater.* **378**, 20190168 (2020).
- [61] J. A. Montañez-Barrera, C. E. Damian-Ascencio, M. R. von Spakovsky, and S. Cano-Andrade, “ Loss-of-entanglement prediction of a controlled-PHASE gate in the framework of steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics, ” *Phys. Rev. A* **101**, 052336 (2020).
- [62] J. A. Montañez-Barrera, M. R. von Spakovsky, C. E. D. Ascencio, and S. Cano-Andrade, “ Decoherence predictions in a superconducting quantum processor using the steepest-entropy-ascent quantum thermodynamics framework, ” *Phys. Rev. A* **106**, 032426 (2022).
- [63] R. K. Ray, “ Steepest entropy ascent solution for a continuous-time quantum walker, ” *Phys. Rev. E* **106**, 024115 (2022).

- [64] A. Montefusco, F. Consonni, and G. P. Beretta, “ Essential equivalence of the general equation for the nonequilibrium reversible-irreversible coupling (GENERIC) and steepest-entropy-ascent models of dissipation for nonequilibrium thermodynamics, ” *Phys. Rev. E* **91** 042138 (2015).
- [65] T. Morishita, K. Kobayashi, and A. Ishikawa, “ Quantum Nano-system Dynamics Based on the Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics, ” *J. Phys. Soc. Jpn.* **92**, 024001 (2023).
- [66] T. Morishita, K. Kobayashi, and A. Ishikawa, “ Relaxation dynamics of nonresonant excitation transfer processes assisted by coherent phonon environment, ” *Jpn. J. Appl. Phys.* **62** 102005 (2023).
- [67] G. N. Hatsopoulos and E. P. Gyftopoulos, “ A unified quantum theory of mechanics and thermodynamics. Part I. Postulates, ” *Found. Phys.* **6**, 15 (1976).
- [68] A. Grossmann, “ Homomorphisms and direct sums of nested Hilbert spaces, ” *Commun. Math. Phys.* **4**, 190 (1967).
- [69] A. Grossmann, “ Fields at a point, ” *Commun. Math. Phys.* **4**, 203 (1967).
- [70] B. M. Butanas Jr and R. C. F. Caballar, “ Coupled harmonic oscillator in a multimode harmonic oscillator bath: Derivation of quantum propagator and master equation using white noise analysis. ” arXiv preprint arXiv:1607.01906 (2016).
- [71] A. Kiely, “ Exact classical noise master equations: Applications and connections, ” *EPL* **134** 10001 (2021).
- [72] B. Reznik, “ Interaction with a pre and post selected environment and recoherence, ” arXiv preprint quant-ph/9501023 (1995).
- [73] B. Reznik, “ Unitary evolution between pure and mixed states, ” *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1192 (1996).
- [74] M. Grigorescu, “Decoherence and dissipation in quantum two-state systems,” *Physica A*, **256**, 149 (1998).
- [75] G. M. Moy, J. J. Hope, and C. M. Savage, “ Born and Markov approximations for atom lasers, ” *Phys. Rev. A* **59** 667 (1999).
- [76] H. P. Breuer, D. Faller, B. Kappler, and F. Petruccione, “ Non-Markovian dynamics in pulsed-and continuous-wave atom lasers, ” *Phys. Rev. A* **60** 3188 (1999).

- [77] C. J. Myatt, B. E. King, Q. A. Turchette, C. A. Sackett, D. Kielpinski, W. M. Itano, C. Monroe, and D. J. Wineland, “Decoherence of quantum superpositions through coupling to engineered reservoirs,” *Nature* **403**, 269 (2000).
- [78] T. C. Ralph, A. Gilchrist, G. J. Milburn, W. J. Munro, and S. Glancy, “Quantum computation with optical coherent states,” *Phys. Rev. A* **68**, 042319 (2003).
- [79] S. Suzuki, M. Takeoka, M. Sasaki, U. L. Andersen, and F. Kannari, “Practical purification scheme for decohered coherent-state superpositions via partial homodyne detection,” *Phys. Rev. A* **73**, 042304 (2006).
- [80] N. Sangouard, C. Simon, N. Gisin, J. Laurat, R. Tualle-Brouri, and P. Grangier, “Quantum repeaters with entangled coherent states,” *J. Opt. Soc. Am. B* **27**, A137 (2010).
- [81] M. Ohtsu and H. Hori, “Near-field nano-optics: from basic principles to nanofabrication and nano-photonics,” (Springer, Berlin, 1999).
- [82] T. Kawazoe, K. Kobayashi, J. Lim, Y. Narita, and M. Ohtsu, “Direct observation of optically forbidden energy transfer between CuCl quantum cubes via near-field optical spectroscopy,” *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067404 (2002).
- [83] S. Sangu, K. Kobayashi, A. Shojiguchi, and M. Ohtsu, “Logic and functional operations using a near-field optically coupled quantum-dot system,” *Phys. Rev. B* **69**, 115334 (2004).
- [84] Y. Tanaka and K. Kobayashi, “Optical near field dressed by localized and coherent phonons,” *J. Microsc.* **229**, 228 (2008).
- [85] T. Matsumoto, K. Ohmori, K. Kodama, M. Hishikawa, S. Fukasawa, F. Iwasaki, T. Muranaka, and Y. Nabetani, “Optical and Structural Properties of Zn–Cd–Mn–Se Double Quantum Well Systems,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **50**, 05FC13 (2011).
- [86] R. Okuyama, M. Eto, and T. Brandes, “Optical phonon lasing in semiconductor double quantum dots,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 013704 (2012).
- [87] R. Okuyama, M. Eto, and T. Brandes, “Lasing and antibunching of optical phonons in semiconductor double quantum dots,” *New J. Phys.* **15**, 083032 (2013).
- [88] K. G. Nakamura, K. Yokota, Y. Okuda, R. Kase, T. Kitashima, Y. Mishima, Y. Shikano, and Y. Kayanuma, “Ultrafast quantum-path interferometry revealing the generation process of coherent phonons,” *Phys. Rev. B* **99**, 180301 (2019).

- [89] I. Takagi, Y. Kayanuma, and K.G. Nakamura, “ Theory for coherent control of longitudinal optical phonons in GaAs using polarized optical pulses with relative phase locking, ” *Phys. Rev. B* **104**, 134301 (2021).
- [90] L. B. Ioffe, V. B. Geshkenbein, C. Helm, and G. Blatter, “ Decoherence in superconducting quantum bits by phonon radiation, ” *Phys. Rev. Lett.* **93**, 057001 (2004).
- [91] A. Bienfait, K. J. Satzinger, Y. P. Zhong, H. S. Chang, M. H. Chou, C. R. Conner, É. Dumur, J. Grebel, G. A. Peairs, R. G. Povey, and A. N. Cleland, “ Phonon-mediated quantum state transfer and remote qubit entanglement, ” *Science* **364**, 368 (2019).
- [92] 小林庸浩, “ 物理学と超準解析: 量子論と古典論の統一, ” *素粒子論研究* **89**, 211 (1994).
- [93] 小林庸浩, “ 物理学と超準解析 II: なぜ量子力学には観測問題があるのか, ” *素粒子論研究* **92**, 61 (1996).
- [94] 中村 徹, 「超準解析と物理学 (増補改訂版)」, 日本評論社 (2017).

本研究に関する発表

- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “量子熱力学に基づく量子ナノ系の散逸緩和理論,” 19p-PA7-4, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会, 名古屋国際会議場, (2018).
- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “量子熱力学に基づく量子ナノ系の散逸緩和理論 II,” 11p-PB1-15, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 東京工業大学, (2019).
- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “量子熱力学に基づく量子ナノ系の散逸緩和理論 III,” 19p-PA6-27, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会, 北海道大学, (2019).
- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “内因性量子熱力学に基づく量子ナノ系の散逸緩和理論,” 14p-B309-9, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会, 上智大学, (2020).
- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “無限状態数を持つ量子ナノ系における内因性量子熱力学”, 10p-Z17-19, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 (オンライン開催), (2020).
- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “量子熱力学に基づく量子ナノ系の散逸緩和理論,” 理研シンポジウム・iTEMMS 研究会「熱場の量子論とその応用」, 理化学研究所, (2018).
- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “Hypo-equilibrium state 近似を用いた量子熱力学による量子ナノ系の散逸緩和理論,” 基研研究会「熱場の量子論とその応用」京都大学基礎物理学研究所, (2019).
- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “内因性量子熱力学に基づく量子ナノ系の散逸緩和ダイナミクス”, KEK 理論センター研究会「熱場の量子論とその応用」, KEK 理論センター理化学研究所 (オンライン開催), (2020).
- 森下天平, 石川陽, 小林潔, “超平面から見た Lindblad 型マスター方程式の定性的評価,” 17pPSL-54, 日本物理学会第 77 回年次大会 (オンライン開催), (2022).
- T. Morishita, R. Okada, A. Ishikawa, and K. Kobayashi, “Synchronized nano-dynamics: quantum thermodynamics viewpoint,” The 15th International Conference on Near-Field Optics, Nanophotonics, and Related Techniques, Troyes, France, (2018).
- T. Morishita, K. Kobayashi, and A. Ishikawa, “Relaxation dynamics of non-resonant excitation transfer phenomena based on steepest-entropy-ascent ansatz”, The 13th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics, Hokkaido University, Sapporo, Japan, (2022).

付録

A 時間-エネルギーの不確定性関係と可逆項の導出

第3章において、 $\hat{H} = d\hat{\gamma}/dt$ を $\hat{H} = \hat{H}_H + \hat{H}_D$ と分解した際、 $\hat{H}_H = -i\hat{H}\hat{\gamma}/\hbar$ とすることで可逆項 $\hat{H}_H\hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma}\hat{H}_H^\dagger = -i[\hat{H}, \hat{\rho}]/\hbar$ を再現した。しかし、任意のスカラーを $c(\hat{\rho})$ とし $\hat{H}_H = -\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - c(\hat{\rho})\hat{I})\hat{\gamma}$ と書いたとしても、可逆項は変わらず再現される。即ち、一般的に \hat{H} には $c(\hat{\rho})\hat{I}$ の自由度が存在するが、エネルギー-時間の不確定性関係を課すことにより $c(\hat{\rho})$ の値が一意に定まることを説明する。一般に、

$$\hat{H}_H = -\frac{i}{\hbar}(\hat{H} - c(\hat{\rho})\hat{I})\hat{\gamma} \quad (152)$$

であれば、可逆項 $\hat{H}_H\hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma}\hat{H}_H^\dagger = -i[\hat{H}, \hat{\rho}]/\hbar$ は満たされる。ただし $c(\hat{\rho})$ は状態に依存する任意のスカラーである。まず、特性時間 (Characteristic times) と呼ばれる量 τ_{XH} を、次のように定義する [52]。任意の演算子 \hat{X} によって

$$\frac{1}{\tau_{XH}^2} = \frac{(d\langle\hat{X}\rangle/dt)^2}{\langle\Delta\hat{X}\Delta\hat{X}\rangle} \quad (153a)$$

$$= \frac{4(\hat{H}_H|\hat{X}\hat{\gamma})^2}{(\Delta\hat{X}\hat{\gamma}|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})} \quad (153b)$$

$$= \frac{4(\hat{H}_H|\{\hat{X} - \langle\hat{X}\rangle\hat{I}\hat{\gamma})^2}{(\Delta\hat{X}\hat{\gamma}|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})} = \frac{4(\hat{H}_H|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})^2}{(\Delta\hat{X}\hat{\gamma}|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})} \quad (153c)$$

$$= \frac{4(\hat{H}_H|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})^2}{(\Delta\hat{X}\hat{\gamma}|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})} = 4 \left(\hat{H}_H | \frac{\Delta\hat{X}\hat{\gamma}}{\sqrt{(\Delta\hat{X}\hat{\gamma}|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})}} \right)^2 \quad (153d)$$

と書く。ただし、式(153c), (153d)では $(\hat{H}_H|\hat{I}\hat{\gamma}) = 0$ となることを用いた。ここで、式(153d)におけるベクトル $|\Delta\hat{X}\hat{\gamma}\rangle / \sqrt{(\Delta\hat{X}\hat{\gamma}|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})}$ は $|\Delta\hat{X}\hat{\gamma}\rangle$ 方向の単位ベクトルであることから、 $\frac{1}{\tau_{XH}^2}$ の最大値 $\frac{1}{\tau_H^2}$ が次のように導ける。

$$\frac{1}{\tau_{XH}^2} = 4 \left(\hat{H}_H | \frac{\Delta\hat{X}\hat{\gamma}}{\sqrt{(\Delta\hat{X}\hat{\gamma}|\Delta\hat{X}\hat{\gamma})}} \right)^2 \leq 4 \left(\hat{H}_H | \frac{\hat{H}_H}{\sqrt{(\hat{H}_H|\hat{H}_H)}} \right)^2 \quad (154a)$$

$$= 4(\hat{H}_H|\hat{H}_H) = \frac{1}{\tau_H^2} \quad (154b)$$

式 (154a) は、単位ベクトル $|\Delta\hat{X}\hat{\gamma}\rangle / \sqrt{\langle\Delta\hat{X}\hat{\gamma}|\Delta\hat{X}\hat{\gamma}\rangle}$ の方向が $|\hat{\Pi}_H\rangle$ であるとき、演算子内積が最大となることを示している。式 (154b) に式 (165a) を代入すると、

$$\frac{1}{\tau_H^2} = 4\langle\hat{\Pi}_H|\hat{\Pi}_H\rangle \quad (155a)$$

$$= \frac{4}{\hbar^2} \langle(\hat{H} - c(\hat{\rho})\hat{I})\hat{\gamma} | (\hat{H} - c(\hat{\rho})\hat{I})\hat{\gamma}\rangle \quad (155b)$$

$$= \frac{4}{\hbar^2} \{ \langle\hat{H}\hat{\gamma}|\hat{H}\hat{\gamma}\rangle + c(\hat{\rho})^2 \langle\hat{\gamma}|\hat{\gamma}\rangle - 2c(\hat{\rho}) \langle\hat{\gamma}|\hat{H}\rangle \} \quad (155c)$$

$$= \frac{4}{\hbar^2} \{ \langle\hat{H}^2\rangle + c(\hat{\rho})^2 - 2c(\hat{\rho}) \langle\hat{H}\rangle \} \quad (155d)$$

$$= \frac{4}{\hbar^2} \langle\Delta\hat{H}\Delta\hat{H}\rangle + \frac{4}{\hbar^2} \{ c(\hat{\rho}) - \langle\hat{H}\rangle \}^2 \quad (155e)$$

と展開できる。ただし、式 (155e) は $\langle\Delta\hat{H}\Delta\hat{H}\rangle = \langle\hat{H}^2\rangle - \langle\hat{H}\rangle^2$ と書けることを用いて変形している。式 (155a)–(155e) から、次の等式が成り立つ。

$$\tau_H^2 \langle\Delta\hat{H}\Delta\hat{H}\rangle = \frac{\hbar^2}{4} - \{ c(\hat{\rho}) - \langle\hat{H}\rangle \} \tau_H^2 \quad (156)$$

ここで、時間とエネルギーの不確定性関係を次のように定義する [?].

$$\tau_H^2 \langle\Delta\hat{H}\Delta\hat{H}\rangle \leq \frac{\hbar^2}{4} \quad (157)$$

式、を見比べると、式の右辺第二項は 0 となることが要請され、 $\tau_H \neq 0$ として、このとき $c(\hat{\rho})$ は $c(\hat{\rho}) = \langle\hat{H}\rangle$ と定まることが分かる。従って、式に代入すると $\hat{\Pi}_H = \frac{-i\Delta\hat{H}\hat{\gamma}}{\hbar}$ という形が一意に導かれる。

B 2次ゆらぎ項の展開

式 (102c) における項 $\langle\Delta\hat{b}\Delta\hat{b}\rangle$ 及び $\langle\Delta\hat{b}^\dagger\Delta\hat{b}\rangle$ 、また式 (117c) における項 $\langle\Delta\hat{b}_l\Delta\hat{b}_l\rangle$ 及び $\langle\Delta\hat{b}_l^\dagger\Delta\hat{b}_l\rangle$ は物理量の 2 次ゆらぎであり、消滅演算子の 2 乗期待値 $\langle\hat{b}^2\rangle$ ($\langle\hat{b}_l^2\rangle$) に依存する。このような項が運動方程式に含まれる場合の従来的な解析方法としては、cluster expansion transactions を用いて、高次の物理量期待値を低次の量で近似するという手法が存在する。しかし、本研究において導入された、式 (95) 及び (114) の 2 分割 CM state 密度演算子を用いると、上記の 2 次ゆらぎ項は全て既存の変数 $\langle\hat{b}\rangle$ 、 $\langle\hat{b}^\dagger\rangle$ ($\text{Re}\langle\hat{b}\rangle$ 、 $\text{Im}\langle\hat{b}\rangle$)、 $\langle\hat{b}^\dagger\hat{b}\rangle$ にのみよって展開し、記述・計算できることを以下で示す。第 5 章の単一ボソン系の $\langle\Delta\hat{b}\Delta\hat{b}\rangle$ 及び $\langle\Delta\hat{b}^\dagger\Delta\hat{b}\rangle$ の場合について示せば、第 6 章の複数系 l の場合においても同様に示せるため、ここでは単一ボソン系の 2 次ゆらぎ項の展開に関し

て説明を行う。

まず、2次ゆらぎ項 $\langle \Delta \hat{b} \Delta \hat{b} \rangle$ 及び $\langle \Delta \hat{b}^\dagger \Delta \hat{b} \rangle$ は、

$$\langle \Delta \hat{b} \Delta \hat{b} \rangle = \langle \hat{b}^2 \rangle - \langle \hat{b} \rangle^2, \quad (158a)$$

$$\langle \Delta \hat{b}^\dagger \Delta \hat{b} \rangle = \langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle - \langle \hat{b} \rangle \langle \hat{b}^\dagger \rangle. \quad (158b)$$

のように展開することが可能である。よって、項 $\langle \Delta \hat{b}^\dagger \Delta \hat{b} \rangle$ が既存の変数によって記述できることは以上から分かる。

次に、式 (158a) に含まれる項 $\langle \hat{b}^2 \rangle$ の展開を考える。この項の実部及び虚部は、

$$\text{Re} \langle \hat{b}^2 \rangle = 2 \left\{ (\text{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 - (\text{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2 \right\} - \langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle \cos(\theta_0 + \theta_1), \quad (159a)$$

$$\text{Im} \langle \hat{b}^2 \rangle = 4 \text{Re} \langle \hat{b} \rangle \text{Im} \langle \hat{b} \rangle - \langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle \sin(\theta_0 + \theta_1). \quad (159b)$$

と書くことができる。更に、 $\sin \theta_0$, $\cos \theta_0$, $\sin \theta_1$, $\cos \theta_1$ は、 $\text{Re} \langle \hat{b} \rangle$, $\text{Im} \langle \hat{b} \rangle$, $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle$ を用いて、

$$\sin \theta_0 = \frac{\text{Im} \langle \hat{b} \rangle \sqrt{(\text{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\text{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2} + \text{Re} \langle \hat{b} \rangle \sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle - \{(\text{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\text{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2\}}}{\sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle \{(\text{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\text{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2\}}}, \quad (160a)$$

$$\cos \theta_0 = \frac{\text{Re} \langle \hat{b} \rangle \sqrt{(\text{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\text{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2} - \text{Im} \langle \hat{b} \rangle \sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle - \{(\text{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\text{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2\}}}{\sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle \{(\text{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\text{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2\}}}. \quad (160b)$$

及び

$$\sin \theta_1 = \frac{\operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle \sqrt{(\operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2} - \operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle \sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle - \{(\operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2\}}}{\sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle \{(\operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2\}}}, \quad (160c)$$

$$\cos \theta_1 = \frac{\operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle \sqrt{(\operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2} + \operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle \sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle - \{(\operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2\}}}{\sqrt{\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle \{(\operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle)^2 + (\operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle)^2\}}}. \quad (160d)$$

のように書くことが可能である。従って、式 (160a)-(160d) 及び三角関数の加法定理から、式 (159a) 及び (159b) は変数 $\operatorname{Re} \langle \hat{b} \rangle$, $\operatorname{Im} \langle \hat{b} \rangle$, $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle$ のみによって表現され、2次ゆらぎの項 $\langle \Delta \hat{b} \Delta \hat{b} \rangle$ はこれらの変数によって完全に記述することができる。即ち、式 (102c) および式 (117c) の運動方程式は、2分割 CM state において常に閉じた形式であることが分かる。

C 平均場近似を用いない定式化

本論文の第5章及び第6章では、相互作用ハミルトニアンに対して平均場近似を行った。そのために、本研究ではモデル系のインコヒーレントフォノンによる相互作用効果を議論することができなかつた。そこで、図35のモデル系のCM近似による解析を、平均場近似を用いずに行う方法によりインコヒーレントフォノン相互作用を記述する展望について議論する。次式は、平均場近似を用いるなどした場合にTLS-フォノン系が無相関の表式で書けるときの全体系密度演算子 $\hat{\rho}_{\text{tot}}$ の表式である。フォノン系を N 分割 CM state で書いたとき、

$$\hat{\rho}_{\text{tot}} = \left(\sum_{\mu, \nu=e, g} \sigma_{\mu\nu} |\mu\rangle \langle \nu| \right) \otimes \left(\bigoplus_{k=0}^{N-1} c_k |c_k\rangle \langle c_k| \right). \quad (161)$$

のように書ける。右辺は TLS とフォノン系の密度演算子のテンソル積であり、 $|g\rangle$ と $|e\rangle$ は TLS の基底状態と励起状態、 $\sigma_{\mu\nu}$ は TLS 密度行列の要素である。平均場近似を用いない形式に拡張するには、 $\hat{\rho}_{\text{tot}}$ を、 $\{|g\rangle|c_k\rangle, |e\rangle|c_k\rangle\}$ を基底として展開する。する

と、全体系の密度演算子は

$$\hat{\rho}_{\text{tot}} = \sum_{\mu, \nu=e, g} \sum_{k, k'=0}^{N-1} \rho_{\mu\nu}^{(kk')} |\mu\rangle \langle \nu| \otimes |c_k\rangle \langle c_{k'}|. \quad (162)$$

と書くことができる。 $\hat{\rho}_{\mu\nu}^{(kk')}$ は、 $2N$ 個の基底 $\{|g\rangle|c_k\rangle, |e\rangle|c_k\rangle\}$ に基づく $(2N \times 2N)$ 密度行列の成分である。有限個の変数 $\{\hat{\rho}_{\mu\nu}^{(kk')}\}, \{\alpha_k\}$ の時間発展を計算することにより、原理的には、本論文の第5章及び第6章で検討した変数に加えて $\langle \hat{b}^\dagger \otimes \hat{a} \rangle$ ($\langle \hat{a}^\dagger \otimes \hat{b} \rangle$), $\langle \hat{b} \otimes \hat{a} \rangle$ ($\langle \hat{b}^\dagger \otimes \hat{a}^\dagger \rangle$) が計算される。これらの変数を介して、インコヒーレントフォノンの影響も含めた TLS-フォノン系間の相互作用過程を扱うことが可能となる。更に、式(162)を対角化した表式を

$$\hat{\rho}_{\text{tot}} = \bigoplus_{l=0}^{2N-1} p_l |d_l\rangle \langle d_l| \quad (163)$$

と書いたとき、全体系のエントロピー演算子 $\hat{S} = -k_B \hat{B} \ln \hat{\rho}_{\text{tot}}$ と式(86a)から、SEAQTによる数値解析を行うことができる。より具体的かつ実用的な定式化は、今後の課題である。

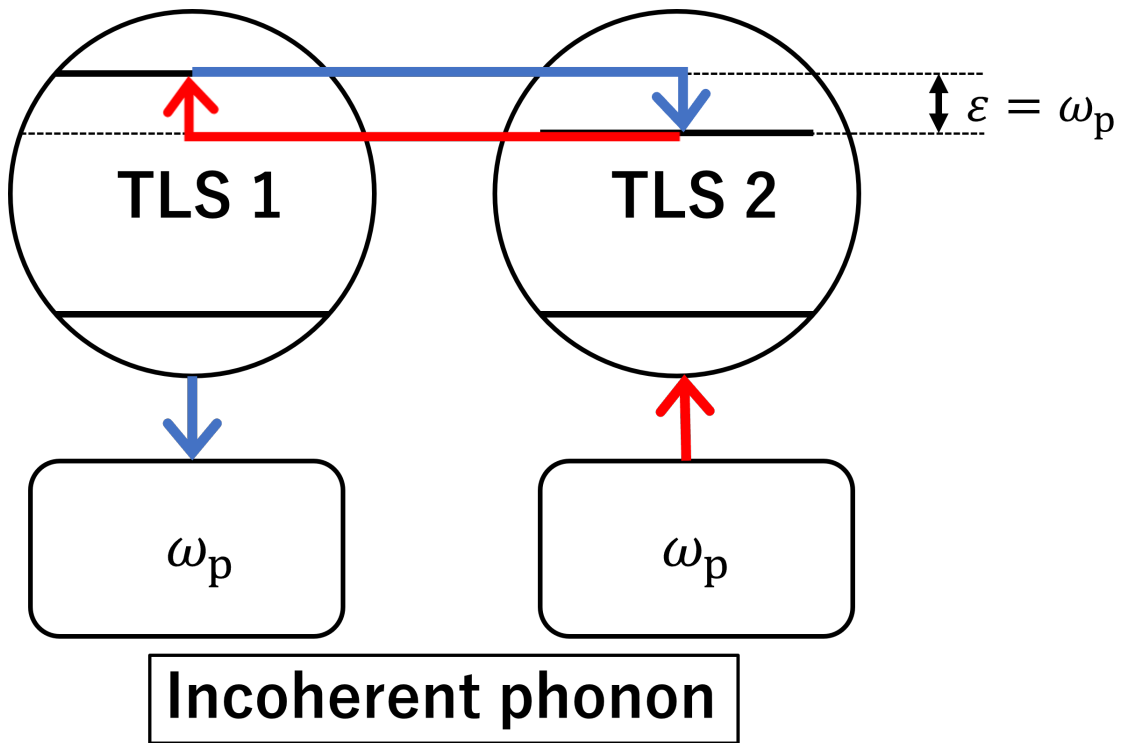


図 35: インコヒーレントフォノン支援効果による非共鳴 ET 増強メカニズムの概念図。2つの TLS 間のエネルギー差 ϵ と等しい固有エネルギーをフォック状態における各フォノン系のが持つ場合、2TLS 間の非共鳴 ET の際に放出/吸収されるエネルギー ϵ を各フォノン系が常に補填する形で、非共鳴 ET が増強される。

D 多様体の定義

定義

(D1) 位相空間

M は位相空間である。位相空間とは、開集合と呼ばれる特定の性質を持つ部分集合の族を通じて定義される空間であり、距離の概念を用いずに連続性を一般化したものである。この概念は、「近さ」や「連続性」を距離を明確に定義しなくても理解するための枠組みとして捉えることができる。

(D2) 地図帳と局所座標

n は自然数であり、添え字集合 Λ をもつ写像の族 $\mathcal{A} = \{\phi_\lambda : U_\lambda \rightarrow \mathbb{R}^n\}_{\lambda \in \Lambda}$ が考えられる。地図帳は、多様体の各部分を通常の平面や空間に「翻訳」するための地図の集まりである。これは、地球の地図を小さな地域ごとに切り分けて理解することに似ている。具体的には、この写像の族が位相空間 M の地図帳であるためには、以下の条件を満たす必要がある：

(a) $\{U_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ は M の開被覆であり、各 U_λ が M の開集合であり、それらの和集合が M 全体を形成する ($\bigcup_{\lambda \in \Lambda} U_\lambda = M$)。

(b) すべての $\lambda \in \Lambda$ に対して、 $\phi_\lambda : U_\lambda \rightarrow \phi_\lambda(U_\lambda) \subset \mathbb{R}^n$ は同相写像である。

(D3) 多様体

位相空間 M とその地図帳 \mathcal{A} の組 (M, \mathcal{A}) を多様体 (manifold) と呼ぶ。地図帳 \mathcal{A} は、 m 次元座標近傍の族 $S = \{(U_\lambda, \phi_\lambda) | \lambda \in \Lambda\}$ であり、 M 全体を覆う。多様体は、異なる形や大きさを持ちながらも、小さな部分では平ら (または通常の空間) と見なせる複雑な形状である。地球の表面を小さな平面の集合体として考えることに似ている。このような多様体が、任意の点に m 次元座標近傍を持つ場合、それは m 次元位相多様体である。

(D4) C^α 級多様体

$U_\lambda \cap U_\mu \neq \emptyset$ の場合、写像 $\Phi_{\lambda\mu} := \phi_\mu \circ \phi_\lambda^{-1} : \phi_\lambda(U_\lambda \cap U_\mu) \rightarrow \phi_\mu(U_\lambda \cap U_\mu)$ は同相写像である。この写像が全ての $\mu, \lambda \in \Lambda$ に対して C^α 級である場合、 M は C^α 級多様体

と呼ばれる。 C^α 級多様体は、地図帳の各地図間で滑らかな移行が可能であり、隣接する地域の地図が互いにうまくつながり、一貫した地球全体の地図を作ることができるような状況に似ている。特に C^0 級多様体は位相多様体であり、さらに座標変換が C^n 級関数である場合は C^n 級可微分多様体となる。

E 超実数の構築

第7章では、実数体の拡張である超実数を導入し、量子力学のダイナミクスと不可逆性に対する新たな解釈を提案した。実数の構築は、有理数の Cauchy 列による収束という概念に基づいて行われる。具体的には、任意の Cauchy 列 $\{a_n\}$ は一つの実数 $x \in \mathbb{R}$ に収束する。この収束のプロセスは、数学的厳密性を持ち、実数体の完備性を保証する [92–94]。

超準解析の概念は、実数体の拡張によって「無限大」や「無限小」といった概念を取り入れるものである。具体的には、超実数体 ${}^*\mathbb{R}$ は、実数の数列 $\mathbb{R}^{\mathbb{N}}$ と自由超フィルター \mathcal{F} による同値関係に基づいて形成される。超フィルター \mathcal{F} は、正式には自由超フィルターという概念であり、特定の性質を満たす部分集合の族である。まずフィルターとは、以下のように定義される [94]：

1. 空集合は \mathcal{F} の元ではない。
2. 任意の $A, B \in \mathcal{F}$ に対して、 $A \cap B \in \mathcal{F}$ 。
3. 任意の $A \in \mathcal{F}$ と任意の $A \subseteq B$ に対して、 $B \in \mathcal{F}$ 。

自由超フィルターは、さらに以下の2つの重要な性質を持つ：

4. 有限集合はフィルターに含まれない(自由フィルターとされる理由)。
5. 任意の集合 $A \subset \mathbb{N}$ に対して、 A かその補集合 $\mathbb{N} \setminus A$ のいずれか一方のみがフィルターに含まれる(超フィルターとされる理由)。

この性質により、無限集合とその補集合のどちらか一方だけがフィルターに含まれる。つまり、有限部分集合は自由超フィルターの要素にはないが、無限集合は常に含まれる可能性がある。超準解析では、実数体の拡張として超実数体を構築する。この構築においては、自由超フィルターによる同値関係が重要な役割を果たす。無限小や無限大を含む超実数は、実数の数列を超フィルターによって分類し、その同値類を定義す

ることにより構築される。

$${}^*\mathbb{R} = \mathbb{R}^{\mathbb{N}}/\mathcal{F} \quad (164)$$

この超フィルターは、無限小や無限大を扱う際の基準となる集合を提供する。たとえば、実数の数列が共通の超フィルターに属する場合、それらの数列は同値と見なされる。この方法により、超実数は実数よりも広い範囲の数を包括することができる。また、これらの条件はフィルターを測定器と考えると理解しやすくなる。空集合は何も測れないため測定器として機能しない(定義1)。また、ある量が一つのフィルターで測定できる場合、それを包含するすべてのフィルターでも測定できる(定義2)。さらに、全てのフィルターに共通する量こそ、我々が観測しようとしている量である(定義3)。超フィルターはフィルターの中でも極大なもので、 \mathbb{N} 上の任意の部分集合 A に対して、 A が超フィルターに含まれるか、またはその補集合 $\mathbb{N} \setminus A$ が含まれるかのいずれかである。超フィルターの重要な性質として、有限集合は含まれない。これは超フィルターが自由であることを意味する。超準解析では、超フィルターによる同値関係を用いて超準元を導出する。無限実数列にフィルターによる同値関係を課すことにより、実数空間を無限小や無限大を含む超実数空間へ拡張する。この同値関係は、フィルターによって見える部分が同じであれば「同じ」とするという概念に基づいている。逆に、フィルターで見えない部分に関しては、同じかどうかは問われない。

超実数体 ${}^*\mathbb{R}$ において、実数はその数列が常に同じ実数に等しいという特性を持つ数列として含まれる。一方で、「無限大」や「無限小」といった超実数は、実数では表現できない挙動を示す数列に基づいて構築される。例えば、自然数の数列は無限大に対応し、その逆数の数列は無限小に対応する。

また、超準解析ではモナド μ と呼ばれる無限小近傍が定義される。モナド μ は実数に対して定義され、実数と無限小の差の集合として表される。実数は常にこのモナド μ に囲まれて超実数空間に存在するが、我々には単一の実数としてしか観測されない。これらの概念により、超準解析は実数体では扱えなかった問題への新しいアプローチを提供する。無限小や無限大の選択によりモナド μ が異なるため、フィルターによってモナド μ が決定されると言える。従って、無限小や無限大の扱いによって異なる世界観が形成されることになる。この柔軟性が、物理学やその他の科学分野において超準解析を有用なツールとしている。

F $\hat{\gamma}$ と $|\Psi\rangle$ の同型性

ある対象同士が同型であるとは、集合論的には対象間の射が全単射であることをいう。集合 $A = \{a, b, c\}$, $B = \{1, 2, 3\}$ 間の全単射は図 36 のように、各々の要素が 1:1 である場合 A, B は同型と呼ぶ。 a, b, c は数字ではないため $A \neq B$ であるが、要素数のみ見たときに同じである。

TFD の自由度倍化における同型性は、状態代数 $\sqrt{\rho}, |\rho\rangle$ 間においては明確に 1:1 の関係が成り立っているが、両代数が属する空間同士の同型性においては、状態代数に任意の演算子が作用することで張られる空間の議論が必要となるため、倍化前と後における演算子の対応関係まで考慮する必要がある。具体的には、チルダ共役則と呼ばれる対応関係が演算子に課される。

$$(\hat{A}\hat{B})^{\sim} = \tilde{A}\tilde{B}, \quad (165a)$$

$$c^{\sim} = c^*, \quad (165b)$$

$$(\hat{A} + \hat{B})^{\sim} = \tilde{A} + \tilde{B}, \quad (165c)$$

$$(\tilde{A})^{\sim} = \hat{A}. \quad (165d)$$

ただし c は c 数であり、チルダ演算子は元の空間における右作用に相当する: $\sqrt{\rho}\hat{B} \leftrightarrow \tilde{B}|\rho\rangle$. 元のヒルベルト空間 \mathcal{H} 上の全ての演算子はチルダ共役によって $\tilde{\mathcal{H}}$ 上の作用素に 1:1 で写される。抽象代数的に、ヒルベルト空間は想定される物理量演算子に基づき構成される (Gel'fand-Naimark-Segal(GNS) 構成). 具体的には、任意のノルム 1 のベクトル (単位ベクトル) を基にして、想定する全ての演算子を単位ベクトルへ作用することにより張られる空間が、必要最低限のヒルベルト空間として最適に構成され

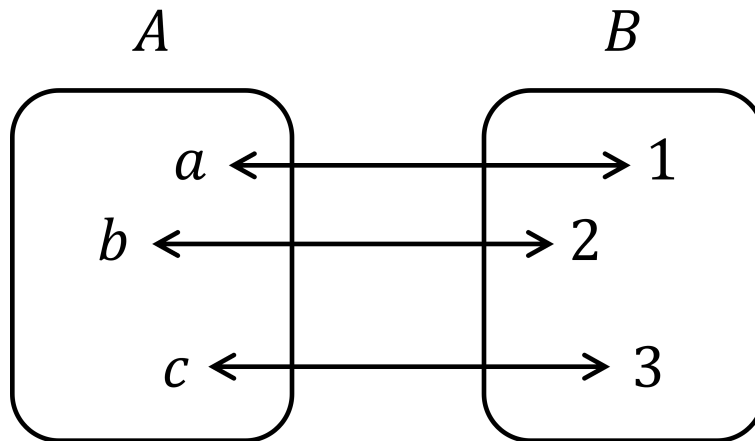


図 36: 対象 $A = \{a, b, c\}$, $B = \{1, 2, 3\}$ 間の全単射

る。即ち、1:1の対応関係 $\sqrt{\rho} \leftrightarrow |\rho\rangle$ 及び、GNS 構成 (Appendix G 参照) の下、チルダ共役則から 1:1 の対応となる演算子を考慮することで、倍化前と後のヒルベルト空間における同型性が成立する。

同様に、 $\hat{\gamma}$ と $|\Psi\rangle$ における関係性を考察すると、ノルム 1 の状態代数 $\hat{\gamma}$, $|\Psi\rangle$ は明らかに 1:1 で対応しており、また任意の演算子作用は、TFD と同様に、 $\hat{\gamma}$ への右作用と $|\rho\rangle$ の外部系ベクトルへの作用が対応する。

ここで、TFD における演算子の想定は倍化前の視点で用意され、元の空間を起点に仮想的な倍化空間が作られたが、 $\hat{\gamma}$ - $|\Psi\rangle$ 対応の場合は、外因的視点 $|\Psi\rangle$ を起点とした方が物理的に明瞭である。単位ベクトル $|\Psi\rangle$ に作用する演算子の形式としては、 $\hat{A} \otimes \bar{I}$, $\hat{I} \otimes \bar{B}$, $\hat{A} \otimes \bar{B}$ のような形が考えられる。内因・外因両視点における期待値の対応関係は、それぞれ次のように書ける： $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \leftrightarrow \langle\Psi|\hat{A} \otimes \bar{I}|\Psi\rangle$, $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{B}\hat{\rho}^\dagger) \leftrightarrow \langle\Psi|\hat{I} \otimes \bar{B}|\Psi\rangle$, $\text{Tr}(\sqrt{\hat{\rho}}\hat{B}\hat{\rho}^\dagger \sqrt{\hat{\rho}}\hat{A}) \leftrightarrow \langle\Psi|\hat{A} \otimes \bar{B}|\Psi\rangle$. 3つ目の対応関係は、従来の内因理論における期待値計算ではないが、これは外因理論における相互作用に相当する物理量の対応物であり、内因理論における潜在因子の性質・影響に関わる構造であると考察できる。

以上の議論から、状態代数と演算子の対応関係を考慮することで、内因・外因理論の状態代数が属する空間同士の同型性が満たされる。両状態代数は演算子とベクトルであるため $\hat{\gamma} \neq |\Psi\rangle$ であるが、幾何学的視点から俯瞰すると区別されない。代数的には、両者における c 数の重み γ_{ij} をただ並べたとき両者が等しいことに相当する。

G Gel'fand-Naimark-Segal 構成

量子論における議論の舞台となるヒルベルト空間を抽象数学的に構成する方法である Gel'fand-Naimark-Segal (GNS) 構成について説明する [10]. GNS 構成は、量子論の演算子 (非可換作用素) やケットベクトルといった概念の本質的性質を数学的に抽出し、非常に一般的な「代数」という概念から「表現」という数学的操作を用いて、状態 (期待値汎関数) ω , ヒルベルト空間 \mathcal{H}_ω , \mathcal{H}_ω 上の演算子 (有界線形作用素) を構築する。期待値汎関数 ω とは、 \mathcal{H}_ω の元であるベクトルへ作用する演算子 (\mathcal{H}_ω 上の演算子) $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_\omega)$ に対して $\omega(\hat{A}) = \langle \hat{A} \rangle$ として期待値を与える関数である。

この構成方法の根幹には、「見えないものは無視する」という考え方がある。具体的には、GNS 構成は C^* -代数という抽象的概念を「物理量」の集合 X として始めに用意する。これは言わば物理量演算子の抽象的概念であり、「演算子」の本質的性質を数学的に抽出した概念となっている。我々はこの C^* -代数 X という物理的世界の全体を全て見る (純粋状態) とは限らず、無限自由度である場合は基本的に不可能である。

全て見るという概念を GNS 構成的に言い換えると、抽象的物理世界 C^* -代数 \mathcal{X} の元 $A \in \mathcal{X}$ を、我々が認識する範囲の作用素空間へ写像 (表現 π_ω) して演算子 $\hat{A} \in \pi_\omega(\mathcal{X})$ に対応させるが、この際に、像である作用素空間が \mathcal{H}_ω 上の有界線形作用素の全空間 $\mathcal{B}(\mathcal{H}_\omega)$ である場合、この表現 π_ω は既約表現と呼ばれ、純粋状態に対応する。即ち、 $\pi_\omega : \mathcal{X} \rightarrow \pi_\omega(\mathcal{X}) = \mathcal{B}(\mathcal{H}_\omega)$ であるとき、我々は全作用素 $\mathcal{B}(\mathcal{H}_\omega)$ と双対なヒルベルト空間 \mathcal{H}_ω を完全に認識できていることになる。一方で混合状態に相当する状況は $\pi(\mathcal{X}) \subsetneq \mathcal{B}(\mathcal{H}_\omega)$ であるような場合であり、このような表現 π は可約表現と呼ばれる。図 37 に、GNS 構成の具体的な概観を示す。

GNS 構成は、演算子 (有界線形作用素) を基盤としてヒルベルト空間を構成する表現手法である。従来の物理学では、状態ベクトルとヒルベルト空間を始めに定義し、

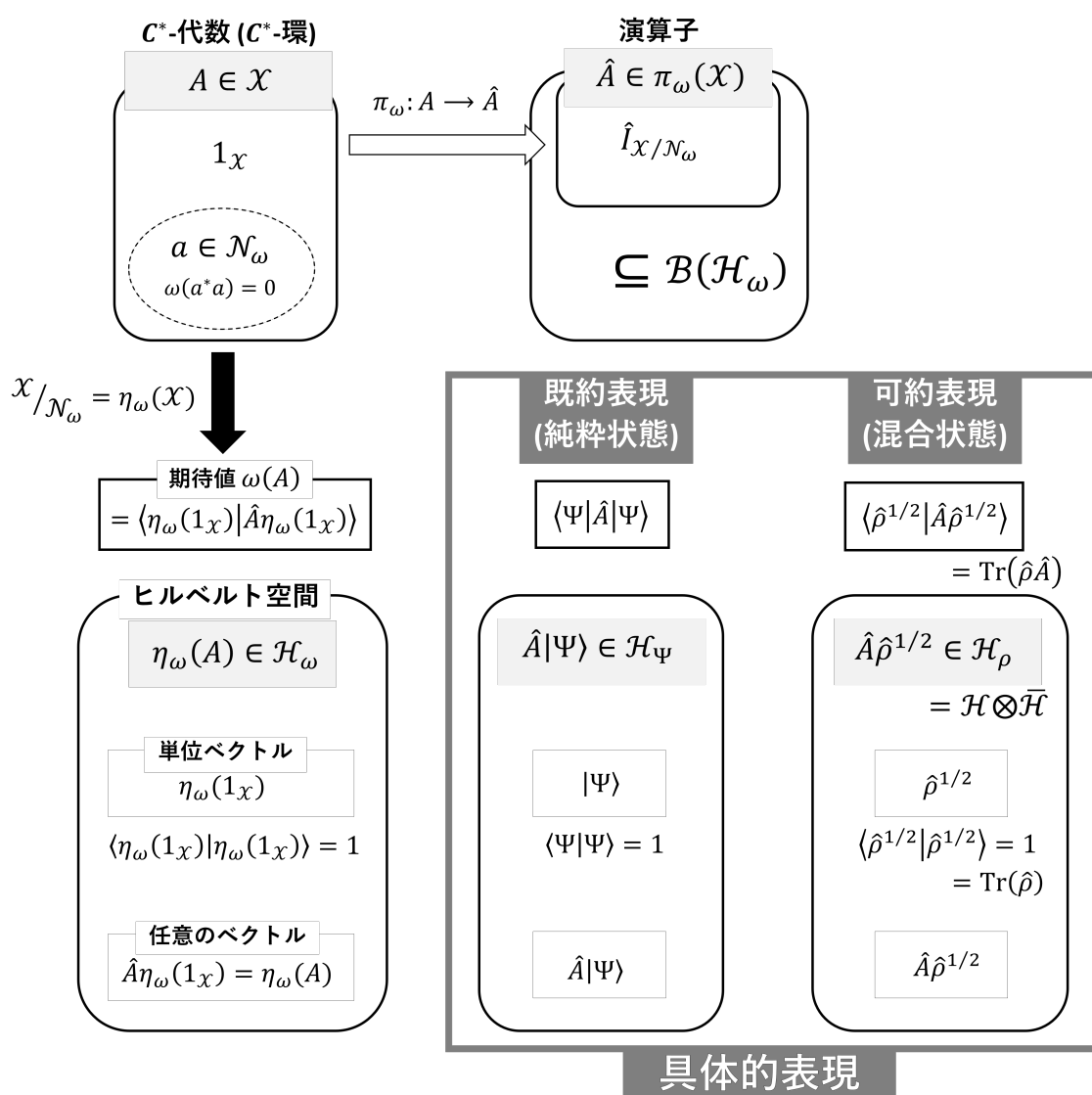


図 37: GNS 構成のイメージ

この空間に作用する演算子を特に制限なく任意に用意し、これらの作用や期待値を議論する。しかし、GNS 構成はこの従来の方法と対照的に、ある種の代数構造 (C^* -代数) から出発して、そこに対応した物理量に対する必要最低限のヒルベルト空間を構築する。この方法により、物理理論の数学的な基盤がより明確になり、より一般的な状況での量子理論の表現が可能となる。

GNS 構成の中心的な考え方は、 C^* -代数上の状態をヒルベルト空間の元として表現することである。具体的には、 C^* -代数の要素をヒルベルト空間上の線型作用素として表現し、これによって物理的な観測量の期待値を計算することが可能となる。ここで、 C^* -代数上の「状態」とは何かを考えると、状態は C^* -代数の正線型汎関数として表現される。この汎関数は、 C^* -代数の各要素を複素数へとマッピングするものであり、物理的には系のある状態での観測量の期待値を与える。

GNS 構成の重要な点は、異なる物理的文脈での状態を、共通の数学的フレームワークで一般的に扱うことができるということである。例えば、ある系の量子状態が異なる基底で表現される場合や、異なる量子系間での状態の関係性など、多岐にわたる問題をこのフレームワークで統一的に捉えることができる。さらに、この構成を使用することで、特定の物理的系の具体的なモデルや具体的なヒルベルト空間の選択をせずに、抽象的な代数的手法のみを使用して物理的な問題を解析することが可能となる。これは、物理的な理論をさらに抽象的なレベルで理解するための強力な手法となっている。

GNS 構成は、 C^* -代数 X 上の状態 ω からヒルベルト空間 \mathcal{H}_ω と作用素の表現へと繋がる。この構成の過程を以下に示す。

1. 状態の定義: 状態 ω は、 C^* -代数 X 上の正規化された正線型汎関数であり、任意の要素 $A \in X$ に対して、 $\omega(A^*A) \geq 0$ かつ $\omega(1_X) = 1$ が成り立つものとする。
2. 内積の導入: X 上の二つの元 A, B に対する内積を次のように定義する：

$$\langle A, B \rangle_\omega = \omega(B^*A)$$

この内積により、ノルム空間が導出される。しかし、この空間は一般には完全でないため、Cauchy 完備化を行い、ヒルベルト空間 \mathcal{H}_ω を得る。

3. 左イデアルと同値類の定義: 部分集合 $\mathcal{N}_\omega = \{A \in X \mid \omega(A^*A) = 0\}$ を考える。この集合 \mathcal{N}_ω は左イデアルであり、同値類 $\eta(A) = A + \mathcal{N}_\omega$ による商空間 X/\mathcal{N}_ω を構成する

と、この同値類は \mathcal{N}_ω に属する元で異なる元を同一視する。左イデアルによる同値類別は、演算子が状態ケットに左から作用する構造の抽象化である。

4. ヒルベルト空間の構成: 定義した内積 $\langle \eta(A), \eta(B) \rangle = \langle A, B \rangle$ から、商空間 $\mathcal{X}/\mathcal{N}_\omega$ は内積空間となる。この空間を完備化することによって、ヒルベルト空間 \mathcal{H}_ω を得る。特に、 $\mathcal{X}/\mathcal{N}_\omega$ は \mathcal{H}_ω で稠密である。

5. 作用素の表現: \mathcal{X} の任意の元 A に対して、ヒルベルト空間 \mathcal{H}_ω 上の作用素 $\pi_\omega(A)$ を次のように定義する：

$$\pi_\omega(A)\eta(B) = \eta(AB)$$

ここで、 $\eta(B)$ は状態 ω と関連付けられたヒルベルト空間 \mathcal{H}_ω のベクトルであり、 B は \mathcal{X} の元である。

6. 巡回ベクトル: 単位元 $1_{\mathcal{X}}$ において、 $\Omega_\omega = \eta(1_{\mathcal{X}})$ で定義される元はヒルベルト空間 \mathcal{H}_ω の巡回ベクトルとなる。このベクトルに対して、 $\langle \Omega_\omega, \pi_\omega(A)\Omega_\omega \rangle = \langle \eta(1_{\mathcal{X}}), \eta(A) \rangle = \omega(A)$ を満たし、さらに $\overline{\pi_\omega(\mathcal{X})\Omega_\omega} = \overline{\mathcal{X}/\mathcal{N}_\omega} = \mathcal{H}_\omega$ が成立する。これにより、 Ω_ω は \mathcal{H}_ω 全体を「巡回」する、つまりヒルベルト空間の各要素を生成可能な特別なベクトルとなる。端的に言えば任意の単位ベクトルの抽象化である。

以上の手順により、 C^* -代数の任意の状態がヒルベルト空間上のベクトルとして具体的に表現される。このヒルベルト空間は、GNS 構成を通して得られる状態 ω の具体的な「表現空間」として理解され、この空間上での物理的な観測が可能となる。