特異摂動と量子マスター方程式

中嶋 慧

July 19, 2020, v3.1

Abstract

このノートでは、論文 [1, 2] の解説を試みる。それは、回転波近似の量子マスター方程式は特異摂動論で理解できるというものである。§ 1 では特異摂動論を解説する。この節では一般的な場合ではなく、§ 2 を扱うのに十分な場合を解説した。§ 2 では§ 1 の理論を量子開放系に応用する。付録 A では特異摂動論を調和振動子に応用する。

なお、量子マスター方程式についての予備知識は [3] 程度で良い。

Contents

1　特異摂動論

微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = Fx + \varepsilon Gx, \quad \varepsilon \ll 1 \tag{1.1}$$

を考える。F, G は線形作用素で、F は対角化可能で、その固有値の実部は 0 以下であるとする。上の方程式の解を、

$$x = x^{(0)} + \varepsilon x^{(1)} + \varepsilon^2 x^{(2)} + \cdots \tag{1.2}$$

とすると、

$$\frac{dx^{(0)}}{dt} = Fx^{(0)}, \tag{1.3}$$

$$\frac{dx^{(i)}}{dt} = Fx^{(i)} + Gx^{(i-1)} \quad (i = 1, 2, \cdots) \tag{1.4}$$

となる。 $x^{(0)}(0) = y$ として、

$$x^{(0)} = e^{Ft} y \tag{1.5}$$

である。$x^{(i)} = e^{Ft} y^{(i)}$ とすると、

$$\begin{aligned} Fe^{Ft} y^{(i)} + e^{Ft} \frac{dy^{(i)}}{dt} &= Fe^{Ft} y^{(i)} + Gx^{(i-1)}, \\ \frac{dy^{(i)}}{dt} &= e^{-Ft} G x^{(i-1)} \end{aligned} \tag{1.6}$$

となるから、

$$y^{(i)} = C_i + \int_0^t ds\ e^{-Fs} G x^{(i-1)}(s), \quad C_i = y^{(i)}(0) \tag{1.7}$$

となる。よって、

$$y^{(1)} = C_1 + \int_0^t ds\ e^{-Fs} G e^{Fs} y, \tag{1.8}$$

$$y^{(2)} = C_2 + \int_0^t ds\ e^{-Fs} G e^{Fs} \Big[C_1 + \int_0^s du\ e^{-Fu} G e^{Fu} y \Big] \tag{1.9}$$

である。

今、

$$\hat{R}_1 \bullet \overset{\text{def}}{=} \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T ds\ e^{-Fs} G e^{Fs} \bullet, \tag{1.10}$$

$$\hat{u}^{(1)}(t) \bullet \overset{\text{def}}{=} \int_0^t ds\ [e^{-Fs} G e^{Fs} \bullet - \hat{R}_1 \bullet] \tag{1.11}$$

とする。さらに、$k=2,3,\cdots$ に対して、

$$\hat{R}_k\bullet \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T ds\,\left[e^{-Fs}Ge^{Fs}\hat{u}^{(k-1)}(s)\bullet - \sum_{i=1}^{k-1}\hat{u}^{(i)}(s)\hat{R}_{k-i}\bullet\right], \tag{1.12}$$

$$\hat{u}^{(k)}(t)\bullet \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^t ds\,\left[e^{-Fs}Ge^{Fs}\hat{u}^{(k-1)}(s)\bullet - \sum_{i=1}^{k-1}\hat{u}^{(i)}(s)\hat{R}_{k-i}\bullet - \hat{R}_k\bullet\right] \tag{1.13}$$

とする。このとき、$C_1=0$ として、

$$y^{(1)} = \int_0^t ds\; e^{-Fs}Ge^{Fs}y = \hat{u}^{(1)}(t)y + (\hat{R}_1 y)t \tag{1.14}$$

となり、$k=2,3,\cdots$ に対して、$C_k=0$ として、

$$y^{(k)} = \hat{u}^{(k)}(t)y + \left[\hat{R}_k y + \sum_{i=1}^{k-1}\hat{u}^{(i)}(t)\hat{R}_{k-i}y\right]t + \mathcal{O}(t^2) \tag{1.15}$$

となる [4]。このとき、摂動解 $x_{\text{naive}}(t,y)$ は、

$$x_{\text{naive}}(t,y) = e^{Ft}y_{\text{naive}}(t,y), \tag{1.16}$$

$$y_{\text{naive}}(t,y) = y + \sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\hat{u}^{(k)}(t)y + \sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\left[\hat{R}_k y + \sum_{i=1}^{k-1}\hat{u}^{(i)}(t)\hat{R}_{k-i}y\right]t + \mathcal{O}(t^2) \tag{1.17}$$

である。$y_{\text{naive}}(t,y) = y + \varepsilon y^{(1)}(t) + \varepsilon^2 y^{(2)}(t) + \cdots$ である。

　初期時刻を τ とすると、$\{y^{(i)}\}_{i=1,2,\dots}$ は、

$$y^{(i)} = C_i(\tau) + \int_\tau^t ds\; e^{-Fs}Gx^{(i-1)}(s), \quad C_i(\tau) = y^{(i)}(\tau), \tag{1.18}$$

$$y^{(1)} = C_1(\tau) + \int_\tau^t ds\; e^{-Fs}Ge^{Fs}y, \tag{1.19}$$

$$y^{(2)} = C_2(\tau) + \int_\tau^t ds\; e^{-Fs}Ge^{Fs}y^{(1)}(s) \tag{1.20}$$

とも書ける。y は $e^{-F\tau}x^{(0)}(\tau)$ である。$\{C_k(\tau)\}_{k=1,2,\dots}$ を上手く選ぶと $(y+\varepsilon y^{(1)}(t)+\varepsilon^2 y^{(2)}(t)+\cdots)$ は、

$$y_{\text{naive}}(t,\tau,y) = y + \sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\hat{u}^{(k)}(t)y + \sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\left[\hat{R}_k y + \sum_{i=1}^{k-1}\hat{u}^{(i)}(t)\hat{R}_{k-i}y\right](t-\tau) + \mathcal{O}\big((t-\tau)^2\big) \tag{1.21}$$

となる。$\{C_k(\tau)\}_{k=1,2,\dots}$ はこのように、永年項が $t=\tau$ で消えるように選ぶ。$\{C_k(\tau)\}_{k=1,2,\dots}$ の効果は、非摂動解 y にくりこむことができる。 $y_{\text{naive}}(t,\tau,y)$ は $t=\tau$ 付近での (単純) 摂動解である。

　y を τ の関数に格上げし、

$$x_{\text{naive}}(t,\tau,y(\tau)) = e^{Ft}y_{\text{naive}}(t,\tau,y(\tau)) \tag{1.22}$$

とし、

$$\frac{x_{\mathrm{naive}}(t,\tau,y(\tau))}{d\tau}\Big|_{\tau=t}=0 \tag{1.23}$$

で $y(\tau)$ を決める[1)] [4]。大域的に (つまり長時間) もっともらしい解は、

$$x_{\mathrm{RG}}(t)\overset{\mathrm{def}}{=}x_{\mathrm{naive}}(t,t,y(t))=e^{Ft}\Big[y(t)+\sum_{k=1}^{m}\varepsilon^k\hat{u}^{(k)}(t)y(t)\Big]+\mathcal{O}(\varepsilon^{m+1}) \tag{1.24}$$

である。$y(t)$ の方程式は、

$$\Big(1+\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\hat{u}^{(k)}(t)\Big)\frac{dy}{dt}-\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\Big[\hat{R}_k+\sum_{i=1}^{k-1}\hat{u}^{(i)}(t)\hat{R}_{k-i}\Big]y(t)=0 \tag{1.25}$$

である。ここで、

$$\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\Big[\hat{R}_k+\sum_{i=1}^{k-1}+\hat{u}^{(i)}(t)\hat{R}_{k-i}\Big]=\Big(1+\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\hat{u}^{(k)}(t)\Big)\sum_{n=1}^{\infty}\varepsilon^n\hat{R}_n \tag{1.26}$$

なので、

$$\frac{dy}{dt}=\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\hat{R}_k y(t) \tag{1.27}$$

となる。m 次までの近似で、

$$\frac{dy}{dt}=\sum_{k=1}^{m}\varepsilon^k\hat{R}_k y(t) \tag{1.28}$$

である [4]。

1) これは、初期時刻の異なるいくつもの単純摂動解たちを (その包絡線で) つなげるイメージである [1, 2, 4]。

2　量子開放系：量子マスター方程式

注目系 S と熱浴 B が弱く結合する系を考える。全系のハミルトニアンは、

$$H = H_0 + \varepsilon H_1 \,, \quad H_0 = H_S + H_B \tag{2.1}$$

である。H_1 は相互作用ハミルトニアンであり、ε は微小である。全系の状態 $\rho(t)$ の方程式は、

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = (-i\hat{H}_0 - i\varepsilon\hat{H}_1)\rho(t), \tag{2.2}$$

$$\hat{H}_0 \bullet \overset{\text{def}}{=} [H_0, \bullet], \quad \hat{H}_1 \bullet \overset{\text{def}}{=} [H_1, \bullet] \tag{2.3}$$

である。演算子 $A(t)$ の相互作用描像での演算子 $A^I(t)$ を、

$$A^I(t) \overset{\text{def}}{=} e^{-i\hat{H}_0 t} A(t) \tag{2.4}$$

すると、$y, y^{(k)}$ に対応するのは $\rho^I(t)$ である。

ここで、

$$y = \rho_S^I \otimes \rho_B \tag{2.5}$$

を仮定する。また、前節の $\hat{R}_k y$ を $R_k(y)$ と書く。このとき、

$$R_1(y) = -i \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T ds \; [H_1^I(s), \rho_S^I \otimes \rho_B] \tag{2.6}$$

である。ρ_B にエルゴード性を仮定すると、

$$R_1(y) = r_1(\rho_S^I) \otimes \rho_B \,, \quad r_1(\rho_S^I) = \mathrm{Tr}_B[R_1(y)] \tag{2.7}$$

である [1]。以下では、

$$r_1(\rho_S^I) = 0 \tag{2.8}$$

$$\tag{2.9}$$

を仮定する。また、

$$R_2(y) = -\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T ds \int_0^s du \; \left[H_1^I(s), [H_1^I(u), \rho_S^I \otimes \rho_B]\right] \tag{2.10}$$

となる。ρ_B のエルゴード性から

$$R_2^{(1)}(y) = r_2(\rho_S^I) \otimes \rho_B \,, \quad r_2(\rho_S^I, \tau) = \mathrm{Tr}_B[R_2^{(1)}(y)] \tag{2.11}$$

を得る [1]。

$y(t) = \rho_S^I(t) \otimes \rho_B$ の方程式は、

$$\frac{d}{dt}\rho_S^I(t) \otimes \rho_B = \varepsilon^2 r_2(\rho_S^I(t)) \otimes \rho_B \tag{2.12}$$

すなわち、

$$
\begin{aligned}
\frac{d\rho_S^I(t)}{dt} &= \varepsilon^2 r_2(\rho_S^I(t)) \\
&= -\varepsilon^2 \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\int_t^T ds \int_t^s du\ \mathrm{Tr}_B\Big(\big[H_1^I(s),[H_1^I(u),\rho_S^I(t)\otimes\rho_B]\big]\Big)
\end{aligned}
\tag{2.13}
$$

である[2)]。これは回転波近似 (RWA) の量子マスター方程式である[3)]！この解を $\rho_S^{I,\mathrm{RWA}}(t)$ と書く。

$\rho^I(t)$ の摂動解は、

$$
\begin{aligned}
\rho^I_{\mathrm{naive}}(t,\tau,\rho_S^I) = \rho_S^I\otimes\rho_B - i\varepsilon\int_0^t ds\ [H_1^I(s),\rho_S^I\otimes\rho_B] \\
+\varepsilon^2\Big\{-\int_0^t ds\ \Big(r_2(\rho_S^I)\otimes\rho_B + \int_0^s du\ \big[H_1^I(s),[H_1^I(u),\rho_S^I\otimes\rho_B]\big]\Big) \\
+(t-\tau)r_2(\rho_S^I)\otimes\rho_B\Big\} + \mathcal{O}(\varepsilon^3)
\end{aligned}
\tag{2.14}
$$

となる。よって、(1.24) は、

$$
\begin{aligned}
\rho^I_{\mathrm{RG}}(t) = \rho_S^{I,\mathrm{RWA}}(t)\otimes\rho_B - i\varepsilon\int_0^t ds\ [H_1^I(s),\rho_S^{I,\mathrm{RWA}}(t)\otimes\rho_B] \\
-\varepsilon^2\int_0^t ds\ \Big(r_2(\rho_S^{I,\mathrm{RWA}}(t))\otimes\rho_B + \int_0^s du\ \big[H_1^I(s),[H_1^I(u),\rho_S^{I,\mathrm{RWA}}(t)\otimes\rho_B]\big]\Big)
\end{aligned}
\tag{2.15}
$$

となる。これより、

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_B[\rho^I_{\mathrm{RG}}(t)] = \rho_S^{I,\mathrm{RWA}}(t) \\
-\varepsilon^2\int_0^t ds\ \Big(r_2(\rho_S^{I,\mathrm{RWA}}(t)) + \int_0^s du\ \mathrm{Tr}_B\Big\{\big[H_1^I(s),[H_1^I(u),\rho_S^{I,\mathrm{RWA}}(t)\otimes\rho_B]\big]\Big\}\Big)
\end{aligned}
\tag{2.16}
$$

を得る。

---

2) 積分の下端を t としたが、$r_2(\bullet)$ は t によらない。ここで $\bullet$ は注目系の、時間によらない演算子である。

3)

$$
\frac{d\rho_S^I(t)}{dt} = -\varepsilon^2\frac{1}{T}\int_t^{t+T} ds\int_t^s du\ \mathrm{Tr}_B\Big(\big[H_1^I(s),[H_1^I(u),\rho_S^I(t)\otimes\rho_B]\big]\Big)
$$

は coarse-graining approximation [3] である。これは $T\to\infty$ で RWA となる。

A　減衰振動子

減衰振動子

$$\frac{d^2x}{dt^2}+\varepsilon\frac{dx}{dt}+x=0\,,\quad \varepsilon\ll 1 \tag{A.1}$$

を考える。これは、

$$\frac{dx}{dt}=p\,,\quad \frac{dp}{dt}=-x-\varepsilon p \tag{A.2}$$

となる。今、

$$X\overset{\text{def}}{=}\begin{pmatrix}x\\p\end{pmatrix} \tag{A.3}$$

とすると、

$$\frac{dX}{dt}=FX+\varepsilon GX, \tag{A.4}$$

$$F=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}\,,\quad G=\begin{pmatrix}0&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{A.5}$$

である。§ 1 の手法で、ε^2 までで、

$$x_{\rm RG}(t)=A\exp\Bigl(-\frac{\varepsilon t}{2}\Bigr)\sin\Bigl(\bigl[1-\frac{\varepsilon^2}{8}\bigr]t+\theta\Bigr) \tag{A.6}$$

となる [1, 2]。厳密解は、

$$x(t)=A\exp\Bigl(-\frac{\varepsilon t}{2}\Bigr)\sin\Bigl(\bigl[1-\frac{\varepsilon^2}{4}\bigr]^{1/2}t+\theta\Bigr) \tag{A.7}$$

である。

References

[1] 久木田真吾「博士論文：特異摂動理論から見た量子開放系の摂動的手法」(2018) `https://hdl.handle.net/2237/00027771`

[2] Shingo Kukita, “Perturbative Dynamics of Open Quantum Systems by Renormalization Group Method”, Phys. Rev. E **96**, 042113 (2017). [arXiv:1705.10522]

[3] 中嶋慧「量子マスター方程式の導出」 `http://physnakajima.html.xdomain.jp/projection.pdf`

[4] Hayato Chiba, “C^1 Approximation of Vector Fields Based on the Renormalization Group Method”, SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, **7**(3), 895-932.