数理解析研究所講究録 1266 巻 2002 年 133-141

Master equation of the Lindblad form based on a microscopic Hamiltonian through stochastic limit approximation ——For rapidly decaying systems——

早稲田大学大学院 理工学研究科
湯浅 一哉,* 木村 元,† 今福 健太郎‡
(Kazuya Yuasa, Gen Kimura, Kentaro Imafuku)

スピン緩和現象, デコヒーレンスといった現象を説明するためには, 散逸現象を量子論に基づいて記述する必要がある. しかしながら, 量子論はもともと閉じた系が適用対象であり, また, 時間反転対称性をもっていることから, それが可能か否かは自明ではなく, 興味深いテーマである. 現在標準的となっている方法のひとつは, 注目している (散逸) 系と相互作用する無限自由度系「環境系」をも含めた「全体系」を閉じた系として量子論的に取り扱い, 興味のない環境系に対する平均操作を通じて, 注目系の非可逆ダイナミクスを導く方法である [1–3]. Caldeira と Leggett は経路積分を用いて量子 Brown 運動を定式化することに成功し [4,5], また, 近年のテクノロジーの進歩は, 量子光学におけるこの方法の成功を明らかにした [6].

Accardi *et al.* の確率極限近似 (stochastic limit approximation) [7,8] は, 全体系から散逸ダイナミクスを引き出す有力な手法である. それが扱うのは, 次のような全体系 Hamiltonian である:

$$H_{\mathrm{tot}} = H_S + \lambda V + H_B. \tag{1}$$

例えば, 電磁場 H_B 中の原子 H_S を考えよ. 量子光学においてしばしば興味のある状況である. その場合, 電磁相互作用 λV は十分弱く ($\lambda \ll 1$), 摂動計算は十分に良い近似を与えるであろう. 確率極限近似は, 同時に時間の粗視化 $t \mapsto \tau = \lambda^2 t$ を行い, 弱結合極限 (weak coupling limit) $\lambda \to 0$ (τ 固定) によって摂動の最低次の寄与を抽出することで, 最小限ではあるが十分に興味深い散逸ダイナミクスを導く方法である [9–11].

しかしながら, Hamiltonian (1) に確率極限近似を適用して導かれるダイナミクスは, 少々状況が限定されている. 一般に, 緩和定数 γ に対する相互作用の最低次の寄与は λ^2 に比例し, 注目系 H_S の特徴的振動数 Ω に比べて $\gamma \ll \Omega$. すなわち, 弱い散逸 (WD: Weak Damping) が導かれるのである. 量子光学はこの状況にあたる. これに比べて緩和が速い $\gamma \sim \Omega$ という状況 (RD: Rapid Decay) を導こうと思ったら, 別の扱いが必要なのである. また, RD の取り扱いは, WD に比べて少々注意を要することが指摘されている [2,12]. WD においては通常 Lindblad 型マスター方程式 [13] が導かれている [2,6] 一方で, RD の状況において導出されるマスター方程式は, しばしば Lindblad 型でないのである. そのため, RD のマスター方程式はしばしば, 確率の正値性が保証されないという困難を伴うことになる [2,12].[1)] Caldeira と Leggett のマスター方程式 [4] はその一例である [2,12,14].

*Email: yuasa@hep.phys.waseda.ac.jp
†Email: gen@hep.phys.waseda.ac.jp
‡Email: imafuku@mn.waseda.ac.jp

1) もちろん, 用いた近似の適用範囲内では問題ない [12].

本稿では, 確率極限近似を

$$H_{\mathrm{tot}} = \lambda^2 H_S + \lambda V + H_B \tag{2}$$

という全体系 Hamiltonian に適用する枠組みを与える [10]. 注目系の振動数 Ω は $O(\lambda^2)$ のオーダーであり, $\gamma \sim \Omega$ という RD の状況が導かれることになる. そして, ここで与える方法で得られるマスター方程式が Lindblad 型であることを見よう.

ここでは, 次の Hamiltonian を考える. 全体系の Hamiltonian H_{tot} は式 (2) であり,

$$H_S = \sum_n E_n |n\rangle\langle n|, \quad H_B = \int_0^\infty d\omega\, \hbar\omega a_\omega^\dagger a_\omega, \tag{3a}$$

$$V = i\hbar \sum_m \sum_n \int_0^\infty d\omega \left(g_{mn}(\omega) D_{mn} a_\omega - g_{mn}^*(\omega) D_{mn}^\dagger a_\omega^\dagger \right), \quad D_{mn} = |m\rangle\langle n|. \tag{3b}$$

一般に離散的エネルギー準位 E_n $(n = 0, 1, \ldots)$ をもつ注目系 H_S が, 環境 boson 場 H_B と λV で線形相互作用する系である. $g_{mn}(\omega)$ は, 注目系がエネルギー $\hbar\omega$ の boson を吸収して n 番目の準位から m 番目へと遷移する過程の行列要素であり, $g_{mn}^*(\omega)$ は, 逆に注目系が m 番目の準位から n 番目へと遷移して, エネルギー $\hbar\omega$ の boson を放出する過程の行列要素である. 特に回転波近似 (rotating-wave approximation) を取るようなことはしていない. また, 通常どおり, 時刻 $t = 0$ 以前には注目系と環境 boson 場との間には相関がなく, 環境 boson 場は温度 T の熱平衡状態にあるものと仮定して, 系の初期条件を

$$\rho_{\mathrm{tot}}(0) = \rho_S \otimes \rho_B, \quad \rho_B = e^{-H_B/k_B T} / \operatorname{tr}_B e^{-H_B/k_B T} \tag{4}$$

で与えることにする. k_B は Boltzmann 定数である.

さて, 相互作用描像の時間発展演算子 $U_I(t)$ に対する Schrödinger 方程式は, $H_0 = \lambda^2 H_S + H_B$ とすると,

$$\frac{d}{dt} U_I(t) = -\frac{i}{\hbar} \lambda V_I(t) U_I(t), \quad U_I(0) = 1, \tag{5a}$$

$$V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} = i\hbar \sum_m \sum_n \left(D_{mn} A_{mn}(t) - D_{mn}^\dagger A_{mn}^\dagger(t) \right) \tag{5b}$$

で与えられる. $A_{mn}(t)$ は環境 boson 場の演算子であり,

$$A_{mn}(t) = \int_0^\infty d\omega\, g_{mn}(\omega) a_\omega e^{-i(\omega - \lambda^2 \omega_{mn})t}, \quad \omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar. \tag{6}$$

確率極限近似では, ここで時間の粗視化を行う. 微視的時間 t から巨視的時間 $\tau = \lambda^2 t$ へと変換し,

$$\frac{d}{d\tau} U_I(\tau/\lambda^2) = \sum_m \sum_n \left(D_{mn} \frac{1}{\lambda} A_{mn}(\tau/\lambda^2) - D_{mn}^\dagger \frac{1}{\lambda} A_{mn}^\dagger(\tau/\lambda^2) \right) U_I(\tau/\lambda^2), \tag{7}$$

弱結合極限 (weak coupling limit) $\lambda \to 0$ を取るのである:2)

$$\frac{d}{d\tau} \mathcal{U}_I(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{V}_I(\tau) \mathcal{U}_I(\tau), \quad \mathcal{V}_I(\tau) = i\hbar \sum_m \sum_n \left(D_{mn} b_{mn}(\tau) - D_{mn}^\dagger b_{mn}^\dagger(\tau) \right) \mathcal{U}_I(\tau). \tag{8}$$

2) この Schrödinger 方程式 (8) は形式的に書き下したものであり, 数学的には注意が必要である. Normal-ordering を施したものが意味をもちうるが [7,8], ここでは深入りしない. 後ほど Heisenberg 方程式を導出する際に, normal-ordering を行うことになる.

ここで, 環境 boson 場の演算子 $b_{mn}(\tau)$ の, 熱平衡状態 $e^{-H_B/k_BT}/\operatorname{tr}_B e^{-H_B/k_BT}$ における相関関数を見ておこう. 次の基礎公式

$$\lim_{\lambda\to 0}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, F(\tau)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}G(\omega)\frac{1}{\lambda^2}e^{-i(\omega-\lambda^2\omega_0)\tau/\lambda^2}$$

$$=\lim_{\lambda\to 0}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, F(\lambda^2 t)\hat{G}(t)e^{i\lambda^2\omega_0 t}=F(0)\lim_{\lambda\to 0}G(\lambda^2\omega_0), \tag{9}$$

すなわち,

$$\lim_{\lambda\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}G(\omega)\frac{1}{\lambda^2}e^{-i(\omega-\lambda^2\omega_0)\tau/\lambda^2}=\lim_{\lambda\to 0}G(\lambda^2\omega_0)\delta(\tau) \tag{10}$$

[$\hat{G}(t)$ は $G(\omega)$ の Fourier 変換] を用いる. すると,

$$\left\langle \frac{1}{\lambda}A_{mn}(\tau/\lambda^2)\frac{1}{\lambda}A^\dagger_{m'n'}(\tau'/\lambda^2)\right\rangle_B$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\Gamma^+_{mn,m'n'}(\omega)\frac{1}{\lambda^2}e^{-i(\omega-\lambda^2\omega_{mn,m'n'})(\tau-\tau')/\lambda^2}e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})(\tau+\tau')/2}$$

$$\overset{\lambda\to 0}{\to}\lim_{\lambda\to 0}\Gamma^+_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'})e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\tau}\delta(\tau-\tau') \tag{11}$$

より,

$$\langle b_{mn}(\tau)b^\dagger_{m'n'}(\tau')\rangle_B=\lim_{\lambda\to 0}\Gamma^+_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'})e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\tau}\delta(\tau-\tau') \tag{12a}$$

が, そして同様にして,

$$\langle b^\dagger_{mn}(\tau)b_{m'n'}(\tau')\rangle_B=\lim_{\lambda\to 0}\Big(\Gamma^-_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'})\Big)^* e^{-i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\tau}\delta(\tau-\tau') \tag{12b}$$

が得られる. ただし,

$$\Gamma^+_{mn,m'n'}(\omega)=\Big(1+N(\omega)\Big)\Gamma_{mn,m'n'}(\omega),\quad \Gamma^-_{mn,m'n'}(\omega)=N(\omega)\Gamma_{mn,m'n'}(\omega), \tag{13a}$$

$$\Gamma_{mn,m'n'}(\omega)=2\pi\theta(\omega)g_{mn}(\omega)g^*_{m'n'}(\omega) \tag{13b}$$

はスペクトル関数,

$$N(\omega)=\frac{1}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1} \tag{14}$$

は Bose–Einstein 分布関数, そして, $\omega_{mn,m'n'}=(\omega_{mn}+\omega_{m'n'})/2$ である. 相関関数 (12) は, 環境 boson 系の演算子 $b_{mn}(\tau)$ の相関時間がゼロであることを示している. このことから, $b_{mn}(\tau)$ を量子ノイズと呼んでも良いであろう. その強さを表す $\lim_{\lambda\to 0}\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'})$ には, スペクトル関数 $\Gamma_{mn,m'n'}(\omega)$ の $\omega\to 0^+$ での振る舞いが重要である. [$\omega<0$ に対しては, 式 (13b) の定義より $\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\omega)=0$.] $N(\omega)\sim k_BT/\hbar\omega$ for $\omega\sim 0$ に注意すると,

$$\Gamma_{mn,m'n'}(\omega)\sim\eta_{mn,m'n'}\omega\quad \text{for}\quad \omega\to 0^+ \tag{15}$$

という線形 (Ohmic) なスペクトル関数のみが有意な値を与えることが分かる. そして, 確率極限 $\lambda\to 0$ において $\lambda^2\hbar\omega_{mn,m'n'}/k_BT$ についての展開

$$\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'})/(k_BT/\hbar)=\eta_{mn,m'n'}+O(\lambda^2\hbar\omega_{mn,m'n'}/k_BT) \tag{16}$$

の第ゼロ次のみが残り,

$$\lim_{\lambda\to 0}\Gamma^{\pm}_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'})=\begin{cases}\dfrac{k_BT}{\hbar}\eta_{mn,m'n'} & (\omega_{mn,m'n'}>0)\\ \dfrac{k_BT}{2\hbar}\eta_{mn,m'n'} & (\omega_{mn,m'n'}=0)\\ 0 & (\omega_{mn,m'n'}<0)\end{cases} \tag{17}$$

を与える. ただし, $\omega_{mn,m'n'}=0$ は特別に扱った. $\Gamma^{\pm}_{mn,m'n'}(\omega)$ が $\omega=0$ において不連続な関数であるためであり, ここでは $\Gamma^{\pm}_{mn,m'n'}(0)=[\Gamma^{\pm}_{mn,m'n'}(0^+)+\Gamma^{\pm}_{mn,m'n'}(0^-)]/2$ とした.

RD と WD とは個別の扱いをしなければならないにもかかわらず, 相関関数 (12) は, WD に対する通常の確率極限近似のものとの対応が分かりやすい. 相関関数 (12) において $\lambda^2\omega_{mn}$ を ω_{mn} に置き換えると, それは WD の相関関数 [7,8] を再現するからである. しかしながら, 物理的な様相は大きく異なる. WD では, 激しく振動する $e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\tau/\lambda^2}\to\delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}}$ が回転波近似を実現し [15], 多くの相関関数がゼロとなる. そして, その結果, WD のダイナミクスは大変シンプルなものとなる. 一方, RD では回転波近似が許されず, WD には見られない様相を示すことになる. この点に関しては, 最後に触れることになろう.

さて, 環境の影響を取り込んだ注目系の演算子

$$\mathcal{D}^{\theta}_{mn}(\tau)=\mathrm{tr}_B\Big(\rho_B\,\mathcal{U}_I^{\dagger}(\tau)D_{mn}e^{i\omega_{mn}\tau}\mathcal{U}_I(\tau)\Big) \tag{18}$$

に対する Heisenberg 方程式を導こう. その際, 熱平衡状態 ρ_B による部分和を計算する必要があるが, 我々は演算子形式で議論しているので, Thermo Field Dynamics (TFD) [16] のテクニックを用いることにする. TFD では, 熱平衡状態は消滅演算子 ξ_ω と $\tilde{\xi}_\omega$ によって消滅される「熱的真空」(thermal vacuum) $|\theta\rangle$ であり, ξ_ω と $\tilde{\xi}_\omega$ についての normal-ordering ができれば, 熱平衡状態における期待値が計算できることになる. この ξ_ω と $\tilde{\xi}_\omega$ は, 環境 boson 場の消滅演算子 a_ω と「熱的 Bogoliubov 変換」(thermal Bogoliubov transformation)

$$a_\omega=\sqrt{1+N(\omega)}\,\xi_\omega+\sqrt{N(\omega)}\,\tilde{\xi}^{\dagger}_\omega \tag{19}$$

によって結びついており, したがって, $\mathcal{U}_I(\tau)$ と $\chi_{mn}(\tau)$, $\tilde{\chi}_{mn}(\tau)$ との交換ができれば, Heisenberg 方程式が求まることになる. ただし, $\chi_{mn}(\tau)$ と $\tilde{\chi}_{mn}(\tau)$ は, 式 (19) に対応して $b_{mn}(\tau)$ と

$$b_{mn}(\tau)=\chi_{mn}(\tau)+\tilde{\chi}^{\dagger}_{mn}(\tau) \tag{20}$$

で結びついているもので,

$$\Xi_{mn}(t)=\int_0^\infty d\omega\sqrt{1+N(\omega)}\,g_{mn}(\omega)\xi_\omega e^{-i(\omega-\lambda^2\omega_{mn})t}, \tag{21a}$$

$$\tilde{\Xi}_{mn}(t)=\int_0^\infty d\omega\sqrt{N(\omega)}\,g^{*}_{mn}(\omega)\tilde{\xi}_\omega e^{i(\omega-\lambda^2\omega_{mn})t} \tag{21b}$$

で定義される $\Xi_{mn}(\tau/\lambda^2)/\lambda$ と $\tilde{\Xi}_{mn}(\tau/\lambda^2)/\lambda$ の確率極限演算子である. そこで, $\chi_{mn}(\tau)$ と

$$\mathcal{U}_I(\tau)=1-\frac{i}{\hbar}\int_0^\tau d\tau'\,\mathcal{V}_I(\tau')\mathcal{U}_I(\tau') \tag{22}$$

との交換関係を考えよう．それは

$$[\chi_{mn}(\tau),\mathcal{U}_I(\tau)] = -\frac{i}{\hbar}\int_0^\tau d\tau'\,[\chi_{mn}(\tau),\mathcal{V}_I(\tau')]\mathcal{U}_I(\tau') - \frac{i}{\hbar}\int_0^\tau d\tau'\,\mathcal{V}_I(\tau')[\chi_{mn}(\tau),\mathcal{U}_I(\tau')] \tag{23}$$

であるが，$[\chi_{mn}(\tau),\mathcal{V}_I(\tau')]=0$ for $\tau\neq\tau'$，及び，$[\chi_{mn}(\tau),\mathcal{U}_I(\tau')]=0$ for $\tau>\tau'$ を考慮すると，

$$[\chi_{mn}(\tau),\mathcal{U}_I(\tau)] = -\sum_{m'}\sum_{n'}\int_0^\tau d\tau'\,[\chi_{mn}(\tau),\chi^\dagger_{m'n'}(\tau')]D^\dagger_{m'n'}\mathcal{U}_I(\tau) \tag{24}$$

となる．ここで，積分範囲が $\tau-\tau'=0$ をまたいでいないために，被積分関数の交換子を $\sim\delta(\tau-\tau')$ とできないことに注意．これを確率極限を取る前の交換子 $[\Xi_{mn}(\tau/\lambda^2)/\lambda,\Xi^\dagger_{m'n'}(\tau'/\lambda^2)/\lambda]$ に戻って改めて評価することで，

$$[\chi_{mn}(\tau),\mathcal{U}_I(\tau)] = -\sum_{m'}\sum_{n'}\lim_{\lambda\to0}\Big(i\Sigma^+_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'})\Big)\,e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\tau}D^\dagger_{m'n'}\mathcal{U}_I(\tau) \tag{25a}$$

を，そして，同様にして，

$$[\tilde{\chi}_{mn}(\tau),\mathcal{U}_I(\tau)] = \sum_{m'}\sum_{n'}\lim_{\lambda\to0}\Big(i\Sigma^-_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'})\Big)^*\,e^{-i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\tau}D_{m'n'}\mathcal{U}_I(\tau) \tag{25b}$$

を得る．これがHeisenberg方程式を導く際に鍵となる交換関係である．ここに現れた $\Sigma^\pm_{mn,m'n'}(\omega)$ は，

$$\begin{aligned} i\Sigma^\pm_{mn,m'n'}(\omega) &= \int_0^\infty dt\int_0^\infty \frac{d\omega'}{2\pi}\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\omega')e^{-i(\omega'-\omega)t} \\ &= \int_0^\infty \frac{d\omega'}{2\pi}\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\omega')\frac{i}{\omega-\omega'+i0^+} = \frac{1}{2}\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\omega)+i\Delta^\pm_{mn,m'n'}(\omega) \end{aligned} \tag{26}$$

で定義される (boson がひとつ飛ぶ) 自己エネルギーであり，その虚部 $\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\omega)$ は緩和定数を，その実部

$$\Delta^\pm_{mn,m'n'}(\omega) = \mathcal{P}\int_0^\infty \frac{d\omega'}{2\pi}\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\omega')\frac{1}{\omega-\omega'} \tag{27}$$

はエネルギー・シフトを与えることになる．この交換関係 (25) でもやはり，$\lambda^2\omega_{mn}\to\omega_{mn}$ の置き換えで WD における交換関係 [7,8] が再現される．そして，WD の場合には $e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\tau/\lambda^2}$ が激しく振動することで，多くがゼロとなることも同様である．

この交換関係 (25) を用いることで，注目系の演算子 $\mathcal{D}^\theta_{mn}(\tau)$ に対する Heisenberg 方程式

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\mathcal{D}^\theta_{mn}(\tau) &= i\omega_{mn}\mathcal{D}^\theta_{mn}(\tau) - \sum_{n'}\sum_{l}\left(\frac{1}{2}\Gamma^\theta_{nl,n'l}+i\Delta^\theta_{nl,n'l}\right)\mathcal{D}^\theta_{mn'}(\tau) \\ &\quad -\sum_{m'}\sum_{k}\left(\frac{1}{2}\Gamma^\theta_{m'k,mk}-i\Delta^\theta_{m'k,mk}\right)\mathcal{D}^\theta_{m'n}(\tau) + \sum_{k}\sum_{l}\Gamma^\theta_{km,ln}\mathcal{D}^\theta_{kl}(\tau), \end{aligned} \tag{28}$$

$$\Gamma^\theta_{mn,m'n'} = \lim_{\lambda\to0}\Big\{\Gamma^+_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'}) + \Big(\Gamma^-_{nm,n'm'}(\lambda^2\omega_{nm,n'm'})\Big)^*\Big\}, \tag{29a}$$

$$\Delta^{\theta}_{mn,m'n'} = \lim_{\lambda\to 0}\left\{\Delta^{+}_{mn,m'n'}(\lambda^2\omega_{mn,m'n'}) - \left(\Delta^{-}_{nm,n'm'}(\lambda^2\omega_{nm,n'm'})\right)^*\right\} \tag{29b}$$

が導かれ，さらに，$\mathrm{tr}_S[\rho_S\mathcal{D}^{\theta}_{mn}(\tau)] = \langle n|\rho_S(\tau)|m\rangle$ より，これは直ちに注目系の密度行列演算子 $\rho_S(\tau) = \mathrm{tr}_B\,\rho_{\mathrm{tot}}(\tau)$ に対するマスター方程式

$$\frac{d}{d\tau}\rho_S(\tau) = -\frac{i}{\hbar}[H^{\theta}_S, \rho_S(\tau)] - \frac{1}{2}\sum_{km}\sum_{ln}\Gamma^{\theta}_{km,ln}\left(L_{km}L^{\dagger}_{ln}\rho_S(\tau) + \rho_S(\tau)L_{km}L^{\dagger}_{ln} - 2L^{\dagger}_{ln}\rho_S(\tau)L_{km}\right), \tag{30}$$

$$L_{km} = |k\rangle\langle m|, \quad H^{\theta}_S = H_S + \sum_m\sum_n\sum_k \hbar\Delta^{\theta}_{mk,nk}|m\rangle\langle n| \tag{31}$$

を与える．自己エネルギーの実部 $\Delta^{\pm}_{mn,m'n'}(\omega)$ が Hamiltonian の繰り込みを与え，虚部 $\Gamma^{\pm}_{mn,m'n'}(\omega)$ が (von Neumann 方程式には見られない) 散逸項に現れているのが分かるであろう．

こうして，RD のマスター方程式が確率極限近似によって導かれた．このマスター方程式が Lindblad 型であるかどうかを見ておこう．Lindblad 型マスター方程式とは [13]，

$$\frac{d}{d\tau}\rho(\tau) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(\tau)] - \frac{1}{2}\sum_{ij}A_{ij}\left(L_iL^{\dagger}_j\rho(\tau) + \rho(\tau)L_iL^{\dagger}_j - 2L^{\dagger}_j\rho(\tau)L_i\right) \tag{32}$$

という構造をした，Markov な線形方程式のことである．ただし，演算子 H は Hermite ($H^{\dagger} = H$)，c 数行列 A_{ij} は Hermite で固有値が正 ($A^*_{ij} = A_{ji}$, $A \geq 0$) という条件を満足しなければならない．L_i は任意の演算子である．これらの条件は，Markov で線形な時間発展をする系の密度行列演算子 $\rho(\tau)$ の Hermite 性 $\rho^{\dagger}(\tau) = \rho(\tau)$ (確率の実数性)，正値性 $\rho(\tau) \geq 0$ (確率の正値性)，トレース保存 $\mathrm{tr}\,\dot{\rho}(\tau) = 0$ (確率保存) に対する必要十分条件であり，いずれかが満たされないとそれは確率が当然もつべき性質が破れてしまうことを意味する．ここで導いたマスター方程式 (30) で確認しなければならないのは，繰り込まれた Hamiltonian H^{θ}_S の Hermite 性と，$\Gamma^{\theta}_{km,ln}$ の (行列の意味での) Hermite 性，及び，正値性である．Hermite 性

$$(H^{\theta}_S)^{\dagger} = H^{\theta}_S, \quad (\Gamma^{\theta}_{km,ln})^* = \Gamma^{\theta}_{ln,km} \tag{33}$$

に関しては，$\{\Gamma^{\pm}_{mn,m'n'}(\omega)\}^* = \Gamma^{\pm}_{m'n',mn}(\omega)$ という性質より容易に確認できるものの，正値性に関しては，残念ながら今のところ完全に示すことができていない．しかしながら，行列 $\Gamma^{\theta}_{km,ln}$ が正定値であることの必要条件

$$\Gamma^{\theta}_{km,km}\Gamma^{\theta}_{ln,ln} - |\Gamma^{\theta}_{km,ln}|^2 \geq 0 \quad \text{for any } km,\ ln \tag{34}$$

を満足していることは，物理的な条件 $g_{km} \geq g_{mk}$ for $k > m$ (boson を吸収してエネルギー準位が下がる確率よりも，上がる確率の方が高いという条件) の下に確認することができる．また，相互作用 Hamiltonian (3b) の特別な場合として，注目系の任意の Hermite 演算子 Q を用いて

$$V = i\hbar Q\int_0^{\infty} d\omega\left(g(\omega)a_{\omega} - g^*(\omega)a^{\dagger}_{\omega}\right) \tag{35}$$

の形をした相互作用の場合には，マスター方程式 (30) は

$$\frac{d}{d\tau}\rho_S(\tau) = -\frac{i}{\hbar}[H^{\theta}_S, \rho_S(\tau)] - \frac{\eta k_BT}{2\hbar}[Q, [Q, \rho_S(\tau)]], \quad H^{\theta}_S = H_S - \hbar Q^2\int_0^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\frac{\Gamma(\omega)}{\omega} \tag{36}$$

となり，これは明らかに Lindblad 型である ($L = Q$, $A = \eta k_BT/\hbar$)．

次に, 熱平衡状態を考えよう. WD の場合には, Hamiltonian (1) 及び (3) から導かれるするマスター方程式より, 系は初期条件に依ることなく $\rho_S(\tau) \rightarrow e^{-H_S/k_BT}/\mathrm{tr}_S\, e^{-H_S/k_BT}$ と正準分布へと向かっていくことを示すことができる [2,17]. それを保証するのは, $\Gamma^{+}_{mk,mk}(\omega_{mk}) = \Gamma^{-}_{mk,mk}(\omega_{mk})e^{\hbar\omega_{mk}/k_BT}$ という, エネルギー放出率 $\Gamma^{+}_{mk,mk}(\omega_{mk})$ と吸収率 $\Gamma^{-}_{mk,mk}(\omega_{mk})$ との間の詳細つり合い (detailed balance) の関係であった. この関係はここでは, 式 (29a) を見ると

$$\Gamma^{\theta}_{km,ln} = (\Gamma^{\theta}_{mk,nl})^{*} \tag{37}$$

であり, エネルギー放出率と吸収率とが等しいことを意味している. したがって, RD のマスター方程式 (30) にしたがう系の熱平衡状態は, 温度無限大の正準分布 $\rho_S \sim 1$ であることが予想される. 実際それは, マスター方程式 (30) の不変分布である. このことは, ここに示した RD に対する確率極限近似が,

$$k_BT \gg \lambda^2\hbar\omega_{mn} \tag{38}$$

という高温において有効であることから理解できる. 式 (16) の展開を見よ. 通常, 確率極限近似は, boson がひとつ飛ぶループの寄与のみを取り出し, それより高次の寄与は無視する近似であるが [11], RD に対する確率極限近似では, さらに, 系の特徴的エネルギーに比べて高温の状況におけるダイナミクスを引き出す方法であると言うことができる.

さて, 具体例を与えておこう.

$$H_S = \frac{1}{2M}p^2 + \frac{1}{2}M\Omega_0^2x^2, \quad V = -i\hbar\sqrt{\frac{M\Omega_0}{\hbar}}x\int_0^\infty d\omega\left(g(\omega)a_\omega - g^*(\omega)a_\omega^\dagger\right). \tag{39}$$

これは, Caldeira–Leggett のモデル [4] の一例である. この場合には, マスター方程式 (30), あるいは (36) は,

$$\frac{d}{d\tau}\rho_S(\tau) = -\frac{i}{\hbar}[H_S^\theta, \rho_S(\tau)] - \frac{M\Omega_0\eta k_BT}{2\hbar^2}[x,[x,\rho_S(\tau)]], \tag{40}$$

$$H_S^\theta = \frac{1}{2M}p^2 + \frac{1}{2}M\Omega_R^2x^2, \quad \Omega_R^2 = \Omega_0^2 - 2\Omega_0\int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi}\frac{\Gamma(\omega)}{\omega} \tag{41}$$

となる. Caldeira と Leggett が導いた (Lindblad 型ではない) マスター方程式 [4] とは $(-i\Omega_0\eta/4\hbar)$ $\times[x,\{p,\rho_S(\tau)\}]$ の項の有無だけ異なり, Lindblad 型である. この項がなくなったのは, ここでの確率極限近似が高温極限の部分を引き出したためであると理解することができる. 同じ事情は, spin-boson モデル [18]

$$H_S = \frac{\varepsilon}{2}\sigma_z + \frac{\Delta}{2}\sigma_x, \quad V = i\hbar\sigma_z\int_0^\infty d\omega\left(g(\omega)a_\omega - g^*(\omega)a_\omega^\dagger\right) \tag{42}$$

でも見られる. マスター方程式は,

$$\frac{d}{d\tau}\rho_S(\tau) = -\frac{i}{\hbar}[H_S, \rho_S(\tau)] - \frac{\eta k_BT}{2\hbar}[\sigma_z,[\sigma_z,\rho_S(\tau)]] \tag{43}$$

である. Munro と Gardiner が Ref. [12] で導いたマスター方程式とは, T に依存しない $(-i\Delta\eta/4\hbar)$ $\times[\sigma_z,\{\sigma_y,\rho_S(\tau)\}]$ の項だけ違う.

本稿では, RD に対する確率極限近似を与え, それによって導かれるマスター方程式が Lindblad 型であることを見てきた. この確率極限近似の基礎となるのは相関関数 (12) と交換関係 (25) である. RD と WD とは個別の取り扱いをしなければならないにもかかわらず, それらの式は WD に

おける式 [7,8] とよく対応している．RD における (12), (25) において $\lambda^2\omega_{mn}$ を ω_{mn} に置き換えると, WD における式を再現するのである．しかしながら, 物理的な様相は大きく異なる．WD においては激しく振動する $e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})\tau/\lambda^2} \to \delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}}$ が回転波近似を実現する [15] 一方で, RD では回転波近似が許されないからである．実際, spin-boson モデル (42) の相互作用 Hamiltonian の代わりに回転波近似を施した

$$V = i\hbar\tilde{\Delta}\int_0^\infty d\omega\left(g(\omega)D_+a_\omega - g^*(\omega)D_-a_\omega^\dagger\right),\quad D_+ = |+\rangle\langle -| = D_-^\dagger, \tag{44}$$

$$\tilde{\Delta} = \Delta/\hbar\Omega_0,\quad \Omega_0 = \sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2},\quad H_S|\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}\hbar\Omega_0|\pm\rangle \tag{45}$$

を用いると, 全体系 Hamiltonian が (2) の RD では, 回転波近似を施さない (42) に対するマスター方程式 (43) とは異なる

$$\frac{d}{d\tau}\rho_S(\tau) = -\frac{i}{\hbar}[H_S^\theta,\rho_S(\tau)] - \frac{\gamma^\theta}{4}\left(D_+D_+^\dagger\rho_S(\tau)+\rho_S(\tau)D_+D_+^\dagger - 2D_+^\dagger\rho_S(\tau)D_+\right)$$
$$- \frac{\gamma^\theta}{4}\left(D_-D_-^\dagger\rho_S(\tau)+\rho_S(\tau)D_-D_-^\dagger - 2D_-^\dagger\rho_S(\tau)D_-\right), \tag{46}$$

$$\gamma^\theta = 2\eta k_BT/\hbar \tag{47}$$

を与える一方で, 全体系 Hamiltonian が (1) の WD では, 回転波近似を施さない (42) でも, 施した (44) でも, (繰り込まれた Hamiltonian H_S^θ を除いて) 同じマスター方程式 (46) を与えるのである．ただし, WD では $\gamma^\theta = \Gamma(\Omega_0)\coth(\hbar\Omega_0/2k_BT)$ である．

回転波近似が実現されない RD のダイナミクスは, WD に比べて多様性をもっている．Spin-boson モデル (42) における Heisenberg 方程式, すなわち, Bloch 方程式を見てみよう．RD では, Heisenberg 方程式 (28) より,

$$\frac{d}{d\tau}\begin{pmatrix}\mathcal{D}_+^\theta(\tau)\\ \mathcal{D}_-^\theta(\tau)\\ \mathcal{D}_0^\theta(\tau)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\tilde{\Delta}^2+2\tilde{\varepsilon}^2)\gamma^\theta/2+i\Omega_0 & \tilde{\Delta}^2\gamma^\theta/2 & \tilde{\varepsilon}\tilde{\Delta}\gamma^\theta/2\\ \tilde{\Delta}^2\gamma^\theta/2 & -(\tilde{\Delta}^2+2\tilde{\varepsilon}^2)\gamma^\theta/2-i\Omega_0 & \tilde{\varepsilon}\tilde{\Delta}\gamma^\theta/2\\ \tilde{\varepsilon}\tilde{\Delta}\gamma^\theta & \tilde{\varepsilon}\tilde{\Delta}\gamma^\theta & -\tilde{\Delta}^2\gamma^\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathcal{D}_+^\theta(\tau)\\ \mathcal{D}_-^\theta(\tau)\\ \mathcal{D}_0^\theta(\tau)\end{pmatrix} \tag{48}$$

である．ただし, $D_0 = |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|$, $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/\hbar\Omega_0$. 一方 WD では, Bloch 方程式 (48) の行列は対角的であり, $\mathcal{D}_\pm^\theta(\tau)$, $\mathcal{D}_0^\theta(\tau)$ の緩和定数はそれぞれ $\gamma_D^\theta = \tilde{\Delta}\gamma^\theta/2$, $\gamma_R^\theta = \tilde{\Delta}\gamma^\theta$ で与えられる [8]. すなわち, WD においては, 二つの緩和定数の間に常に $\gamma_R^\theta = 2\gamma_D^\theta$ の関係が成立しているのである．スピン緩和の実験では必ずしもそうなってはいない．実験の解析にしばしば用いられる現象論的 Bloch 方程式には, いわゆる縦緩和時間 $\tau_R = (\gamma_R^\theta)^{-1}$ と横緩和時間 $\tau_D = (\gamma_D^\theta)^{-1}$ という二つの独立な時間スケールが与えられている．これに対して RD では, Bloch 方程式 (48) の行列の固有値の実部で与えられる緩和時間の間には, WD の場合のような自明な関係は存在せず, より大きな自由度をもっているのである．この RD における Bloch 方程式に関しては, それ自身大変興味深いものであり, いずれどこかで報告する予定である．

最後に, ここでは確率極限 $\lambda \to 0$ における演算子の収束性といった事柄に関しては議論してこなかった．ここに与えた枠組みで物理における実際上の計算には十分であるが, この RD に対する確率極限近似が確立するためには, そのような数学的な事柄を明確にしなければならない．

本研究を発表する場を与えてくださった主催者の方々に, また, 研究集会において議論してくださった皆様に, 感謝致します．

参考文献

[1] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, Vol. 2 of *Series in Modern Condensed Matter Physics* (World Scientific, Singapore, 1993).

[2] C. W. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise*, 2nd ed. (Springer-Verlag, Heidelberg, 2000).

[3] R. P. Feynman and F. L. Vernon, Jr., Ann. Phys. (N.Y.) **24**, 118 (1963); R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).

[4] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Physica A **121**, 587 (1983); **130**, 374(E) (1985).

[5] B. L. Hu, J. P. Paz, and Y. Zhang, Phys. Rev. D **45**, 2843 (1992); **47**, 1576 (1993).

[6] D. F. Walls and G. J. Milburn, *Quantum Optics* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1994); M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).

[7] L. Accardi, A. Frigerio, and Y. G. Lu, Commun. Math. Phys. **131**, 537 (1990); L. Accardi, J. Gough, and Y. G. Lu, Rep. Math. Phys. **36**, 155 (1995); L. Accardi, S. V. Kozyrev, and I. V. Volovich, Phys. Lett. A **260**, 31 (1999); L. Accardi, Y. G. Lu, and I. V. Volovich, *Quantum Theory and Its Stochastic Limit* (Oxford University Press, London, in press).

[8] L. Accardi, S. V. Kozyrev, and I. V. Volovich, Phys. Rev. A **56**, 2557 (1997).

[9] L. van Hove, Physica **21**, 517 (1955); E. B. Davies, Commun. Math. Phys. **39**, 91 (1974); I. Ojima, J. Stat. Phys. **56**, 203 (1989).

[10] P. F. Palmer, J. Math. Phys. **18**, 527 (1977); H. Spohn, Rev. Mod. Phys. **52**, 569 (1980).

[11] P. Facchi and S. Pascazio, Physica A **271**, 133 (1999); quant-ph/9910111.

[12] W. J. Munro and C. W. Gardiner, Phys. Rev. A **53**, 2633 (1996).

[13] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976); V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. **17**, 821 (1976).

[14] S. Gao, Phys. Rev. Lett. **79**, 3101 (1997); Phys. Rev. B **57**, 4509 (1998); L. Diósi, Europhys. Lett. **22**, 1 (1993); A. Tameshtit and J. E. Sipe, Phys. Rev. Lett. **77**, 2600 (1996); B. Vacchini, Phys. Rev. Lett. **84**, 1374 (2000).

[15] M. Rosenau da Costa, A. O. Caldeira, S. M. Dutra, and H. Westfahl, Jr., Phys. Rev. A **61**, 022107 (2000).

[16] H. Umezawa, *Advanced Field Theory: Micro, Macro, and Thermal Physics* (American Institute of Physics, New York, 1993); R. J. Rivers, *Path Integral Methods in Quantum Filed Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 1987).

[17] 湯浅一哉, submitted to 物性研究 (Bussei Kenkyu, Kyoto) for the proceedings of 第 8 回「非平衡系の統計物理」シンポジウム (筑波大学, 1999).

[18] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987).