# Master equation of the Lindblad form based on a microscopic Hamiltonian through stochastic limit approximation

早稲田大学大学院 理工学研究科
湯浅 一哉*

スピン緩和現象, デコヒーレンスといった話題を初めとし, 量子論における散逸現象の研究が盛んに行われている. その難しさ (そして, その面白さ) は, 非可逆な現象を時間反転対称な量子論でいかに記述するかという点にあると言えよう. 現在標準的となっているのは, 注目している系と相互作用する無限自由度の「環境系」をも含めた「全体系」の Hamiltonian を出発点として量子論を展開し, 環境系についての平均操作を経て, 注目系の非可逆ダイナミックスを導く理論である [1]. Caldeira と Leggett は, 環境系として無限個の調和振動子の集まりを採用したモデルを用いて量子 Brown 運動を定式化し, 量子散逸現象の研究に大きな影響をもたらした [2]. また, それ以前から, 量子光学の分野において大きな成功を収めている [3].[1)]

一方で, 環境系の詳細に立ち入ることはしない現象論的立場も存在する. 一般に密度行列演算子 $\rho(t)$ は $\rho^\dagger(t)=\rho(t)$ (Hermite 性), $\rho(t)\geq 0$ (確率の正値性),[2)] $\operatorname{tr}\dot{\rho}(t)=0$ (確率保存) という性質をもつべきであり, $\rho(t)$ が線形で Markov 的な時間発展をするならば, そのマスター方程式は Lindblad 型

$$\frac{d}{dt}\rho(t)=-\frac{i}{\hbar}[H,\rho(t)]-\frac{1}{2}\sum_{i,j}A_{ij}\left(L_iL_j^\dagger\rho(t)+\rho(t)L_iL_j^\dagger-2L_j^\dagger\rho(t)L_i\right) \tag{1}$$

であることが必要十分条件として示される [4]. ただし, $H$ は Hermite 演算子 ($H^\dagger=H$), $A_{ij}$ は Hermite で半正値の c 数行列 ($A_{ij}^*=A_{ji}$, $A\geq 0^{1)}$), $L_i$ は任意の演算子である. そこで, この形のマスター方程式を理論の出発点にしようというのである [5–9]. von Neumann 方程式には見られない "散逸項" の存在により, 散逸現象を記述することができる. また, Caldeira と Leggett が, 高温近似, Markov 近似の下に導出したマスター方程式 [2] は Lindblad 型になっておらず, その帰結として密度行列演算子の正値性が保証されないことが知られているが [7,10–13], この立場では初めからその困難に悩まされることはない.

ただ, この Lindblad 型のマスター方程式を出発点とする理論では, $H$, $L_i$, $A_{ij}$ として何を採用するかということが問題となる [7,8]. それらの選択が物理モデルを決めることになるが, Lindblad の数学理論はその指針までは与えない. 通常は, その解析的取り扱いの容易さのために, 調和振動子系 $H_0=p^2/2m+m\omega^2x^2/2$ に対して $H=H_0+\mu(xp+px)/2$, $L_i=a_ix+ib_ip$, $A_{ij}=\delta_{ij}$ ($i,j=1,2$; $\mu$ は実の, $a_i$, $b_i$ は複素の定数) を仮定した, $x$, $p$ についてたかだか 2 次であるマスター方程式で議論しているのが現状である [6].[3)]

$H$, $L_i$, $A_{ij}$ は物理的にはどのようなものであろうか. 本稿では, 全体系の Hamiltonian から出発する微視的立場から基礎付けることで, それらの物理的構造を見ることにしよう.

---

*E-mail: yuasa@hep.phys.waseda.ac.jp

1) 注目している原子に対し, それと相互作用する電磁場が, ここで言う環境系という位置付けとなる.

2) 固有値がゼロ以上という意味.

3) 定数 $\mu$, $a_i$, $b_i$ を適当に選ぶと, 量子光学において導出されるマスター方程式 [3] を再現する [6]. 式 (38) を参照.

ここで基礎とするのは, 次の Hamiltonian である.

$$H_{\rm tot} = H_0 + \lambda V, \quad H_0 = H_S + H_B, \tag{2}$$

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

$$V = i\hbar \sum_m \sum_n \int_0^\infty d\omega \left( g_{mn}(\omega) D_{mn} a_\omega - g_{mn}^*(\omega) D_{mn}^\dagger a_\omega^\dagger \right), \quad D_{mn} = |m\rangle\langle n|. \tag{4}$$

エネルギー固有値 $E_n\,(n = 0, 1, \ldots)$ をもつ注目系 $H_S$ が環境 Boson 場 $H_B$ と $\lambda V$ で線形相互作用するモデルである. $g_{mn}(\omega)$ は, エネルギーが $\hbar\omega$ の Boson を吸収して, 注目系の状態が $n$ 番目のエネルギー準位から $m$ 番目の準位へと遷移する過程の結合定数であり,[4] $\lambda$ は相互作用の強さを特徴付ける実定数である. 特に回転波近似 (rotating wave approximation) をとるようなことはしていない. この Hamiltonian により, 全体系の密度行列演算子 $\rho_{\rm tot}(t)$ の時間発展が決まるが, その詳細に興味のない環境系に関しては, あらゆる状態について足し上げる平均操作を行い, 注目系の密度行列演算子

$$\rho_S(t) = {\rm tr}_B\, \rho_{\rm tot}(t) \tag{5}$$

の時間発展に注目する. その際, 初期時刻においては

$$\rho_{\rm tot} = \rho_S \otimes \rho_B, \quad \rho_B = e^{-\beta H_B} / {\rm tr}_B\, e^{-\beta H_B} \tag{6}$$

のように, 注目系と環境系との間には相関がなく, 環境系は温度 $T$ の熱平衡状態にあるものとする. $\beta = 1/k_B T$ である.

こうして導かれる $\rho_S(t)$ に対するマスター方程式が Lindblad 型マスター方程式 (1) の形をしていれば, Hamiltonian (2)-(4) の構成要素によって表現された $H$ や $L_i$, $A_{ij}$ が得られるという寸法であるが, そのようにはならない. 一般に $\rho_S(t)$ の時間発展は Markov 的でないからである. そこで, ここでの目的のために, メモリーを無視できるような巨視的時間スケールへ移行しよう. van Hove 極限 (van Hove limit) [14-17] によって時間の粗視化をおこなうことにする.

$$t \mapsto \tau = \lambda^2 t, \quad \lambda \to 0. \tag{7}$$

新しい時間 $\tau$ で見た時間発展は, Markov 的となる.

ここでは, この van Hove 極限を取り扱う手法として, Accardi *et al.* の確率極限近似 (stochastic limit approximation) の方法 [18] を用いることにする. 出発点は, 相互作用描像の時間発展演算子 $U_I^{(\lambda)}(t)$ に対する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I^{(\lambda)}(t) = \lambda V_I(t)\, U_I^{(\lambda)}(t), \quad U_I^{(\lambda)}(0) = 1, \tag{8}$$

$$V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} = i\hbar \sum_m \sum_n \left( D_{mn} A_{mn}(t) - D_{mn}^\dagger A_{mn}^\dagger(t) \right), \tag{9}$$

$$A_{mn}(t) = \int_0^\infty d\omega\, g_{mn}(\omega) a_\omega e^{-i(\omega - \omega_{mn})t}, \quad \omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar \tag{10}$$

[4] $g_{mn}^*(\omega)$ は, 逆に, 注目系の状態が $m$ 番目のエネルギー準位から $n$ 番目の準位へと遷移して, エネルギーが $\hbar\omega$ の Boson を放出する過程の結合定数.

である. ここで時間のスケール変換 $t \mapsto \tau = \lambda^2 t$ をおこない,

$$\frac{d}{d\tau}U_I^{(\lambda)}(\tau/\lambda^2) = \sum_m \sum_n \left(D_{mn}\frac{1}{\lambda}A_{mn}(\tau/\lambda^2) - D_{mn}^\dagger \frac{1}{\lambda}A_{mn}^\dagger(\tau/\lambda^2)\right) U_I^{(\lambda)}(\tau/\lambda^2), \tag{11}$$

弱結合極限 (weak coupling limit) $\lambda \to 0$ をとるわけであるが, まず, 環境系の演算子 $A_{mn}(\tau/\lambda^2)/\lambda$ の交換関係を見ておこう (Appendix A) [18].

$$\left[\frac{1}{\lambda}A_{mn}(\tau/\lambda^2), \frac{1}{\lambda}A_{m'n'}^\dagger(\tau'/\lambda^2)\right] \to \Gamma_{mn,m'n'}(\omega_{mn})\,\delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}}\delta(\tau-\tau'). \tag{12}$$

これはまさに, van Hove 極限によって環境系の相関時間が見えなくなるような巨視的時間スケールへ移行したことを意味している. ただし,

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

はいわゆるスペクトル関数である [$\Gamma_{mn,m'n'}(\omega) = 0$ for $\omega \le 0$ としている]. 形式的に $U_I^{(\lambda)}(\tau/\lambda^2) \to \mathcal{U}_I(\tau)$, $A_{mn}(\tau/\lambda^2)/\lambda \to b_{mn}(\tau)$ として, Schrödinger 方程式 (11), 交換関係 (12) を

$$\frac{d}{d\tau}\mathcal{U}_I(\tau) = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{V}_I(\tau)\mathcal{U}_I(\tau), \quad \mathcal{V}_I(\tau) = i\hbar \sum_m \sum_n \left(D_{mn}b_{mn}(\tau) - D_{mn}^\dagger b_{mn}^\dagger(\tau)\right), \tag{14}$$

$$[b_{mn}(\tau), b_{m'n'}^\dagger(\tau')] = \Gamma_{mn,m'n'}(\omega_{mn})\,\delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}}\delta(\tau-\tau') \tag{15}$$

と書くことにしよう. 熱平衡状態 $\rho_B = e^{-\beta H_B}/\operatorname{tr}_B e^{-\beta H_B}$ における相関関数も同様で,

$$\langle b_{mn}(\tau) b_{m'n'}^\dagger(\tau')\rangle_{\text{th}} = \Gamma_{mn,m'n'}^+(\omega_{mn})\,\delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}}\delta(\tau-\tau'), \tag{16}$$

$$\langle b_{mn}^\dagger(\tau) b_{m'n'}(\tau')\rangle_{\text{th}} = \left(\Gamma_{mn,m'n'}^-(\omega_{mn})\right)^* \delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}}\delta(\tau-\tau') \tag{17}$$

で与えられる. ただし,

$$\Gamma_{mn,m'n'}^+(\omega) = \left(1+n(\omega)\right)\Gamma_{mn,m'n'}(\omega), \quad \Gamma_{mn,m'n'}^-(\omega) = n(\omega)\Gamma_{mn,m'n'}(\omega) \tag{18}$$

であり,

$$n(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} \tag{19}$$

は Bose 分布関数である.

次に, Schrödinger 方程式 (14) をもとに, 注目系の演算子

$$\mathcal{D}_{mn}^I(\tau) = \operatorname{tr}_B\left(\rho_B \mathcal{U}_I^\dagger(\tau) D_{mn}\mathcal{U}_I(\tau)\right) \tag{20}$$

の時間発展方程式 (Heisenberg 方程式) を導こう. まずは, $T=0$, すなわち, $\rho_B = |0\rangle\langle 0|$ の場合を考える. この場合,「$b_{mn}(\tau)$ は右へ, $b_{mn}^\dagger(\tau)$ は左へ」という操作 (normal-ordering) によって, $\operatorname{tr}_B$ の計算をおこなうことができる. 特に, $b_{mn}(\tau)$ と $\mathcal{U}_I(\tau)$, $b_{mn}^\dagger(\tau)$ と $\mathcal{U}_I^\dagger(\tau)$ の交換ができればよい. それらの交換関係は, van Hove 極限において実は求めることができて (Appendix B) [18],

$$[b_{mn}(\tau), \mathcal{U}_I(\tau)] = \left([\mathcal{U}_I^\dagger(\tau), b_{mn}^\dagger(\tau)]\right)^\dagger = -\sum_{m'}\sum_{n'} \delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}} i\Sigma_{mn,m'n'}(\omega_{mn}) D_{m'n'}^\dagger \mathcal{U}_I(\tau) \tag{21}$$

で与えられる. ここで, $\Sigma_{mn,m'n'}(\omega)$ は

$$i\Sigma_{mn,m'n'}(\omega) = \int_0^\infty \frac{d\omega'}{2\pi}\,\Gamma_{mn,m'n'}(\omega')\frac{-i}{\omega'-\omega-i\epsilon} = \frac{1}{2}\Gamma_{mn,m'n'}(\omega) + i\Delta_{mn,m'n'}(\omega), \tag{22}$$

$$\Delta_{mn,m'n'}(\omega)=\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{d\omega'}{2\pi}\,\Gamma_{mn,m'n'}(\omega')\frac{1}{\omega-\omega'} \tag{23}$$

であるが, これは自己エネルギー (self-energy) の $\lambda^2$ についての摂動展開の最低次[5)]であることを抑えておこう. van Hove 極限は, 自己エネルギーの最低次を抽出する処方であると言うことができるが [17], 確率極限近似では, それがここに見られているのである. 有限温度の場合も, TFD (Thermo Field Dynamics) [19] のテクニックを用いれば全く同様である. TFD では, 熱平衡状態は熱的真空 (thermal vacuum) という純粋状態 $|\theta\rangle$ であるので, それを消滅する演算子と $\mathcal{U}_I(\tau)$ との交換関係を同様に求めればよい. その交換関係を用いると, $\mathcal{D}^I_{mn}(\tau)$ に対する Heisenberg 方程式が

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\tau}\mathcal{D}^I_{mn}(\tau)&=-\sum_l\left(\frac{1}{2}\Gamma^\theta_{nl,nl}+i\Delta^\theta_{nl,nl}\right)\mathcal{D}^I_{mn}(\tau)\\&\quad-\sum_k\left(\frac{1}{2}\Gamma^\theta_{mk,mk}-i\Delta^\theta_{mk,mk}\right)\mathcal{D}^I_{mn}(\tau)+\sum_k\sum_l\delta_{\omega_{km}\omega_{ln}}\Gamma^\theta_{km,ln}\mathcal{D}^I_{kl}(\tau)\end{aligned} \tag{24}$$

と得られる. ただし,

$$\Gamma^\theta_{mn,m'n'}(\omega)=\Gamma^+_{mn,m'n'}(\omega)+\left(\Gamma^-_{nm,n'm'}(-\omega)\right)^*, \tag{25}$$

$$\Delta^\theta_{mn,m'n'}(\omega)=\Delta^+_{mn,m'n'}(\omega)-\left(\Delta^-_{nm,n'm'}(-\omega)\right)^*,\quad \Delta^\pm_{mn,m'n'}(\omega)=\mathcal{P}\int_0^\infty\frac{d\omega'}{2\pi}\,\Gamma^\pm_{mn,m'n'}(\omega')\frac{1}{\omega-\omega'} \tag{26}$$

であり, 引数を省略した場合は, $\Gamma^\theta_{mn,m'n'}=\Gamma^\theta_{mn,m'n'}((\omega_{mn}+\omega_{m'n'})/2)$ である ($\Delta^\theta_{mn,m'n'}$ も同様).

この Heisenberg 方程式 (24) は, 直ちに, 注目系

$$\rho^I_S(\tau)=\mathrm{tr}_B\,\rho^I_{\mathrm{tot}}(\tau),\quad \rho^I_{\mathrm{tot}}(\tau)=\mathcal{U}_I(\tau)\rho_{\mathrm{tot}}\,\mathcal{U}^\dagger_I(\tau) \tag{27}$$

に対するマスター方程式を与える. $\mathrm{tr}_S(\rho_S\mathcal{D}^I_{mn}(\tau))=\langle n|\rho^I_S(\tau)|m\rangle$ により, Heisenberg 方程式 (24) は $\rho^I_S(\tau)$ の行列要素に対する方程式に焼き直されるからである. こうして, Hamiltonian (2)–(4) を基礎とするマスター方程式

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\tau}\rho^I_S(\tau)&=-i[\Delta^\theta,\rho^I_S(\tau)]\\&\quad-\frac{1}{2}\sum_{k,m}\sum_{l,n}\delta_{\omega_{km}\omega_{ln}}\Gamma^\theta_{km,ln}\left(L_{km}L^\dagger_{ln}\rho^I_S(\tau)+\rho^I_S(\tau)L_{km}L^\dagger_{ln}-2L^\dagger_{ln}\rho^I_S(\tau)L_{km}\right),\end{aligned} \tag{28}$$

$$L_{km}=|k\rangle\langle m|,\quad \Delta^\theta=\sum_n\sum_l\Delta^\theta_{nl,nl}|n\rangle\langle n|=(\Delta^\theta)^\dagger \tag{29}$$

が導かれた. しかも, これは Lindblad 型マスター方程式 (1) のクラスに属するマスター方程式である. Lindblad 型マスター方程式 (1) の $H$ にあたる $\hbar\Delta^\theta$ は Hermite, $A_{ij}$ にあたる $\delta_{\omega_{km}\omega_{ln}}\Gamma^\theta_{km,ln}$ は Hermite で半正値という条件を, それぞれ満足しているからである.

そして, $H$ や $A_{ij}$ の物理的構造が Hamiltonian (2)–(4) を基礎として与えられたことで, それぞれの物理的内容が明確になった. $\hbar\Delta^\theta$ は自己エネルギー $\Sigma^\theta_{km,ln}(\omega)=\Delta^\theta_{km,ln}(\omega)-i\Gamma^\theta_{km,ln}(\omega)/2$ の Hermite 部 $\Delta^\theta_{km,ln}(\omega)=\{\Sigma^\theta_{km,ln}(\omega)+(\Sigma^\theta_{ln,km}(\omega))^*\}/2$ から成り, 環境系との相互作用に伴うエネルギー・シフト

$$E_n\mapsto E_n+\sum_l\hbar\Delta^\theta_{nl,nl} \tag{30}$$

[5)]Boson が飛ぶ 1-loop.

を与える．一方，散逸項の $\delta_{\omega_{km}\omega_{ln}}\Gamma^{\theta}_{km,ln}$ は自己エネルギー $\Sigma^{\theta}_{km,ln}(\omega)$ の反 Hermite 部 $\Gamma^{\theta}_{km,ln}(\omega) = i\{\Sigma^{\theta}_{km,ln}(\omega) - (\Sigma^{\theta}_{ln,km}(\omega))^*\}/2$ から成り，特に $\Gamma^{\theta}_{mk,mk}$ は，注目系が $m$ 番目のエネルギー準位から $k$ 番目の準位へと遷移する，単位時間あたりの確率を与える．このことは，密度行列演算子 $\rho^I_S(\tau)$ の行列要素 $\rho_{mn}(\tau) = \langle m|\rho^I_S(\tau)|n\rangle$ の対角成分に対する方程式

$$\frac{d}{d\tau}\rho_{mm}(\tau) = \sum_n F_{mn}\,\rho_{nn}(\tau) = -\sum_{k\neq m}\Gamma^{\theta}_{mk,mk}\,\rho_{mm}(\tau) + \sum_{k\neq m}\Gamma^{\theta}_{km,km}\,\rho_{kk}(\tau) \tag{31}$$

を見ると分かる．さらに，$\Gamma_{mn,m'n'}(\omega) = 0$ for $\omega \leq 0$ に注意すると，$\Gamma^{\theta}_{mk,mk} = \Gamma^{+}_{mk,mk}$ for $m > k$，そして，$\Gamma^{\theta}_{mk,mk} = \Gamma^{-}_{km,km}$ for $m < k$ であり，$\Gamma^{+}_{mk,mk}$，$\Gamma^{-}_{km,km}$ が，それぞれ，エネルギー $\hbar\omega_{mk}$ を放出する確率，$\hbar\omega_{km}$ を吸収する確率を意味することが分かる．そして，放出確率 $\Gamma^{+}_{mk,mk} = (1 + n(\omega_{mk}))\Gamma_{mk,mk}$ は，自発放出 (spontaneous emission) の $\Gamma_{mk,mk}$ と誘導放出 (induced emission) の $n(\omega_{mk})\Gamma_{mk,mk}$ とから成る.[6)]

この，エネルギーを放出して $m$ から $k$ へ出ていく確率 $\Gamma^{+}_{mk,mk}$ と，エネルギーを吸収して $k$ から $m$ へ入ってくる確率 $\Gamma^{-}_{mk,mk}$ との間のつり合い

$$\Gamma^{+}_{mk,mk} = \Gamma^{-}_{mk,mk}\,e^{\beta\hbar\omega_{mk}} \quad \text{for} \quad m > k \tag{32}$$

は，正準状態 $e^{-\beta H_S}/\,\mathrm{tr}_S\,e^{-\beta H_S}$ が平衡状態であることを保証する (詳細つり合いの条件: detailed balance condition) [8,20]．また，その状態から外れている場合には，マスター方程式 (28) にしたがってそれへ向かっていくことを示すことができる．実際，対角成分に関しては，方程式 (31) の Fokker–Planck 行列 $F$ が半負値 ($F \leq 0$) であり，その最大固有値 0 に属する固有ベクトル $\boldsymbol{u}_0$ が $(u_0)_n = e^{-\beta\hbar\omega_n}$ であることから，対角成分は初期状態に依ることなく，

$$\rho_{nn}(\tau) \to e^{-\beta\hbar\omega_n}/\sum_l e^{-\beta\hbar\omega_l} \quad \text{as} \quad \tau\to\infty \tag{33}$$

となることが示される (Appendix C)．また，非対角成分 $\rho_{mn}(\tau)\,(m\neq n)$ については，$\omega_{mn} \neq \omega_{kl}$ for $(m,n)\neq(k,l)$ の場合には容易で，

$$\frac{d}{d\tau}\rho_{mn}(\tau) = -\sum_k\left(\frac{1}{2}\Gamma^{\theta}_{mk,mk} + i\Delta^{\theta}_{mk,mk}\right)\rho_{mn}(\tau) - \sum_l\left(\frac{1}{2}\Gamma^{\theta}_{nl,nl} - i\Delta^{\theta}_{nl,nl}\right)\rho_{mn}(\tau) \tag{34}$$

より，

$$\rho_{mn}(\tau) \to 0 \quad \text{as} \quad \tau\to\infty \quad \text{for} \quad m\neq n \tag{35}$$

を得る．いわゆるデコヒーレンスである．(33) と (35) とは，まさに，

$$\rho^I_S(\tau) \to e^{-\beta H_S}/\,\mathrm{tr}_S\,e^{-\beta H_S} \quad \text{as} \quad \tau\to\infty \tag{36}$$

を意味している．正準状態へ向かうのである．ここでは，$e^{-\beta H_S}/\,\mathrm{tr}_S\,e^{-\beta H_S}$ が単なる定常状態であるだけでなく，初期条件に依ることなく到達する熱平衡状態であることを示したということを強調しておく．Lindblad 型マスター方程式 (1) から出発する現象論的立場において，この詳細つり合いの条件を課すことで $H$, $A_{ij}$, $L_i$ に対して物理的な拘束を与えようという議論が [8] でなされている．

最後に簡単な例を与えておこう．調和振動子系が環境と線形相互作用するモデルである．

$$H_S = \hbar\Omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right), \quad V = i\hbar(a + a^\dagger)\int_0^\infty d\omega\left(g(\omega)a_\omega - g^*(\omega)a^\dagger_\omega\right). \tag{37}$$

6) 吸収 $\Gamma^{-}_{km,km} = n(\omega_{km})\Gamma_{km,km}$ に関しては，誘導吸収 (induced absorption) のみ．

この場合, $g_{mn}(\omega) = \langle m|a + a^\dagger|n\rangle g(\omega)$ に注意すると, マスター方程式 (28) は

$$\frac{d}{d\tau}\rho_S^I(\tau) = -i[\Delta^\theta, \rho_S^I(\tau)] - \frac{1}{2}\Gamma^+(\Omega)\left(a^\dagger a\rho_S^I(\tau) + \rho_S^I(\tau)a^\dagger a - 2a\rho_S^I(\tau)a^\dagger\right) - \frac{1}{2}\Gamma^-(\Omega)\left(aa^\dagger\rho_S^I(\tau) + \rho_S^I(\tau)aa^\dagger - 2a^\dagger\rho_S^I(\tau)a\right), \tag{38}$$

$$\Delta^\theta = \Delta^\theta(\Omega)a^\dagger a + \Delta^\theta(-\Omega)aa^\dagger \tag{39}$$

となる. ただし, $\Gamma^\pm(\omega)$ や $\Delta^\theta(\omega)$ は, 添え字がなくなっただけで, これまでと同様. 量子光学においてよく見られるマスター方程式である [3]. ここでは, $aa_\omega$, $a^\dagger a_\omega^\dagger$ という相互作用項 (counter-rotating term) を含むモデルを考えたが, 量子光学では通常, それらを含まない回転波近似のモデルを用いる. その場合でも, マスター方程式は, 振動数シフト $\Delta^\theta$ の表式 $[\Delta^\theta = \Delta^+(\Omega)a^\dagger a - \Delta^-(\Omega)aa^\dagger]$ を除いて, (38) と同じである. これまでの議論より明らかなように, $\Gamma^+(\Omega)$ の項はエネルギー放出, $\Gamma^-(\Omega)$ の項はエネルギー吸収の項である.

このマスター方程式は, $a$, $a^\dagger$ $(x, p)$ についてたかだか 2 次である. すなわち, 初めに述べたように現象論的立場においてよく用いられる, 便宜上 $L_i = a_i x + ib_i p$ と置いた Lindblad 型マスター方程式である. 逆に言うと, 現象論的立場において用いているこの形の Lindblad 型マスター方程式の背景には, Hamiltonian (37) というモデルがあると言えよう. ただし, そのモデルは一意的であるとは限らない. 実際, 回転波近似のモデルでもマスター方程式は同形である.

ところで, Hamiltonian (37) は, Caldeira と Leggett が議論したモデルのひとつの例であるが [2], 彼らが高温, Markov 近似において導出したマスター方程式

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[H_S', \rho_S(t)] - \frac{M\gamma k_B T}{2\hbar^2}[x, [x, \rho_S(t)]] - \frac{i\gamma}{4\hbar}[x, \{p, \rho_S(t)\}] \tag{40}$$

は, ここで導いたマスター方程式 (38) とは異なる.[7] ただし, $\gamma$ は $\Gamma(\Omega)$ に対応する減衰係数, $M$ は繰り込まれた Hamiltonian が $H_S'$ で与えられる注目系粒子の質量である. この相違は, 想定している状況が異なるからであると理解される [1,11]. ここで想定しているのは, 弱い散逸の状況である. 実際, 注目系の振動数 $\Omega$ はスケールされた $\tau$ の時間では $\Omega/\lambda^2$ であり, $\lambda \to 0$ の van Hove 極限においては $\Gamma(\Omega) \ll \Omega/\lambda^2$ という, 減衰が注目系の時間変動を特徴付ける振動に対して圧倒的に遅い状況である. これに対して Caldeira と Leggett の状況は, 散逸と系の時間変動とが同程度な, $\gamma \sim \Omega$ という状況でなのである [1,11]. この後者の状況を van Hove 極限で扱うには, ここで用いた通常の弱結合極限とは異なる極限を考えなければならない. Hamlitonian としては, (2) のかわりに,

$$H = \lambda^2 H_S + \lambda V + H_B \tag{41}$$

である [21]. この場合の van Hove 極限を取り扱う確率極限近似を確立することは課題である. また, 最初に触れたように, Caldeira と Leggett のマスター方程式 (40) は Lindblad 型でない [7,10–13]. もちろんそのことは, 彼らが用いた近似の適用範囲内では問題とはならないが [11], Hamiltonian (41) の状況の van Hove 極限によって導かれるマスター方程式が Lindblad 型であるか否か, Caldeira と Leggett のマスター方程式 (40) が導かれるか否かは, 興味あるところである [22].

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. 本研究は, 共同研究者である今福健太郎博士との議論が柱となっております.

[7] マスター方程式 (38) において, $a = (p - iM\Omega x)/\sqrt{2M\hbar\Omega}$ としてみよ. Caldeira と Leggett のマスター方程式 (40) にはない $[p, [p, \rho_S(t)]]$ と $[p, \{x, \rho_S(t)\}]$ の項が存在する.

## Appendix A: Stochastic Limit Approximation and Delta-Correlation

式 (10) で定義される環境系の演算子 $A_{mn}(t)$ の交換関係は

$$[A_{mn}(t), A^{\dagger}_{m'n'}(t')] = \phi_{mn,m'n'}(t-t')\, e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})(t+t')/2}, \tag{A.1}$$

$$\phi_{mn,m'n'}(t) = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, \Gamma_{mn,m'n'}(\omega)\, e^{-i\{\omega-(\omega_{mn}+\omega_{m'n'})/2\}t}, \quad \Gamma_{mn,m'n'}(\omega) = 2\pi g_{mn}(\omega) g^{*}_{m'n'}(\omega) \tag{A.2}$$

である．ここで，$\Gamma_{mn,m'n'}(\omega) = 0$ for $\omega \leq 0$ として，

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, \Gamma_{mn,m'n'}(\omega) \frac{1}{\lambda^2} e^{-i(\omega-\omega_0)\tau/\lambda^2} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi}\, \Gamma_{mn,m'n'}(\omega_0 + \lambda^2 x) e^{-ix\tau} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \left( \Gamma_{mn,m'n'}(\omega_0) + \lambda^2 x \Gamma'_{mn,m'n'}(\omega_0) + \cdots \right) e^{-ix\tau} \\ &= \left\{ \Gamma_{mn,m'n'}(\omega_0) + \lambda^2 \Gamma'_{mn,m'n'}(\omega_0) \left( i\frac{\partial}{\partial\tau} \right) + \cdots \right\} \delta(\tau)\end{aligned} \tag{A.3}$$

に注意すると, van Hove 極限 $\lambda \to 0$ において

$$\frac{1}{\lambda^2} \phi_{mn,m'n'}(\tau/\lambda^2) \to \Gamma_{mn,m'n'}((\omega_{mn} + \omega_{m'n'})/2)\, \delta(\tau) \tag{A.4}$$

となることが示されるので [18], したがって, 交換関係は

$$\left[ \frac{1}{\lambda} A_{mn}(\tau/\lambda^2), \frac{1}{\lambda} A^{\dagger}_{m'n'}(\tau'/\lambda^2) \right] \to \Gamma_{mn,m'n'}(\omega_{mn})\, \delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}} \delta(\tau - \tau') \tag{A.5}$$

となる．ただし，$e^{i(\omega_{mn}-\omega_{m'n'})(\tau+\tau')/2\lambda^2} \to \delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}}$ とした．形式的に $A_{mn}(\tau/\lambda^2)/\lambda \to b_{mn}(\tau)$ と書くと，

$$[b_{mn}(\tau), b^{\dagger}_{m'n'}(\tau')] = \Gamma_{mn,m'n'}(\omega_{mn})\, \delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}} \delta(\tau - \tau'). \tag{A.6}$$

## Appendix B: Commutators for Normal-Ordering

$b_{mn}(\tau)$ と $\mathcal{U}_I(\tau)$ との交換関係を求めよう．Schrödinger 方程式 (14) を積分方程式

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

に書き換え，これと $b_{mn}(\tau)$ との交換関係を考える．

$$[b_{mn}(\tau), \mathcal{U}_I(\tau)] = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau} d\tau'\, [b_{mn}(\tau), \mathcal{V}_I(\tau')] \mathcal{U}_I(\tau') - \frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau} d\tau'\, \mathcal{V}_I(\tau')\, [b_{mn}(\tau), \mathcal{U}_I(\tau')]. \tag{B.2}$$

これは，交換関係 (A.6) を考慮すると $[b_{mn}(\tau), \mathcal{V}_I(\tau')] = 0$ for $\tau \neq \tau'$, $[b_{mn}(\tau), \mathcal{U}_I(\tau')] = 0$ for $\tau > \tau'$ であり,[8)]

$$[b_{mn}(\tau), \mathcal{U}_I(\tau)] = -\sum_{m'} \sum_{n'} \int_0^{\tau} d\tau'\, [b_{mn}(\tau), b^{\dagger}_{m'n'}(\tau')] D^{\dagger}_{m'n'} \mathcal{U}_I(\tau) \tag{B.3}$$

[8)] 積分方程式 (B.1) から逐次代入して得られる $\mathcal{U}_I(\tau) = \sum_{p=0}^{\infty} (-i/\hbar)^p \int_0^{\tau} d\tau_1 \cdots \int_0^{\tau_{p-1}} d\tau_p \mathcal{V}_I(\tau_1) \cdots \mathcal{V}_I(\tau_p)$ との交換関係を考えよ．

となる．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，van Hove 極限をとる前の交換関係 (A.1) に戻って改めて評価することで，

$$\int_0^\tau d\tau'\,\frac{1}{\lambda^2}\phi_{mn,m'n'}((\tau-\tau')/\lambda^2)=\int_0^{\tau/\lambda^2} dt'\,\phi_{mn,m'n'}(t')$$

$$\to\int_0^\infty dt'\,\phi_{mn,m'n'}(t')=\int_0^\infty\frac{d\omega'}{2\pi}\varGamma_{mn,m'n'}(\omega')\frac{-i}{\omega'-(\omega_{mn}+\omega_{m'n'})/2-i\epsilon} \tag{B.4}$$

を用いて，

$$[b_{mn}(\tau),\mathcal{U}_I(\tau)]=-\sum_{m'}\sum_{n'}\delta_{\omega_{mn}\omega_{m'n'}}\,i\varSigma_{mn,m'n'}(\omega_{mn})D^\dagger_{m'n'}\mathcal{U}_I(\tau), \tag{B.5}$$

$$i\varSigma_{mn,m'n'}(\omega)=\int_0^\infty\frac{d\omega'}{2\pi}\varGamma_{mn,m'n'}(\omega')\frac{-i}{\omega'-\omega-i\epsilon}=\frac{1}{2}\varGamma_{mn,m'n'}(\omega)+i\varDelta_{mn,m'n'}(\omega), \tag{B.6}$$

$$\varDelta_{mn,m'n'}(\omega)=\mathcal{P}\int_0^\infty\frac{d\omega'}{2\pi}\varGamma_{mn,m'n'}(\omega')\frac{1}{\omega-\omega'} \tag{B.7}$$

を得る．ただし，

$$\int_0^\infty dt\,e^{-i(\omega'-\omega)t}=\frac{-i}{\omega'-\omega-i\epsilon}=\pi\delta(\omega'-\omega)-i\mathcal{P}\frac{1}{\omega'-\omega} \tag{B.8}$$

である．

## Appendix C: Negative Semi-Definiteness of the Fokker–Planck Matrix $F$ and Thermalization

対角成分に対する方程式 (31) を

$$\frac{d}{d\tau}\boldsymbol{\rho}(\tau)=F\boldsymbol{\rho}(\tau),\quad F_{mn}=-\delta_{mn}\sum_k\varGamma^\theta_{mk,mk}+\varGamma^\theta_{nm,nm} \tag{C.1}$$

と行列表記することにする．Fokker–Planck 行列 $F$ は，相似変換により対称化することができ，

$$\bar{F}=UFU^{-1},\quad U_{mn}=\delta_{mn}e^{\beta\hbar\omega_m/2}, \tag{C.2}$$

$$\bar{F}_{mn}=-\delta_{mn}\sum_k\varGamma^\theta_{mk,mk}+\varGamma^\theta_{nm,nm}e^{-\beta\hbar\omega_{nm}/2}=\bar{F}_{nm}, \tag{C.3}$$

さらに，この対称行列 $\bar{F}$ は，

$$\bar{F}=-Q^\dagger Q \tag{C.4}$$

と分解することができる．$Q$ は，例えば，

$$\bar{F}_{mn}=\sum_{k>l}Q^*_{kl,m}Q_{kl,n},\quad Q_{kl,n}=\sqrt{\varGamma^\theta_{kl,kl}}\,\delta_{kn}-\sqrt{\varGamma^\theta_{lk,lk}}\,\delta_{ln}. \tag{C.5}$$

式(C.4)は, Fokker–Planck 行列 $F$ の固有値がゼロ以下であること ($F \le 0$) を示している. これは, 対角成分が初期条件に依ることなく, Fokker–Planck 行列 $F$ の最大固有値0に属する固有ベクトル $\boldsymbol{u}_0$ ($F\boldsymbol{u}_0 = 0$) に向かうことを意味する.

$$\boldsymbol{\rho}(\tau) = e^{F\tau}\boldsymbol{\rho}(0) \to C\boldsymbol{u}_0 \quad \text{as} \quad \tau \to \infty. \tag{C.6}$$

$C$ は規格化定数である. その固有ベクトル $\boldsymbol{u}_0$ は

$$Q\bar{\boldsymbol{u}}_0 = 0, \quad \bar{\boldsymbol{u}}_0 = U\boldsymbol{u}_0 \tag{C.7}$$

より決まって

$$(u_0)_n = e^{-\beta\hbar\omega_n} \tag{C.8}$$

であり, 対角成分は長時間極限で

$$\rho_{nn}(\tau) \to e^{-\beta\hbar\omega_n} \Big/ \sum_l e^{-\beta\hbar\omega_l} \quad \text{as} \quad \tau \to \infty \tag{C.9}$$

となる.

## 参考文献


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

[2] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Physica A **121** (1983) 587; **130** (1985) 374(E); Ann. Phys. (N.Y.) **149** (1983) 374; **153** (1984) 445(E).

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

[4] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **40** (1975) 147; **48** (1976) 119; V. Gorini, A. Kossakowski and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. **17** (1976) 821.

[5] G. Lindblad, Rep. Math. Phys. **10** (1976) 393.

[6] A. Sandulescu and H. Scutaru, Ann. Phys. (N.Y.) **173** (1987) 277; A. Isar, A. Sandulescu and W. Scheid, J. Phys. G **17** (1991) 385; J. Math. Phys. **34** (1993) 3887; Int. J. Mod. Phys. B **10** (1996) 2767; Phys. Rev. E **60** (1999) 6371; A. Isar, W. Scheid and A. Sandulescu, J. Math. Phys. **32** (1991) 2128; A. Isar, Helv. Phys. Acta **67** (1994) 436; Helv. Phys. Acta **68** (1995) 225.

[7] S. Gao, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 3101; Phys. Rev. B **57** (1998) 4509.

[8] A. K. Rajagopal, Phys. Lett. A **246** (1998) 237.

[9] A. K. Rajagopal, Physica A **253** (1998) 271.

[10] L. Diósi, Europhys. Lett. **22** (1993) 1.

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

[12] A. Tameshtit and J. E. Sipe, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 2600.

[13] B. Vacchini, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 1374.

[14] L. van Hove, Physica **21** (1955) 517.

[15] E. B. Davies, Commun. Math. Phys. **39** (1974) 91.

[16] I. Ojima, J. Stat. Phys. **56** (1989) 203.

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

[18] L. Accardi, A. Frigerio and Y. G. Lu, Commun. Math. Phys. **131** (1990) 537; L. Accardi, J. Gough and Y. G. Lu, Rep. Math. Phys. **36** (1995) 155; L. Accardi, S. V. Kozyrev and I. V. Volovich, Phys. Rev. A **56** (1997) 2557; L. Accardi, Y. G. Lu and I. V. Volovich, *Quantum Theory and Its Stochastic Limit* (Oxford University Press, London, in press).

[19] H. Umezawa (有光敏彦, 有光直子 訳), 場の量子論: ミクロ, マクロ, そして熱物理学の最前線 (培風館, 1995).

[20] M. Le Bellac, *Thermal Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).

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

[22] To be reported in 数理解析研究所考究録.