物性研究　79－1（2002－10）

修士論文（2001年度）

量子開放系のダイナミクスにおける完全正値性の役割

早稲田大学 大学院理工学研究科 物理学及び応用物理学専攻
大場・中里研　木村 元*1

目次

*1 Email address: gen@hep.phys.waseda.ac.jp

概要

量子開放系のダイナミクスに対する一般論に基づいた議論が展開される．そこでは状態を密度行列により特徴付け，状態空間上の 1 パラメータ写像として量子ダイナミクスが定義される．特にメモリーを引きずらない Markov 過程に着目し，力学的半群に対する考察を行なう．まずは von Neumann 方程式の超演算子と散逸部の超演算子が可換であるクラスと，Pauli マスター方程式，(現象論的) Bloch 方程式との関連性が示される．さらに詳細釣り合いの原理が成立することを証明する．続いて，ミクロな立場によるダイナミクスの考察 (縮約された力学) から完全正値性に関する議論を行なう．対象系が 2 準位系である場合，Gorini *et al.* の緩和時間に対する議論が一般化され，完全正値性を特徴付ける制約が示される．この制約が完全正値性，また縮約された力学に対する実験検証を与える可能性について議論する．また完全正値性と初期相関に関する考察もなされる．

記号の説明

以下の記号を説明無しに用いる．

- $\mathbb{C}, \mathbb{R}, \mathbb{Z}, \mathbb{N}$, をそれぞれ複素数，実数，整数，自然数の集合とする．また n 次元実 (複素) ベクトル空間を $\mathbb{R}^n$ $(\mathbb{C}^n)$, $n \times n$ 複素行列空間を $M(n)$ と記す．
- $c \in \mathbb{C}$ の絶対値，複素共役，実部，虚部に対してそれぞれ $|c|$, $\bar{c}$, $\mathrm{Re}\, c, \mathrm{Im}\, c$ を用いる．
- 任意の集合 S 上の単位演算子を $\mathbb{I}$ と記す．
- Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の元を，Dirac のケット表示 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ で表す．また，$|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ の内積を $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$, ノルムを $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \equiv ||\psi||$ と記す．
- Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の演算子 A の共役演算子を $A^\dagger$ と表す (ただし，Hilbert 空間上の演算子に作用する超演算子 Λ に対する共役演算子には Λ^* を用いる)．
- 「任意の A」，「B が存在する」に対し，それぞれ論理記号 $\forall A$, $\exists B$ を用いる．

また，本稿を通じてプランク定数は $\hbar = 1$, ボルツマン定数は $k_B = 1$ に統一する．

1　序論

量子力学では，系のハミルトニアン H が与えられるとそのダイナミクスは完全に決まる: 状態 $|\psi_t\rangle \in \mathcal{H}$ $(t \in \mathbb{R})$ は Schrödinger 方程式:

$$i\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle = H|\psi_t\rangle \tag{1}$$

に従い，ユニタリー発展をする [1]:

$$|\psi_t\rangle = U_t|\psi_0\rangle, U_t^\dagger U_t = U_t U_t^\dagger = \mathbb{I}. \tag{2}$$

ここで，H, U_t*2はそれぞれ $\mathcal{H}$ 上のハミルトニアン演算子，時間発展演算子，$\mathcal{H}$ は可分な Hilbert 空間である [2]．ユニタリー性は，確率解釈から要請される: 全確率が 1 であるために，量子状

*2 H が時間に依存しない場合は $U_t = \exp(-iHt)$, H が時間に依存する場合 $H = H_t$ は T 積 (時間順序積) を用いて，$U_t = T\exp[-i\int_0^t dt' H_{t'}]$.

態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ には規格化条件 $|\langle\psi|\psi\rangle|^2 = 1$ が課せられる; 初期時刻に規格化された任意の状態 $\forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ $(\langle\psi|\psi\rangle = 1)$ は, 時刻 t において $|\psi_t\rangle = U_t|\psi\rangle$ となり, 規格化条件が保たれるためには, $1 = \langle\psi_t|\psi_t\rangle = \langle\psi|U_t^\dagger U_t|\psi\rangle, \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Leftrightarrow U_t^\dagger U_t = U_t U_t^\dagger = \mathbb{I}$ となる [3].

これに反して本稿は, ユニタリー性がない現象を扱う枠組みに対して興味がある. 熱平衡状態への移行, 量子観測過程に伴う非干渉化等がその例である. 上述の議論は, これらの現象を量子論に基づいて説明するのは困難であるように思わせる. 特に, ユニタリー性が確率解釈によって要請されたことは, 非ユニタリー現象を扱うためには確率解釈が不可能であるかのようにも思われるかもしれない.

このようなジレンマを克服するために, まずは状態概念の一般化が必要とされる: **ユニタリー性が確率解釈から要請されたのは, 状態空間を Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の規格化されたベクトルによって与えるという前提に基づく**. 状態概念が一般化されることにより, ユニタリー性は確率解釈の産物でなくなる. 本稿では, Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ のベクトルから Hilbert 空間上のトレース 1 の正値演算子へと拡張した密度行列空間を量子状態空間として扱う. 第 2 節において密度行列を状態に用いることの意義, またその性質が詳細に説明される; そこでは, 古典統計描像や量子系の合成の際の状態概念に基づいて, 密度行列への拡張が自然に行なわれることが示される (第 2.1 節). さらに, 密度行列を数学的に特徴付け, 状態空間が明確に表される (第 2.2 節).

続いて, 第 3 節において密度行列空間上の時間発展が考察される: 密度行列に拡張された状態空間においては, ユニタリー性は確率解釈により要請されるものではない; この場合の確率解釈は, 密度行列空間を $\mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H})$*3, 時刻 t への時間発展演算子を Λ_t とすると,

$$\forall\rho \in \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H}) \Rightarrow \Lambda_t\rho \in \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H}) \tag{3}$$

となる. つまり, 「初期時刻において状態である任意の ρ は, 時刻 t においても状態になる」という要請である. この性質は, ユニタリー発展はもちろん, 非ユニタリー発展も含んでいる. **状態空間を密度行列によって表すとき, 確率解釈から要請される性質はユニタリー性でなく, 性質 (3) である***4. 熱平衡化や非干渉化された状態も密度行列により表され非ユニタリー発展を伴うが, もちろん確率解釈が破られるわけではない. 本稿では, 状態空間を密度行列の空間 $\mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H})$ とし, 実 1 パラメータ (時間 t) 写像で, 性質 (3) を満たすものとして量子ダイナミクスを定義する (第 3.1 節). つまり, 時間 t をパラメータとして持つ, 状態空間上の写像が時間発展演算子であると考える*5.

さて, 原子, スピン緩和など多くの現象は, 時間発展に対する局所性, すなわち Markov 性を備えている [4–6]. Markov 性は時間発展演算子 Λ_t に対し, 群特性: $\Lambda_{t+s} = \Lambda_t\Lambda_s$ を課す. 非ユニタリー発展を示す多くの現象 (熱平衡化や非干渉化) が不可逆な現象であるために, 考察対象となる時間領域が初期時刻以後 $t \geq 0$ に限られる. そこで, $t \geq 0$ において定義された時間発展演算子 Λ_t で, 群特性を備える実 1 パラメータの**半群**は, 多くの現象を説明する土台となる. このようなことから Kossakowski は, 状態空間を密度行列により与えた半群, すなわち性質 (3) を満たす半群によってダイナミクスを特徴付けた. これが, 力学的半群 (Dynamical Semigroup) [7] である. よって, 力学的半群は (密度行列を状態空間に持つ) 量子 Markov 過程の一般論を与えることができる. 第 3.2 節に

*3 記号の説明は第 2.2 節参照.

*4 第 3.1 節においてこの仮定を (i) 強い確率解釈と呼ぶ.

*5 他に時間 t に対する連続性の条件などを物理的な条件として加える. 詳しくは第 3.2 節参照.

力学的半群のレビューを与える.

このように密度行列空間上の実 1 パラメータ写像としてダイナミクスを特徴付けることは, 状態を密度行列によって表す意味では量子論を基礎に置くが, そのダイナミクスに関するミクロ的な考察が欠けている. すなわち, ダイナミクスに関しては現象論の範疇を超えるものではない; できるならば, 非ユニタリー発展を伴う現象をミクロな理論である量子論に基づいて説明するのが望ましい. この問題は, **「ユニタリー発展によって非ユニタリー発展を説明する」** という, 一見パラドキシカルな命題を伴うことになる [8]. これを解決する有力な理論が**縮約された力学** (Reduced Dynamics, 以後 RD と略すこともある) である [6,9,10]: RD は対象系と相互作用する環境系 (熱浴, 観測装置等) の存在を考慮に入れることにより, 量子論に基づいて対象系の非ユニタリー発展を説明することができる. 第 3.3 節において, RD の概念的枠組み, 非ユニタリー発展の説明 (第 3.3.1 節), 導出されるマスター方程式 (第 3.3.2 節) 等を説明する. しかしながら, 本研究は具体的モデルを考察するようなことはせずに, RD の一般論を考察する. そこで注目するのが**完全正値性**である. 1971 年ドイツの Kraus により RD には完全正値性と呼ばれる強い性質が備わっていることが指摘された [11]. すなわち, RD に従って説明されるダイナミクスであれば, それは完全正値性を備えているはずである[*6]. そこで, 完全正値性を備える時間発展, つまり, 完全正値性と性質 (3) を備える写像が, RD に基づく量子ダイナミクスを特徴付けると考えられる. 第 3.3.3 節において完全正値性の定義, RD が完全正値性を備えること, その物理的意味等を詳細に説明する.

本稿は主に, 量子 Markov 過程の一般論を与える力学的半群に, 完全正値性を課した完全正値力学的半群 (Completely Positive Dynamical Semigroup) に着目する: すなわち, **完全正値力学的半群は, RD によって説明される Markov 過程の一般論を与える.** この枠組みは 1970 年代に Lindblad [13], Gorini, Kossakowski, Sudarshan [14] によって相次いで完成させられた. 第 3.4 節において完全正値力学的半群のレビューを与える.

第 4 節において本研究の主なる結果を述べる. まず, 第 4.1 節において, von Neumann 方程式の超演算子と散逸部の超演算子が可換であるような力学的半群に着目する. 本研究では, この条件はエネルギーと干渉項がそれぞれ独立に時間発展をするための十分条件であることを示す. この系として, この性質を持つ力学的半群が Pauli マスター方程式 (第 4.1.1 節) を満たすこと, 2 準位系では現象論的 Bloch 方程式と等価になること, また詳細釣り合いの原理 (第 4.1.2 節) を満たすことが示される. 続いて第 4.2 節では, 2 準位系の完全正値力学的半群において常に成立する緩和時間への制約が存在することが示される. 緩和時間が物理量 (測定可能量) であることから, この制約は, 完全正値力学的半群に対する実験による検証を与える. また, 力学的半群と完全正値力学的半群の相違は, RD により特徴付けられる完全正値性であることから, 前者になく後者に特有の現象は, RD を特徴付ける現象であることが推測される. つまり, この制約は RD を特徴付ける性質である可能性がある. これらは第 4.3 節における初期相関と完全正値性の関係に関する考察を踏まえ, 第 4.4 節において議論される.

[*6] 逆に完全正値性を備えるダイナミクスがあれば, 背後に大きな Hilbert 空間があり, 全体系がユニタリー発展をしていることも示されている [12].

2　密度行列の状態空間

本節は密度行列に関するレビューを与える．第 2.1 節は，古典統計性を踏まえた本義混合性，また合成系から縮約されて得られる転義混合性に基づいて混合状態を導入し，状態空間が Hilbert 空間から密度行列空間へと一般化される概観を説明する．第 2.2 節では密度行列のいくつかの性質を示し，本質的な性質に基づいて密度行列の数学的定義を行なう．これは密度行列の状態空間の構造を明確にする．また純粋性，混合性に関する定義も改めて行なわれる．

2.1　密度行列の導入—純粋状態，混合状態—

密度行列は元来，量子論に対する古典的な統計性を説明するために提案された概念である．$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ($\mathcal{H}$ は可分な Hilbert 空間) を規格化された状態 ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$) とするとき，ある力学量 A ($\mathcal{H}$ 上の自己共役演算子) の期待値 $\langle A\rangle$ は内積

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{4}$$

により計算される (このように，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上のベクトル $|\psi\rangle$ によって表される状態を，**純粋状態**と呼ぶ)．しかし，情報の不足などの理由から，状態が厳密に $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ にあるとはいえない場合がある; そのときは (古典統計のように)，ある確率 (重み) $p_i \geq 0$ ($\sum_i p_i = 1$) で状態が $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}$, ($\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1\ \forall i$) にあると考えることが妥当である．力学量 A の期待値は，状態が $|\psi_i\rangle$ である場合の期待値 $\langle\psi_i|A|\psi_i\rangle$ に重み p_i の平均を施した

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i\langle\psi_i|A|\psi_i\rangle \tag{5}$$

により与えられる．この場合，状態は純粋状態と区別され，**混合状態**と呼ばれる．特にここで説明したように，情報の不足から生じた混合状態を**本義混合状態**と呼ぶ [15]．

純粋，混合状態は期待値の形 (式 (4),(5)) を見ても明らかに異質の扱いを要求するように思われる．そもそも純粋状態が Hilbert 空間の元として扱えることに対して，混合状態はそうではない．しかしながら，次のようにして両者を統一的に記述することが可能となる:

重みが p_i ($\sum_i p_i = 1$) で $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}$ にある場合の状態 (混合状態) から，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上で定義される演算子

$$\rho \equiv \sum_i |\psi_i\rangle p_i\langle\psi_i| \tag{6}$$

を導入する．このとき期待値 (5) は,

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i\langle\psi_i|A|\psi_i\rangle = \sum_i p_i\langle\psi_i|A\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)|\psi_i\rangle = \sum_n\langle n|\left(\sum_i |\psi_i\rangle p_i\langle\psi_i|\right)A|n\rangle = \mathrm{tr}\,\rho A \tag{7}$$

となる (ここで，$\mathrm{tr}\,A \equiv \sum_n\langle n|A|n\rangle$, $|n\rangle$ は Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の任意の完全正規直交系 (CONS) で

ある[*7]). つまり, 重み p_i で $|\psi_i\rangle$ にある混合状態における期待値 $\langle A\rangle$ は, 演算子 (6) を用いて

$$\langle A\rangle = \mathrm{tr}\,\rho A \tag{8}$$

によって与えられる. 演算子 ρ は (混合状態の) **密度行列 (密度演算子)** と呼ばれるものである. これは, 純粋状態も自動的に定義に含む: 純粋状態 $|\psi\rangle$ を重みが $p_1 = 1, p_2 = p_3 = \cdots = 0$ であると考えると, 純粋状態は混合状態の特殊な場合である. その場合の密度行列は,

$$\rho = \sum_i |\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i| = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{9}$$

である. 期待値 (4) に関してもこの密度行列 (9) を用いると, 混合状態の場合の期待値の表記 (8) と同じであることがわかる. つまり, 密度行列を用いることにより純粋, 混合状態は統一的に扱うことが可能となる. このことは, 単なる形式的取り扱いの統一に留まるものではない. むしろ重要なことは, **状態空間を密度行列の空間として明確化することにある**[*8].

次に, 二つの合成系— 対象系 S +環境系 E —の部分としての, 対象系の状態を表す密度行列 (縮約された密度行列) を説明する. 対象系 S, 環境系 E に対する Hilbert 空間をそれぞれ $\mathcal{H}_S$, $\mathcal{H}_E$ と記す. 全体系 $S\otimes E$ (S と E の合成系) に対する Hilbert 空間は, $\mathcal{H}_S$ と $\mathcal{H}_E$ のテンソル積 $\mathcal{H}_S\otimes\mathcal{H}_E$ により構成される [16]. 全体系の状態を密度行列 ρ_{TOT} によって与えられるものとしよう. このとき, **環境系の部分和をとることにより得られる演算子を, 対象系の (縮約された) 状態 ρ_S と見なすことができる**:

$$\rho_S \equiv \mathrm{tr}_E\,\rho_{\mathrm{TOT}}. \tag{10}$$

[ここで, tr_E は次のように定義される環境系の部分和である: $|\tilde{j}\rangle$ を $\mathcal{H}_E$ 上の CONS とする. B を全体系のある演算子 (正確にはトレースクラス $\mathcal{T}(\mathcal{H}_S\otimes\mathcal{H}_E)$ の演算子) とするとき, tr_E は, $\mathrm{tr}_E : \mathcal{T}(\mathcal{H}_S\otimes\mathcal{H}_E) \to \mathcal{T}(\mathcal{H}_S), s.t.,\ \forall|\psi\rangle\in\mathcal{H}_S,\ \langle\psi|\,\mathrm{tr}_E\,B|\psi\rangle \equiv \sum_j \langle\psi|\langle\tilde{j}|B|\tilde{j}\rangle|\psi\rangle$ で定義される.]
式 (10) が対象系 S の状態を表すことは, 次のように理解することができる: 我々が実験により測定する観測量 (対象とする観測量) は, 対象系 Hilbert 空間 $\mathcal{H}_S$ 上で定義される自己共役演算子 A (全体系では $A\otimes\mathbb{I}_E$, $\mathbb{I}_E$ は環境系の単位演算子) のみであることを前提とする (第 3.3.1 節参照). 式 (8) より $A\otimes\mathbb{I}_E$ の期待値は,

$$\langle A\rangle = \mathrm{tr}_{SE}\,(\rho_{\mathrm{TOT}} A\otimes\mathbb{I}_E) = \mathrm{tr}_S(\mathrm{tr}_E\,\rho_{\mathrm{TOT}})A. \tag{11}$$

一方, 対象系 S の状態が ρ である場合の力学量 A に対する期待値は,

$$\langle A\rangle = \mathrm{tr}_S\,\rho A \tag{12}$$

によって与えられることから, 式 (11) と比較して, $\rho_S = \mathrm{tr}_E\,\rho_{\mathrm{TOT}}$ を得る: あらゆる対象系の観測量に関する同じ (統計的) 予言を与えるので ρ_S と $\mathrm{tr}_E\,\rho_{\mathrm{TOT}}$ は同じ状態と見なすことができる[*9]. このようにして全体系から部分和をとることで縮約して得られる密度行列 (10) を, **縮約された密度行列 (Reduced Density Matrix)** と呼ぶ.

ここで, 縮約された密度行列の重要な性質を述べよう:

[*7] Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ は可分 (separable) であるので, 高々加算無限個の完全正規直交系 (CONS) が存在する [2]. tr は CONS の選択に依らないことを注意しておく.

[*8] 詳しくは次節参照.

[*9] 数学的には, $\forall A\in\beta(\mathcal{H}), \mathrm{tr}\,A\rho_1 = \mathrm{tr}\,A\rho_2 \Leftrightarrow \rho_1 = \rho_2$ を用いている.

合成系 $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ 上の密度行列 ρ_{TOT} が純粋状態 $\rho_{\mathrm{TOT}} = \|\Psi\rangle\langle\Psi\|$ であるとする. このとき縮約された密度行列 $\rho_S = \mathrm{tr}_E\, \rho_{\mathrm{TOT}}$ は一般に純粋状態ではない (つまり, 混合状態である).

説明: $\rho_{\mathrm{TOT}} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ を固定する. $|\Psi\rangle = \sum_{ij} C_{ij}|i\rangle|\tilde{j}\rangle$ ($\sum_{ij}|C_{ij}|^2 = 1$, $|i\rangle$, $|\tilde{j}\rangle$ はそれぞれ $\mathcal{H}_S$, $\mathcal{H}_E$ の CONS) と展開すると, $\rho_{\mathrm{TOT}} = \sum_{ij;kl} C_{ij}\overline{C}_{kl}|i\rangle|\tilde{j}\rangle\langle k|\langle\tilde{l}|$. このとき縮約された状態は

$$
\begin{aligned}
\rho_S = \mathrm{tr}_E\, \rho_{\mathrm{TOT}} &= \sum_m \langle\tilde{m}| \left(\sum_{ij;kl} C_{ij}\overline{C}_{kl}|i\rangle|\tilde{j}\rangle\langle k|\langle\tilde{l}|\right)|\tilde{m}\rangle = \sum_j \left(\sum_i C_{ij}|i\rangle\right)\left(\sum_k \overline{C}_{kj}\langle k|\right) \\
&= \sum_j |\psi_j\rangle p_j \langle\psi_j|, \qquad (13)
\end{aligned}
$$

$$
|\psi_j\rangle \equiv \sum_i C_{ij}|i\rangle/Z_j,\ Z_j \equiv [(\sum_k \overline{C}_{ik}\langle k|)(\sum_i C_{ij}|i\rangle)]^{1/2},\ p_j \equiv Z_j^2 (\Rightarrow \sum_j p_j = 1). \qquad (14)
$$

一般的に, p_j のうち少なくとも二つは 0 でないために, 縮約された密度行列 (13) は混合状態 (6) となる (より詳細な条件に関しては, 次節定理 2 参照). つまり, 全体系が純粋状態であっても, 対象系の状態が混合状態になるのである. 簡単な具体例として, 2-量子ビット系 (二つの 2 準位系の合成系) における, 一重項状態 (純粋状態) を考えよう:

$$
|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_S|\downarrow\rangle_E - |\downarrow\rangle_S|\uparrow\rangle_E) \qquad (15)
$$

ただし, ($|\uparrow\rangle_S$, $|\downarrow\rangle_S$), ($|\uparrow\rangle_E$, $|\downarrow\rangle_E$) はそれぞれの系の 2 準位系の正規直交基底である. S を対象系, E を環境系とすると, 縮約された密度行列 (10) は,

$$
\rho_S = \mathrm{tr}_E|\psi\rangle\langle\psi| = {}_E\langle\uparrow|(|\psi\rangle\langle\psi|)|\uparrow\rangle_E + {}_E\langle\downarrow|(|\psi\rangle\langle\psi|)|\downarrow\rangle_E = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle_S\langle\uparrow| + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle_S\langle\downarrow| \qquad (16)
$$

となり, これが混合状態であることは次のようにして示される:

式 (16) で表される状態が純粋であると仮定する:

$$
\exists|\psi_S\rangle \in \mathcal{H}_S \ \ s.t.\ \rho_S = |\psi_S\rangle\langle\psi_S|. \qquad (17)
$$

ところで, $|\uparrow\rangle_S$, $|\downarrow\rangle_S$ は $\mathcal{H}_S$ の基底であるので, $|\psi_S\rangle = a|\uparrow\rangle_S + b|\downarrow\rangle_S$ ($a, b \in \mathbb{C}$) と表される. よって,

$$
\begin{aligned}
\rho_S = |\psi_S\rangle\langle\psi_S| &= (a|\uparrow\rangle_S + b|\downarrow\rangle_S)(\overline{a}\langle\uparrow|_S + \overline{b}\langle\downarrow|_S) \\
&= |a|^2|\uparrow\rangle_S\langle\uparrow| + |b|^2|\downarrow\rangle_S\langle\downarrow| + a\overline{b}|\uparrow\rangle_S\langle\downarrow| + \overline{a}b|\downarrow\rangle_S\langle\uparrow|. \qquad (18)
\end{aligned}
$$

式 (16) と比較して, $|a|^2 = |b|^2 = 1/2, \overline{a}b = a\overline{b} = 0$. しかし, $\overline{a}b = 0 \Leftrightarrow a = 0$ or $b = 0$. これは, $|a|^2 = |b|^2 = 1/2$ と矛盾する.

このように, たとえ全体系の状態が純粋であっても, 縮約して得られる状態が混合になることがあり得るのである. この場合の混合性を, 本義混合と区別して, **転義混合**と呼ぶ [15]. 本義混合性が古典的統計, もしくは情報の不足から課せられたものであることに対し, 転義混合性は, 部分系としての対象系 S の情報に着目することによって産まれる混合性である. 数学的には両者を区別する理由はないが, 概念上の明確な区別立てが重要である. 後述するように, 縮約された力学 (RD) が対象系の混合化を説明するのは, 転義混合を利用する (第 3.3 節参照).

2.2 密度行列の性質

本節において，密度行列の主な性質を見る．ここでは，本質的な性質を抜粋し，密度行列を数学的に定式化する．

まずは次の 3 つの性質 (i),(ii),(iii) が基本的である．

補題 1 [密度行列の性質]
密度行列 $\rho = \sum_i |\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i|$(ただし，$\forall i, \langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1,\ \ p_i \geq 0,\ \sum_i p_i = 1$) は以下の性質を満たす:

(i) $\mathrm{tr}\,\rho = 1$ (規格化条件)　　(ii) $\rho^\dagger = \rho$ (自己共役性)　　(iii) $\rho \geq 0$ (正値性)

補題 1 の証明
(i) $\mathrm{tr}\,\rho = \sum_n \langle n| \left(\sum_i |\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i|\right) |n\rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i| \left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right) |\psi_i\rangle = \sum_i p_i = 1.$
(ii) $\rho^\dagger = \left(\sum_i |\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i|\right)^\dagger = \sum_i |\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i| = \rho.$
(iii) 任意のベクトル $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ を固定する．$\langle\phi|\rho|\phi\rangle = \sum_i \langle\phi|\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i|\phi\rangle = \sum_i p_i |\langle\psi_i|\phi\rangle|^2 \geq 0.$

QED

これらの性質 (i), (ii), (iii) は密度行列が一般的に備える重要な性質である．上では，密度行列が性質 (i) 規格化条件, (ii) 自己共役性, (iii) 正値性を満たすことを見たが，逆に，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の演算子で，(i)-(iii) を満たす演算子を密度行列と定義することができる．つまり，密度行列による状態空間 $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ を，$\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}) \equiv \{\rho \mid \text{(i)}\ \ \mathrm{tr}\,\rho = 1,\ \text{(iii)}\ \rho \geq 0\}$ により定義することができる (ここでは数学的理由—正値性を備える演算子は自動的に自己共役である[*10]—から，(ii) 自己共役性を除いて定義する[*11])．つまり，密度行列 (状態) とは，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上で定義される演算子で，(i) 規格化条件, (iii) 正値性を持つものであると定義する[*12]．条件 (i), (iii) を満たす任意の演算子を密度行列と見なすことができる理由は固有値展開定理に基づく [17]:

定理 1 [固有値展開定理]
A が $\mathcal{H}$ 上のコンパクトな自己共役作用素ならば，有限個または 0 に収束する無限列 $\{p_n\} \in \mathbb{R}$ と，ONS(正規直交系)$|n\rangle$ が存在して，

$$A = \sum_n p_n |n\rangle\langle n| \tag{19}$$

と表される．

性質 (i) $\mathrm{tr}\,\rho = 1$ より，ρ はトレースクラスの作用素 $\mathrm{tr}\,|\rho| < \infty$ となり，コンパクト性も持つ ($\because$ トレースクラスの作用素 $\Rightarrow$ コンパクト作用素)．固有値展開定理より，$\rho = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$ と展開するこ

*10 例えば偏極恒等式を用いると示すことができる．
*11 (ii) 密度行列の自己共役性は，観測量の期待値が実数であるための必要条件であるなど物理的には重要なことである．
*12 状態空間を $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ と記すのも，(i) 規格化条件を 1, (iii) 正値性を +, さらに，Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上で定義される演算子で，特にトレースクラス (Trace Class) と呼ばれる— $\mathrm{tr}\,|A| < \infty$—空間を $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ と表す．

とがいつでも可能となる. $\mathrm{tr}\,\rho = 1$ より $\sum_n p_n = 1$. ここで, 性質 (iii) より, ρ は自己共役演算子なので, p_n は ρ の固有値であり, さらに, 性質 (iii) 正値性より, 固有値の正値性 $p_n \geq 0$ が成立し, 式 (6) として導入された密度行列と解釈することができる.

密度行列の他の重要な性質として次を挙げる:

補題 2 [密度行列の性質 2]
(iv) 密度行列 $\rho \in \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ は, $0 \leq \mathrm{tr}\,\rho^2 \leq 1$ を満たす.
(v) 特に, 純粋状態である場合 ($\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$) は, $\mathrm{tr}\,\rho^2 = 1$. 逆に, $\mathrm{tr}\,\rho^2 = 1$ を満たす密度行列は純粋状態である.

補題 2 の証明

(iv) 任意の密度行列 $\rho \in \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ を固定する. 固有値展開定理 1 により, $\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|$ (ただし, $\forall i, j,\ \langle i|j\rangle = \delta_{ij},\ p_i \geq 0, \sum_i p_i = 1$) と表すことができる. よって $\mathrm{tr}\,\rho^2 = \sum_k \langle k|(\sum_i p_i|i\rangle\langle i|)(\sum_j p_j|j\rangle\langle j|)|k\rangle = \sum_i p_i^2$. $p_i \geq 0, \sum_i p_i = 1$ なので, $0 \leq \mathrm{tr}\,\rho^2 \leq 1$.

(v) [必要条件]: 任意の純粋状態 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ を固定する. $\rho^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)(|\psi\rangle\langle\psi|) = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho$ であるから, $\mathrm{tr}\,\rho^2 = \mathrm{tr}\,\rho = 1$.

[十分条件]: (iv) の証明で, 一般に密度行列 ρ は, $\mathrm{tr}\,\rho^2 = \sum_i p_i^2$ であることがわかっているので, $\mathrm{tr}\,\rho^2 = 1 \Leftrightarrow \sum_i p_i^2 = 1 \Leftrightarrow\ \exists\, i\ s.t.\ p_i = 1,\ p_j = 0\ (j \neq i)\ (\because\ p_i \geq 0,\ \sum_i p_i = 1)$. よって, $\rho = |i\rangle\langle i|$. QED

前節では純粋状態を, $\exists|\psi\rangle \in \mathcal{H},\ s.t.\ \rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ として定義したが, 補題 2 (v) は, $\mathrm{tr}\,\rho^2 = 1$ を満たす状態を純粋状態と定義することが可能であることを示す. さらに性質 (iv), (v) は $\mathrm{tr}\,\rho^2$ が, 状態が純粋であるか, 混合であることの目安を与える: $\mathrm{tr}\,\rho^2$ が 1 からどれだけ離れているかによって, どのくらい混合度が高いかを与える. $\mathrm{tr}\,\rho^2$ は Fidelity と呼ばれており, $\mathrm{tr}\,\rho^2 = 1$ を純粋状態, $\mathrm{tr}\,\rho^2 = 0$ を最大混合状態 (Maximally Mixed State) と呼ぶ. また, 同じ目安として線形エントロピー (密度行列空間上の汎関数) が導入される:

(a) 線形エントロピー: $S_2[\rho] \equiv 1 - \mathrm{tr}\,\rho^2$.

補題 2 (iv) より, 線形エントロピーは $0 \leq S_2[\rho] \leq 1$ を満たし, 純粋状態で 0 をとる. 特に, $S_2[\rho] = 1$ を満たす ρ が最大混合状態である. 同じ混合度の目安を与える量として,

(b) von Neumann エントロピー: $S_1[\rho] \equiv -\mathrm{tr}\,\rho \log \rho$

(c) Tsallis エントロピー: $S_q[\rho] \equiv -\frac{\mathrm{tr}\,\rho^q - 1}{q-1}$

が有名である. 特に, (a), (b) は (c)Tsallis エントロピー $S_q[\rho]$ において, $q = 2$, $q \to 1$ に相当するので, 表記を $S_q[\rho]$ で統一した [18].

補題 2 (v) の系として

系 1 [密度行列の性質 3]
(vi) ρ が純粋であることと, $\rho^2 = \rho$ (射影演算子) であることは等価である.

が得られる[*13].

[*13] 射影演算子 A は, 自己共役なべき等演算子 $A^\dagger = A$, $A^2 = A$ で定義される. 一般には $\exists A = |\psi\rangle\langle\psi|$ は射影演算子で

系 1 の証明

必要条件は自明である．十分条件は，$\rho^2 = \rho$ より，$\mathrm{tr}\,\rho^2 = \mathrm{tr}\,\rho = 1$．よって補題 2 によって ρ は純粋状態である． QED

つまり，密度行列が純粋状態であることは，(a) $\exists\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, (b) $\mathrm{tr}\,\rho^2 = 1$, (c) $\rho^2 = \rho$ のいずれによって定義してもよい．

最後に，縮約された密度行列が純粋，混合状態であるための条件として次の定理が有用である (証明は付録 A.1 参照).

定理 2 [G.K.]
$\mathcal{H}_S$, $\mathcal{H}_E$ を，それぞれ対象系 S, 環境系 E の Hilber 空間，$\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ をその合成系とする．さらに，ρ_{TOT} を合成系のある密度行列，$\rho_S = \mathrm{tr}_E\,\rho_{\mathrm{TOT}}$ を縮約された状態とする．このとき，

$$\rho_S^2 = \rho_S \Leftrightarrow \exists\rho_E \in \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_E),\ s.t.,\ \rho_{\mathrm{TOT}} = \rho_S \otimes \rho_E,\ \rho_S^2 = \rho_S. \tag{20}$$

つまり，縮約された密度行列が純粋状態であるためには，全体系の状態が相関を持たない場合に限られることになる．逆にいうと，全体系が相関を持つと，縮約された状態は必ず混合状態になる．この命題は，たとえ全体系の状態が純粋であっても相関がある場合には，縮約された密度行列が混合状態になることを導く (転義混合性).

3　状態の時間発展

本節では密度行列空間上のダイナミクスが説明される．第 3.1 節にて密度行列空間 $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ 上の実 1 パラメータ写像として時間発展 (ダイナミクス) が定義される．また，確率解釈に関する二つの仮定 (i) **強い確率解釈**, (i)′ **弱い確率解釈**が導入される．第 3.2 節では，ダイナミクスの線形性，Markov 性を課した力学的半群が説明され，その生成子の具体形が与えられる．第 3.3 節では，量子論に基づいて非ユニタリー性を説明することのできる縮約された力学 (Reduced Dynamics, 以後 RD とも略す) のレビュー—その概念的説明，使用方法に関する説明—が与えられ，特に，RD の最大の特性である完全正値性が説明される．第 3.4 節では力学的半群に完全正値性を課した完全正値力学的半群が説明され，その生成子が与えられる．第 3.5 節では，2 準位系における Bloch 方程式が説明される．

3.1　密度行列空間上の時間発展

状態空間の指定 (ここでは，密度行列空間 $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$) が行なわれると，それ上のダイナミクスが定義される[*14]: すなわち，時間 $t \in \mathbb{R}$ を 1 パラメータに持つ $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ 上の写像として時間発展演算子が与えられる:

$$\text{(i)}\quad \forall\rho \in \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H}) \Rightarrow \Lambda_t\rho \in \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H}),\ t \in \mathbb{R}. \tag{21}$$

あることの十分条件あるが，必要条件ではないので，この系は自明ではない．

*14 ある集合 S 上の写像 A とは，S から S への写像.

第 1 節にも述べたように, 性質 (i) は密度行列を密度行列に写像するため確率解釈を保証している. 他方, これよりも弱い性質:

$$\text{(i)}' \quad \exists\rho \in \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H}) \Rightarrow \Lambda_t\rho \in \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H}),\ t \in \mathbb{R} \tag{22}$$

を考えることができる; 密度行列空間 $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ 全体ではなく, その (真) 部分集合上の密度行列のみに確率解釈を保証するものである*15.

本研究では, 性質 (i), (i)$'$ を区別し, 前者を**強い確率解釈**, 後者を**弱い確率解釈**と呼ぶことにする. この区別は衒学的興味にすぎないように思われがちだが, 縮約された力学で初期相関がある場合には, 密度行列の性質から原理的に要請されるものである. 詳しくは, 第 4.4 節に説明する. 次節以降に説明する, 力学的半群, 完全正値力学的半群に課せられるのは性質 (i) **強い確率解釈**である.

3.2 力学的半群 (Dynamical Semigroup)

時間発展演算子で性質 (i) を満たすものを考える. これに, 線形性と Markov 性を課すことによって, 量子 (線形)Markov 過程を記述するための一般論を与えることができる.

線形性とは混合性を保持する性質である: 時間発展演算子を Λ_t とすると,

$$\text{(ii)} \quad \forall\rho_1,\rho_2 \in \mathcal{T}(\mathcal{H}),\ \forall\alpha_1,\alpha_2 \in \mathbb{C},\ \Lambda_t(\alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2) = \alpha_1\Lambda_t(\rho_1) + \alpha_2\Lambda_t(\rho_2) \tag{23}$$

を満たすことを要請する. 量子ダイナミクスが線形性を持つことから, ここでも線形性を課すことにする. Markov 性は, 時間に対する局所性を意味し, 過去のメモリーを引きずることのない性質を指す [19]. 数学的には半群の性質をもつものとして定義される*16: 正の時刻 $t \geq 0$ において定義される時間発展演算子を Λ_t $(t \geq 0)$ とすると, 半群の性質 $\Lambda_{t+s} = \Lambda_t\Lambda_s$ が成立することを「時間発展は半群の性質を持つ, または時間発展は Markov 的である」という. Markov 性の仮定は数学的扱いを簡略化するのみでなく, レーザー理論, スピン緩和現象などの記述における実験との整合性も確認されている. そのために, Kossakowski は Markov 過程を一つの基礎的ダイナミクスと位置付け, その一般論を展開した [7]. これが力学的半群 (Dynamical Semigroup) である.

定義 1 力学的半群とは, 1 パラメータの半群 $\Lambda_t : \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H}) \to \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H})$ を満たす線形写像の集合によって定義される ($\mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H})$ は密度行列による状態空間). つまり, 力学的半群は, 三つの仮定: (i) 強い確率解釈, (ii) 線形性, (iii) Markov 性 (半群性) によって構成される [7].

条件 (i) が確率解釈からの要請であったために, 力学的半群とは, 線形な量子 Markov 過程を記述する一般論を与えるものと考えられる.

数学的にはさらに, トレースノルム $||\cdot||_1$ に対する連続性: $\lim_{t\to 0_+} ||\Lambda_t\rho - \rho||_1 = 0, \quad \forall\rho \in \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ を課す. すなわち, 時間発展に対して非連続的振舞いは起こさないという物理的な要請である. Λ_t が縮小写像 (Contraction Map) であることから $\Lambda_t = e^{\mathcal{L}t}$ を満たす生成子 $\mathcal{L}$ の存在が保証さ

*15 数学的には, 時間発展演算子 Λ_t の定義域 $\mathrm{Dom}(\Lambda_t)$ が $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ 全体ではないことを意味する.

*16 半群性は時間に対する局所性よりも強い. 例えばメモリーを引きずることがなくても時間に陽に依存する時間発展演算子を考えることは可能であるが, それは半群性を備えない.

れる (Hille-Yoshida の定理 [20]): 密度行列に対するマスター方程式は,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}\,\rho(t) \tag{24}$$

となり, 解は $\rho(t) = e^{\mathcal{L}t}\rho(0)$ である.

Kossakowski により与えられた以下の定理を紹介する*17:

定理 3 [A. Kossakowski [7]]
有限準位系 (Dim$\mathcal{H} = N < \infty$) における力学的半群の生成子 $\mathcal{L}:\ M(N) \to M(N)$ は以下の形に表すことができる:

$$\mathcal{L} = \mathcal{H} + \mathcal{D}, \tag{25a}$$

$$\mathcal{H}\,\rho = -i\,[H,\rho]\,,\ \mathcal{D}\,\rho = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N^2-1} C_{ij}\{[F_i,\rho F_j] + [F_i\rho, F_j]\}. \tag{25b}$$

ここで, H は $\mathcal{H}$ 上のある自己共役演算子, $F_i (i = 1 \sim N^2-1)$ は $\mathcal{H}$ 上の $\mathrm{tr}\,F_i = 0, \mathrm{tr}\,F_i^\dagger F_i = \delta_{ij}$ を満たす任意の演算子である. 複素行列 $[C_{ij}]$ はエルミート行列 $(\overline{C_{ji}} = C_{ij})$ である.

$\mathcal{H}$ は系のユニタリー発展を与えるハミルトニアン部 (Hamiltonian Part) であり以下に説明する von Neumann 方程式 (第 3.3.2 参照) に相当する部分である. H は系の (繰り込まれた) ハミルトニアンと見なしてもよい. 以後 H を有効ハミルトニアンと呼ぶ. $\mathcal{D}$ は非ユニタリー発展を与える部分で散逸部 (Dissipative Part) と呼ばれる.

3.3 縮約された力学 (Reduced Dynamics) と完全正値性

第 3.1 節によって, 密度行列空間上の時間発展を考察する準備が整ったが, これらはあくまでも現象論的な議論に過ぎない. ダイナミクスの起源がミクロな理論により与えられる可能性について議論する必要性が残されている. しかしながら序論で考察されたように, ミクロな理論としての量子論が, ユニタリー性 (または可逆性) を備えているために, 非ユニタリー性 (または不可逆性) を伴う時間発展を量子論に基づき説明することには困難があるように思われる. にもかかわらず, 縮約された力学 (Reduced Dynamics, 以後 RD とも略す) は, 量子論に基づいて非ユニタリー性を説明することを可能とする有力な理論である. 本節では, RD の概念的説明からはじめ, いかにして非ユニタリー性を説明するのか (第 3.3.1 節), また, (あくまで原理的なレベルに留めるが) 具体的な計算法 (第 3.3.2 節), さらに RD の最大の特徴と考えられている完全正値性 (第 3.3.3 節) に渡って詳細に説明する.

3.3.1 縮約された力学 (RD) の概念的説明

縮約された力学 (RD) は, 対象とする量子系の非ユニタリー発展 (混合化等) を量子論に基づいて説明する有力な方法である. 以下にその概念的枠組みを説明する.

---

*17 この定理はあくまで生成子 $\mathcal{L}$ が力学的半群 $\Lambda_t = e^{\mathcal{L}}$ であるための必要条件である. Kossakowski は行列 $[C_{ij}]$ ある凸集合に属するものと限定して必要十分条件も導いている [7].

量子論が孤立系に対する理論体系であるため, 外界 (環境系 E) との相互作用が無視できないような対象系 S には, 直接に量子論を適用することができない. この場合は, 対象系 S と相互作用する環境系 E を合わせた全体系 (対象系 S と環境系 E の合成系) に量子論を適用する必要があり, 対象系 S のダイナミクスは, 全体系 $S \otimes E$ のダイナミクス—ユニタリー発展—の部分として抽出される. こうして得られる (対象系 S の) ダイナミクスを縮約された力学 (Reduced Dynamics, 以後 RD) と呼ぶ. RD が非ユニタリー発展を説明する一例として, 混合化 (非ユニタリー発展の例; 詳しくは第 3.3.2 節参照) を説明する: 初期時刻において, 対象系 S が純粋状態にあるとする. このとき対象系と環境系の初期相関はない (第 2.1 節定理 2 参照). しかしながら, 時間発展 (ユニタリー発展) を通じて両系の相関が産まれる. この相関を持つ全体系 $S \otimes E$ の状態から, (環境系 E の部分和をとることにより) 対象系 S の状態を引き出す (第 2.1 節縮約された密度行列 (10) 参照) と, 対象系 S の状態は混合状態となる (第 2.1 節定理 2 参照). すなわち, 全体系の相関により産み出される転義混合性が, 対象系の混合化を説明するのである (不可逆性に関しては [21] 参照).

このように, RD は対象系 S の非ユニタリー発展を自然に説明するのだが, 一方で批判的意見も見受けられないわけではないことを注意しておく. 例えば Prigogine は対象系と環境系を分けるは人間であるので, 物理学に対する客観性が失われるとして RD を批判する [22]. 観測問題に関しても RD に基づく理論の提唱 [11, 23] もあるが, 観測問題に対する意見の統一は未だに成されていない. 本稿ではこのような議論に深入りするのは避けるが, 「対象とする系と環境系とに分ける」ことが物理的に何を意味するかに関しては明確にしておこう: 対象系と環境系の分割は, 我々が実験により引き出す情報が, 多くとも対象系の観測可能量 (対象系の Hilbert 空間上で定義される, 自己共役演算子*18) だけであることを意味する. それ以外の観測量 (つまり, 環境系に関係する観測量) に興味がある場合には, 縮約された密度行列 (10) は正しくない. このことが, RD を使用する際の前提であることを認識しておく必要がある.

3.3.2 縮約された力学 (RD) とマスター方程式

本節は, (Schrödinger 方程式 (1) に基づいて導出される)RD の基礎方程式 (マスター方程式) を説明する. まずは, 孤立系で記述された Schrödinger 方程式と等価な von Neumann 方程式*19を説明する—Schrödinger 方程式が Hilbert 空間のベクトルの時間発展を扱うのに対し, von Neumann 方程式は密度行列の時間発展を扱う. その後環境系を導入し, 全体系の von Neumann 方程式から縮約された力学 (RD) のマスター方程式を導出する.

孤立系のハミルトニアン H が与えられているとき, 状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展は, Schrödinger 方程式により与えられる:

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle. \tag{26}$$

*18 全体系の Hilbert 空間は, 対象系と環境系の Hilbert 空間のテンソル積による合成系であるが, 対象系の自己共役演算子 A とは, より正確に合成系の自己共役演算子 $A \otimes \mathbb{I}_E$ で定義する. ここで, $\mathbb{I}_E$ は環境系の Hilbert 空間上で定義される単位演算子である.

*19 ここでの等価とは, 両者は共にユニタリー発展をするという意味に過ぎない. 数学的には純粋状態に限れば両者は等価である. しかし後述するように, von Neumann 方程式は混合状態をも扱うことができるので, Shrödinger 方程式よりも広い.

これを密度行列 $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ で表す場合, 時間発展方程式は,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\rho(t) &= \left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle\left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)\\ &= (-iH|\psi(t)\rangle)\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle(i\langle\psi(t)|H) = -iH\rho + i\rho H\\ &= -i\,[H, \rho(t)]\end{aligned} \tag{27}$$

となる. 特にその形式解は

$$\rho(t) = U_t\rho(0)U_t^\dagger,\ U_t \equiv \exp(-iHt) \tag{28}$$

である (U_t の具体形はハミルトニアン H が時間に依存しない場合を書いた). 状態が混合状態 $\rho = \sum_i |\psi_i\rangle p_i\langle\psi_i|$ である場合にも, 各 $|\psi_i\rangle$ $(i = 1, 2, \dots)$ が, 同じハミルトニアン H の Schrödinger 方程式によって発展する場合には, 同じ方程式 (27), (28) で記述される. このように, 密度行列に対する方程式で, Schrödinger 方程式と等価な方程式を von Neumann 方程式と呼ぶ. von Neumann 方程式は確かに混合状態をも扱う時間発展方程式であるが, それは Schrödinger 方程式と同様, 混合化に関する説明はできない: 初期状態が純粋状態 $\rho(0) = |\psi\rangle\langle\psi|$ ならば, von Neumann 方程式の形式解 (28) より $\rho(t) = \rho(t) = U_t|\psi\rangle\langle\psi|U_t^\dagger = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ となって純粋状態であり続ける.

これに対して, 縮約されたは力学 (RD) は, 対象系と相互作用する環境系の存在を考慮に入れ, 量子論 (von Neumann 方程式 (28)) を (孤立系としての) 全体系—対象系＋環境系—に適用する: すなわち, 全体系の状態 $\rho_{\mathrm{TOT}}(t) \in \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E)$ は量子論に従ってユニタリー発展 (28) をする:

$$\rho_{\mathrm{TOT}}(t) = U_t\rho_{\mathrm{TOT}}(0)U_t^\dagger. \tag{29}$$

ここで, U_t はある $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ 上のあるユニタリー演算子である ($\mathcal{H}_S$, $\mathcal{H}_E$ はそれぞれ対象系, 環境系の Hilbert 空間, $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ は全体系 (合成系) の Hilbert 空間). 対象系の状態は, 縮約された状態 (10) により与えられるため, たとえ全体系がユニタリー発展をしても, 時間発展によって両系の相関が産まれると対象系の混合化 (転義混合性) が説明される.

ここで, 全体系のハミルトニアン H_{TOT} が与えられている場合, RD のマスター方程式 (密度行列に対する基礎方程式) と von Neumann 方程式との相違がいかにして現れるかを見ておこう. 全体系のハミルトニアン H_{TOT} は一般に, 対象系ハミルトニアン H_S, 環境系ハミルトニアン H_E, 両者の相互作用ハミルトニアン H_{INT} に分割される:

$$H_{\mathrm{TOT}} = H_S + H_{\mathrm{INT}} + H_E, \tag{30}$$

全体系は, ハミルトニアン (30) に基づく von Neumann 方程式 (27) を満たす:

$$\frac{d}{dt}\rho_{\mathrm{TOT}}(t) = -i[H_{\mathrm{TOT}}, \rho_{\mathrm{TOT}}(t)] = -i[H_S, \rho_{\mathrm{TOT}}(t)] - i[H_{\mathrm{INT}}, \rho_{\mathrm{TOT}}(t)] - i[H_E, \rho_{\mathrm{TOT}}(t)]. \tag{31}$$

対象系に対するマスター方程式 (縮約された密度行列 (10) $\rho_S(t) = \mathrm{tr}_E\,\rho_{\mathrm{TOT}}(t)$ に対するマスター方程式) は, 両辺に対して環境の部分和 tr_E をとることにより得ることができる. :

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_S, \rho_S(t)] - i\,\mathrm{tr}_E\{[H_{\mathrm{INT}}, \rho_{\mathrm{TOT}}(t)]\}. \tag{32}$$

式変形の際には, (i) 時間微分 $\frac{d}{dt}$ とトレース tr_E の可換性, (ii) 超演算子 $-i[H_S,\cdot]$ とトレース tr_E の可換性 ($\because H_S$ は対象系の演算子) そして, (iii) $\mathrm{tr}_E\{H_E\rho_{\mathrm{TOT}}(t)\} = \mathrm{tr}_E\{\rho_{\mathrm{TOT}}(t)H_E\}$ ($\because H_E$ は環境の演算子) を用いている. von Neumann 方程式からのずれは, 相互作用ハミルトニアンが与える (32) 式右辺の第二項 (散逸部) である. この項がダイナミクスの非ユニタリー性を生み出し, 散逸の効果を与えるのである. 本稿では具体的ハミルトニアンを与えずに, 一般的な議論のみを行なうので, 散逸部の導出等に関する詳細は文献にゆずる [4–6, 9, 10, 24–27]. ここで重要なことは, 形式的な議論の段階において散逸の効果の起源が見て取れることである.

ここで, 初期相関が無い場合の時間発展演算子の具体形を与えておく (初期相関がある場合は, 第 4.3 節参照): 初期時刻において, 対象系と環境系の相関が無い場合, すなわち全体系の初期状態が $\rho_{\mathrm{TOT}}(0) = \rho_S \otimes \rho_E$ によって与えられる場合に, 時間発展演算子の形は

$$\rho_S(t) = \mathrm{tr}_E\, U_t \rho_S \otimes \rho_E U_t^\dagger \equiv \Lambda_t \rho_S(0) \tag{33}$$

となる (ここで, $\rho_S(0) = \rho_S$ に注意). さらに, 固有値展開定理 1 に基づき $\rho_E = \sum_j p_j |j\rangle\langle j|$ と展開すると:

$$\Lambda\rho = \mathrm{tr}_E\, U\rho \otimes \left(\sum_j p_j |j\rangle\langle j|\right) U^\dagger = \sum_{j,k} \sqrt{p_j}\langle k|U|j\rangle \rho \sqrt{p_j}\langle j|U^\dagger|k\rangle = \sum_{j,k} W_{jk}\rho W_{jk}^\dagger, \tag{34}$$

(ただし $W_{jk} \equiv \sqrt{p_j}\langle k|U|j\rangle$) と表すことができる (時間の添え字 t は省略した). よって, 初期相関の無い場合の RD の時間発展演算子は (添え字集合 $\{i,j\}$ を $\{\alpha\}$ に統一して)

$$\Lambda\rho = \sum_\alpha W_\alpha \rho W_\alpha^\dagger \tag{35}$$

と表すことができる (第 3.3.3 節における Kraus 表示も参照).

Λ_t は (状態を時間発展させるので)Schrödinger 描像の時間発展演算子であるが, 対応する Heisenberg 描像における時間発展演算子 Λ_t^* は Λ_t の (次の意味での) 共役で与えられる: 任意の $\rho \in \mathcal{T}(\mathcal{H}_S)$, $A \in \beta(\mathcal{H}_S)$ に対して

$$\mathrm{tr}_S(\Lambda_t\rho)A = \mathrm{tr}_S\,\rho(\Lambda_t^* A) \tag{36}$$

を満たすものとして Λ_t の共役 Λ_t^* が定義される. ここで, $\mathcal{H}_S$ は対象系の Hilbert 空間, $\mathcal{T}(\mathcal{H}_S)$, $\beta(\mathcal{H}_S)$ はそれぞれ $\mathcal{H}_S$ 上の線形トレースクラスの作用素の空間, 線形有界作用素の空間である. 時間発展演算子の具体形は, $\forall\rho \in \mathcal{T}(\mathcal{H}_S), \forall A \in \beta(\mathcal{H}_S)$ を固定して,

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}_S\{(\Lambda_t\rho)A\} &= \mathrm{tr}_S\{\left(\mathrm{tr}_E\, U_t\rho \otimes \rho_E U_t^\dagger\right) A\} \\ &= \mathrm{tr}_S\,\mathrm{tr}_E\{\left(\rho \otimes \rho_E U_t^\dagger A U_t\right)\} = \mathrm{tr}_S\{\rho\, \mathrm{tr}_E\left(\rho_E U_t^\dagger A U_t\right)\}\end{aligned} \tag{37}$$

より,

$$\Lambda_t^* A = \mathrm{tr}_E\left(\rho_E U_t^\dagger A U_t\right) \tag{38}$$

となる. これが初期相関の無い場合の Heisenberg 描像における時間発展演算子の具体形である.

3.3.3 完全正値性

本節において, (初期相関の無い場合の)RD の特性である完全正値性について説明する*20.

定義 2 [完全正値性]
$\beta(\mathcal{H})$ を Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の線形有界作用素の空間とする. 写像 $\Lambda : \beta(\mathcal{H}) \to \beta(\mathcal{H})$ に関して, 任意の自然数 $n \in \mathbb{N}$ に対し, 合成写像 $\Lambda_n \equiv \Lambda \otimes \mathbb{I}_n : \beta(\mathcal{H}) \otimes M(n) \to \beta(\mathcal{H}) \otimes M(n)$ が正値保存である— 正演算子を正演算子に写像する—とき, Λ は完全正写像 (Completely Positive Map) であると呼ばれる. ここで, $M(n)$ は $n \times n$ の複素行列空間, $\mathbb{I}_n$ はそれ上の単位行列. また, この性質を特に完全正値性と呼ぶ [9,11,28].

1971 年ドイツの Kraus により, RD の時間発展演算子に対する次の定理が得られた.

定理 4 [K. Kraus [11]]
初期相関の無い場合の縮約された力学 (RD) から得られる, Heisenberg 描像における時間発展演算子 $\Lambda_t^* : \beta(\mathcal{H}) \to \beta(\mathcal{H})$ (38) は, 任意の時刻において完全正写像である.

証明は付録第 A.2 節にゆずり, ここでは Lindblad によって与えられた, 物理的な説明を行なう [13]. 対象系 S, 環境系 E のどちらとも相互作用をせず, さらにエネルギーが 0 であるような仮想的な n 準位系 V(その Hilbert 空間は $\mathcal{H}_V = \mathbb{C}^n$) を考える. さらに, 初期時刻において全体系—対象系 S + 環境系 E + 仮想系 V —の状態が, $\rho_V \otimes \rho_S \otimes \rho_E$ であるとする. 合成系 $S \otimes V$ のレベルにおいて見る対象系力学量 A ($\otimes I_E \otimes I_V$) の期待値は,

$$
\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \mathrm{tr}_{SEV}\, \rho_V \otimes \rho_S \otimes \rho_E U_t^\dagger A U_t = \mathrm{tr}_{SV}\, \rho_V \otimes \rho_S \,\mathrm{tr}_E \left(\rho_E U_t^\dagger A U_t \right) \\
&= \mathrm{tr}_{SV}\, \rho_V \otimes \rho_S \Lambda_t^* \otimes \mathbb{I}_n A
\end{aligned} \tag{39}
$$

となる (前節式 (38) 参照). このとき, 合成系 $S \otimes V$ における Heisenberg 描像における時間発展演算子は $\Lambda_t^* \otimes \mathbb{I}_n$ とみなすことができる. ところで, 時間発展演算子は確率の正値性を保証するために, 正値保存の性質を持つ. よって, 合成系 $S \otimes V$ 上の時間発展演算子 $\Lambda_t^* \otimes \mathbb{I}_n$ は正値保存性を持つ. この議論は任意の自然数 n に対して当てはまるので, 定義より Λ_t^* は完全正写像である.

このように, (初期相関の無い場合の)RD には, 完全正値性と呼ばれる性質が課せられることになる*21. 完全正値性は非常に強い性質である. 孤立系の時間発展が, ユニタリー性によって特徴付けられたのは, 波動関数の確率解釈からの要請であったのに対して, 完全正値性は対象系 S 自体の確率解釈から得ることはできない. このことは, 完全正値性は, 確率解釈を保証するのでなく, さらに物理量の時間発展を特徴付けるような強い性質を持つ可能性を示唆している (第 4.2 節参照).

*20 完全正値性は C^* 代数の間の写像に定義される性質であるが, 本稿で用いる場合には C^* 代数として, Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の線形有界作用素の空間 $\beta(\mathcal{H})$ 以外を用いることはないので, 有界作用素上の写像に限定した完全正値性の定義を与える.

*21 初期相関がある場合の完全正値性に関しては現在もなお未解決の問題である (第 4.3 節参照).

Kraus はさらに, 性質 (i) 強い確率解釈, (ii) 線形性, (iii) 完全正値性を備える時間発展演算子の一般形を導出した [11]:

定理 5 [Kraus 表示 [11]]
$\mathcal{H}$ を可分な Hilbert 空間, $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ を線形トレースクラスの作用素の空間とする. 性質 (i) 強い確率解釈, (ii) 線形性, (iii) 完全正値性を備える $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ 上の写像 Λ は

$$\exists W_\alpha,\ s.t.\ \Lambda\rho = \sum_\alpha W_\alpha \rho W_\alpha^\dagger \tag{40}$$

と表すことができる.

この形の表現は Kraus 表示と呼ばれている. 初期相関の無い場合の RD の時間発展演算子がこの形に書き表されることは既にみた (前節式 (35) 参照). このことは, 初期相関の無い場合の RD の時間発展演算子が完全正値性を備えることを示しているばかりでなく, (i) 強い確率解釈, (ii) 線形性の仮定が正しいことも表している.

3.4 完全正値力学的半群 (Completely Positive Dynamical Semigroup)

第 3.2 節において説明された力学的半群は, 確かに量子 Markov 過程を記述する一般論を提供するが, それは現象論的枠組みの範疇を超えるものではない. そのダイナミクス (特に非ユニタリー発展を伴うもの) の起源は, ミクロなものに基づいているわけではなく, Markov 的で確率解釈に矛盾しないものの集合に過ぎない (ただし, 状態概念を密度行列の空間とするところには, 量子的記述の背景があることは大きい). そこで, 非ユニタリー性の起源を RD に基づいて考えるのが, 完全正値力学的半群 (Completely Positive Dynamical Semigroup)[*22]である: (初期相関の無い)RD に基づいて導出されるダイナミクスであれば, 完全正値性を備えるはずである (3.4 節参照). そこで, 力学的半群の仮定 (i) 強い確率解釈, (ii) 線形性, (iii)Markov 性に (iv) 完全正値性を加えたものが, 「RD に基づいた量子 Markov 仮定の一般論」を与えるものと考えられる.

定義 3 完全正値力学的半群とは, 1 パラメータの半群 $\Lambda_t : \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H}) \to \mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H})$ を満たす線形写像の集合で, 完全正値性を備えるものによって定義される ($\mathcal{T}_{+,1}(\mathcal{H})$ は密度行列による状態空間).
つまり, 完全正値力学的半群は, 四つの仮定:
(i) 強い確率解釈, (ii) 線形性, (iii) Markov 性 (半群性), (iv) 完全正値性
によって構成される [7].

Lindblad [13] や Gorini, Kossakowski そして Sudarshan [14] は, 完全正値力学的半群の生成子 $\mathcal{L}$ の一般形を導出することに成功した. 今日では, それは Lindblad 型生成子 (または, Lindblad-Kossakowski 型生成子) と呼ばれ, 量子光学 (原子緩和, スピン緩和) [4–6, 10], 量子情報理論 [29], 量子観測理論 [11], QSD(Quantum State Diffusion) [30], 散逸系の量子カオス [31], そして素粒子

*22 文献によっては, 量子力学的半群 (Quantum Dynamical Semigroup) と呼ばれることもある.

論 [32] に渡って広く用いられている．対象系の Hilbert 空間の次元 N が有限である場合*23を考えると，それは

定理 6 [G. Lindblad [13], V. Gorini, A. Kossakowski, E. C. G. Sudarshan [14]]
有限準位系 ($\mathrm{Dim}\mathcal{H} = N < \infty$) における完全正値力学的半群の生成子 $\mathcal{L}:\ M(N) \to M(N)$ は以下の形に一意的表される．また以下の型を満たす生成子は完全正値力学的半群の生成子である：

$$\mathcal{L} = \mathcal{H} + \mathcal{D}, \tag{41a}$$

$$\mathcal{H}\rho = -i\,[H,\rho]\,,\ \mathcal{D}\rho = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N^2-1} C_{ij}\{\left[F_i,\rho F_j^\dagger\right] + \left[F_i\rho, F_j^\dagger\right]\}. \tag{41b}$$

ここで，H は $\mathcal{H}$ 上のある自己共役演算子 $\mathrm{tr}\,H = 0$, $F_i (i = 1 \sim N^2 - 1)$ は $\mathcal{H}$ 上の $\mathrm{tr}\,F_i = 0, \mathrm{tr}\,F_i^\dagger F_i = \delta_{ij}$ を満たす任意の演算子である．複素行列 $[C_{ij}] \in M(N^2 - 1)$ は正値行列である．

(ここで，行列 $[C_{ij}] \in M(N^2 - 1)$ が正値行列であるとは，任意の $[x_i] \in \mathbb{C}^{N^2-1}$ に対し，$\sum_{i,j} \overline{x}_i C_{ij} x_j \geq 0$ であることにより定義される．) 第 3.2 節における力学的半群の場合の定理 3 との相違は，力学的半群では $[C_{ij}]$ がエルミート行列であるのに対し，完全正値力学的半群行列正値行列に変わったことである*24．完全正値力学的半群が力学的半群に (iv) 完全正値性を加えたものであるから，完全正値性は行列 $[C_{ij}]$ の正値性を課すことが分かる．力学的半群と同様 $\mathcal{H}$ をハミルトニアン部，H を有効ハミルトニアン，$\mathcal{D}$ を散逸部と呼ぶ．ハミルトニアン部にある H は，第 3.3.2 節で得られた RD のマスター方程式 (32) と比較すると，対象系のエネルギー H_S に相当しているように思われる．しかしながら一般には，式 (32) の右辺第 2 項から密度行列との交換関係への繰り込みがあるために，Lindblad 型マスター方程式における H は，対象系の繰り込まれたエネルギー $H = H_S + \Delta H$ と見なすことが正しい (これが H を有効ハミルトニアンと呼ぶ理由である)．$\mathrm{tr}\,H = 0$ は，表現の一意性から要請するが，物理的にはエネルギー原点を 0 にそろえることに対応している．定理 6 の証明は文献 [13, 14] にゆずるが，完全正値性の条件が散逸部の行列 $[C_{ij}]$ の正値性に完全に帰せられることを覚えておいて欲しい．

3.5　2 準位系の完全正値力学的半群と等価な Bloch 方程式と緩和定数

本節において「2 準位系 (完全正値) 力学的半群の緩和定数 (緩和時間)」を厳密に定義する．そのために，まず 2 準位系の (完全正値) 力学的半群と等価な一般化された Bloch 方程式を説明する*25: Bloch 方程式とは，三つの偏極成分 $M_i(t) = \mathrm{tr}\,\rho(t)\sigma_i/2\ (i = 1, 2, 3)$ に対する方程式である (ここで，

*23 Gorini *et al.* は有限準位系で議論しているが，Lindblad は無限準位系を含む，より一般的な結果を導出している．以下で我々が興味あるのは有限準位系であるため，Gorini *et al.* の議論で十分である．

*24 もちろん定理 3 は力学的半群の必要条件であるために，行列のエルミート性以上の性質が課せられる．Kossakowski は行列 $[C_{ij}]$ にさらに強い性質を課すことで力学的半群の必要十分条件を導出した [7]．この性質を陽に書き下すことは避けるが，この性質は正値性よりも弱い条件であることを強調しておく．よって，完全正値力学的半群の特徴はやはり行列 $[C_{ij}]$ の正値性に帰着されることには相違ない．

*25 力学的半群，完全正値力学的半群それぞれに対する Bloch 方程式，緩和定数の定義は平行して説明される．

σ_i は Pauli 行列である). Bloch によって核スピン緩和を記述するために導出された Bloch 方程式は, 量子論に基づく磁場中の際差運動を現象論的に緩和させる方程式であった [33]. 一方, 2 準位系力学的半群 (または, 完全正値力学的半群) と等価な一般化された Bloch 方程式は, 密度行列 $\rho(t)$ が力学的半群のマスター方程式 (25)(または, Lindblad 型マスター方程式 (41)) によって記述される場合の Bloch 方程式により定義するのである. その具体形は初めて Kossakowski に導出された [34]. 本稿では, Bloch によって現象論的に導出された方程式を Bloch 方程式 (または現象論的 Bloch 方程式), Kossakowski によって導出された「2 準位系力学的半群 (または完全正値力学的半群) と等価な Bloch 方程式」を「一般化された Bloch 方程式」と呼び, 区別する.

3.5.1 (現象論的) Bloch 方程式

ここではごく簡単に Bloch により現象論的に導入された Bloch 方程式を説明する. 磁気回転比を γ とすると, 磁場 $\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$*26内におけるスピン系のエネルギー H(系のハミルトニアン) は

$$H = -\gamma B S_z, \quad S_z = \frac{1}{2}\sigma_z \tag{42}$$

で与えられる. 偏極成分 (スピン期待値)$M_i(t) = \mathrm{tr}\,\rho(t)\sigma_i/2$ $(i = 1, 2, 3)$ は Schrödinger 方程式に従って際差運動を行なう:

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{M}(t) = -A\boldsymbol{M}(t), \tag{43a}$$

$$\boldsymbol{M}(t) = \begin{pmatrix} M_1(t) \\ M_2(t) \\ M_3(t) \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma B & 0 \\ \gamma B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{43b}$$

しかしより現実的には, 周りの電磁場との光子のやり取りによって, 次第にエネルギーを失い, またその非干渉化も起こる. そこで, Bloch は現象論的にこの効果を導入した. 彼はエネルギー散逸と非干渉化をする時間スケール T_L, T_T を導入し, 際差運動 (43) からのずれとして Bloch 方程式:

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{M}(t) = -A\boldsymbol{M}(t) + \boldsymbol{b}, \tag{44a}$$

$$\boldsymbol{M}(t) = \begin{pmatrix} M_1(t) \\ M_2(t) \\ M_3(t) \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \Gamma_T & -\gamma B & 0 \\ \gamma B & \Gamma_T & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_L \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ a \end{pmatrix} \tag{44b}$$

を導出した. ここで, $\Gamma_T \equiv 1/T_T$(横緩和定数), $\Gamma_L \equiv 1/T_L$(縦緩和定数) である. a は定常状態を決定する定数で, 定常解は $A^{-1}\boldsymbol{b}$ である*27 ($\det A = \Gamma_L(\Gamma_T^2 + (\gamma B)^2) = 0 \Leftrightarrow \Gamma_L = 0$ or $\Gamma_T = \gamma B = 0$ に注意). ここで, 定常解の方向 $A^{-1}\boldsymbol{b}$ と磁場方向は一致することを強調しておく ($A^{-1}\boldsymbol{b} \propto \boldsymbol{B} \Leftrightarrow \boldsymbol{b} \Leftrightarrow A\boldsymbol{B} = {}^t(0, 0, a\Gamma_L)$. よって, $\boldsymbol{b} \propto \boldsymbol{B}$). これが (z 軸方向を磁場方向と選んだ際の) 現象論的 Bloch 方程式である.

---

*26 簡単のため磁場方向を z 軸と選んだ.

*27 定常解が温度 $T = 1/\beta$ の熱平衡状態 ($\rho_\beta = \exp(-\beta H)$) になるためには, $a = \frac{1}{T_L}\tanh\frac{\beta\gamma B}{2}$ である.

3.5.2　一般化された Bloch 方程式

2 準位系 $(N=2)$ 力学的半群のマスター方程式 (25)(または, Lindblad 型マスター方程式 (41)) において $F_i = \sigma_i/2$ $(i = 1 \sim 3 = 2^2 - 1)$ を採用する. $\mathbb{I}, F_i$ $(i = 1,2,3)$ は $M(2)$ における完全性をなすために,

$$\text{(i)}\ H = \sum_{i=1}^{3} h_i F_i, h_i \in \mathbb{R}, \tag{45}$$

と表すことができる (ここでは, $\operatorname{tr} H = 0$ を用いた). 散逸部の行列 $[C_{ij}]$ はエルミート行列である. そこで, 上手く座標軸を選択することで, 非対角成分の実部が 0 であるようにパラメトライズすることが可能である[*28]:

$$\text{(ii)}\quad [C_{ij}] = \begin{pmatrix} \gamma_2+\gamma_3-\gamma_1 & -ia_3 & ia_2 \\ ia_3 & \gamma_3+\gamma_1-\gamma_2 & -ia_1 \\ -ia_2 & ia_1 & \gamma_1+\gamma_2-\gamma_3 \end{pmatrix}.\ a_i, \gamma_i \in \mathbb{R}, \tag{46a}$$

$$\Leftrightarrow\quad C_{ij} = (2\gamma - \gamma_i)\delta_{ij} - i\epsilon_{ijk}a_k,\ \gamma \equiv \gamma_1+\gamma_2+\gamma_3. \tag{46b}$$

偏極成分 $M_i(t) = \operatorname{tr}\rho(t)F_i$ に対する, 一般化された Bloch 方程式は,

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\operatorname{tr}\rho(t)F_i = \operatorname{tr}(\mathcal{H}+\mathcal{D})\rho(t)F_i \\
&= ih_j \operatorname{tr}\rho(t)[F_j,F_i] + \frac{1}{2}C_{jk}\operatorname{tr}\rho(t)\left\{F_k[F_i,F_j] + [F_k,F_i]F_j\right\} \\
&= -\epsilon_{ijk}h_j\operatorname{tr}\rho(t)F_k + i\frac{1}{2}\left((\gamma-2\gamma_j)\delta_{jk} - i\epsilon_{jkm}a_m\right)\operatorname{tr}\rho(t)\left\{\epsilon_{ijl}F_kF_l + \epsilon_{kil}F_lF_j\right\} \\
&\quad (\because C_{ij} = (\gamma-2\gamma_i)\delta_{ij} - i\epsilon_{ijk}a_k,\ [F_i,F_j] = i\epsilon_{ijk}F_k) \\
&= -\epsilon_{ijk}h_j\operatorname{tr}\rho(t)F_k + i\frac{1}{2}(\gamma-2\gamma_j)\operatorname{tr}\rho(t)\left\{\epsilon_{ijl}F_jF_l + \epsilon_{jil}F_lF_j\right\} \\
&\quad + \frac{1}{2}\epsilon_{jkm}a_m\operatorname{tr}\rho(t)\left\{\epsilon_{ijl}F_kF_l + \epsilon_{kil}F_lF_j\right\} \\
&= -\epsilon_{ijk}h_j\operatorname{tr}\rho(t)F_k + i\frac{1}{2}(\gamma-2\gamma_j)\epsilon_{ijl}\operatorname{tr}\rho(t)[F_j,F_l] + \frac{1}{2}\epsilon_{jkm}a_m\epsilon_{ijl}\operatorname{tr}\rho(t)[F_k,F_l]_+ \\
&= -\epsilon_{ijk}h_j\operatorname{tr}\rho(t)F_k - \frac{1}{2}(\gamma-2\gamma_j)\epsilon_{ijl}\epsilon_{jlm}\operatorname{tr}\rho(t)F_m + \frac{1}{4}\epsilon_{jkm}\epsilon_{ijk}a_m\ (\because [F_i,F_j]_+ = \frac{1}{2}\delta_{ij}) \\
&= -\epsilon_{ijk}h_j\operatorname{tr}\rho(t)F_k - \gamma_i\operatorname{tr}\rho(t)F_i + \frac{1}{2}a_i,
\end{aligned} \tag{47}$$

となる.

行列形式にまとめると,

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{M}(t) = -A\boldsymbol{M}(t) + \boldsymbol{b}, \tag{48a}$$

---

*28 実対称行列が実直交行列 $[V_{ij}]$ によって対角化されることを利用すると, (一般に複素成分を持つ) エルミート行列は, 実直交行列によって非対角成分実部を 0 にすることが可能となる. そこで上手い実直交行列を採用し, 新しい F_i' として $F_i' = \sum_j V_{ij}F_j$ を選択すれば, 式 (46) のパラメトライズができる. 以後 $'$ は落とす.

$$\boldsymbol{M}(t)=\begin{pmatrix} M_1(t) \\ M_2(t) \\ M_3(t) \end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix} \gamma_1 & h_3 & -h_2 \\ -h_3 & \gamma_2 & h_1 \\ h_2 & -h_1 & \gamma_3 \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \tag{48b}$$

で与えられる．これが (力学的半群, または完全正値力学的半群に対する) 一般化された Bloch 方程式である．

完全正値力学的半群 (Lindblad 型マスター方程式 (41)) の場合には, 行列 $[C_{ij}]$ は正値行列であるために, 対角成分は非負である ($\forall x_i, \sum_{ij}\bar{x}_i C_{ij} x_j \geq 0$ であるので, $x_i^{(j)}=\delta_{ij}$ を採用すればよい). つまり, パラメータ γ_i には次の制約が課せられる:

$$\gamma_1+\gamma_2 \geq \gamma_3,\quad \gamma_2+\gamma_3 \geq \gamma_1,\quad \gamma_3+\gamma_1 \geq \gamma_2. \tag{49}$$

この条件は, さらに γ_i の正値性を導く:

$$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 \geq 0. \tag{50}$$

($\because$ 一般性を失うことなく, $\gamma_3 \leq \gamma_2 \leq \gamma_1$ とすることができる. (49) より, $\gamma_1 \leq \gamma_2+\gamma_3$ であるので, $\gamma_3 \leq \gamma_2 \leq \gamma_1 \leq \gamma_2+\gamma_3$. よって, $\gamma_2 \leq \gamma_2+\gamma_3 \Leftrightarrow 0 \leq \gamma_3$. よって γ_i's の正値性 $0 \leq \gamma_3 \leq \gamma_2 \leq \gamma_1$ が成立する.) つまり,

$$\boxed{\gamma_1+\gamma_2 \geq \gamma_3 \geq 0,\qquad \gamma_2+\gamma_3 \geq \gamma_1 \geq 0,\qquad \gamma_3+\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq 0} \tag{51}$$

が成立している. **条件 (51) は, 力学的半群の場合にはなく, 完全正値力学的半群に特有な性質である.**

3.5.3 緩和定数 (緩和時間)

Bloch 方程式 (48) の解は行列 A の固有値 λ_i $(i=1,2,3)$ を指数の肩に乗せた形:

$$\exp(-\lambda_i t)=\exp(-i\,\mathrm{Im}\,\lambda_i t)\exp(-\mathrm{Re}\,\lambda_i t) \tag{52}$$

である[*29]ために, 行列 A の固有値の虚部は振動を与え, 固有値実部が指数関数的な散逸の時間スケールを決定する. そこで, 緩和定数 Γ_i $(i=1,2,3)$, 緩和時間 T_i $(i=1,2,3)$ を

$$\Gamma_i \equiv \mathrm{Re}\,\lambda_i,\ \lambda_i : \text{行列 } A \text{ の固有値} \tag{53a}$$
$$T_i \equiv 1/\Gamma_i\ (i=1,2,3) \tag{53b}$$

によって定義する. これは実験により観測が可能な物理量であることを強調しておく.

[*29] 行列 A が対角化可能でない場合は, さらに t のべきがかかる.

現象論的 Bloch 方程式 (44) の場合行列 A の固有値は, $\Gamma_L, \Gamma_T \pm i\gamma B$ であるので, 二つの独立な緩和定数 Γ_L, Γ_T があることになる. よって, Bloch の導入した縦・横緩和定数 (またその逆数の縦・横緩和時間) は, 上定義における緩和定数に一致する. また, これらの固有値に属する固有ベクトルは, 縦緩和定数の場合が z 軸に比例し, 横緩和定数の場合が x,y 平面に属するベクトルの集合である. エネルギー方向 (磁場方向) を z 軸に設定したために, 縦緩和とはエネルギー緩和を, 横緩和とはその非干渉化をする時間スケールを与えるのである.

次に, 一般化された "縦・横" 緩和定数を定義する [35]: 現象論的 Bloch 方程式の縦・横緩和が, 実固有値の実部, 複素固有値の実部に対応していることに着目する. そこで, 一般化された Bloch 方程式においても, Bloch 方程式と同様に "縦・横" 緩和定数を,

$$\begin{cases} \Gamma_L \equiv (\text{行列 } A \text{ の実固有値の実部}), \\ \Gamma_T \equiv (\text{行列 } A \text{ の複素固有値の実部}) \end{cases} \tag{54}$$

によって与えるものとする. 実固有値は振動を伴わない指数関数的減衰を, 複素固有値は振動を伴う減衰をもたらす. この物理的特徴によって, 縦, 横緩和を定義しなおすのである. 現象論的 Bloch 方程式の場合は, さらに縦緩和がエネルギー緩和と同一視され, また横緩和はエネルギーの非干渉化と同一視される.

4　結果

4.1　$[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ 条件の物理的考察

本研究では, 力学的半群の生成子 (25) で, ハミルトニアン部と散逸部が可換なクラス:

$$[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0 \tag{55}$$

に着目した. 例えば対象系と環境系が弱結合である RD のマスター方程式は, ある時間の粗視化 (van Hove 極限 [24]) の下, 条件 (55) を備えることが一般的に示されている [36]. また第 3.5.1 節に紹介した現象論的 Bloch 方程式と等価なマスター方程式もこの条件を満たす. このことからも, 条件 (55) を満たすクラスに的を絞り, 考察することには意義があると考えられる.

本研究では, 条件 (55) が, エネルギー緩和とその非干渉化が独立に時間発展をするための十分条件であることを示す (第 4.1.1 節定理 7). このことは, 条件 (55) を満たすマスター方程式が, Pauli マスター方程式を満たすことを意味している. また 2 準位系の場合, この条件が現象論的 Bloch 方程式を完全に特徴付けること, 一般化された詳細釣り合いの原理を満たすことを示す (第 4.1.2 節).

4.1.1 Pauli マスター方程式

まず, 以下の定理を示すことができる:

定理 7 [G.K.]
力学的半群における生成子 $\mathcal{L}=\mathcal{H}+\mathcal{D}$ (25) が,

$$[\mathcal{H},\mathcal{D}]=0 \tag{56}$$

を満たし, かつ有効ハミルトニアン H が非縮退 ε_i $(i\in\mathbb{Z})$ の離散固有値のみを持つものとする: $H|i\rangle=\varepsilon_i|i\rangle$. このとき,

$$p_{ij}(t)\equiv \mathrm{tr}\,\rho(t)|i\rangle\langle j| \tag{57}$$

は, 対角成分, 非対角成分にそれぞれ閉じた方程式で記述される (ただし, $H|i\rangle=\varepsilon_i|i\rangle$):

$$\text{(i)}\quad \frac{d}{dt}p_{ii}(t)=\sum_j W_{ij}p_{jj}(t)\quad (i=j), \tag{58}$$

$$\text{(ii)}\quad \frac{d}{dt}p_{ij}(t)=\sum_{k\neq l} V_{ij;kl}p_{kl}(t)\ (i\neq j). \tag{59}$$

ここで, 係数 $W_{ij},V_{ij;kl}$ は次の関係式を満たす:

$$\text{(i)}\quad \overline{W}_{ij}=W_{ij},\ \sum_i W_{ij}=0 \tag{60}$$

$$\text{(ii)}\quad V_{ij;kl}=\overline{V}_{ji;lk}. \tag{61}$$

これより, 次の系を得る:

系 2 [G.K.]
定理 7 の条件を満たすマスター方程式は, Pauli マスター方程式を満たす: すなわち, 対角成分 $p_{ii}(t)\equiv \mathrm{tr}\,\rho(t)|i\rangle\langle i|=\langle i|\rho(t)|i\rangle\equiv p_i(t)$

$$\frac{d}{dt}p_i(t)=\sum_{j\neq i}W_{ij}p_j(t)-\sum_{j\neq i}W_{ji}p_i(t). \tag{62}$$

定理 7, 系 2 の証明
まず, 力学的半群の生成子 (25)$\mathcal{L}=\mathcal{H}+\mathcal{D}$ に対して,

$$[\mathcal{H},\mathcal{D}]=0\Leftrightarrow[\mathcal{H},\mathcal{L}]=0\Leftrightarrow[\mathcal{H}^*,\mathcal{L}^*]=0 \tag{63}$$

が成立する (ただし, $\mathcal{H}^*$, $\mathcal{L}^*$ は Hilbert-Schmid 内積による $\mathcal{H}$, $\mathcal{L}$ の共役). ここで, 任意の $\rho \in \mathcal{T}(\mathcal{H})$, $A \in B(\mathcal{H})$ に対して,

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}\mathcal{H}(\rho)A &= \operatorname{tr}(-i[H,\rho]A) = -i\operatorname{tr}((H\rho A - \rho H A)) \\ &= -i\operatorname{tr}(\rho(AH - HA)) = \operatorname{tr}\rho i[H,A] = \operatorname{tr}\rho\mathcal{H}^*(A)\end{aligned} \tag{64}$$

が成立するので, $\mathcal{H} = -\mathcal{H}^*$ である (三番目の等式には $\operatorname{tr}AB = \operatorname{tr}BA$ を用いている). よって, 式 (63) より,

$$[\mathcal{H}, \mathcal{L}^*] = 0 \tag{65}$$

が成立する. ところで, 超演算子である $\mathcal{H}\cdot = -i[H,\cdot]$ の固有値 ω は, H の固有値の差を $-i$ 倍したもの: $\omega = -i(\varepsilon_i - \varepsilon_j)$ であり, その固有ベクトルは $|i\rangle\langle j|$. 特に, H が非縮退であるので $\mathcal{H}$ の 0 固有値に属する固有ベクトルは $|i\rangle\langle i|$ の重ね合わせのみである. つまり, $\mathcal{H}$ の 0 固有値に属する固有空間は $\{ \sum_i x_i|i\rangle\langle i|,\ x_i \in \mathbb{C} \}$ となる. 式 (65) より $\mathcal{L}^*$ と $\mathcal{H}$ は可換であるので, $\mathcal{L}^*$ が $\mathcal{H}$ の 0 固有値に属する固有ベクトルの一つの $|i\rangle\langle i|$ に作用すると, それはまた $\mathcal{H}$ の 0 固有値に属する固有ベクトルでなくてはならない: すなわち, $\forall i$ に対し, ある $W_{ij} \in \mathbb{C}$ が存在し,

$$\mathcal{L}^*\,|i\rangle\langle i| = \sum_j W_{ij}|j\rangle\langle j|, \tag{66}$$

が成立する. 同様に, $i \neq j$ に対する $\mathcal{L}^*\,|i\rangle\langle i|$ も, $\mathcal{H}$ の同じ固有値 $-i(\varepsilon_i - \varepsilon_j)$ に属するので, $\forall i,j\ (i \neq j)$ に対し, ある $V_{ij;kl} \in \mathbb{C}$ が存在し,

$$\mathcal{L}^*\,|i\rangle\langle j| = \sum_{l\neq k} V_{ji;lk}|l\rangle\langle k|, \tag{67}$$

が成立する.

力学的半群の性質 (エルミート保存) $\mathcal{L}(A^\dagger) = (\mathcal{L}(A))^\dagger$, 特にその共役な関係の $\mathcal{L}^*(A^\dagger) = (\mathcal{L}^*(A))^\dagger$ に注意すると,

$$\overline{W}_{ij} = \langle j|(\mathcal{L}^*(|i\rangle\langle i|))^\dagger|j\rangle = \langle j|\,\mathcal{L}^*(|i\rangle\langle i|^\dagger)|j\rangle = \langle j|\,\mathcal{L}^*(|i\rangle\langle i|)|j\rangle = W_{ij}, \tag{68}$$

また,

$$\overline{V}_{ji;lk} = \langle k|(\mathcal{L}^*(|i\rangle\langle j|))^\dagger|l\rangle = \langle k|\,\mathcal{L}^*(|j\rangle\langle i|)|l\rangle = V_{ij;kl} \tag{69}$$

が成立する.

よって, 対角項 $p_{ii}(t)$ に対する方程式は,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}p_{ii}(t) &= \frac{d}{dt}\operatorname{tr}\rho(t)|i\rangle\langle i| = \operatorname{tr}\mathcal{L}\,\rho(t)|i\rangle\langle i| = \operatorname{tr}\rho(t)(\mathcal{L}^*(|i\rangle\langle i|))^\dagger \\ &= \sum_j \overline{W}_{ij}\operatorname{tr}\rho(t)|j\rangle\langle j| = \sum_j W_{ij}\operatorname{tr}\rho(t)|j\rangle\langle j| = \sum_j W_{ij}p_j,\end{aligned} \tag{70}$$

非対角項 $p_{ij}(t)(i \neq j)$ に対する方程式は,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}p_{ij}(t) &= \frac{d}{dt}\operatorname{tr}\rho(t)|i\rangle\langle j| = \operatorname{tr}[(|j\rangle\langle i|)^\dagger\,\mathcal{L}\,\rho(t)] = \operatorname{tr}[(\mathcal{L}^*(|j\rangle\langle i|))^\dagger\rho(t)] \\ &= \sum_{k\neq l}\overline{V}_{ji;lk}\operatorname{tr}\rho(t)|k\rangle\langle l| = \sum_{k\neq l}V_{ij;kl}p_{kl}(t)\end{aligned} \tag{71}$$

となる．

式 (70) の両辺を i について和をとると，$\sum_i p_i = 1$ が成立する[30]ために，

$$0 = \sum_{ij} W_{ij} p_j,\ \forall\{p_j\} \Leftrightarrow \sum_i W_{ij} = 0 \tag{72}$$

が成立する．これを変形した $W_{ii} = -\sum_{i\neq j} W_{ij}$ を対角項の方程式 (70) に代入すると，Pauli マスター方程式 (62) が成立する．

QED

式 (57) の対角項はエネルギーが ε_i にある確率 p_i，非対角項はエネルギーの非干渉項と見なすことができる．一般的に，これらは従属して時間発展をするものである．定理 7 は，条件 (55) がエネルギーと非干渉項が独立に時間発展をするための十分条件であることを示している．これにより，Pauli が現象論的にエネルギー緩和を記述するために導入した，Pauli マスター方程式が成立することがわかる．

4.1.2 一般化された Bloch 方程式と $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$

定理 7, 系 2 を 2 準位系の場合に当てはめると，興味深い結論が導かれる．ハミルトニアン H を

$$H = \omega(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) \tag{73}$$

と対角化すると，Pauli マスター方程式 (62) より，対角成分 $p_{\pm} = \operatorname{tr}\rho(t)|\pm\rangle\langle\pm|$ は，

$$\frac{d}{dt}p_+ = W_{12}p_- - W_{21}p_+, \tag{74}$$

$$\frac{d}{dt}p_- = W_{21}p_- - W_{12}p_- \tag{75}$$

が成立する．よって，z 方向の偏極成分 $\langle\sigma_z\rangle = \omega(p_+ - p_-)$ は

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\sigma_z\rangle &= -(W_{12} + W_{21})\langle\sigma_z\rangle + (W_{12} - W_{21})\\ &= -\Gamma_L\langle\sigma_z\rangle + \frac{a}{2},\quad \Gamma_L \equiv W_{12} + W_{21},\ a \equiv 2(W_{12} - W_{21})\end{aligned} \tag{76}$$

に従う．よって，z 方向の偏極成分は $T_L \equiv 1/\Gamma_L$ の時間スケールで指数関数的に散逸することがわかる．これはエネルギー期待値 $\langle H\rangle = \omega\langle\sigma_z\rangle$ が指数関数的に散逸することを意味している．

また，非対角項 $p_{+-} = \operatorname{tr}\rho(t)|+\rangle\langle-|$, $p_{-+} = \operatorname{tr}\rho(t)|-\rangle\langle+|$ は

$$\frac{d}{dt}p_{+-} = Vp_{+-}, \tag{77}$$

$$\frac{d}{dt}p_{-+} = \overline{V}p_{-+} \tag{78}$$

となる．ここでは，$\mathcal{H}$ の $|+\rangle\langle-|$ と $|-\rangle\langle+|$ に対する固有値は異なるため，p_{+-}, p_{+-} それぞれに閉じた式となることを用いた．よって，x, y 方向の偏極成分 $\langle\sigma_x\rangle = p_{+-} + p_{-+}, \langle\sigma_y\rangle = -i(p_{+-} - p_{-+})$

---

[30] 正確には，力学的半群のトレース保存の性質より，$\sum_i p_i = \sum_i \operatorname{tr}\rho(t)|i\rangle\langle i| = \operatorname{tr}\rho(t) = \operatorname{tr}\rho(0) = 1$ が成立する．

は

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\langle\sigma_x\rangle\\ \langle\sigma_y\rangle\end{pmatrix} = -\begin{pmatrix}\Gamma_T & -\Omega\\ \Omega & \Gamma_T\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\langle\sigma_x\rangle\\ \langle\sigma_y\rangle\end{pmatrix}, \quad -\Gamma_T \equiv \mathrm{Re}\,V,\ -\Omega \equiv \mathrm{Im}\,V \tag{79}$$

となり，これはエネルギーの干渉項が $T_T \equiv 1/\Gamma_T$ の時間スケールで指数関数的に散逸，つまり指数関数的に非干渉化が起こることを意味している．

以上をまとめると，偏極成分 $M_i(t) = \langle\sigma_i\rangle$ $(i = x, y, z)$ は

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{M}(t) = -A\boldsymbol{M}(t) + \boldsymbol{b}, \tag{80a}$$

$$\boldsymbol{M}(t) = \begin{pmatrix}M_1(t)\\ M_2(t)\\ M_3(t)\end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix}\Gamma_T & -\Omega & 0\\ \Omega & \Gamma_T & 0\\ 0 & 0 & \Gamma_L\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\ 0\\ a\end{pmatrix} \tag{80b}$$

を満たすことになり，これは現象論的 Bloch 方程式と完全に一致する (第 3.5.1 節, (44) 式参照)．よって，次の定理を得る:

定理 8 [G.K.]
2 準位系力学的半群における，生成子 $\mathcal{L} = \mathcal{H} + \mathcal{D}$ に対する条件 $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ は，現象論的 Bloch 方程式が成立するための必要十分条件である．

以上の議論では，縦・横緩和定数 Γ_L, Γ_T の正値性については触れていない．この性質は，力学的半群の確率保存の性質から保証される (もし，緩和定数が負であったなら，偏極成分は時間発展に対して発散してしまう．しかしながら，確率解釈より，偏極成分は有界な値しかとらないため矛盾する．)．

続いて，一般化された Bloch 方程式の表現 (48) 式を用いることで，定理 8 を別の角度から考察することにしよう．そのための幾つかの補題を示すことから始める:

補題 3 [G.K.]
力学的半群の生成子 (3) が $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ on $\left\{\rho \in M(2) \mid \rho = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}),\ \boldsymbol{n} \in \mathbb{R}^{(3)}\right\}$ を満たすことの必要十分条件は
(i)　$h_1 = 0$ or $\gamma_2 = \gamma_3$;
(ii)　$h_2 = 0$ or $\gamma_3 = \gamma_1$;
(iii)　$h_3 = 0$ or $\gamma_1 = \gamma_2$;
(1v)　$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{h} = 0$, i.e., $\boldsymbol{a} \propto \boldsymbol{h}$.

補題 4 [G.K.]
一般化された Bloch 方程式 (48) の行列 A が正規行列 ($[A, A^\dagger] = 0$) でるあための必要十分条件は
(i) $h_1 = 0$ or $\gamma_2 = \gamma_3$;
(ii) $h_2 = 0$ or $\gamma_3 = \gamma_1$;
(iii) $h_3 = 0$ or $\gamma_1 = \gamma_2$.

補題 3, 4 の証明は付録第 A.3 節, 第 A.4 節参照.
補題 3, 4 に基づいて, 以下の定理が成立する.

定理 9 [G.K.]
2 準位系力学的半群で, 生成子 $\mathcal{L} = \mathcal{H} + \mathcal{D}$ が, $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ を満たすとき, 一般化された Bloch 方程式 (48) 次の性質を満たす (ただし $H = 0$ の自明な場合は除く):
(a) 縦・横緩和定数が常に存在する;
(b) 縦緩和方向とハミルトニアンの方向が同じ;
(c) 縦・横緩和が直交する;
(d) 定常状態と有効ハミルトニアンの方向が同じ.
つまり, 2 準位系の $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ を満たす力学的半群は現象論的 Bloch 方程式と等価である (第 3.5.1 節参照).

ここで, 縦・横緩和とは一般化された "縦・横緩和"(54). さらに, 縦方向, 横方向とは縦・横緩和に対応する固有値 (つまり, 実固有値と複素固有値) に属する固有ベクトルの方向である. 有効ハミルトニアンの方向とは ${}^t(h_1, h_2, h_3)$ の方向である.

これは, 定理 8 を, 一般化された Bloch 方程式 (48) に基づき証明したものになるが, パラメータの対応がよりはっきりする.

定理 9 の証明: $H \neq 0$ であるので一般性を失うことなく $h_3 \neq 0$ とする. 補題 3 (iii) より, $\gamma_1 = \gamma_2$. ここで, (a)$\gamma_3 \neq \gamma_1 (= \gamma_2)$, (b)$\gamma_3 = \gamma_1 (= \gamma_2)$ と場合分けする.

場合 (a): 補題 3 (i),(ii) より, $h_1 = h_2 = 0$. さらに, 補題 3 (iv) より, $\boldsymbol{a} = {}^t(0, 0, 2ch_3)$, $c \in \mathbb{R}$ と表すことができる. Bloch 方程式 (48) の行列 A とベクトル $\boldsymbol{b}$ は,

$$A = \begin{pmatrix} \gamma_1 & h_3 & 0 \\ -h_3 & \gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_3 \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{b} = (0, 0, ch_3) \tag{81}$$

となり, 第 3.5.1 節に導入した現象論的 Bloch 方程式と完全に一致する. 現象論的 Bloch 方程式が (a)-(d) を満たすことは既に見た.

場合 (b): 補題 3 (iv) より, $\boldsymbol{a} = {}^t(2ch_1, 2ch_2, 2ch_3)$, $c \in \mathbb{R}$ と表すことができる. Bloch 方程式 (48) の行列 A とベクトル $\boldsymbol{b}$ は,

$$A = \begin{pmatrix} \gamma_1 & h_3 & -h_2 \\ -h_3 & \gamma_1 & h_1 \\ h_2 & -h_1 & \gamma_1 \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{b} = {}^t(ch_1, ch_2, ch_3) \tag{82}$$

A の固有値方程式は

$$\begin{aligned}\det(\lambda \mathbb{I} - A) &= (\lambda-\gamma_1)^3 + h_1^2(\lambda-\gamma_1) - h_1h_2h_3 + h_3^2(\lambda-\gamma_1) + h_1h_2h_3 + h_2^2(\lambda-\gamma_1)\\ &= (\lambda-\gamma_1)(\lambda^2 - 2\gamma_1\lambda + \gamma_1^2 + h_1^2 + h_2^2 + h_3^2) = 0. \end{aligned} \tag{83}$$

よって固有値, $\gamma_1, \gamma_2 \pm i|\boldsymbol{h}|$ を持つ. つまり (a) が示された ($\because \boldsymbol{h} \neq 0$). さらに, (b) 縦緩和 γ_1 に対する固有ベクトルが ${}^t(h_1, h_2, h_3)$ に比例することは直ちに示される:

$$\begin{pmatrix} \gamma_1 & h_3 & -h_2 \\ -h_3 & \gamma_1 & h_1 \\ h_2 & -h_1 & \gamma_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \end{pmatrix} = \gamma_1 \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \end{pmatrix}. \tag{84}$$

ここで, 補題 3, 4 によって, 力学的半群で条件 $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ を満たすものは, Bloch 方程式 (48) の行列 A が正規行列である. よって異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する (c). 最後に (d) 定常解が有効ハミルトニアンの方向と同じであることの証明を行なう. 定常解 $A^{-1}\boldsymbol{b} \propto {}^t(h_1, h_2, h_3) \Leftrightarrow \boldsymbol{b} \propto A^t(h_1, h_2, h_3)$ であるが, (84) より $A^t(h_1, h_2, h_3) \propto {}^t(h_1, h_2, h_3)$. 一方 (82) より $\boldsymbol{b} = {}^tc(h_1, h_2, h_3)$ であるために, $\boldsymbol{b} \propto A^t(h_1, h_2, h_3)$ が成立する. QED

この証明において, パラメータ γ_i $(i = 1, 2, 3)$ は常に行列 A の固有値の実部, すなわち緩和定数 Γ_i $(i = 1, 2, 3)$ であることに注意されたい:

$$[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0 \Rightarrow \gamma_i = \Gamma_i \ (i = 1, 2, 3) \tag{85}$$

が成立する (第 4.2 節補題 6 参照).

さらに, 2 準位系の場合 $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ の条件は, 一般化された詳細釣り合いの原理 [37] を満たすことがわかる:

定理 10 [G.K.]
2 準位系力学的半群で, 生成子 $\mathcal{L} = \mathcal{H} + \mathcal{D}$ が, $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ を満たすとき, 定常状態 ρ_0 に関する一般化された詳細釣り合いの原理を満たす.

ここで, 一般化された詳細釣り合いの原理とは次のように定義される:

定義 4 [一般化された詳細釣り合いの原理 [37]]
力学的半群において生成子 $\mathcal{L}$ が, $\rho_0 \in \mathcal{T}(\mathcal{H})$ に対する一般化された詳細釣り合いの原理とは,

$$(1)\ \mathcal{H}\rho_0 = 0,\ (2)\ \mathcal{D}(A\rho_0) = (\mathcal{D}^* A)\rho_0 \tag{86}$$

を満たすことにより定義する.

これは Pauli マスター方程式 (62) の場合には通常の詳細釣り合いの原理 [19]:

$$W_{jk}\langle k|\rho_0|k\rangle = W_{kj}\langle j|\rho_0|j\rangle \tag{87}$$

を以下のように演繹する.

Pauli マスター方程式が成立するとする.

$$\frac{d}{dt}\operatorname{tr}\rho(t)|i\rangle\langle i| = \operatorname{tr} W_{ij}\rho(t)|j\rangle\langle j| \Leftrightarrow \operatorname{tr}\rho(t)[L^*(|i\rangle\langle i|) - W_{ij}|j\rangle\langle j|] = 0$$
$$\Leftrightarrow \mathcal{D}^*(|i\rangle\langle i|) - W_{ij}|j\rangle\langle j| = 0. \tag{88}$$

(最後に $H^*|i\rangle\langle i| = 0$ を用いた.) 両辺に定常解 ρ_0 を作用させ, 一般化された詳細釣り合いの原理 (86) の (2) を用いると

$$\mathcal{D}(|i\rangle\langle i|\rho_0) = W_{ij}|j\rangle\langle j|\rho_0. \tag{89}$$

さらに両辺を $\langle a|\cdot|a\rangle$ にてはさむと

$$\langle a|\,\mathcal{D}(|i\rangle\langle i|\rho_0)|a\rangle = W_{ia}\langle a|\rho_0|a\rangle \tag{90}$$

を得る. よって,

$$W_{ia}\langle a|\rho_0|a\rangle = \langle a|\,\mathcal{D}(|i\rangle\langle i|\rho_0)|a\rangle = \operatorname{tr}\mathcal{D}(|i\rangle\langle i|\rho_0)|a\rangle\langle a| = \operatorname{tr}|i\rangle\langle i|\rho_0 D^*(|a\rangle\langle a|)$$
$$= \operatorname{tr}|i\rangle\langle i|D^*(|a\rangle\langle a|)\rho_0 = \operatorname{tr}|i\rangle\langle i|D(|a\rangle\langle a|\rho_0) = \langle i|D(|a\rangle\langle a|\rho_0)|i\rangle = W_{ai}\langle i|\rho_0|i\rangle. \tag{91}$$

式変形の際に一般化された詳細釣り合いの原理 (86) の (1) から得られる $[\rho_0, |i\rangle\langle i|] = 0$.

定理 10 の証明

証明には次の補題を用いる (補題の証明は付録第 A.5 節参照).

補題 5 [G.K.] 2 準位系力学的半群が $\rho_0 = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \sum_{i=1}^3 n_i F_i)$ に対して一般化された詳細釣り合いの原理を満たすことの必要十分条件は以下のように与えらる:

$$(1)\ \mathcal{H}\rho_0 \Leftrightarrow \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{h} = 0 \tag{92}$$

$$(2)\ \mathcal{D}(A\rho_0) = (\mathcal{D}^*A)\rho_0 \Leftrightarrow \begin{cases} (2-1) & \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a} = 0,\ (2-2)\ \forall i = 1,2,3,\ 2a_i = \gamma_i n_i, \\ (2-3) & \gamma_i = \gamma_j \text{ or } n_k = 0\ [(i,j,k):\ (1,2,3) \text{ の置換}]. \end{cases} \tag{93}$$

定理 10 の証明はこの補題より明らかである.

4.2 2 準位系の完全正値力学的半群と緩和定数

本節では, RD に基づいた量子 Markov 過程を記述する完全正値力学的半群に着目する. これまでに完全正値性の定義, RD との関連については触れたものの, 完全正値性が課す物理量への影響については考察をしていない. ユニタリー性が波動ベクトルに対する確率解釈であるのに対し, 完全正値性は密度行列に対する確率解釈でないことを考えると, 確率解釈に反しない振舞い以上の影響を物理量の時間発展に及ぼす可能性が高い. このことは, 完全正値性に対する実験による検証を与える可能性が出てくるために重要である. そこで, 本節では完全正値力学的半群を考察し, 力学的半群にはなく, 完全正値力学的半群に特有な物理量への影響を明らかにする. 完全正値力学的半群は力学的半群に完全正値性の仮定を加えたものであるために, 後者になく前者にある性質は, 完全正値性の特性を与えると考えられる.

対象系が 2 準位系の場合, Gorini *et al.* による緩和定数 (緩和時間) に関する議論がある. まずは, 彼らのより得られた定理を紹介する:

定理 11 [V. Gorini, A. Kossakowski and E. C. G. Sudarshan [14]]
2 準位完全正値力学的半群において, 生成子 (41) $\mathcal{L} = \mathcal{H} + \mathcal{D}$ が条件

$$[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0 \tag{94}$$

を満たす場合, 緩和定数 (53) Γ_i $(i = 1, 2, 3)$ の間に以下の関係式が成立する:

$$\Gamma_1 + \Gamma_2 \geq \Gamma_3 \geq 0, \quad \Gamma_2 + \Gamma_3 \geq \Gamma_1 \geq 0, \quad \Gamma_3 + \Gamma_1 \geq \Gamma_2 \geq 0. \tag{95}$$

前節において議論された (94) を満たす力学的半群に, 完全正値性が課せられると, 緩和定数の間に式 (95) のような制約が課せられることになる. 一般に三つ存在する緩和定数の任意の二つの和は残りの緩和定数よりも大きいという制約である.

定理 11 の証明

その証明には, 完全正値性から課せられたパラメータ γ_i に対する制約 (51):

$$\gamma_1 + \gamma_2 \geq \gamma_3 \geq 0, \quad \gamma_2 + \gamma_3 \geq \gamma_1 \geq 0, \quad \gamma_3 + \gamma_1 \geq \gamma_2 \geq 0$$

と, 次の補題 6 を用いる.

補題 6 [パラメータ γ_i $(i = 1, 2, 3)$ と緩和定数 Γ_i とを結ぶ補題 [14]]
Lindblad 型マスター方程式 (41) の生成子において (94) $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ が成立する特別な場合には, γ_i $(i = 1, 2, 3)$ は Bloch 方程式 (48) の行列 A の固有値の実部, つまり, 緩和定数 Γ_i $(i = 1, 2, 3)$ に一致する:

$$\gamma_i = \Gamma_i \ (i = 1, 2, 3). \tag{96}$$

(この補題の証明は前節の定理 9 の証明の際に既に示されている. 第 4.1.2 節式 (85) 参照.)

条件 (94) が成立する場合は, 補題 6 によって式 (51) の γ_i を緩和定数 Γ_i に置き換えることができるため定理 11 が成立する.

QED

定理 11 は条件 (94) の下に限定される. 条件 (94) は弱結合系の一般的特性であることや, 2 準位系では前節で議論されたように, 現象論的 Bloch 方程式を完全に特徴付けることからも, この限定は実用上の面から考えるとさほどの支障をきたすものではない. しかしながら近年注目を集める強結合系 [6, 35, 38] などにおいては, 条件 (94) は成立しない. よって, このような系に対して定理 11 は無力である. さらに本節の目的が, 完全正値力学的半群を特徴付ける現象の探索であることを考えると, 条件 (94) 等の付加的仮定がない, 完全正値力学的半群に普遍的な現象を探さなくてはならない.

最近我々は, 2 準位系完全正値力学的半群の具体的なモデルで, 条件 (94) を満たさないにもかかわらず, 緩和定数に同様の制約 (95) が課せられるものを見つけた [35]. このことは, 条件 (94) は, 緩和定数への制約 (95) に対する本質的な条件ではなく, この制約はさらに広い範囲において成立するものであることを示唆する. そこで, 2 準位系完全正値力学的半群において制約 (95) はどの程度広い範囲において成立するものであるのかに興味がある; その答えは次の定理によって与えられた.

定理 12 [G.K.] [39]
2 準位系完全正値力学的半群において, 緩和定数 Γ_i $(i=1,2,3)$ の間に以下の関係式が成立する:

$$\Gamma_1+\Gamma_2\geq\Gamma_3\geq 0,\quad \Gamma_2+\Gamma_3\geq\Gamma_1\geq 0,\quad \Gamma_3+\Gamma_1\geq\Gamma_2\geq 0. \tag{97}$$

すなわち, 緩和定数への制約 (97) は, 2 準位系の完全正値力学的半群全てにおいて成立する. このことによって制約 (97) のモデルに依らない普遍性が明らかになった; この制約に必要な仮定は完全正値力学的半群を構成する (i)-(iv)(第 3.4 節参照) だけである. 緩和定数が実験により測定可能であることから, 制約 (97) は (2 準位系) 完全正値力学的半群に対する実験検証を与えることになる.

定理 12 の証明

証明には次の補題 7 が有効である (補題の証明は付録 第 A.6.1 節参照):

補題 7 [G.K.]
3×3 実行列 A の固有値 λ_i $(i=1,2,3)$ の実部が非負 $\mathrm{Re}\,\lambda_i\geq 0$ $(i=1,2,3)$ であるとき, 不等式

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\,\lambda_1+\mathrm{Re}\,\lambda_2\geq\mathrm{Re}\,\lambda_3\geq 0,\\ \mathrm{Re}\,\lambda_2+\mathrm{Re}\,\lambda_3\geq\mathrm{Re}\,\lambda_1\geq 0,\\ \mathrm{Re}\,\lambda_3+\mathrm{Re}\,\lambda_1\geq\mathrm{Re}\,\lambda_2\geq 0\end{aligned} \tag{98}$$

が成立することの必要十分条件は,

$$f(\mathrm{tr}\,A/2)\geq 0, \tag{99}$$

(ただし, $f(x)$ は行列 A の固有値多項式 $f(x)=\det(x\mathbb{I}-\mathbb{A})$) である.

2 準位系完全正値力学的半群と等価な Bloch 方程式 (48) の行列 A の固有値実部は非負である. なぜならば, 完全正値力学的半群は, 確率解釈を保証する条件 (トレースと正値性の保存) があるために, 緩和定数が負であると確率解釈に矛盾するからである (より直接的証明は, 付録第 A.6.2 節参照). よって, Bloch 方程式 (48) の行列 A に対して上補題を用いることができる. 式 (48) の行列 A に関して $f(\mathrm{tr}\,A/2)$ を直接的に計算して, まとめると

$$\begin{aligned}f(\mathrm{tr}\,A/2)=&-\frac{1}{4}\gamma_1\gamma_2\gamma_3\\ &+\frac{1}{8}\{(\gamma_1^2+h_1^2)(\gamma_2+\gamma_3-\gamma_1)+(\gamma_2^2+h_2^2)(\gamma_3+\gamma_1-\gamma_2)+(\gamma_3^2+h_3^2)(\gamma_1+\gamma_2-\gamma_3)\}\\ =&\frac{1}{8}[(\gamma_1+\gamma_2-\gamma_3)(\gamma_2+\gamma_3-\gamma_1)(\gamma_3+\gamma_1-\gamma_2)\\ &+h_3^2(\gamma_1+\gamma_2-\gamma_3)+h_1^2(\gamma_2+\gamma_3-\gamma_1)+h_2^2(\gamma_3+\gamma_1-\gamma_2)]\end{aligned} \tag{100}$$

となる. 完全正値性から課せられたパラメータ γ_i に対する制約 (51) より式 (99) が成立するのは明らかである; 補題 7 より式 (98) が成立する. これは制約 (97) に他ならないので, 定理 12 が成立する. QED

ここで定理 12 の重要な系 3 を示すことができる.

系 3 [V. Gorini, A. Kossakowski and E. C. G. Sudarshan [14], G.K.]
2 準位系完全正値力学的半群では, 縦・横緩和定数 Γ_L, Γ_T の間に以下の関係式が成立する:

$$2\Gamma_T \geq \Gamma_L \geq 0. \tag{101}$$

系 3 の証明

縦, 横緩和定数 Γ_L, Γ_T が存在する複素固有値が存在する場合である (第 3.5.3 節参照). Bloch 方程式 (48) 行列 A は実行列であるために, 固有値が実固有値: $\lambda_R = \Gamma_L$ と, 共役な複素固有値: $\Lambda_C \pm i\Omega = \Gamma_T \pm i\Omega$ がある場合のみである. よって $\Gamma_1 = \Gamma_L, \Gamma_2 = \Gamma_T, \Gamma_3 = \Gamma_T$ とおくと, 制約 (97) は

$$\Gamma_L + \Gamma_T \geq \Gamma_T \geq 0, \quad \Gamma_T + \Gamma_T \geq \Gamma_L \geq 0, \quad \Gamma_T + \Gamma_L \geq \Gamma_T \geq 0 \tag{102}$$

となる. このうち二つは Γ_L, $\Gamma_T \geq 0$ であるので残りの $2\Gamma_T \geq \Gamma_L \geq 0$ に吸収できる. よって題意は示された. QED

この関係式は, Gorini *et al.* によっても議論されているが, 彼らの議論はあくまでも条件 (94) 下の制限付きである*31. これに対して, 系 3 は, この条件なしに成立するものである. 実は, 関係式 (101) は 縦・横緩和定数の間に知られている実験において, この関係式を満たさない例は知られていない有名な式である [10, 40]. つまり, 定理 12 は縦・横緩和に関する実験を再現するのである. これは (2 準位系) 完全正値力学的半群に対する実験による支持を与える結果である. このことに関しては, 詳しくは第 4.4 節にて議論をする.

4.3 初期相関と完全正値性

第 3.3.3 節において, 初期相関が無い場合の RD には完全正値性が課せられることが示された. そこでは, 具体的に Heisenberg 描像における時間発展演算子を構成 (式 (38)) することにより, その完全正値性が証明された (第 A.2 節参照). 初期相関がある場合にも, 第 3.3 節において説明した RD の方法を用いることには何の問題もない. ある時刻 (それを初期時刻と考える) において, 対象系と環境系の相関がある状態 (量子的絡み合いの状態) であったとしても, 全体系は Shrödinger 方程式 (26)(または von Neumann 方程式 (27)) に従ってユニタリー発展をするのみである:

$$\rho_{\mathrm{TOT}}(t) = U_t \rho_{\mathrm{TOT}}(0) U_t^{\dagger}. \tag{103}$$

(U_t は時間 t をパラメータと持つあるユニタリー演算子.) 対象系の状態は, 縮約された密度行列 (10) に基づいて, 環境系の部分和 tr_E をとることによって導出される:

$$\rho_S(t) = tr_E \rho_{\mathrm{TOT}}(t). \tag{104}$$

この意味において初期相関のある場合の RD には何ら混乱も生じることはなく, 統一的な見解が課せられる. 問題は, 具体的な時間発展演算子の構成である. 初期相関が無い場合の式 (33), (38) の構成

*31 前節では, 2 準位系の場合に条件 (94) が現象論的 Bloch 方程式と等価となる条件であったことが判明した. 現象論的 Bloch 方程式が必ず縦・横緩和定数を持つことを考えると, 条件 (94) の下での議論は制約 (95) と (101) は全く同じであることになっている.

に対して, 初期相関が存在する場合に, $\Lambda_t : \rho_S(0) \to \rho_S(0)$:

$$\rho_S(t) = \Lambda_t \rho_S(0) \tag{105}$$

を構成することは難しい. 一連の流れ (式 (103), (104)) に基づいた時間発展演算子 (105) の構成には, ある写像 $\Phi : \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E) \to \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_S)$:

$$\Phi(\rho_S(0)) = \rho_{\mathrm{TOT}}(0) \tag{106}$$

の存在が要請されるように思われる [41–43]. すなわち,

$$\rho_S(t) = \mathrm{tr}_E\, U_t \rho_{\mathrm{TOT}}(0) U_t^\dagger = \mathrm{tr}_E\, U_t \Phi(\rho_S(0)) U_t^\dagger, \tag{107}$$

に基づいて, 時間発展演算子の構成が行なわれる. 初期相関が無い場合 $\rho_{\mathrm{TOT}}(0) = \rho_S \otimes \rho_E$ には, 演算子 Φ の具体形は明らかで, 任意の $\rho \in \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_S)$ に対して

$$\Phi\rho = \rho \otimes \rho_E \tag{108}$$

となる.

1994 年 Pechukas は「Reduced Dynamics Need Not Be Completely Positive」という題の論文の中で, 初期相関がある場合の RD では完全正値性は成立しないという主張を行なった [41]. これに対し, Alicki はそのコメントの中で, 論点の本質, 課せられる仮定を明確にし, 初期相関がある場合においても完全正値性が課せられる可能性を与えた [42]. ここでは, Alicki により整理された議論を紹介する. まず, 演算子 Φ に対して課す条件として以下の三つの条件を挙げる:

(a) $\mathrm{tr}_E\, \Phi(\rho) = \rho, \forall \rho \in \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_S)$
(b) 任意の正値演算子 ρ に対し, $\Phi(\rho)$ は正値演算子である.
(c) Φ は線形作用素である.

(a) は初期時刻において成立する (106) と, 縮約された密度行列 (10) が矛盾なく成立するよう課す条件である. (b) に関しても, ρ が対象系の状態であれば $\Phi(\rho)$ は全体系の状態であることを要請している*32. (c) に関しては, 混合性の保持であるが, 欠かせない条件とはいえないであろう. Pechukas は次の定理を得た.

定理 13 [P. Pechukas [41]]
(a)-(c) 全てを満たす写像 $\Phi : \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E) \to \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_S)$ は,

$$\Phi(\rho) = \rho \otimes \rho_E, \ \rho_E \in \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}_E) \tag{109}$$

の形 (つまり初期相関が無い場合) に限られる.

そこで, 初期相関がある場合に写像 Φ を構成しようとすると, (a)-(c) の仮定のいずれかを犠牲にすることになり, 特に条件 (b) が崩れる場合には, 完全正値性どころか正値性の条件が崩れることにな

*32 (b) は正値性のみの条件であるが, 規格化条件は (a) によって補われている. $\mathrm{tr}_{SE}\, \phi(\rho) = \mathrm{tr}_S\, \rho$ ($\because$ (a)).

る．これが Pechukas の行なった議論である*33．一方で，Alicki は，条件 (b) ではなく，(a) または (c) を犠牲にすることによって完全正値性を保持する写像が構成可能であることを示した [42]．特に彼は，条件 (c) 線形性が物理的に要請されるものではないことを強調している．いずれにしても，彼が認めているように，初期相関のある場合に RD(時間発展演算子の構成) に関する統一的見解はまだないようである．

本研究では RD と完全正値性の関係が Heisenberg 描像に基づくために，Heisenberg 描像の時間発展演算子を構成し，その完全正値性に関する議論を行なった (初期相関の無い場合には，(38) 式．)．

対象系の観測量 $A \otimes \mathbb{I}_E$ の期待値 $\langle A\rangle_t$ は，

$$\langle A\rangle_t = \mathrm{tr}_{SE}\, \rho_{\mathrm{TOT}}(0) U_t^\dagger A \otimes \mathbb{I}_E U_t \tag{110}$$

であるので，任意の A に対してこの期待値を再現するように Heisenberg 描像における時間発展演算子 Λ_t^* を構成する:

$$\mathrm{tr}_S\, \rho_S(0) \Lambda_t^* A = \mathrm{tr}_{SE}\, \rho_{\mathrm{TOT}}(0) U_t^\dagger A \otimes \mathbb{I}_E U_t, \ \forall A \in B(\mathcal{H}), \tag{111}$$

ただし $\rho_S(0) = \mathrm{tr}_E\, \rho_{\mathrm{TOT}}(0)$．ここで，$\rho_S(0)$ の逆元がある場合 (Faithful State)，Λ_t の具体形の候補が求まる:

$$\mathrm{tr}_{SE}\, \rho_{\mathrm{TOT}}(0) U_t^\dagger A \otimes \mathbb{I}_E U_t = \mathrm{tr}_{SE}\, \rho_S(0) \rho_S(0)^{-\frac{1}{2}} \rho_{\mathrm{TOT}}(0)^{\frac{1}{2}} U_t^\dagger A \otimes \mathbb{I}_E U_t \rho_{\mathrm{TOT}}(0)^{\frac{1}{2}} \rho_S(0)^{-\frac{1}{2}} \tag{112}$$

より，

$$\Lambda_t^* A = \rho_S(0)^{-\frac{1}{2}} \rho_{\mathrm{TOT}}(0)^{\frac{1}{2}} U_t^\dagger A \otimes \mathbb{I}_E U_t \rho_{\mathrm{TOT}}(0)^{\frac{1}{2}} \rho_S(0)^{-\frac{1}{2}}, \ \forall A \in B(\mathcal{H}). \tag{113}$$

この写像が完全正値性を備えることは付録第 A.2 節の証明とほぼ平行して示される．よって，$\rho_S(0)$ の逆元がある場合には初期相関があっても完全正値性が成立することがわかる．すなわち，

定理 14 [G.K.]
初期相関があり，縮約された状態 ρ_S に逆元が存在する場合には，Heisenberg 描像における時間発展演算子 Λ_t^* (113) は任意の時刻 t において完全正写像である．

この写像は $\rho_S(0)$ の逆元が無い場合には定義できないが，2 準位系の対象系の場合には初期相関が無い場合の式 (38) と組み合わせることで，全てを言い尽くすことができる: $\rho_S(0)$ の固有値を p_1, p_2 とする．$\rho_S(0)$ の逆元が存在しないときは，$\rho_S(0)$ の固有値に $p_1 = 0$ が存在する場合である．一方 $1 = \mathrm{tr}\, \rho_S(0) = p_1 + p_2$ であるために $p_2 = 1$ が成立する．よって，$\rho_S(0)^2 = \rho_S(0)$(純粋状態) となる．この対偶をとると，状態が混合である場合には，逆元が存在することになる．一方，定理 2 より，相関がある状態の縮約された状態は混合状態 $\rho_S(0)^2 \neq \rho_S(0)$ となるために，相関がある場合の縮約された状態の逆元が存在することになる．そこで，対象系が 2 準位系であるならば初期相関が無い場合は式 (38)，初期相関がある場合には式 (113) を用いることによって初期相関がある無しにかかわらず，Λ_t^* に完全正値性が課せられることが示される．すなわち，次の定理を得ることができる:

*33 文献 [41] で Pechukas はこのような仮定を暗に用いているのみで，明確な論点を付いているわけではない．これらは Alicki による整理された議論である．

定理 15 [G.K.]
2 準位系の場合, Heisenberg 描像における時間発展演算子 Λ_t^* は任意の時刻 t において完全正写像である. ただし, 初期相関が無い場合には, Λ_t^* として (38), 初期相関がある場合には (113) を用いる.

しかしながら, 式 (113) は, 確かに初期状態が $\rho_{\mathrm{TOT}}(0)$ である場合には任意のオブザーバブル A に対する期待値を再現するが, 初期状態依存性があることに注意しなくてはならない: 式 (113) は, 初期状態が $\rho_{\mathrm{TOT}}(0)$ である場合のみに正当化される. このことは, 対応する Shrödinger 描像の時間発展演算子 Λ_t の構成をあきらめることになる. なぜならば Λ_t と Λ_t^* が共役で結ばれており, その一意性を保証するためには任意の $\rho \in \mathcal{T}(\mathcal{H})$ に対する関係 (36) が成立しなくてはならないからである.

結局初期相関がある場合の完全正値性に関する議論は完結していないように思われる.

4.4 定理 12 に関する議論

第 4.2 節において Gorini *et al.* の緩和定数に関する定理は一般化され, 制約 (97) は, 2 準位系完全正値力学的半群において必ず成立することが明らかになった. 緩和定数は測定可能な物理量である. よって, 制約 (97) は, 完全正値力学的半群に対する実験的な検証を与える.

ここまでに我々が用いた仮定を整理しよう: 力学的半群が (i) 強い確率解釈, (ii) 線形性, (iii) Markov 性を課すものであるのに対し, さらに (iv) 完全正値性の仮定を加えることによって得られるのが完全正値力学的半群であった. このことから力学的半群になく, 完全正値力学的半群に成立する制約 (97) は (iv) 完全正値性に対する実験検証を与えるものと考えることができる. 完全正値性は (初期相関の無い場合の) 縮約された力学 (RD) から要請される性質であった. このことは, 次の二つの意味で意義がある: まず, (a) 初期相関が存在する場合の RD には果たして完全正値性が課されるのかという問題, さらには (b) 非ユニタリー発展 (または不可逆過程) を記述するのに RD が万能であるかという問題に対し, 制約 (97) は実験により回答を与える可能性を持っている. (a) に関しては前節 4.3 において考察されたように, 初期相関が存在する場合の完全正値性に関する議論は必ずしも完結していない [41,42]. 制約 (97) は初期相関がある場合の完全正値性に対する実験検証を与える可能性がある. しかしながら, 初期相関がある場合の RD は, (完全正値) 力学的半群を構成する他の仮定 (i),(ii),(iii) に対する再検討も必要とされる. 特に (iii) Markov 性は初期相関がある場合に正当化されるかは自明でない. 例えば RD から Markov 性が得られる代表的な例としては, 時間の粗視化 (van Hove 極限 [24]) があるが, この極限は初期相関がある場合には上手く働かない. さらに (i) 強い確率解釈は, 初期相関がある場合の RD では成立しないことが Stelmachovič と Buzěk によって示されている [43]. 変わりに成立するのは, (i)$'$ 弱い確率解釈である (第 3.1 節参照). つまり時間発展演算子 $\Lambda_t : \mathcal{T}_{1,+} \to \mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ の定義域 $\mathrm{Dom}(\Lambda_t)$ が状態空間全体ではない*34. この理由は, 環境系の状態と相関の情報を固定すると, 必ずしも対象系の状態全てが全体系を状態とすることはないことにある. 相関が無い場合には, 環境系の状態 ρ_E を固定して, 任意の対象系の状態 ρ_S に対して

*34 この空間が凸集合を形成することは分かっているが, 具体的に環境系の状態の情報, 相関の情報が与えられたときにこの集合がどのようなものであるかはあまり議論されていない.

全体系の $\rho_S \otimes \rho_E$ が状態であったのである. このような理由から初期相関がある場合に対して制約 (97) の果たす役割—つまり何の仮定に対する制約になるか—はいささか曖昧なものとなる. (b) に関しては, RD は非ユニタリー性 (または不可逆性) を説明するのに確かに有力な方法論を提供するのであるが, 全ての非ユニタリー現象が RD によって説明されるかは定かではないという問題がある. 例えば量子論の観測問題は, 現在にいたっても統一的見解がなされておらず, 多くの理論が提唱されている [15, 44]. 観測装置を環境と見立てること (つまり RD を用いること) で, 非干渉化を説明する [11, 23] こともできるが, それも多くの理論のうちの一つに過ぎない. もし RD に共通の現象 (つまり, RD を用いた方法でハミルトニアンなどのモデルに依存しない共通現象) があったとして, さらにこれを満たさない実験が発見されたとすると, この実験結果を RD で説明することは不可能であることを意味する. 制約 (97) はその候補になる可能性がある. というのもこの制約は (iv) 完全正値性の仮定に対する実験検証を与えるものと考えられるが, 完全正値性は RD に共通の性質であるからである. しかし, (a) 初期相関の問題, さらに他の (i)- (iii) の仮定の問題もあるため制約 (97) をそのまま RD に対する検証として用いることは, 他の仮定を確認する実験が必要となるなどの工夫が必要となる. いずれにしても, 制約 (97) は, RD に対する新たな知見を与えることになるであろう. 特に, 縦・横緩和が存在する場合には, 制約 (3) は現在知られている実験では常に成立している有名な式であり [10, 40], このことは完全正値性, または RD に対する正当性を高める結果となっている.

いずれにしても, 制約 (97) が 2 準位系完全正値力学的半群に対する実験検証を与えることには相違ない. 完全正値力学的半群 (またそれと等価な Lindblad マスター方程式) が多くの分野において用いられている昨今, これら全てに共通の制約 (97) が存在し, 実験による検証が可能であることには意義があると考えている.

謝辞

本研究に対して, 常に有益なご意見, ご議論をして頂きました大場教授, 中里教授に感謝いたします. 本研究は, 先生方のご指導, ご教授の賜物です. また, 田崎教授, Kossakowski 教授に深く感謝をいたします. 田崎教授にはゼミを通じ, C^* 代数, 完全正値性, 完全正値力学的半群多くを学ばさせて頂きました. また, 定理 14 の証明には, 先生のお力をお借りいたしました. Kossakowski 教授には, 本研究の主なる結果である定理 12 に関する証明の詳細を追って頂き, また有益なご助言をいただけました. 本研究をするきっかけを与えて下さり, 鋭い物理的視点によるご指摘をしていただき, またいつも真剣に議論に付き合って頂いた今福氏には, 大変感謝しております. また, 湯浅氏には有益な議論をしていただいたばかりでなく, 概要や論文に対する細かいチェックをしていただきました. ありがとうございました. 本研究は, 密度行列空間上の時間発展を, モデルに依存しない統一的研究により行なった結果, 数学的で集合論的処方を取らざるを得ませんでした. この際, 数学的厳密性を保持するために, 宮本氏は常にご指導をしていただき, またいつでも質問に丁寧に答えてくださいました. 太田氏には, 常に真剣に物理学と向き合って, 本研究で得られた結果に対し有益なご意見を多く頂き, また議論をさせていただきました. 両氏にも大変感謝しております. 大場・中里研究室の皆様には, 日ごろから多くの面で支えていただき, 本研究がここに完成したのも皆様のおかげであります. 皆様に深く御礼申し挙げます.

付録 A　種々の証明

ここでは本文において省いた定理や補題に関する証明を与える.

A.1　第 2.2 節: 定理 2 の証明

証明のため次の補題を用意する:

補題 8 [G.K.]
$\rho_S = \sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \sum_i P_i = 1, |\langle\psi_i|\psi_i\rangle| = 1\forall i$ とする. このとき,

$$\rho_S^2 = \rho_S \Leftrightarrow \forall i,j, |\psi_i\rangle = |\psi_j\rangle.\ i.e., \rho_S = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \tag{114}$$

補題 8 の証明.

$$0 = \rho_S^2 - \rho_S = \sum_{i,j} P_i P_j \left(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle\langle\psi_j| - |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right). \tag{115}$$

よって,

$$0 = -\operatorname{tr}(\rho_S^2 - \rho_S) = \sum_{i,j} P_i P_j (1 - |\langle\psi_i|\psi_j\rangle|^2). \tag{116}$$

Schwarz の不等式より $|\langle\psi_i|\psi_j\rangle|^2 \leq 1$ であるので, $\forall i,j, P_iP_j(1-|\langle\psi_i|\psi_j\rangle|^2 \geq 0$. よって,

$$\forall i,j,\ 1 = |\langle\psi_i|\psi_j\rangle|(\because\ P_i \neq 0) \Leftrightarrow \forall i,j, |\psi_i\rangle = |\psi_j\rangle. \tag{117}$$

QED

定理 2 の証明
十分条件は自明であるので, 必要条件のみを示す.
(I) ρ_{TOT} が純粋状態:
$\exists|\psi\rangle = \sum_{ij} C_{ij}|i\rangle|\tilde{j}\rangle, s.t., \rho_{\mathrm{TOT}} = |\psi\rangle\langle\psi|$. よって, $\rho_S = \operatorname{tr}_E \rho_{\mathrm{TOT}} = \sum_m P_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m|$, $|\psi_m\rangle = \sum_i C_{im}|i\rangle/\tilde{C}_m$, $\tilde{C}_m = \sqrt{\sum_i |C_{im}|^2}$, $P_m = \tilde{C}_m^2$. 補題 8 より,

$$\forall m,n, |\psi_m\rangle = |\psi_n\rangle \Leftrightarrow \frac{\sum_i C_{im}|i\rangle}{\tilde{C}_m} = \sum_i \tilde{C}_{in}|i\rangle\tilde{C}_n \Leftrightarrow \forall i,m,n, \frac{C_{im}|i\rangle}{\tilde{C}_m} = \frac{C_{in}|i\rangle}{\tilde{C}_n} \equiv a_i. \tag{118}$$

よって,

$$\sum_{i,j} C_{ij}|i\rangle|\tilde{j}\rangle = \sum_i |i\rangle(\sum_j C_{ij}|\tilde{j}\rangle) = \sum_i |i\rangle\left(\tilde{C_{ij}a_i}\right) = (\sum_i a_i|i\rangle)(\tilde{C_j}|\tilde{j}\rangle) \equiv |\psi_S\rangle|\psi_E\rangle. \tag{119}$$

(II) ρ_{TOT} が混合状態:
略.

QED

A.2　第 3.3.3 節: 定理 4 の証明

初期相関の無い場合, RD の, Heisenberg 描像における時間発展演算子 Λ_t^* は, 式 (38) によって与えられた: $\Lambda_t^* A = \mathrm{tr}_E \left(\rho_E U_t^\dagger A U_t\right)$. 以後表記の簡明性から, $\Lambda_n^* \equiv \Lambda_t^* \otimes \mathbb{I}_n$ と表し, パラメータ t の添え字を落とす. ところで, 任意の $\beta(\mathcal{H}) \otimes M(n)$ 上の演算子 X は, $X = \sum_{i,j=1}^n A_{ij} E_{ij}$ によって分解される. ここで, $A_{ij} \in \beta(\mathcal{H})$, $E_{ij} \in M(n), s.t., [E_{ij}]_{kl} = \delta_{ik}\delta_{jl}$. さらに, 任意の正演算子 X_+ は極分解されて, $X_+ = X^\dagger X$ と表される. よって, $\forall X_+ = \sum_{i,j;k,l=1}^n A_{ij}^\dagger A_{kl} E_{ij}^\dagger E_{kl}$ と表される. よって,

$$
\begin{aligned}
\Lambda_n^* X_+ &= \sum_{i,j;k,l=1}^n \mathrm{tr}_E \left(\rho_E U_t^\dagger A_{ij}^\dagger A_{kl} U_t\right) E_{ij}^\dagger E_{kl} \\
&= \sum_{i,j;k,l=1}^n \mathrm{tr}_E \left(\rho_E U_t^\dagger A_{ij}^\dagger U_t U_t^\dagger A_{kl} U_t\right) E_{ij}^\dagger E_{kl} \\
&= \sum_{i,j;k,l=1}^n \mathrm{tr}_E \left(\rho_E C_{ij}^\dagger C_{kl}\right) E_{ij}^\dagger E_{kl},\ C_{ij} \equiv U_t^\dagger A_{ij} U_t \\
&= \mathrm{tr}_E\, \rho_E D^\dagger D,\ D \equiv \sum_{i,j=1}^n C_{ij} E_{ij}.
\end{aligned} \tag{120}
$$

これは正演算子である. 事実, 任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \otimes C^n$ に対して,

$$
\langle\psi|\, \mathrm{tr}_E\, \rho_E D^\dagger D |\psi\rangle = \sum_j p_j \langle\psi| D^\dagger D |\psi\rangle \geq 0 \tag{121}
$$

が成立する. ここで, ρ_E が環境の密度行列であるので, $\rho_E = \sum_j p_j |j\rangle\langle j|, p_j \geq 0,\ |j\rangle$: CONS と表される事実を用いた. よって, 任意の自然数 n に対して, Λ_n^* が正値保存であることが示された. つまり, Heisenberg 描像における時間発展演算子 Λ_t^* の完全正値性が示された.

QED

A.3　第 4.1.2 節: 補題 3 の証明

補題 3 の証明

繰り返し現れる和の記号を省略する.

$$
\begin{aligned}
[\mathcal{H},\mathcal{D}]\rho &= \frac{1}{2}h_k(\gamma-\gamma_i)\epsilon_{kil}(n_lF_i+n_iF_l)+\epsilon_{ijk}h_ia_jF_k \\
&= \frac{1}{2}h_k(\gamma-\gamma_i)\epsilon_{kix}(n_xF_i)+\frac{1}{2}h_k(\gamma-\gamma_x)\epsilon_{kxl}(n_xF_l)+\epsilon_{ijk}h_ia_jF_k \\
&= \left\{\frac{1}{2}h_k\left((\gamma-\gamma_i)\epsilon_{kix}F_i+(\gamma-\gamma_x)\epsilon_{kxi}F_i\right)\right\}n_x+\epsilon_{ijk}h_ia_jF_k \\
&= \left\{\frac{1}{2}h_k\epsilon_{kix}(\gamma_x-\gamma_i)F_i\right\}n_x+\epsilon_{ijk}h_ia_jF_k \\
&\quad +\frac{1}{2}\left(h_2(\gamma_1-\gamma_3)F_3+h_3(\gamma_2-\gamma_1)F_2\right)n_1 \\
&\quad +\frac{1}{2}\left(h_3(\gamma_2-\gamma_1)F_1+h_1(\gamma_3-\gamma_2)F_3\right)n_2 \\
&\quad +\frac{1}{2}\left(h_1(\gamma_3-\gamma_2)F_2+h_2(\gamma_1-\gamma_3)F_1\right)n_3 \\
&\quad +(h_2a_3-h_3a_2)F_1+(h_3a_1-h_1a_3)F_2+(h_1a_2-h_2a_1)F_3. \qquad (122)
\end{aligned}
$$

$[\mathcal{H},\mathcal{D}]=x_in_i+x_0=0$ on $\left\{\rho\in M(2)\mid\rho=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma},\ \boldsymbol{n}\in\mathbb{R}^{(3)})\right\}\Leftrightarrow x_i=x_0=0$ であり

$$
y_iF_i=0\Leftrightarrow\begin{pmatrix} y_3 & y_1-iy_2 \\ y_1+iy_2 & -y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0\\0&0\end{pmatrix}\Leftrightarrow y_i=0. \qquad (123)
$$

に注意すると, 式 (122) より

$$
[\mathcal{H},\mathcal{D}]=x_in_i+x_0=0\Leftrightarrow h_1(\gamma_3-\gamma_2)=0,\ h_2(\gamma_1-\gamma_3)=0,\ h_3(\gamma_2-\gamma_1)=0\wedge\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{h}=0. \qquad (124)
$$

QED

A.4 第 4.1.2 節: 補題 4 の証明

補題 4 の証明

一般化された Bloch 方程式 (48) の行列 A に関して $[A,A^\dagger]$ を計算すると:

$$
[A,A^\dagger]=\begin{pmatrix} 0 & 2h_3(\gamma_2-\gamma_1) & -2h_2(\gamma_3-\gamma_1) \\ -2h_3(\gamma_2-\gamma_1) & 0 & 2h_1(\gamma_3-\gamma\_2) \\ 2h_2(\gamma_3-\gamma_1) & -2h_1(\gamma_3-\gamma\_2) & 0\end{pmatrix}. \qquad (125)
$$

よって $[A,A^\dagger]=0$ であるためには,

(i) $h_1=0$ or $\gamma_2=\gamma_3$;

(ii) $h_2=0$ or $\gamma_3=\gamma_1$;

(iii)$h_3=0$ or $\gamma_1=\gamma_2$.

が成立することが必要十分である. QED

A.5 第 4.1.2 節: 補題 5 の証明

$\rho_0=\frac{1}{2}(\mathbb{I}+\sum_i n_iF_i),\ n_i\ (i=1,2,3)\in\mathbb{R}$ とする (以後繰り返し現れる添え字に関しては, $1\sim3$ の和を省略する).

(i) $\mathcal{H}\rho_0 = 0$ に対する必要十分条件:

$$\mathcal{H}\rho_0 = -i\frac{1}{2}[h_iF_i, \mathbb{I} + n_iF_i] = \frac{1}{2}\epsilon_{kij}h_in_j. \tag{126}$$

よって, $\mathcal{H}\rho_0 = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{h} = 0$.

(ii) $\mathcal{D}(A\rho) = \mathcal{D}^*(A)\rho,\ \forall A \in M(2)$ に対する必要十分条件:

$A = x_0\mathbb{I} + x_iF_i,\ x_i\ (i = 0, 1, 2, 3) \in \mathbb{C}$ とする.

$$\begin{aligned}
&\mathcal{D}(A\rho) - \mathcal{D}^*(A)\rho \\
&= \frac{1}{2}x_0[2a_i - \gamma_in_i + i\epsilon_{ijk}a_jn_k]F_i + \frac{1}{8}x_i[(-2a_i - \gamma_in_i - i\epsilon_{ijk}a_jn_k)\mathbb{I} + 2i(\epsilon_{jki}(\gamma_j - \gamma_i)n_k)F_j].
\end{aligned} \tag{127}$$

よって, (2-1) $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{a} = 0$, (2-2) $\forall i = 1, 2, 3,\ 2a_i = \gamma_in_i$, (2-3) $\gamma_i = \gamma_j$ or $n_k = 0$ [(i, j, k) : $(1, 2, 3)$ の置換] が必要十分条件となる.

A.6　第 4.2 節: 定理 12 の証明の補足

第 4.2 節における補題 7 の証明を与える. さらに, 緩和定数の正値性を具体的に判定する補題 9 を与える.

A.6.1　補題 7 の証明

補題 7 の証明

A を 3×3 実行列で $\lambda_i\ (i = 1, 2, 3)$ をその固有値とする. さらに, 固有値の実部の正値性 $\mathrm{Re}\lambda_i \geq 0\ (i = 1, 2, 3)$ が成立するものとする.

次の場合分けを行なう: (i) 一つの実固有値 $\lambda_R \geq 0$ と互いに複素共役な複素固有値 $\lambda_{C\pm} = \lambda_C \pm \Omega, \lambda_C \geq 0, i\Omega \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$ が存在する場合, (ii) 三つの実固有値 $0 \leq \lambda_3 \leq \lambda_2 \leq \lambda_1$ が存在する場合である (行列 A は実成分のみを持つために, 場合わけは (i),(ii) で十分である).

場合 (i)

式 (97) は, $\Gamma_1 = \lambda_R, \Gamma_2 = \Gamma_3 = \lambda_C$ とおくと,

$$\lambda_R + \lambda_C \geq \lambda_C, \quad \lambda_C + \lambda_C \geq \lambda_R, \quad \lambda_C + \lambda_R \geq \lambda_C \quad \Leftrightarrow \quad 2\lambda_C \geq \lambda_R \tag{128}$$

と変形される ($\because$, $\lambda_R \geq 0$). $\mathrm{tr}\,A = \lambda_R + (\lambda_C + i\Omega) + (\lambda_C - i\Omega) = 2\lambda_C + \lambda$ より, 式 (128) はさらに次のように変形される:

$$\mathrm{tr}\,A - \lambda_R \geq \lambda_R \Leftrightarrow \frac{\mathrm{tr}\,A}{2} \geq \lambda_R. \tag{129}$$

他方, 固有値多項式 $f(x) = \det(x\mathbb{I} - A)$ は, $x = \lambda_R$ に唯一の実数の 0 点を持ち, i.e., $f(x) = 0,\ x \in \mathbb{R} \Leftrightarrow x = \lambda_R$, 右上がりの関数 $\lim_{x\to\pm\infty} f(x) = \pm\infty$ であるために,

$$f(x) \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad x \geq \lambda_R \tag{130}$$

が成立する．式 (130) に $x = trA/2$ を採用すると，式 (128), (129) より

$$\lambda_R + \lambda_C \geq \lambda_C, \quad \lambda_C + \lambda_C \geq \lambda_R, \quad \lambda_C + \lambda_R \geq \lambda_C \quad \Leftrightarrow \quad f(\mathrm{tr}\,A/2) \geq 0 \tag{131}$$

が成立する．

場合 (ii)

仮定 $\lambda_3 \leq \lambda_2 \leq \lambda_1$ より式 (97) において自明でない式は

$$\lambda_2 + \lambda_3 \geq \lambda_1 \tag{132}$$

のみである．場合 (i) と同様に，$\mathrm{tr}\,A = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3$ より与式は $\mathrm{tr}\,A/2 \geq \lambda_1$ と等価である．この場合は固有値多項式 $f(x)$ は，三つの 0 点 $(x = \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ を持つために，

$$f(x) \geq 0, x \in \mathbb{R} \Leftrightarrow x \geq \lambda_1 \text{ or } \lambda_2 \geq x \geq \lambda_3 \tag{133}$$

が成立する．しかし，$x = \mathrm{tr}\,A/2$ の特別な点に関して $\lambda_2 \geq \mathrm{tr}\,A/2 \geq \lambda_3$ が無矛盾に成立するのは，$\lambda_1 = \lambda_2$ で $\mathrm{tr}\,A/2 = \lambda_2$ が成立するとき，または，$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ で，$\mathrm{tr}\,A/2 = \lambda_2 = \lambda_3$ が成立するときのみであることがわかる．これらはいずれも $\mathrm{tr}\,A/2 \geq \lambda_1$ に吸収可能な場合である．よって，場合 (ii) においても

$$\lambda_1 + \lambda_2 \geq \lambda_3, \quad \lambda_2 + \lambda_3 \geq \lambda_1, \quad \lambda_3 + \lambda_1 \geq \lambda_2, \quad \Leftrightarrow f(\mathrm{tr}\,A/2) \geq 0 \tag{134}$$

が成立する．つまり，次の補題 7 を得ることができる: QED

A.6.2 緩和定数の非負性に関する証明

続いて緩和定数の正値性に関して具体的な証明を与えるために，以下の補題 9 を示すことができる:

補題 9 [G.K.]
$M_{R,3} \equiv \{A : 3\text{ 行 }3\text{ 列の行列} \mid \mathrm{tr}\,A, \det A, \mathrm{tr}\,\mathrm{adj}\,A \in \mathbb{R}\}$ (ただし，$\mathrm{adj}\,A$ は行列 A の余因子行列，$\mathbb{R}$ は実数の集合) とすると，$A \in M_{R,3}$ の固有値の実部がゼロ以上であることの必要十分条件は，

$$\mathrm{tr}\,A \geq 0, \quad \det A \geq 0, \quad \mathrm{tr}\,\mathrm{adj}\,A \geq 0, \quad \text{and} \quad f(\mathrm{tr}\,A) \geq 0 \tag{135}$$

である．

実際一般化された Bloch 方程式 (48) の行列 A に関しては，$\gamma_i \geq 0,\ h_i \in \mathbb{R}$ より，

$$\begin{aligned}
&\mathrm{tr}\,A = \sum_{i=1}^{3} \gamma_i \geq 0, \quad \det A = \gamma_1\gamma_2\gamma_3 + \sum_{i=1}^{3} \gamma_i h_i^2 \geq 0, \\
&\mathrm{tr}\,\mathrm{adj}\,A = (\gamma_1\gamma_2 + \gamma_2\gamma_3 + \gamma_3\gamma_1) + \sum_{i=1}^{3} h_i^2 \geq 0, \\
&f(\mathrm{tr}\,A) = \gamma_1\gamma_2(\gamma_1+\gamma_2) + \gamma_2\gamma_3(\gamma_2+\gamma_3) + \gamma_3\gamma_1(\gamma_3+\gamma_1) \\
&\qquad + \gamma_1(h_2^2+h_3^2) + \gamma_2(h_3^2+h_1^2) + \gamma_3(h_1^2+h_2^2) + 2\gamma_1\gamma_2\gamma_3 \geq 0
\end{aligned} \tag{136}$$

が成立するため, 補題 9 より緩和定数の正値性が成立する.

補題 9 の証明

補題 9 の証明と同じく, 以下の場合分けを行なう.

(i) 一つの実固有値 $\lambda_R \geq 0$ と互いに複素共役な複素固有値 $\lambda_{C\pm} = \lambda_C \pm \Omega, \lambda_C \geq 0, \Omega \in \mathbb{R}\backslash 0$ が存在する場合, (ii) 三つの実固有値 $0 \leq \lambda_3 \leq \lambda_2 \leq \lambda_1$ が存在する場合である (行列 A は実成分のみを持つために, 場合わけは (i),(ii) で十分である).

(a) 必要条件

場合 (i)

直接の計算により,

$$\operatorname{tr} A = \lambda_R + \lambda_{C+} + \lambda_{C-} = \lambda_R + 2\lambda_C \geq 0, \tag{137}$$

$$\det A = \lambda_R \lambda_{C+} \lambda_{C-} = \lambda_R(\lambda_C^2 + \Omega) \geq 0, \tag{138}$$

$$\operatorname{tr}\operatorname{adj} A = \lambda_R\lambda_{C+} + \lambda_{C+}\lambda_{C-} + \lambda_{C-}\lambda_R = 2\lambda_R\lambda_C + (\lambda_C^2 + \Omega^2) \geq 0. \tag{139}$$

$\operatorname{tr} A = \lambda_R + 2\lambda_C \geq \lambda_R$ と $x \geq \lambda_R \Leftrightarrow f(x) \geq 0$ により, $f(\operatorname{tr} A) \geq 0$ も成立する.

場合 (ii)

同じく直接計算は,

$$\operatorname{tr} A = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \geq 0, \tag{140}$$

$$\det A = \lambda_1\lambda_2\lambda_3 \geq 0, \tag{141}$$

$$\operatorname{tr}\operatorname{adj} A = \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1 \geq 0, \tag{142}$$

を示す. さらに, $\operatorname{tr} A \geq \lambda_1$ と $x \geq \lambda_1 \Rightarrow f(x) \geq 0$ より, $f(\operatorname{tr} A) \geq 0$ も成立.

(ii) 十分条件

$\det A \geq 0 \Leftrightarrow f(0) \leq 0$ ($\because \det A = -f(0)$) であるため, $f(x)$ は少なくとも一つは非負の 0 点を持つ; つまり, 行列 A は少なくとも一つの非負の実固有値を持つ (ここでは, $f(x)$ が右上がりの三次関数であることを用いている).

場合 (i)

上述の結果より, $\lambda_R \geq 0$ と置くことができる. 残りの複素共役な固有値を $\lambda_{C\pm} = \lambda_C \pm i\Omega, \lambda_C \in \mathbb{R}, \Omega \in \mathbb{R}\backslash 0$ とすると, $f(\operatorname{tr} A) \geq 0 \Leftrightarrow \operatorname{tr} A (= \lambda_R + 2\lambda_C) \geq \lambda_R \Leftrightarrow \lambda_C \geq 0$.

場合 (ii)

場合 (i) と同様に $\det A \geq 0$ が成立するために,

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3, \ \lambda_1 \geq 0. \tag{143}$$

と置くことができる. しかし二つの場合, (i-2-a) $0 \geq \lambda_2 > \lambda_3$ と (i-2-b) $0 > \lambda_2 = \lambda_3$ は, 以下のように矛盾する:

(i-2-a) $0 \geq \lambda_2 > \lambda_3$

$f(\operatorname{tr} A) \geq 0 \Leftrightarrow \lambda_2 \geq \operatorname{tr} A \geq \lambda_3$ or $\operatorname{tr} A \geq \lambda_1$. $\lambda_2 \geq \operatorname{tr} A \geq \lambda_3$ と仮定すると, $\operatorname{tr} A \geq 0$ より $\lambda_2 = 0$. よって, $0 \geq \operatorname{tr}\operatorname{adj} A = \lambda_1\lambda 3 \geq 0 \Leftrightarrow \lambda_1$ or $\lambda_3 = 0$ が成立するが, $0 > \lambda_3$ であるので $\lambda_1 = 0$. しかしこれは $\operatorname{tr} A = \lambda_3 \geq 0$ と矛盾する. $\operatorname{tr} A \geq \lambda_1$ と仮定すると, $\operatorname{tr} A \geq \lambda_1 \Leftrightarrow \lambda_2 + \lambda_3 \geq 0$ である. 他方 $\lambda_3 \geq \lambda_2 + \lambda_3$ も成立するので, $\lambda_3 \geq 0$. これも $0 > \lambda_3$ と矛盾する.

(i-2-b) $0 > \lambda_2 = \lambda_3$

$f(\mathrm{tr}\, A) \geq 0 \Leftrightarrow \mathrm{tr}\, A = \lambda_2 (= \lambda_3)$ or $\mathrm{tr}\, A \geq \lambda_1$. $\mathrm{tr}\, A = \lambda_2(= \lambda_3)$ と仮定すると, $0 > \lambda_2 = \mathrm{tr}\, A$ は $\mathrm{tr}\, A \geq 0$ と矛盾する. $trA \geq \lambda_1$ と仮定すると, $\mathrm{tr}\, A \geq \lambda_1 \Leftrightarrow \lambda_2 + \lambda_3 \geq 0 \Leftrightarrow \lambda_2 \geq 0$ は $0 > \lambda_2$ と矛盾する. よって $f(\lambda) = 0$ は $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$ に制限される; つまり条件 (135) を満たす行列 $A \in M_{R,3}$ の固有値は非負である. QED

参考文献

[1] P. A. M. Dirac, *The Principles Of Quantum Mechanics* (Oxford, 1958).

[2] A. Arai, ヒルベルト空間と量子力学 (共立出版, 1997).

[3] 数学的に正しくは, 等長作用素 $U_t(\forall|\psi\rangle \in \mathrm{Dom}(U_t), ||\psi|| = ||U_t\psi||)$ は必ずしもユニタリー作用素ではない. しかし, 時間発展演算子の定義域, 値域が Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 全体であることを要請すると, U_t はユニタリー演算子となる (偏極恒等式を用いるとよい).

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

[5] 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).

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

[7] A. Kossakowski, Rep. Math. Phys **3**, 247 (1972); A. Kossakowski, Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Math. Astr. Phys. **21**, 1021 (1972); R. S. Ingarden and A. Kossakowski, Ann. Phys. **89**, 451 (1975).

[8] このことは, 19 世紀後半に Boltzmann により始められた「古典力学によって不可逆現象を説明する」という目論見と極度に類似している: 古典力学は可逆な理論であるから, この場合 **「可逆な理論によって不可逆な現象を説明する」** という命題となる. 実はこれは, 基礎理論が古典力学から量子力学に置き換わったことを除けば, 現在でもそのまま成立している: 量子力学は可逆な理論である. このユニタリー性と可逆性の類似は単なる論理的な構造に止まることはなく, さらに現象のレベルにおいて密接に関連している. 熱平衡化や非干渉化など多くの現象は, 非ユニタリーであると同時に, 不可逆な現象である. つまり, 熱平衡化や非干渉化等の現象を量子論に基づいて説明するためには, 上記の二つの命題— **「ユニタリーで可逆な量子論に基づいて, 非ユニタリーで不可逆な現象を説明する」** —を同時に解決する必要がある. しかしながら, これらを結びつける論理的な証拠はない. むしろ全く別の問題であることを認識するほうがよいと思われる. なぜならば, 非ユニタリー発展をするが可逆な現象, ユニタリー発展をするが不可逆な現象は両者共に存在する.

さて, 量子論が可逆な理論であることは, 時間反転対称性を備えることと, 回帰的であることの二つの意味を持つ. 後者は, 連続スペクトルが存在しない場合に起こり得る性質で, ある時間 (回帰時間) 待つと, 任意の精度で初期時刻に近い状態に戻る性質である. つまり, 可逆な理論によって不可逆な現象を説明することは, 「時間反転対称性を持つ理論が時間反転対称性を持たない現象を説明する」ことと, 「回帰性がある理論から回帰性が無い現象を説明する」という二つの命題のどちらを指すのか, または両方指しているのかに気をつけなくてはならない. このことを有

名な二つのパラドックス— Loshmidt と Zermelo のパラドックス —で説明しよう: Loshmidt, Zermoeo は両者とも, エントロピー増大則を古典力学により説明する Boltzmann の確率的 (統計的) 方法を批判するために, 次のようなパラドックスを考えた. Loshmidt のパラドックス: エントロピーが増大する古典力学的過程があったとすると, ある時刻に全ての粒子の速度を反転する (量子力学の場合は, 例えば位置表示における波動関数の複素共役を取る) ことが可能であるとすると, 古典力学は時間反転対称性を備える可逆性を備えるため, 粒子は元の位置に戻り始めてエントロピーは減少する. Zermelo のパラドックス: Poincare の回帰定理によると, ある時間だけ待つと, 初期時刻に任意の精度で近いところに戻るため, エントロピーが増大し続けることは不可能である. Loshmidt が時間反転対称性を備える意味での可逆性を利用したのに対して, Zermelo は回帰性を備える意味での可逆性を利用している.

[9] E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems* (Academic Press, London, 1976).

[10] R. Alicki and K. Lendi, *Quantum Dynamical Semigroups and Applications*, Lecture Notes in Physics Vol. 286 (Springer, Berlin, 1987).

[11] K. Kraus, Ann. Phys. **64**, 311 (1971); K. Kraus, *States, Effects, and Operations* (Springer, 1983).

[12] E. B. Davies, Z. Wahrscheinlichkeitstheorie, **23**, 161 (1972);D. E. Evans, Commun. Math. Phys. **48**, 15 (1976).

[13] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976).

[14] V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. **17**, 821 (1976).

[15] B. d'Espagnat, 量子力学における観測の理論, (S. Machida 訳) 岩波書店, 1980.

[16] A. Arai and H. Ezawa, 量子力学の数学的構造 I,II, 朝倉書店, 1999.

[17] F. Hiai and K. Yanagi, ヒルベルト空間と線形作用素, 牧野書店, 1995.

[18] C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988); S. Abe and Y. Okamoto, *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications* (Springer, 2000).

[19] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes In Physics And Chemistry* (North-Holland, 1983).

[20] K. Yoshida, *Functional Analysis* (Springer, Berlin, 1972).

[21] RD は, 「可逆な量子論による不可逆現象の説明」も同時に解決する: 対象系 S の RD は一般に時間反転対称性も失う: もともと量子論が備える時間反転対称性は, 全体系に対しては当てはまる. しかしその部分としての対象系 S のダイナミクスは, 可逆なユニタリー発展を引き起こすハミルトニアンの情報だけでなく, 初期時刻の環境系の状態, また相関度などの情報を含んだダイナミクスとなるために, 一般に Markov 的 (時間的な局所性) を失う (例えば時間発展は一般に時刻 t を陽に含んだ形となり, 時間反転対称性も失われる.) また, たとえ Markov 性が近似として正当化される領域においても, それは半群 (正の時間 $t \geq 0$ のみで定義される時間発展で, 群特性を持つもの) で記述され, 一般に時間反転が定義不可能である. 回帰的でない意味での不可逆性は, 例えば環境系 E が無限大の自由度を備える場合に説明される. 対象系 S のハミルトニアンの固有値が離散的である場合にも, 環境系 E の連続スペクトルが引き起こす, 全体系の回帰的でないダイナミクスが生じ, 部分としての対象系 S のダイナミクスの回帰性も失われる.

[22] I. Prigogine, 確実性の終焉, (S. Abiko 訳) みすず書房, 1997.

[23] W. H. Zurek, Phys. Rev. D, **24**, 1516 (1981); **26** 1862 (1982).

[24] L. van Hove, Physica **21**, 517 (1955); E. B. Davies, Commun. Math. Phys. **39**, 91 (1974).

[25] 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).

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

[27] G. Kimura, K. Yuasa, and K. Imafuku, Phys. Rev. A **63**, 022103 (2001).

[28] H. Umegaki, M. Ohya, and F. Hiai, 作用素代数入門, 共立出版, 1984.

[29] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge, England, 2000); M. Ohya and D. Petz, *Quantum Entropy and Its Use* (Spiringer-Verlag, 1993).

[30] I. Percival, *Quantum State Diffusion* (Cambridge University Press, New York, 1998).

[31] D. Braun, *Dissipative Quantum Chaos and Decoherence* (Springer-Verlag, New York, 2000).

[32] F. Benatti and R. Floreanini, Phys. Lett. B **389**, 100 (1996); Nucl. Phys. B **488**, 335 (1997).

[33] F. Bloch, Phys. Rev. **70**, 460 (1946).

[34] A. Kossakowski, Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Math. Astr. Phys. **21**, 649 (1973).

[35] G. Kimura, K. Yuasa, and K. Imafuku, quant-ph/0110150 (to be published in Physical Review Letters).

[36] H. Spohn and J. L. Leboqitz, Adv. Chem. Phys. **38**, 109 (1978).

[37] A. Alicki, Rep. Math. Phys. **10**, 249 (1976); A. Kossakowski, A. Frigerio, V. Gorini and M. Verri, Commun. Math. Phys. **57**, 97 (1977).

[38] W. J. Munro and C. W. Gardiner, Phys. Rev. A **53**, 2633 (1996); A. S. Parkins, C. W. Gardiner, and M. L. Steyn-Ross, Z. Phys. B **83**, 413 (1991).

[39] G. Kimura (in preparation).

[40] A. Abragam, *Principles of Nuclear Magnetism* (Oxford University Press, New York, 1961); F. Haake, in *Quantum Statistics in Optics and Solid-State Physics*, Vol. 66 of *Springer Tracts in Modern Physics*, edited by G. Höhler (Springer-Verlag, Heidelberg, 1973), pp. 98–168; C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance* (Springer-Verlag, Berlin, 1990).

[41] P. Pechukas, Phys. Rev. Let. **73**, 1060 (1994).

[42] R. Alicki, *ibid.* **75**, 3020 (1995).

[43] P. Stelmachovič and V. Buzěk, Phys. Rev. A **64**, 062106 (2001).

[44] J. A. Wheeler and W. H. Zurek, *Quantum Theory and Measurement* (Princeton University, 1983).