

量子非平衡定常ダイナミクスに対する計算物理的アプローチ

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

湯川諭¹

1 はじめに

熱平衡化過程と外力による非平衡化過程が競合しているような状況はきわめて頻繁に起こりえます。また状況によっては、そのような競合下でのみ存在するような現象もたくさんあるでしょう。ここでは、量子系におけるそのような競合状態に存在する物理現象を調べるための手法について考えましょう。それらは、たとえば線形応答理論、散逸の効果を取り込んだ経路積分、熱浴変数を消去した Liouville 方程式などがあります。これらの理論は互いに相補的であり、適用できる領域があります。例えば、線形応答理論は熱平衡状態からのずれが小さいときには現象をよく記述するでしょうし、経路積分を用いた方法は古典的な状況に近ければ取り扱いやすいでしょう。

注目している現象が熱平衡状態、古典の状況から非常に離れたところで起き、また時間に依存したような外場が存在しているときは、熱浴変数を消去した Liouville 方程式を使えば、解析的には難しいかもしれませんが、数値的には取り扱えるでしょう。このサブゼミの主題は「計算物理」という事ですから、熱浴変数を消去した Liouville 方程式を数値的に取り扱うことにします。内容としては、まず始めに計算すべき方程式を射影演算子法を用いて導出します。この方程式が導出されれば、あとは数値積分すればとりあえず何か計算結果が出ます。次に、その連立一次微分方程式が与える定常状態を考えましょう。特に、周期外力に対する定常状態を求める方法を解説します。最後に、具体的な応用例として「量子ラチェット系」に適用した結果を示します。

2 射影演算子法

射影演算子法によって、基本となる方程式を導出しましょう。始めに二三の定義をしておきます。まず、時間に依存した孤立系のハミルトニアンを $H(t)$ としましょう。この系は、時間に依存した外力が働いている注目している系、熱浴を表す自由度が大きな系、それら二つの系の間の相互作用を担う系と三つに分ける事ができます。それらのハミルトニアンを順に、 $H_{\text{sys}}(t)$ 、 H_B 、 H_{int} と書きましょう。全系の密度行列 $\sigma(t)$ は次のような Liouville 方程式にしたがって時間発展します。

$$\frac{\partial \sigma(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \sigma(t)] \quad (1)$$

三つのそれぞれのハミルトニアンに対応する Liouville 演算子を $i\mathcal{L}_{\text{sys}}(t) \equiv -(i/\hbar)[H_{\text{sys}}(t), \]$ 、 $i\mathcal{L}_{\text{int}} \equiv -(i/\hbar)[H_{\text{int}}, \]$ 、 $i\mathcal{L}_B \equiv -(i/\hbar)[H_B, \]$ と定義して、さらに全系の時間発展を記述する Liouville 演算子を $i\mathcal{L}(t) \equiv i(\mathcal{L}_{\text{sys}}(t) + \mathcal{L}_{\text{int}} + \mathcal{L}_B)$ としましょう。このとき式 (1) は

$$\frac{\partial \sigma(t)}{\partial t} = i\mathcal{L}(t) \sigma(t) = i(\mathcal{L}_{\text{sys}}(t) + \mathcal{L}_{\text{int}} + \mathcal{L}_B) \sigma(t) \quad (2)$$

となります。注目している系の密度行列を $\rho(t)$ と書いて、

$$\rho(t) \equiv \text{Tr}_B [\sigma(t)],$$

というように、熱浴の自由度を消去した形で定義しましょう (Tr_B は熱浴の自由度に対してトレースを取ることを表しています)。これによって $\rho(t)$ は注目している系のヒルベルト空間にのみ作用する

¹E-mail: yukawa@ap.t.u-tokyo.ac.jp

事になります)。また、熱浴は逆温度 β での熱平衡状態にあると仮定します。このとき、熱浴の密度行列 ρ_B は

$$\rho_B \equiv \frac{\exp(-\beta H_B)}{\text{Tr}_B \exp(-\beta H_B)} = \frac{1}{Z_B} e^{-\beta H_B}$$

となります。 Z_B は熱浴の分配関数です。

さて、射影演算子 P と Q の作用を、全系のヒルベルト空間に作用する演算子 f を通じて

$$Pf \equiv \text{Tr}_B [f] \otimes \rho_B, \quad Q \equiv 1 - P$$

と定義しましょう。ここで $\text{Tr}_B [f]$ という部分は注目している系のヒルベルト空間に作用する事になります。この射影演算子をつかえば、全系の密度行列と注目している系の密度行列に

$$P\sigma(t) = \rho(t) \otimes \rho_B \quad (3)$$

という関係が成り立っている事がわかります。さらに、熱浴が熱平衡状態にあるならば、

$$P^2 = P, \quad Q^2 = Q, \quad PQ = 0, \quad QP = 0, \quad P + Q = 1, \quad P\mathcal{L}_{\text{sys}}(t) = \mathcal{L}_{\text{sys}}(t)P, \quad (4)$$

$$P\mathcal{L}_B = 0, \quad \mathcal{L}_B P = 0, \quad Q\mathcal{L}_{\text{sys}}(t) = \mathcal{L}_{\text{sys}}(t)Q, \quad Q\mathcal{L}_B = \mathcal{L}_B \quad (5)$$

などの関係式が成立します。話を簡単にするために相互作用をあらわす Liouville 演算子に $P\mathcal{L}_{\text{int}}P = 0$ という制限をつけておきましょう。これはハミルトニアンで書けば $\text{Tr}_B [H_{\text{int}}\rho_B] = 0$ と同等です。

注目している系の密度行列が満たす方程式を求めましょう。式 (2) を射影演算子を用いて二つに分解すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial P\sigma(t)}{\partial t} &= Pi\mathcal{L}(t)P\sigma(t) + Pi\mathcal{L}(t)Q\sigma(t), \\ \frac{\partial Q\sigma(t)}{\partial t} &= Qi\mathcal{L}(t)P\sigma(t) + Qi\mathcal{L}(t)Q\sigma(t) \end{aligned}$$

となります。この下の方程式の一般解は、初期時刻 t_0 と時間順序積をあらわす $\mathcal{T}$ を用いて

$$Q\sigma(t) = \mathcal{T} \exp \left\{ \int_{t_0}^t Qi\mathcal{L}(t') dt' \right\} Q\sigma(t_0) + \int_{t_0}^t \mathcal{T} \exp \left\{ \int_{\tau}^t Qi\mathcal{L}(t') dt' \right\} Qi\mathcal{L}(\tau) P\sigma(\tau) d\tau$$

と書けます。これを上の方程式に代入して、さらに密度行列の初期値を $\sigma(t_0) = \rho(t_0) \otimes \rho_B$ と仮定すると、

$$\frac{\partial P\sigma(t)}{\partial t} = Pi\mathcal{L}(t)P\sigma(t) + Pi\mathcal{L}(t) \int_{t_0}^t \mathcal{T} \exp \left\{ \int_{\tau}^t Qi\mathcal{L}(t') dt' \right\} Qi\mathcal{L}(\tau) P\sigma(\tau) d\tau$$

という方程式が得られます。射影演算子の作用を関係式 (4) を用いて展開すると、方程式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= i\mathcal{L}_{\text{sys}}(t)\rho(t) \\ &+ \text{Tr}_B \left(i\mathcal{L}_{\text{int}} \int_{t_0}^t \mathcal{T} \exp \left\{ \int_{\tau}^t (i\mathcal{L}_{\text{sys}}(t') + i\mathcal{L}_B + iQ\mathcal{L}_{\text{int}}) dt' \right\} Qi\mathcal{L}_{\text{int}}\rho(\tau)\rho_B \right) \quad (6) \end{aligned}$$

となります。この右辺の第一項は熱浴が存在していないときの密度行列の時間発展と同じですから、第二項が熱浴との相互作用による影響を表しています。今後この第二項を散逸項と呼び、式の中では (DT) と書く事にします。

今までの取り扱いは、相互作用と初期値に制限がついていましたが厳密なものです。ここからは熱浴との結合が弱い場合を考えましょう (強い極限を考えると量子 Langevin 方程式が得られますが、それ

はここでは取り扱いません)。弱結合を考えるために、相互作用の Liouville 演算子を $i\mathcal{L}_{\text{int}} \rightarrow i\epsilon\mathcal{L}_{\text{int}}$ というようにパラメーター ϵ を使って書き直しましょう。あとで ϵ について展開します。この時、散逸項は

$$(\text{DT}) = \text{Tr}_B \left(i\epsilon^2 \mathcal{L}_{\text{int}} \int_{t_0}^t d\tau \mathcal{T} \exp \left\{ \int_{\tau}^t (i\mathcal{L}_{\text{sys}}(t') + i\mathcal{L}_B + i\epsilon\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}) dt' \right\} \mathcal{Q}i\mathcal{L}_{\text{int}}\rho(\tau)\rho_B \right)$$

となります。初期時刻を $t_0 = 0$ 、また相互作用ハミルトニアンは $H_{\text{int}} = \sum_j H_I^j \otimes \xi^j$ というように、注目している系のヒルベルト空間に作用する部分、 H_I^j と熱浴のヒルベルト空間に作用している部分 ξ^j に分割できるとします。次のような時間順序に並んだ演算子、

$$\overleftarrow{\mathcal{T}}(t, \tau) \equiv \overleftarrow{\mathcal{T}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{\tau}^t H_{\text{sys}}(t') dt' \right\}, \quad \overrightarrow{\mathcal{T}}^\dagger(t, \tau) \equiv \overrightarrow{\mathcal{T}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{\tau}^t H_{\text{sys}}(t') dt' \right\}$$

を定義し ($\overleftarrow{\mathcal{T}}, \overrightarrow{\mathcal{T}}^\dagger$ はそれぞれ時間順序が右から左、左から右に並んでいる事を表します)、 ξ^j のハイゼンベルグ表示を

$$\xi^j(t) \equiv \exp \left(\frac{i}{\hbar} H_B t \right) \xi^j \exp \left(-\frac{i}{\hbar} H_B t \right) \quad (7)$$

とします。また、任意の演算子 A に対し

$$A^{:,t,\tau} \equiv \overleftarrow{\mathcal{T}}(t, \tau) A \overrightarrow{\mathcal{T}}^\dagger(t, \tau) \quad (8)$$

と書けば、散逸項は ϵ の二次までで

$$(\text{DT}) \sim -\frac{\epsilon^2}{\hbar^2} \text{Tr}_B \left(\left[\sum_j H_I^j \xi^j, \int_0^t d\tau \left[\sum_l H_I^{l:,t,\tau} \xi^l(-(t-\tau)), \rho(\tau)^{:,t,\tau} \rho_B \right] \right] \right)$$

と書けます。積分変数の変換 $\tau \rightarrow t-s$ を行い、トレースを実行すると

$$(\text{DT}) \sim -\frac{\epsilon^2}{\hbar^2} \int_0^t ds \sum_{j,l} \left([H_I^j, H_I^{l:,t,t-s} \rho(t-s)^{:,t,t-s}] \Phi_{jl}(s) - [H_I^j, \rho(t-s)^{:,t,t-s} H_I^{l:,t,t-s}] \Phi_{lj}(-s) \right)$$

となります。ここで $\Phi_{jl}(s)$ は、演算子 $\xi^j(s)$ と $\xi^l(0)$ の相関関数であり、

$$\Phi_{jl}(s) \equiv \text{Tr}_B \left(\rho_B e^{iH_B s/\hbar} \xi^j e^{-iH_B s/\hbar} \xi^l \right)$$

と定義されます。

さて私たちは ϵ が小さいと仮定したので、密度行列の時間発展方程式の形から、 $\rho(t)$ に対する散逸項の影響の特徴的な時間が長くなる事が分かります。また、十分に熱浴の大きさを大きくすると相関関数 $\Phi_{jl}(s)$ の振舞いがデルタ関数的になり、非常に早くゼロに収束する事が予想されます。さらに時間に依存している外場の時間変化がゆっくりである事を仮定すれば、散逸項の積分で

1. $\overleftarrow{\mathcal{T}}(t, t-s)\rho(t-s)\overrightarrow{\mathcal{T}}^\dagger(t, t-s) \rightarrow \rho(t)$
2. $\overleftarrow{\mathcal{T}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{\tau}^t H_{\text{sys}}(t') dt' \right\} \rightarrow \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{\text{sys}}(t) \int_{\tau}^t dt' \right\}$
3. $\overrightarrow{\mathcal{T}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{\tau}^t H_{\text{sys}}(t') dt' \right\} \rightarrow \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{\text{sys}}(t) \int_{\tau}^t dt' \right\}$

$$4. \int_0^t ds \rightarrow \int_0^\infty ds$$

というような近似を行うことができます。この近似を使うと散逸項は

$$\begin{aligned} (DT) = & -\frac{e^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \sum_{j,l} \left([H_I^j, \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} H_I^l \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} \rho(t)] \Phi_{jl}(s) \right. \\ & \left. - [H_I^j, \rho(t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} H_I^l \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\}] \Phi_{lj}(-s) \right) \end{aligned}$$

と書けます。さらに相関関数の $\Phi_{jl}^*(s) = \Phi_{lj}(-s)$ という性質を使えば、

$$\begin{aligned} (DT) = & -\frac{e^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \sum_{j,l} \left([H_I^j, [\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} H_I^l \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\}, \rho(t)]] \operatorname{Re} \Phi_{jl}(s) \right. \\ & \left. + [H_I^j, [\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} H_I^l \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\}, \rho(t)]_+] i \operatorname{Im} \Phi_{lj}(s) \right) \end{aligned}$$

というように書き換える事ができます。 $\mathcal{K}(t)_{jl}, \mathcal{G}(t)_{jl}$ という二つの演算子を

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(t)_{jl} &= \int_0^\infty ds \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} H_I^l \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} \operatorname{Re} \Phi_{jl}(s), \\ \mathcal{G}(t)_{jl} &= \int_0^\infty ds \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} H_I^l \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} \operatorname{Im} \Phi_{jl}(s) \end{aligned}$$

と定義すると、最終的に密度行列 $\rho(t)$ に対する時間発展方程式は、弱結合の下で

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H_{sys}(t), \rho(t)] - \frac{e^2}{\hbar^2} \sum_{jl} \left([H_I^j, [\mathcal{K}(t)_{jl}, \rho(t)]] + i[H_I^j, [\mathcal{G}(t)_{jl}, \rho(t)]_+] \right) \quad (9)$$

となります。

もし相互作用が完全に直積の形で書けるならば、すなわち $H_{int} = H_I \otimes \xi$ ならば方程式はさらに簡単になり、

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [H_{sys}(t), \rho(t)] - \frac{e^2}{\hbar^2} \left([H_I, [\mathcal{K}(t), \rho(t)]] + i[H_I, [\mathcal{G}(t), \rho(t)]_+] \right) \quad (10)$$

となり、積分に含まれる二つの演算子は

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(t) &= \int_0^\infty ds \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} H_I \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} \operatorname{Re} \Phi(s), \\ \mathcal{G}(t) &= \int_0^\infty ds \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} H_I \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} H_{sys}(t) s \right\} \operatorname{Im} \Phi(s) \end{aligned}$$

となります。

3 周期的定常状態

この前のセクションで、時間に依存した外場がかかっている系の密度行列の熱浴による影響を考慮した時間発展方程式を求めました。もし時間に依存した外場が周期的に変動していたら時間発展はどのようなになるのでしょうか。古典的な振動子にエネルギーの散逸をつけて、外から強制的に周期力を加える場合を考えると、量子系においても外力の周期と同じ周期をもつ定常的な時間発展を示

すはずです。もしそのような周期的な時間発展を示す密度行列が存在したら、その密度行列はどのようにして計算する事ができるのでしょうか。ここでは、そのような密度行列の求め方を考えます。

密度行列の時間発展方程式は線形の方程式ですから、次のように書き直す事ができます。

$$\frac{\partial \bar{\rho}(t)}{\partial t} = \mathcal{M}(t)\bar{\rho}(t), \quad (11)$$

ここで $\bar{\rho}(t) \in \mathbb{C}^{N^2}$ はベクトル表示した密度行列であり、 N はハミルトニアン次元です。また $\mathcal{M}(t) \in \mathbb{C}^{N^2 \otimes N^2}$ は行列表示した散逸の効果を含む Liouville 演算子です。一般的に $\mathcal{M}(t)$ は非対称複素行列です。式 (11) の形式解は、

$$\bar{\rho}(t) = \mathcal{D}(t, t_0)\bar{\rho}(t_0), \quad \text{ただし} \quad \mathcal{D}(t, t_0) \equiv \mathcal{T} \exp \int_{t_0}^t \mathcal{M}(t') dt' \quad (12)$$

と表すことができます。

時間に依存した外場が周期的な場合を考えてみましょう。周期を T とすると $\mathcal{M}(t) = \mathcal{M}(t+T)$ が成立します。この一周期分に対応する時間発展演算子を $\mathcal{D}$ とすると、

$$\mathcal{D} \equiv \mathcal{D}(t_0, t_0 + T) = \mathcal{T} \exp \int_{t_0}^{t_0+T} \mathcal{M}(t') dt' \quad (13)$$

となります。外力周期と同じ周期をもつ周期的な密度行列が存在すると言う事は、 $\mathcal{D}$ に最大固有値 1 をもつ固有ベクトルが存在するという事に他なりません。すなわち、周期的に定常な密度行列ベクトル $\bar{\rho}_s$ は

$$\bar{\rho}_s = \mathcal{D}\bar{\rho}_s \quad (14)$$

を満たします。

よって周期的な定常状態が存在するならば、一周期時間発展演算子の最大固有値 1 に属する固有ベクトルを求めれば、それが周期的な定常状態に対応します。あとはそのベクトルを求めればいいのですが、今の場合 $\mathcal{D}$ が非対称行列のため単なる対角化では求まりません。そこで次のような手順を踏みます。まず $\mathcal{D}$ の Schur 分解を考えます。このとき $\mathcal{D}$ を

$$\mathcal{D}\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{T} \quad (15)$$

と分解できます。 $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{N^2 \otimes N^2}$ はユニタリ行列、 $\mathbf{T} \in \mathbb{C}^{N^2 \otimes N^2}$ は対角成分が $\mathcal{D}$ の固有値である複素上三角行列です。 $\mathbf{U}$ の列ベクトルを $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{N^2}]$ と書き、複素上三角行列を

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & \cdots \\ 0 & \ddots & \cdots \\ 0 & 0 & \lambda_{N^2} \end{pmatrix} \quad (16)$$

と書けば、それぞれの $\mathbf{u}_i$ は固有値 λ_i に属する Schur ベクトルです。今の場合最大固有値が 1 ですから、複素上三角行列は

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_M & \mathbf{A} \\ 0 & \mathbf{T}^{(1)} \end{pmatrix}$$

というように、最大固有値の縮退度 M として $M \times M$ の単位行列 $\mathbf{I}_M$ 、 $M \times (N^2 - M)$ の複素行列 $\mathbf{A}$ 、 $(N^2 - M) \times (N^2 - M)$ の複素上三角行列 $\mathbf{T}^{(1)}$ を用いて分解できます。縮退度 M は系の対称性から決まります。Schur ベクトルは直交してますから、1 番目から M 番目の Schur ベクトルが

最大固有値 1 に属する部分空間を張ることになります。つまり周期的定常状態は 1 番目から M 番目の Schur ベクトルの線形結合で書けるということです。密度行列の初期状態は Schur ベクトルの直交性から

$$\bar{\rho}(0) = \sum_{i=1}^{N^2} a_i u_i \quad (17)$$

と分解できます。対称行列ならば、この初期状態で最大固有値 1 に属する Schur ベクトルの成分のみを考えればいいのですが、今は非対称行列ですからもう少し計算がいります。

次のような行列 Z とその逆行列 Z^{-1}

$$Z = \begin{pmatrix} I_M & -X \\ 0 & I_{N^2-M} \end{pmatrix}, \quad Z^{-1} = \begin{pmatrix} I_M & X \\ 0 & I_{N^2-M} \end{pmatrix} \quad (18)$$

を考えましょう。 I_M と I_{N^2-M} は添え字の次元を持つ単位行列、 X は次の条件を満たす複素行列です。もし X が

$$-X + A + XT^{(1)} = 0 \quad (19)$$

という行列方程式を満たすとき (これは Sylvester 方程式と呼ばれています)、複素上三角行列 T は Z, Z^{-1} を使って、

$$Z^{-1}TZ = \begin{pmatrix} I_M & 0 \\ 0 & T^{(1)} \end{pmatrix} \quad (20)$$

というようにブロック対角化されます。また

$$D = U T U^\dagger, \quad T = Z[I_M \oplus T^{(1)}]Z^{-1} \quad (21)$$

ですから、時間発展演算子は

$$D = U Z[I_M \oplus T^{(1)}]Z^{-1}U^\dagger \quad (22)$$

と書く事ができます。さらに、 n 周期分の時間発展演算子は、行列 $Q = UZ$ を使って

$$D^n = Q[I_M \oplus (T^{(1)})^n]Q^{-1} \quad (23)$$

となり、複素上三角行列 $T^{(1)}$ の対角成分の絶対値は 1 より小さいですから、 $n \rightarrow \infty$ の極限で $(T^{(1)})^n$ はゼロ行列になります。したがって、周期的な定常状態は

$$\bar{\rho}_s = \lim_{n \rightarrow \infty} D^n \bar{\rho}(0) = Q[I_M \oplus 0]Q^{-1} \bar{\rho}(0) = U \begin{pmatrix} I_M & X \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{N^2} \end{pmatrix}$$

と書けます。 X の行ベクトルを $X = {}^t(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_M)$ とし、ベクトル $\vec{a}$ を $\vec{a} = {}^t(a_{M+1}, a_{M+2}, \dots, a_{N^2})$ と定義すると、

$$\bar{\rho}_s = U \begin{pmatrix} a_1 + {}^t\vec{X}_1 \cdot \vec{a} \\ a_2 + {}^t\vec{X}_2 \cdot \vec{a} \\ \vdots \\ a_M + {}^t\vec{X}_M \cdot \vec{a} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^M (a_j + {}^t\vec{X}_j \cdot \vec{a}) \vec{u}_j \quad (24)$$

と書く事ができます。もし行列 M が対称ならば、行列 D も対称となり、Sylvester 方程式 (19) の解がゼロ行列になります。その時は、定常状態は $\sum_{j=1}^M a_j \bar{u}_j$ となります。

4 量子ラチェット系への応用

ここでは量子ラチェット系に適用した結果を紹介します。ラチェット系とは、空間反転対称性を局所的に破っているようなポテンシャル (非対称周期ポテンシャル) が存在している粒子系であり、全体的に見ると平均してポテンシャルの勾配はありません。そのような系が熱浴に接しているとき、粒子は局所的なポテンシャルの勾配に応じた熱平衡状態になっているだけで、古典的には速度分布はマクスウェル分布をしています。この時、正味の粒子の流れは存在しません。同じように量子系でも正味の流れは存在しません。しかし、このような系にさらに外力を加えると、たとえその外力が方向性を持っていないくとも、粒子の正味の流れが発生するという事が知られています。このような流れは、外力による非平衡化と熱浴による熱平衡化の競合から発生します。

量子系でそのような競合状態にカレントが発生するかどうか調べてみましょう。まずハミルトニアンを定義します。ここでは、計算の手間を省くために次のようなものとしましょう。

$$\begin{aligned} H(t) &= H_{\text{sys}}(t) + \epsilon H_{\text{int}} + H_B, \\ H_{\text{sys}}(t) &= \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|) + \sum_n (V_{n \bmod L} - F_n(t)) |n\rangle\langle n|, \\ H_{\text{int}} &= \epsilon H_I \otimes \xi, \\ H_B &= \sum_\alpha \hbar \omega_\alpha \left(a_\alpha^\dagger a_\alpha + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

$H(t)$ は全系のハミルトニアンであり、 $H_{\text{sys}}(t)$ は非対称周期ポテンシャル $V_{n \bmod L}$ を持つラチェット系です。エネルギーの単位を 1 にとっています。 H_B は調和振動子の集団として記述されている熱浴です。相互作用を

$$H_I = \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|), \quad (25)$$

$$\xi = \sum_\alpha (a_\alpha + a_\alpha^\dagger) \quad (26)$$

とします。この形はあまり物理的ではないのですが、現象の本質はこれで捕らえる事ができます。外力として周期 T でポテンシャルが対称的にオンオフされるような物を考えましょう。式で書けば

$$F_n(t) = V_{n \bmod N} \Theta(T/2 - t \bmod T)$$

となります。熱浴のモードの分布のモデルとして、分布関数 $J(\omega) = \eta \omega \exp(-\lambda \omega)$ というモデルを取ると、モードの和がこの分布関数を使った積分に置き換わります。この時、散逸の効果を表す演算子 $\mathcal{K}(t), \mathcal{G}(t)$ は、指数積分の級数として解析的に計算する事ができます。

ラチェット系で興味のあるのはカレントの期待値ですから、カレント演算子を定義しましょう。密度行列のサイト表示の対角成分の時間変化から局所的なカレントを定義する事ができます。それは演算子として

$$\hat{j}_n(t) \equiv \hat{j}_n^0 + \frac{\epsilon^2}{\hbar} (-i[\hat{j}_n^0, \mathcal{K}(t)] + [\hat{j}_n^0, \mathcal{G}(t)]_+) \quad (27)$$

となります。 $\hat{j}_n^0$ は相互作用がないときのカレント演算子であり、 $\hat{j}_n^0 \equiv (i/\hbar)(|n-1\rangle\langle n| - |n\rangle\langle n-1|)$ です。実際には、上のカレント演算子のすべてのサイトで和をとったものを全カレント演算子として

定義し、密度行列との積のトレースで期待値を計算します。非対称周期ポテンシャルが小さいとして、線形応答理論を適用すると、全カレント演算子は非摂動ハミルトニアンと保存量ですから、線形応答の範囲内でカレントは存在しません。したがって、もしカレントが存在すればそれは非線形効果で現れた事になります。

実際の計算結果を一つだけ示します (Figure 1)。カレントの時系列を計算すると、密度行列は周期的な定常状態に (初期状態にほとんど依存なく) 収束します。その収束した周期的な状態でカレントを計算した結果をプロットしました。横軸に熱浴の逆温度、縦軸に一周あたりのカレント (に比例する量) をとっています。それぞれのプロットの中に書いてあるのは外力の周期です。どのような周期に対しても、カレントは高温でゼロ、低温で有限の値を取っている事がわかります。高温でゼロになるのは、ポテンシャルの非対称性が見えなくなるからです。カレントの低温での振舞いは温度に比例します。カレントが低温で有限に残り、さらにその向きが周期によって違うというのは、古典系では見られなかった結果です。また、特定の周期によっては、熱浴の温度によってカレントの向きが逆転する現象も見られます。さらに現象を調べた結果、このカレントの発生には、量子力学的なエネルギー固有値から決まる振動数と外力周期による共鳴が本質的であることがわかりました。

5 さいごに

ここまでで、ある系のハミルトニアンと、熱浴のハミルトニアン、それらの間の相互作用ハミルトニアンが与えられていれば、その定常状態を何とか求める事ができるようになったでしょう (なっていないかもしれませんが)。サブゼミの主題である「計算物理」という観点から見れば、私自身職人芸的プログラミングをしない所為なのですが、少し離れた話になってしまったかもしれません。その点はご了承ください。最後に、このような話を話す機会を与えて下さいました夏の学校準備局の皆様、サブゼミ担当の宮島さんどうもありがとうございました。

6 参考文献

参考文献はたくさんあります。ここでは、基本的な文献を挙げることにします。量子系の散逸を伴う非平衡状態の取り扱いに関しては、

- R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume. *Statistical Physics II*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- C. W. Gardiner. *Quantum Noise*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- U. Weiss. *Quantum Dissipative Systems*. World Scientific, Singapore, 1993.
- G. Mahler and V. A. Weberruß. *Quantum Networks*. Springer-Verlag, Berlin, 1995.
- A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger. "Dynamics of the dissipative two-state system". *Rev. Mod. Phys.*, **59**, (1987), 1-85.

あたりから始めて溯って行けばいいかもしれません。数値計算的な手法は、

- W. Press, S. A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical recipes in FORTRAN 2nd ed.* Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations, 3rd ed.* The Johns Hopkins University Press, London, 1996.

などを見るといいでしょう。古典的なラチェットに関しては、レビューをあげておきます。

- R. D. Astumian. "Thermodynamics and Kinetics of a Brownian Motor". *SCIENCE*, **276**, (1997), 917–922.
- F. Jülicher, A. Ajdari, and J. Prost. "Modeling molecular motors". *Rev. Mod. Phys.*, **69**, (1997), 1269–1281.

量子ラチェットに関する研究は始まったばかりであり、文献はあまりありません。

- S. Yukawa, M. Kikuchi, G. Tatara, and H. Matsukawa. "Quantum Ratchets". *J. Phys. Soc. Jpn*, **66**, (1997), 2953–2956.
- P. Reimann, M. Grifoni, and P. Hänggi. "Quantum Ratchets". *Phys. Rev. Lett.*, **79**, (1997), 10.
- G. Tatara, M. Kikuchi, S. Yukawa, and H. Matsukawa. "Dissipation Enhanced Asymmetric Transport in Quantum Ratchets". *J. Phys. Soc. Jpn*, **67**, (1998), 1090–1093.

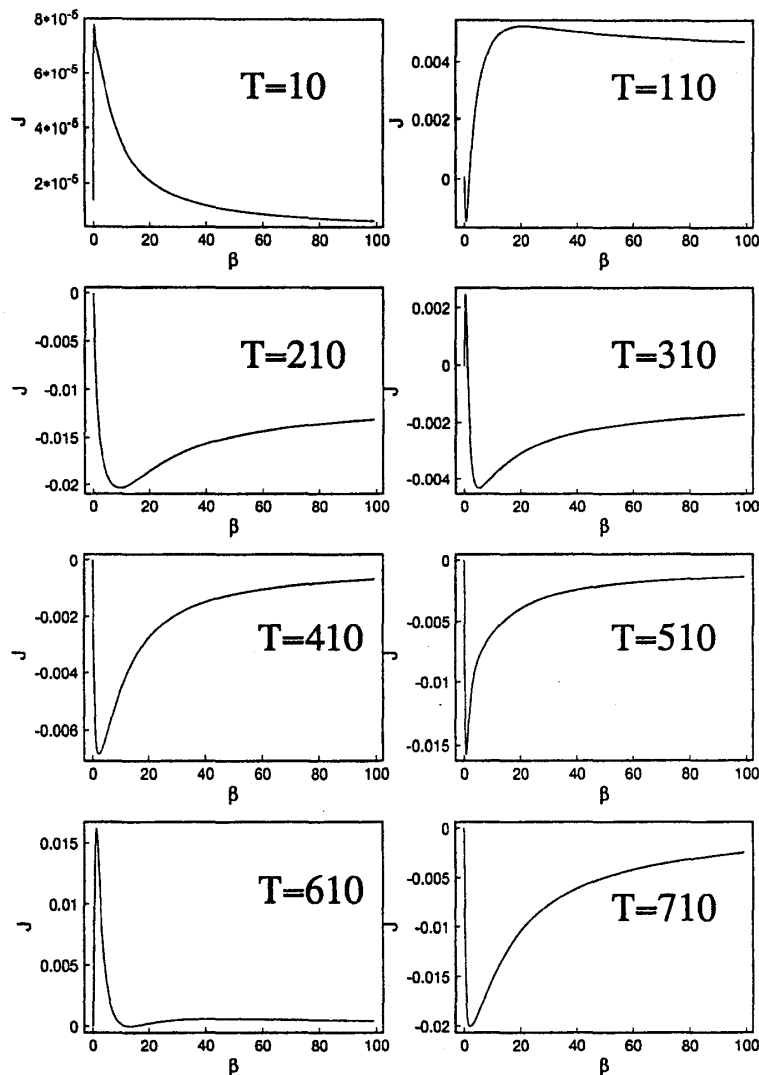


Figure 1: カレントの温度、外力周期依存性