

博士論文
特異摂動理論から見た
量子開放系の摂動的手法

久木田真吾

1月8日

概要

近年、情報処理や通信技術の分野で量子力学的性質を有効活用しようとする研究が盛んに行われている。情報通信や情報処理という現実的な問題を考えた場合、外部から与えられるノイズの影響を考慮し、物理系のダイナミクスを記述することが重要だと考えられる。

孤立系を対象とする場合、量子力学の基本的時間発展は von Neumann 方程式で記述される。しかし、外部からのノイズの影響を考えた場合には、対象としている系（対象系）は孤立系ではなく、ノイズを与える外部系（環境系）の影響を取り入れた量子的ダイナミクスの記述法が必要となる。このような、環境系からノイズによる擾乱を受けている量子力学的な系を、「量子開放系」と呼称する。

すでに知られた開放系の記述方法として、環境系と対象系を合わせて孤立系として取り扱い、その複合系に対する von Neumann 方程式を考えた上で、系間の相互作用に関して摂動展開する方法がある。この方法によって得られる対象系のダイナミクスを表す方程式は、(摂動的) 量子マスター方程式とよばれる。量子マスター方程式による開放系のダイナミクスの記述は、物理の広い分野で受け入れられ、利用されている方法である。

量子マスター方程式の導出過程において、「環境系と対象系の初期状態が無相関であること」がしばしば要請され、重要な役割を果たす。しかし、この要請の物理的な正当性については明らかになっていない。また、量子マスター方程式は一般に微積分方程式や係数が時間に依存する微分方程式の形をしているため、方程式の解析は主に特定の系の数値計算に基づくものとなってしまう、一般的な性質を解析するのが難しい。

著者はこれらの問題点を解決するため、量子マスター方程式とは異なった、微分方程式の体系的近似解法の観点から量子開放系の記述を試みた。そのために、微分方程式の摂動問題に対する「繰り込み群の方法」を量子系の von Neumann 方程式に適用し、一般論を展開した。量子マスター方程式を導出する際の設定と同じように相互作用が弱いという仮定を課した上で、複合系の von Neumann 方程式に対して繰り込み群の方法による近似解の構築を行い、その結果、次の二つのことが分かった。

ひとつは、環境系に対する定常性と混合性、および相互作用の減衰に対して条件を課すことで、「環境系と対象系の初期状態が無相関であること」が長時間スケールのダイナミクスで正当化できることである。さらにこの性質は、全系のダイナミクスが対象系のみ自由度によって支配されるという、自由度の縮約を引き起こす。第二に、結果得られた方程式は量子マスター方程式の中で代表的なものである「時間畳み込み型」の量子マスター方程式、および「時間非畳み込み型」の量子マスター方程式より解析しやすい形をしていることが示された。

目次

第 1 章	導入	5
1.1	量子論へのいざない	5
1.2	本題：量子開放系のダイナミクス	6
1.3	本研究の結果・結論	8
1.4	本論文を読み進める上での注意、記法の約束	9
第 2 章	量子開放系のいろは	11
2.1	量子力学的時間発展の基本事項	11
2.2	量子開放系とは	20
2.3	量子マスター方程式	24
2.4	Markov 性、力学的半群	30
2.5	微分方程式の観点から見た量子マスター方程式	31
2.6	議論：完全正值性	33
第 3 章	特異摂動論のおはなし	35
3.1	単純摂動論とその破綻、永年項	35
3.2	特異摂動論の例題	36
3.3	繰り込み群の方法	38
3.4	中心多様体と力学自由度の縮約	43
第 4 章	量子開放系再訪	45
4.1	量子摂動計算における「永年項」	45
4.2	von Neumann 方程式の解の有界性	48
4.3	状況設定	51
4.4	繰り込み群の方法を用いた「全系」の時間発展の摂動解	53
4.5	力学的写像の構築	53
4.6	厳密解がわかっているモデルでの数値的比較	57
4.7	再議論：非 Markov 性	60
4.8	再議論：完全正值性	60

第 5 章	結論と今後の展望	65
	参考文献	69
付録 A	量子マスター方程式の微視的導出、より一般的な形	73
A.1	非マルコフ量子マスター方程式の導出	73
A.2	摂動展開と初期無相関の仮定	76
付録 B	こまごまとした証明	79
B.1	式 (4.35) 及び (4.36) の証明	79
B.2	$R^2(\tilde{\rho}_S(\tau))$ が 0 でない有限の値を持ちうることの証明	81

第1章

導入

1.1 量子論へのいざない

量子論という概念が登場してからおよそ一世紀が経過した。現代科学において最も成功した理論のひとつである量子論は、現在では素粒子理論から物性理論、果ては宇宙論まで広い分野にその姿を現し、我々を深遠なる世界へ導く。驚くべきことに、以前ははるか遠くに坐し、非常に小さなスケールにしか姿を現さなかった量子論の面影は、現在では実験室で人によってコントロール可能なほど卑近な存在になってきている。我々は量子論によって深遠を覗くだけでなく、その支配すら可能にしたのだ。

しかし同時に、量子論は現代科学の生み出した”忌み子”であるということにも疑いの余地はないだろう。量子論はその大きな成功とは裏腹に、他の理論とは比べ物にならないほど「なぜ」成功したのか分からない理論である。物理学にとってその「なぜ」を問うことはルール違反だという向きもあるだろう。うまく現象を記述する方程式を作るのみが物理の至上命題ではないかと言う意見はもちろんある。しかし、量子論にとってこの「なぜ」は重篤な欠陥となりうる。それは量子論の原理の定め方の問題に起因するものだ。

いわずと知れたニュートン力学においてはニュートンの第一法則から第三法則によって運動が記述される。この法則（原理）は第一法則を除き単純に実験事実を書き下したものだ。第一法則も計算をするための概念の定立に過ぎない。そして、もろもろの古典的な問題は現象として我々の直観にそぐうものであり、原理から与えられた方程式は解いた結果がそのまま現象を記述している。かくて、実験事実と与えられた原理は相互に比較可能なものであり、原理は多数の実験を持ってその傍証が生み出され続けている。

他方、量子論において計算できることは、そして我々が現象に実験的にアクセスできることは、古典論よりはるかに少ない。現在の量子力学の公理が実験事実を記述するのに十分な者であることは疑いようもないが、必要条件であるか、ということは傍証に乏しい。つまり、量子論における原理は、作業仮設に過ぎないとすらいえる。現在このような理論が現象の記述に十分であったとしても、これが将来的に（一瞬先ですら！）うまい理論であり続けるかは誰にもわからない。それに対して、すべての科学者が警鐘を鳴らさずには、いずれ重大な壁にぶつかってしまうこととなるであろう。少なくともある程度の人数が、量子力学の基礎の部分

疑い続けていくことは、決して無駄ではない。このような背景を考えると、量子論の基礎付けをさまざまな観点から見直すことが、あたらおろそかにしてはいけないことであることは疑いようもない事実である。

1.2 本題：量子開放系のダイナミクス

さて、近年の実験技術の発展は、実験室系での量子力学特有の重ね合わせ状態やエンタングル状態の生成、コントロールを可能にした。これらを用いると、古典的な通信や情報の輸送よりもはるかに豊富なことが行えるようになる [3]。いまだ通信や暗号への応用は小規模なスケールで生成、コントロールされるにとどまっているが、これらが実際に応用されるのはそう遠い未来のことではないだろう。このような、量子力学的な重ね合わせやエンタングルメントをうまく使うために、外部からノイズが加わっているような量子系の発展を理論的に調べる、ということはかなり重要な問題となってくる。実際の系では、保たれてほしい量子状態は常に雑音にさらされており、また量子力学特有の性質はこの雑音によって壊れやすいからだ。外部からノイズが加わっているこのような系を「量子開放系」という。量子開放系のダイナミクスを探る研究はかなり古い歴史を持ち、光学、熱力学、化学、生物学などの多くの分野で広く行われてきたが、近年になってこのような量子情報の観点からもにわかに注目されている [1, 2, 3]。

量子系のダイナミクスは通常ユニタリ発展に従うが、量子開放系の場合には散逸などがあって明らかにそうではない。通常の量子力学は外部とのエネルギーのやり取りがない孤立系に対して定式化され、外部とのエネルギーのやり取りを持つような開放系の記述には適していない。このような場合には量子開放系のダイナミクスをどう現象論ではなく微視的に取り扱うか、ということが問題になる。その中でよく用いられるアイデアが、「縮約された力学」の考え方である。もし開放系にノイズを与えている系が更にその外側に相互作用する系を持っていなかった場合には、対象とする開放系（対象系）とその外側の系（環境系）が複合系として孤立系をなしている。もし環境系が外側にさらに相互作用する系を持っている場合には、環境系の定義をその系まで含めた形に拡張して、というやり方を続けていけばやれば、いずれ外側の系がない孤立系として記述することができる。この複合系を量子力学的に取り扱っていると、そのダイナミクスはユニタリ発展で記述されるはずである。最初の状態を複合系全体の状態として適当に設定して、それをユニタリ発展させる。そののちに、結果として得られた状態に対して、環境系の自由度をトレースアウトしてやると、対象系の終状態がわかる。最初に用意した状態を環境系についてトレースアウトしたものが最初に私たちの見ていた対象系の状態だとすれば、この一連の操作によって対象系のみに対するダイナミクスを記述する写像が手に入る。これが縮約された力学の考え方である。

当然、このダイナミクスはもともとの全系のユニタリ発展を解くという行為と等価なものである。今この複合系は、対象系、それにノイズを与える一般にはかなり大きいと仮定される環境系、またその間の相互作用が存在しているため、そのユニタリ発展を解くということは難しい場合がほとんどである。そこで、量子開放系のダイナミクスを追う、つまり上で述べた縮約

された力学を明示的に解くにはいくつかの仮定、近似が必要になってくる。もっともよく用いられる仮定が環境系と対象系の相互作用が非常に弱いとする仮定である。これによって、相互作用を摂動的に取り扱うことができるため、問題は飛躍的に簡単になる。そうして得られる対象系の自由度に対する発展方程式を（摂動的）量子マスター方程式という [4, 6]。もうひとつ、量子マスター方程式を対象系のみ閉じた簡単な方程式にするために、環境系と対象系が初期に無相関であることをしばしば仮定する。この仮定は頻繁に行われるものであるが [6, 7, 36]、その物理的意味は明白でなく、対象系と環境系の初期相関がある場合のダイナミクスが初期相関がない場合のダイナミクスと異なった結果を生む場合があることが知られている [12, 13]。この仮定については多くの議論がある [14, 15]。

以上のような仮定の下で、摂動的量子マスター方程式が導出される。さらにここから $\lambda^2 t$ を固定したまま $\lambda \rightarrow 0$ という極限（これを van Hove 極限という [5]）をとると、過去の履歴を引きずらない Markov 型の量子マスター方程式 [4, 6] を得る（対応して、この極限をとらない場合の量子マスター方程式を非 Markov 型の量子マスター方程式という）。Markov 型の量子マスター方程式は、物理学の広範にわたる分野で登場し、受け入れられている [3, 16, 17]。ここから、相互作用ハミルトニアンの中かで（相互作用描像で）速く振動する項を取り除く、「回転近似」を課すことで、我々は完全正值な力学的写像を得ることが出来る。完全正值性については本論にて詳しく論ずるが、縮約された力学が満たしているべき性質であると考えられている [18]。

Markov 型の量子マスター方程式は多くの場合で実験事実と整合しているが、いくつかの状況で非 Markov 的な効果（履歴効果）が無視できない場合がある。その場合には van Hove 極限をとらない場合のダイナミクスが必要となり、上述した非 Markov 型の量子マスター方程式が用いられる。非 Markov 型の量子マスター方程式には、その摂動展開の方法に由来するいくつかの種類があり、しばしば用いられるものは時間畳み込み型 (TCL) のものと時間非畳み込み型 (TC) のものである [24, 25]。

量子マスター方程式の導出（非 Markov 型の段階）は、全系のユニタリ発展を縮約した対象系のダイナミクスと等価な、摂動パラメータの無限次数まで含む微積分方程式に対して、その高次項を切り捨てる操作に基づいている。縮約された力学は、環境系の自由度を縮約しているだけでダイナミクスとしては全系のダイナミクスと等価だから、必然この微積分方程式から対象系のダイナミクスを得るためには、本来ならば環境系のダイナミクスについても解く必要がある。しかし、初期無相関の仮定、および相互作用が弱いとする近似の下で得られたこれらの微積分方程式（=量子マスター方程式）は対象系についての閉じた微分方程式を与え、環境系のダイナミクスを解く必要がない構造になっている。ここで、二つの疑問が生じる：まず第一に、なぜ通常の摂動論で行われる解の摂動展開に基づいて近似解を構築できないのか？第二に、いかなる条件が全系のダイナミクスを対象系についての閉じたダイナミクスにする（動的自由度の縮約が起こる）のか、という問題である。本論文はこの二つの疑問に対して「繰り込み群の方法」を用いて解を与える。

繰り込み群の方法は、摂動パラメータを含む微分方程式の漸近解析を行うための道具である [26, 27, 30]。解の摂動展開に基づく単純摂動理論は、厳密解が有界であるにもかかわらず、し

ばしば $t \rightarrow \infty$ で発散するような項、永年項を生じる。その場合、永年項は単純摂動解が厳密解を大域的に近似することを妨げてしまう。これは摂動論固有の問題であり、特異摂動問題と呼ばれる問題の一種として知られる。繰り込み群の方法はこの問題を回避するために用いられる方法である。特異摂動問題には永年項問題以外にもうひとつ種類があり、繰り込み群の方法はこちらへの処理法としても用いられるが、本稿では相手を永年項問題に絞ることとする。繰り込み群の方法では、「繰り込み群方程式」を単純摂動解に課すことで、動的変数に格上げされた初期値に対する微分方程式を得る。この解を単純摂動解の初期値として再代入することで、大域的に厳密解を近似する解を構築することが出来る [26]。近年、Markov 型の量子マスター方程式の導出にこの方法が適応され、時間粗視化型の量子マスター方程式という回転波近似の一般化が導かれることが示された [31]。

1.3 本研究の結果・結論

本稿では、量子開放系の摂動的ダイナミクスを量子マスター方程式とは異なった方法で体系的に構築した。まず、環境系まで含めた複合系の von Neumann 方程式に対して、単純な解の摂動展開が破たんしうることを示した。そこで、微分方程式の特異摂動問題で用いられる繰り込み群の方法を利用し、それを解決した。結果得られた全系のダイナミクスは、いくつかの物理的仮定のもとで対象系のみ閉じたダイナミクスに縮約されることが示される。この縮約されたダイナミクスは、量子マスター方程式、およびその導出でしばしば用いられる「初期無相関状態の仮定」と密接に関連している。また、このダイナミクスを記述する方程式は量子マスター方程式の中で頻繁に用いられる TC、および TCL 型の方程式より簡単に解ける形になっている。最後に、繰り込み群の方法から得られるダイナミクスを厳密な解が求まっている spin-boson 系に適用し、厳密解、および TCL 型の量子マスター方程式の解と比較した。

量子マスター方程式においてただ方程式を簡単にするために用いられる作業仮設であった「初期無相関状態」、およびそれに伴う方程式系の自由度の縮約がいったいどのような物理的状況で正当化されるか、を明示的に示したのが本研究の一つの大きな結論である。先行研究 [15] では相互作用が 0 の極限でこれが示されていたが、本研究はこの一般化であるといえる。もう一つの結論は、自由度の縮約と同じ状況設定において、従来用いられてきた量子マスター方程式よりも解析が簡単なダイナミクスの記述法を提示したということである。この簡単さは、手で解くのが容易という以上に終状態や安定性などの解析がしやすくなるという利点がある。

以下は本稿の構成である。まず第二章では本題の結果を理解するために、量子論の基礎的な部分から話を進め、量子マスター方程式を導出する。その際に、マルコフ性や完全正值性、初期状態の直積性の仮定といった、量子マスター方程式を議論するうえで重要になる種々の概念を導入し、その正当性について議論する。第三章では打って変わって、特異摂動論というものを紹介し、そのなかでも広いクラスをカバーできる繰り込み群の方法について例題を交えつつ詳論する。また、漸近挙動において重要な中心多様体の概念を導入し、その意義について議論する。第四章が本稿の本題で、量子マスター方程式を一度忘れて、量子マスター方程式で取り扱うような系、たとえば環境系が大きいと仮定されるような系を純粋に摂動論に当てはめて解

くことを試みる。得られる結果は上に述べたように非常に示唆に富んだ内容となっている。第五章は本稿の結論に充てられると同時に、主結果の計算の数学的拡張性とその意味について深く議論する。

1.4 本論文を読み進める上での注意、記法の約束

本論文を読み進めるためには、量子力学の基本的な知識、摂動論に対する基本的な考え方が必要になる。また、しばしばわかりづらい表現、だいぶ前に定義されたがしばらく使わなかった表現等が出てくるので、その都度読解し、以前の文章に立ち戻る根気が必要になる。また記法に関して、本論文では常に \hbar を 1 とする単位系を採用している。それ以外の基本定数は出てこない。やった。最後に、本稿で証明という言葉を用いていても、直感性を重視して数学的厳密さには欠けていることがしばしばある。適宜参考文献を付しておくので、もし数学的に厳密な証明が気になる場合にはそちらを参考にされたし。

第 2 章

量子開放系のいろは

量子系の状態空間やダイナミクスの記述には古典系にはないテクニカルな部分がある。本章では本論文の主張を理解する準備段階として、量子系を議論するための準備を行う。

2.1 量子力学的時間発展の基本事項

量子力学的な状態は、複素係数体上のヒルベルト空間 \mathcal{H} 上のベクトル、 $|\psi\rangle$ によって指定される。また、この共役である $\langle\psi|$ を導入しておくこと、そのノルムは $\langle\psi|\psi\rangle$ と略記することが出来る。実際にこのヒルベルト空間上で量子力学の議論に用いるのは $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ の射線のみである。

状態ベクトル $|\psi\rangle$ の時間発展は、個々の系に付随するハミルトニアン演算子 H によって、

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (2.1)$$

と記述される。ただしハミルトニアンは自己共役（エルミート）演算子である。つまり、 $H = H^\dagger$ を満たす。これを形式的に解くと、

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle \quad (2.2)$$

となる。 H がエルミートであることから、 e^{-iHt} はユニタリ演算子である。そのため、この時間発展をユニタリ発展とも言う。また、共役な状態ベクトルについての発展方程式は

$$i\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \langle\psi(0)| \quad (2.3)$$

であり、その解は

$$\langle\psi(t)| = \langle\psi(0)|e^{iHt} \quad (2.4)$$

となっている。

量子力学的には物理的に測定可能な量（可観測量、observable）は考えているヒルベルト空間上に作用する、ある自己共役な演算子 A によってあらわされる。以下では、可観測量といったときには基本的にその可観測量をあらわす自己共役演算子をさす。考えている状態を表す状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して、そのベクトルに A を演算させた後に共役なベクトル $\langle\psi|$ と内積を

取ったもの、 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ が、その物理量の期待値となるとされる。もう少し詳細にいうと、個々の実験で得る結果は統計的に定まっており、ある A の値 a を我々が実験的に得る確率 $p(a)$ は、 $A|a\rangle = a|a\rangle$ を満たす固有ベクトル $|a\rangle$ によって、

$$p(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2 = \langle a | \psi \rangle \langle \psi | a \rangle \quad (2.5)$$

と定義され、実験後は状態ベクトルが得た値 a に対応する $|a\rangle$ に収縮する。 A が自己共役演算子であり、すべての固有値 $\{a_i\}$ に対応する固有ベクトルの集合 $\{|a_i\rangle\}$ で

$$A = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i| \quad (2.6)$$

と展開できることに気づくと、 A の期待値 $\langle A \rangle$ が

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i p(a_i) = \sum_i a_i \langle a_i | \psi \rangle \langle \psi | a_i \rangle = \langle \psi | \left(\sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i| \right) | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (2.7)$$

となることが分かる。先ほどの「 A を状態ベクトルではさんだものがその物理量の期待値となる」というのは、このような議論を測定という考え方をはさまずに述べたものである。以上の背景を持って、一般的に「量子論は確率的である」といわれるが、この確率的、統計的、という意味は古典論とはかなり含意するところが異なっている。その意味については後ほど詳述する。

可観測量 A の期待値の時間発展を考えてみよう。うへの議論から、 $t = 0$ で $|\psi(0)\rangle$ に設定された状態ベクトルがある時刻 t で持つ可観測量 A の期待値は、この状態ベクトルを用いて

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{iHt} A e^{-iHt} | \psi(0) \rangle \quad (2.8)$$

となるが、最後の $e^{iHt} A e^{-iHt}$ を $A(t)$ と考えることで、時間発展を状態ベクトルから物理量に対するものだと考えることも可能である。このときには、物理量は

$$i \frac{d}{dt} A(t) = [H, A(t)] \quad (2.9)$$

なる発展方程式にしたがっていると考えることが出来る。この描像を Heisenberg 描像、先に説明した状態ベクトルが時間発展するとみなす描像を Schrödinger 描像というが、結局観測可能な量は物理量の期待値のみであり、状態ベクトルや A そのものが見えるわけではないので、どのような描像をとっても理論を変更しているわけではない。量子論において、理論と実験を結びつけるのが密度行列そのものではなく、物理量に対する期待値であるという視点は後ほど重要になる。

つづいて、ユニタリ発展の意味について見ておこう。ユニタリ発展 $U(t) := e^{-iHt}$ は自身の共役である $U^\dagger = e^{iHt}$ と、 $U^\dagger U = 1$ という関係を満たしている（ユニタリ演算子の定義）。これは、初期でそのノルムが規格化された $|\psi\rangle(0)$ に対してその時間発展後の状態ベクトル $|\psi\rangle(t) = U(t)\psi(0)$ のノルムが

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger U | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 1 \quad (2.10)$$

となっていて、いわば考えている量子系の全確率の保存のようなものを意味している。

2.1.1 Liouville von Neumann 方程式

Schrödinger 描像ではヒルベルト空間上の状態ベクトルの時間発展を量子力学的な時間発展と同定してきた、ここで、「今のところは」それと等価な表現を導入しておこう。それは、 $|\psi\rangle$ の代わりに、ヒルベルト空間上の演算子 $\rho := |\psi\rangle\langle\psi|$ を用いる表現である。これを密度行列、あるいは密度演算子という。もし $\psi(t)$ が Schrödinger 方程式を満たす場合、容易に分かるとおり、この演算子は時間発展の方程式として、

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H, \rho(t)] \quad (2.11)$$

に従う（形式としては可観測量の満たす方程式と同じ）。これは Liouville von Neumann 方程式と呼ばれる。もしハミルトニアンがあらわな時間依存性を持たない場合、その形式解が

$$\rho(t) = e^{-iH(t-t_0)}\rho(t_0)e^{iH(t-t_0)} \quad (2.12)$$

と書けることを確認するのはそうむづかしいことではない。時間依存する場合にも単純に、 $H(t-t_0) \rightarrow \mathcal{T} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1)$ という変更をすれば形式解を書き下すことができる。ここで、 \mathcal{T} は時間順序積を表す。Liouville von Neumann 方程式を超演算子 $\mathcal{L}_H(\cdot) := -i[H, \cdot]$ を用いて

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}_H\rho(t) \quad (2.13)$$

と書く記法もある。以下ではその都度便利な方を用いる。

2.1.2 純粋状態と混合状態

以上の議論で、密度行列を $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ の形であるとした。しかし、密度行列の導入のメリットは、密度行列の形として $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ という形を導入した場合にはっきりわかるようになる。ここで、 $|\psi_i\rangle$ はそのノルムが規格化されており、それぞれの内積が $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$ であるとする。つまり $\{\psi_i\}_i$ はヒルベルト空間上の正規直交基底である。また、 $\{p_i\}$ は $\sum_i p_i = 1$ を満たしている。この状態を混合状態と呼ぼう。特別な場合として先に導入した形、 $|\psi\rangle\langle\psi|$ を含む。特にこの形をしているときには、混合状態と区別して、純粋状態と呼称する。このように構築した密度行列の意味を見ていこう。

まず、密度行列についてその対角和をとると、

$$\text{Tr}\rho = \text{Tr}\left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right) = \sum_i p_i \delta_{ij} = 1 \quad (2.14)$$

となっている。ここで、 $\sum_i p_i$ の条件を用いた。つづいて、密度行列によって表される状態の、ある物理量 A の期待値を、

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(A\rho) \quad (2.15)$$

と定義しよう。これに混合状態の表式を入れると、

$$\text{Tr}(A\rho) = \sum_i p_i \langle\psi_i|A|\psi_i\rangle \quad (2.16)$$

となる。もし状態が状態ベクトルで書ける場合、すなわち純粋状態の場合にはこの定義は

$$\text{Tr}(A\rho) = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (2.17)$$

となり、先の状態ベクトルでの定義と一致する。また、一般の場合には、「ある状態ベクトルでの A の期待値」のさらに古典的な確率混合のような形になっている。しかし、状態ベクトルによる確率性とこの $\{p_i\}$ (分布関数の役割) による確率の意味の違いとは何か? もしその意味に違いがないならば、すべての $\{p_i\}$ による「確率らしさ」を状態ベクトルに押し付けることが出来、それならば密度行列など導入する必要もなさそうである。そこで、次のような測定過程を想定してみよう。我々は何かしらの測定操作によって、与えられた $|\psi\rangle$ に対して、測定の後にある正規直交基底 $\{|i\rangle\}$ のいずれかにこの状態ベクトルを見出すとする。たとえば、この系が離散的なエネルギースペクトルを持っており、ある状態ベクトルのエネルギーを測定する過程を考えると、測定後はエネルギーがいずれかの値に確率的に決定され、状態ベクトルもその固有ベクトルに収縮する。そのような状況設定を考えていると思えばよいだろう。このとき、こちらの用意したある正規直交基底 $|i\rangle$ にこの状態ベクトルを見出す確率 $p(i)$ は

$$p(i) = |\langle i | \psi \rangle|^2 \quad (2.18)$$

であらわされる。同じ測定を次々に繰り返す(目的の状態ベクトルも毎回同じものを生成すること)で、我々はどの位の頻度でどの正規直交基底に状態ベクトルを見出したかのプロットを作成でき、これはもちろん実験数を増やす極限で上の確率分布に収束していく。ところで、こちらの測定する正規直交基底をヒルベルト空間上で回転させ、また別の正規直交基底をもって同じ状態ベクトルに対して測定を繰り返すことが出来る。この正規直交基底が、首尾よく $|\psi\rangle$ そのものを含んでいた場合を考えよう。このときの正規直交基底を $\{|\psi_i\rangle\}$ とおき、 $|\psi_1\rangle = |\psi\rangle$ であるとする。この場合には、ある状態 $|\psi_i\rangle$ に状態ベクトルを見出す確率 $p'(i)$ は

$$p'(i) = |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2 = \delta_{1i} \quad (2.19)$$

である。つまり、何度測定しても我々は $\langle \psi |$ にのみ状態ベクトルを見出し、他の状態を見出す確率はない。次に、用意されているのが状態ベクトルではなく、密度行列である場合を考えよう。この密度行列は正規直交基底を用いて $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ なるものであるとしておく。同じく、こちらにも正規直交基底 $\{|i\rangle\}$ を用意して、状態ベクトルのときと同じように測定を繰り返す。ある正規直交基底 $|i\rangle$ にこの密度行列で与えられる状態を見出す確率 $p(i)$ は、

$$\text{Tr}(|i\rangle \langle i| \rho) = \text{Tr}(|i\rangle \langle i| \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|) = \sum_j p_j |\langle i | \psi_j \rangle|^2 \quad (2.20)$$

で与えられる。首尾よく正規直交基底 $\{|\psi_i\rangle\}$ で測定できた場合のことを考えよう。この場合には、 $|\psi_i\rangle$ に状態を見出す確率 $p'(i)$ は

$$\text{Tr}(|\psi_i\rangle \langle \psi_i| \rho) = \text{Tr}(|\psi_i\rangle \langle \psi_i| \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|) = \sum_j p_j |\langle \psi_i | \psi_j \rangle|^2 = \sum_j p_j \delta_{ij}^2 = p_i \quad (2.21)$$

となる。一般に、どのように測定する正規直交基底を変えても $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ に対して、「絶対にこの状態である」という基底を取ることが出来ない。つまり、純粋状態における確率的な振る舞いは、測定という操作に依存するものであり、適切な測定によって、その状態が実際にはある状態に確定していることを見る事が出来る。他方で、混合状態の場合にはいかなる基底を用いてもある状態に確定している様子は見て取れず、我々の無知に起因した本質的な「確率混合」状態であり、その意味で古典的な場合の確率混合に対応している。

2.1.3 密度行列の非対角項

前節まででは密度行列を正規直交基底である $\{|\psi_i\rangle\}$ を用いて $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ である、と定義してきた。ここで、この正規直交基底をさらに別の基底 $\{|\phi_i\rangle\}$ で表示することを考えよう。これらの基底が直交している必要はないが、完全系をなすとする。このとき、密度行列は

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_{kl} \left(\sum_i p_i \langle\phi_k|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\phi_l\rangle \right) |\phi_k\rangle\langle\phi_l| \quad (2.22)$$

このように表示すると、密度行列には非対角成分が生じる。これらの非対角項は、測定基底を $\{|\phi_i\rangle\}$ にとったときの量子コヒーレンスと関連した項になっている。しかし、全確率が1であることを意味するトレース条件 $\text{Tr}\rho = 1$ および確率が正であることを意味する正值性 $\rho \geq 0$ は、基底によらない概念である。

また逆にこれら二つの条件、つまり

- $\text{Tr}\rho = 1$ トレース条件
- $\rho \geq 0$ 正值性

を満たすヒルベルト空間上の演算子 ρ に対して、正規直交基底で対角化した表示 $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ を見出すことができる。そこで、これら二つの条件を密度行列の一般的な定義とする。

2.1.4 部分対角和と情報を捨てるということ

系が二つの部分系の複合系になっている場合を考えよう。このような場合には複合系のヒルベルト空間は部分系のヒルベルト空間 \mathcal{H}_1 、 \mathcal{H}_2 を用いて $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ のように書ける。それを反映して、複合系のある密度行列 ρ_{tot} は一般に

$$\rho_{tot} = \sum_{ij} p_{ij} \rho_{i1} \otimes \rho_{j2} \quad (2.23)$$

という形を持っている。 ρ_{i1} 、 ρ_{j2} はすべて、それぞれの系に作用する規格化された密度行列で p_{ij} は条件

$$\sum_{ij} p_{ij} = 1 \quad (2.24)$$

を満たす。この場合に、先ず系1に対する演算子 A_1 の期待値を考えてみる。この演算子は、複合系に対する演算子としては $A_1 \otimes 1_2$ とみなすことが出来る。ただし 1_2 は系2に対する恒等演算子である。この期待値は

$$\begin{aligned} \langle A_1 \otimes 1_2 \rangle &= \text{Tr}(A_1 \otimes 1_2 \rho_{tot}) = \text{Tr}(A_1 \otimes 1_2 \sum_{ij} \rho_{i1} \otimes \rho_{j2}) \\ &= \sum_{ij} p_{ij} \text{Tr}_1(A_1 \rho_{i1}) \text{Tr}_2(\rho_{j2}) = \sum_{ij} p_{ij} \text{Tr}_1(A_1 \rho_{i1}) \end{aligned} \quad (2.25)$$

となる。他方でこの ρ_{tot} を系2について部分対角和をとったもの $\text{Tr}_2 \rho_{tot}$ を考えると、これは系1に作用する密度行列になっている。この密度行列について系1の演算子 A_1 の期待値をとると、その結果

$$\langle A_1 \rangle = \text{Tr}_1(A_1 \text{Tr}_2 \rho_{tot}) = \text{Tr}(A_1 \sum_{ij} p_{ij} \rho_{i1}) = \sum_{ij} p_{ij} \text{Tr}(A_1 \rho_{i1}) \quad (2.26)$$

となり、上で得た $A_1 \otimes 1_2$ の期待値と一致する。この複合系に対して我々が測定できる物理量は、全系のヒルベルト空間上の自己共役作用素によって記述される。その中で、「一切系2に関係しない」物理量は上で書いたような形 $A_1 \otimes 1_2$ と書くことが出来る。仮に、我々が系2について一切アクセスできない場合、つまりいかなる物理量も測定できない場合には、この形の物理量のみが我々の「見ることが出来る」物理量である。想定している状況のあらゆる可観測量に対して同じ期待値を与えるという意味で、上で定義されている二つの密度行列 ρ_{tot} と $\text{Tr}_2 \rho_{tot}$ は等価な意味を持っている。つまり、我々がある系1と2から構成された複合系に対して、「系2を見ない」という操作は、密度行列に対しては系2の自由度をトレースアウトするという操作としてやきなおすことが出来る。

2.1.5 転義混合性とエンタングルメント

本章では、孤立系が純粋状態だったとしても部分系だけを見たときにはそれが混合状態に見えるという、転義混合性について説明したい。ある孤立系を見ている部分系とそれ以外の系に分けたときの、二つの系の相関と密接に関連している。

たとえば、宇宙が量子論的に記述できていると想定してみよう。宇宙全体の状態が先に定義したような混合状態であるとは考えがたい。このように考えると我々の宇宙が確率的に混合していることになり、実際にその中に組み込まれている観測者すら確率的にいろいろな状態をとりうることを許容するが、我々がその混合性を感じることは出来ないからである。よって、宇宙は純粋状態であると思うことが出来るだろう。しかし、我々が観測するよう量子系は熱的な確率分布を持つ混合状態になっていることもある。つまり、大きな系は純粋状態であるのにもかかわらず、その中に存在する部分系が混合状態であるということは、一般に起こりうる。これを量子論の言葉で見ると、非常にとおりがよい事を以下に見ていく。

系1と系2からなるような複合系を考える。この複合系は純粋状態 $\rho_{tot} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ であると

しよう。この状態が部分系 1、2 の四つの状態ベクトル $|±_1\rangle$ 、 $|±_2\rangle$ によって

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_1\rangle \otimes |+_2\rangle + |-_1\rangle \otimes |-_2\rangle) \quad (2.27)$$

とかけている場合を考える。簡単のために、 $\langle +|- \rangle = 0$ という直交性条件が両系のヒルベルト空間で成り立っているとす。このとき、我々が系 2 を見ることが出来ない場合には、系 2 に対してトレースを取って得られる系 1 の密度行列

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \text{Tr}_2(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \text{Tr}_2\left(\frac{1}{2}(|+_1\rangle \otimes |+_2\rangle + |-_1\rangle \otimes |-_2\rangle)(\langle+_1| \otimes \langle+_2| + \langle-1| \otimes \langle-2|)\right) \\ &= \frac{1}{2}|+_1\rangle\langle+_1| + \frac{1}{2}|-_1\rangle\langle-1| \end{aligned} \quad (2.28)$$

が我々の”持つ”量子的な状態である。明らかに、これは混合状態となっている。もし全系が直積状態

$$|\Psi\rangle = |+_1\rangle \otimes |+_2\rangle \quad (2.29)$$

であるときにはこのようなことにはならない。実際に、

$$\rho_1 = \text{Tr}_2(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \text{Tr}_2(|+_1\rangle \otimes |+_2\rangle \langle+_1| \langle+_2|) = |+_1\rangle\langle+_1| \quad (2.30)$$

となって、純粋状態のままである。状態 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+_1\rangle \otimes |+_2\rangle + |-_1\rangle \otimes |-_2\rangle)$ はちょっと見た感じ直積状態 $|+_1\rangle|+_2\rangle$ よりも系 1 と系 2 が”相関”している印象である。つまり、このような相関がある場合には部分系に対するトレースアウトの操作が混合性を生み出しうる。このように、部分トレースによって混合状態が生まれる性質を転義混合性という。全系は混合状態ではないが、我々が系 2 について情報を得られないがために、系 2 からの相関が系 1 の不確定性、確率を生み出している。

このような見方は、古典的な系を考える場合でも直感的には有用である。たとえば、熱浴に接するある少数系は、熱浴からのノイズで確率的な（平衡）状態にあると考えられるが、この確率的、という意味はもちろん量子論では混合状態での確率的という意味に対応している。しかし、この少数系にノイズを与える熱浴まで視野を広げると、熱浴がさらに外側と相互作用していなければ（熱浴に対する熱浴がなければ）、全体の運動は完全に決定論的なものであるはずである。我々は熱浴の自由度が多すぎて、それに対して制御が出来ない、あるいはそれらの力学を追えるほど詳細には熱浴のことを知らないというだけの話である。ゆえに少数系の振舞いは「一見」確率的に見える。このように考えると、古典的な場合でも、やはり系の混合的な状態というものがある系（この場合では熱浴）に対する無知に起因しうる、ということが分かるだろう。これを敷衍して、世界のあらゆる混合性はこの無知性に起因するもので、宇宙自体は純粋状態になっている、と考えることはしばしば行われる。この考え方は直感的にも納得しやすいものであるが、とはいえ、これは計算を簡単化するためのお約束のような面がたぶんにあり、実際にどうなっているか、というところを議論できる類の話ではない、ということには注意しておこう。

さて、以上の議論で何気なしに”相関”という言葉を用いたが、これはいったいかなる意味での相関であろうか。それを明確にするために以下の思考実験を考えよう。上で考えた状態 $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle \otimes |+2\rangle + |-1\rangle \otimes |-2\rangle)$ を考えよう。今我々は、系1に対して状態 $|\pm_1\rangle$ のどちらにあるかを測定出来る装置と、同様に系2に対して状態 $|\pm_2\rangle$ のどちらにあるかを測定できる装置を持っているとする。最初に系1に対して測定をしたあとの状態を考える。系1が $|+1\rangle\langle+1|$ になっている確率 $p_1(+)$ は

$$p_1(+)=\text{Tr}\left(E_{1+}|\Psi\rangle\langle\Psi|\right)=1/2 \quad (2.31)$$

で与えられ、その後の状態は

$$|\Psi_+\rangle=E_{1+}|\Psi\rangle/\sqrt{|E_{1+}|\Psi\rangle|}=|+1\rangle|+1\rangle \quad (2.32)$$

となる。ここで $E_{1\pm}:=|\pm_1\rangle\langle\pm_1|\otimes 1_2$ という略記法を用いた。一方で、系1が $|-1\rangle\langle-1|$ になっている確率も同様に

$$p_1(+)=\text{Tr}\left(|+1\rangle\langle+1|\otimes 1_2|\Psi\rangle\langle\Psi|\right)=1/2 \quad (2.33)$$

であり、その後の状態は同様に

$$|\Psi_-\rangle=E_{1-}|\Psi\rangle/\sqrt{|E_{1-}|\Psi\rangle|}=|-1\rangle|-1\rangle \quad (2.34)$$

という状態に落ち着いている。次に、系1に対する測定後に系2に対して同様の測定を行うことを考えよう。明らかに $|\Psi_+\rangle$ に対して系2への測定を行うと、状態 $|+2\rangle$ しか見出されることが分かる。 $|\Psi_-\rangle$ への測定では逆に $|+2\rangle$ の状態しか見出されない。つまり、系1への測定操作は系2の状態すら確定していることが分かる。この議論において、系1と系2の物理的距離には一切言及していないことに注目しよう。つまり、もし遠く離れた系1と系2に対して何らかの方法で状態 $|\Psi\rangle$ を用意できたならば、系1の測定によって系2の状態は瞬時に確定していると考えることが出来る（しかし、これは情報が光速を超えて伝わることを”意味しない”）。このような非局所性を持った相関は量子論特有のものであり、「量子エンタングルメント」、あるいは「量子もつれ」と呼ばれ、量子力学、量子情報理論などにおいて非常に重要な役割を果たしている。

ここで、もう一つ部分系の混合状態が持つ乱雑さの指標である、情報エントロピー (von Neumann エントロピー) と全系のエンタングルメントの関係について議論しておこう。密度行列 ρ に対して、情報エントロピー $S(\rho)$ は

$$S(\rho)=\text{Tr}\rho\log_2\rho \quad (2.35)$$

と定義される。 \log の底は対して重要ではなく、ビットの概念を基準に考えているために2をとっていると思えばよい。これは、対角化された基底 $\rho=\sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ を使って表示すると、

$$S(\rho)=\sum_i p_i\log_2 p_i \quad (2.36)$$

となって、古典的な場合に用いられるシャノンの意味でのエントロピーと同じ形をしている。これは、密度行列が純粋状態の時には 0 となり、等確率ですべての状態が混合した完全混合状態の時に最大値をとる。部分系が純粋状態であるときには全系はエンタングル状態にない。また、上で定義した

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle \otimes |+2\rangle + |-1\rangle \otimes |-2\rangle) \quad (2.37)$$

なる状態はエンタングルメントの言葉でいえば Bell 状態と呼ばれ、二準位系同士の最大エンタングル状態であることがわかっている。これを考えると、二体系に対してトレースをとって得られた縮約密度行列の情報エントロピーを計算することで、二体系のエンタングルメントの強さを図ることができるはずである。このように、二つの系から構成される系に対して、 $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ なる状態を考え、それを片方の自由度に対して縮約して得られる密度行列

$$\rho_1 = \text{Tr}_2(|\Psi\rangle\langle\Psi|) \quad (2.38)$$

から計算された情報エントロピー

$$S(\rho) = \text{Tr} \rho_1 \log_2 \rho_1 \quad (2.39)$$

を、全系のエンタングルメントの強さを表すという意味で、「エンタングルメントエントロピー」という。直観的に言うと、部分系が強く混合しているほど、我々はこの系に対する情報を持っていないことになるが、それは非常にこの系と相関が強い系の情報をトレースアウトしている（＝見ないことにしている）からである、といえる。

実は、どちらの部分系に対して縮約をとっても、全系が純粋状態の場合にはエンタングルメントエントロピーは同じ結果を与えることがわかっている。また、上の議論は全系が純粋状態であるときにしか通用しないものであることに注意されたい。全系が混合状態であるときには、エンタングルメントエントロピーはエンタングルメントの強さを表す良い指標にはなっておらず、別の指標を用いる必要がある。

2.1.6 純粋化 (PURIFICATION)

転義混合性は、全系として純粋状態が与えられた時に系を二つ（あるいはそれ以上）の部分系の複合系とみて、その間に相関がある場合には部分系が混合状態に見えるということを主張していた。では逆に、ある混合状態を表す密度行列が得られたときに、それを部分系として持つような純粋状態はあるか？という問いを考えることができる。結果としてはそのような純粋状態は存在する。あるヒルベルト空間 \mathcal{H}_1 上の混合状態

$$\rho_1 = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|, \quad \sum_i p_i = 1 \quad (2.40)$$

に対して、今 \mathcal{H}_1 と同じ次元を持つヒルベルト空間 \mathcal{H}_2 を用意して、複合系のヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上の純粋状態

$$|\Psi\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle \otimes |\tilde{i}\rangle \quad (2.41)$$

を考える。ここで、 $|\tilde{i}\rangle$ は \mathcal{H}_2 上の正規直交基底である。この状態について \mathcal{H}_2 の自由度をトレースアウトして縮約された密度行列 ρ_1 を計算すると、

$$\begin{aligned}\rho_1 &= \text{Tr}_2 |\Psi\rangle\langle\Psi| = \text{Tr}_2 \left(\left(\sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle \otimes |\tilde{i}\rangle \right) \left(\sum_j \sqrt{p_j} \langle j| \otimes \langle \tilde{j}| \right) \right) \\ &= \sum_{i,j} \sqrt{p_i} \sqrt{p_j} \text{Tr}_2 \left((|i\rangle \otimes |\tilde{i}\rangle) (\langle j| \otimes \langle \tilde{j}|) \right) = \sum_{i,j} \sqrt{p_i} \sqrt{p_j} \delta_{ij} |i\rangle\langle i| = \sum_i p_i |i\rangle\langle i| \quad (2.42)\end{aligned}$$

となって、最初に用意した密度行列を再現することがわかる。このような操作は数学的には一般に行うことができ、ある系の密度行列に対してそれより十分に大きな系を用意して対応する純粋状態を持ってくるこの操作を「純粋化」という。この手続きは量子情報の分野などで重要になってくるが、数学的な操作に過ぎないことには注意しておくべきである。この操作はある部分の混合状態を、その外側の系まで考えることで純粋な状態にできる、ということの意味してはいない。あくまで複合系にするためにとりつける系 (ancilla ということもある) は仮想的なものである。他方で、直観レベルでは外側の系まで考えると純粋状態になっているというのは、そこまで不穏当な考え方ではない。転義混合性の部分で説明したように「情報の欠如」という概念を用いて考えると、その系の情報を持っているほかの系を考慮することで情報を回復するという操作は、物理的にも大変それらしいものであるように思われる。

2.2 量子開放系とは

以上の議論においては、考慮している系外から入る雑音や不確定な要素の影響を考えることはしていなかった。無論、上記の Liouville von Neumann 方程式に古典的にノイズを入れるという現象論的なやり方はいつでも実行可能ではあるが、あまりにも指導原理に欠ける方法である。そこで、このようなノイズが加わっている量子系のダイナミクスを体系的に取り扱う方法が、「ノイズを与えている系まで含めて量子論的に取り扱う」というものである。つまり、対象系のヒルベルト空間 \mathcal{H}_S に、考えている状況をうまく記述するような量子系 \mathcal{H}_E を結合させ、複合系 $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ を考え、これで孤立系をなすとする（つまりこの複合系は外の系と相互作用していない）。環境系を適切に大きくすることでこの複合系を孤立系とみなすことはいつでも可能である。この孤立系自体は外部からの雑音の影響を受けずユニタリ発展に従うから、これを解き、環境系に対するデータを見ることなく捨てれば、直観的には相互作用によって対象系の純粋性が失われていき散逸が起こるだろう。以下ではこの考え方を、これまでに準備した道具を用いてから定式化していく。

2.2.1 縮約された力学

我々はその発展を見たい（あるいは実験などでその発展を見ることができ）系を対象系 (Target system) と呼称しよう。この対象系には、我々が実験でコントロールできないだとか、それ自体の物理量の時間発展に興味がない、あるいは逆に十分に古典的でありその物理量

を議論することに意味がない、十分にコントロールできるシステムが取り付けられているとする。このシステムのことを環境系 (Environment system)、と呼称しよう。典型的には有限温度の熱浴だとか、外側からのレーザー光などがあげられる。この全体の状況を量子力学的に正当化すると、全系のヒルベルト空間は、対象系に付随したヒルベルト空間 \mathcal{H}_S と環境系に付随したヒルベルト空間 \mathcal{H}_E によって

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E \quad (2.43)$$

と書くことができる。

このような環境系と対象系の相互作用を考え、これら全体はほかの外系と相互作用していないような状況を考えよう。つまり、これらの系は二つで一つの孤立系をなしているとする。孤立系をなしている、ということは、二つの系は対象系に作用するハミルトニアン H_S 、環境系に作用するハミルトニアン H_E 、その二つの相互作用 H_{int} によって構成される、全系のハミルトニアン H_{tot} によってユニタリ発展をする、ということを表している。また、全系のハミルトニアンはシュレディンガー描像ではあらわな時間依存性がないとする (ハミルトニアンの時間依存性はさらなる外系からの相互作用などによるエネルギーの非保存を示しているため)。この時の時間発展演算子は、

$$U(t - t_0) = \exp(-iH_{tot}(t - t_0)) = \exp(-i(H_S + H_E + H_{int})(t - t_0)) \quad (2.44)$$

の形で書くことができ、Liouville von Neumann 方程式による密度行列の時間発展は

$$\rho(t) = U(t - t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t - t_0) \quad (2.45)$$

と形式的に求まる。環境系の物理量や振る舞いに興味がない時にはその自由度について対角和をとった、

$$\rho_S = \text{Tr}_E(\rho(t)) = \text{Tr}_E(U(t - t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t - t_0)) \quad (2.46)$$

が対象系の物理量のふるまいを表していて、この密度行列を使えばほしい対象系の情報が得られる。しかし、仮に対象系の孤立系としての時間発展と環境系の孤立系としての時間発展が個々に求まっていたとしても (つまり H_S 、 H_E の固有値、固有ベクトルが首尾よく求められたとしても)、相互作用ハミルトニアン H_{int} の寄与によってこのダイナミクスは一般に複雑怪奇なものになり、全系の時間発展に対する形式解は形式解以上の意味を持たない。環境系の自由度の対角和という概念は、こちらが環境系の情報を見たいか見たくないかの問題でしかなく、対象系だけを見たからと言って問題が簡単になっているというわけではない、ということに注意されたい。基本的に我々がほしいのは、この全系のユニタリ発展が求められない場合の対処であり、上のユニタリ発展を見ても何も始まらないのではあるが、その事実にもかかわらず、形式的に上の書き方をすると一つの興味深い定理に至る。それは、以下の Kraus 表現、そして完全正值性の定理である。

縮約された力学のクラウス表現 [36]

初期状態として密度行列 $\rho_{tot} = \rho_S(t_0) \otimes \rho_E(t_0)$ なる直積状態を用意する。これに対してユニタリ発展を行い環境系の自由度をトレースアウトしたとき、この操作を対象系の初期状態 $\rho_S(t_0)$ から $\rho_S(t)$ へ写像とみなすと、この写像は Kraus 表現という形で書ける。つまり、

$$\rho_S = \text{Tr}_E(\rho(t)) = \text{Tr}_E(U(t-t_0)(\rho_S(t_0) \otimes \rho_E(t_0))U^\dagger(t-t_0)) =: \Lambda\rho_S(t_0) \quad (2.47)$$

に対して、この写像を

$$\Lambda\rho_S = \sum_i E_i \rho_S E_i \quad (2.48)$$

と書くことが可能である。ただしここで、 $\{E_i\}$ は

$$\sum_i E_i^\dagger E_i = 1_S \quad (2.49)$$

を満たしている。このような写像の表現を Kraus 表現という。

この証明は基本的に（数学的厳密さに立ち入らなければ）一直線である。以下に示しておこう。まず、ユニタリ演算子が \mathcal{H}_S 上の演算子と \mathcal{H}_E 上の演算子を用いて

$$U = \sum_\alpha A_S^\alpha \otimes B_E^\alpha \quad (2.50)$$

と書けるとしておこう。これに対して、

$$\begin{aligned} \rho_S(t) &= \text{Tr}_E U \rho_S(0) \otimes \rho_E U^\dagger = \text{Tr}_E \left(\left(\sum_\alpha A_S^\alpha \otimes B_E^\alpha \right) (\rho_S(0) \otimes \rho_E) \left(\sum_\beta A_S^{\dagger\beta} \otimes B_E^{\dagger\beta} \right) \right) \\ &= \sum_{\alpha, \beta} A_S^\alpha \rho_S(0) A_S^{\dagger\beta} \text{Tr}_E (B_E^\alpha \rho_E B_E^{\dagger\beta}) \\ &= \sum_{\alpha, \beta} A_S^\alpha \rho_S(0) A_S^{\dagger\beta} \text{Tr}_E (B_E^\alpha \sum_i p_i |i_E\rangle \langle i_E| B_E^{\dagger\beta}) \\ &= \sum_{i, j, \alpha, \beta} p_i A_S^\alpha \rho_S(0) A_S^{\dagger\beta} \langle j_E | B_E^\alpha | i_E \rangle \langle i_E | B_E^{\dagger\beta} | j_E \rangle \\ &= \sum_{ij} E_{ij} \rho_S(E_{ij}^\dagger) \end{aligned} \quad (2.51)$$

となる。途中の式で、 ρ_E を適当な正規直交基底で $\rho_E = \sum_i p_i |i_E\rangle \langle i_E|$ と展開できると仮定している（これは環境系が連続無限次元である場合には破たんする仮定であるが、その場合でも類似の証明が可能である）。最後の等号で $E_{ij} := \sqrt{p_i} \sum_\alpha \langle j_E | B_E^\alpha | i_E \rangle A_S^\alpha$ と置いた。この演算

子 E_{ij} に対して、

$$\begin{aligned}
 \sum_{ij} E_{ij} E_{ij}^\dagger &= \sum_{ij} (\sqrt{p_i} \sum_{\alpha} \langle j_E | B_E^\alpha | i_E \rangle A_S^\alpha) (\sqrt{p_i} \sum_{\beta} \langle i_E | B_E^{\dagger\beta} | j_E \rangle A_S^\beta) \\
 &= \sum_i p_i \sum_j \langle j_E | U | i_E \rangle \langle i_E | U^\dagger | j_E \rangle \\
 &= \sum_i p_i \langle i_E | U^\dagger U | i_E \rangle = \sum_i p_i \langle i_E | i_E \rangle = 1
 \end{aligned} \tag{2.52}$$

が成り立っている。よって、初期相関がない場合には縮約された力学はこのようにクラウス表現に帰着される。本来は一様収束性などの数学的に精緻な議論に立ち入らなければならないが、ここではそれは割愛して、おおよその概略を書いた。より詳しい証明は、[36] を見られたし。

次に、完全正値性について紹介しておこう。完全正値性とは以下のような性質である。

完全正値性

有界作用素空間 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 上の写像 Λ とある自然数 n を用意する。今、仮想的に複素 n 次元行列の空間 $M(n)$ とその上の恒等写像 \mathbb{I}_n を想定し、 $\mathcal{B}(\mathcal{H}) \otimes M(n)$ に作用する合成写像 $\Lambda \otimes \mathbb{I}_n$ を考える。この合成写像が正値保存である、つまり、任意の正値な $\mathcal{B}(\mathcal{H}) \otimes M(n)$ の元を正値な元に移すとき、これを n 正値な写像であるという。

任意の n について n 正値性が言えているときにはその写像 Λ を「完全正値な写像である」という。また、特に 1 正値な場合には、これは $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 上の正値な写像である。

イメージで述べてしまうと、だいたい $M(n)$ というのが n 次元のヒルベルト空間上の密度行列を含む線形作用素の空間なので、これは考えている系 \mathcal{H} に仮想的に余剰な系を付け足したときに、部分系だけを Λ で発展させる操作が全系の密度行列の正値性を保存する、という性質である。物理的な系の発展を記述する操作としてはこれが満たされていてほしいものであることが以下のように分かる。たとえば、物理的に遠くに離れている系を考える。この二つの系のうち、片方について我々は Λ の操作が（遠くに離れた系とは独立に）可能である。全系に対してこの操作は $\Lambda \otimes 1$ と表現されるが（ 1 は遠くに離れている系の恒等演算子）、この結果正値性が破れるということは、この宇宙のどこかで確率が負になることを示唆している。

完全正値な写像に対しては、以下の表現定理があることが非常に重要である。

完全正値写像の Kraus 表現

完全正値写像 Λ は Kraus 表現によって

$$\Lambda \rho = \sum_i E_i \rho E_i^\dagger, \quad \sum_i E_i^\dagger E_i = 1_S \tag{2.53}$$

の形に書くことができる。逆に上の形にかける写像 Λ は完全正値である [9]。

つまり、これらの定理を組み合わせることで「初期相関がない場合の縮約された力学は完全正値である」ということが主張できる。これはハミルトニアンなどのモデルの詳細によらず成り立っている、非常に強力な定理である。縮約された力学の完全

正值性

対象系と環境系の二つからなる複合系を考える。全系の発展がユニタリ発展 $U(t)$ で支配されているとする。初期状態を相関がない状態 $\rho_S(0) \otimes \rho_E$ の時、縮約された力学

$$\rho_S(t) = \Lambda_t \rho_S := \text{Tr}_E(U(t)\rho_S(0) \otimes \rho_E U^\dagger) \quad (2.54)$$

は、完全正值な写像になっている。

2.3 量子マスター方程式

2.3.1 基本的な微視的導出

上では状態空間の時間発展の一般論について議論したが、そこでも述べたように、基本的には縮約された力学が完全な形で求まっているということは全系の時間発展が完全な形で求まっているということであり、その意味で環境系まで拡張された大きなヒルベルト空間の Schrödinger 方程式をまともに解くということに他ならない。無論のこと、基本的にはこれが可能なのは非常にまれな状況で、相互作用の存在により全系の厳密な時間発展は一般には解くことが極端に難しくなる。ゆえに、このダイナミクスを追う場合には何かしらの近似が必要になってくる。もっともよく用いられるのは、相互作用ハミルトニアン H_{int} にあらわにその強さを表すパラメータ λ を入れて、 λ が非常に弱い場合でのダイナミクスを考えることである。これによって、全系のシュレディンガー方程式を”摂動的に”解くことが可能になる。また、その過程で、初期状態を直積状態として置いておく、という仮定も非常にしばしば用いられる。この仮定は多くの場合で用いられる近似ではあるが、これに対する直観的意味を考えるのは非常にむづかしい問題である。最近でもこの仮定に対する物理的意味付け、正当化の方法などは議論に上がることがある [14][15]。数学的には、完全正值性の保証がしやすくなるという非常に大きな利点がある。

これらの仮定を基に、対象系の密度行列に対する発展方程式を求めてみよう。この導出にはいくつかの流儀があるが、本稿ではもっとも最短かつ意味合いも分かりやすい方法をとる。より詳細な方法は付録に載せておいたのでそちらを見てほしい。まず基本になるのは、対象系と環境系からなる複合系に対するユニタリ発展である。ここで、対象系は有限の Hilbert 空間の次元 N を持っているとする。全系のシュレディンガー方程式は

$$\dot{\rho}_{tot} = -i[H_{tot}, \rho_{tot}] = -i[H_S + H_E + \lambda H_{int}, \rho(t)] \quad (2.55)$$

と書かれる。 H_S はシステムのみ作用するハミルトニアン演算子、 H_E は環境系のみ作用するハミルトニアン演算子で、相互作用がない場合の発展を記述している。その意味を含めて $H_S + H_E$ を H_0 と書き、自由ハミルトニアン部という。 H_{int} は相互作用ハミルトニアンを表し、 $\lambda \ll 1$ という正の値でその強さが制御されている。まず最初に、相互作用表示を導入して Schrödinger 方程式を書き直そう。Schrödinger 表示での演算子 A について、 $\tilde{A}(t) = e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t}$ という相互作用表示の演算子を導入する。相互作用表示での von

Neumann 方程式は

$$\dot{\tilde{\rho}}_{tot}(t) = -i\lambda[\tilde{H}_{int}(t), \tilde{\rho}_{tot}] \quad (2.56)$$

となる。これを形式的に相互作用の強さの二次のオーダーまで解くと、得られる結果は

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{tot}(t) &= \tilde{\rho}_{tot}(\tau) - (i\lambda) \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t_1), \tilde{\rho}_{tot}(\tau)] \\ &\quad + (i\lambda)^2 \int_{\tau}^t dt_1 \int_{\tau}^{t_1} [\tilde{H}_{int}(t_1), [\tilde{H}_{int}(t_2), \tilde{\rho}_{tot}(\tau)]] \end{aligned} \quad (2.57)$$

という、非常に単純なものとなる。また、この際に初期時刻に相関がない、つまり $\rho_{tot}(\tau) = \rho_S(\tau) \otimes \rho_E$ であり、環境系が定常であるとして、環境系についてのトレースアウトを取り、

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_S(t) &= \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \tilde{\rho}_E \\ &\quad + (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 \int_{\tau}^{t_1} [\tilde{H}_{int}(t_1), [\tilde{H}_{int}(t_2), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \tilde{\rho}_E]] \end{aligned} \quad (2.58)$$

の形にしたものが、摂動的な対象系のダイナミクスを記述していると考えられる。ここで、一般性を失わずに相互作用ハミルトニアンを環境系でトレースアウトした項が落とせることと、

$$\tilde{\rho}_S(t) := \text{Tr}_E \tilde{\rho}_{tot}(t) \quad (2.59)$$

という定義を用いた。これを再び微分方程式の形に書き直す。両辺を t で微分して、

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \rho_S(\tau) \otimes \rho_E]] \quad (2.60)$$

という形で書き、相互作用が弱い、つまり

$$\rho_S(\tau) \sim \rho_S(t) + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (2.61)$$

ということから積分内の密度行列を

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\rho}}_S(t) &= (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \rho_S(\tau) \otimes \rho_E]] \\ &\sim (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \rho_S(t) \otimes \rho_E]] \end{aligned} \quad (2.62)$$

のようにすり替える。これはそのようにすり替えても高次の項からしか寄与がないと見込んでのことである。得られた ρ_S についての微分方程式

$$\dot{\rho}_S(t) = (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_E]] \quad (2.63)$$

を非時間畳み込み型 (Time ConvolutionLess, TCL) の量子マスター方程式という。また、密度行列をすり替えるところで、

$$\rho_S(\tau) \sim \rho_S(t_1) + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (2.64)$$

であるとして、

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{\rho}}_S(t) &= (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \tilde{\rho}_E]] \\ &\sim (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \tilde{\rho}_S(t_1) \otimes \tilde{\rho}_E]]\end{aligned}\quad (2.65)$$

のごとくすり替えることで、時間畳み込み型 (Time Convolution, TC) の量子マスター方程式

$$\dot{\rho}_S(t) = (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \rho_S(t_1) \otimes \rho_E]]\quad (2.66)$$

を得る。見てわかる通り自分自身の積分を含んでいるので、基本的には TC 型の量子マスター方程式のほうが TCL 型のものより解きづらい。では、この方法のほうが精度が良いのかといわれるとそういうわけではなく、そもそもいくつかの系では密度行列の正值性が保証されないなどの問題を含んでいる。この摂動的な二つのやり方のどちらが、どのような状況でより正しい結果を与えるかということに対しての明快な答えはいまだに得られていない。この事実は、「どのように摂動計算をするべきか」ということに対する体系的な知識の欠如によって引き起こされるものであるが、そもそもそれを言ってしまうと、「なぜ TCL 型の量子マスター方程式はある程度の良い近似を与えるか」ということまで疑わなくてはならない。個々の系に対してはこれを議論するいくつかの研究がある [10][11]。また、付録に譲った導出法を使えば、摂動の次数を上げていくことも可能である。

以上の二つの量子マスター方程式は、積分の中に初期時刻から現在時刻までの寄与が含まれているために履歴を引きずるような効果が出ている。このため、これらのことをしばしば、非 Markov 的なダイナミクスを記述しているとみなす。以下で断りなく非 Markov 的な量子マスター方程式といったら、これら二つの方程式をさしている。

いくつかの応用においてはここからさらに Markov 的であるという仮定をするほうが計算が楽になり、必要な結果が取り出しやすい場合がある。その場合、積分の上端を ∞ に持っていく、

$$\dot{\rho}_S(t) = (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^{\infty} dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \rho_S(t_1) \otimes \rho_E]]\quad (2.67)$$

とすれば、もっとも単純に履歴効果を消去できる。

2.3.2 回転波近似

量子マスター方程式を考えるときには、方程式系を簡単にするために種々の近似を用いるが、本論文では、そのような近似のうちの一つである「回転波近似」が重要な役割を果たす。実は、回転波近似、という言葉には「階層的に異なる」二つの意味がある。

第一の回転波近似は、相互作用ハミルトニアンに対しての近似である。例として、対象系に付随する消滅 (生成) 演算子 a (a^\dagger) と環境系に付随する消滅 (生成) 演算子 b (b^\dagger) から相互作用ハミルトニアンが、

$$H_{int} = g_1 a \otimes b + g_1^* a^\dagger \otimes b^\dagger + g_2^* a \otimes b^\dagger + g_2 a^\dagger \otimes b\quad (2.68)$$

と書けている場合を考えよう。ここで、 g_1 、 g_2 は係数で、相互作用ハミルトニアンに得るミート性を要求したために上のような組み方で入っている。上の形から、「生成演算子×生成演算子」、あるいはその共役である「消滅演算子×消滅演算子」のような「エネルギー量子数を保存しない」項を落とし

$$H_{int} \sim g_2^* a \otimes b^\dagger + g_2^* a^\dagger \otimes b \quad (2.69)$$

とする近似を、回転波近似ということがある。この近似は、相互作用が小さい時にはかなり良い近似を与えることがわかっている。

もう一つの回転波近似は、上の回転波近似と若干似ているが、そもそも存在する階層が異なり、より強い近似となっている。先ほどと同じように、対象系と環境系にそれぞれ消滅（生成）演算子 a (a^\dagger)、 b_{ω_i} ($b_{\omega_i}^\dagger$) が付随しているばあいを考える。ここで、環境系はエネルギー準位が $\Omega > 0$ の系、環境系はエネルギー準位差 $\omega_i > 0$ の調和振動子がつながっている複合系を想定している。相互作用ハミルトニアンは

$$H_{int} = \sum_i g_i a (b_{\omega_i} + b_{\omega_i}^\dagger) + H.c. \quad (2.70)$$

の形をしているとする。ここで、生成消滅演算子の相互作用表示が

$$\begin{aligned} a(t) &= e^{-i\Omega t} a, & a^\dagger(t) &= e^{i\Omega t} a^\dagger \\ b_{\omega_i}(t) &= e^{-i\omega_i t} b_{\omega_i}, & b_{\omega_i}^\dagger(t) &= e^{i\omega_i t} b_{\omega_i}^\dagger \end{aligned} \quad (2.71)$$

のようになることを使うと、相互作用表示の相互作用ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{int}(t) &= \sum_i g_i a(t) (b_{\omega_i}(t) + b_{\omega_i}^\dagger(t)) + H.c. \\ &= \sum_i g_i a e^{-i\Omega t} (e^{-i\omega_i t} b_{\omega_i} + e^{i\omega_i t} b_{\omega_i}^\dagger) + H.c. \end{aligned} \quad (2.72)$$

となるが、ここで、 e の指数が 0 となるつまり $\Omega = \omega_i$ となるようなものだけを取り出し、

$$\tilde{H}_{int}(t) \sim \sum_i g_i \delta_{\Omega\omega_i} a e^{-i(\Omega-\omega_i)t} b_{\omega_i}^\dagger + H.c. = g_\Omega a b_\Omega^\dagger + H.c. \quad (2.73)$$

とする近似を、回転波近似という。生成演算子×消滅演算子という形の項しか出てこないのみならず、そのエネルギー準位が同じ部分のみを残している。そうすることで、相互作用ハミルトニアンの時間依存性（相互作用表示で）がなくなっていることが見て取れる。環境系の定常であると仮定した場合には、量子マスター方程式に回転波近似を課するという操作を時間積分の言葉で書き直すことが出来、以下の表式

$$\dot{\rho}_S(t) = (i\lambda)^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \text{Tr}_E \int_\tau^T dt_1 \int_\tau^{t_1} dt_2 [\tilde{H}_{int}(t_1), [\tilde{H}_{int}(t_2), \rho_S(t_1) \otimes \rho_E]] \quad (2.74)$$

を得る。これを示すこと自体は容易で、単純に行ってしまうと時間領域での無限大積分が周波数領域でのデルタ関数に変ずるという性質を用いている。以下の議論のために、これを变形しておく。そのために、相互作用を

$$H_{int} = \sum_i A_S^i \otimes B_E^i \quad (2.75)$$

の形であるとする。\$A_S^i\$、\$B_E^i\$ はそれぞれ対象系、環境系の演算子であるが、展開の仕方を変えることで \$A_S^i\$ をすべて

$$\text{Tr}(A_S^{i\dagger} A_S^j) = \delta_{ij}, \quad \text{Tr}(A_S^j) = 0 \quad (2.76)$$

を満たすように取っておくことはいつでも可能である。以下では常にこうとっているものとする。また、対象系は有限自由度であるため、相互作用表示 \$A_{S,s}^i(t)\$ はスペクトル分解

$$A_S^i(t) = \sum_{\omega} e^{i\omega t} A_S^i(\omega), \quad A_S^i(\omega) = \sum_{\omega_1 - \omega_2 = \omega} \Pi(\omega_1) A_S^i \Pi(\omega_2), \quad (2.77)$$

を持つ。実は (2.76) のようなとり方をスペクトル分解と同定することが可能であり、以下では \$A_S^i = A_S(\omega_i)\$ ということにして話を薦めることとする。この場合 \$A_S^{i\dagger} = A_S(-\omega_i)\$ である。この前提の下で、回転波近似の量子マスター方程式は

$$\dot{\rho} = -i[H + \sum_{ij} \gamma_{ij} A^i A^{\dagger j}, \rho] + \frac{1}{2} \sum_{ij} C_{ij} (2A^i \rho A^{\dagger j} - A^i A^{\dagger j} \rho - \rho A^{\dagger j} A^i) \quad (2.78)$$

と変形される。係数はそれぞれ

$$C_{ij} = \frac{1}{T} \int_0^T dt_1 \int_0^T dt_2 e^{i\omega_i t_1} e^{-i\omega_j t_2} \text{Tr}(B_E^i(t_1) B_E^j(t_2))$$

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{T} \int_0^T dt_1 \int_0^T dt_2 \text{sign}(t_1 - t_2) e^{i\omega_i t_1} e^{-i\omega_j t_2} \text{Tr}(B_E^i(t_1) B_E^j(t_2)) \quad (2.79)$$

である。ここで環境系が定常な場合には

$$\text{Tr}(B_E^i(t) B_E^j(t')) = f^{ij}(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathcal{G}^{ij}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} \quad (2.80)$$

となっていることに気づく。ただし、フーリエ変換は環境系の自由度に応じて適宜フーリエ級数などに置き換える必要がある。時間の無限大積分がフーリエ空間でのデルタ関数にすり替わることを考慮する（付録も参照）と、それぞれの係数は

$$C_{ij} = \delta_{ij} \mathcal{G}^{ij}(\omega_i)$$

$$\gamma_{ij} = \delta_{ij} \mathcal{K}^{ij}(\omega_i) = \delta_{ij} \frac{1}{i\pi} \int d\zeta \frac{\mathcal{G}^{ij}(\omega_i)}{\omega_i - \zeta} \quad (2.81)$$

となっている。ただし、ここで \$\delta_{ij}\$ は \$\delta_{\omega_i \omega_j}\$ の略記であり、準位差が一緒であれば \$\{i, j\}\$ が異なるものでも値を返すクロネッカーのデルタである。改めて量子マスター方程式を書き直すと、

$$\dot{\rho} = -i[H + \sum_i \mathcal{K}^{ii}(\omega_i) A^i A^{\dagger i}, \rho] + \frac{1}{2} \sum_i \mathcal{G}(\omega_i) (2A^i \rho A^{\dagger i} - A^i A^{\dagger i} \rho - \rho A^{\dagger i} A^i) \quad (2.82)$$

ハミルトニアンとの交換子のようにかけている部分をハミルトニアン項とよび、そうでない部分は非ユニタリな発展を引き起こすために散逸項と呼ぶ。

実はこのように書かれた量子マスター方程式は Lindblad 型の量子マスター方程式の一種で、非常に良い性質を持っている。以下の節で、この Lindblad 型の量子マスター方程式の性質について紹介する。

2.3.3 Lindblad 型量子マスター方程式

量子マスター方程式が Lindblad 型をしているときには、その完全正値性と正値性が明白になる。

Lindblad 型の量子マスター方程式

一般にマスター方程式が以下の形をしているときに Lindblad 型のマスター方程式であるという。

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum_{ij} C_{ij} (2A^i \rho A^{i\dagger} - A^i A^{i\dagger} \rho - \rho A^{i\dagger} A^i) \quad (2.83)$$

ここで、 A^i は条件

$$\text{Tr}(A_S^{i\dagger} A_S^j) = \delta_{ij} \quad (2.84)$$

を満たす。また、係数 C_{ij} は正値、すなわち

$$\forall x_i \in \mathbb{R}^n, \quad x_i C_{ij} x_j > 0 \quad (2.85)$$

である。

回転波近似の下での量子マスター方程式はこの特別な場合である（すでに C_{ij} が正値な固有値で対角化されている場合）。実は、回転波近似の表式において、 $T \rightarrow \infty$ の極限をとらなくてもこの性質は満たされており（証明は容易である）、これを時間粗視化型の量子マスター方程式という [21][22]。Lindblad 型の量子マスター方程式が非常に興味深いのは、その完全正値性が保証されることである。

Lindblad 型量子マスター方程式の完全正値性

Lindblad 型の量子マスター方程式

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum_{ij} C_{ij} (2A^i \rho A^{i\dagger} - A^i A^{i\dagger} \rho - \rho A^{i\dagger} A^i) \quad (2.86)$$

はその解として Kraus 表現

$$\rho(t) = \sum_i V^i \rho V^{i\dagger}, \quad \sum_i V^i V^{i\dagger} = 1 \quad (2.87)$$

を持ち、完全正値な写像である [18][19]。

係数が時間に依存している場合には Lindblad 型とは言わないが、その場合でも全時間において係数の正値性が言えている場合には完全正値性が担保される形となっている [20]。

Lindblad たち [18][19] がどのようにこの形を導出したかの詳細は参考文献に頼るが、この導出が微視的な量子マスター方程式の導出とは全く関係ない、摂動的な記述によらないという顕著な性質だけは覚えておいてもよいだろう。Lindblad 型の量子マスター方程式の解である Kraus 表現は、その Kraus 演算子 $\{V_i\}$ は時間によっておらず群構造を有しているが、一般に

縮約された力学の Kraus 表現は群構造を持っていないことを注意しておく。

2.4 Markov 性、力学的半群

量子開放系の力学においてしばしばよく用いられる仮定が「Markov 性」である。この性質自体は量子論特有のものでなく、古典的な確率過程にも表れる概念であり、大雑把に言ってしまえば「履歴を引きずらない」効果である。例えば非常に大きな環境系と結合している少数自由度系を考えよう。この二つの系はある時刻で相互作用をし、その結果は少数自由度系に影響を与えると同時に環境系にも影響を与える。この相互作用は時々刻々と起こっていき、「原理的には」全自由度の複雑な発展を引き起こすはずである。しかし、このような時間発展の計算は一概にはむづかしい。しかし、例えば相互作用が弱い場合を考えよう。少数自由度系はこの相互作用によって無視できない効果を受け時間発展するが、環境系は十分に大きいため相互作用はほとんどこの系に影響を与えられず、系の状態はほぼ変化しないと考えてもよいだろう。これは、ある時刻での相互作用が環境系に擾乱を与えず、また過去のいかなる相互作用も現在の環境系の状態、つまり相互作用の形に影響を与えない、という意味で過去の履歴を引きずらない形になっている。もちろん、この過程だけではあまりにも議論が荒すぎであり、実際にはある時刻での相互作用が環境系に与える影響がどれほど速やかに減衰するかも重要な因子となってくるはずである。しかし、このような問題はひとまず無視すると、対象系に対する Markov な時間発展を構築することができる。

量子開放系の議論では Markov 性が十分よく成り立っているであろう物理的に意味のある系も多く、非常に重要な性質として広く認知されている。逆に、Markov 的な時間発展を仮定したときに量子論に現れる種々の性質が逆に量子開放系のダイナミクスを記述するときの指導原理のように扱われることすらある。これが力学的半群と呼ばれる性質であり、それに完全正值性を満たすべき性質として付け足した、「完全正值な力学的半群」の考え方は量子開放系の文脈においてしばしばその姿を見せる。

まずは力学的半群の定義を紹介しよう。

力学的半群の性質

写像 Λ_t が力学的半群であるとは

- 線形性： $\Lambda_t(\rho_1 + \rho_2) = \Lambda_t\rho_1 + \Lambda_t\rho_2$
- 群特性： $\Lambda_s\Lambda_t\rho = \Lambda_{t+s}\rho$
- トレース保存： $\text{Tr}(\Lambda_t\rho) = \text{Tr}(\rho)$
- 正值性： $\forall\rho > 0, \Lambda_t\rho > 0$

の四つの性質を満たすことを言う。

線形性は確率のダイナミクスが満たしているものであるとして、しばしば古典確率論や一般確率論においても仮定される性質である。トレース保存は全確率の保存を表し、正值性は時間発展後の状態も密度行列として解釈可能であることを保証している。群特性が先ほど行った

Markov 性とつながっている性質で、履歴を引きずっていないために写像が始点の情報に依存しないことが、群特性を生じる要因となっている。逆に非 Markov 的な量子マスター方程式は始点の情報を必要とするダイナミクスとなっているために、群特性が破れていることになる。

続いて、これに完全正值性を付け加えた完全正值な力学的半群の概念を説明する。

完全正值な力学的半群

完全正值な力学的半群とは、

- 線形性 : $\Lambda_t(\rho_1 + \rho_2) = \Lambda_t\rho_1 + \Lambda_t\rho_2$
- 群特性 : $\Lambda_s\Lambda_t\rho = \Lambda_{t+s}\rho$
- トレース保存 : $\text{Tr}(\Lambda_t\rho) = \text{Tr}(\rho)$
- 完全正值性 : $\forall n, \forall \rho_{ex} > 0, \text{ s.t. } \rho_{ex} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \otimes M(n), (\Lambda_t \otimes 1_n)\rho_{ex} > 0$

の四つの性質を満たす写像のことを言う [9]。

正值性の代わりに完全正值性はその定義に入っている。完全正值性は正值性を含むから、これは上の力学的半群の特殊な場合となっている。完全正值性は開放系の力学が満たしているべき性質であると考えられているが、微視的な導出においては初期相関が存在していない場合のみ証明される性質であることは再び注意しておく。

微視的な導出をした量子マスター方程式のうち、回転波近似の量子マスター方程式はこのような半群の生成子となっている。また、一般に摂動的な量子マスター方程式と厳密なダイナミクスについて van Hove 極限 ($\lambda \rightarrow 0, \lambda^2 t = \text{finite}$) をとったものは状態の距離の意味で全く等価なものになることが知られている。これはつまり、摂動の弱極限では $\lambda^2 t$ のスケールのダイナミクスをマルコフな量子マスター方程式が十分に記述していることの証左である。

2.5 微分方程式の観点から見た量子マスター方程式

Markov 的な時間発展は非常に良い性質を持ち、またこの類の時間発展で記述される物理的に重要は系が非常に多いことから、それを記述する量子マスター方程式という枠組み自体も (非 Markov の場合すら) 十分に正当化できているものであると思われがちである。しかし、微弱な履歴効果が入っている場合のダイナミクスが非 Markov 的な (λ 有限の) 摂動的量子マスター方程式で記述できていると言われると、これを無思慮に肯ずることはできないといえるだろう。本来ならば系が如何に Markov に近いかということには環境系がどの程度大きいか、相互作用の環境系への影響がどの程度速やかに減衰するかと相互作用の大きさ λ の相対的な議論に基づくものである。 λ を 0 とする極限ではある種これらの相対評価がうまく消えており、その結果 Markov 的な量子マスター方程式はダイナミクスとしてうまい性質を持っていると考えられる。これに対して、van Hove 極限をとらない非 Markov 的なままの量子マスター方程式が相互作用などの詳細に立ち入らずしてうまい近似方程式になっているかどうか議論できないのは当たり前のことであるといえる。であるならば、環境系の大きさなども相対的に評価してしまえばいいではないか、という意見はもちろんあるだろうが、量子マスター方程式を撰

動の二次まで考えるという操作を最初に行ってその後に環境系の大きさなどについて議論するということは、本質的に順序が逆になっていることに気づくべきである。上記の非 Markov 量子マスター方程式の導出では特に注意を払うこともなく「微分方程式」内の λ に関する高次の項を落とした。しかし、以下の例を見てみると、これが素朴にやってはいけないことであることがわかるだろう。

例；以下の微分方程式を考えよう。

$$\frac{d}{dt}x = -\lambda^2 x - \lambda^4 t x \quad (2.88)$$

これは明らかに厳密解

$$x(t) = C e^{-\lambda^2 t - \frac{\lambda^4 t^2}{2}} \quad (2.89)$$

を持つ。ところで、これを単純に λ を小さいとして λ^4 の項を切り捨てることを考える。素朴に見ると、 t がある程度小さければ第一項だけが効いてきて第二項が効かないような、そんな状況が存在し、この操作はそのような時間領域に対してよい近似を与えそうである。切り捨てた結果の方程式は、

$$\frac{d}{dt}x = -\lambda^2 x \quad (2.90)$$

となっていて、この解は

$$x(t) = C e^{-\lambda^2 t} \quad (2.91)$$

であることは一目で分かる。高次の項を切り捨てた結果ガウシアン $e^{-\frac{\lambda^4 t^2}{2}}$ を定数として扱うことになっているわけだが、このように取り扱える領域でなおかつ $e^{-\lambda^2 t}$ が無視できないくらいダイナミカルになる領域は「存在しない」。なぜならば、 $\tau := \lambda^2 t$ とすると元の厳密解は

$$x(t) = C e^{-\tau - \frac{\tau^2}{2}} \quad (2.92)$$

と書け、指数減衰の部分とガウシアンの部分がダイナミカルになる時間スケールが分離していないからである。まとめると、以下の可換図式において上段の切捨ては可能であるが、下段の切捨ては不可能であるということである。

$$\begin{array}{ccc} \frac{d}{dt}x = -\lambda^2 x - \lambda^4 t x & \xrightarrow{\text{truncation}} & \frac{d}{dt}x = -\lambda^2 x \\ \text{integration} \downarrow & & \text{integration} \downarrow \\ x(t) = C e^{-\lambda^2 t - \frac{\lambda^4 t^2}{2}} & \longleftrightarrow & x(t) = C e^{-\lambda^2 t} \end{array} \quad (2.93)$$

これはひどく自明な例であり、そのような項が高次項にあるか確認してから対処すればいいのではないかと思われるかもしれないが、非 Markov 量子マスター方程式においては環境系の詳細によってそれらの出現が起こるか否かが決まるのに、その詳細を吟味することなく落としている。この意味で順序が逆なのである。摂動の二次で切る前にどのような場合に上の簡単な例で見たようなことが起こるかを確認したうえで高次項を落とすかどうか確認しなくてはならないのであるが、このような確認を量子マスター方程式の文脈で行っている文献は寡聞にして知

らない。この操作は無限次数まで行ったうえで $\lambda^2 t$ のスケールのダイナミクスを表す部分をすべて持ってこねばならず、量子マスター方程式の高次項の複雑さを見るにこれがあまり筋のいい方法でないことは容易にわかるであろう。この量子マスター方程式に出てくるような高次項を、微分方程式の一般論としてどう回避するかについては次章にて詳論する。

2.6 議論：完全正值性

先の議論で、完全正值性という概念を導入した。完全正值性は縮約された力学に付随する概念であり、ハミルトニアンや相互作用が弱いという仮定には一切よらないはずの概念である。回転波近似を課したマルコフ的量子マスター方程式は少なくとも環境系が定常な下では Lindblad 型の構造

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum_{ij} C_{ij} (2A^i \rho A^{\dagger i} - A^{\dagger i} A^i \rho - \rho A^{\dagger i} A^i) \quad (2.94)$$

を持っているために自明に完全正值性を満たしており、その意味では性質がいいものとなっている。一方で、TC 型や TCL 型の非マルコフ的量子マスター方程式にたいして、完全正值性が満たされているか、という問いは決して自明ではない。実際に、TC 型の量子マスター方程式

$$\dot{\rho}_S(t) = (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \rho_S(t_1) \otimes \rho_E]] \quad (2.95)$$

に関しては、完全正值性どころか 1 正值性すら保証されないことがある。ここで注意を喚起しておきたいのは、摂動的に解いたものに対してそれが厳密解の持った性質を完全に持っているべき、とするのはいささか強い仮定である、ということだ。実際に、ユニタリ発展を摂動的に解く問題を考えると、密度行列の正值性は摂動のオーダーで破れうるはずである。つまりこの状況でも、その完全正值性が摂動的に満たされているならば問題がないといえる。しかし、上の TC 型の量子マスター方程式や、TCL 型の量子マスター方程式

$$\dot{\tilde{\rho}}_S(t) = (i\lambda)^2 \text{Tr}_E \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{H}_{int}(t), [\tilde{H}_{int}(t_1), \tilde{\rho}_S(t) \otimes \tilde{\rho}_E]] \quad (2.96)$$

が完全正值性を摂動の次数で満たしているか、という問いもあまり自明ではない。むしろ、これらの方程式は小さい時間スケールで単純な摂動論に戻るから、単純な摂動と同じ程度には完全正值性が破れていることが考えられる。しかし、次に気になるのは、この完全正值性の破れが長時間スケールで摂動の次数で抑えられているかという問題である。これは、量子マスター方程式を見ているだけでは議論することがむづかしい。TC 型や TCL 型の方程式は、微分方程式として係数が時間依存していたり積分を含む微積分方程式であったりするので、個々の系に立ち寄らない限り、その解が保っている性質を議論することは難しい。後ほど次々章にて最後にするが、本研究では摂動的非 Markov 量子過程の完全正值性の破れに対する一つの見通しを、一つのモデルを使って与える。

図 (2.6) は本章で語った量子開放系の手法それぞれの関係を荒っぽくまとめたものである。まず縮約された力学という考え方があり、その中でも初期相関がない場合には完全正值性が満

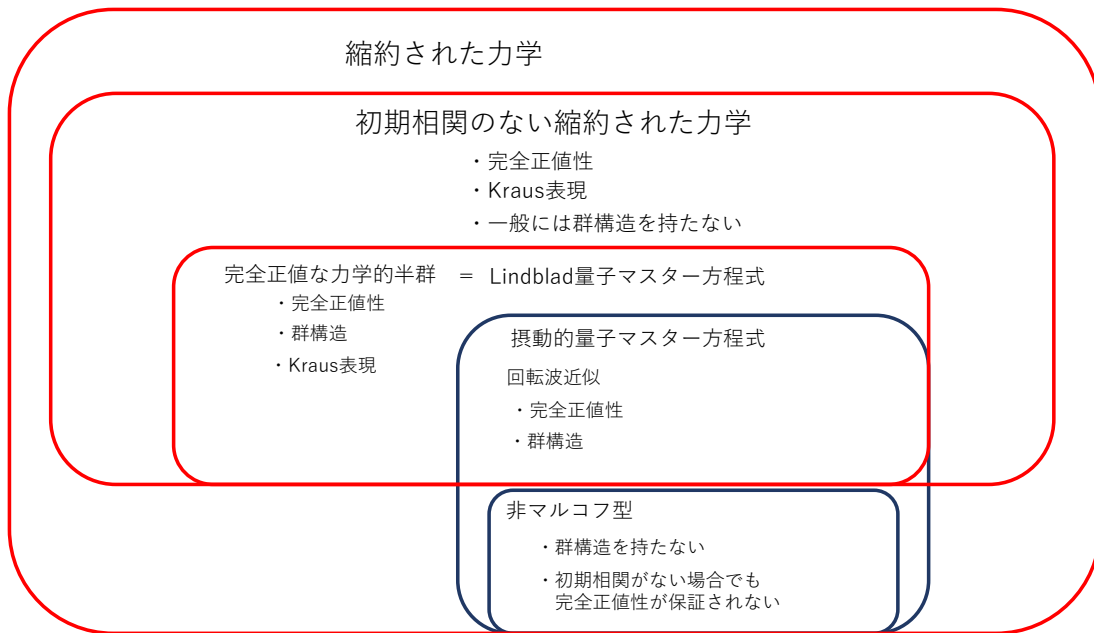


図 2.1 量子開放系の手法の相関図

たされている。これは表現定理として Kraus 表現を持つ。さらにここに群構造を課すことで、完全正值な力学的半群の考え方へと行きつくわけだが、これはさらに強く、Lindblad 型量子マスター方程式として表現できるという性質を持つ。他方、縮約された力学を微視的摂動論の観点から推し進め、我々は種々の量子マスター方程式を得ることができる。この中でもある特殊なタイプの量子マスター方程式は Lindblad 型の構造を有し、完全正值であるという意味で素晴らしい構造を持つ。他方で摂動論の観点からは群構造を有しないようなマスター方程式も得られ、これらの完全正值性については何も言えない。しかし、種々の量子マスター方程式は初期相関のない縮約された力学を近似するものであるから、本来ならば（摂動的には）満たされてほしい性質であり、多くの議論がある。

本章のまとめ

- 量子力学の基礎事項
- 量子開放系の一般論
- 量子マスター方程式の導出
- Markov 性、完全正值性などの諸事項

第3章

特異摂動論のおはなし

-Concordia res parvae crescunt.-

Gaius Sallustius Crispus 『Bellum Iugurthinum』

この章では摂動論の体系的な方法である特異摂動法についてみていく。最初に、単純な解の摂動展開による微分方程式が破綻しうることを永年項の観点から重点的に説明する。その後、永年項を処理する方法として「複スケール解析」を議論する。複スケール解析は繰り込み群の方法への足がかりとなる方法論であり、永年項とその処理について考えるよい練習問題となる。最後に、そこまでの議論で得られた知見を元に本稿で用いる「繰り込み群の方法」を、量子マスター方程式への応用を念頭に置いて説明していく。もし特異摂動理論自体に興味をもたれた方がいるならば、[23][26]などがよい例題を与えてくれるだろう。

3.1 単純摂動論とその破綻、永年項

微分方程式にある小さいパラメータが入り、そのパラメータが0の極限での解が分かっているときには、摂動論という方法を用いることで元の微分方程式の近似解を構築することができる。これを摂動論（摂動法）というが、素朴な意味での摂動論、つまり解の摂動展開は破綻することがある。例えば、微分方程式系

$$\dot{x} = -\lambda x, \quad 0 < \lambda \ll 1 \quad (3.1)$$

を考える。これはもちろん厳密に解くことが可能で、その解は

$$x = Ce^{-\lambda t} \quad (3.2)$$

となる。しかし、この問題について解を $x(t) = x_0 + \lambda x_1(t) + \dots$ と仮定し、摂動的に解くことを考えると、その解は λ の一次までで、

$$x(t) = C(1 - \lambda t) + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (3.3)$$

となっており、 $t \sim \mathcal{O}(1/\lambda)$ の時間領域で破たんしていることがわかるだろう。解の摂動展開は、摂動パラメータで展開したときに各々の部分が $\mathcal{O}(1)$ であることを仮定しているが、 λt の

ような項はこの仮定を破る。このように解を素朴に摂動パラメータで展開すると、その近似の正当性が、長い時間スケールで保証されないということがしばしば起こりうる。これは、ダイナミクスの中に異なる時間スケール（この場合には t 及び λt ）が存在し、共鳴現象を引き起こすことにその原因の一端がある。これを「永年項問題」という。他方で、上の例において厳密解をテイラー展開すると摂動解と各次数で一致することが示せるというのは気づいておくべきである。

一般に解の摂動展開という単純な摂動論の方法が破たんする大きな理由には、この永年項問題と、もう一つ「構造的破綻」という問題がありうる [23]。これについて詳しく説明することは怠るが、簡単に言ってしまうと、微分方程式の最高次に摂動パラメータがついている場合、解の摂動展開の意味での 0 次解は一つ次数の下がった微分方程式の解になってしまうため、単純に厳密解において摂動パラメータを 0 にした極限とは構造的に違う解になってしまう、というものである。

3.2 特異摂動論の例題

特異摂動論とは、スケールの違いに起因して起こる共鳴効果による永年項、あるいは微分方程式の構造自体が摂動パラメータによって変化する構造的破綻を処理する方法論であるが、そのやり方にはいくつかの方法がある。ここでは、その方法のうち、複スケール解析について紹介し、特異摂動という行為が何を行っているのかを例題を通して解説していきたい。以下の説明は文献 [23] に基づいているので、より詳細な議論が見たい場合はそちらを見ることをお勧めする。

3.2.1 複スケール解析

複スケール解析はおよそ繰り込み群の方法の前身であるといつてよい。微分方程式、

$$\ddot{x} + x = -\epsilon \dot{x}, \quad \epsilon \ll 1. \quad (3.4)$$

を考えてみよう。この方程式の厳密解はよく知られており、

$$x(t, \tau; A, \theta) = A \exp(-\epsilon(t - \tau)/2) \sin(\sqrt{1 - (\epsilon/2)^2}(t) + \theta) \quad (3.5)$$

である。ここで τ は微分方程式の初期時刻であり、 A と θ はそれぞれ積分定数。この方程式は簡単にわかるように減衰振動を記述する微分方程式となっている。しかし、これをもし ϵ のオーダーで摂動的に解くとすると、 τ を初期時刻として、

$$\begin{aligned} x_{\text{naive}}(t, \tau; A, \theta) &= A \sin(t + \theta) + \frac{\epsilon}{2}(t - \tau)A \sin(t - \theta) \\ &\quad + \frac{\epsilon^2 A}{8}((t - \tau)^2 \sin(t + \theta) - (t - \tau) \cos(t + \theta)) + \mathcal{O}(\epsilon^3), \end{aligned} \quad (3.6)$$

であり、明らかに減衰振動とは振る舞いが異なることがわかる。上で議論したように、これはもちろん厳密解を ϵ について摂動展開したものではあるのだが、形式的な ϵ での摂動展開で

は、 ϵt のような項の展開が $t \sim \mathcal{O}(1/\epsilon)$ で破たんするために、単純な意味での摂動が長時間ではうまく機能しないという事態に陥る。その結果として、 t の一次のべきに比例するような部分が登場する。一般に t のべきに比例するような項が出てきた場合には (n 次の) 永年項と呼ぶが、特に重要なのは一次の永年項なので、以下単純に永年項と言ったら一次の永年項を指すこととしよう。

さて、ここでこの問題を「複スケール解析」によって近似的に解く事を目指す。複スケール解析では、先ず時間 t に加えてそれよりさらに長い時間スケール

$$t, \quad t_1 = \epsilon t, \quad t_2 = \epsilon^2 t, \dots \quad (3.7)$$

を導入し、それぞれを独立変数として扱う。このとき、もとの時間 t での微分をそれぞれの時間スケールでの偏微分によって、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial t_1}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial t_2}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots = \frac{\partial}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots \\ \frac{d^2}{dt^2} &\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2\epsilon \frac{\partial^2}{\partial t \partial t_1} + \epsilon \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial t \partial t_2} \right) + \dots \end{aligned} \quad (3.8)$$

と書くことが出来る。もともとの微分方程式 (3.4) にこの展開、および解の摂動展開 $x(t) = x_0 + \epsilon x_1 + \epsilon^2 x_2 + \dots$ を用いて ϵ の各幂で項を比較すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 x_0}{\partial t^2} + x_0 &= 0 \\ \frac{\partial^2 x_1}{\partial t^2} + x_1 &= - \left(\frac{\partial^2 x_0}{\partial t \partial t_1} + \frac{\partial x_0}{\partial t} \right) \\ \frac{\partial^2 x_2}{\partial t^2} + x_2 &= - \left(\frac{\partial^2 x_1}{\partial t \partial t_1} + \left(\frac{\partial x_0}{\partial t_1} + \frac{\partial x_1}{\partial t} \right) \right) - \left(\frac{\partial^2 x_0}{\partial t_1^2} + 2 \frac{\partial^2 x_0}{\partial t \partial t_2} \right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

という微分方程式たちを得る。

先ず、0 次の方程式は解

$$x_0 = A(t_1, t_2, \dots) e^{it} + B(t_1, t_2, \dots) e^{-it} \quad (3.10)$$

を持っている。A および B は (偏微分方程式なので) t_1 以降の長い時間スケールの依存性を持っていてもいいことに注意。これを 1 次の微分方程式に代入することで、

$$\frac{\partial^2 x_1}{\partial t^2} + x_1 = -i \left(\frac{\partial A}{\partial t_1} + A \right) e^{it} + i \left(\frac{\partial B}{\partial t_1} + B \right) e^{-it} \quad (3.11)$$

という微分方程式を得るわけだが、これは右辺が外力項と思うと、左辺の固有振動数と共鳴する強制振動の形となっていて、幂で増大する解 (= 永年項) の原因となってしまう。そこで、いささかとってつけたようではあるが「永年項は存在してはならない」という条件の下、A および B を決めてしまう。すなわち、

$$\frac{\partial A}{\partial t_1} + A = 0, \quad \frac{\partial B}{\partial t_1} + B = 0 \quad (3.12)$$

を課す。この結果、 A と B は

$$A = A_0(t_2, \dots)e^{-t_1}, \quad B = B_0(t_2, \dots)e^{-t_1} \quad (3.13)$$

という風になる。すると、1 次の式の右辺は 0 となり、

$$x_1 = C(t_1, t_2, \dots)e^{it} + D(t_1, t_2, \dots)e^{-it} \quad (3.14)$$

を得る。これをさらに二次に代入し、同じ操作をやっていき、逐次「永年項が存在しないこと」を指導原理としてやることで、

$$x = A(t_3, \dots) \exp(-i\frac{1}{8}t_2 - t_1 + it) + B(t_3, \dots) \exp(+i\frac{1}{8}t_2 - t_1 - it) \quad (3.15)$$

という近似解を得ることが出来る。ここで、 x_0 や x_1 が同じ振る舞いとしていることを使って変数の再定義などを適宜いききれいな形にまとめなおしている。この式は元の時間 t のみで表すと、

$$x = A(\epsilon^3 t, \dots) \exp(-i\frac{1}{8}\epsilon^2 t - \epsilon t + it) + B(\epsilon^3 t, \dots) \exp(+i\frac{1}{8}\epsilon^2 t - \epsilon t - it) \quad (3.16)$$

と書けるが、これは厳密解の減衰部分を取り入れ、振動数部分の係数の 2 次までのテイラー展開を評価している式となっている。永年項はその定義上消えているため、長時間スケールで厳密解を近似していることが見て取れるであろう。

複スケール解析の手法は非常に広範の微分方程式に用いられる強力な手法であり、ダフィン方程式をはじめ、力学系の理論でしばしば登場する。しかし、その方法論として多くの時間スケールが混在することを表している点は直感的であるが、その後の操作「永年項を消去する」という点はどうしてもその場しのぎな要求である感が否めない。永年項がなくなれ、ということとはナイーブにはあってほしい性質のようではあるが、それが大域的な近似解を作る、ということと直接つながるのかということ非常にあいまいである。摂動解において永年項を消去するということの物理的（あるいは直感的）な意味が理解できるようになるには、どうしても「繰り込み群の方法」の登場およびその包絡線方程式としての解釈を待たねばならない。実際、改めて繰り込み群の方法で以上の微分方程式の摂動計算を行うことで、この方法の意味が直感的な意味で了解できると同時に、より広範の微分方程式に用いることが可能となる。

3.3 繰り込み群の方法

副スケール解析を用いた特異摂動的な手法について説明してきたが、これを含む多くの特異摂動論の考え方をほとんど包含し、およそ特異摂動問題のすべての状況で用いることができるのが以下で説明する「繰り込み群の方法」だ。先行研究 [27] によりこの繰り込み群方程式と幾何学的概念である包絡線方程式の関連が指摘され、繰り込み群方程式の物理的な意味がより分かりやすくなった。さらに、[30] によって数学的な厳密化がなされ、ある限られたクラスの方程式については繰り込み群の方法により構築した解が厳密な解を摂動の次数で長時間近似しているということも明らかにされた。また、この繰り込み群の手法はいわばこれまで ad hoc に与

えられていた「遅い変数を取り出す」方法であることが明らかにされ、実際これを応用した研究がある [28][29]。繰り込み群の方法自体は先述した構造的破綻の問題に対しても適応可能なアプローチであるのだが、ここでは永年項問題に対する処理に焦点を当ててその方法論を紹介する。

再び、簡単な微分方程式である

$$\ddot{x} + x = -\epsilon \dot{x}, \quad \epsilon \ll 1 \quad (3.17)$$

を考えてみよう。先述したとおり、その厳密解は

$$x(t, \tau; A, \theta) = A \exp(-\epsilon(t - \tau)/2) \sin(\sqrt{1 - (\epsilon/2)^2}(t) + \theta) \quad (3.18)$$

となっている。複スケール解析のところで述べたように、これを単純摂動で解こうとすると永年項が生じ、長時間スケールでの近時が著しく悪くなってしまふ。

永年項が発生するという問題を避けつつ上に与えられた微分方程式を解くために、今回は「繰り込み群の方法」を用いよう。単純摂動解内の任意定数 A と θ を初期時刻 τ の関数として動変数に格上げし、以下の「繰り込み群方程式」を単純摂動解に課す。

$$\left. \frac{dx_{\text{naive}}(t, \tau; A(\tau), \theta(\tau))}{d\tau} \right|_{t=\tau} = 0, \quad (3.19)$$

これは形としては τ をパラメータとした包絡線方程式になっている。この直観的な意味については図 (3.1) を見てほしい。今我々が手にしている単純摂動解は、 $t \sim \mathcal{O}(1/\epsilon)$ で明らかに破たんしている。しかし、それより小さいスケールではおよそ良い近似となっているであろう。そこで、最初の τ から $\mathcal{O}(1/\epsilon)$ 進む前に、適当なところで $\tau_1 (> \tau)$ を初期時刻とするような摂動解に「乗り換える」。この操作を時々刻々行って厳密解を近似しようという操作が、図に表した操作である。また、これはパラメータを τ として、単純摂動解のそのパラメータに対する包絡線を構築する操作に他ならない。そこで以上のような方程式が登場し、初期条件 $A(\tau)$ 、 $\theta(\tau)$ を、上の解が包絡線上に常に乗っているように構築しなさいという要請を行うのである。その結果、我々は $(A(\tau), \theta(\tau))$ について方程式

$$\frac{dA}{dt} = -\epsilon A/2, \quad \frac{d\theta}{dt} = -\epsilon^2/8. \quad (3.20)$$

を得る。ここで、 $\mathcal{O}(\epsilon^3)$ の項は無視していることに注意されたし。これらの方程式はたやすく解くことができ、

$$A(t) = \bar{A} \exp(-\epsilon t/2), \quad \theta(t) = -\frac{\epsilon}{8}t + \bar{\theta}, \quad (3.21)$$

という解を持つ。 \bar{A} 、 $\bar{\theta}$ は上の微分方程式の積分定数である。得られた τ の動変関数 $(A(\tau), \theta(\tau))$ を使うと、包絡線の具体的な形は

$$x(t, t; A(t), \theta(t)) = A(t) \sin(\theta(t)) = \bar{A} \exp(-\epsilon t/2) \sin\left(\left(1 - \frac{\epsilon^2}{8}\right)t + \bar{\theta}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (3.22)$$

となっていて、これが直観的には改良された解になっているであろうと思われる。複スケール解析と同じように厳密解を単純な摂動より長時間スケールで近似する解を与えてくれていることが見て取れる。

繰り込み群の方法では、時間スケールを複数導入することなく複スケール解析と同じ結果が得られたことに気づく。アприオリに複数の時間スケールを与えることなく繰り込み群方程式の帰結としてそのスケールが自然に導入される点は、複スケール解析よりありがたい性質である。

3.3.1 より一般的な場合

より一般的な微分方程式系に対して、永年項が発生しうる場合の対処を考えよう。次のような連立微分方程式系を考える。

$$\dot{x} = Fx + \epsilon G(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (3.23)$$

ここで、 F は無摂動発展を記述する部分で、線形であるとしよう。さらに対角化可能で、その固有値は複素平面の左半分に住んでいるとする。つまり、実部は全て負である。また、 G はあらわに時間に依存しておらず、しかも F と同様に線形であるとする（非線形な場合、 t に依存している場合への拡張は可能である）。これは連立一階微分方程式ではあるが、二階以上の微分方程式も変数を追加することで一般に連立一階微分方程式系に変換できることはコメントしておく。この方程式系を摂動的に解く。解の形 $x = x_0 + \lambda x_1 + \lambda^2 x_2 + \dots$ を仮定して、微分方程式に代入したのちに ϵ の次数でこれを整理すると、方程式系

$$\begin{aligned} \dot{x}_0 &= Fx_0 \\ \dot{x}_1 &= Fx_1 + G(x_0) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ \dot{x}_i &= Fx_i + G(x_{i-1}) \\ &\cdot \\ &\cdot \end{aligned} \quad (3.24)$$

を得る。順次これらを解いていくわけだが、簡単のため ϵ の一次までを考えよう。無摂動部分の解は初期値を y として $x^{(0)}(t) = e^{Ft}y$ と与えられる。ひとたびこの解が与えられると一次までの摂動解を構築することができ、

$$x(t, \tau; y) = e^{Ft}y + e^{Ft} \left(\int_{\tau}^t ds (\epsilon e^{-Fs} G e^{Fs} y) + C_1 \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.25)$$

のようになる。右辺第二項は時間積分を含んでおり、もし被積分関数の中に定数項がある場合には時間に対して一次で増大する項があることがわかる。この項の存在は、 et なる項の現れ方を許し、結果 $t \sim \mathcal{O}(1/\epsilon)$ のあたりで摂動論が破たんする可能性があることを示している。そ

ここで、ひとまずこの増大部分を摂動解からとりだすことを考える。

$$p_1^{(1)}(y) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T ds (\epsilon e^{-Fs} G e^{Fs} y). \quad (3.26)$$

のように定義すれば、この項が t の一次で増大する部分のみを取り出せることは容易に了解できるであろう。この部分を取り出し、改めて摂動解を書き直すと、

$$x(t, \tau; y) = p_1^{(0)}(t, y) + e^{Ft} p_1^{(1)}(y)(t - \tau) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.27)$$

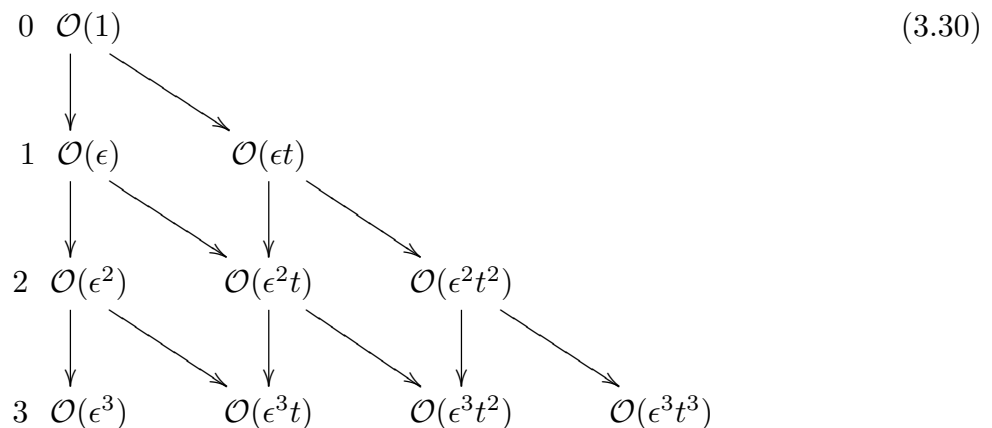
と、増大部分 $p_1^{(1)}(y)$ (ただし増大の振る舞いは係数 $(t - \tau)$ によってあらわされているのでこれ自体は有界) 及び

$$p_1^{(0)}(t, y) = e^{Ft} y + e^{Ft} \left(\int_{\tau}^t ds (\epsilon e^{-Fs} G e^{Fs} y - p_1^{(1)}(y)) \right). \quad (3.28)$$

という部分に分けることができる。 $p_1^{(0)}(t, y)$ は ϵ の一次までの項を含むが、すでに時間に対して一次で増大する項を含んでおらず、有界である。また、ここで C_1 の任意性を $p_1^{(0)}(t, y)$ 内の積分の下端に押し込めた。実際上ではここには”本当の”初期時刻を入れればよい。後ほどわかるように、繰り込み群の方法では τ は仮想的な初期時刻となってその本来の意味を失う。同様のやり方で、 $\mathcal{O}(\epsilon^n)$ までの摂動解を

$$x(t, \tau; y(\tau)) = e^{Ft} p_n^{(0)}(t, y) + e^{Ft} p_n^{(1)}(t, y)(t - \tau) + e^{Ft} p_n^{(2)}(t, y)(t - \tau)^2 + \dots + e^{Ft} p_n^{(i)}(t, y)(t - \tau)^i + \dots + e^{Ft} p_n^{(n)}(t, y)(t - \tau)^n + \mathcal{O}(\epsilon^{n+1}), \quad (3.29)$$

とまとめなおすことができる。ここで、 $p_n^{(i)}(t, y)$ はそれぞれ有界な項であって、下の添え字 n はその部分が ϵ について n 次の項まで含んでいることを表し、上の添え字 i はその項が t について何次の増大を示すか、つまり何次の永年項であるかを表している。一般に ϵ について n 次の摂動解は n 回の積分を操作として含むため、 n 次までの永年項を含みうる。以下の図式は永年項の発生の仕方を考える助けになるであろう。



斜めの矢印が永年項が生じていく様を表しており、ラフに言ってしまうと一つ低い次数での定数部分を高次の微分方程式で積分する際に永年項が表れる仕組みとなっている。この構造上、摂動パラメータについて n 次の摂動解を考えるときには、永年項 t^i のべき i は n までしか生じず、さらにその発生源は $(n - 1)$ 次の t^{i-1} の構造を持つ項であることがわかる。

このように生じた永年項を処理するために、初期値 y を初期時刻 τ の関数に「格上げ」し、そうした結果異なる時刻を初期時刻とする摂動解がその摂動の次数までである（接続できる）ことを要求する。

$$x(t, \tau; y(\tau)) = x(t, \mu; y(\mu)) + \mathcal{O}(\epsilon^{n+1}). \quad (3.31)$$

さらに、このままでは取り扱いづらいので、微分方程式の形に直す。

$$\left. \frac{dx(t, \tau; y(\tau))}{d\tau} \right|_{t=\tau} = 0. \quad (3.32)$$

これは繰り込み群方程式といわれる。 $t = \tau$ としたのは、 t が十分に τ と離れたような部分の情報をもとに接続しても、そこでは両方の単純摂動の解が破たんしている可能性があり、あまり意味がないからである。上の繰り込み群方程式は、 $x(t, \tau; y(\tau))$ が異なる時刻を初期時刻とした場合でも考慮している摂動の次数まで一致するための、 $y(\tau)$ の τ に対する関数系を決定する方程式となっている。永年項をまとめ上げた表式を用いることで、繰り込み群方程式が $\mathcal{O}(\epsilon^n)$ までの方程式として

$$\frac{dy}{dt} = p_n^{(1)}(t, y(t)) \quad (3.33)$$

が得られる。その定義上、二次以上の永年項は繰り込み群方程式に入ってこず、情報が落ちていのように見えるが、先述の図式にある通りに次以上の永年項は一次の永年項の積分に由来しているので、一次の永年項を消去すれば芋づる式に高次の永年項も処理できるであろうことは、直観的に感得できる。

この解 $y_{sol}(\tau)$ を用いると、大域的にもっともらしい解は

$$x^{RG}(t) = x(t, t; y_{sol}(t)) = e^{Ft} p_n^{(0)}(t, y_{sol}(t)) \quad (3.34)$$

と書くことができる。初期条件の任意性は $y_{sol}(\tau)$ と繰り込み群方程式の解として用意してくる部分に入っている。永年項が消え、有界な部分だけが残っていることがあらわに見て取れる。

上でもこの処方と包絡線概念の類似性について触れていたが、ここで再度議論しておくべきだろう [27]。ある1パラメータ τ でパラメトライズされる曲線群 $y = y(t; \tau, C(\tau))$ を考える。この曲線群の包絡線は、包絡線方程式

$$\frac{dy(t; \tau, C(\tau))}{d\tau} = 0 \quad (3.35)$$

を解く事で求めることが出来る。関数 $C(\tau)$ が未知で、この曲線群が包絡線を持つか分からないときには、 $\tau = \tau(t)$ を他の条件から決めることにより、包絡線方程式は曲線群が包絡線を持つような $C(\tau)$ の関数形を決定する方程式となる。たとえば、 $t = \tau$ であれと課すことにより、

$$\left. \frac{dy(t; \tau, C(\tau))}{d\tau} \right|_{t=\tau} = \frac{\partial y(t; \tau, C(\tau))}{\partial \tau} \Big|_{t=\tau} + \frac{\partial y(t; \tau, C(\tau))}{\partial C} \frac{dC}{d\tau} \Big|_{t=\tau} = 0 \quad (3.36)$$

となる。ここに繰り込み群方程式との類似を見て取ることが出来るだろう。 $t = \tau$ であれと課したのは、パラメータが初期値となっていることから来る要請で、各摂動解が局所的に厳密解

を近似している、という要請と対応している。この方程式を解いて得られた $C(\tau)$ を用いることで、曲線群の方絡線方程式は $y(t; t, C(t))$ と書くことが出来る。この包絡線が繰り込み解と対応している。

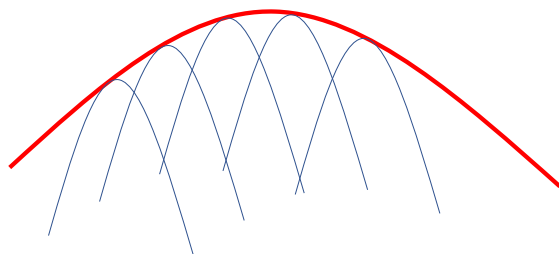


図 3.1 包絡線方程式としての繰り込み群方程式

3.4 中心多様体と力学自由度の縮約

特異摂動論が適応できる方程式系を議論するとき、しばしばその解の全時間スケールのふるまいではなく、漸近的なふるまいのみが注目されることがしばしばある。ラフに言ってしまうと、これは弱いと仮定されていた摂動が解に大きな影響を与えるスケールでの振る舞いのことである。例えば先述の例で、無摂動系の解 $e^{Ft}y$ について考える。 F を $n \times n$ の行列として、この固有値のうち m 個が負の実部を持つとする。さらに、残りの部分についても正の実部を持つような固有値はないとおこう。摂動論では無摂動部分の発展は摂動が有効になるよりも十分速いスケールで起こると仮定されているから、 $t \rightarrow \infty$ かつ $e^i t$ (i は問題としている方程式によって変わる) が有限であるようなスケールにおいて $e^{Ft}y$ は $n - m$ 個の自由度のみが残り、 m 個の成分は十分 0 に近づいてしまう。これを $y_m \in \mathbb{R}^m$ とおこう。このとき、繰り込み群方程式

$$\left. \frac{dx(t, \tau; y(\tau))}{d\tau} \right|_{t=\tau} = 0. \quad (3.37)$$

の初期値として y_m を仮定すると、自動的に繰り込み群方程式が解 $y(\tau)$ を \mathbb{R}^m 上に制限することを示すことが出来る [30]。繰り込み解 (3.34) の動的自由度はすべて繰り込み群方程式の解の動的自由度によって支配されているので、この制限によって繰り込み解の動的自由度が縮減される。このような自由度の縮約現象は「中心多様体縮約」といい、特異摂動論、主として力学系の理論において重用される概念である [34]。さらにこの概念は繰り込み解の解析を容易にするのみならず、解の安定性や厳密解を大域的に近似することの保証などにも用いられる [30]。

この漸近振る舞いに対する自由度の縮約に対して、量子力学の場合も類似の現象がおきる。これが初期無相関の仮定と深く関連することを、次の節、この研究の本論で示すこととする。量子力学の場合にはユニタリ発展に減衰のような項が存在しないので類似性があるに過ぎないのだが、それでもなお繰り込み群方程式が自由度の縮約を引き起こすことを見て取ることが出来る。次節、および付録にて確認出来るであろう。

本章のまとめ

- 単純摂動理論は長時間で破綻しうる
- 永年項を処理する方法としての抱絡線方程式
- 中心多様体の概念

第 4 章

量子開放系再訪

4.1 量子摂動計算における「永年項」

量子力学における摂動計算を考えよう。対象系（その時間発展を解くことを目的とする系）と環境系の二つの系からなる複合系を考え、その時間発展は以下のハミルトニアンによって支配されているとする。

$$H_{\text{tot}} = H_S + H_E + \lambda V = H_0 + \lambda V, \quad \lambda \ll 1, \quad (4.1)$$

ここで、 H_S は対象系の、 H_E は環境系のハミルトニアンであり、 V は二つの系の相互作用うハミルトニアンである。相互作用の大きさは λ というパラメータによって、その強さが表され、今は、 $\lambda \ll 1$ であるとする。以下の議論を正当化するために、対象系の Hilbert 空間の次元は有限であるとする。このハミルトニアンによるダイナミクスを単純な解の摂動展開の方法に基づいて解いてみよう。複合系の時間発展は上のハミルトニアンによる von Neumann 方程式

$$\frac{d}{dt}\rho_{\text{tot}} = (\mathcal{L}_0 + \lambda\mathcal{L}_V)\rho_{\text{tot}} := -i[H_0 + \lambda V, \rho_{\text{tot}}],$$

によって記述される。 \mathcal{L}_0 、 \mathcal{L}_V はそれぞれ交換子 $-i[H_0, \cdot]$ 、 $-i[V, \cdot]$ を略記したものである。以下では都度都合のいい記法を用いる。ここで、任意の演算子 A に対して相互作用表示

$$\tilde{A}(t) = e^{-iH_0 t} A e^{iH_0 t}$$

を導入する。これにより、von Neumann 方程式は

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{\text{tot}} = -i[\lambda\tilde{V}(t), \tilde{\rho}_{\text{tot}}(t)] \quad (4.2)$$

のように書き換えられる。これを、解の摂動展開 $\tilde{\rho}_{\text{tot}}(t) = \tilde{\rho}_{\text{tot}}^0(t) + \lambda\tilde{\rho}_{\text{tot}}^1(t) + \lambda^2\tilde{\rho}_{\text{tot}}^2(t) + \dots$ によって、各次数での方程式

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{\text{tot}}^0 &= 0 \\ \frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{\text{tot}}^1 &= -i[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}_{\text{tot}}^0(t)] \\ \frac{d}{dt}\tilde{\rho}_{\text{tot}}^2 &= -i[\tilde{V}(t), \tilde{\rho}_{\text{tot}}^1(t)] \end{aligned} \quad (4.3)$$

に分解し、低次のほうから順に解いてやる。各次数は「未知関数の時間微分＝既知関数」という非常に単純な形をしているので、これを解くことに何も難しい操作は必要なく、各次数の解

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{\text{tot}}^0(t, \tau) &= \tilde{\rho}_{\text{tot}}(\tau) \\ \tilde{\rho}_{\text{tot}}^1(t, \tau) &= -i \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_{\text{tot}}(\tau)] + C_1 \\ \tilde{\rho}_{\text{tot}}^2(t, \tau) &= - \int_{\tau}^t dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 [\tilde{V}(t_1), [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_{\text{tot}}^0(\tau)]] - i \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{V}(t_1), C_1] + C_2\end{aligned}\quad (4.4)$$

を得る。ここで初期時刻を τ とした。 C_i はそれぞれ積分したときの任意定数である。ただし、密度演算子の積分を議論しているのが当然演算子の形をしている。以下区別を要する状況はないので、演算子の形をしていても任意定数と呼称することにする。改めて、二次までの単純摂動解をまとめると、

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{\text{tot}}(t, \tau; \rho_{\text{tot}}(\tau)) &= \rho_{\text{tot}}(\tau) - i\lambda \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_{\text{tot}}(\tau)] - i\lambda \int_{\tau}^t dt_1 [\tilde{V}(t_1), C_1] \\ &\quad - \lambda^2 \int_{\tau}^t dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 [\tilde{V}(t_1), [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_{\text{tot}}(\tau)]] + C_2 \\ &\quad + \mathcal{O}(\lambda^3),\end{aligned}\quad (4.5)$$

となる。ただし、ここで任意定数の定義を変更してまとめなおしたことに注意しておく。通常、単純摂動解を議論するときには0次の初期値の自由度にすべての任意定数の自由度をまとめてしまうのが常だが、後ほど議論する繰り込み群の方法ではこの自由度たちをどのように取り扱うかが肝要となるので、それを明示して残しておく。

ここで、この単純摂動解が永年項を発生しうることを見るために、しばしば用いられるモデルである

$$H_{\text{tot}} = \Delta\sigma_+\sigma_- + \int d\omega\omega a_{\omega}^{\dagger}a_{\omega} + \lambda \int_0^{\infty} (\sigma_+g_{\omega}a_{\omega} + \sigma_-g_{\omega}^*a_{\omega}^{\dagger}),\quad (4.6)$$

を摂動的に計算してみよう。物理的な状況設定としては、二準位系が boson 場と結合しているモデルとなっている。 σ_{\pm} は二準位系の昇降演算子である。 a_{ω}^{\dagger} 及び a_{ω} はそれぞれ周波数 ω に対応するボソン場の生成消滅演算子であり、交換関係 $[a_{\omega}, a_{\omega'}^{\dagger}] = i\Delta(\omega - \omega')$ を満たしている。 g_{ω} は二準位系がそれぞれの周波数とどのように結合しているかを表しているが、ひとまずその詳細には立ち寄らない。 σ_{\pm} 、 a_{ω} 及び a_{ω}^{\dagger} に対して、それぞれの相互作用表示は

$$\tilde{\sigma}_{\pm}(t) = e^{\pm i\Delta t}\sigma_{\pm}, \quad \tilde{a}_{\omega}(t) = e^{-i\omega t}a_{\omega}, \quad \tilde{a}_{\omega}^{\dagger}(t) = e^{i\omega t}a_{\omega}^{\dagger}\quad (4.7)$$

となっている。初期状態を無相関純粋状態 $\rho_{\text{tot}}(0) = |\psi\rangle \otimes |0\rangle$ として摂動解を構築しよう。 $|\psi\rangle$ は対象系の任意の状態、 $|0\rangle$ は環境系の真空状態 ($a_{\omega}|0\rangle = 0$) を満たす状態である。ここで、簡単のため初期時刻を $t = 0$ として、通常摂動的な取り扱いでしばしば行われるように0次

以外の部分から出てくる任意定数をすべて 0 とおいた。二次までの摂動解は

$$\begin{aligned}
\rho_{\text{tot}}^0 &= |\psi\rangle\langle\psi| \otimes |0\rangle\langle 0| \\
\rho_{\text{tot}}^1 &= -i \int_0^\infty d\omega g_\omega e^{i(\omega-\Delta)t/2} \frac{\sin[(\omega-\Delta)t/2]}{\omega-\Delta} (\sigma_- |\psi\rangle\langle\psi| \otimes |1_\omega\rangle\langle 0|) \\
&\quad + i \int_0^\infty d\omega g_\omega e^{-i(\omega-\Delta)t/2} \frac{\sin[(\omega-\Delta)t/2]}{\omega-\Delta} (|\psi\rangle\langle\psi| \sigma_+ \otimes |0\rangle\langle 1_\omega|) \\
\rho_{\text{tot}}^2 &= - \int_0^\infty d\omega g_\omega^2 \frac{\sin^2[(\omega-\Delta)t/2]}{(\omega-\Delta)^2} (\sigma_+ \sigma_- |\psi\rangle\langle\psi| \otimes |0\rangle\langle 0|) \\
&\quad - \int_0^\infty d\omega g_\omega^2 \frac{\sin^2[(\omega-\Delta)t/2]}{(\omega-\Delta)^2} (|\psi\rangle\langle\psi| \sigma_- \sigma_+ \otimes |0\rangle\langle 0|) \\
&\quad + \int_0^\infty d\omega d\omega' g_\omega g_{\omega'} e^{i(\omega'-\omega)t/2} \frac{\sin[(\omega-\Delta)t/2] \sin[(\omega'-\Delta)t/2]}{(\omega-\Delta)(\omega'-\Delta)} (\sigma_- |\psi\rangle\langle\psi| \sigma_+ \otimes |1_\omega\rangle\langle 1_{\omega'}|) \\
&\quad + \int_0^\infty d\omega d\omega' g_\omega g_{\omega'} e^{i(\omega-\omega')t/2} \frac{\sin[(\omega-\Delta)t/2] \sin[(\omega'-\Delta)t/2]}{(\omega-\Delta)(\omega'-\Delta)} (\sigma_- |\psi\rangle\langle\psi| \sigma_+ \otimes |1_{\omega'}\rangle\langle 1_\omega|) \\
&\quad + (\text{anti symmetric parts with respect to time})
\end{aligned} \tag{4.8}$$

と書ける。二次の部分については時間 t_1 、 t_2 に対して対称な部分のみを明示的に書いた。反対称な部分の計算には Lamb shift というモデルに依存する別の問題が関わってくるため詳論はしないが、形式的な計算は問題なく実行することが出来る。これに関しては付録を参照されたい。以下では反対称部分は無視してしまおう。また、状態 $|1_\omega\rangle$ の積分という、測度論と関わりそうかなり怪しい問題が出てきているが、ここではそのような難しい話はあまり細かく定式化しないこととする。

上の表式でも永年項の議論をすることは可能なのであるが、話を簡単にしつつ以降の量子開放系の議論とつなげるために、環境系についてトレースを取る。この結果、二次までの摂動解を縮約したものは、

$$\begin{aligned}
\rho_S^0 &= |\psi\rangle\langle\psi| \\
\rho_S^1 &= 0 \\
\rho_S^2 &= - \int_0^\infty d\omega g_\omega^2 \frac{\sin^2[(\omega-\Delta)t/2]}{(\omega-\Delta)^2} (\sigma_+ \sigma_- |\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\psi| \sigma_- \sigma_+) \\
&\quad + \int_0^\infty d\omega g_\omega^2 \frac{\sin^2[(\omega-\Delta)t/2]}{(\omega-\Delta)^2} (\sigma_- |\psi\rangle\langle\psi| \sigma_+ + \sigma_- |\psi\rangle\langle\psi| \sigma_+)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

となる。さて、ここで

$$\frac{\sin^2[(\omega-\Delta)t/2]}{t(\omega-\Delta)^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 2\pi\delta(\omega-\Delta) \tag{4.10}$$

であることを考えると、二次摂動の部分の係数が、

$$\int_0^\infty d\omega g_\omega^2 \frac{\sin^2[(\omega-\Delta)t/2]}{(\omega-\Delta)^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 2\pi t g_\Delta^2 \tag{4.11}$$

という振る舞いをして、 t の一次のべきで増大していくことが分かる。これがこの系の場合の永年項となっている。ただし、上の計算は極限の操作として正しくない。あくまで永年項の発生を直感的に見るための説明に過ぎないことは釈明しておく（本来は上のように書かれた項の中に有界にとどまる項もある）。実際には、前節で行ったような永年項の取り出し方をすればよいが、これは読者への練習問題として残しておく。通常、この系に対する処理としては、量子力学の王道的方法では Fermi の黄金律が用いられる。これは、単位時間当たりの遷移振幅の平均を計算するという上で上の表式を t で割ることで有限の値を出す方法である。無論この処理自体に問題はないが、この方法は系のダイナミクスを計算する、ということをしているわけではない。このような問題でダイナミクスを計算するにはどうすればいいのか？というのが、以下の内容であり「繰り込み群の方法」と密接に関係している。

4.2 von Neumann 方程式の解の有界性

前節では、時間のべきで発散することを以て永年項が発生していると呼んでいたが、厳密解にそもそもべきで増大する構造があればこれは（厳密解の近似を阻むという意味での）永年項とは言えないだろう。von Neumann 方程式の解が持つ有界性、べきで増大する部分が存在しないことを示さなければ、上で説明した永年項が近似解の構築に悪さをしているかどうかということは厳密にはわかったことにはならない。これは特異摂動問題を議論するときには最初の問題として考えなくてはならないことである。先に挙げた繰り込み群方程式が機能する微分方程式の例、減衰振動 (3.4) では、厳密解がわかっていたためこの部分に何の疑問も持たずに永年項がよくないものであると了解することができた。無論、実用上の問題では摂動的に解を構築している以上厳密解がわかっていることは望むべくもないだろう。しかし、我々が特異摂動理論を適用したい多くの系で、厳密解を見ることなくもとの解が有界であることを示すことができ、永年項が厳密解の近似を妨げていることを見ることが出来る。

やはりもっとも典型的な例である、減衰振動で事態を見てみよう。

$$\ddot{x} + x = -\epsilon \dot{x}, \quad \epsilon \ll 1. \quad (4.12)$$

今回はその厳密解がわかっていないという前提の下で話を進める。先に議論した通り、この問題を摂動的に解いていくと、べき的に増大する項が発生する。しかし、これが永年項、つまり近似解の構築に悪さをする項なのか？ということはこの時点では判然としない。モデル化している物理系が有界な振る舞いをしそうなら厳密解にそれを期待してもよさそうではあるが、上の方程式が物理系をうまく記述しておらず、べき増大する可能性はあるため、上の方程式に何の物理的期待もせずに増大項がないことを示すのは重要なことである。これは、以下のように示すことができる。

エネルギー保存の議論でしばしば行われるように上式の両辺に dx/dt を作用させる。すると、この方程式は

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} x^2 \right) = -\epsilon \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \quad (4.13)$$

と書き換えることができる。この式の意味するところは、エネルギーが散逸によって減少して

いくという、物理的にはごくごく当たり前のことである。右辺は常に負の値であるので関数

$$\frac{1}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}x^2 \quad (4.14)$$

は初期時刻での値が有限ならば常にそれを上限としてバウンドされている。これは x 及び dx/dt の値が常に有限であることを意味している。つまり、この解は有界である。この主張は厳密解がわかっていなくともできることであり、永年項が厳密解の基本的性質と矛盾することを示すことができている。

では、von Neumann 方程式の場合はどうであろうか。環境系まで含めた複合系に対する密度演算子の一般的状態は

$$\rho = \sum_{ij} p_{ij} \rho_i^S \otimes \rho_j^E \quad (4.15)$$

と書けている。ここで、 ρ_i^S はすべて対象系に対する密度演算子であり、 ρ_j^E は環境系に対するそれである。係数 p_{ij} は $0 \leq p_{ij} \leq 1$ かつ $\sum_{ij} p_{ij} = 1$ という条件を満たす。von Neumann 方程式の厳密解による時間発展はユニタリ演算子 $U(t) = \exp(-iH_{tot}t)$ を用いて

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t) \quad (4.16)$$

であることを思い出そう。このような時間発展の後の密度演算子 $\rho(t)$ を環境系の自由度について縮約したものについて、行列とみなしたときの各成分 $\rho_{(\alpha\beta)}$ の大きさの二乗和 (= Frobenius norm) が

$$\sum_{\alpha\beta} |\rho_{(\alpha\beta)}|^2 \leq 1 \quad (4.17)$$

を満たすことを示すことができるならば、これは”縮約密度行列のすべての成分”が厳密解の時間発展によってべき発散の性質を持たないことを示せる。つまり摂動論を展開したときに、どれか一つの成分でも永年項を持っていると近似の正当性が破れることがいえる。ところで、任意の行列 A に対する Frobenius norm は

$$\sum_{\alpha\beta} |A_{(\alpha\beta)}|^2 = \text{Tr}(AA^\dagger) \quad (4.18)$$

とも書ける。密度演算子がエルミート、つまり $\rho = \rho^\dagger$ であることを考えると、示したいことは

$$\sum_{\alpha\beta} |\rho_{(\alpha\beta)}|^2 = \text{Tr}(\rho^2) \leq 1 \quad (4.19)$$

と書ける。これは一見して密度演算子が満たすべき性質そのものであり、ここから永年項が厳密解に存在しないことを主張できそうであるが、先ほどの例で話したようにこの論理はよろしくない論理である。von Neumann 方程式を縮約して得られる時間発展が密度演算子を密度演算子に飛ばす写像であるか、というのは非自明な問題であり、明らかに示すべき命題である。実際、密度演算子が満たしているべきと考えられている完全正值性は縮約された力学によって一般に保証されないことを思い出すべきであろう。これには初期無相関状態の仮定が必要なのであった

縮約された力学の下で、初期状態を仮定することなく (4.19) が示せることを以下で証明しよう。まずユニタリ発展 $U(t)$ が一般性を失うことなく対象系に対する演算子 $\{A_S^i\}$ 及び環境系に対する演算子 $\{B_E^j\}$ によって $U(t) = \sum_i A_S^i \otimes B_E^i$ と書けることに注意する。時間発展後の全系の密度演算子は

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t) = \sum_{ijkl} p_{ij} A_S^k \rho_i^S A_S^{\dagger l} \otimes B_E^k \rho_j^E B_E^{\dagger l} \quad (4.20)$$

である。これを環境系の自由度について縮約した密度演算子

$$\rho_S(t) := \sum_{ijkl} p_{ij} \text{Tr}(B_E^k \rho_j^E B_E^{\dagger l}) A_S^k \rho_i^S A_S^{\dagger l} \quad (4.21)$$

の正値性、および $\text{Tr}_S \rho_S(t) = 1$ が言えれば示したいこと $\text{Tr}_S \rho_S^2(t) \leq 1$ が言えることは了解できよう。この写像に対して $\text{Tr}_S \rho_S(t) = 1$ が言えることはもともとユニタリ発展を縮約したものであるというところから即座に従う。そこで $\rho(t)$ の正値性を示すことで証明を完了しよう。

$\text{Tr}(B_E^k \rho_j^E B_E^{\dagger l})$ という行列は任意の複素ベクトル x_k について、

$$\sum_{kl} x_k \text{Tr}(B_E^k \rho_j^E B_E^{\dagger l}) x_l^* = \text{Tr}(|x_k B_E^k \rho_j^E|^2) \geq 0 \quad (4.22)$$

である。ここで密度行列が正演算子であることから、 $\rho_j^E = \zeta_j^E \zeta_j^{\dagger E}$ のようにかけることを用いた。これは $\text{Tr}(B_E^k \rho_j^E B_E^{\dagger l})$ を kl を足とみなした場合の行列として正値であることを示している。そこで、この行列を対角成分及びそれに作用するユニタリ行列 \mathcal{J}_{kl} の積として

$$\text{Tr}(B_E^k \rho_j^E B_E^{\dagger l}) = \sum_m \mathcal{J}_{km} \lambda_m \mathcal{J}_{lm}^* \quad (4.23)$$

と明示的に表示しておく。すると、(4.21) は

$$\begin{aligned} \rho_S(t) &= \sum_{ijkl} p_{ij} \text{Tr}(B_E^k \rho_j^E B_E^{\dagger l}) A_S^k \rho_i^S A_S^{\dagger l} \\ &= \sum_{ijklm} p_{ij} \mathcal{J}_{km} \lambda_m \mathcal{J}_{lm}^* A_S^k \rho_i^S A_S^{\dagger l} \\ &= \sum_{ijm} p_{ij} \lambda_m \left(\sum_k A_S^k \mathcal{J}_{km} \right) \rho_i^S \left(\sum_l \mathcal{J}_{lm}^* A_S^{\dagger l} \right) \\ &= \sum_{ijm} p_{ij} \lambda_m \mathcal{K}_m \rho_i^S \mathcal{K}_m^\dagger \end{aligned} \quad (4.24)$$

となる。ここで、 $\sum_k A_S^k \mathcal{J}_{km} = \mathcal{K}_m$ である。この正値性は対象系の Hilbert 空間 \mathcal{H}_S 上の任意のベクトル $|x\rangle$ に対して

$$\sum_{ijm} p_{ij} \lambda_m \langle x | \mathcal{K}_m \rho_i^S \mathcal{K}_m^\dagger | x \rangle = \sum_{ijm} p_{ij} \lambda_m \| \langle x | \mathcal{K}_m \tau_i \rangle \|^2 \geq 0 \quad (4.25)$$

となることから示せる。ここで、 $\rho_i^S = \tau_i \tau_i^\dagger$ を用いた。最後の不等式は p_{ij} 及び λ_m がすべて正であることから従う。

いささか迂遠ではあったが、以上の議論によって von Neumann 方程式は少なくとも縮約された対象系に対する密度行列に対してそのすべての成分が発散しないことを主張できる。つまり、摂動論的に求められた縮約密度行列のいずれかの成分に永年項が入っている時点で、解の近似の良さが破たんしてしまう。

ここで、わざわざ縮約して対象系だけに話を限ったのは、対象系については Hilbert 空間が有限次元であると仮定しており、行列代数に直接翻訳できるからである。他方環境系は有限次元とは限っていないために、行列代数と対応がつけられるかは明白でない。こちらの系の密度演算子を表に出すと大層議論が重々しくなると考えられたために、以上のような構成とした。より平易な証明があるかもしれないことはコメントしておく。

4.3 状況設定

以上のことから、量子系を摂動論で計算する際には、特異摂動の章で述べたように単純摂動では大域的な近似解が構成できないことがわかる。通常量子マスター方程式をこのような系に適用する時には、この事実はさほど触れられることなく済まされることが多い。本研究では、この系に繰り込み群の方法を適用することを考えるわけだが、前提をいくつか置いておくことにする。環境系、および全系の初期状態について、ちょっとした仮定を置いておく。ただし、この初期状態に対する仮定は通常初期に無相関であるという仮定よりもずっと弱い仮定である。「物理的にこうあるべし」という類の仮定ではなく、「物理的に良く起こりうるであろうこのような仮定をすれば、ここまでのことが主張できる」という、いわば我々の結論の十分条件を与えるものであり、無論この仮定を外した場合の議論は大いに興味があるし、これからの研究課題である。

まず、今考えている環境系に対して、定常性と混合性という二つの性質を導入する [15, 32, 33]。環境系のある密度演算子 Ω_E が定常である（定常性を持つ）というのは、

$$e^{-iH_E t} \Omega_E e^{iH_E t} := e^{\mathcal{L}_E t} \Omega_E = \Omega_E, \quad (4.26)$$

が満たされている場合をいう。この性質から、環境系に作用する任意の二つの演算子 X, Y について、その二時刻相関 $\text{Tr}_E(X(t_1)Y(t_2)\Omega_E)$ が $t_1 - t_2$ のみの関数となることがわかる。

環境系の状態 Ω_E が混合性を持つというのは、任意の「有界な」（超）演算子 X, Y に対して、その二時刻相関が

$$\text{Tr}(X e^{\mathcal{L}_E t} Y \Omega_E) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \text{Tr}(X \Omega_E) \text{Tr}(Y \Omega_E). \quad (4.27)$$

とふるまうことを言う。これが意味しているのは、異なる時刻における演算子間の相関が長時間では速やかに消えているべし、ということである。以下での議論を成立させるために、状態 Ω_E に対して混合性より強い条件、

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left| \frac{\text{Tr}(X e^{\mathcal{L}_E t} Y \Omega_E) - \text{Tr}(X \Omega_E) \text{Tr}(Y \Omega_E)}{t^{-\gamma}} \right| \leq \alpha_\gamma. \quad (4.28)$$

を導入しておく。ここで、 γ は 1 より大きい定数で、 α_γ は γ に依存する定数（時間によらないという意味）である。この条件は、混合性において指定されていなかった二時刻相関の

消失のスピードについて、それが逆べきの一次よりは速やかに落ちるべし、というものである。自由ボソン場に対して、有限温度の熱的状态を考えると、これらの性質を満たす重要な例となっている。詳細は省くが、この状態に対して混合性などを示すときには、Wick の定理と Riemann-Lebesgue の補題を用いる [15]。

さて、以下のような全系の状態を考えてみよう。

$$\rho_{\text{tot}} = \Lambda(1_S \otimes \Omega_E) := \sum_i L_i(1_S \otimes \Omega_E)L_i^\dagger, \quad (4.29)$$

ここで、 $\{L_i\}$ は全系に作用する有界な演算子である。今、対象系の Hilbert 空間の次元は有限であると仮定しているので、 L_i は対象系に対する「任意の」演算子 A_i^α 及び環境系に対する有界な演算子 B_i^α によって $L_i = \sum_\alpha A_i^\alpha \otimes B_i^\alpha$ と書ける。この状態は、 $1_S \otimes \Omega_E$ から L_i という有界な演算子によって擾乱された状態であるといってもよい。重要なのは、いかなる全系に作用する有界な演算子 $Z = \sum_i A_{iS} \otimes B_{iE}$ に対しても、

$$\begin{aligned} \text{Tr}(Ze^{\mathcal{L}ot}\rho_{\text{tot}}) &= \text{Tr}_E\left(\sum B_{iE}e^{\mathcal{L}Et}\text{Tr}_S(A_{iS}e^{\mathcal{L}st}\Lambda(1_S \otimes \Omega_E))\right) \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \sum \text{Tr}_E(B_{iE}\Omega_E)\text{Tr}(A_{iS}e^{\mathcal{L}st}\Lambda(1_S \otimes \Omega_E)) \\ &= \sum \text{Tr}_E(B_{iE}\Omega_E)\text{Tr}_S(A_{iS}e^{\mathcal{L}st}\text{Tr}_E\rho_{\text{tot}}) \\ &= \text{Tr}(Z\text{Tr}_E(e^{\mathcal{L}st}\rho_{\text{tot}}) \otimes \Omega_E). \end{aligned} \quad (4.30)$$

という極限が混合性から従うことである。これは、密度演算子 $e^{\mathcal{L}ot}\rho_{\text{tot}}$ が任意の有界な演算子に対して時間無限大の極限で $\text{Tr}_E(e^{\mathcal{L}st}\rho_{\text{tot}}) \otimes \Omega_E$ と同じ期待値を与えるということを主張している。

ここで、話を有界な演算子に限ることで何が起こるかを直感的に考えてみよう：先ず足がかりとして、我々は密度演算子を観測できない、ということに気づくべきである。系が有限自由度である場合、トモグラフィの手法によっていくつかの可観測量に対する測定を繰り返し行うことで、密度演算子の情報を過不足なく得ることが出来る。しかし、たとえば系の自由度が無限次元の場合には有限個の可観測量でトモグラフィが完了するかは自明ではない。さらに、一般に系の次元が無限次元である場合、有界でない自己共役演算子が存在しうる。しかし、我々は無限大の値を測定することなど出来ないから、このような物理量の測定を考えると出来ない。ナイーブに言えば、有界な演算子に話を限っていることは、密度演算子そのものの代わりに、我々が測定可能な物理量に対して同じ期待値（期待値といっても無限次のモーメントなども含むので、実際にはそれぞれの測定値と言い換えてもよい）を与える密度演算子の同値類のみを議論していることに対応している。

以上の議論から、上の式の意味するところを

$$e^{\mathcal{L}ot}\rho_{\text{tot}} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \text{Tr}_E(e^{\mathcal{L}st}\rho_{\text{tot}}) \otimes \Omega_E. \quad (4.31)$$

とすり替えることができる。この等式は密度演算子そのものに対する等式ではなく、あくまで「任意の有界演算子に対する期待値が」という意味であり、密度演算子の同値類としての等式である。

式 (4.31) は、式 (4.29) のように書かれている状態が、「無摂動」ハミルトニアンによる時間発展の後に無相関状態に「緩和する」ということを表している。これを繰り込み群の方法の視点から見たときに、中心多様体の議論において無摂動ハミルトニアンが引き起こす緩和が自由度の縮約を引き起こすこととつなげて考えたいのは自然であろう。この場合、緩和の速度はもちろん $\{L_i\}$ に依存しているが、もしこの緩和速度が摂動パラメータで決まる時間スケールよりも速い場合、中心多様体の議論との類推から我々は初期状態をあらかじめ無相関状態に仮定してもよいということになる。例えば Ω_E として有限温度の熱的状态を採用すると、この状態における擾乱の緩和時間は典型的にはその温度で決まるので、十分に高温な熱的状态をとることで（よほど特殊な擾乱 $\{L_i\}$ を考えない限り）、この仮定は正当化されることとなる。

量子マスター方程式の文脈では、初期に無相関であるということは（直観的な説明がなされることはあるものの）その場しのぎ的に導入されたものであった。ここでの議論は先行研究 [15] に従っているが、これによると上のように限定された初期状態に対して、この初期無相関状態の仮定を環境系が混合性を持つことの帰結として示すことができる。式 (4.29) のように特徴づけられる状態はどれほど初期状態を限定しているかを確認してみる。

有界な超演算子によって Ω_E から移り変わることが出来る任意の環境系の状態、および対象系の任意の状態について、これらを適当に混ぜ合わせ相関させた状態がこの初期状態に入っていることを確認するのはむつかしくない（対象系は有限次元なので任意の超演算子は有界である）。これは古典的な相関状態に限らず、エンタングル状態なども含んでいる。他方で、対象系の任意の状態を持ってきて、環境系の「マクロに異なる」状態いくつかと適当に混ぜ合わせた状態は、この初期状態には含まれていない。「マクロに異なる」という言葉は、二つの状態が有界な演算子で移り変わらない、と言っているのだと考えてよい。例えば、連続自由度を持つ boson 場のようなものを考えると、異なる温度に属する有限温度状態は有界な演算子で移り変わることができない。しかし、多くの物理的な系を考える場合には異なる温度状態を相関させた系を考えることはそれほどない。これは強い非平衡状態などに立ち入らない限りあまり登場する状態ではないと考えられる。その意味で、多くの物理的状态は式 (4.29) のように記述されている、ということができるだろう。

4.4 繰り込み群の方法を用いた「全系」の時間発展の摂動解

4.5 力学的写像の構築

さて、これまで説明してきた前提の下で実際に繰り込み群の方法を用いて厳密解を長時間近似するであろう近似解を構築する。量子マスター方程式の存在を忘れたうえで、以下の議論を行おう。

二次の摂動解

全系の von Neumann 方程式に対する $O(\lambda^2)$ までの単純摂動解は式 (4.5) で与えられる。この中に永年項が存在しうことは先述した。ここでは、その永年項を一般的に取り出そう。

繰り込み群の方法の知見に従うと、時間積分の上端を T にすり替え、 T で項を除しておく。そののちに $T \rightarrow \infty$ の極限をとると、この項の中にある有界な項は消えてしまい、漸近的にべき発散するような項のみが残る。これがつまり永年項である。摂動の一次の項に対する永年項及び二次の項に対する永年項の係数はそれぞれ

$$R^1(\tilde{\rho}_S(\tau)) := -i\lambda \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E], \quad (4.32)$$

と

$$R^2(\tilde{\rho}_S(\tau)) := -\lambda^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 [\tilde{V}(t_1), [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]], \quad (4.33)$$

で与えられる。今、初期状態を無相関状態にすり替えた。これは、永年項が問題になるような長時間スケールでは先ほど議論した無摂動発展による緩和がすでに起こっており、状態はほとんど無相関状態として取り扱っていいであろうという考えに基づく。もちろんこれが正当化されるには、 λ で決まるダイナミクスのスケールよりも初期状態を決定する $\{L_i\}$ の緩和スケールが十分短くなければならない。

これらの項が消えていたら摂動の二次まで（時間スケールとしては λt 及び $\lambda^2 t$ ）で永年項は存在せず、有限な値を持っている場合にはそれを係数として時間の一次で発散する永年項を持っている。また、 $R^1(\tilde{\rho}_S(\tau))$ が有限な値を持っている場合は、その定数部分の積分から摂動の二次の解に時間の二次で増大する項が存在し得、その場合には $R^2(\tilde{\rho}_S(\tau))$ は発散する。その場合には、あらかじめ時間の二次で増大する項を $R^2(\tilde{\rho}_S(\tau))$ から引いておかねばならないが、以下で述べるように $R^1(\tilde{\rho}_S(\tau))$ は 0 であるため上の定義で十分である。

一次の永年項 $R^1(\tilde{\rho}_S(\tau))$ を評価するために、エルゴード性

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \text{Tr}(X e^{\mathcal{L}t} Y \Omega_E) = \text{Tr}(X \Omega_E) \text{Tr}(Y \Omega_E), \quad (4.34)$$

が任意の有界な超演算子 X と Y について、混合性から従うことに注意したい (4.27) [15, 32, 33]。この性質を用いることで、

$$\begin{aligned} R^1(\tilde{\rho}_S(\tau)) &= -i\lambda \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E] \\ &= -i\lambda \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 \text{Tr}_E([\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]) \otimes \Omega_E. \end{aligned} \quad (4.35)$$

を示すことができる (B.1)。今、相互作用ハミルトニアンを $V = A_S \otimes B_E$ という形に限定してしまおう。 B_E は環境系に作用する有界な演算子である。より一般的な相互作用ハミルトニアン $V = \sum_i A_S^i \otimes B_E^i$ への拡張は容易である。一般性を失うことなく、我々は環境系のハミルトニアン及び相互作用ハミルトニアンの定義を変えることで、 $\text{Tr}(B_E \Omega_E)$ であるように取ることができる。このようにすると、 $R^1(\tilde{\rho}_S(\tau))$ は先んじて述べたように 0 である。これは λt という永年項が摂動解に登場しないことと同時に、二次の摂動解に $\lambda^2 t^2$ という項が登場しないことも意味している。

同じように、 $R^2(\tilde{\rho}_S(\tau))$ を計算することができ、

$$\begin{aligned} R^2(\tilde{\rho}_S(\tau)) &= -\lambda^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 [\tilde{V}(t_1), [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]] \\ &= R(\tilde{\rho}_S(\tau)) \otimes \Omega_E \\ &:= -\lambda^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 \text{Tr}_E([\tilde{V}(t_1), [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]]) \otimes \Omega_E. \end{aligned} \quad (4.36)$$

と書ける。この証明では (4.36), 混合性より強い付帯条件 (4.28) を用い、さらに

$$\int_0^{\infty} dt |\text{Tr}_E(B_E(t)B_E\Omega_E)| < \infty. \quad (4.37)$$

を仮定した。これは相互作用ハミルトニアンが環境系に加える影響が速やかに減衰せよ、ということの意味している。これらの証明の詳細は B.1 を見よ。式 (4.36) の右辺は 0 ではなく、また (時間に対して) 発散もしないことが示せる (この証明も付録に回した)。つまり von Neumann 方程式の二次の単純摂動解はこれを係数とするような一次の永年項を持つ。

繰り込み群の一般的な処方に従って、単純摂動解を有界な項と、有界な係数を持つ永年項部分に分解する。

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{\text{tot}}(t, \tau, \tilde{\rho}_S \otimes \Omega_E) &= \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E - i\lambda \int_0^t [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E] \\ &\quad - \int_0^t dt_1 \left(R^2(\tilde{\rho}_S(\tau)) + \lambda^2 \left[\tilde{V}(t_1), \int_0^{t_1} dt_2 [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E] \right] \right) \\ &\quad + (t - \tau) R^2(\tilde{\rho}_S(\tau)) + \mathcal{O}(\lambda^3). \end{aligned} \quad (4.38)$$

ここで、任意定数 $\{C_i\}$ の自由度を用いて有界な部分の積分の下端 τ を真の初期時刻 $t = 0$ に変更した。単純摂動解に繰り込み群方程式

$$\left. \frac{d\rho_{\text{tot}}(t, \tau, \rho_{\text{tot}}(\tau))}{d\tau} \right|_{t=\tau} = 0, \quad (4.39)$$

を課すことで、我々は初期状態 $\tilde{\rho}_{\text{tot}}^{\text{ini}}(\tau) := \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E$ に対する摂動の二次までの方程式、

$$\frac{d\tilde{\rho}_{\text{tot}}^{\text{ini}}(\tau)}{d\tau} = -\lambda^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 \text{Tr}_E[\tilde{V}(t_1), [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_{\text{tot}}^{\text{ini}}(\tau)]] \otimes \Omega_E. \quad (4.40)$$

この微分方程式は全系の発展に対するものであるが、その解の値域は状態空間の中でも特に $\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E$ として記述される部分空間に拘束されている。ひとたびある時刻で初期状態が無相関状態であることを仮定すれば、この微分方程式の解が常に $\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E$ のように書かれることが保証される。今の文脈では式 (4.29) のように初期状態を置くことで、混合性から漸近的に無相関状態である取り扱い、それを保証している。

このように繰り込み群方程式によるダイナミクスは、(全系のダイナミクスを考えているにも関わらず) 対象系に対してのみのダイナミクスとなる。繰り込み群の処方では、全系の密度演算子 $\tilde{\rho}_{\text{tot}}(t)$ は繰り込み群方程式 (4.40) によってそのダイナミクスが完全に決定されるた

め、全系のダイナミクスは対象系のダイナミクスのみで記述される。すなわち、自由度の縮約が起こっている。この構造は前節で述べた中心多様体の構造との類似である。量子マスター方程式の文脈では、対象系のみを見るからといってダイナミクスを対象系のみに射影していたが、繰り込み群の文脈ではダイナミクスは環境系の混合性の帰結として自然に対象系のみのものであることが示される。さらに、繰り込み群方程式 (4.40) が回転波近似を課した量子マスター方程式と同じ形をしていることが容易に見て取れる。

上の繰り込み群方程式の解を用いて、厳密解を近似する繰り込み解は

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{\text{tot}}^{\text{RG}} &= \tilde{\rho}_{\text{tot}}(t, t, \tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t) \otimes \Omega_E) \\ &= \tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t) \otimes \Omega_E - i\lambda \int_0^t [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t) \otimes \Omega_E] \\ &\quad - \int_0^t dt_1 \left(R^2(\tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t)) + \lambda^2 \left[\tilde{V}(t_1), \int_0^{t_1} dt_2 [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t) \otimes \Omega_E] \right] \right),\end{aligned}\quad (4.41)$$

と書くことができる。ここで、我々は繰り込み群方程式 (4.40) の解を $\tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t) \otimes \Omega_E$ と書いた。これは全系に対する近似解であり、もし対象系のみ状態を見たかったら環境系の自由度をトレースアウトして

$$\begin{aligned}\rho_S^{\text{RG}}(t) &= \text{Tr}_E \tilde{\rho}_{\text{tot}}(t, t, \tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t) \otimes \Omega_E) \\ &= \tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t) \\ &\quad - \int_0^t dt_1 \text{Tr}_E \left(R^2(\tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t)) + \lambda^2 \left[\tilde{V}(t_1), \int_0^{t_1} dt_2 [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S^{\text{RWA}}(t) \otimes \Omega_E] \right] \right).\end{aligned}\quad (4.42)$$

とすればよい。これが対象系に対する繰り込み群方程式を用いた力学的写像の構築となる。このダイナミクスを評価するのに、微分方程式として解く必要があるのが (4.40) のみであることに注意してほしい。後の操作は (4.42) のように代数的なものであり（面倒くさはさしておく）、何の困難も生じえない。つまり、繰り込み群の方法の微分方程式としての困難さは「係数が時間非依存の線形微分方程式」である。他方で、TC 型の量子マスター方程式は微積分方程式であり、TCL 型のほうは「係数が時間依存する線形微分方程式」である。この意味で、我々の構築した力学的写像を解くことは、紹介した二つの非 Markov 的な量子マスター方程式よりも容易である。

近年、post-Markov 型量子マスター方程式という量子マスター方程式が提案されている [35]。文献 [37] ではこの方法をボソン場の熱浴と結合した二準位系のダイナミクスに適用し、厳密解と比較している。この量子マスター方程式自身は複雑な微積分方程式の形をしているが、実は解くことはさほど困難ではない。というのも、この微積分方程式には対応する Markov 型の方程式が存在し、それを解いたのちにラプラス変換を用いることでその解を構成することができるからである。ラプラス変換による解の構築自体は純粋に代数的に行うことができるので、post-Markov 型の量子マスター方程式を解く（微分方程式としての）困難さは Markov 的な量子マスター方程式を解く場合と等価になる。この意味で、この方法で解を構築する困難さは我々の繰り込み群の方法で解を構築する困難さとほぼ等しい。より詳細な議論は必要になる

であろうが、我々の見ているパラメータ領域も、「Markov 的ではないものの摂動が弱いためにほとんど Markov 的と考えられる」領域であるため、いわゆる post-Markov 的な領域であるといえる。post-Markov 的な量子マスター方程式と繰り込み群の方法による摂動解の構築の関連性を議論することは研究課題として示唆に富んでいるものではあるが、我々の方法には post-Markov 量子マスター方程式にはない物理的な利点がある。それは、post-Markov 型量子マスター方程式が微視理論を欠いているのに対して、我々の方法論は純粋に微視的理論からトップダウンで導出されたものである、ということである。この意味で、我々の方法は post-Markov 型量子マスター方程式より、より基本的なものであるといえるだろう。

4.6 厳密解がわかっているモデルでの数値的比較

この節では、今までの節で導出した二次までの繰り込み解が実際に厳密解を近似しているか、厳密に解けることがわかっているモデルで議論する。考えるのは、二準位の系（スピン系）がボソン場と結合している場合である。そのハミルトニアンは、

$$H_{\text{tot}} = \Delta\sigma_+\sigma_- + \int d\omega\omega a_\omega^\dagger a_\omega + \lambda \int_0^\infty (\sigma_+ g_\omega a_\omega + \sigma_- g_\omega^* a_\omega^\dagger), \quad (4.43)$$

と書ける。 σ_\pm は二準位系の昇降演算子である。二準位系の Hilbert 空間は $\sigma_+\sigma_-$ の二つの固有状態、 $|+\rangle$ (励起状態) と $|-\rangle$ (基底状態) から生成されている。この二つの固有状態を用いると、昇降演算子は

$$\sigma_\pm = |\pm\rangle\langle\mp|. \quad (4.44)$$

となっている。 a_ω^\dagger 及び a_ω はそれぞれ周波数 ω に対応するボソン場の生成消滅演算子である。 λ は結合の強さを表す定数で、 g_ω はそれぞれの周波数とどのように結合しているかを表す関数。初期条件は簡単のために無相関状態 $\rho_S(0) \otimes |0\rangle\langle 0|$ にとっておく。 $|0\rangle\langle 0|$ はボソン場の真空である。boson 場の状態を真空状態に取っているため、前節以前に写像の導出で議論したような、「無相関状態から有界演算子によって摂動が加えられている初期状態」から出発した場合に、長時間スケールを見ると実効的に無相関状態への緩和が起こるかどうかは自明ではない。典型的にはボソン場の真空に有界演算子の相関を減衰させる典型的なスケールがなくてはならず（このスケールが相互作用の強さ λ より短いというのが条件であった）、例えば無質量ボソン場の場合にはこれは望めそうもない。しかし、この場合であってもひとたび初期に無相関状態を設定したならば、自由度の縮約が起こりうる。つまり、相互作用項の二点相関が典型的なスケールを持って充分速く減衰するならば、状態が真空であろうとも関係なく自由度の縮約が起こるということは十分強調しておきたい。

今、各周波数帯との結合の仕方を決める関数 g_ω を以下の条件が満たされるように決める。

$$f(t) := \int_0^\infty d\omega_1 \int_0^\infty d\omega_2 g_{\omega_1} g_{\omega_2}^* \langle 0|a_{\omega_1}(t)a_{\omega_2}^\dagger|0\rangle = \frac{\alpha}{2} \exp(-(\alpha + i\Delta)t) \quad (4.45)$$

つまり、Lorentzian に取る [38, 39]。 α は二点相関の減衰を表すパラメータであり、我々の方法ではこれが十分 λ^2 より大きいことが、繰り込み群の方法において十分自由度の縮約が良い

近似を与える条件となっている。と同時に、従来のマスター方程式の文脈では相関が速やかに環境系に紛れること、すなわち非 Markov 性の一つの指標になっている。ひとたびこのように $g(\omega)$ を決定すると、この系のダイナミクスは厳密量子マスター方程式というものをを用いて非摂動的に解くことが可能になる [39]。導出は省くがこの場合厳密量子マスター方程式は

$$\dot{\rho}_S = \text{Im}(\dot{u}/u)[\sigma_+\sigma_-, \rho_S] - \text{Re}(\dot{u}/u)[2\sigma_-\rho_S(t)\sigma_+ - \{\sigma_+\sigma_-, \rho_S(t)\}]. \quad (4.46)$$

のように与えられる。 $u(t)$ は

$$u(t) = \exp\left(-(\alpha + 2i\Delta)t/2\right) \left[\cosh(dt/2) - \frac{\alpha}{d} \sinh(dt/2) \right], \quad (4.47)$$

であり、 $d = \sqrt{\alpha^2 - 2\lambda^2\alpha}$ のように与えられている。この方程式はもともとのユニタリ発展と等価であり、環境系への影響もすべて考慮に入れた式となっている。

数値計算における比較対象として、時間非畳み込み型の量子マスター方程式も用意しておこう。この系に対しては、時間非畳み込み型の量子マスター方程式は

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S^{TCL}(t) = & -i\Delta[\sigma_+\sigma_-, \rho_S(t)] + \int_0^t dt' \{f(t-t') \\ & \times [e^{-i\Delta(t-t')}(\sigma_-\rho_S^{TCL}(t)\sigma_+ - \sigma_+\sigma_-\rho_S^{TCL}(t))] + H.c.\}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

という形をしている。

さて、この二準位系のモデルに対して、繰り込み群の方法を用いて写像を構築することを考える。環境系について $\langle 0|a^\dagger|0\rangle$ であることを用いると、一般的処方に基づいて、相互作用表示での繰り込み群方程式（対象系のみ方程式に落ちるので、その部分）が

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) = -\lambda^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} \text{Tr}_E[H_{\text{int}}(t_1), [H_{\text{int}}(t_2), \tilde{\rho}_S(t)]] \quad (4.49)$$

と書ける。具体的な相互作用の表式をこの中に入れることで、対象系に対する

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}_S(t) = -i[H_{\text{eff}}, \tilde{\rho}] + \lambda^2 \sum_{i=\pm} C_i(\sigma_i\rho(t)\sigma_i^\dagger - \frac{1}{2}\{\sigma_i^\dagger\sigma_i, \tilde{\rho}(t)\}) \quad (4.50)$$

という方程式を得る。ここで、

$$H_{\text{eff}} = K_+\sigma_+\sigma_- + K_-\sigma_-\sigma_+ \quad (4.51)$$

であり、

$$\begin{aligned} C_\pm = & \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{\pm i\Delta t_1} f(t_1 - t_2) \\ K_\pm = & i \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \text{sgn}(t_1 - t_2) e^{\pm i\Delta t_1} f(t_1 - t_2) \end{aligned} \quad (4.52)$$

が係数のあらわな表式である。

この方程式は明らかに Lindblad 方程式の形をしている。この解を $\rho^{RWA}(t)$ （一般論で述べたように、これは回転波近似のマスター方程式と同じ形をしている）として計算した後に、

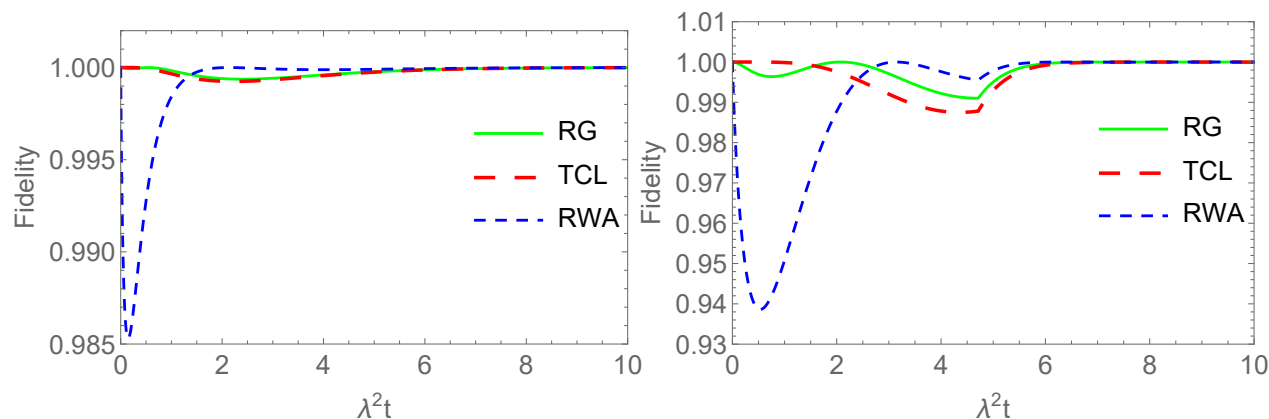


図 4.1 厳密解と、RWA、TCL、RG 法それぞれの解との Fidelity の時間発展。左図ではパラメータとして $\Delta = 10\lambda^2$ 、 $\alpha = 5\lambda^2$ を採用。右は $\Delta = 10\lambda^2$ 、 $\alpha = \lambda^2$ のパラメータである。

永年項を引いた摂動項部分を計算して演算することで、繰り込み解を得ることが出来る。この計算自体は式 (4.42) に従えば直接的ではあるものの、表式自体は煩雑になるため省略する。

繰り込み解及び回転波近似の量子マスター方程式、時間非畳み込み型の量子マスター方程式それぞれの解と、この系のダイナミクスの厳密解の間の密度行列の Fidelity $F(\rho_1, \rho_2) := \text{Tr} \sqrt{\rho_1^{1/2} \rho_2 \rho_1^{1/2}}$ をプロットしたのが図 4.1 である。ある近似解と厳密解の Fidelity F が 1 に近ければ近いほど厳密解をうまく近似していることを意味している。左右のグラフはともに対象系の初期状態を $\rho_S(0) = |+\rangle\langle +|$ と設定した場合の時間発展を、それぞれ違うパラメータについてプロットしている。左側の図はパラメータとして $\Delta = 10\lambda^2$ 、 $\alpha = 5\lambda^2$ と設定した場合の Fidelity の時間発展である。右側の図は $\Delta = 10\lambda^2$ 、 $\alpha = \lambda^2$ に対応している。左側の図では回転波近似の量子マスター方程式が初期時刻近傍で若干ずれているものの、全ての解は厳密解に対して良い近似を与えていることがわかる。これは α が大きい場合が Markov 的なダイナミクスであるという直観と一致している。 α を小さくしていくと直観的にはダイナミクスが非 Markov 的なものになっていくが、右の図はそのような α を表している。回転波近似の初期時刻近傍でのずれが大きくなっているのがわかる。また、時間非畳み込み型の量子マスター方程式も繰り込み解もそれに応じて若干 Fidelity が全時間スケールで Markov 的な場合より落ちている。超時間スケールでは回転波近似の量子マスター方程式が最も速やかに厳密解に近づいている。初期時刻近傍では時間非畳み込み型の量子マスター方程式が最も良い近似を与えている。繰り込み解は両者の中間程度で、どの時間領域でも一番か二番目程度には厳密解をよく近似している。むろん、この近似の具合はパラメータによって変わるので明確な指標にはなりえない。驚くべきことは、上述したように導出の際に危ないことをしている時間非畳み込み型の量子マスター方程式が、実際はいい近似を与えていることのほうであろう。結果論に過ぎないものの、量子マスター方程式の導出で単純に摂動の次数で高次を落としてしまうという操作はそれほど悪くないものであるようだ。ここに何か理由があるのか、それとも議論している模型の性質が効いてきているのかは定かではない。

4.7 再議論：非 Markov 性

我々の方法論では、系のダイナミクスを2つに分けて構築している。一つは回転波近似の Markov 型量子マスター方程式と同じ形をしている微分方程式。もう一つはその解を代数的に微小量だけ変化させた、(群構造を破るという意味で) 非 Markov 的な部分である。これは非 Markov 型量子マスター方程式として従来からよく知られている二つの方程式にはない構造である。この構造を持っていることにより、我々の構築した写像は非 Markov な量子マスター方程式よりとくことが一般的に簡単になっていることは先述した。さらに、この分離が非 Markov 性を摂動の次数で評価可能にしていることも特筆しておくべき点である。TCL 型にせよ TC 型にせよ、非 Markov 型の量子マスター方程式が大域的な時間スケールでどの程度 Markov 的なダイナミクスから離れたダイナミクスになるかは、実際にダイナミクスを解いた上で Markov 的なものと比較しなくてはならなかった。我々の写像は Markov 的なダイナミクスさえ解いてしまえば、非 Markov 性はそこからの微小なずれで記述されるため、その比較は容易である。言ってしまうと、繰り込み群の方法は「繰り込み群方程式による Markov 的なダイナミクス」「Markov 的なダイナミクスからの代数的摂動展開」という、ある種の長時間極限からの解の展開を行っていることに対応している。このことをより詳論するには、環境系のダイナミクスのスケールや相互作用ハミルトニアンによる擾乱の緩和具合も複雑に絡んでいるので、ここでは直感的説明にとどめておく。

4.8 再議論：完全正值性

以上の導出では、完全正值性に関しては一切考慮していなかった。実際、この導出によって得られた特異摂動解は完全正值性どころか正值性すら保証されていない。しかし、この問題は摂動論を考えたときには絶対に避けては通れない問題である。繰り込み群の方法に於ける近似解は厳密解と二次までの精度で(ある程度大域的に)あっていてほしいということなので、完全正值性もその意味で保障されていれば十分であると考えられる。そこで、以下では繰り込み群の方法によって導出した写像が二次までのオーダーで完全正值か否かを議論する。

4.8.1 短時間スケールでの完全正值性

繰り込み群の方法における解は短時間では単純摂動の解に帰着するようになっている。ゆえに、単純摂動解の完全正值性について議論すればそれで充分である。しかし、これは半ば自明であり、単純摂動解が

$$\rho_S(t) = F\rho_S(t_0)F^\dagger + \sum_{ij} \mathcal{R}_{ij} A_S(\omega_i)\rho_S(t_0)A_S^\dagger(\omega_j) + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad (4.53)$$

とまとめられることを用いればよい、ただしここで

$$F = \left(1 - \lambda^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \text{Tr}_E(V(t_1)V(t_2)\Omega_E)\right) \quad (4.54)$$

である。 $A_S(\omega_i)$ は $A_S(t)$ のスペクトル分解

$$A_S(t) = \sum_{\omega_i} e^{i\omega_i t} A_S(\omega_i), \quad A_S(\omega_i) = \sum_{\omega_1 - \omega_2 = \omega_i} \Pi(\omega_1) A_S \Pi(\omega_2) \quad (4.55)$$

を表す。 $A_S(t)$ はもともとの仮定からエルミート演算子なので、そのスペクトル分解は常に $A_S(\omega_i)$ と $A_S(-\omega_i)$ を含み、 $A_S(\omega_i) = A_S^\dagger(-\omega_i)$ の関係がある。 \mathcal{R}^{ij} は

$$\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{i\omega_i t_1} e^{-i\omega_j t_2} \text{Tr}_E(B(t_1)B(t_2)\Omega_E) \quad (4.56)$$

という形をしており、その行列としての正值性は複素ベクトル x_i を用いて

$$\begin{aligned} \forall x_i, \quad & \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 x_i e^{i\omega_i t_1} e^{-i\omega_j t_2} x_j^* \text{Tr}_E(B(t_1)B(t_2)\Omega_E) \\ & = \text{Tr}_E\left(\left|\int_0^t dt_1 x_i e^{i\omega_i t_1} B(t_1)\right|^2 \Omega_E\right) \end{aligned} \quad (4.57)$$

と示すことができる。ただし、もちろんこれは永年項を含みうるために、 $t \sim \mathcal{O}(1/\lambda^2)$ の時間スケールで摂動が破たんしているため、短い時間スケールでのみ有効である。

4.8.2 長時間スケール $\sim \lambda^2 t$ での完全正值性

繰り込み群方程式の解はマルコフ的かつ回転波近似の形をしており、明らかにクラウス表現で書ける。つまり、適当な演算子の集合 $\{E_i\}$ を用いて

$$\rho_S^{RWA}(t) = \sum_i E_i \rho_S(0) E_i^\dagger \quad (4.58)$$

となる。そこで、完全正值性を保証しているかどうかは微分方程式を解いた後の代数的処理 4.42 がクラウス表現になるか、という問題に帰着する。なぜならば、もしこれがクラウス表現になっていれば、

$$\rho_S(t) = \sum_{ij} F_j E_i \rho_S^{RWA}(t) E_i^\dagger F_j^\dagger = \sum_{ij} F_j E_i \rho_S^{RWA}(t) (F_j E_i)^\dagger \quad (4.59)$$

となって、完全正值性が保証されるからである。4.42 は摂動の二次のオーダーで

$$\rho_S(t) = F \left(\rho_S^{RWA} + \sum_{ij} \mathcal{S}_{ij} A_S(\omega_i) \rho_S^{RWA} A_S^\dagger(\omega_j) \right) F^\dagger + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad (4.60)$$

の形にまとめられる。また、行列 \mathcal{R}_{ij} は

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{ij} &= -2\pi t \mathcal{G}(\omega_i) \delta_{\omega_i \omega_j} + e^{i(\omega_1 + \omega_2)t/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\sin[(\omega - \omega_1)t/2]}{\omega - \omega_1} \frac{\sin[(\omega - \omega_2)t/2]}{\omega - \omega_2} \mathcal{G}(\omega) \\ \mathcal{G}(\omega) &= \lambda^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \text{Tr}_E(B_E(t)B_E \Omega_E). \end{aligned} \quad (4.61)$$

という形をしている（付録 B 参照）。 F に挟まれた中身がどういう構造をしているか調べればいいのだが、この一般証明はむづかしい。

そこで、対象系を 2 準位系に限定し、相互作用の形も具体的に与えた上で、完全正值性がどうなっているかラフに見てみる。二準位系の自由ハミルトニアンを $\frac{\omega}{2}\sigma_z$ 、環境系の自由度を実スカラー場と考えて、相互作用を $\lambda\sigma_x\phi$ ($\lambda \ll 1$) とすると、繰り込み群方程式は相互作用表示で最終的に

$$\begin{aligned}\rho_S &= -i[C\sigma_+\sigma_- + D\sigma_-\sigma_+, \rho_S] \\ &\quad + A(2\sigma_+\rho_S\sigma_- - \sigma_-\sigma_+\rho_S - \rho_S\sigma_-\sigma_+) \\ &\quad + B(2\sigma_-\rho_S\sigma_+ - \sigma_+\sigma_-\rho_S - \rho_S\sigma_+\sigma_-) \\ &= L_H\rho_S + L_d\rho_S\end{aligned}\tag{4.62}$$

という形にまとまる（それぞれの係数部分の詳細は今はいらないので議論しないこととする）。有効相互作用部分 L_H と散逸部分 L_d が超演算子として交換するので、おのこの部分について微分方程式を解いた形式解をそれぞれ $e^{L_H t}\rho_S(0)$ 、 $e^{L_d t}\rho_S(0)$ とすると、上式の解は $e^{L_H t}e^{L_d t}\rho_S(0)$ と書ける。 $e^{L_H t}$ 部分はユニタリ発展であり、定義から自明なクラウス表現を与えているので、今は考えなくてよい。 $\rho_S(0)$ を成分表示として

$$\rho_S(0) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta^* \\ \beta & \gamma \end{pmatrix}\tag{4.63}$$

の形にまとめると、 $\rho_S^{RWA}(t) = e^{L_d t}\rho_S(0)$ を Kraus 表示で書くと、

$$\begin{aligned}\rho_S^{RWA}(t) &= R_{\uparrow\uparrow}\sigma_{\uparrow}\rho_S(0)\sigma_{\uparrow} + R_{\downarrow\downarrow}\sigma_{\downarrow}\rho_S(0)\sigma_{\downarrow} \\ &\quad + R_{\uparrow\downarrow}\sigma_{\uparrow}\rho_S(0)\sigma_{\downarrow} + R_{\downarrow\uparrow}\sigma_{\downarrow}\rho_S(0)\sigma_{\uparrow} \\ &\quad + R_{++}\sigma_+\rho_S(0)\sigma_+^\dagger + R_{--}\sigma_-\rho_S(0)\sigma_-^\dagger\end{aligned}\tag{4.64}$$

である。ただしここで、Kraus 表示の演算子として $\{\sigma_+, \sigma_-, \sigma_{\uparrow} = \sigma_+\sigma_-, \sigma_{\downarrow} = \sigma_-\sigma_+\}$ を用いて、係数行列の添え字もそれに従った。 σ_{\uparrow} 及び σ_{\downarrow} は自己共役であるが σ_+ と σ_- は互いに共役になっている。係数行列の内訳は

$$\begin{aligned}R_{\uparrow\uparrow} &= \left(\frac{B}{A+B} + \frac{A}{A+B}e^{-2(A+B)t} \right) \\ R_{\downarrow\downarrow} &= \left(\frac{A}{A+B} + \frac{B}{A+B}e^{-2(A+B)t} \right) \\ R_{\uparrow\downarrow} &= R_{\downarrow\uparrow} = e^{-(A+B)t} \\ R_{+-} &= \left(\frac{A}{A+B}(1 - e^{-2(A+B)t}) \right) \\ R_{-+} &= \left(\frac{B}{A+B}(1 - e^{-2(A+B)t}) \right)\end{aligned}\tag{4.65}$$

であり、この行列が正值であること、すなわち微分方程式 (4.62) に従うダイナミクスが完全正值であることを見るのはたやすい。

繰り込み群の方法に基づく摂動解は、上の解 $\rho_S^{RWA}(t)$ を用いて以下のように書ける。

$$\begin{aligned}
\rho_S^{RWA}(t) = & (R_{\uparrow\uparrow}\sigma_{\uparrow} + (\xi_t - 2At)R_{-+})\rho_S(0)\sigma_{\uparrow} \\
& + (R_{\downarrow\downarrow} + (\zeta_t - 2Bt)R_{+-})\sigma_{\downarrow}\rho_S(0)\sigma_{\downarrow} \\
& + R_{\uparrow\downarrow}\sigma_{\uparrow}\rho_S(0)\sigma_{\downarrow} + R_{\downarrow\uparrow}\sigma_{\downarrow}\rho_S(0)\sigma_{\uparrow} \\
& + (R_{++} + (\xi_t - 2At)R_{\downarrow\downarrow})\sigma_{+}\rho_S(0)\sigma_{+}^{\dagger} \\
& + (R_{--} + (\zeta_t - 2Bt)R_{\uparrow\uparrow})\sigma_{-}\rho_S(0)\sigma_{-}^{\dagger} \\
& + \eta_t\sigma_{+}\rho_S(0)\sigma_{-}^{\dagger} + \eta_t\sigma_{-}\rho_S(0)\sigma_{+}^{\dagger}
\end{aligned} \tag{4.66}$$

ここで、 ξ_t 、 ζ_t 、 η_t は以下の条件を満たす関数であり、それを用いて構成された $\xi_t - 2At$ 、 $\zeta_t - 2Bt$ 等は永年項が取り除かれているために全時間で有界である（その具体的な表式は微視的な導出の部分参照されたい）。

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\xi_T}{T} = 2A, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\zeta_T}{T} = 2B, \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\eta_T}{T} = 0 \tag{4.67}$$

これらの具体的な表式を用いると、繰り込み解が完全正值性を保持しているかは前の係数行列の正值性を調べれば明らかとなる。詳細な計算は煩雑かつ直接的であるため省くものの、このように構築された繰り込み解の基づくダイナミクスは、 $(1 - e^{2(A+B)t}) \gg \mathcal{O}(\lambda^2)$ を満たす長時間スケールにおいて、摂動の二次までで完全正值であることを示すことができる（短時間領域では上の議論から完全正值性が保たれているが、中間領域でどうなっているかの証明はできていない）。

上の問題では話を二準位系に限っている。二準位系に対してはその自由度の少なさから一般的な相互作用の場合の繰り込み群方程式を書き下し、さらに解くことができる。その場合に完全正值性がどうなっているかを調べることは重要なことであろう。

非 Markov 的な（摂動）量子マスター方程式では完全正值性が一般に破れうるが、初期相関のない縮約された力学自体は完全正值性を保っているため、繰り込み群の方法がこのギャップを一般的な場合に埋める方法となるか（つまり、完全正值性を摂動の次数で保つような摂動的方法になっているか）、という問題は興味深い話題である。

第 5 章

結論と今後の展望

本稿では、いくつかの物理的な仮定を置いた上で、環境系と結合する有限自由度系に対する力学的写像を導いた。着目したのは「繰り込み群の方法」という特異摂動法の一つである。しばしば量子開放系の方法で使用される摂動的量子マスター方程式の方法、特に van Hove 極限をとらない場合の（非 Markov 的と称される）ものは、摂動的方法ではあるもののその摂動の取り方には即応的な仮定が盛り込まれており、その近似が実際に厳密解を近似できているか否かに関しては結果論的なところがあった。

本稿では、まず「なぜな単純な摂動論が量子開放系の文脈に用いられないか」を明らかにしたうえで、通常そのような単純摂動が破たんする微分方程式系の解析に一般的に用いられる「特異摂動理論」、その中で最も多くの場合に適応可能であると目されている繰り込み群の方法を用いて、量子マスター方程式とは異なった見方から対象系に対する力学的写像を導出した。この写像は van Hove 極限をとった際には Markov 的な量子マスター方程式と等価なものになるが、とらない場合には非 Markov 型の量子マスター方程式とは違う結果を与える。

この過程で、環境系が混合性という性質を持っている場合には、しばしば繰り込み群の方法とともに用いられる「中心多様体縮約」の議論から「初期無相関状態の仮定」を物理的に正当化することができる。「初期無相関状態の仮定」というのは量子マスター方程式の文脈でしばしば用いられる方法であり、全系の von Neumann 方程式から導出した種々の量子マスター方程式が、対象系のみに対する方程式として閉じた形になるための、数学的な仮定である。その物理的な意味については、「環境系が十分に大きいため」などの説明がなされることはあったものの、環境系が大きい時に初期無相関状態が実現されることを明確に証明した話はなく、またどの程度大きければよいのかについても不明瞭なものであった。

この「初期無相関の仮定」に対して文献 [15] は、環境系が混合性を持つ（～不可算無限自由度の Hilbert 空間を持っている）場合に、多くの初期状態のクラスから時間発展の帰結として初期無相関状態が正当化されることを示した。しかし、これは van Hove 極限の下での証明であり、van Hove 極限からはみ出たような場合では、その証明をそのまま使うことはできない。しかし、繰り込み群の方法を用いると、有限の λ の場合にもある仮定の下でこの正当化ができることがわかる。この仮定というのは、

- 初期状態は式 (4.29) のように用意され、 $\{L_i\}$ の影響が緩和する時間スケールは λ で決まる時間スケールより短い。
- 相互作用ハミルトニアン（の環境系に作用する部分）の二時刻相関は積分可能である。

というものである。このような正当化ができるのは繰り込み群の方法で構築したダイナミクスが「van Hove 極限を記述する繰り込み群方程式+そこからの代数的な微小のずれ」という形で表されることの帰結である。

初期無相関の仮定とともに、我々の方法は同様の仮定の下で環境系まで含めた全系のダイナミクスが、対象系のみダイナミクスで支配されるということを示唆する。これは、通常の量子マスター方程式の議論での「Markov 性=環境系が大きくそのダイナミクスは対象系からの影響を受けない」ということと対応していると考えられる。van Hove 極限においては量子マスター方程式の文脈でもそれを厳密に示すことができていた [15] が、有限の λ の時に環境系のダイナミクスをどの程度考慮すべきかという問題に関しては疑問が残ったままであった。我々の方法は、そのダイナミクスの記述は（繰り込み群の方法によると）代数的に取り扱える程度のものであり、本質的に動的（微分方程式を要さないという意味で）になっているわけではない、ということを実証している。

このような気づきにもとづいて、我々は対象系に対する力学的写像を導いた。繰り込み群の方法で得られた解自体は全系のものであったことに注意したい。これを環境系の自由度についてトレースアウトした $\text{Tr}_E(\rho_{tot}(t, t; \rho_S^{RWA}(t) \otimes \Omega_E))$ が対象系のダイナミクスを記述する写像になっている。この力学的写像の構築は、定義上本稿中で紹介した二つの非 Markov 的な量子マスター方程式（時間畳み込み型および時間非畳み込み型）よりも簡単に解けるものとなっている。一般に、時間畳み込み型は微積分方程式、時間非畳み込み型は係数が時間に依存する微分方程式となっているが、繰り込み群の方法で微分方程式として解くべきなのは Markov 的な回転波近似の元での量子マスター方程式であり、これは微分方程式の構造としては係数が時間に依存しない線形微分方程式であるためである。非 Markov 性を取り入れる部分は Markov 的な量子マスター方程式を解いた後の操作であって、この操作は完全に代数的なものとして行うことができ、何の困難もない。これは我々の手法を用いるメリットになりうる。

本稿の最後に、厳密解がわかっている spin-boson 模型を用いて、繰り込み群による力学的写像、時間非畳み込み型量子マスター方程式の解たちの厳密解との比較を行った。この結果から、我々の方法は厳密解に対する近似解の構築として悪くないことをしていることがわかる。しかし、時間非畳み込み型のほうも厳密解を大域的に近似しており、その近似の良さの比較、というところまでは（見ているパラメータ領域の少なさもあって）はっきりと断定できるレベルにはない。あくまで、同じ程度の近似をしつつ、より解きやすい解を構築したということが主張できるのみである。

この写像を語るうえでもう一つ、完全正值性については触れておかなければならないだろう。我々のダイナミクスは、ある簡単なモデル（二準位系）に限定した場合に、完全正值性が（もちろん、摂動的に）長時間スケールで満たされることを示すことが出来る。これは、微分方程式としての構造を Markov 的な量子マスター方程式として全体のダイナミクスから分離できてい

ることに大きくよっている。つまり、係数が時間に依存しない微分方程式さえ解ければいい、という状況になっているため、比較的一般性を失わない形でそのダイナミクスを解くことが可能である。紹介した二つの非 Markov 型量子マスター方程式では係数が時間に依存する微分方程式や、微積分方程式の形が登場し、これらを解くには熱浴の二点相関などの具体的な情報が必要であった。より一般の場合で我々の手法に基づく摂動的なダイナミクスが完全正值性を満たしていることがわかれば量子開放系の基礎づけへの大きな足がかりとなるであろう。

しばしば言及したように、我々の構築した力学的写像は、系のダイナミクスを二つに分けている。一つは「Markov 的な遅いダイナミクスを記述する微分方程式」であり、この部分は繰り込み群方程式 (4.40) として記述される。このダイナミクスの典型的なスケールは $\lambda^2 t$ である。もうひとつは「その解に作用する、群構造を破壊する代数的なずれ」であり、方程式 (4.42) の高次項として現れている。この項で表されるダイナミクスは「遅くない」通常的时间スケールのダイナミクスであるが、その大きさは λ^2 によって特徴付けられる小さなものとなっている。この項が群構造を破壊することを示すのはたやすい。また、得られた写像の van Hove 極限 ($\lambda^2 t$ を有限にしたまま λ を 0 にする極限) をとることを考えると、繰り込み群方程式は変化せず、この代数的部分の高次項だけが落ちることを容易に示すことが出来る。結局解は繰り込み群方程式の解 (4.40) の Schrodinger 表示、つまり回転波近似の元での Markov 型量子マスター方程式に帰着する。

この事実は、繰り込み群の方法が非 Markov 性を λ の次数で摂動論的に評価できることを意味している。さらに、非 Markov 性を議論するときダイナミクスを解く事を必要としないことも同時に示唆される。この性質は明らかに非 Markov 的な量子マスター方程式には存在していない性質である。非 Markov 的な量子マスター方程式は Markov 型の量子マスター方程式とは別物で、そのずれを評価するにはあくまで両者の解を解いたのちに比較するほかない。

繰り込み群の方法が、Markov 的なダイナミクスと非 Markov 的なダイナミクスの中間領域を解析するのに有用であることが以上の議論からわかる。最近では非 Markov 性が量子エンタングルメントやコヒーレンスなどの量子性のダイナミクスにどのような影響を与えるか、ということが注目を集めており、幾つかの研究がなされている [40][41]。我々の方法はこの周辺の解析を補助するものとなりうるであろう。

より摂動パラメータの高次への拡張は、意義深い今後の課題としておきたい。繰り込み群の方法は原理的に任意次数までの拡張が可能である。自由度の縮約自体は無摂動部分の構造で決まるため、繰り込み群方程式そのものはやはり本稿で定めた条件の下で対象系のみ閉じた微分方程式となり、任意次数での対象系への力学的写像を構築することが出来る。その場合には繰り込み群方程式自体が回転波近似の量子マスター方程式ではなくなるはずだが、ある条件の下では繰り込み群方程式の高次項が落ちることが計算から予想される [42]。この場合繰り込み群方程式は”無限次数で”回転波近似のマスター方程式に帰着する、という顕著な性質を持つ。では残りの代数的な部分はどうか、ということはまだ判然としていないため、今後の課題となるだろう。

参考文献

- [1] M. O. Scully, M. S. Zubairy, "Quantum Optics" (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [2] R. Alicki, J.Phys. A 12, L103 (1979).
- [3] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, "Quantum Computation and Quantum Information" (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [4] H. -P. Breuer, F. Petruccione "THE THEORY OF OPEN QUANTUM SYSTEM" (Oxford University Press, New York, 2002).
- [5] L. van. Hove, Physica 21, 517 (1954)s
- [6] U. Weiss, "Quantum Dissipative Systems", Vol. 2 of Series in Modern Condensed Matter Physics (World Scientific, Singapore, 1993).
- [7] E. B. Davies, "Quantum Theory of Open Systems" (Academic Press, London, 1976).
- [8] K. Kraus, Ann. Phys. 64, 311 (1971); K. Kraus, States, Effects, and Operations (Springer, 1983).
- [9] M.. D. Choi, Completely Positive Linear Maps on Complex Matrices, Linear Algebra and its Applications, 10, 285-290 (1975)
- [10] A.. Smirne, B. Vacchini ,Phys. Rev. A. 82.022110
- [11] A.. Royer, Phys. Lett. A. 315. 335 (2003
- [12] H. Hayashi, G. Kimura, Y. Ota, Phys. Rev. A 67, 062109 (2003).
- [13] A. Z. Chaudhry, Jiangbin Gong, Phys. Rev, Vol. 88, 052107 (2013).
- [14] T. Mori, Phys. Rev. A 89, 040101 (2014)
- [15] S. Tasaki K. Yuasa, P. Facchi, G. Kimura, H. Nakazato, I. Ohba, S. Pascazio, Ann. Phys. 322 (2007)31-656.
- [16] C. W. Gardiner, P. Zoller, "Quantum Noise" (Springer, Berlin, 2000).
- [17] J. Hu, H. Yu, JHEP 09(2012)062
- [18] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. 1976, 48, 119-130.
- [19] V. Gorini, A. Kossakowski, E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. 17,821 (1976)
- [20] M. J. W. Hall, J. Phys. A: Math. Theor. 41 269801 (2008)
- [21] D. A. Lidar, Z. Bihary, K. Whaley, Chem. Phys. 268, 35 (2016)

- [22] G. Schaller, T. Brandes, Phys. Rev. A 78, 022106 (2008)
- [23] 柴田正和 漸近級数と特異摂動法 ー微分方程式の体系的近似解法ー
- [24] F. Shibata, Y. Takahashi, N. Hashitsume: J. Stat. Phys. 17 (1977) 171.
- [25] S. Nakajima, Prog. Theor. Phys. 20, 948 (1958)
- [26] Lin-Yuan Chen, Nigel Goldenfeld, Y. Oono, Phys.Rev. E54: 376-394,1996
- [27] Teiji Kunihiro, Prog.Theor.Phys. 94 (1995) 503-514
- [28] Y. Hatta. T. Kunihiro. Ann. Phys. 298 24-57 (2002)
- [29] T. Kunihiro. K. Tsumura. J. Phys. A: Math. Gen. 39 25 (2006)
- [30] H. Chiba, SIAM j. on Appl. Dyn. Syst.,Vol.7, No.3, pp.895-932 (2008)
- [31] Y. Nambu, S. Kukita, J. Phys. Soc. Jpn. 85, 114002 (2016)
- [32] V. Bach, J. Froehlich, I. M. Sigal, J. Math. Pays. 41 (2000) 3985
- [33] R. Haag, "Local Quantum Physics: Fields, Particles,Algebras", (Springer, Berlin, 1996)
- [34] M. W. HIRSCH, C. C. PUGH, M. SHUB, Invariant manifolds, Springer-Verlag, 1977, Lec. Notes in Math.,583.
- [35] A. Shabani, D. A. Lidar, "Complete Positive Post-Markovian Mater Equation via a Measurement Approach", Phys. Rev. A 71, 020101(R) (2005)
- [36] K. Kraus, Ann. Phys. 64, 311(1971)
- [37] S. Maniscalco, F. Petruccione, "Non-Markovian dynamics of a qubit", Phys. Rev. A 73, 012111 (2006)
- [38] B. Vacchini, H.-P. Breuer, Phys. Rev. A 81, 042103 (2010)
- [39] H. Z. Shen, M. Qin, Xiao-Ming Xiu, X. X. Yi, Phys. Rev. A 89, 062113 (2014)
- [40] C. Anastopoulos, S. Shresta, B.L. Hu, Inf. Proc. 8, 549 (2009)
- [41] C. H. Fleming, N. I. Cummings, C. Anastopoulos, B. L. Hu, J. Phys. A: Math. Theor. 45 065301 (2012)
- [42] private calculation に基づく。詳細は本人まで連絡されたし。

謝辞

博士後期過程での生活、研究ではたくさんの人や存在にお世話になった。先ず一も二もなく自分自身に感謝しておきたいと思う。年齢に伴う衰えは見たものの、自身の力がなければここまでくることはできなかつただろう。

次に研究室の方々に謝意を表明していきたい。分野がかぶっており有益な議論をしていただいた松村央氏、こと数学的な議論では特に大活躍した駒田翔氏兩名には特別の謝意を表明したい。また、野田君には舶来料理をともに食べに行くことで、ストレスを解消する機会を多くいただいた。博士論文の手続きの過程で同研究室の池田君、事務の深谷さんにはたくさんの助け舟を出していただいたため、この場を借りて感謝しておきたい。

Ad postremum, divis japonicis senibus omnibus et demiurgo, qui Alpha et Omega est, gratias agam.

付録 A

量子マスター方程式の微視的導出、 より一般的な形

A.1 非マルコフ量子マスター方程式の導出

本論中での量子マスター方程式の導出は、あらかじめ摂動の二次までをとってから行っていたが、これでは摂動の次数を上げる方法がそこまで自明ではなく、あくまで簡潔で直観的な説明に過ぎない。より一般的に、非マルコフ量子マスター方程式の導出には摂動によらずに量子マスター方程式を導出して、最後の段階で発展方程式を摂動展開する方法がある。従来の非マルコフ的量子マスター方程式がどの程度体系的なものかを見るためには、やはりこちらの方法の方が見通しがよいので、ここに付記する。

A.1.1 摂動によらない表式

全系の von Neumann 方程式

$$\dot{\rho}_{\text{tot}} = -i[H_{\text{tot}}, \rho_{\text{tot}}] \quad (\text{A.1})$$

の相互作用表示

$$\dot{\tilde{\rho}}_{\text{tot}} = -i[\tilde{H}_{\text{int}}(t), \tilde{\rho}_{\text{tot}}] =: -i\mathcal{L}_{\text{int}}(t)\tilde{\rho}_{\text{tot}} \quad (\text{A.2})$$

から話を始めよう。以下簡単のため、相互作用表示におけるチルダを省く。この方程式は形式解

$$\rho_{\text{tot}}(t) = \mathcal{T} \exp\left(\int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))\right) \rho_{\text{tot}}(t_0) \quad (\text{A.3})$$

を持つ。 \mathcal{T} は時間順序積である。この定義と指数関数のべき展開の定義を考えると、指数関数型演算子の時間順序積は

$$\mathcal{T} \exp\left(\int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))\right) = 1 + \int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) + \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' (-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))(-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t'')) + \dots \quad (\text{A.4})$$

と書くことができる。

全系の密度行列に対する射影演算子 \mathcal{P} を

$$\mathcal{P}\rho_{\text{tot}} = \text{Tr}(\rho_{\text{tot}}) \otimes \Omega_E \quad (\text{A.5})$$

のように定義する。 Ω_E は環境系の密度演算子である。ここまでの論理において、導入した Ω_E が環境系の初期状態などとは一切関係ないものであることは注意しておきたい。この演算子が射影演算子の条件

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P} \quad (\text{A.6})$$

を満たしていることは、環境系の密度演算子の性質 $\text{Tr}_E \Omega_E = 1$ から従う。また、直交する演算子として、

$$\mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P} \quad (\text{A.7})$$

を定義する。 \mathcal{P} 及び \mathcal{Q} について

$$\mathcal{P}\mathcal{Q} = 0, \quad \mathcal{Q}\mathcal{P} = 0 \quad (\text{A.8})$$

という性質が成り立っていることを示すのはたやすい。これらの演算子 \mathcal{P} 、 \mathcal{Q} を用いて、式 (A.2) を対象系に対する部分とそれ以外の部分に分離する。簡単のために

$$\mathcal{P}\rho_{\text{tot}} = x(t), \quad \mathcal{Q}\rho_{\text{tot}} = y(t) \quad (\text{A.9})$$

という略記法を導入して $x(t)$ 、 $y(t)$ に対する連立方程式に変形すると

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= -i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)x(t) - i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)y(t) \\ \dot{y}(t) &= -i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)x(t) - i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)y(t) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

という形の方程式となる。ここで、 $y(t)$ を形式的に解くことで $x(t)$ を用いた形で表示することができて、

$$y(t) = \mathcal{G}(t, t_0)y(t_0) + \int_{t_0}^t dt' \mathcal{G}(t', t_0)(-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))x(t') \quad (\text{A.11})$$

という式を得る。 $\mathcal{G}(t, t_0)$ は

$$\mathcal{G}(t, t_0) := \mathcal{T} \exp\left(\int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))\right) \quad (\text{A.12})$$

で定義される演算子である。これを $x(t)$ 似て浮いての微分方程式に代入することで、 $x(t)$ のみで閉じた方程式、

$$\dot{x}(t) = -i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)x(t) + \int_{t_0}^t dt' \Phi(t, t')x(t') + I(t, t_0) \quad (\text{A.13})$$

が得られる。 $\Phi(t, t')$ 及び $I(t, t_0)$ は以下のように定義される量である：

$$\begin{aligned} \Phi(t, t') &:= (-i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t))\mathcal{G}(t, t')(-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) \\ I(t, t_0) &:= -i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)\mathcal{G}(t, t_0)y(t_0) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

このように定義された $x(t)$ (対象系の自由度) に対する微分方程式を、 $x(t)$ の時間積分を含むという意味で、時間畳み込み型 (Time Convolution, TC) の方程式という。この方程式には $1x(t)$ の時間積分を通じて、明らかに履歴効果 (非 Markov 性) が入っている。

等価変形の方法を変更することで、 $x(t)$ に対するほかの微分方程式が得られることを確認しよう。式 (A.3) において $t_0 \rightarrow t'$ に変更したもの ($t' < t$)

$$\rho_{\text{tot}}(t) = \mathcal{T} \exp\left(\int_{t'}^t dt'' (-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t''))\right) \rho_{\text{tot}}(t') \quad (\text{A.15})$$

を考える。この式を逆に $\rho_{\text{tot}}(t')$ について解くと

$$\rho_{\text{tot}}(t') = G(t, t') \rho_{\text{tot}}(t) := \mathcal{T}_- \exp\left(\int_{t'}^t dt'' (i\mathcal{L}_{\text{int}}(t''))\right) \rho_{\text{tot}}(t) \quad (\text{A.16})$$

となっている。ただし、 \mathcal{T}_- は逆時間順序積である。これに、射影演算子を作用させることで $x(t')$ の表式

$$x(t') = \mathcal{P}\mathcal{T}_- \exp\left(\int_{t'}^t dt'' (i\mathcal{L}_{\text{int}}(t''))\right) (x(t) + y(t)) \quad (\text{A.17})$$

を得る。これを改めて式 (A.11) に代入し、 $y(t)$ について解くと、

$$y(t) = \{\Theta(t, t_0) - 1\}x(t) + \Theta(t, t_0)\mathcal{G}(t, t_0)y(t_0) \quad (\text{A.18})$$

となる。ここで、 $\Theta(t, t_0)$ は

$$\Theta(t, t_0) = \left\{1 - \int_{t_0}^t dt' \mathcal{G}(t, t') (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) \mathcal{P}\mathcal{G}(t, t')\right\}^{-1} \quad (\text{A.19})$$

である。TC 型の方程式の導出の時と同じく、このようにして得られた $y(t)$ の表式を $x(t)$ の微分方程式に再代入することで、

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= K(t, t_0)x(t) + \mathcal{I}(t, t_0), \\ K(t, t_0) &= -i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)\Theta(t, t_0), \\ \mathcal{I}(t, t_0) &= -i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)\Theta(t, t_0)\mathcal{G}(t, t_0)y(t_0) \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

という方程式を得る。TC 型の方程式と異なり、この中には $x(t)$ の時間積分が含まれていない。履歴効果は全て微分方程式の係数を通して入ってくる。その意味で時間畳み込み (TC) と対比して、時間非畳み込み型 (Time ConvolutionLess, TCL) の方程式と呼称される。

以上で求めた二つの方程式は、もともとの方程式を等価変形したものであるなので、表式は異なれど等価なものである。しかし、もともとの方程式と等価であるということは、解くことに対する困難さももともとの方程式と同じ程度であることも同様に理解されよう。そこで、実際にはこれらの方程式を解くためにいくつかの仮定と近似を実行する。

A.2 摂動展開と初期無相関の仮定

まず式 (A.13)、(A.20) を見て最初に気づくことは、初期状態として対象系と環境系が無相関な状態で、環境系の状態が射影演算子の定義に出てきた Ω_E で記述されている場合、 $y(t_0) = 0$ になるために $I(t, t_0)$ 及び $\mathcal{I}(t, t_0)$ がその帰結として消えるということである。これらの項の存在は \mathcal{P} と直交する方向のダイナミクス（ざっくりというと環境系のダイナミクス）を解くことを要求しているため、これらが 0 であるということは、方程式が対象系のみ閉じた方程式になる十分条件を与えている。本付録の流れでは最初に射影演算子を定義したのちに初期無相関である場合にどうなるか、という話をしたが、実際の問題では逆で、初期が無相関状態である場合には、その時の環境系の密度演算子を用いて射影演算子を導入することができ、それを用いて方程式系を対象系のみものに縮約することができる、という流れとなる。では、初期無相関状態が数学的に方程式を縮約する以外にどのような意味があるかということ、この問題は以上の量子マスター方程式の導出の枠組みでは議論することができず、[15] の登場を待つこととなる（そして、この問題は本稿の主題の一つでもある。）。

次に、相互作用が弱い場合にこれらが摂動の再提示までどのように展開できるかを確認する。改めて $y(t_0) = 0$ としたときの方程式を挙げておこう。

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= -i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)x(t) + \int_{t_0}^t dt' \Phi(t, t')x(t') \\ \dot{x}(t) &= K(t, t_0)x(t)\end{aligned}\quad (\text{A.21})$$

これらの方程式について相互作用の高次項を切り捨てる。最初に上の方程式 TC 型のほうを考えよう。まず、場の一点相関を一般性を失わずに 0 にできるという条件、すなわち

$$\mathcal{P}(-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t))\mathcal{P} = 0 \quad (\text{A.22})$$

を使うことで、右辺第一項を切り落とすことができる。また、 $\Phi(t, t')$ の内訳は

$$\begin{aligned}\Phi(t, t') &= (-i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t))\mathcal{G}(t, t')(-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) \\ \mathcal{G}(t, t_0) &= \mathcal{T} \exp\left(\int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))\right)\end{aligned}\quad (\text{A.23})$$

であるが、これを相互作用で摂動展開すると \mathcal{G} の寄与が 0 字のものしか残らないことが見て取れる。よって、 $\Phi(t, t_0)$ の摂動の最低次項 $\Phi^0(t, t')$ は

$$\Phi^0(t, t') = (-i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t))(-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) \quad (\text{A.24})$$

である。これを TC 型の方程式に代入すると、

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= \int_{t_0}^t dt' \Phi^0(t, t')x(t') = \int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t))(-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))x(t') \\ &= \int_{t_0}^t dt' \Phi^0(t, t')x(t') = \int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t))(-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))x(t')\end{aligned}\quad (\text{A.25})$$

という表式を得る。最後の等号において式 (A.22) をもちいて、

$$\begin{aligned}
 (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))x(t') &= (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))x(t') + 0 \\
 &= (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))x(t') + (-i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))x(t') \\
 &= (-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t'))x(t')
 \end{aligned} \tag{A.26}$$

という式変形を行った。

次に、TCL 型の方程式の摂動展開を確認する。この問題は結局 $K(t, t_0)$ の摂動展開に帰着するから、 $K(t, t_0)$ の表式

$$\begin{aligned}
 K(t, t_0) &= -i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)\Theta(t, t_0) \\
 \Theta(t, t_0) &= \left\{ 1 - \int_{t_0}^t dt' \mathcal{G}(t, t') (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) \mathcal{P}\mathcal{G}(t, t') \right\}^{-1}
 \end{aligned} \tag{A.27}$$

を摂動展開してやればよい。じっと目を凝らすと、 Θ 自体が摂動の一次までで

$$\Theta(t, t_0) \sim 1 + \int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) \tag{A.28}$$

となることがわかるため、 $K(t, t_0)$ 自体は摂動の二次までで (なぜ二次まで取るかは後述)、

$$K(t, t_0) = -i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t) + (-i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)) \int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{Q}\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) \tag{A.29}$$

と展開できる。右辺第一項は $x(t)$ に作用すると消えるため、非自明なダイナミクスを生まない。そこで、 $K(t, t_0)$ としては摂動の二次まで展開したのであった。結局、TCL 型の方程式は

$$\dot{x}(t) = \int_{t_0}^t dt' (-i\mathcal{P}\mathcal{L}_{\text{int}}(t)) (-i\mathcal{L}_{\text{int}}(t')) x(t) \tag{A.30}$$

という形で摂動の最低次までの展開が得られる。TC 型の時と同じように、A.22 を用いた式変形を行った。

結局、TC 型と TCL 型の最低次までの方程式は、右辺の変数の引数が現在時刻 t になっているか、積分変数の時刻 t' になっているかの違いしかないことが分かる。また、それぞれの変数や演算子の定義に立ち戻ることによって、本稿中で直観的な解説を交えつつ導出した量子マスター方程式の形と一致していることが見て取れる。より基本的な導出は付録で行ったものが正しいのであるが、本文中のやり方は直感的で数学的面倒くささもないため、非常によく好まれる説明である。

本稿中で議論したように、このような方程式系において永年項がうまく処理されているかという事実は判然とせず (証明は実際のところ可能なのかもしれないが、そのようなことを議論している論文は寡聞にして知らない)、摂動の高次を切り落とす操作があまりにも機械的で、大域的な時間スケールで厳密解の挙動を近似しているかどうかということについては疑問が残る。

付録 B

こまごまとした証明

B.1 式 (4.35) 及び (4.36) の証明

最初に式 (4.35) を示そう。超演算子 \mathcal{L}_V は、対象系及び環境系のそれぞれに作用する超演算子の集合 $\{\mathcal{X}_S^i\}$ と $\{\mathcal{Y}_E^j\}$ を用いて $\mathcal{L}_V = \sum_i \mathcal{X}_S^i \otimes \mathcal{Y}_E^j$ と表示することができる。 \mathcal{X}_S^i のスペクトル分解を

$$e^{-\mathcal{L}_S t} \mathcal{X}_S^i e^{\mathcal{L}_S t} = \sum_{\Omega} e^{i\Omega t} \mathcal{X}_S^i(\Omega), \quad \mathcal{X}_S^i(\Omega) = \sum_{\Omega_1 - \Omega_2 = \Omega} \mathcal{P}(\Omega_1) \mathcal{X}_S^i \mathcal{P}(\Omega_2), \quad (\text{B.1})$$

のように定める。ここで、 $\mathcal{P}(\Omega)$ は \mathcal{L}_S の固有値 Ω を持つ固有空間への射影を表す超演算子である。全系の任意の有界な（超）演算子 $Z = \sum_i A_{iS} \otimes B_{iE}$ に対して

$$\begin{aligned} & \text{Tr}\left(ZR^1(\tilde{\rho}_S(\tau))\right) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \text{Tr}\left(Z \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]\right) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \text{Tr}\left(Z \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0 t_1} (\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E)\right) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{i,j,\Omega_j} \text{Tr}_S(A_{iS} \mathcal{X}_S^j \tilde{\rho}_S(\tau)) \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 e^{i\Omega_j t} e^{-\mathcal{L}_E t_1} \mathcal{Y}_E^j e^{\mathcal{L}_E t_1} \Omega_E \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{i,j,\Omega_j} \text{Tr}_S(A_{iS} \mathcal{X}_S^j \tilde{\rho}_S(\tau)) \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 e^{i\Omega_j t} \text{Tr}_E(B_E^i e^{-\mathcal{L}_E t_1} \mathcal{Y}_E^j \Omega_E) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{i,j,\Omega_j} \text{Tr}_S(A_{iS} \mathcal{X}_S^j \tilde{\rho}_S(\tau)) \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 e^{i\Omega_j t} \text{Tr}_E(B_E^i \Omega_E) \text{Tr}_E(\mathcal{Y}_E^j \Omega_E) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_i \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 \text{Tr}_S\left(A_{iS} \text{Tr}_E\left(e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0 t_1} (\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E)\right)\right) \text{Tr}_E\left(B_E^i \Omega_E\right) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \text{Tr}\left(Z \frac{1}{T} \text{Tr}_E\left(\int_{\tau}^T dt_1 [\tilde{V}(t_1), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]\right) \otimes \Omega_E\right). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

が示される。ここで、定常性 (4.26) とエルゴード性 (4.34) を用いた。本文中にて述べたようにあらゆる有界演算子（～我々の観測できる量）に対して成り立つという意味で、我々は

式 (4.35). を示したことになる。

次に、式 (4.36) の証明を試みる。まず、これを証明するには

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left(Z \int_0^{t_1} dt_2 e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0(t_1-t_2)} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0 t_2} (\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E) \right) \\ & \xrightarrow{t_1 \rightarrow \infty} \text{Tr} \left(Z \int_0^{t_1} dt_2 \text{Tr}_E (e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0(t_1-t_2)} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0 t_2} (\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E)) \otimes \Omega_E \right), \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

があらゆる有界演算子について成り立てば十分であることに気づくべきだ。今、式 (4.36) の左辺を

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left(Z \int_0^{t_1} dt_2 e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0(t_1-t_2)} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0 t_2} (\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E) \right) \\ & = \sum_{i,j,k,\Omega_j,\Omega_k} \text{Tr}_S (A_{iS} \mathcal{X}_S^j(\Omega_j) \mathcal{X}_S^k(\Omega_k) \tilde{\rho}_S(\tau)) \times \\ & \quad \times \int_0^{t_1} dt_2 e^{i\Omega_j t_1 + i\Omega_k t_2} \text{Tr}_E (B_{iE} e^{-\mathcal{L}_E t_1} \mathcal{Y}_E^j e^{\mathcal{L}_E(t_1-t_2)} \mathcal{Y}_E^k \Omega_E). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

のように書き換える。 Ω_E に対する条件 (4.28) を用い、積分変数を t_2 から $\sigma := t_1 - t_2$ に変更することで、我々は t_1 の極限に対する式

$$\begin{aligned} & \int_0^{t_1} d\sigma e^{i(\Omega_j + \Omega_k)t_1 - i\Omega_k \sigma} \text{Tr}_E (B_{iE} e^{-\mathcal{L}_E t_1} \mathcal{Y}_E^j e^{\mathcal{L}_E \sigma} \mathcal{Y}_E^k \Omega_E) \\ & \xrightarrow{t_1 \rightarrow \infty} e^{i(\Omega_j + \Omega_k)t_1} \text{Tr}_E (B_{iE} \Omega_E) \int_0^{t_1} d\sigma e^{-i\Omega_k \sigma} \text{Tr}_E (\mathcal{Y}_E^j e^{\mathcal{L}_E \sigma} \mathcal{Y}_E^k \Omega_E). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

を得る。この極限が存在するのは、 σ 積分が全ての \mathcal{Y}_k^i に対して収束する場合、つまり

$$\int_0^\infty d\sigma |\text{Tr}_E (\mathcal{Y}_E^j e^{\mathcal{L}_E \sigma} \mathcal{Y}_E^k \Omega_E)| < \infty. \quad (\text{B.6})$$

であるときのみである。もともと $\mathcal{L}_V = -i[V, \cdot]$ であったことを思い出すと、この条件は相互作用項が環境に与える影響が十分速やかに緩和する条件、

$$\int_0^\infty dt |\text{Tr}_E (B_E(t) B_E \Omega_E)| < \infty. \quad (\text{B.7})$$

に対応していることがわかる。上の極限 (B.5) を用いることで、

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left(Z \int_0^{t_1} dt_2 e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0(t_1-t_2)} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0 t_2} (\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E) \right) \\ & \xrightarrow{t_1 \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k,\Omega_j,\Omega_k} \text{Tr}_S (A_{iS} \mathcal{X}_S^j(\Omega_j) \mathcal{X}_S^k(\Omega_k) \tilde{\rho}_S(\tau)) \times \\ & \quad \times e^{i(\Omega_j + \Omega_k)t_1} \text{Tr}_E (B_{iE} \Omega_E) \int_0^{t_1} d\sigma e^{-i\Omega_k \sigma} \text{Tr}_E (\mathcal{Y}_E^j e^{\mathcal{L}_E \sigma} \mathcal{Y}_E^k \Omega_E) \\ & = \sum_i \text{Tr}_S \left(A_S^i \int_0^{t_1} dt_2 \text{Tr}_E (e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0(t_1-t_2)} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0 t_2} (\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E)) \right) \text{Tr}_E (B_{iE} \Omega_E) \\ & = \text{Tr} \left(Z \int_0^{t_1} dt_2 \text{Tr}_E (e^{-\mathcal{L}_0 t_1} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0(t_1-t_2)} \mathcal{L}_V e^{\mathcal{L}_0 t_2} (\tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E)) \otimes \Omega_E \right). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

となり、式 (B.3) が示される。式 (4.36) をこの式から証明することは直線的であるので ($\epsilon - \delta$ 論法を用いる。極限を持つ数列や関数の平均が極限值に一致することの証明と同じである)、ここでは割愛する。

以上の証明はいずれも積分の下端が 0 の場合のみ示されているが、証明の詳細を見ればわかるように下端が有限の τ の場合でも同様に示すことができる。

B.2 $R^2(\tilde{\rho}_S(\tau))$ が 0 でない有限の値を持ちうることの証明

ここでは $R^2(\tilde{\rho}_S(\tau))$ が 0 でない有限の値を持ちうることの証明を行う。そのために、式 (4.36) を変形しよう。前節にて超演算子に対して行ったように、対象系に作用する相互作用表示の演算子 $A_S(t)$ は

$$A_S(t) = \sum_{\omega} e^{i\omega t} A_S(\omega), \quad A_S(\omega) = \sum_{\omega_1 - \omega_2 = \omega} \Pi(\omega_1) A_S \Pi(\omega_2), \quad (\text{B.9})$$

とスペクトル分解できる。ここで、 $\Pi(\omega)$ は対象系の自由ハミルトニアン H_S に対する固有値 ω を持つ固有空間への射影演算子である。Heaviside のステップ関数

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & t < 0, \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

を導入することで、式 (4.33) を

$$\begin{aligned} R(\tilde{\rho}_S(\tau)) &= -\lambda^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 \text{Tr}_E [\tilde{V}(t_1) [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]] \\ &= -\lambda^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\tau}^T dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 \Theta(t_1 - t_2) \text{Tr}_E [\tilde{V}(t_1) [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]]. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

のように書き換えることができる。式 (B.9) と式 (B.11) を用いて、さらに Ω_E の定常性を考慮することで、

$$\begin{aligned} R(\tilde{\rho}_S(\tau)) &= -\lambda^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \text{Tr}_E \int_{\tau}^T dt_1 \int_{\tau}^{t_1} dt_2 \Theta(t_1 - t_2) [\tilde{V}(t_1) [\tilde{V}(t_2), \tilde{\rho}_S(\tau) \otimes \Omega_E]] \\ &= \sum_{\omega_1, \omega_2} [h_{\omega_1 \omega_2} A_S(\omega_1) A_S(\omega_2), \tilde{\rho}_S(\tau)] \\ &\quad + \sum_{\omega_1, \omega_2} \gamma_{\omega_1 \omega_2} [2A_S(\omega_1) \tilde{\rho}_S(\tau) A_S(\omega_2) - \{A_S(\omega_1) A_S(\omega_2), \tilde{\rho}_S(\tau)\}], \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

という表式を得る。ここで、 $\{ \cdot, \cdot \}$ は反交換子である。 $h_{\omega_1 \omega_2}$ と $\gamma_{\omega_1 \omega_2}$ は

$$\begin{aligned} h_{\omega_1 \omega_2} &= \lim_{T \rightarrow \infty} e^{i(\omega_1 + \omega_2)(T + \tau)/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{T} \frac{\sin[(\omega - \omega_1)T/2]}{\omega - \omega_1} \frac{\sin[(\omega + \omega_2)T/2]}{\omega + \omega_2} \mathcal{K}(\omega), \\ \gamma_{\omega_1 \omega_2} &= \lim_{T \rightarrow \infty} e^{i(\omega_1 + \omega_2)(T + \tau)/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{T} \frac{\sin[(\omega - \omega_1)T/2]}{\omega - \omega_1} \frac{\sin[(\omega + \omega_2)T/2]}{\omega + \omega_2} \mathcal{G}(\omega), \\ \mathcal{K}(\omega) &= \frac{1}{i\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\mathcal{G}(\zeta)}{\omega - \zeta}, \\ \mathcal{G}(\omega) &= \lambda^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \text{Tr}_E (B_E(t) B_E \Omega_E). \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

のように与えられている。 P は主値積分を表す記号。係数内の被積分関数の極限が

$$\frac{1}{T} \frac{\sin[(\omega - a)T/2]}{\omega - a} \frac{\sin[(\omega - b)T/2]}{\omega - b} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \delta(\omega - a)\delta_{ab}, \quad (\text{B.14})$$

のように与えられることに気づくと、我々は $h_{\omega_1\omega_2}$ および $\gamma_{\omega_1\omega_2}$ が $T \rightarrow \infty$ の極限である値 $\mathcal{K}(\omega_i)\delta_{\omega_1(-\omega_2)}$ 及び $\mathcal{G}(\omega_i)\delta_{\omega_1(-\omega_2)}$ に収束しうることが分かる（ただし、具体的な系で計算すると理論の正則化の問題が絡み、Lamb shift などの発散は出てき得る。ここでの立場はあくまでそのような正則化がうまく処理できているという前提に基づく）。このように、単純摂動解 (4.5) は式 (B.12) で表される永年項を持っている。