O-13

調和振動子系に対するリンドブラッド方程式の導出

Derivation of the Lindblad equation for a harmonic oscillator system

○劉奐[1]，　鈴木隆史[2]，　出口真一[3]
*Huan Liu[1], Takafumi Suzuki[2], Shinichi Deguchi[3]

Abstract : We derive the Lindblad equation for a harmonic oscillator system. Our formulation includes Calderia-Leggett's interaction term in addition to an ordinary interaction term.

１．導入

環境系と相互作用し，エネルギーや粒子をやり取りする量子系を開放量子系という．閉じた量子系である全体系が部分系と環境系から成るとき，開放量子系は環境系の影響を近似的に取り入れた部分系として定式化できる．実際に，環境系の効果を含む部分系の密度演算子 $\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)$ は，リンドブラッド方程式

$$\frac{d\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)}{dt} = -\frac{i}{h}[\hat{H}_{\mathrm{S}}, \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)] + \sum_k \left(\hat{L}_k \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t) \hat{L}_k^\dagger - \frac{1}{2}\{\hat{L}_k^\dagger \hat{L}_k, \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\} \right) \tag{1}$$

に従うことが知られている [1]．ここで，$\hat{H}_{\mathrm{S}}$ は部分系のハミルトニアン，$\hat{L}_k$ はリンドブラッド演算子である．

本研究では，部分系として 1 個の調和振動子を考え，環境系として N 個の調和振動子を考える．その際，従前の研究 [2] とは異なり，カルデラ・レゲット模型 [3] を内包するような拡張された相互作用ハミルトニアンを対象として計算を進める．その過程において，環境系が熱平衡状態にあると仮定し，全体系の密度演算子の環境系に関する部分トレースを取ることで，レッドフィールド方程式 [4] を求める．その後，相互作用ハミルトニアンをレッドフィールド方程式に代入することで，調和振動子系のリンドブラッド方程式を導く．

２．相互作用ハミルトニアン

本研究で扱う相互作用ハミルトニアンは，部分系の生成消滅演算子 $\hat{a}_0^\dagger$, $\hat{a}_0$ と環境系の生成消滅演算子 $\hat{a}_n^\dagger$, $\hat{a}_n$ $(n = 1, 2, \ldots, N)$ を用いて，以下のように書かれる．

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \sum_{n=1}^{N} (\beta_n \hat{a}_0 \otimes \hat{a}_n + \bar{\gamma}_n \hat{a}_0 \otimes \hat{a}_n^\dagger + \gamma_n \hat{a}_0^\dagger \otimes \hat{a}_n + \bar{\beta}_n \hat{a}_0^\dagger \otimes \hat{a}_n^\dagger). \tag{2}$$

ただし，β_n と γ_n は任意の複素数である．特に $\beta_n = 0$ のとき，ハミルトニアン (2) は

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \sum_{n=1}^{N} (\bar{\gamma}_n \hat{a}_0 \otimes \hat{a}_n^\dagger + \gamma_n \hat{a}_0^\dagger \otimes \hat{a}_n) \tag{3}$$

となる．これは，文献 [2] で論じられたリンドブラッド方程式の導出で採用されたハミルトニアンである．また，$\beta_n \neq 0$ かつ $\beta_n = \gamma_n$ のとき，ハミルトニアン (2) は

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \sum_{n=1}^{N} (\hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger) \otimes (\gamma_n \hat{a}_n + \bar{\gamma}_n \hat{a}_n^\dagger) \tag{4}$$

となる．これは，文献 [3] でカルデラとレゲットが与えたハミルトニアンである．

3. レッドフィールド方程式の導出

レッドフィールド方程式を導出するために，まず相互作用描像のフォンノイマン方程式

$$\frac{d\hat{\rho}_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{I}}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{\mathrm{int}}^{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{I}}(t)] \tag{5}$$

に注目する．ここで，I は相互作用描像の指標であり，$\hat{\rho}_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{I}}(t)$ はこの描像における全体系の密度演算子である．式 (5) を 0 から t まで積分し，式 (5) の右辺に代入すると

$$\frac{d\hat{\rho}_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{I}}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_{\mathrm{int}}^{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{I}}(0)] - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t ds [\hat{H}_{\mathrm{int}}^{\mathrm{I}}(t), [\hat{H}_{\mathrm{int}}^{\mathrm{I}}(s), \hat{\rho}_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{I}}(s)]] \tag{6}$$

が得られる．いま，初期時刻 $t = 0$ において，部分系と環境系に相関がなく積状態にあるとして，$\hat{\rho}_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{I}}(0) = \hat{\rho}_{\mathrm{S}}^{\mathrm{I}}(0) \otimes \hat{\rho}_{\mathrm{B}}(0)$ が成り立つと仮定する．(ここで，$\hat{\rho}_{\mathrm{B}}^{\mathrm{I}}(0) = \hat{\rho}_{\mathrm{B}}(0)$ を考慮した.) また．環境は十分に大きいため時間経過で変化せず，熱平衡状態にあるとする．さらに，時間が経過したのちでも部分系と環境系の相関は小さいとし，$\hat{\rho}_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{I}}(s) = \hat{\rho}_{\mathrm{S}}^{\mathrm{I}}(s) \otimes \hat{\rho}_{\mathrm{B}}(0)$ が成り立つと仮定する．以上の仮定の下で環境系の部分トレース $\mathrm{tr_B}[\bullet]$ を取ると，相互作用ハミルトニアが (2) で与えられるとき，式 (6) の右辺第 1 項は 0 となる．一方で左辺は $d\hat{\rho}_{\mathrm{S}}^{\mathrm{I}}(t)/dt$ となる．

最後にマルコフ近似をする．部分系の時間変化がマルコフ過程のとき，$\hat{\rho}_{\mathrm{S}}^{\mathrm{I}}$ は過去の時刻である積分変数 s には依存せず，現在の時刻 t のみに依存するので，$\hat{\rho}_{\mathrm{S}}^{\mathrm{I}}(s) \simeq \hat{\rho}_{\mathrm{S}}^{\mathrm{I}}(t)$ と近似できる．さらに，t を初期時刻から十分に過ぎた時刻として積分の下限を $-\infty$ にする．これらの近似と変数変換 $s \to t - s$ を行うと，レッドフィールド方程式 [4]

$$\frac{d\hat{\rho}_{\mathrm{S}}^{\mathrm{I}}(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^\infty ds\, \mathrm{tr_B}\Big[[\hat{H}_{\mathrm{int}}^{\mathrm{I}}(t), [\hat{H}_{\mathrm{int}}^{\mathrm{I}}(t-s), \hat{\rho}_{\mathrm{S}}^{\mathrm{I}}(t) \otimes \hat{\rho}_{\mathrm{B}}(0)]]\Big] \tag{7}$$

が求まる [4]．

[1] 日大理工・院 (前)・量子　[2] 日大・研究員・量科研　[3] 日大・教員・量科研

4. リンドブラッド方程式の導出

相互作用描像において，ハミルトニアン (2) は

$$\begin{aligned}&\hat{H}^{\mathrm{I}}_{\mathrm{int}}(t) = \\ &\sum_{n=1}^{N}(\beta_n e^{-i(\omega+\omega_n)t}\hat{a}_0\otimes\hat{a}_n + \bar{\gamma}_n e^{-i(\omega-\omega_n)t}\hat{a}_0\otimes\hat{a}_n^\dagger \\ &+ \gamma_n e^{i(\omega-\omega_n)t}\hat{a}_0^\dagger\otimes\hat{a}_n + \bar{\beta}_n e^{i(\omega+\omega_n)t}\hat{a}_0^\dagger\otimes\hat{a}_n^\dagger)\end{aligned} \tag{8}$$

となる．ここで，ω は部分系の角振動数，ω_n は環境系の角振動数である．式 (8) を式 (7) に代入し，整理すると

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)}{dt} =& -\frac{i}{h}[\hat{H}_{\mathrm{S}} + \hat{H}_{\mathrm{LS}} + \hat{H}'_{\mathrm{LS}}, \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)] \\ &+ (g^- + l^+)\left(\hat{a}_0^\dagger\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\hat{a}_0 - \frac{1}{2}\{\hat{a}_0\hat{a}_0^\dagger, \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\}\right) \\ &+ (g^+ + l^-)\left(\hat{a}_0\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\hat{a}_0^\dagger - \frac{1}{2}\{\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0, \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\}\right) \\ &+ \hat{H}_\omega(t)\end{aligned} \tag{9}$$

が求まる．ハミルトニアン $\hat{H}_{\mathrm{LS}}$ と $\hat{H}'_{\mathrm{LS}}$ はラムシフトを表す．関数 $\hat{H}_\omega(t)$ は $e^{\pm 2i\omega t}$ を含む項の和であり，g^-, g^+, l^-, l^+ はコーシーの主値 $\mathrm{P}[\bullet]$ やボース・アインシュタイン分布関数

$$N_{\mathrm{B}}(\omega_n) = \frac{1}{e^{\hbar\omega_n/k_{\mathrm{B}}T} - 1} \tag{10}$$

などを用いて

$$g^+ = 2\pi\sum_{n=1}^{N}\bar{\gamma}_n\gamma_n(1 + N_{\mathrm{B}}(\omega_n))\delta(\omega - \omega_n)\,, \tag{11}$$

$$g^- = 2\pi\sum_{n=1}^{N}\bar{\gamma}_n\gamma_n N_{\mathrm{B}}(\omega_n)\delta(\omega - \omega_n)\,, \tag{12}$$

$$l^+ = i\sum_{n=1}^{N}(\bar{\gamma}_n\beta_n - \bar{\beta}_n\gamma_n)(1 + N_{\mathrm{B}}(\omega_n))\mathrm{P}[\frac{1}{\omega + \omega_n}]\,, \tag{13}$$

$$l^- = i\sum_{n=1}^{N}(\bar{\gamma}_n\beta_n - \bar{\beta}_n\gamma_n)N_{\mathrm{B}}(\omega_n)\mathrm{P}[\frac{1}{\omega + \omega_n}] \tag{14}$$

と書ける．関数 $\hat{H}_\omega(t)$ は何らかのリンドブラッド演算子を用いて式 (1) の右辺第２行のような形に表せないため，式 (9) 自体はリンドブラッド方程式とは言えない．以下では場合分けをして式 (9) を考察する．

(i) $\beta_n = 0$ のとき　このとき，$\hat{H}_\omega(t)$, $\hat{H}'_{\mathrm{LS}}$, l^+, l^- は 0 となり，式 (9) はリンドブラッド方程式になる．文献 [5] と異なり，本研究では回転波近似 ($\omega t \gg 1$ と仮定し，$e^{\pm 2i\omega t}$ を含む項を平均化により 0 とする近似) を行わずに同様の方程式を得た．実際に (1) と比べると，リンドブラッド演算子は $\hat{L}_1 = \sqrt{g^-}\,\hat{a}_0^\dagger$ と $\hat{L}_2 = \sqrt{g^+}\,\hat{a}_0$ であることが分かる．

(ii) $\beta_n \neq 0$ のとき　このとき，回転波近似を行うと $\hat{H}_\omega(t) = 0$ となり，リンドブラッド方程式が得られる．このときのリンドブラッド演算子は $\hat{L}_1 = \sqrt{g^- + l^+}\,\hat{a}_0^\dagger$ と $\hat{L}_2 = \sqrt{g^+ + l^-}\,\hat{a}_0$ である．

(iii) $\beta_n \neq 0$ かつ $\beta_n = \gamma_n$ のとき　このとき，相互作用ハミルトニアンはカルデラとレゲットが与えた式 (4) であり，回転波近似を行うことで，リンドブラッド方程式が

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)}{dt} =& -\frac{i}{h}[\hat{H}_{\mathrm{S}} + \hat{H}_{\mathrm{LS}} + \hat{H}'_{\mathrm{LS}}, \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)] \\ &+ g^-\left(\hat{a}_0^\dagger\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\hat{a}_0 - \frac{1}{2}\{\hat{a}_0\hat{a}_0^\dagger, \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\}\right) \\ &+ g^+\left(\hat{a}_0\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\hat{a}_0^\dagger - \frac{1}{2}\{\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0, \hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)\}\right)\end{aligned} \tag{15}$$

と求まる．(ii) の条件に $\beta_n = \gamma_n$ を付け加えることにより，(i) の場合と同じく l^- と l^+ は 0 になる．その結果，(i) のときと同じリンドブラッド演算子を持ち，ラムシフト $\hat{H}'_{\mathrm{LS}}$ が追加されたリンドブラッド方程式が得られる．

5. まとめと今後の課題

本研究では，ハミルトニアン (2) をレッドフィールド方程式 (7) に代入して，リンドブラッド方程式の導出を試みた．その結果，式 (9) が求まり，$\beta_n = 0$ のときは近似せずにリンドブラッド方程式が導かれた．一方，$\beta_n \neq 0$ のときは回転波近似を用いてリンドブラッド方程式が導かれた．カルデラとレゲットが与えたハミルトンニアンを考えるために，$\beta_n = \gamma_n$ という条件を追加すると，$\beta_n = 0$ のときと同じリンドブラッド演算子とラムシフト $\hat{H}'_{\mathrm{LS}}$ を含むリンドブラッド方程式が得られた．

今後の課題として，導出されたリンドブラッド方程式を満たす密度演算子の期待値に適切な前提条件 (Ansatz) を課し，実際に位置演算子の期待値の振る舞いを調べることなどが挙げられる．

参考文献

[1] G. Lindblad, On the generators of quantum dynamical semigroups. Commun. Math. Phys.**48**(1976).

[2] D. Walls and G. Milburn, Quantum Optics, Springe(1994).

[3] B. Calderia and A. Leggett, Ann，phys.**140**, 374(1983).

[4] A.G. Redfield, The Theory of Relaxation Processes, Advances in Magnetic and Optical Resonance(1965).

[5] M. Scully and M. Zubairy, Quantum Optics, Cambridge University Press(1997).