Projection Operator Method for Irreversible Dynamics of Open Quantum Systems Revisited

産業技術総合研究所
湯浅 一哉*

1　はじめに

量子論の枠組みにおいて，系の時間発展はハミルトニアンをその生成子とするユニタリー変換によって記述される．したがって，基本的にはハミルトニアンが与えられた閉じた系が量子論の適用対象であり，また，時間発展は，時間反転対称性を備えたものとなる．一方で，現実の実験は必ずしも理想的な環境下で行われるものではなく，量子系も，外界の様々な影響を受けて緩和現象を示すことになる．当然，実験結果を理解するために量子緩和過程を記述する理論的枠組みが求められるとともに，時間反転対称性を備えた量子論に基づいていかに不可逆的現象が記述されるかという統計力学の基礎とも関わる観点から，「量子開放系」の研究が長年にわたって精力的に行われてきた．初期の頃から多くの日本人研究者が重要な寄与をもたらしてきたことを特筆しておかなければならない [1,2]．古くから多くの実験が可能であった量子光学の分野において特に精力的に研究が進められ，量子光学の教科書 [3,4] であればどれを手にとってみても，この話題に多くのページを割いた章に出会うことができる．実験技術の驚異的な進歩に伴って様々な実験が可能となり，量子情報という新しい分野の盛り上がりによってますますその勢いが加速する中，日々発表される論文に量子開放系の枠組みを見かけない日はないといっても過言ではない．

さて，エネルギーを散逸し，緩和する系そのものをハミルトニアンで記述することはできないので，それを直接量子論の枠組みに載せることはできない．そこで，注目している量子系だけでなく，それを取り巻く (無限に大きな) 環境系の自由度も含めた全体を閉じた系としてハミルトニアン

$$H = H_\mathrm{S} + H_\mathrm{B} + \lambda H_\mathrm{SB} \tag{1}$$

を書き下し，量子論を適用するのが通常のアプローチである．ここで，H_S は今注目している系 S の，H_B は環境系 B の，H_SB は S と B との相互作用のハミルトニアンであり，λ は相互作用の強さを与える定数である．そして，全体系の状態を表す密度演算子 $\rho(t)$ のうち系 S の自由度にのみ注目すると，S の開放系としての振舞いが見えることになる．具体的には，環境系 B のあらゆる状態に関する足し上げ行った

$$\rho_\mathrm{S}(t) = \mathrm{tr}_\mathrm{B}\,\rho(t) \tag{2}$$

に注目する．一つの目標は，$\rho(t)$ の時間発展を記述する von Neumann 方程式 (Schrödinger 方程式) から出発して，$\rho_\mathrm{S}(t)$ の時間発展を記述する「マスター方程式」を導出することである．その方法は様々あるが，ここでは「中嶋–Zwanzig の射影演算子法」[1,4,5] に着目する．射影演算子

$$\rho(t) \longrightarrow \mathcal{P}\rho(t) = \mathrm{tr}_\mathrm{B}\{\rho(t)\} \otimes \Omega_\mathrm{B}, \qquad \mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P} \tag{3}$$

を導入し，$\mathcal{P}$ で S の情報を引き出すのである．この手法の歴史も長く，何を今さら議論するのかという声が聞こえてきそうであるが，本稿では，教科書では述べられていない以下の点を強調したい．

■初期相関の仮定　きっかけは，上述のようなマスター方程式の導出において必ず設定される次の仮定に対する素朴な疑問である:

$$\rho(0) = \rho_\mathrm{S} \otimes \rho_\mathrm{B}. \tag{4}$$

初期時刻 $t=0$ において，系 S と環境系 B との間に相関がないことを仮定するのである [1–4]．一方で，このような初期状態から出発しても，時間が経てば相互作用 $H_{\rm SB}$ の影響で両系は相関を持つことになる．いつを “初期時刻” とするのかは我々が勝手に決めることであるから，式 (4) の初期状態の下でマスター方程式の導出ができるのに，そこから少し時間が経過したところを初期時刻と思って話を始めると導出できなくなるというのはどういうことなのであろうか？さらには，式 (4) から出発し，相互作用 $\lambda H_{\rm SB}$ が弱ければ，時間が経過してもそれほど相関は生じないであろうと考え，

$$\rho(t) \simeq \rho_{\rm S}(t) \otimes \rho_{\rm B} \tag{5}$$

という仮定も課してしまうことがあるが，その正当性が検討されることはほとんどない．

■射影演算子の選択　初期状態の仮定 (4) をはずすと，射影演算子として何を採用すべきかが自明でなくなる [6]．式 (3) で導入した射影演算子 $\mathcal{P}$ は，環境系に関する部分対角和によって失われた環境系の自由度を，状態 $\Omega_{\rm B}$ を付与することで補う操作になっている．問題は，その $\Omega_{\rm B}$ の選択である．式 (5) が正当化される状況にあれば $\Omega_{\rm B}=\rho_{\rm B}$ で良さそうに思われるが，式 (4) も (5) もなくなると，何を採用するべきかすぐには分からない．一方で，$\mathcal{P}$ と $\mathcal{Q}$ が射影演算子，つまり，

$$\mathcal{P}+\mathcal{Q}=1, \quad \mathcal{P}^2=\mathcal{P}, \quad \mathcal{Q}^2=\mathcal{Q}, \quad \mathcal{P}\mathcal{Q}=\mathcal{Q}\mathcal{P}=0 \tag{6}$$

という性質を備えていれば何でも良い ($\mathrm{tr}_{\rm B}\,\Omega_{\rm B}=1$ と規格化されていれば十分) というような記述が時折見られるが，それは必ずしも正しくないことを以下で明らかにしよう．

■リウビル演算子のスペクトル　これらの疑問を解消する鍵は，密度演算子 $\rho(t)$ の時間発展の生成子であるリウビル演算子のスペクトルにある．不可逆性の起源として環境系が連続スペクトルをもつことの重要性は教科書にも書かれているが，通常，点スペクトルの存在 [7,8] が見落とされているように思われる．点スペクトルの存在を理解するためには，環境系，すなわち，無限に大きな系を正しく扱うことが重要である．実は，この点に，本稿でこの話題を取り上げさせて頂く理由がある．無限系である環境系の振舞いを議論するというのは，場の理論を展開することに他ならないのである．そして，散乱理論で馴染みのある表式がしばしば顔を出すことに気が付かれるだろう．

さらに，リウビル演算子のスペクトルを理解すると，不可逆性の起源に対する理解も進む．不可逆性の起源として，相互作用 $H_{\rm SB}$ が重要であるという考えがあろう．当然，系 S がエネルギーを散逸するためには環境系との相互作用が欠かせないが，より本質的なのは，環境系の “非摂動時間発展” の方であることが以下で見て頂けると思う．また，式 (2) の部分対角和という “粗視化” が不可逆性をもたらすという意見もあるかと思うが，この部分対角和は我々の手で施すものではなく，実は，環境系の非摂動時間発展の帰結として自然に実現されるものなのである．

これらの点を以下で議論するが，紙面の都合上，エッセンスだけを何とかお伝えすることに努めたい．本稿の内容は文献 [9] の結果に基づいており，詳細はそちらをご覧頂けると幸いである．

2　マスター方程式の導出

マスター方程式の導出を始めよう．ハミルトニアン (1) の全体系に対する von Neumann 方程式

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}\rho(t) \tag{7}$$

が出発点である．ここで，$\mathcal{L}$ は全体系のリウビル演算子であり，ハミルトニアン (1) に対応して

$$\mathcal{L} = -i[H,\,\cdot\,] = \mathcal{L}_{\rm S} + \mathcal{L}_{\rm B} + \lambda\mathcal{L}_{\rm SB} = \mathcal{L}_0 + \lambda\mathcal{L}_{\rm SB}. \tag{8}$$

初期状態 $\rho(0)$ に対する (4) の仮定は設定しない．後のために，系 S は有限系で離散スペクトルをもつものとして，$\mathcal{L}_\mathrm{S}$ のスペクトル分解を導入しておこう: $\mathcal{L}_\mathrm{S}=-i\sum_m\omega_m\tilde{Q}_m$, $\sum_m\tilde{Q}_m=1$, $\tilde{Q}_m\tilde{Q}_n=\delta_{mn}\tilde{Q}_m$. 我々は，式 (3) で導入した射影演算子 $\mathcal{P}$ を用いて系 S の自由度を抽出するわけであるが，今のところ Ω_B として何を採用すべきかはっきりしないので，とりあえず，定常状態であること $\mathcal{L}_\mathrm{B}\Omega_\mathrm{B}=0$ のみを仮定して話を進めることにする．Ω_B が (すなわち $\mathcal{P}$ が) 備えるべき性質を明らかにすることが本稿の一つのテーマである．射影演算子を扱う上で，リウビル演算子との間に成立する幾つかの関係式を知っておくと便利であるが，その詳細は教科書 [1,4,5] や [9] を参照頂くことにして，マスター方程式の導出に特に重要と思われるもののみを挙げておこう:

$$\mathcal{P}\mathcal{L}_\mathrm{SB}\mathcal{P}=0. \tag{9}$$

この関係式は，$H_\mathrm{S}+\lambda H_\mathrm{SB}$ を変えない範囲で H_S と H_SB を再定義 (すなわち，非摂動部分と相互作用部分との間の境界を調節) することで，いつでも成立させることができる．

さて，射影演算子 $\mathcal{P}$ と $\mathcal{Q}$ を用いて von Neumann 方程式 (7) を分解する:

$$\begin{cases}\dfrac{d}{dt}\mathcal{P}\rho(t)=\mathcal{L}_\mathrm{S}\mathcal{P}\rho(t)+\lambda\mathcal{P}\mathcal{L}_\mathrm{SB}\mathcal{Q}\rho(t),\\[2mm] \dfrac{d}{dt}\mathcal{Q}\rho(t)=\mathcal{L}_0'\mathcal{Q}\rho(t)+\lambda\mathcal{Q}\mathcal{L}_\mathrm{SB}\mathcal{P}\rho(t),\end{cases}\qquad \mathcal{L}_0'=\mathcal{L}_0+\lambda\mathcal{Q}\mathcal{L}_\mathrm{SB}\mathcal{Q}. \tag{10}$$

そして，第 2 式を用いて第 1 式の $\mathcal{Q}\rho(t)$ を消去すると，$\mathcal{P}\rho(t)$ で閉じた方程式

$$\frac{d}{dt}e^{-\mathcal{L}_\mathrm{S}t}\mathcal{P}\rho(t)=\lambda^2\int_0^t dt'\,e^{-\mathcal{L}_\mathrm{S}t}\mathcal{P}\mathcal{L}_\mathrm{SB}e^{\mathcal{L}_0'(t-t')}\mathcal{L}_\mathrm{SB}\mathcal{P}\rho(t')+\lambda e^{-\mathcal{L}_\mathrm{S}t}\mathcal{P}\mathcal{L}_\mathrm{SB}e^{\mathcal{L}_0't}\mathcal{Q}\rho(0) \tag{11}$$

が得られる．過去の履歴を引きずる非 Markov 的時間発展を記述する方程式になっている．

これで $\rho_\mathrm{S}(t)$ に対する方程式が得られたともいえるが，このままでは各項が複雑すぎて，実用上使い物にならない．実際，各項は射影演算子やリウビル演算子が複雑に組み合わさったものとなっており，与えられたモデルごとにそれらを具体的に書き下すことは，幾つかの簡単なモデルを除いて不可能である．そこで，通常は相互作用定数 λ が小さいという仮定の下で Markov 近似を施す．この手続きは，数学的には van Hove 極限 [10]

$$\lambda\to 0\quad\text{keeping}\quad\tau=\lambda^2 t\quad\text{finite} \tag{12}$$

で定式化することができる．この極限について詳細に議論するゆとりはないが，スケール変換された時間 τ で現象を眺めるということは，相互作用が弱い場合にそれが積み上がって目に見えて効果をもたらしてくる程度に長い時間 t のところを見ることになっている．あるいは，一般に量子系の緩和過程は単純な指数関数的なものとはならず，短時間領域や長時間領域において指数関数則からずれることが予言されるが [11]，相互作用が弱い状況では指数関数的振舞いを示す時間領域が広いことが知られており [11]，van Hove 極限は，その指数関数的振舞いのみを抽出する操作となっている [11]．電磁相互作用に支配される量子光学の系では非指数関数的緩和が実験的に観測されることはまずなく，van Hove 極限 (Markov 近似) による記述は，実験をよく説明する．

そこで，方程式 (11) に対して (相互作用描像で) van Hove 極限を取る

$$\rho_\mathrm{I}^{(\lambda)}(\tau)=e^{-\mathcal{L}_\mathrm{S}\tau/\lambda^2}\mathcal{P}\rho(\tau/\lambda^2)\xrightarrow{\lambda\to0}\rho_\mathrm{I}(\tau) \tag{13}$$

のであるが，注目は (11) の最後の項である．仮に，初期状態が式 (4) のようになっており，それに対応して射影演算子で $\Omega_\mathrm{B}=\rho_\mathrm{B}$ と選ぶと，この非斉次項は存在しないことに注意しよう．時間のスケール変換 $t\to\tau=\lambda^2 t$ を施すべく方程式 (11) の両辺を λ^2 で除すと，その最後の項が $1/\lambda$ に比例

することになり，van Hove 極限 $\lambda \to 0$ が取れないように思われる．そこで，この困難を回避するために初期状態に (4) の条件を課し，その項を落としておくのが通常の取り扱いである．しかし，ここでは，その項を残したまま話を進める．微積分方程式 (11) を一度積分し，積分方程式に書き直そう:

$$\rho_{\mathrm{I}}^{(\lambda)}(\tau) = \mathcal{P}\rho(0) + \sum_{m,n} \int_0^{\tau} d\tau'\, e^{i(\omega_m - \omega_n)\tau'/\lambda^2} \mathcal{K}_{mn}^{(\lambda)}(\tau - \tau') \rho_{\mathrm{I}}^{(\lambda)}(\tau') + \mathcal{I}^{(\lambda)}(\tau), \tag{14}$$

$$\mathcal{K}_{mn}^{(\lambda)}(\tau) = \mathcal{P}\tilde{Q}_m \mathcal{L}_{\mathrm{SB}} \mathcal{R}_m^{(\lambda)}(\tau) \mathcal{L}_{\mathrm{SB}} \tilde{Q}_n \mathcal{P}, \quad \mathcal{I}^{(\lambda)}(\tau) = \lambda \sum_m \mathcal{P}\tilde{Q}_m \mathcal{L}_{\mathrm{SB}} \mathcal{R}_m^{(\lambda)}(\tau) \mathcal{Q}\rho(0). \tag{15}$$

ここで，$\mathcal{K}_{mn}^{(\lambda)}(\tau)$ と $\mathcal{I}^{(\lambda)}(\tau)$ の主要部分が，いずれも

$$\mathcal{R}_m^{(\lambda)}(\tau) = \int_0^{\tau/\lambda^2} dt\, \mathcal{Q} e^{(\mathcal{L}_0' + i\omega_m)t} \tag{16}$$

に支配されていることに注意しよう．つまり，$\mathcal{R}_m^{(\lambda)}(\tau)$ の van Hove 極限が分かればよい．それは，

$$\mathcal{R}_m^{(\lambda)}(\tau) \xrightarrow{\lambda \to 0} -\frac{\mathcal{Q}}{\mathcal{L}_0 + i\omega_m - 0^+} \quad (\tau > 0) \tag{17}$$

となることが示され [9]，結局，

$$\rho_{\mathrm{I}}^{(\lambda)}(\tau) \xrightarrow{\lambda \to 0} \mathcal{P}\rho(0) + \int_0^{\tau} d\tau'\, \mathcal{K}\rho_{\mathrm{I}}(\tau'), \quad \mathcal{K} = -\sum_m \mathcal{P}\tilde{Q}_m \mathcal{L}_{\mathrm{SB}} \frac{\mathcal{Q}}{\mathcal{L}_0 + i\omega_m - 0^+} \mathcal{L}_{\mathrm{SB}} \tilde{Q}_m \mathcal{P} \tag{18}$$

を得る．微分方程式の形に戻すと，マスター方程式は

$$\frac{d}{d\tau}\rho_{\mathrm{I}}(\tau) = \mathcal{K}\rho_{\mathrm{I}}(\tau), \qquad \rho_{\mathrm{I}}(0) = \mathcal{P}\rho(0) = \mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\{\rho(0)\} \otimes \Omega_{\mathrm{B}} \tag{19}$$

である ($\mathcal{K}$ がモデルごとに具体的にどのような形で与えられるかは，文献 [12] を見るとよい.) すなわち，van Hove 極限の下で，問題の非斉次項 $\mathcal{I}^{(\lambda)}(\tau)$ は消失し，τ の時間で眺めると，系はあたかも相関のない初期状態から出発したかのように振舞うのである．この結論は，通常用いられる式 (4) の仮定に正当性を与えるものであるともいえる．さらには，式 (5)，すなわち $\mathcal{Q}\rho(\tau/\lambda^2) \xrightarrow{\lambda \to 0} 0$ も具体的に証明することができる [9].

以上で，相関のある初期状態の場合にもマスター方程式の導出が可能であり，しかも，初期相関は van Hove 極限の下では系の振舞いに影響を及ぼさないことが分かった．しかし，問題は，式 (17) をいかに示すかに先送りされたに過ぎない．そして，式 (17) を示す上で，リウビル演算子のスペクトルの理解が，そして，射影演算子の正しい選択が重要なのである．

3 リウビル演算子のスペクトル

まず，無限系を扱う上での注意点を述べておこう．これまで，全体系の状態として密度演算子 $\rho(t)$ を書いてきたが，そもそもその存在に注意が必要である．例えば，自由ボソン場 $H_{\mathrm{B}} = \int d\omega\, \omega b_\omega^\dagger b_\omega$ の熱平衡状態 $\rho_{\mathrm{B}} \sim e^{-\beta H_{\mathrm{B}}}$ の規格化 $\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\, e^{-\beta H_{\mathrm{B}}}$ を考えてみるとよい．連続極限がままならないことが分かるであろう．そこで，状態そのものを扱うのではなく，物理量の期待値を通じて状態を議論するアプローチが存在する [8,13]．任意の物理量の期待値を並べたリストが状態を規定すると考えるのである．その際，有限の期待値を与える物理量のみを対象とする点が重要である．実際の実験で無限大という測定値に出会うことはないから，有限の期待値のみで現象を記述できるはずと考え

るのである．本稿では，そうしたアイデアを忠実に実現する数学的枠組み [8, 13] で議論を定式化する努力は怠るが，密度演算子を見かけたら，その状態における期待値に対して成立する式であると考えて頂きたい．特に，規格化 $\mathrm{tr}\,\rho(t)=1$ は，状態 $\rho(t)$ における “1” の期待値を与える式である．

さて，期待値で議論するということで，環境系 B の状態 Ω_B における相関関数を考えよう．それが

$$\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{X(t)Y\Omega_\mathrm{B}\}=\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{Xe^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}Y\Omega_\mathrm{B}\}\xrightarrow{t\to\infty}\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{X\Omega_\mathrm{B}\}\,\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{Y\Omega_\mathrm{B}\} \tag{20}$$

のように時間的隔たりを大きくしたときに相関が切れるとき，状態 Ω_B は B の非摂動時間発展 $e^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}$ に関して「混合性」を持つといわれる [7,8,14]．X や Y は，B の任意の (超) 演算子である．そうした状態の典型例としては，上でも取り上げた自由ボソン場の熱平衡状態 $\Omega_\mathrm{B}\sim e^{-\beta H_\mathrm{B}}$ が挙げられる．具体的に計算してみるとよい [9]．Wick の定理と Riemann–Lebesgue の定理で示すことができる．熱平衡状態以外でも，二つの異なる温度の熱浴間に一定の流れが生じている非平衡定常状態が，具体的に混合性 (20) を証明できる非自明で興味深い例として知られている [15]．

この混合性があると，次のことが帰結される．環境系 B の状態として，混合性を持つ状態 Ω_B が有界演算子 K_i で摂動を受けた状態

$$\rho_\mathrm{B}=\sum_i K_i\Omega_\mathrm{B}K_i^\dagger \tag{21}$$

を考えよう．Ω_B が混合性を持つことから，$\rho_\mathrm{B}=Y\Omega_\mathrm{B}$ として式 (20) を適用すると，

$$\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{X(t)\rho_\mathrm{B}\}=\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{Xe^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}\rho_\mathrm{B}\}\xrightarrow{t\to\infty}\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{X\Omega_\mathrm{B}\}\,\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{\rho_\mathrm{B}\}=\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{X\Omega_\mathrm{B}\}. \tag{22}$$

これは，環境系 B が状態 ρ_B から $e^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}$ で時間発展し，Ω_B に「緩和」することを意味している:

$$e^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}\rho_\mathrm{B}\xrightarrow{t\to\infty}\Omega_\mathrm{B}. \tag{23}$$

そして，このことは，環境系 B のリウビル演算子 $\mathcal{L}_\mathrm{B}$ が連続スペクトルとともに唯一の点スペクトル 0 を持つことを示している．つまり，時間発展演算子をスペクトル分解すると，

$$e^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}\rho_\mathrm{B}=\Pi_0\rho_\mathrm{B}+\int e^{-i\nu t}\,d\Pi(\nu)\rho_\mathrm{B}. \tag{24}$$

$d\Pi(\nu)$, Π_0 は，それぞれ連続スペクトル ν，点スペクトル 0 に属する射影演算子である．

さらに，系 S も含めた合成系 $\mathrm{S}\otimes\mathrm{B}$ を考えよう．初期状態として

$$\rho(0)=\sum_i L_i(1_\mathrm{S}\otimes\Omega_\mathrm{B})L_i^\dagger \tag{25}$$

を考え，環境系の非摂動時間発展 $e^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}$ の下で合成系の物理量 $D=\sum_j A_j\otimes X_j$ の時間発展を追いかける．式 (22) と同様に Ω_B の混合性 (20) を適用すると，

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\{De^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}\rho(0)\}&=\sum_i\sum_j\mathrm{tr}_\mathrm{B}[X_je^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}\,\mathrm{tr}_\mathrm{S}\{A_jL_i(1_\mathrm{S}\otimes\Omega_\mathrm{B})L_i^\dagger\}]\\&\xrightarrow{t\to\infty}\sum_i\sum_j\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{X_j\Omega_\mathrm{B}\}\,\mathrm{tr}\{A_jL_i(1_\mathrm{S}\otimes\Omega_\mathrm{B})L_i^\dagger\}=\mathrm{tr}[D(\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{\rho\}\otimes\Omega_\mathrm{B})].\end{aligned} \tag{26}$$

これは，合成系が

$$e^{\mathcal{L}_\mathrm{B}t}\rho(0)\xrightarrow{t\to\infty}\mathrm{tr}_\mathrm{B}\{\rho(0)\}\otimes\Omega_\mathrm{B} \tag{27}$$

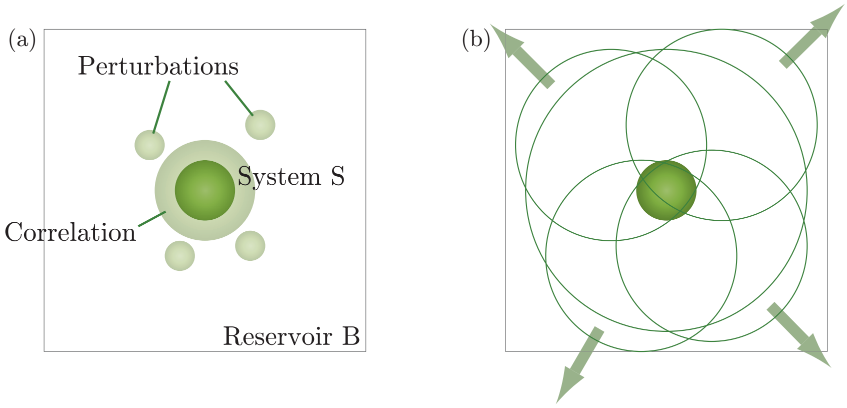

図 1　(a) 初期状態 (25).（b) 初期相関や摂動は無限の彼方へと伝播し，(27) が残される．

と緩和し，しかも系 S と環境系 B との間の相関が切れることを意味している．そして，環境系 B のリウビル演算子 $\mathcal{L}_{\mathrm{B}}$ の点スペクトル 0 に属する射影演算子 Π_0 が，合成系の状態に

$$\Pi_0\rho = \mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\{\rho\} \otimes \Omega_{\mathrm{B}} \tag{28}$$

と作用することを教えている．

以上で，様々なことが分かった．まず，混合性 (20) の帰結として，環境系 B のリウビル演算子 $\mathcal{L}_{\mathrm{B}}$ が点スペクトル 0 を持つことが分かった．そして重要なのは，以上の議論はすべて環境系 B の非摂動時間発展 $e^{\mathcal{L}_{\mathrm{B}}t}$ に関するものであり，系 S との相互作用は考えていないことである．つまり，非摂動系の時間発展で (23) や (27) のような一方向的な緩和が起こるのであり，相互作用は重要ではない．ここで起こっていることを図に描いて説明することを試みると，図 1 のようになろう．初期状態 (25) において L_i で表現されていた系 S と環境系 B との間の初期相関や Ω_{B} に対する摂動は，環境系 B の非摂動時間発展 $e^{\mathcal{L}_{\mathrm{B}}t}$ によって無限の彼方へと伝播していく．環境系 B に果てはないので，それらは行ったっきり戻ってこない．さらに，我々は有限の期待値を与える物理量しか対象としていないことを思い起こそう．言い換えると，環境系 B の物理量としては，事実上有限の領域内に分布したもののみを見ているのである．したがって，その分布領域よりも外へ伝播すると，もはや我々はそれを感知できなくなり，式 (27) のように相関も見えなくなってしまうのである．そして，あとには定常状態 Ω_{B} が残され，それが点スペクトル 0 に対応している．t が有限の範囲内ではあくまでユニタリー発展なので不可逆という言葉はふさわしくないが，ここに一方向的に緩和していく振舞いの根源があるのである [van Hove 極限は (27) で $t \to \infty$ の極限を実行しており，それが非ユニタリー発展の方程式 (19) を導いている]．そして，前節で導いた van Hove 極限の下での初期相関の影響の消失が，環境系 B の非摂動時間発展による (27) の反映であることも理解できよう．

これらは，Ω_{B} の「混合性」(20) の帰結である．また，この節では初期状態 $\rho(0)$ として (25) を想定してきた．次節では，そうした要素の必要性を見ることにしよう．

4　正しい射影演算子の選択

残された課題は，射影演算子選択の指針を明らかにすることである．その答えは，

$$\mathcal{P} = \Pi_0. \tag{29}$$

このとき，全体系の初期状態 $\rho(0)$ は (25) のようなものでなければならない．その理由を理解するために，そのように選ばなかったときに何が起こるかを見てみよう．第 2 節の議論で残されていたの

は，$\mathcal{R}_m^{(\lambda)}(\tau)$ の van Hove 極限 (17) の証明である．ここでは，$\mathcal{R}_m^{(\lambda)}(\tau)$ を

$$\mathcal{R}_m^{(\lambda)}(\tau) = \int_0^{\tau/\lambda^2} dt\, \mathcal{Q}e^{(\mathcal{L}_0+i\omega_m)t} + \lambda \int_0^{\tau/\lambda^2} dt \int_0^t dt'\, e^{(\mathcal{L}_0+i\omega_m)t} e^{-\mathcal{L}_0 t'} \mathcal{Q}\mathcal{L}_{\mathrm{SB}}\mathcal{Q}e^{\mathcal{L}_0' t'} \tag{30}$$

と展開した最初の項のみを見てみよう．式 (25) を初期状態として想定した場合に $\mathcal{L}_{\mathrm{B}}$ のスペクトルが点スペクトル 0 と連続スペクトルからなることから，式 (24) のようにスペクトル分解して，

$$\begin{aligned}\int_0^{\tau/\lambda^2} dt\, \mathcal{Q}e^{(\mathcal{L}_0+i\omega_m)t} &= \int_0^{\tau/\lambda^2} dt\, \mathcal{Q}\Pi_0 e^{(\mathcal{L}_{\mathrm{S}}+i\omega_m)t} + \int_0^{\tau/\lambda^2} dt\, \mathcal{Q}(1-\Pi_0)e^{(\mathcal{L}_0+i\omega_m)t} \\ &= \frac{\tau}{\lambda^2}\mathcal{Q}\Pi_0\tilde{Q}_m + \sum_{n\neq m}\mathcal{Q}\Pi_0\tilde{Q}_n \frac{e^{i(\omega_m-\omega_n)\tau/\lambda^2}-1}{i(\omega_m-\omega_n)} + \mathcal{Q}(1-\Pi_0)\frac{e^{(\mathcal{L}_0+i\omega_m)\tau/\lambda^2}-1}{\mathcal{L}_0+i\omega_m-0^+}\end{aligned} \tag{31}$$

を得る．ここで注目は，点スペクトルの寄与である第 1–2 項である．特に，第 1 項が van Hove 極限 $\lambda \to 0$ で発散してしまうことが分かるであろう．ところが，射影演算子 $\mathcal{P}$ を式 (29) のように選べば，$\mathcal{Q}\Pi_0 = (1-\Pi_0)\Pi_0 = 0$ であり，その発散の困難はなくなる．つまり，射影演算子 $\mathcal{Q}$ が点スペクトルの寄与を除去することが重要なのである．それに失敗してしまうと，マスター方程式の導出はできなくなってしまう．これが，式 (29) が必要な理由である．物理的にいうと，系は (27) に向かっていこうとしているのに， 式 (28) とは異なる射影演算子で系の意図とは無関係な状態に強制的に射影してしまうと，系は悲鳴を上げてしまうのである．

また，仮に，点スペクトルが 0 以外にも存在したとしよう．すると，正しい射影演算子 $\mathcal{Q} = 1-\Pi_0$ は点スペクトル 0 を取り除くことはできるが，それ以外の点スペクトルを除去することができず，再び van Hove 極限が存在しない困難に陥ってしまう．したがって，点スペクトルは 0 のみであることが重要であって，それを保証するのが式 (25) の Ω_{B} の混合性なのである [7,8,14].

さらに，混合性を持つ様々な状態 Ω_{B} が初期状態に含まれていて，点スペクトル 0 が縮退してしまうと，一つの Ω_{B} で定義された $\mathcal{Q}$ ではそのすべての 0 の寄与を取り除くことができない．したがって，初期状態は式 (25) のように一つの Ω_{B} のみを含んでいるものでなければならないのである．この条件は，かなり強い制約を与えているように見えるかもしれないが，実際の物理を記述する上ではそれほど問題にならない．複数の Ω_{B} が含まれている状態というのは，例えば，異なる温度の状態の重ね合わせや，磁性体で縮退している基底エネルギーのマクロに異なる基底状態を重ね合わた状態のように，通常の状況では存在しない状態だからである．そして，一つの Ω_{B} が指定するセクターに含まれるすべての状態は数学的に (25) の形に書けるので [13]，それほど強い非平衡状態を議論するのでなければ，これで十分である．

結局，射影演算子 $\mathcal{P}$ に添えられるべき Ω_{B} は，初期状態に (25) の形で含まれ混合性を持った状態である．これが射影演算子法が機能し，マスター方程式の導出が可能であるための条件である．

5　おわりに

本稿では射影演算子法について議論してきたが，系がどのように振舞うかは，それを議論する手法の選択とは無関係であり，マスター方程式の導出に射影演算子法が本質的な役割を果たしているということはないであろう．ここで興味深いのは，自然が「射影」を実現していることである．式 (27) を見ると，環境系の時間発展が，射影演算子法で用いられるのと同じ形の射影 (3) を実現していることが分かるであろう．射影演算子法は，$\mathcal{P} = \Pi_0$ によってただそれを拾い上げているだけといえるかもしれない．実際，射影演算子 $\mathcal{P}$ を導入せずとも，マスター方程式の導出は可能なのである．式 (27) においてさらに示唆に富んでいるのは，式 (2) の部分対角和が系の時間発展の帰結として実現されていることだ．部分対角和 (平均操作) を実行するのは，我々ではなく，自然だったのである．

最後に，本研究会の主要なテーマの一つのであった高エネルギー重イオン衝突の物理では，重イオンの衝突で生じた高温・高密度物質の極度に非平衡なダイナミクスの理解が求められている．本稿で議論したのは，Ω_{B} が指定する系の大域的な様相 (グローバルな温度など) の土台の上でのダイナミクスである．したがって，局所的な温度や温度が変化していくような非平衡現象を記述することは今のままではできない．一方で，第 3 節で触れた非平衡定常状態を扱う枠組みの整備も進み [15]，また，Thermo Field Dynamics の枠組みで非平衡現象を扱う試みも精力的に進められている [16]．今後の発展が楽しみなテーマである．

田﨑秀一，中里弘道，大場一郎，木村元，Paolo Facchi，Saverio Pascazio の各氏との議論に感謝するとともに，基研研究会「熱場の量子論とその応用」の主催者に御礼申し上げます．

*Email address: kazuya.yuasa@aist.go.jp

[1] 戸田盛和・久保亮五 編, 統計物理学, 第 2 版 (岩波書店, 東京, 1978); R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 1995).

[2] Y. Tanimura, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 082001 (2006).

[3] D. F. Walls and G. J. Milburn, *Quantum Optics* (Springer, Berlin, 1994); M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997); C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg, *Atom-Photon Interactions* (Wiley, Weinheim, 1998); H. J. Carmichael, *Statistical Methods in Quantum Optics 1* (Springer, Berlin, 1999).

[4] L. Mandel and E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995); C. W. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 2004).

[5] S. Nakajima, Prog. Theor. Phys. **20**, 948 (1958); R. Zwanzig, J. Chem. Phys. **33**, 1338 (1960); F. Haake, in *Quantum Statistics in Optics and Solid-State Physics*, Vol. 66 of *Springer Tracts in Modern Physics*, edited by G. Höhler (Springer, Berlin, 1973), pp. 98–168.

[6] V. Romero-Rochin and I. Oppenheim, Physica A **155**, 52 (1989); V. Romero-Rochin, A. Orsky, and I. Oppenheim, *ibid.* **156**, 244 (1989); V. Gorini, M. Verri, and A. Frigerio, *ibid.* **161**, 357 (1989).

[7] V. Jakšić and C.-A. Pillet, Commun. Math. Phys. **178**, 627 (1996); Ann. Inst. Henri Poincaré A **67**, 425 (1997); V. Bach, J. Fröhlich, and I. M. Sigal, J. Math. Phys. **41**, 3985 (2000).

[8] O. Bratteli and D. W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 1–2*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 2002).

[9] S. Tasaki, K. Yuasa, P. Facchi, G. Kimura, H. Nakazato, I. Ohba, and S. Pascazio, Ann. Phys. (N.Y.) (to be published) [quant-ph/0602184 (2006)]; K. Yuasa, S. Tasaki, P. Facchi, G. Kimura, H. Nakazato, I. Ohba, and S. Pascazio, *ibid.* (to be published) [quant-ph/0602185 (2006)].

[10] L. van Hove, Physica **21**, 517 (1955); **23**, 441 (1957); E. B. Davies, Commun. Math. Phys. **39**, 91 (1974); *Quantum Theory of Open Systems* (Academic Press, London, 1976); P. F. Palmer, J. Math. Phys. **18**, 527 (1977); H. Spohn and J. L. Lebowitz, Adv. Chem. Phys. **38**, 109 (1979); H. Spohn, Rev. Mod. Phys. **52**, 569 (1980); I. Ojima, J. Stat. Phys. **56**, 203 (1989); L. Accardi, Y. G. Lu, and I. Volovich, *Quantum Theory and Its Stochastic Limit* (Springer, Berlin, 2002).

[11] H. Nakazato, M. Namiki, and S. Pascazio, Int. J. Mod. Phys. B **10**, 247 (1996); P. Facchi and S. Pascazio, Phys. Lett. A **241**, 139 (1998); Physica A **271**, 133 (1999).

[12] P. Facchi, S. Tasaki, S. Pascazio, H. Nakazato, A. Tokuse, and D. A. Lidar, Phys. Rev. A **71**, 022302 (2005).

[13] R. Haag, *Local Quantum Physics: Fields, Particles, Algebras*, 2nd revised and enlarged ed. (Springer, Berlin, 1996); 荒木不二洋, 量子場の数理 (岩波書店, 東京, 1996); H. Araki, *Mathematical Theory of Quantum Fields* (Oxford University Press, New York, 1999).

[14] V. Arnold and A. Avez, *Ergodic Problems of Classical Mechanics* (Benjamin, New York, 1968); M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis*, revised and enlarged edition ed. (Academic Press, San Diego, 1980).

[15] D. Ruelle, J. Stat. Phys. **98**, 57 (2000); W. Aschbacher, V. Jakšić, Y. Pautrat, and C.-A. Pillet, mp_arc 05-207 (2005); S. Tasaki and J. Takahashi, cond-mat/0606259 (2006).

[16] H. Umezawa, *Advanced Field Theory: Micro, Macro, and Thermal Physics* (American Institute of Physics, New York, 1993); H. Umezawa 著, 有光敏彦・有光直子 訳, 場の量子論: ミクロ，マクロ，そして熱物理学の最前線 (培風館, 東京, 1995).