開放系の物理

蘆田 祐人（東大理）

集中講義資料（京大）

概要

従来の物性物理学や量子統計力学の枠組みは、熱平衡にある物理系の法則や多彩な現象を解明する上で多大な成功を収めてきた。一方で、外界環境との相互作用が顕著な物理系—開放系—の理解はその多くが未だ発展途上である。本講義では、開放系の物理に関して基礎的事項からはじめ、最近のいくつかの発展まで学ぶことを目指す。特に、量子光学分野で発展してきた量子測定理論からはじめ、環境自由度との相関が顕著な場合（強結合開放系）の基礎的事項まで理解することを目指す。前者は非エルミート物理や測定誘起臨界性など最近の話題を理解するための基礎を与える。後者は、量子不純物系や量子散逸相転移など物性物理の伝統的な話題とも深く関連する話題であり、また回路量子電磁力学や共振器物質系など最近の進展を理解する上でも重要である。本講義ではこれらの発展についても、具体例を交えて可能な限り紹介する。

*last update: 2023/10/31

*以前に集中講義（中央大）や東大の講義「現代物理学入門」で用いた資料をベースに加筆・修正したバージョンです。

目次

第 I 部　弱結合開放系　6

1　量子測定理論　6
1.1　導入：二準位系の間接測定模型　6
1.2　量子測定理論　9
1.2.1　Positive operator-valued measure (POVM)　9
1.2.2　Completely positive trace-preserving (CPTP) map　10
1.2.3　Steinespring 表現と Kraus 表現　10
1.2.4　量子非破壊測定　12
1.2.5　Cavity QED における光子数の量子非破壊測定　13
1.3　量子連続測定　15
1.3.1　量子トラジェクトリー　15
1.3.2　量子マスター方程式　18
1.3.3　測定下の物理系と散逸系　18
1.3.4　二準位原子の自発放射　19
1.3.5　光子数測定　20
1.3.6　減衰調和振動子　20
1.3.7　拡散過程を用いた量子トラジェクトリー　21
1.3.8　連続位置測定下の粒子　22
1.4　弱結合量子散逸系　23
1.4.1　Born-Markov 近似を用いた量子マスター方程式の導出　23
1.4.2　自発放射（Wigner-Weisskopf 理論）　24
1.5　開放系の多体物理　25
1.5.1　測定誘起臨界現象　26
1.5.2　系-環境間エンタングルメントの相転移と臨界現象　28
1.5.3　散逸ロス下の量子多体系　32

2　非エルミート物理　34
2.1　導入　34
2.2　有効非エルミートハミルトニアン　35
2.3　非エルミート行列の諸性質　36
2.3.1　導入：固有空間とエルミート行列　36
2.3.2　ジョルダン標準形・非直交性・双直交性　37
2.3.3　例外点　40
2.3.4　擬エルミート性・PT 対称性　41
2.3.5　無限次元に関する注意　45
2.4　非エルミート物理に関する話題　46
2.4.1　非ユニタリ場の理論と臨界現象　46
2.4.2　測定誘起臨界性・非平衡ダイナミクス　49
2.4.3　非エルミートバンドトポロジー　51

第 II 部　強結合開放系　56

3　導入：Orthogonalization catastrophe　57

4 二準位開放系 59
4.1 Spin-Boson 模型 . . . 59
4.1.1 ディスエンタングリングユニタリ変換 . . . 59
4.2 近藤問題 . . . 62
4.2.1 導入 . . . 62
4.2.2 摂動的繰り込み群 . . . 63
4.2.3 ディスエンタングリングユニタリ変換 . . . 65
4.3 近藤問題と Spin-Boson 模型の対応 . . . 67
4.3.1 ボソン化法（速習） . . . 67
4.3.2 近藤問題と Spin-Boson 模型の等価性 . . . 72

5 多準位開放系 74
5.1 ポーラロン . . . 74
5.2 共振器/導波管量子電磁力学（Cavity/Waveguide QED） . . . 75

6 Gaussian 状態と変分原理 78
6.1 変分多体波動関数 . . . 78
6.2 Bosonic Gaussian 多体状態 . . . 79
6.2.1 導入：cavity QED, BEC . . . 79
6.2.2 一般論 . . . 82
6.3 Fermionic Gaussian 多体状態 . . . 89
6.3.1 導入：BCS 理論 . . . 89
6.3.2 一般論 . . . 93
6.4 時間依存変分原理 . . . 102
6.4.1 導入 . . . 102
6.4.2 複素変数における変分原理 . . . 103
6.4.3 実数変数における変分原理 . . . 104
6.4.4 虚時間発展 . . . 106
6.4.5 Gaussian 変分状態における変分原理 . . . 107
6.5 強結合開放系への応用 . . . 109
6.5.1 量子不純物系 . . . 110
6.5.2 基底状態 . . . 111
6.5.3 非平衡多体ダイナミクス . . . 114

付録 A 回路量子電磁力学（Circuit QED） 117
A.1 基礎的事項 . . . 117
A.2 ジョセフソン接合系の量子散逸相転移 . . . 120

付録 B 朝永-Luttinger 液体 123
B.1 基礎的事項 . . . 123
B.2 臨界現象と共形次元 . . . 125
B.3 1 次元スピン系の臨界状態 . . . 127

はじめに

学部の授業で学ぶように、量子系の時間発展はハミルトニアンと呼ばれる線形演算子を生成子としたユニタリ演算子で記述される。従ってハミルトニアンはエルミートでなくてはならない。これは確率の保存（量子状態のノルム保存）を保証するための量子力学における基礎的要請の一つである。ただし、このような量子系の記述は、念頭にある物理系の自由度を全て余すことなく取り入れていることを前提に成立する。この意味で、エルミートなハミルトニアンに基づくユニタリなダイナミクスとは、暗に「孤立系」のものを指している。

しかし、果たして身の回り（実験室）の量子系はユニタリダイナミクスに従っているだろうか。もちろんその答えは時間スケールと念頭にある量子系に強く依存するが、究極的には長い時間待てば孤立系に基づいた記述は（この世界に存在する自由度を余すことなく取り入れない限り）どこかで破綻する。例えば理想的な孤立系といえる冷却原子系ですら、レーザー光との相互作用や黒体放射などの影響により、完全な孤立系ではない。このように考えると、外部環境と相互作用する量子系（すなわち「開放系」）の物理を理解することの重要性は自明ともいえる。

ではこのような開放系を（ある程度）統一的に記述するための理論的枠組みはあるのだろうか。本講義では、二つの基礎的な開放系のクラスを取り上げ、それらを記述するための形式論について学び、開放系で発現する豊かな現象を理解することを目指す。

一つ目のクラスは、着目系と環境が弱く相互作用し、ボルン-マルコフ近似が成立する「弱結合開放系」である（図 1 上段)。物理的には、例えば連続測定下の系や、原子・分子・光（AMO）分野で実現している種々の散逸系がこのクラスに属する。手法としては、量子測定理論、量子トラジェクトリー法、マスター方程式、非エルミートハミルトニアンなどがある。これらの形式論を学んだのち、いくつかの具体例に適用しながら最近のいくつかの話題を理解することを目指す。

二つ目のクラスとして、着目している量子系と環境自由度の間に無視できない強い相関が存在し、ボルン-マルコフ近似が破綻する「強結合開放系」を取り上げる（図 1 下段)。着目系が少数自由度系（単一キュービット/粒子）の場合は、物性分野で量子不純物系としても良く知られたクラスの問題である。量子光学・AMO 分野の共振器/回路 QED で最近実現した超強結合領域も、量子電磁場を環境自由度と考えれば、この範疇の問題とみなせる。さらに着目系が量子多体系の場合は、最近発展している共振器物質系が例として挙げられる。本講義では、強結合開放系に適用可能な汎用性の高い手法として、ディスエンタングリングユニタリ変換や Gaussian 変分状態を用いた手法を扱う。また関連する最近のいくつかの発展を理解することも目指す。

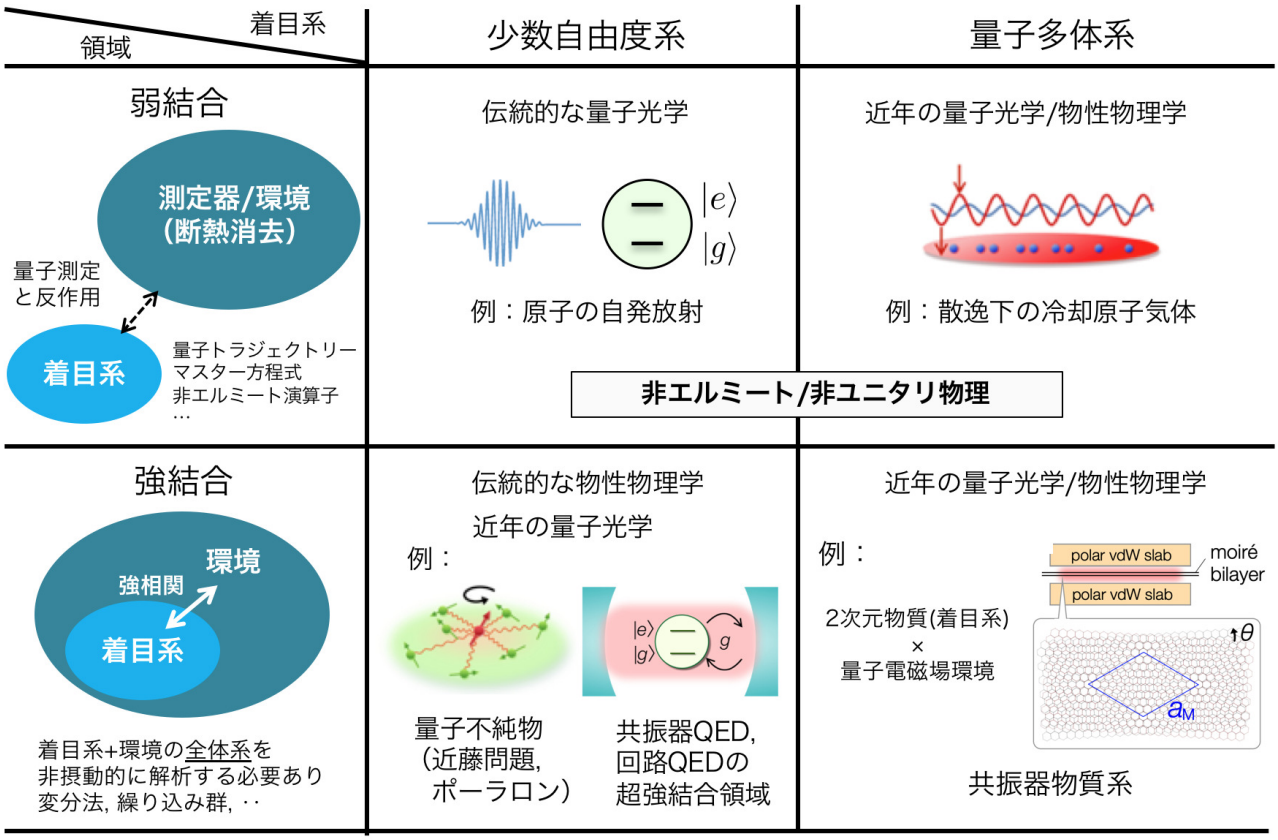

図 1　(上段) 弱結合開放系と (下段) 強結合開放系.

第 I 部
弱結合開放系

ここでは開放系のうち、着目系と環境自由度の結合が弱く、ボルン-マルコフ近似を用いることで大胆な単純化が行えるクラスの物理系（弱結合開放系）について学ぶ。この単純化により環境自由度は理論から除去され、その代償として着目系の量子ダイナミクスが実効的に非ユニタリとなる。対応する発展方程式は、いわゆる量子マスター方程式として良く知られている。このような弱結合開放系の研究は、歴史的には熱浴と弱く接した「散逸量子系」の熱平衡化の問題の文脈でなされ [例えば, Davies, Commun. Math. Phys. 39, 91 (1974)]、その後量子光学を始めとする AMO 分野に広く応用されるに至った。特に後者では、量子連続測定理論を用いた実質的な再定式化がなされ、（散逸系とは異なる）被測定系ならではの本質的に新しい側面も最近になって明らかとなってきた。第 I 部では、この量子測定理論に基づいた開放系の定式化をまず行い、非ユニタリ/非エルミート量子系の基礎的諸性質といくつかの最近の発展を紹介する。

1　量子測定理論

1.1　導入：二準位系の間接測定模型

量子測定理論の目的は、測定過程の下での量子状態の変化および、得られる測定結果の統計的振る舞いを精緻に記述することである。ここでは間接測定模型と呼ばれる標準的な問題設定を考えよう。これは被測定系を測定器と相互作用させて、この測定器の自由度に対して射影測定を行うことで、間接的に被測定系についての情報を得るものである。後で見るように、このような問題設定により量子測定理論の一般論が展開できるが、その前に典型的な例として被測定系が「二準位系」で測定器が「ボソン自由度（量子電磁場）」という簡単な場合を以下でまず考えよう。

このような物理系は（第 II 部でも詳しく取り扱う）Spin-Boson 模型で記述できるが、相互作用が十分弱ければ回転波近似が妥当で、つぎの有効ハミルトニアンで記述される（簡単のためボソンは単一モードのみ考える）：

$$\hat{H}_{\rm JC} = \frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}^z + \hbar\omega_c \hat{b}^\dagger \hat{b} + \hbar\gamma(\hat{\sigma}^- \hat{b}^\dagger + \hat{\sigma}^+ \hat{b}). \tag{1}$$

ここで

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

$$\hat{\sigma}^\pm = \frac{\hat{\sigma}^x \pm i\hat{\sigma}^y}{2},\ \ [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1 \tag{3}$$

である。この有効ハミルトニアンは次の励起数

$$N_{\rm ex} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^z + 1) + \hat{b}^\dagger \hat{b} \tag{4}$$

を保存する。ここでは $N_{\rm ex} = 1$ のセクターに着目しよう。初期状態として二準位系が励起状態、ボソンが真空状態の積状態を考える：

$$\hat{\rho}_{\rm tot}(0) = |e\rangle\langle e| \otimes |0\rangle\langle 0|. \tag{5}$$

被測定系と測定器両方の自由度を含めた全体系の時間発展はユニタリである：

$$\hat{\rho}_{\rm tot}(t) = \hat{U}\hat{\rho}_{\rm tot}(0)\hat{U}^\dagger, \quad \hat{U} = e^{-i\hat{H}_{\rm JC}t}. \tag{6}$$

一定時間 t の後に被測定系と測定器は相互作用によりエンタングルする。その後、測定器に関して射影測定を行う。いま $N_{\rm ex} = 1$ は保存するので、測定結果はボソンを 0 個あるいは 1 個観測する場合の二通りである。それぞれの測定結果に対応する射影演算子は

$$\hat{P}_0 = |0\rangle\langle 0|, \quad \hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1| \tag{7}$$

であり

$$\hat{I}_A = \sum_{m=0}^{1} \hat{P}_m \tag{8}$$

を満たす。ここで $\hat{I}_A$ は、いま興味がある $N_{\rm ex} = 1$ セクターの測定器状態空間に関する恒等演算子である。この一連の操作を、初期状態に作用する線形演算子 $\mathcal{E}_m$ として次で表す：

$$\mathcal{E}_m(\hat{\rho}_S(0)) \equiv {\rm Tr}_A \left[\left(\hat{I}_S \otimes \hat{P}_m \right) \hat{\rho}_{\rm tot}(t) \left(\hat{I}_S \otimes \hat{P}_m \right) \right], \tag{9}$$

$$\hat{\rho}_S(0) = |e\rangle\langle e|. \tag{10}$$

ここで ${\rm Tr}_A$ は測定器の自由度に関するトレースで、$\mathcal{E}_m$ が測定結果 $m = 0, 1$ に依存していることに注意せよ。それぞれの測定結果を得る確率 p_m はこの状態を被測定系の自由度についてもトレースをとることで

$$p_m = {\rm Tr}_S \left[\mathcal{E}_m(\hat{\rho}_S(0)) \right] \tag{11}$$

で与えられ、測定後の状態（post-measurement state）は p_m で状態を規格化した

$$\hat{\rho}_{S,m} = \frac{\mathcal{E}_m(\hat{\rho}_S(0))}{p_m} \tag{12}$$

で与えられる。

さて、測定過程を特徴付ける演算子 $\mathcal{E}_m$ を（測定器の自由度が陽に現れない形で）被測定系に作用する演算子のみで表すことを考えよう。そのために次の Kraus 演算子：

$$\hat{M}_m = \langle m|\hat{U}|0\rangle \tag{13}$$

を導入する。ここで $\hat{U}$ は被測定系と測定器の全体系に作用する演算子のため、$\hat{M}_m$ は被測定系に作用する演算子であることに注意されたい。これを用いると、式 (9) の測定過程 $\mathcal{E}_m$ は被測定系の自由度のみを用いて

$$\mathcal{E}_m(\hat{\rho}_S(0)) = {\rm Tr}_A \left[\left(\hat{I}_S \otimes \hat{P}_m \right) \hat{U}\hat{\rho}_S(0) \otimes |0\rangle\langle 0|\hat{U}^\dagger \left(\hat{I}_S \otimes \hat{P}_m \right) \right] \tag{14}$$

$$= \langle m|\hat{U}|0\rangle \hat{\rho}_S(0) \langle 0|\hat{U}^\dagger|m\rangle \tag{15}$$

$$= \hat{M}_m \hat{\rho}_S(0) \hat{M}_m^\dagger \tag{16}$$

と表せる。これにより式 (9) の測定過程 $\mathcal{E}_m$ は被測定系の自由度のみを用いて

$$\mathcal{E}_m(\hat{\rho}_S(0)) = \hat{M}_m \hat{\rho}_S(0) \hat{M}_m^\dagger, \quad \hat{\rho}_S(0) = |e\rangle\langle e| \tag{17}$$

と表せる。測定結果 m を得る確率は

$$p_m = \mathrm{Tr}_S \left[\hat{\rho}_S(0) \hat{E}_m \right], \quad \hat{E}_m = \hat{M}_m^\dagger \hat{M}_m \tag{18}$$

と書ける。ここで $\hat{E}_m$ は Positve Operator-Valued Measure (POVM) と呼ばれる。式 (8) から、POVM の和は次の完全性条件を満たす：

$$\sum_{m=0}^{1} \hat{E}_m = \sum_{m=0}^{1} \hat{M}_m^\dagger \hat{M}_m = \hat{I}_S. \tag{19}$$

従って、測定確率の和は

$$\sum_{m=0}^{1} p_m = 1 \tag{20}$$

を満たす。

時間発展 $\mathcal{E}_m$ は測定結果に条件づけられた過程である。もう一つの重要な概念は、測定結果に条件づけない（つまり測定結果についてアンサンブル平均を行った）場合の状態変化である。これは具体的には

$$\mathcal{E}(\hat{\rho}_S(0)) \equiv \sum_{m=0}^{1} \mathcal{E}_m(\hat{\rho}_S(0)) = \sum_{m=0}^{1} \hat{M}_m \hat{\rho}_S(0) \hat{M}_m^\dagger \tag{21}$$

と書き下せ、記号 $\mathcal{E}$ で表す。

以上のことは任意の相互作用時間 τ について成立するが、後で連続測定を考える際に重要となる相互作用時間が短い極限 $\gamma\tau \ll 1$ を考えよう。まず測定結果が $m = 1$ の場合の状態変化は、$\hat{U} = e^{-i\hat{H}_{\mathrm{JC}}\tau}$ を $\gamma\tau$ について展開することで、

$$\hat{\rho}_{S,1} = \frac{\tau \hat{L} \hat{\rho}_S(\tau) \hat{L}^\dagger}{p_1} \tag{22}$$

$$\hat{\rho}_S(\tau) = \hat{U}_S |e\rangle\langle e| \hat{U}_S^\dagger, \quad \hat{U}_S = e^{-i\Delta\hat{\sigma}^z\tau/2} \tag{23}$$

と書ける。ここで Lindblad 演算子（あるいはジャンプ演算子とも呼ばれる）を

$$\hat{L} \equiv \sqrt{\gamma^2\tau}\hat{\sigma}^- \tag{24}$$

で定義したが、これは光子検出（$m = 1$）に対応した Kraus 演算子と定数倍を別にして一致する：

$$\hat{M}_1 \simeq \sqrt{\tau}\hat{L}. \tag{25}$$

対応する測定確率は

$$p_1 = \tau \mathrm{Tr}_S \left[\hat{L} \hat{\rho}_S(\tau) \hat{L}^\dagger \right] \tag{26}$$

となる。状態変化 (22) は量子ジャンプとも呼ばれ、物理的には、光子検出により「着目系である二準位系が基底状態に脱励起した（従って $\hat{\rho}_{S,1} = |g\rangle\langle g|$）」という情報を、観測者が得たことを意味する。

一方で、光子が検出されず測定結果が $m = 0$ の場合は、$\gamma\tau$ の leading term のみを考えると状態変化は

$$\hat{\rho}_{S,0} = \frac{1}{p_0}\left[\hat{\rho}_S(\tau) - \frac{\tau}{2}\left\{\hat{L}^\dagger\hat{L}, \hat{\rho}_S(\tau)\right\}\right] \tag{27}$$

で与えられ、測定確率は

$$p_0 = 1 - \tau \mathrm{Tr}_S\left[\hat{L}\hat{\rho}_S(\tau)\hat{L}^\dagger\right] \tag{28}$$

で記述できる。

さらに τ が被測定系内部のダイナミクスの時間スケールよりも十分短い（$\tau\Delta \ll 1$）とすれば、測定結果 $m = 0$ に対応する Kraus 演算子はさらに簡単な形になる：

$$\hat{M}_0 = 1 - i\hat{H}_{\mathrm{eff}}\tau/\hbar. \tag{29}$$

ここで次の非エルミート有効ハミルトニアンを導入した：

$$\hat{H}_{\mathrm{eff}} = \frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}^z - \frac{i}{2}\hat{L}^\dagger\hat{L} = \frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}^z - \frac{i\gamma^2\tau}{2}|e\rangle\langle e|. \tag{30}$$

つまり、測定結果が $m = 0$ で測定器自由度が初期状態から変化しない場合には、その測定の反作用の効果が被測定系のダイナミクスを記述する有効ハミルトニアンの「非エルミート性」として捉えられる。

1.2 量子測定理論

1.2.1 Positive operator-valued measure (POVM)

ここからは上で導入した概念を抽象化することで、量子測定理論の一般論を紹介する。まず $\mathrm{POVM}\left\{\hat{E}_m\right\}$ を次の条件を満たす線形演算子の集合として定義する：

- $\hat{E}_m = \hat{E}_m^\dagger$
- $\hat{E}_m \geq 0$
- $\sum_m \hat{E}_m = \hat{I}$

ただし $\hat{O} \geq 0$ の定義は、$\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle \geq 0$ が任意の $|\psi\rangle$ に対して成立することである。一般に $\hat{E}_m$ は互いに直交しないことに注意されたい。POVM を用いることで、測定結果 m を得る確率は

$$p_m = \mathrm{Tr}[\hat{E}_m\hat{\rho}] \tag{31}$$

で与えられる。上の条件により、確率 p_m の実性（$p_m \in \mathbb{R}$）、非負性（$p_m \geq 0$）、規格化（$\sum_m p_m = 1$）が満たされている。

1.2.2 Completely positive trace-preserving (CPTP) map

次に、上で考えた「測定結果に条件付けない場合の非ユニタリ発展 $\mathcal{E}$」を一般化しよう。特に、作用 $\mathcal{E}$ をヒルベルト空間上の線形演算子に作用する写像として抽象化し、数学的に特徴付ける。

いま $\mathcal{H}$ をヒルベルト空間、$\mathcal{H}$ 上の線形演算子の集合を $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする。線形写像 $\mathcal{E} : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \to \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は、着目系の密度演算子を別の密度演算子に写す何らかの時間発展を記述する写像なため、トレースを保存し、また少なくとも正値（$\mathcal{E} \geq 0$）でなくてはならない。ここで $\mathcal{E} \geq 0$ は、任意の正値演算子 $\hat{O} \geq 0$（$\hat{O} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$）について $\mathcal{E}(\hat{O}) \geq 0$ であることを意味する。しかし実際には、着目系はより大きなヒルベルト空間の一部にしか過ぎないため、これでは不十分で、「$\mathcal{E}$ が（より大きな）任意のヒルベルト空間の一部としての着目系に作用した時も正値である」という、より強い条件を要請せねばならない。後者の条件は完全正値性（completely positivity）と呼ばれる。

以上をまとめ（一般に非ユニタリな）時間発展を表す線形写像 $\mathcal{E}$ を、次で定義する：

- $\mathcal{E}$ はトレースを保存する（つまり $\forall \hat{O} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ について $\mathrm{Tr}[\mathcal{E}(\hat{O})] = \mathrm{Tr}[\hat{O}]$）。
- $\mathcal{E}$ は完全正値である（つまり任意のヒルベルト空間 $\mathcal{H}_A$ について、$\mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$ 上の恒等演算子 $\mathcal{I}$ を用いた線形写像 $\mathcal{E} \otimes \mathcal{I} : \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_A) \to \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_A)$ が正値である）。

$\mathcal{E}$ を completely positive trace-preserving (CPTP) 写像と呼ぶ。最後に述べた完全正値性は、物理的に実現可能な写像を特徴付ける条件として本質的に重要な要請である。実際、もしこの性質が満たされていないと、$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_A$ 上のもつれた初期状態に $\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}$ を作用させることで「負の確率」が生じてしまう場合が出てくる（例えば、Peres, PRL 77, 1413 (1996)）。

前述の間接測定模型における「測定結果に条件づけない時間発展 $\mathcal{E}$」は CPTP 写像である。間接測定模型では、$\mathcal{E}$ は Kraus 演算子 $\hat{M}_m$ を用いた演算子和の形で表現された（式 (21)）。そしてこれらは、もともとより大きなヒルベルト空間上のユニタリ発展を出発点として考えることで導出された。それでは逆に、ある CPTP 写像 $\mathcal{E}$ が与えられた時、これを「測定結果に条件づけない時間発展」として持つような間接測定模型を構成できるだろうか？またそれを Kraus 演算子で表現できるだろうか？次で述べるように、これらの問いについては肯定的な答えが知られている。

1.2.3 Steinespring 表現と Kraus 表現

CPTP 写像と間接測定模型は以下に述べる意味で等価である。いま $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ をヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の線形演算子の集合とし、$\{\mathcal{E}_m\}_{m \in M}$ を $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の線形写像の集合とする。このとき次の定理が成立する [Hellwig & Kraus, Comm. Math. Phys. 16, 142 (1970); Kraus, Ann. Phys. 64, 311 (1971); Stinespring, Proc. Amer. Math. Soc. 6, 211 (1955)]：

定理（測定過程の一般的特徴付け）：次の条件を考える：

- $\mathcal{E} \equiv \sum_m \mathcal{E}_m$ はトレースを保存する。
- 任意の $m \in M$ について $\mathcal{E}_m$ は完全正値である。

集合 $\{\mathcal{E}_m\}_{m\in M}$ が上の条件を満たすことは、何らかの $\left\{\mathcal{H}_A, \hat{\rho}_A, \hat{U}, \left\{\hat{P}_m\right\}_{m\in M}\right\}$ を用いて、この写像が次のように表せることと同値である：

$$\mathcal{E}_m(\hat{\rho}) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_A}\left[\left(\hat{I}\otimes\hat{P}_m\right)\hat{U}\left(\hat{\rho}\otimes\hat{\rho}_A\right)\hat{U}^\dagger\left(\hat{I}\otimes\hat{P}_m\right)\right]. \tag{32}$$

ここで $\mathcal{H}_A$ はヒルベルト空間、$\hat{\rho}$ と $\hat{\rho}_A$ はそれぞれ $\mathcal{H}$ と $\mathcal{H}_A$ 上の密度演算子、$\hat{U}$ は $\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}_A$ に作用するユニタリ演算子で、$\left\{\hat{P}_m\right\}_{m\in M}$ は $\mathcal{H}_A$ のうち m でラベル付された $\mathcal{H}_A$ の部分空間への射影演算子の集合である。

式 (32) はしばしば Stinespring 表現と呼ばれる。この定理は、着目系の物理的に可能な非ユニタリ発展（つまり CPTP 写像）が、常に適切に拡張したヒルベルト空間上の間接測定として考えることができることを保証している。逆に、間接測定から誘起される非ユニタリ発展は、CPTP 写像で完全に特徴付けられるということになる。重要な点は CPTP 写像 $\mathcal{E}$ 自体は $\mathcal{H}$ 上の密度演算子 $\hat{\rho}$ のみに作用することである。つまり、着目系のヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ に作用する一般的な測定過程を考える上では、その空間上での CPTP 写像を考えれば十分で、測定器の自由度 $\mathcal{H}_A$ はもはや逐一気にしなくてもよい。これは測定過程を抽象化したことで可能となった、有用な単純化といえる。一方で、実際の物理系を考える上では、前節で導入した Kraus 演算子 $\hat{M}_m$ や POVM $\hat{E}_m$ の具体形を得ることが重要である。このために微視的なハミルトニアン（例えば光-物質相互作用など）に立ち戻って、それぞれの物理系に対して注意深く解析を行う必要が一般にはある（以下で簡単な例を挙げる）。

式 (32) は次のような Kraus 表現でも常に表すことができる[*1]：

$$\mathcal{E}_m(\hat{\rho}) = \sum_k \hat{M}_{m,k}\hat{\rho}\hat{M}_{m,k}^\dagger. \tag{33}$$

これを示すためには、次のスペクトル分解を用いればよい：

$$\hat{\rho}_A = \sum_i c_i |\psi_i\rangle_{AA}\langle\psi_i|, \;\; \hat{P}_m = \sum_j |\phi_{m,j}\rangle_{AA}\langle\phi_{m,j}|. \tag{34}$$

ここで $\{|\psi_i\rangle_A\}$ と $\{|\phi_{m,j}\rangle_A\}$ は $\mathcal{H}_A$ 上の正規直交基底である。次の Kraus 演算子

$$\hat{M}_{m,k} \equiv \hat{M}_{m,(i,j)} = \sqrt{c_i}_A\langle\phi_{m,j}|\hat{U}|\psi_i\rangle_A \tag{35}$$

を導入すれば、式 (32) が式 (33) と書き直せる。POVM は

$$\hat{E}_m = \sum_k \hat{M}_{m,k}^\dagger\hat{M}_{m,k}, \;\; \sum_m \hat{E}_m = \hat{I} \tag{36}$$

で定義され、規格化された測定後状態

[*1] 逆に、任意の Kraus 表現は Stinespring 表現で表せることが示せる。

$$\hat{\rho}_m = \frac{\mathcal{E}_m(\hat{\rho})}{p_m} \tag{37}$$

を得る確率は

$$p_m = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{E}_m] \tag{38}$$

と表される。

1.2.4 量子非破壊測定

測定過程の一例として、次のように POVM と Kraus 演算子が共通の基底 $\{|\psi_j\rangle\}$ を用いて対角化できるクラスの測定過程を考えよう：

$$\hat{E}_m = \sum_j c_{m,j}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|, \;\; \hat{M}_{m,k} = \sum_j c'_{m,k,j}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|. \tag{39}$$

ここで $c_{m,j} = \sum_k |c'_{m,k,j}|^2$ である。以下で述べるように、このような測定過程の代表例として量子非破壊測定が挙げられる。

ある状態 $\hat{\rho}$ の基底 $\{|\psi_j\rangle\}$ に関する確率分布を

$$P(j) = \mathrm{Tr}[\hat{P}_j\hat{\rho}], \;\; \hat{P}_j = |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \tag{40}$$

とし、$|\psi_j\rangle$ に対する測定結果の条件付き確率分布を

$$P(m|j) = \mathrm{Tr}[\hat{E}_m\hat{\rho}_j], \;\; \hat{\rho}_j = \frac{\hat{P}_j\hat{\rho}\hat{P}_j}{P(j)} \tag{41}$$

と表す。同様に、$P(j|m)$ を測定後状態 $\hat{\rho}_m$ について、状態 $|\psi_j\rangle$ に見出す条件付き確率分布とする：

$$P(j|m) = \mathrm{Tr}[\hat{P}_j\hat{\rho}_m], \;\; \hat{\rho}_m = \frac{\mathcal{E}_m(\hat{\rho})}{P(m)}. \tag{42}$$

これらは次のベイズ則を満たす：

$$P(j|m) = \frac{P(m|j)P(j)}{P(m)}, \;\; P(m) = \sum_i P(m|i)P(i). \tag{43}$$

これは次の関係より明らかである：

$$P(j|m) = \frac{\mathrm{Tr}[\hat{P}_j\mathcal{E}_m(\hat{\rho})]}{P(m)} = \frac{\mathrm{Tr}[\mathcal{E}_m(P(j)\hat{\rho}_j)]}{P(m)} = \frac{\mathrm{Tr}[\hat{E}_m\hat{\rho}_j]}{P(m)}P(j) = \frac{P(m|j)P(j)}{P(m)}. \tag{44}$$

測定を同様に n 回続けて繰り返し、測定結果として $\mathbf{m} = \{m_1, m_2, \ldots, m_n\}$ を得たとする。この場合の測定後状態の確率分布は（古典推定理論と同様に）ベイズ推定の連鎖律から

$$P_n(j|\mathbf{m}) = \frac{\prod_{l=1}^n P(m_l|j)P_0(j)}{P(\mathbf{m})}, \;\; P(\mathbf{m}) = \sum_i \prod_{l=1}^n P(m_l|i)P_0(i) \tag{45}$$

となる。

以上の準備をもとに、量子非破壊測定を取り上げる。そのために、着目系の（測定結果で条件付けない）時間発展が次で与えられる測定過程を考える：

$$\mathcal{E}(\hat{\rho}) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_A}\left[\hat{U}(\hat{\rho}\otimes|\psi_A\rangle\langle\psi_A|)\hat{U}^\dagger\right]. \tag{46}$$

着目系に作用するあるエルミート演算子 $\hat{X}$ について

$$[\hat{X},\hat{U}]|\psi_A\rangle = 0 \tag{47}$$

が成立する時、この測定過程を $\hat{X}$ についての量子非破壊測定（QND 測定）と呼ぶ。この条件の十分条件は $\hat{X}$ が全体系のユニタリ発展において保存することである：

$$\hat{X} = \hat{U}^\dagger\hat{X}\hat{U}. \tag{48}$$

QND 測定では、測定の前後で観測量 $\hat{X}$ の分布が変化しない：

$$\mathrm{Tr}[\hat{P}_x\hat{\rho}] = \mathrm{Tr}[\hat{P}_x\mathcal{E}(\hat{\rho})]. \tag{49}$$

これが「非破壊」測定と呼ばれる由縁である。QND 測定は条件 (39) を満たすため、測定後状態の確率分布はベイズ則から決定される。また一定の条件の下で、QND 測定が次を満たすことが示せる [例えば、Phys. Rev. A 84, 044103 (2011)]：

- 測定回数が大きい極限 $n\to\infty$ で、測定後状態は「波束の収縮」を起こす（つまり何らかの i に対し、$P_\infty(j|\{m_k\}_{k=1}^\infty) = \delta_{ij}$）。
- 収縮後の状態の統計分布は初期分布を再現する（つまり $E[P_\infty(j|\{m_k\}_{k=1}^\infty)] = P_0(j)$）。

問題：量子非破壊測定が、条件 (39) を満たすことを示せ。ヒント：$\hat{X}$ のスペクトル分解 $\hat{X} = \sum_x x|x\rangle\langle x|$ を用いよ。

1.2.5 Cavity QED における光子数の量子非破壊測定

前節で紹介した一般論が、実際の物理系でどのように役立つかを見るため、2002 年ノーベル物理学賞の一翼を担った成果でもある光子数の量子非破壊測定を取り上げる。ここでは共振器中の周波数 ω_c の量子電磁場モードが着目系で、原子がそれをプローブする測定器としての役割を果たす。

いま $|f\rangle$ を $|e\rangle$ とは別の原子励起状態とし、光物質相互作用は

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \hbar\gamma(|e\rangle\langle f|\hat{b}^\dagger + |f\rangle\langle e|\hat{b}) \tag{50}$$

で与えられるとする。離調 $\delta = \omega_c - \omega_{fe}$ が非共鳴条件 $|\delta|\gg\gamma$ を満たす場合、$|f\rangle$ を断熱消去することで、有効相互作用として

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} \simeq \frac{\hbar\gamma^2}{\delta}\hat{b}^\dagger\hat{b}|e\rangle\langle e| \tag{51}$$

が得られる。光子数を $\hat{n} = \hat{b}^\dagger\hat{b}$ で表せば、全体系の有効ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\mathrm{eff}} = \hbar\omega_c\hat{n} + \hbar\Omega\hat{n}|e\rangle\langle e|,\ \ \Omega = \frac{\gamma^2}{\delta} \tag{52}$$

となる。これが測定したい量である光子数と可換であることに注意されたい：

$$[\hat{H}_{\rm eff}, \hat{n}] = 0. \tag{53}$$

つまりダイナミクス $\hat{H}_{\rm eff}$ に基づく測定過程は、光子数 n の確率分布を変化させない。

一方で、測定器である原子の初期状態は励起状態とする：

$$\hat{\rho}_A = |e\rangle\langle e|. \tag{54}$$

ここでは（実際の実験で行われたように）全体系に作用するユニタリ変換が相互作用時間 T のハミルトニアン発展に加え、その前後に Ramsey 干渉を行ったものとする：

$$\hat{U} = \hat{U}_{R_2}\hat{U}_c\hat{U}_{R_1}, \tag{55}$$

$$\hat{U}_{R_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \ \hat{U}_{R_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & e^{-i\phi} \\ -e^{i\phi} & 1 \end{pmatrix}, \tag{56}$$

$$\hat{U}_c = e^{-i\hat{H}_{\rm eff}T} = e^{-i\omega_c T\hat{n}}\begin{pmatrix} e^{-i\Omega T\hat{n}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{57}$$

最後に、光子との相互作用および Ramsey 干渉を終えた原子について、射影測定を行う。従って測定結果は原子を励起状態あるいは基底状態に見出す場合の二通り（$m = e, g$）である。

まず $m = e$ の場合には、Kraus 演算子が

$$\hat{M}_e = \langle e|\hat{U}|e\rangle = \frac{e^{-i\omega_c T\hat{n}}\left(e^{-i\Omega T\hat{n}} - e^{-i\phi}\right)}{2} \tag{58}$$

と求まる。次に $m = g$ の場合には

$$\hat{M}_g = \langle g|\hat{U}|e\rangle = \frac{-e^{-i\omega_c T\hat{n}}\left(e^{-i\phi - i\Omega T\hat{n}} + 1\right)}{2} \tag{59}$$

となる。それぞれの測定結果に対応する POVM は

$$\hat{E}_e = \hat{M}_e^\dagger\hat{M}_e = \frac{1 - \cos\left(\Omega T\hat{n} - \phi\right)}{2}, \tag{60}$$

$$\hat{E}_g = \hat{M}_g^\dagger\hat{M}_g = \frac{1 + \cos\left(\Omega T\hat{n} - \phi\right)}{2} \tag{61}$$

と求まる。これらは一般に非直交であるが、完全性条件 $\sum_{m=e,g}\hat{E}_m = \hat{I}$ を常に満たす。光子の初期状態を $\hat{\rho}$ とすれば、Kraus 表現により測定後の状態および測定確率は

$$\hat{\rho}_m = \frac{\hat{M}_m\hat{\rho}\hat{M}_m^\dagger}{p_m}, \ \ p_m = {\rm Tr}[\hat{\rho}\hat{E}_m], \ \ m \in \{e, g\} \tag{62}$$

と表せる。

さて、前述の議論より、QND 測定はベイズ推定と等価である。よって、測定を一回行った後の光子数分布は次で与えられる：

$$P(n|m) = \frac{P(m|n)P_0(n)}{p_m}. \tag{63}$$

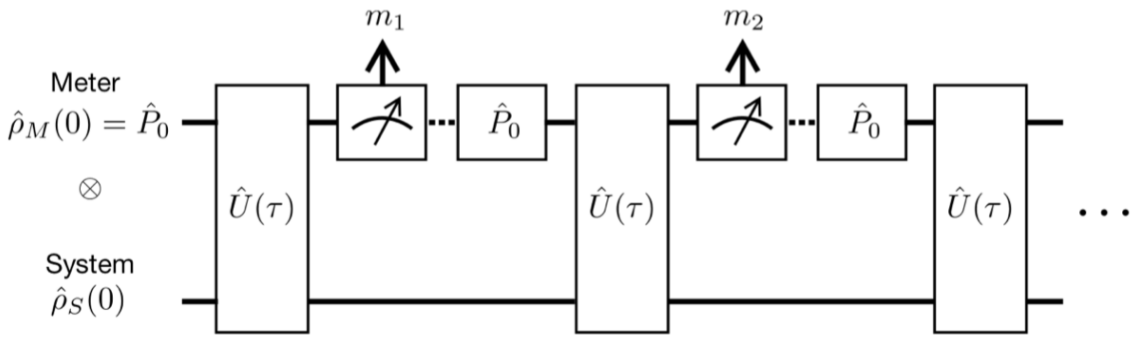

図 2　量子連続測定過程の模式図。

ここで $P_0(n) = \rho_{nn}$ は初期状態のフォック基底での分布であり、右辺の $P(m|n)$ は光子数 n のフォック状態について測定結果 $m \in \{e, g\}$ を得る確率である：

$$P(m|n) \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{E}_m \hat{P}_n\right] = \begin{cases} \frac{1-\cos(\Omega T n - \phi)}{2} & m = e \\ \frac{1+\cos(\Omega T n - \phi)}{2} & m = g \end{cases}. \tag{64}$$

ここで $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$ はフォック状態への射影演算子である。

次に、光子状態に連続して同様の測定を N 回行うことを考えよう。この場合、測定後状態に関する光子数分布はベイズ推定の連鎖律より

$$P_N(n|\{m_i\}) = \mathcal{N} \prod_{j=1}^{N} P(m_j|n) P_0(n) \tag{65}$$

となる。ここで $\mathcal{N}$ は規格化定数である。上で言及した一般論より、測定数 N を大きくすると、光子数分布（即ち光子波動関数）は次第にある特定のフォック状態に「収縮」してゆく。そしてこの最終的に収縮する状態の統計分布が、もとの初期状態分布 $P_0(n)$ に一致する。物理的には、これは光子波動関数の連続的な量子測定に伴う「波束の収縮」とも解釈できる。これは共振器 QED を用いた実験でも観測されている。

1.3　量子連続測定

1.3.1　量子トラジェクトリー

前節では離散的な（つまりストロボスコピックな）測定過程を主に考えていた。以降は、このような測定を十分短い時間間隔かつ弱い測定強度で断続的に行う「連続測定過程」を取り扱う。

問題設定として、まず前節の間接的測定模型と同様に $\mathcal{H}_S$ を被測定系、$\mathcal{H}_M$ を測定器のヒルベルト空間とし、初期状態は積状態を考える：

$$\hat{\rho}_{\mathrm{tot}}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{P}_0, \quad \hat{P}_0 = |\psi_0\rangle_{MM}\langle\psi_0|. \tag{66}$$

連続する測定の時間間隔は τ とし、測定器の初期状態は毎回 $|\psi_0\rangle_M$ に各測定過程前に「リセット」する（図を参照）。それぞれの測定過程で得られる測定結果を $m_i \in \{0, 1, \ldots, M\}$ で、その列を $\{m_1, m_2, \ldots\}$ と表す。

被測定系と測定器を含めた全体系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{V},\ \ \hat{V} = \gamma \sum_{m=1}^{M} \hat{A}_m \otimes \hat{B}_m + \text{H.c.},\ \ \gamma \in \mathbb{R} \tag{67}$$

とする。ここで $\hat{H}_S$ は被測定系のハミルトニアンで、その時間スケールは τ より十分長いとする。$\hat{V}$ は被測定系と測定器の相互作用を表し、$\hat{A}_m$ と $\hat{B}_m$ はそれぞれ被測定系、測定器に作用する演算子である。また、$\hat{B}_m$ は測定結果 $m \neq 0$ の対応する部分空間上でのみ非自明に作用する演算子とする。つまり、次が成立すると仮定する：

$$\hat{P}_{m'} \hat{B}_m = \delta_{m'm} \hat{B}_m \ \ (m' = 0, 1, \ldots, M;\ m = 1, 2, \ldots, M). \tag{68}$$

ここで $\hat{P}_{m'}$ は測定結果 m' に対応した測定器状態の部分空間への射影演算子で、完全性条件 $\sum_{m'=0}^{M} \hat{P}_{m'} = \hat{I}$ を満たす。ラベル $m' = 0$ がリセット状態 $|\psi_0\rangle_M$ に対応する。

さて、いま連続的な測定に興味があるわけであるが、素朴に測定間隔を $\tau \to 0$ としてしまうと、量子ゼノ効果により測定器は常に初期状態 $|\psi_0\rangle$ に留まり、被測定系のダイナミクスは単にユニタリ発展となる。これを防ぎ、非自明な測定の反作用が存在する連続極限を取るには、相互作用 γ について「$\gamma\tau \ll 1$ かつ $\gamma^2\tau$ は非ゼロで有限にとどまる」という極限をとれば良い。実際こうすれば、測定結果が $m \in \{1, 2, \ldots, M\}$ となる（つまり測定器の状態が $|\psi_0\rangle_M$ から変化する）場合の被測定系の状態変化が

$$\mathcal{E}_m(\hat{\rho}_S) = \mathrm{Tr}_M \left[\hat{P}_m \hat{U}(\tau) \left(\hat{\rho}_S \otimes \hat{P}_0 \right) \hat{U}^\dagger(\tau) \hat{P}_m \right] \simeq \tau \hat{L}_m \hat{\rho}_S \hat{L}_m^\dagger \tag{69}$$

$$\hat{L}_m = \sqrt{\gamma^2 \tau \langle \hat{B}_m^\dagger \hat{B}_m \rangle_0}\ \hat{A}_m \tag{70}$$

となり非ユニタリな変化が生じる。ここで $\hat{U}(\tau) = e^{-i\hat{H}\tau}$ は全体系のユニタリ演算子である。$\hat{L}_m$ は Lindblad 演算子と呼ばれ「$\gamma^2\tau$ は非ゼロで有限にとどまる」という条件のおかｑげで意味のある定義になっており、$\langle \cdots \rangle_0$ は $|\psi_0\rangle_M$ に対する期待値である。一方で測定結果が $m = 0$ となる（つまり測定器の状態が $|\psi_0\rangle_M$ にとどまる）場合には

$$\mathcal{E}_0(\hat{\rho}_S) = \mathrm{Tr}_M \left[\hat{P}_0 \hat{U}(\tau) \left(\hat{\rho}_S \otimes \hat{P}_0 \right) \hat{U}^\dagger(\tau) \hat{P}_0 \right] \tag{71}$$

$$\simeq \hat{\rho}_S - i\tau [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S] - \frac{\tau}{2} \left\{ \sum_{m=1}^{M} \hat{L}_m^\dagger \hat{L}_m, \hat{\rho}_S \right\}, \tag{72}$$

となる。これらがトレース保存性（$\mathrm{Tr}_S[\sum_{m'=0}^{M} \mathcal{E}_{m'}(\hat{\rho}_S)] = 1$）を満たすことはすぐに確認できる。

次にこのことを、確率微分方程式の言葉を用いて簡潔な形に書き直したい。そのために時間間隔 $dt = N\tau$ を考える[*2]。ここで $N \gg 1$ ではあるが、時間間隔 τ に $m \in \{1, 2, \ldots, M\}$ の測定結果を観測する確率は

$$p_m = \mathrm{Tr}_S[\mathcal{E}_m(\hat{\rho}_S)] = \tau \mathrm{Tr}_S[\hat{L}_m \hat{\rho}_S \hat{L}_m^\dagger] = O((\gamma\tau)^2) \ll 1 \tag{73}$$

[*2] dt は依然として $\hat{H}_S$ の時間スケールよりも十分短いとする。

で非常に小さく、時間間隔 $dt = N\tau$ の間であっても $m \neq 0$ の観測回数は高々 1 回とする。よって dt の間の非ユニタリ発展は、$m \neq 0$ の測定結果を 1 回観測する場合（以降慣習に従い「量子ジャンプ」と呼ぶ）と、観測しない場合の二通りに分類できて、それぞれ

$$\Phi_{m=1,\dots,M}(\hat{\rho}_S) \equiv \sum_{i=1}^{N} \left(\mathcal{E}_0^{N-i} \circ \mathcal{E}_m \circ \mathcal{E}_0^{i-1}\right)(\hat{\rho}_S) = \hat{M}_m \hat{\rho}_S \hat{M}_m^\dagger + O(dt^2), \tag{74}$$

$$\Phi_0(\hat{\rho}_S) \equiv \mathcal{E}_0^N(\hat{\rho}_S) = \hat{M}_0 \hat{\rho}_S \hat{M}_0^\dagger + O(dt^2), \tag{75}$$

となる。ここで Kraus 演算子を

$$\hat{M}_m = \hat{L}_m \sqrt{dt} \quad (m = 1, 2, \dots, M), \tag{76}$$

$$\hat{M}_0 = 1 - i\hat{H}_{\text{eff}} dt, \tag{77}$$

と定義し、後者については非エルミートハミルトニアンを

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_S - \frac{i}{2} \sum_{m=1}^{M} \hat{L}_m^\dagger \hat{L}_m \tag{78}$$

により導入した。つまり時刻 $[t, t+dt]$ の間にジャンプが生じた場合には $\hat{M}_m$ が、生じなかった場合には $\hat{M}_0$ が状態に作用する。それぞれの確率は、$\mathrm{Tr}_S[\hat{M}_m \hat{\rho}_S \hat{M}_m^\dagger]$ と $\mathrm{Tr}_S[\hat{M}_0 \hat{\rho}_S \hat{M}_0^\dagger]$ で与えられる。Kraus 演算子が完全性条件 $\sum_{m'=0}^{M} \hat{M}_{m'}^\dagger \hat{M}_{m'} = \hat{I}_S$ を（$O(dt^2)$ の項を別にして）満足することはすぐに確かめられる。

以上のプロセスは、確率微分方程式の言葉を用いれば簡潔な式で表せる。簡単のため初期状態は純粋状態とする。$\{0, 1\}$ の二値をとり得る離散変数確率過程 dN_m を、$m \in \{1, 2, \dots, M\}$ について次で導入しよう：

$$dN_m dN_n = \delta_{mn} dN_m, \tag{79}$$

$$\mathbb{E}\left[dN_m\right] = \langle \hat{M}_m^\dagger \hat{M}_m \rangle_S = \langle \hat{L}_m^\dagger \hat{L}_m \rangle_S dt. \tag{80}$$

ここで $\mathbb{E}[\cdots]$ は確率過程のアンサンブル平均を表し、dN_m の期待値は「時刻 $[t, t+dt]$ の間にジャンプ m が起こり $dN_m = 1$ となる確率」を示している。式 (79) は「時刻 $[t, t+dt]$ の間に生じるジャンプは高々一回」であることに対応する[*3]。確率過程を用いれば、上で述べた連続測定下の状態変化は

$$|\psi\rangle_S \to |\psi\rangle_S + d|\psi\rangle_S = \left(1 - \sum_{m=1}^{M} dN_m\right) \frac{\hat{M}_0 |\psi\rangle_S}{\sqrt{\langle \hat{M}_0^\dagger \hat{M}_0 \rangle_S}} + \sum_{m=1}^{M} dN_m \frac{\hat{M}_m |\psi\rangle_S}{\sqrt{\langle \hat{M}_m^\dagger \hat{M}_m \rangle_S}} \tag{81}$$

とまとめて書ける。最右辺第一項が確率 $1 - \sum_{m=1}^{M} \mathbb{E}[dN_m]$ で生じる測定結果 $m = 0$ の場合の状態変化であり、第二項が確率 $\mathbb{E}[dN_m]$ で生じる測定結果 $m \neq 0$ の場合の状態変化を表している。

[*3] 確率過程 dN_m は一見 Poisson 過程に似ているが、その期待値が状態ベクトルに依存しているため別物である。dN_m は数学的には marked point process として知られている。

それぞれの項の分母は波動関数の規格化に必要な因子である。また Lindblad 演算子 $\hat{L}_m$ を用いて書き直せば

$$d|\psi\rangle_S = \left(-i\hat{H}_{\rm eff} + \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{M}\langle\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m\rangle_S\right)dt|\psi\rangle_S + \sum_{m=1}^{M}\left(\frac{\hat{L}_m|\psi\rangle_S}{\sqrt{\langle\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m\rangle_S}} - |\psi\rangle_S\right)dN_m \tag{82}$$

となる。第一項が非エルミート有効ハミルトニアン $\hat{H}_{\rm eff}$ による決定論的かつ連続な発展で、$\sum_{m=1}^{M}\langle\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m\rangle_S/2$ は規格化に必要な項である。第二項は量子ジャンプ m に対応した確率的かつ不連続な状態変化を表している。このような連続測定下の時間発展の実現それぞれを「量子トラジェクトリー」と呼ぶ。

1.3.2 量子マスター方程式

前節で導出した連続測定下の発展方程式 (81) を、$\hat{\rho}_S = |\psi\rangle_{SS}\langle\psi|$ という密度行列に対する形に書き直すと

$$d\hat{\rho}_S = -i\left(\hat{H}_{\rm eff}\hat{\rho}_S - \hat{\rho}_S\hat{H}_{\rm eff}^\dagger\right)dt + \sum_{m=1}^{M}\langle\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m\rangle_S\hat{\rho}_S dt + \sum_{m=1}^{M}\left(\frac{\hat{L}_m\hat{\rho}_S\hat{L}_m^\dagger}{\langle\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m\rangle_S} - \hat{\rho}_S\right)dN_m \tag{83}$$

を得る。この式自体は $\hat{\rho}_S$ が純粋状態でなくとも一般の混合状態で成立する。

次に確率過程についてアンサンブル平均をとり、両辺を dt で割れば

$$\frac{d\,\mathbb{E}[\hat{\rho}_S]}{dt} = -i\left(\hat{H}_{\rm eff}\mathbb{E}[\hat{\rho}_S] - \mathbb{E}[\hat{\rho}_S]\hat{H}_{\rm eff}^\dagger\right) + \sum_{m=1}^{M}\hat{L}_m\mathbb{E}[\hat{\rho}_S]\hat{L}_m^\dagger \tag{84}$$

を得る。これは Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad マスター方程式として知られる式で、全てのあらゆる測定結果についてアンサンブル平均をとった密度行列の時間発展を記述する。量子マスター方程式 (84) 自体は、もともとは連続測定理論が発展するよりも以前に、熱浴と弱く結合した散逸系の研究における文脈で既に議論されていた。こちらについても後で簡単に取り扱う。

1.3.3 測定下の物理系と散逸系

さて、ここまで大きく分けて二種類の非ユニタリ時間発展が出てきた。一つは、連続測定下の量子系を記述する量子トラジェクトリー (81) であり、もう一つは散逸系を記述するマスター方程式 (84) である。前者は後者をアンサンブル平均した極限として包含しており（後でいくつかの例で紹介するように）より豊かな物理が発現し得る。つまり、これら二つの時間発展は（しばしば混同されがちだが）一般には質的に異なる。具体例は後に示すが、ここではそのような差異を説明するための形式論を簡単に紹介しよう。

そのために「観測者がどの程度まで測定結果の情報にアクセスできるか」に着目する。まず観測者が測定結果に関する完全な情報（つまり全ての量子ジャンプの種類と時刻）を知ることができる場合には、量子状態の時間発展は純粋状態に関する単一のトラジェクトリーとして記述される。具体的には

$$|\psi_{\rm traj}\rangle_S = \prod_{k=1}^{n}\left[\hat{\mathcal{U}}_{\rm eff}(\Delta t_k)\hat{L}_{m_k}\right]\hat{\mathcal{U}}_{\rm eff}(t_1)|\psi_0\rangle_S/\|\cdot\|, \tag{85}$$

と書ける。ここで $0<t_1<\cdots<t_n<t$ は $\{m_1,m_2,\ldots,m_n\}$ という量子ジャンプが生じた時刻、$\Delta t_k = t_{k+1}-t_k$ は時間差で $t_{n+1}\equiv t$ とし、$\hat{\mathcal{U}}_{\rm eff}(t)=e^{-i\hat{H}_{\rm eff}t}$ は非エルミートハミルトニアンによる時間発展である。

次に、このような完全な情報でなくとも、測定結果の部分的な情報であれば観測者が知ることができる場合もしばしば存在する。例として、ジャンプの種類と時刻は不明だが、生じたジャンプの総回数は分かるという場合を考えよう。この場合、対応する量子状態の時間発展は次の密度行列で記述される [Phys. Rev. Lett. 120, 185301 (2018)]：

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{(n)}(t) &\propto \sum_{\alpha\in\mathcal{D}_n}|\psi_\alpha\rangle_{SS}\langle\psi_\alpha| \\ &= \sum_{\{m_k\}_{k=1}^n}\int_0^t dt_n\cdots\int_0^{t_2}dt_1\prod_{k=1}^{n}\left[\hat{\mathcal{U}}_{\rm eff}(\Delta t_k)\hat{L}_{m_k}\right]\hat{\mathcal{U}}_{\rm eff}(t_1)\hat{\rho}_S(0)\hat{\mathcal{U}}_{\rm eff}^\dagger(t_1)\prod_{k=1}^{n}\left[\hat{L}_{m_k}^\dagger\hat{\mathcal{U}}_{\rm eff}^\dagger(\Delta t_k)\right].\end{aligned} \tag{86}$$

ここで $\mathcal{D}_n$ は可能な全てのトラジェクトリーのうち、観測されるジャンプの総回数が n であるトラジェクトリーからなる部分集合である。つまり、$\hat{\rho}^{(n)}$ は「n 回の何らかのジャンプを観測した」という測定結果に条件づけられた量子状態の時間発展を記述しており、該当するトラジェクトリーに関するサブアンサンブル平均をとって構成される。特に、$\hat{\rho}^{(n)}$ のうち最も単純な $n=0$ の場合は非エルミート発展に対応する。

これら式 (85) や (86) で記述されるダイナミクスは、何らかの測定結果に「条件づけられた」ものであり「測定下のダイナミクス」と呼ぶにふさわしいものである。一方、マスター方程式 (84) で記述されるダイナミクスは、測定結果の情報が完全に失われているという意味で「粗視化」されたものであり「散逸下のダイナミクス」と呼ぶべきものである。両者は異なる物理的性質を示し得るため、一般に区別すべき点は意識しておく必要がある。

1.3.4 二準位原子の自発放射

いくつか具体例への応用を通じて、連続量子測定理論に慣れてみよう。まず二準位系が被測定系でボソンモード（電磁場）と相互作用する場合を考えよう。系-測定器相互作用は

$$\hat{V}\propto\hat{\sigma}^-\hat{b}^\dagger+\hat{\sigma}^+\hat{b} \tag{87}$$

で与えられ、リセット状態に対応するのは光の真空状態 $|\psi_0\rangle_M=|0\rangle$ とする。二準位系の自発放射に対応する Lindblad 演算子は

$$\hat{L}=\sqrt{\gamma}\hat{\sigma}^- \tag{88}$$

であり、自発放射を観測しない時間帯を記述する非エルミートハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\rm eff}=\hat{H}_S-\frac{i\gamma}{2}\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}^-=\hat{H}_S-\frac{i\gamma}{2}|e\rangle\langle e| \tag{89}$$

である。ここで、たとえ自発放射を観測していなくとも時間発展が非ユニタリになることに注意されたい。物理的にはこれは、観測者が「自発放射を観測しない」という測定結果を知ることにより、量子系について「基底状態にいるのがよりもっともらしい」という情報を獲得し、その測定の反作用がハミルトニアンの非エルミート性として現れていると解釈できる。

1.3.5 光子数測定

次に、前節でも考えた光子数測定の例を考えよう。この場合は着目する量子系が光子、測定器自由度が二準位系である。話を具体的にするため、Kraus 演算子 (58),(59) で $\phi = \pi$ の場合を考える。測定器のリセット状態は原子の励起状態 $|\psi_0\rangle_M = |e\rangle$ に対応し、原子の射影測定の結果が基底状態の場合 $m = g$（つまり測定器がリセット状態から変化する場合）に量子ジャンプが生じる。$\omega_c T, \Omega T \ll 1$ での Kraus 演算子

$$\hat{M}_g \propto \hat{n} \tag{90}$$

の類推から、Lindblad 演算子は次のように求まる：

$$\hat{L} = \sqrt{\gamma}\hat{n}. \tag{91}$$

一方、測定結果が励起状態の場合 $m = e$（つまり測定器がリセット状態にとどまる場合）には、非エルミートハミルトニアンが次のように得られる：

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_S - \frac{i\gamma}{2}\hat{n}^2. \tag{92}$$

いま QND 条件 $[\hat{H}_S, \hat{n}] = 0$ が満たされているとしよう。前述の通り、量子トラジェクトリーのレベルでは、波動関数はあるフォック状態へ次第に収縮してゆく。一方で、アンサンブル平均した密度行列 $\hat{\rho}$ はマスター方程式

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i[\hat{H}_S, \hat{\rho}] - \frac{\gamma}{2}[\hat{n}, [\hat{n}, \hat{\rho}]] \tag{93}$$

に従い、フォック基底での行列成分は

$$\frac{d\rho_{mn}}{dt} = -\frac{\gamma}{2}(n-m)^2 \rho_{mn} \tag{94}$$

を満たす。つまり、非対角成分が指数関数的に減少する（デコヒーレンス）。一方で対角成分は保存する。よって初期状態の対角成分のみを取り出した状態が終状態となる。これは、前述の QND 測定で、各トラジェクトリーで収縮した状態の統計分布が、初期状態の分布を再現したことに対応している。

1.3.6 減衰調和振動子

被測定系と測定器どちらも調和振動子の場合を考えよう。測定器のリセット状態は基底状態 $|\psi_0\rangle_M = |0\rangle$ とし、系-測定器相互作用は

$$\hat{V} \propto \hat{a}\hat{b}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{b} \tag{95}$$

とする。Lindblad 演算子は次のように求まり

$$\hat{L} = \sqrt{\gamma}\hat{a} \tag{96}$$

調和振動子の（脱励起による）減衰を引き起こす。対応する非エルミートハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_S - \frac{i\gamma}{2}\hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{97}$$

となる。トラジェクトリーレベルでは、量子ジャンプにより $\hat{a}$ に対応したボソン数が不連続的に一つずつ減少し、最終的には真空状態へ緩和する。一方で、アンサンブル平均して得られるマスター方程式は次のようになる：

$$\frac{d\,\hat{\rho}}{dt} = -i\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{\rho}] + \frac{\gamma}{2}\left(2\hat{a}\hat{\rho}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{a}^\dagger\hat{a}\right). \tag{98}$$

ここで $\hat{H}_S = \omega\hat{a}^\dagger\hat{a}$ とした。定常状態はやはり基底状態 $|0\rangle\langle 0|$ であるが、この場合は振幅が連続的な指数減衰を示す：

$$\frac{da}{dt} \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{a}\frac{d\hat{\rho}}{dt}\right] \to a(t) = a(0)e^{-i\omega t - \gamma t/2}. \tag{99}$$

1.3.7 拡散過程を用いた量子トラジェクトリー

これまでは Lindblad 演算子が不連続な変化を引き起こす量子ジャンプを含んだトラジェクトリーを考えてきたが、以下では連続的な拡散過程を含んだ連続測定下のダイナミクスの定式化について考える。このために上で得た次の確率微分方程式から議論を始める：

$$d\hat{\rho} = -i\left(\hat{H}_{\text{eff}}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}_{\text{eff}}^\dagger\right)dt + \sum_{m=1}^{M}\langle\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m\rangle\hat{\rho}dt + \sum_{m=1}^{M}\left(\frac{\hat{L}_m\hat{\rho}\hat{L}_m^\dagger}{\langle\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m\rangle} - \hat{\rho}\right)dN_m \tag{100}$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H} - \frac{i}{2}\sum_{m=1}^{M}\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m. \tag{101}$$

量子ジャンプの個々が与える変化は小さく、かつジャンプの検出レートが高い極限（拡散極限）を考えるため、ジャンプ演算子が小さい無次元量 $\epsilon \ll 1$ を用いて

$$\hat{L}_m = \sqrt{\Gamma}(1 + \epsilon\hat{a}_m) \tag{102}$$

と書けるとする。ある時間幅 Δt の間に量子ジャンプ m を検出する回数 ΔN_m は十分大きく、中心極限定理より

$$\Delta N_m \simeq \Gamma(1 + 2\epsilon\langle\hat{a}_m\rangle)\Delta t + \sqrt{\Gamma}\left(1 + \epsilon\langle\hat{a}_m\rangle\right)\Delta W_m \tag{103}$$

と近似できるとしよう。ここで $\Delta W_m \in \mathcal{N}(0, \Delta t)$ は Gaussian ノイズである。拡散極限（$\epsilon \to 0$ かつ $\Gamma \to \infty$ で $\Gamma\epsilon^2$ は有限に保つ）をとれば、$\Delta t \to 0$ において時間発展方程式

$$d\hat{\rho} = \left[-i[\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{M}\left[\hat{l}_m, \left[\hat{l}_m, \hat{\rho}\right]\right]\right]dt + \sum_{m=1}^{M}\left\{\hat{l}_m - \langle\hat{l}_m\rangle, \hat{\rho}\right\}dW_m \tag{104}$$

を得る。ここで $\hat{l}_m = \sqrt{\Gamma\epsilon^2}\,\hat{a}_m$ であり、dW_m は次を満たす確率変数（Wiener 過程）である：

$$\mathbb{E}[dW_m] = 0, \;\; dW_m dW_n = \delta_{mn} dt. \tag{105}$$

特に純粋状態については

$$d|\psi\rangle = \left[-i\hat{H} - \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{M} \left(\hat{l}_m - \langle \hat{l}_m \rangle \right)^2 \right] dt|\psi\rangle + \sum_{m=1}^{M} \left(\hat{l}_m - \langle \hat{l}_m \rangle \right) dW_m |\psi\rangle \tag{106}$$

が成立する。これら拡散型の方程式は、ホモダイン測定下の共振器系のダイナミクスや、連続位置測定下の粒子の運動などを記述する際にしばしば用いられる。

1.3.8 連続位置測定下の粒子

具体例として、単一粒子の量子連続位置測定を考える。Lindblad 演算子は位置演算子そのもの

$$\hat{l} = \sqrt{\kappa}\hat{x} \tag{107}$$

であり、時間発展方程式は

$$d|\psi\rangle = \left[1 - i\hat{H} - \frac{\kappa}{2}(\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \right] dt|\psi\rangle + \sqrt{\kappa}(\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) dW |\psi\rangle \tag{108}$$

$$d\hat{\rho} = \left(-i[\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{\kappa}{2}[\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}]] \right) dt + \sqrt{\kappa} \left\{ \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle, \hat{\rho} \right\} dW \tag{109}$$

で与えられる。

簡単のため、初期状態はガウシアン状態で、ユニタリパートが次の自由粒子ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \tag{110}$$

で記述される場合を考えよう。この場合には系の確率的な時間発展は一次・二次モーメントにより完全に特徴付けられ、それらは以下を満たす：

問題：分散を $V_O \equiv \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2$、共分散を $C_{xp} = \langle \{\hat{x}, \hat{p}\} \rangle / 2 - \langle \hat{x} \rangle \langle \hat{p} \rangle$ と表す。次の関係式を導け：

$$d\langle \hat{x} \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} dt + \sqrt{4\kappa} V_x dW, \tag{111}$$

$$d\langle \hat{p} \rangle = 2\sqrt{\kappa} C_{xp} dW, \tag{112}$$

$$dV_x = \frac{2}{m} C_{xp} dt - 4\kappa V_x^2 dt, \tag{113}$$

$$dV_p = \kappa(1 - 4C_{xp}^2) dt, \tag{114}$$

$$dC_{xp} = \frac{V_p}{m} dt - 4\kappa V_x C_{xp} dt. \tag{115}$$

運動エネルギの上昇レート（ヒーティングレート）は、これらの結果を用いることで

$$dK \equiv d\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m}\left(dV_p + d(\langle\hat{p}\rangle^2)\right) = \frac{1}{2m}\left(\kappa dt + 4\langle\hat{p}\rangle\sqrt{\kappa}C_{xp}\,dW\right) \tag{116}$$

$$\mathbb{E}[K(t)] = K(0) + \frac{\kappa t}{2m} \tag{117}$$

と得られる。つまり、粒子の温度は時刻 t に比例して際限なく上昇する。物理的には、例えば顕微鏡のように光散乱で原子位置を測定する状況を考えれば、これは光の反跳エネルギーにより原子の運動エネルギーが上昇することに対応している。

特に、原子運動が無視できる極限 $m \to \infty$ を考えると方程式は

$$d\hat{\rho} = -\frac{\kappa}{2}[\hat{x},[\hat{x},\hat{\rho}]]dt \tag{118}$$

となり、位置測定はデコヒーレンスを引き起こす：

$$\frac{d\rho_{xy}}{dt} = -\frac{\kappa}{2}(x-y)^2\,\rho_{xy}. \tag{119}$$

ここでデコヒーレンスレートは行列要素の距離の二乗に比例しており、「マクロ」な重ね合わせほど早く壊れてしまうことがわかる。この点は上述の QND 測定でも同様である。

1.4 弱結合量子散逸系

1.4.1 Born-Markov 近似を用いた量子マスター方程式の導出

前節で述べたように、量子マスター方程式 (84) 自体は、測定理論とは別に、熱浴と弱く結合した散逸系の研究における文脈で議論されていた。この場合の導出も種々の仮定に基づいており、特に次の条件が量子マスター方程式 (84) を正当化する上での十分条件と考えられている：

1. Born 近似：系-環境間の相互作用 γ が十分弱く、初期状態が系-環境の積状態であれば、時間が経過しても系-環境相関は十分小さい値にとどまり引き続き積状態で良く近似できる。
2. Markov 近似：環境内のダイナミクスの相関時間 $\tau_{\rm env}$ が全体系の緩和時間 $\tau_{\rm rel}$ より十分短く、全体系の時間発展で環境が記憶を持たない。典型的には、着目する系の準位間隔 Δ として $\tau_{\rm rel} \propto \Delta/\gamma^2$ と見積もられる。
3.「Secular」近似：系内部のダイナミクスが十分早く $1/\Delta \ll \tau_{\rm rel}$、粗視化した時間スケール $1/\Delta \ll dt \ll \tau_{\rm rel}$ が存在する。これによりマスター方程式における Lindblad 演算子 $\hat{L}_m$ の時間依存性が無視できる。

話を具体的にするために、やや単純化された状況をここでは考えよう（より一般の場合は教科書を参照：例えば Breuer, The Theory of Open Quantum Systems, Oxford Univ. Press (2007) など)。まず初期状態として系-環境の積状態

$$\hat{\rho}_{SE} = \hat{\rho}\otimes\hat{\rho}_E \tag{120}$$

を考え、全体系はハミルトニアン

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_E + \hat{H}_{SE} \tag{121}$$

に従いユニタリ発展を行うとする。相互作用表示を

$$\hat{\tilde{O}}(t) \equiv e^{i(\hat{H}_S+\hat{H}_E)t}\hat{O}e^{-i(\hat{H}_S+\hat{H}_E)t} \tag{122}$$

で導入し、系-環境相互作用は

$$\hat{H}_{SE} = \sum_m \hat{L}_m \otimes \hat{R}_m + \text{H.c.} \tag{123}$$

で表す。

この時、上に挙げた条件 1,2,3 に加え、簡単のため次も成立すると仮定しよう：

$$\hat{\tilde{L}}_m(t) = \hat{L}_m e^{-i\omega_m t}, \tag{124}$$

$$\mathrm{Tr}_E\left[\hat{\tilde{\rho}}_E\hat{\tilde{R}}_m(t_1)\hat{\tilde{R}}_n^\dagger(t_2)\right] = \mathrm{Tr}_E\left[\hat{\tilde{\rho}}_E\hat{\tilde{R}}_m(t_1)\hat{\tilde{R}}_n(t_2)\right] = \mathrm{Tr}_E\left[\hat{\tilde{\rho}}_E\hat{\tilde{R}}_m^\dagger(t_1)\hat{\tilde{R}}_n^\dagger(t_2)\right] = 0. \tag{125}$$

これらの条件は、今回の講義で扱う系では典型的に成立している。以上の準備をもとに、量子マスター方程式が導出できる。

問題：上に挙げた近似や仮定を用いることで、次の時間発展方程式を導出せよ：

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} \simeq \sum_m \left[C_m\left(\hat{L}_m\hat{\rho}(t)\hat{L}_m^\dagger - \hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m\hat{\rho}(t)\right) + \text{H.c.}\right]. \tag{126}$$

ここで

$$C_m \equiv \int_0^\infty d\tau\, e^{i\omega_m\tau}\,\mathrm{Tr}_E\left[\hat{\tilde{\rho}}_E\hat{\tilde{R}}_m^\dagger(\tau)\hat{\tilde{R}}_m(0)\right] = \frac{\gamma_m + i\kappa_m}{2},\ \ \gamma_m,\kappa_m \in \mathbb{R}. \tag{127}$$

ヒント：相互作用表示を用い、$\hat{H}_{SE}$ についての摂動論を用いよ。

式 (126) を書き直すことで、以前に導いた方程式と同じ形を得る：

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i\left(\hat{H}_{\text{eff}}\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t)\hat{H}_{\text{eff}}^\dagger\right) + \sum_m \gamma_m\hat{L}_m\hat{\rho}(t)\hat{L}_m^\dagger. \tag{128}$$

ここで

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_S + \frac{1}{2}\sum_m \kappa_m\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m - \frac{i}{2}\sum_m \gamma_m\hat{L}_m^\dagger\hat{L}_m \tag{129}$$

であり、右辺第二項は（真空揺らぎに起因するエネルギー変化の類似ということで）しばしば「ラムシフト」とも呼ばれる。

量子マスター方程式を正当化するために用いた条件は、AMO 物理で扱う物理系（冷却原子系、量子光学系など）で典型的に満足されている。一方で、このような扱いが開放系の記述において万能ではなく、適用限界が存在する点は常に心に留めておく必要がある。実際、第 II 部で考える物理系（量子不純物系、共振器/回路 QED など）では、上に挙げた条件が容易に破綻し得る。

1.4.2 自発放射（Wigner-Weisskopf 理論）

3 次元自由空間中の量子電磁場と相互作用する二準位原子を考える。長波長近似（つまり原子の長さスケールが放射電磁場の波長よりも十分短い：$r_a = |\mathbf{d}|/e$ に対し $r_a/\lambda_a \ll 1$）が成立し、ま

た相互作用が十分弱く回転波近似が妥当と仮定する。この時、全体系のハミルトニアンは

$$\hat{H}_{SE} = \hbar\omega_a \left(\frac{\hat{\sigma}^z + 1}{2}\right) + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} - \left(\hat{\sigma}^+ \sum_{\mathbf{k}\lambda} g_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \text{H.c.}\right) \tag{130}$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|, \;\; g_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar\epsilon_0 V}} \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \;\; \mathbf{d} \equiv \langle e|(-e\hat{\mathbf{r}})|g\rangle \tag{131}$$

で与えられる。電磁場環境の初期状態は真空とする：$\rho_E = |0\rangle\langle 0|$。

上述の量子マスター方程式の一般論を用いれば、式 (127) に対応する係数として

$$\Gamma = 2\sum_{\mathbf{k}\lambda} \int_0^\infty d\tau |g_{\mathbf{k}}|^2 e^{i\omega_a \tau} \langle 0|\hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}\tau} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}|0\rangle \tag{132}$$

$$= \int_0^\infty \frac{2k^2 dk}{\pi^2} \frac{ck}{2\hbar\epsilon_0} \frac{|\mathbf{d}|^2}{3} \pi\delta(\omega_a - ck) \tag{133}$$

$$= \frac{\omega_a^3 |\mathbf{d}|^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} \tag{134}$$

を得る。ここで

$$\frac{\sum_{\mathbf{k}}}{V} \to \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \int 4\pi k^2 dk d\Omega, \;\; \sum_\lambda \int d\Omega \, |\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}|^2 = \frac{1}{3}|\mathbf{d}|^2, \tag{135}$$

$$\int_0^\infty d\tau e^{i(\omega_a - \omega_{\mathbf{k}})\tau} = \pi\delta(\omega_a - \omega_{\mathbf{k}}) + \text{P.v.}\frac{i}{\omega_a - \omega_{\mathbf{k}}} \tag{136}$$

を用いた。よって時間発展方程式として

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}_{\text{eff}}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}^\dagger_{\text{eff}}\right) + \Gamma\hat{\sigma}^-\hat{\rho}\hat{\sigma}^+, \tag{137}$$

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hbar\omega_a \left(\frac{\hat{\sigma}^z + 1}{2}\right) - \frac{i\hbar\Gamma}{2}\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}^- = \hbar\left(\omega_a - \frac{i\Gamma}{2}\right)\left(\frac{\hat{\sigma}^z + 1}{2}\right) \tag{138}$$

を得る。非エルミート有効ハミルトニアンの固有値虚部 Γ は励起状態の崩壊レートに対応する。実際に Γ が小さく、マスター方程式を用いた扱いが妥当であることを確かめるため、次のように書き直そう：

$$\Gamma = \frac{4\alpha_{\text{QED}}\omega_a^3 |\mathbf{d}|^2}{3c^2 e^2}, \;\; \alpha_{\text{QED}} \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137}. \tag{139}$$

原子の周波数との比を考えると、確かに $\Gamma/\omega_a \sim \alpha_{\text{QED}}(r_a/\lambda_a)^2 \ll 1$ が成り立っている。

1.5 開放系の多体物理

上で学んだ量子測定理論を通じて理解される量子開放系の多体物理について、いくつか例を取り上げる。そのほかの話題については後節も参照のこと。

1.5.1 測定誘起臨界現象

非エルミートハミルトニアンに基づく記述は、測定下の量子多体系の物理を理解する上でしばしば有用である。ここでは観測下での長時間極限、つまり定常状態の性質を考えよう。測定が粒子ロスに対応する場合は、定常状態は自明な真空状態であるが、位置測定など粒子数を保存するタイプの測定過程の場合には、量子トラジェクトリーは何らかの非自明な定常状態に到達すると期待される。非平衡定常領域の性質は、マスター方程式に従う密度行列のレベルでは駆動散逸系の文脈でも良く調べられてきた。これに対し、最近の研究では測定下の純粋状態である量子トラジェクトリーが、散逸系（つまりマスター方程式に従う混合状態）とは質的に異なる物理的性質を示すことが明らかになっている。

例として、連続測定下の 1 次元自由スピンレスフェルミ粒子系を考える：

$$d|\psi\rangle = \left(-i\hat{H}_{\rm eff} + \frac{1}{2}\sum_i \langle \hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i\rangle\right) dt|\psi\rangle + \sum_i \left(\frac{\hat{L}_i|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i\rangle}} - |\psi\rangle\right) dN_i, \tag{140}$$

$$\hat{H}_{\rm eff} = \hat{H} - \frac{i}{2}\sum_i \hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i = \sum_k \left(E_k - \frac{i\Gamma_k}{2}\right) \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k. \tag{141}$$

ここで E_k と Γ_k は、有効非エルミートハミルトニアン $\hat{H}_{\rm eff}$ を対角化して得られる複素固有値の実部と虚部で、$\hat{c}_k^{(\dagger)}$ は波数 k のフェルミオンの (生成) 消滅演算子である。式 (140) に従うトラジェクトリー $|\psi(t)\rangle$ を考え、長さ l の部分領域 A 上の縮約密度行列を

$$\hat{\rho}_A(t) = {\rm Tr}_{\overline{A}}\left[|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\right] \tag{142}$$

で導入する。$|\psi(t)\rangle$ において領域 A とそれ以外の領域 $\overline{A}$ との間に生じるエンタングルメントは、$\hat{\rho}_A(t)$ の von Neumann エントロピー（エンタングルメントエントロピー）で与えられる。ここでは、トラジェクトリーの典型的な性質に興味があるため、確率過程についてアンサンブル平均した量に着目する：

$$S(t) = -\mathbb{E}\left[{\rm Tr}_A\left[\hat{\rho}_A(t)\ln\hat{\rho}_A(t)\right]\right]. \tag{143}$$

話を具体的にするため、位置基底の積状態を初期状態とするクエンチダイナミクスを考える。まず測定がなくユニタリな場合、クエンチにより $k, -k$ の運動量を持つ準粒子ペアが生成され、それぞれ一定速度 $v_{\pm k}$ で伝搬する。片方が領域 A にもう片方が $\overline{A}$ に存在する準粒子ペアにより、領域 A-$\overline{A}$ 間のエンタングルメントが生じるという描像が成り立つ。従って各運動量 k の寄与を合わせることで、ユニタリな場合のエントロピー S^0 は

$$S^0(t) = \int \frac{dk}{2\pi} S_k^0(t), \;\; S_k^0(t) = s_0 \min\left(2|v_k|t, l\right), \;\; v_k = \frac{\partial E_k}{\partial k} \tag{144}$$

と表せる。ここで s_0 は準粒子ペアが運ぶ単位長さあたりのエントロピー寄与である。

次に測定の影響を考える。測定下では量子ジャンプが生じ、また量子ジャンプ間の発展は非エルミートハミルトニアンに従う。これらの効果を現象論的に次のように取り入れよう：

- 波数 k の準粒子は、非エルミートハミルトニアンの固有値 (141) で決まるエネルギー E_k と寿命 $1/\Gamma_k$ を持つ準粒子として振舞う。

- 量子ジャンプはレート Γ_k で生じ、その効果は「波数 k の準粒子を破壊し、エンタングルメントエントロピーを初期値にリセットしてダイナミクスを再出発させるもの」とする。

従って、エンタングルメントエントロピーへの波数 k の寄与 $S_k(t)$ の発展方程式として

$$S_k(t) = e^{-\Gamma_k t} S_k^0(t) + \int_0^t d\tau\, \Gamma_k e^{-\Gamma_k \tau} S_k(t-\tau) \tag{145}$$

を得る。第一項は時刻 t までジャンプが生じなかった場合に対応し、第二項は時刻 τ にジャンプが初めて生じそれ以降は全ての可能なジャンプ過程を含んだ寄与である。この方程式を解くことで

$$S(t) = \int \frac{dk}{2\pi} S_k(t), \;\; S_k(t) = \frac{2|v_k|}{\Gamma_k}\left[1 - e^{-\Gamma_k \min(t, l/(2|v_k|))}\right] \tag{146}$$

を得る。

問題：ラプラス変換を用いて式 (145) を解き、式 (146) を導け。ヒント：$\mathcal{L}[f(t)] \equiv \int_0^\infty dt\, e^{-\lambda t} f(t)$ に対する次の公式を用いても良い：

$$\mathcal{L}\left[e^{-\Gamma t}\right] = \frac{1}{\lambda + \Gamma}, \;\; \mathcal{L}\left[\int_0^t d\tau\, f(\tau) g(t-\tau)\right] = \mathcal{L}[f(t)]\,\mathcal{L}[g(t)], \tag{147}$$

$$\mathcal{L}\left[e^{-\Gamma t} \min[2|v|t, l]\right] = \frac{2|v|\left(1 - e^{-l(\lambda+\Gamma)/(2|v|)}\right)}{(\lambda+\Gamma)^2}. \tag{148}$$

定常状態 $t \to \infty$ では

$$S_\infty = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{2|v_k|}{\Gamma_k}\left[1 - e^{-\Gamma_k l/(2|v_k|)}\right] \tag{149}$$

を得る。この表式を用いてエンタングルメントエントロピーのスケーリングについて考察しよう。

まず単純な模型として次を考える：

$$\hat{H} = -J \sum_i \left(\hat{c}_{i+1}^\dagger \hat{c}_i + \text{H.c.}\right), \;\; \hat{L}_i = \sqrt{\gamma}\hat{n}_i. \tag{150}$$

測定は各サイトの位置測定に対応し、非エルミートハミルトニアンの固有値として

$$E_k = -2J\cos k, \;\; \Gamma_k = \gamma > 0 \tag{151}$$

を得る。虚部 Γ_k は波数に依存しない定数のため、熱力学極限（$l \gg 1$）において S_∞ はサイズ l に依らない定数となる。従ってスケーリング則は、測定の強さ γ に依らず次の面積則

$$S_\infty = \text{const.} \;\; \forall \gamma > 0 \tag{152}$$

で与えられる [Cao et al., SciPost Phys. 7, 024 (2019)]。従ってこの場合には、測定誘起相転移は生じない。

次に別の例として横磁場イジング模型

$$\hat{H} = -J \sum_i \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x - h \sum_i \hat{\sigma}_i^z, \;\; \hat{L}_i = \sqrt{\gamma}\frac{1 + \hat{\sigma}_i^z}{2} \tag{153}$$

を考えよう。測定は各サイト z 方向の磁化測定に対応する。この模型は Jordan-Wigner 変換を用いることで自由フェルミ粒子系にマップでき、非エルミートハミルトニアンを対角化すると次の複素固有値を得る：

$$E_k - \frac{i\Gamma_k}{2} = \sqrt{\epsilon_k^2 - \frac{\gamma^2}{4} + 2i\gamma(h - J\cos k)}. \tag{154}$$

ここで ϵ_k は測定が無い場合（$\gamma = 0$）、つまり横磁場イジング模型の励起スペクトルである：

$$\epsilon_k = \sqrt{4(h^2 + J^2 - 2Jh\cos k)}. \tag{155}$$

まず $h < J$ としよう。$\gamma < \gamma_c = 4\sqrt{J^2 - h^2}$ の時、実部 E_k はギャップを持ち（つまり $E_k > 0\,\forall k$）、虚部 Γ_k は $k^*(h) = \arccos h$ 付近でギャップが閉じる：

$$\Gamma_k \simeq 2\gamma\sqrt{\frac{J^2 - h^2}{\gamma_c^2 - \gamma^2}}|k - k^*| \equiv \lambda|k - k^*|. \tag{156}$$

従って、エンタングルメントエントロピーの主要な寄与は $k \simeq k^*$ に由来し、$\kappa = |k - k^*|$ とすれば次が成立する：

$$S_\infty \propto \sqrt{\gamma_c - \gamma}\int_{\frac{2|v_{k^*}|}{\lambda l}}^{\Lambda} d\kappa \frac{1}{\kappa} \propto \sqrt{\gamma_c - \gamma}\,\ln l. \tag{157}$$

つまりエンタングルメントエントロピーがサイズ l について対数則を示す。これは 1 次元臨界状態で知られたスケーリング則と一致する。臨界状態は $\gamma < \gamma_c, h < J$ というパラメータ領域で実現されており臨界「相」を形成している。従来の 1 次元臨界状態では、$\ln l$ の係数は共形場理論の中心電荷 c と関連づくが、今の場合、係数は $\sqrt{\gamma_c - \gamma}$ という依存性を持つ。

次に $\gamma > \gamma_c$ では逆に実部がギャップレスで虚部はギャップを持ち、模型 (150) と同様の議論により、エンタングルメントエントロピーは面積則を満たすことがわかる。最後に、$h > J$ の場合もやはり虚部は常にギャップを持ち面積則となる。以上をまとめると

$$S_\infty \propto \begin{cases} \sqrt{\gamma_c - \gamma}\,\ln l & \gamma < \gamma_c \\ \text{const.} & \gamma > \gamma_c \end{cases} (h < J), \qquad S_\infty \propto \text{const. } \forall\gamma\ (h > J) \tag{158}$$

となる [Turkeshi et al., Phys. Rev. B 105, L241114 (2022)]。従って $\gamma = \gamma_c$ で測定誘起相転移が生じる。

以上は、相互作用がないという特殊な状況で成立する結果である点には注意が必要である。実際、後で紹介するように相互作用の存在により上述した臨界相は消え、体積則を示すようになり、測定強度が臨界点 γ_c 直上の場合でのみ対数則が生じると考えられている [Phys. Rev. B 102, 054302 (2020)]。

1.5.2 系-環境間エンタングルメントの相転移と臨界現象

前節では測定下の着目系内部におけるエンタングルメントが、測定強度に応じて相転移や臨界性を示すことを見た。ここでは見方を変えて、着目系と外界環境（または測定器）の間で生じるエンタングルメントが示す普遍性について紹介する（図）。

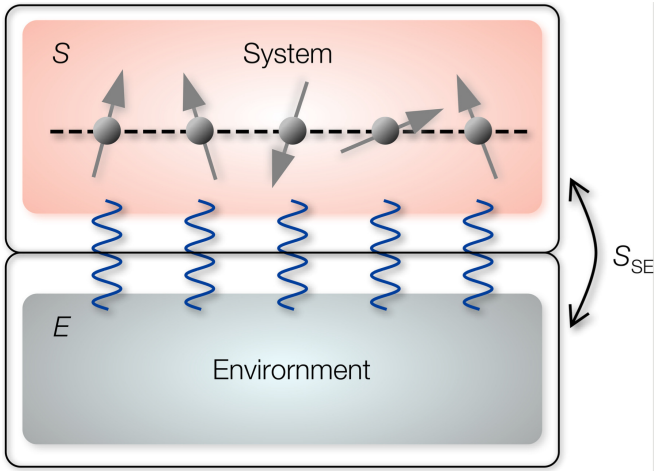

図 3　系-環境間エンタングルメント

量子測定理論の一般論で学んだ Steinespring 表現を用いると、着目系 S の（測定結果に条件付けない）非ユニタリ時間発展は一般に

$$\hat{\rho}_{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\left(\hat{\rho}_S\right) \equiv \mathrm{tr}_E\left[\hat{\rho}_{SE}\right], \tag{159}$$

$$\hat{\rho}_{SE} = \hat{U}\left(\hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_E\right)\hat{U}^\dagger \tag{160}$$

と書ける。ここで E は外界環境、$\hat{U}$ は S と E 全体に作用するユニタリ演算子である。$\hat{\rho}_{\mathcal{E}}$ は着目系の縮約密度行列に他ならない。従って、終状態 $\hat{\rho}_{SE}$ における系-環境間エンタングルメントを特徴付ける量として、次の Rényi エンタングルメントエントロピーを用いることができる：

$$S_{SE}^{(n)} = \frac{1}{1-n}\log \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}_{\mathcal{E}}^n\right]. \tag{161}$$

以下では特に $n = 2$（つまり着目系の状態の purity）について考える：

$$S_{SE} = -\log \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}_{\mathcal{E}}^2\right]. \tag{162}$$

前節と同様に、着目系は 1 次元量子多体系とする。特に、環境と相互作用する前の初期状態 $\hat{\rho}_S$ が、臨界性を示すギャップレスな基底状態 $|\Psi_0\rangle$ の場合を考える：

$$\hat{\rho}_S = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|. \tag{163}$$

このとき以下で説明するように、系-環境間エンタングルメント S_{SE} は、次のスケーリング則を示す：

$$S_{SE} = s_1 L - s_0 + \mathrm{o}(1). \tag{164}$$

ここで L は着目系全体のサイズ、s_1 は模型の詳細に依存した何らかの係数、s_0 が詳細に依らず普遍的な値をとる定数である。臨界状態の普遍性が主要項ではなく、サブリーディングな寄与に現れる点に注意したい。これは場の理論の言葉では、CPTP 写像 $\mathcal{E}$ がバルクではなく境界における摂動として作用することに起因している。

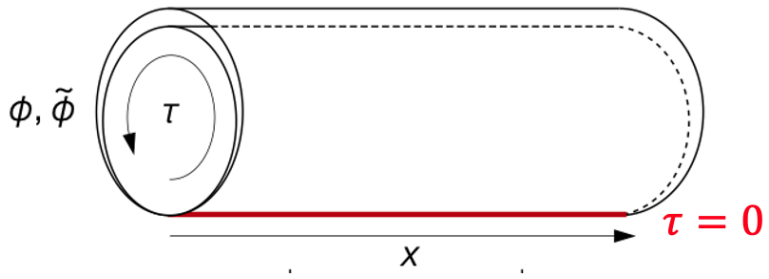

図 4　拡大ヒルベルト空間上での密度行列の経路積分表示。

このことを見るために、形式的に二重化した拡大ヒルベルト空間を考え、密度行列をその空間上のベクトルとして記述するのが便利である。例えば、初期状態 (163) は $|\Psi_0\rangle$ とその複素共役 $|\Psi_0^*\rangle$ のテンソル積で表される：

$$|\rho_S) = |\Psi_0\rangle \otimes |\Psi_0^*\rangle. \tag{165}$$

ここで拡大ヒルベルト空間上の元を $|\cdot)$ で表した。量子測定理論で学んだ Kraus 表現

$$\mathcal{E}(\cdot) = \sum_m \hat{M}_m(\cdot)\hat{M}_m^\dagger \tag{166}$$

を用いれば、縮約密度行列 $\hat{\rho}_\mathcal{E}$ は

$$|\rho_\mathcal{E}) = \sum_m \hat{M}_m \otimes \hat{M}_m^* |\rho_S) = \exp\left[-\mu \sum_l \hat{m}_l \otimes \hat{\tilde{m}}_l\right] |\rho_S) \tag{167}$$

と表される。ここで最後の行では指数の形に演算子を書き直した。詳細は場の理論の教科書に譲るが、経路積分表示を用い場の理論による記述を行うと、拡大された空間上の「密度行列 $|\rho_\mathcal{E})(\rho_\mathcal{E}|$」は次のように表される：

$$(\phi'(x), \tilde{\phi}'(x)|\rho_\mathcal{E})(\rho_\mathcal{E}|\phi''(x), \tilde{\phi}''(x)) = \frac{1}{Z_\mathcal{I}} \int_{(\phi,\tilde{\phi})_{\tau=0+}=(\phi'',\tilde{\phi}'')}^{(\phi,\tilde{\phi})_{\tau=0-}=(\phi',\tilde{\phi}')} \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\tilde{\phi}\, e^{-\mathcal{S}^\mathcal{E}_{\rm tot}[\phi,\tilde{\phi}]}.$$

ここで τ は虚時間、x は空間自由度を表し、ϕ と $\tilde{\phi}$ はそれぞれ $1+1$ 次元空間上の場である。ヒルベルト空間が二重化されていることに対応して、ϕ と $\tilde{\phi}$ の二つの場が存在する。作用 $\mathcal{S}^\mathcal{E}_{\rm tot}$ は基底状態に対応したバルクの寄与 $\mathcal{S}_0$ と、非ユニタリ発展 $\mathcal{E}$ に対応した境界 $\tau = 0$ での寄与 $\mathcal{S}_\mathcal{E}$ の和から構成される：

$$\mathcal{S}^\mathcal{E}_{\rm tot}[\phi, \tilde{\phi}] \equiv \mathcal{S}_0[\phi] + \mathcal{S}_0[\tilde{\phi}] + \mathcal{S}_\mathcal{E}[\phi, \tilde{\phi}], \tag{168}$$

$$\mathcal{S}_\mathcal{E} = \mu \int dx d\tau\, \delta(\tau) \sum_l \left(m_l[\phi]\tilde{m}_l[\tilde{\phi}] + \text{c.c.}\right). \tag{169}$$

経路積分表示を用いると、系-環境間エンタングルメント S_{SE} は次のように境界項がある場合とない場合の分配関数の比で表現できる：

$$S_{SE} = -\log \mathrm{tr}\,[|\rho_{\mathcal{E}})(\rho_{\mathcal{E}}|] = -\log \frac{Z_{\mathcal{E}}}{Z_{\mathcal{I}}}, \tag{170}$$

$$Z_{\mathcal{I}} = (Z_0)^2, \;\; Z_0 = \int \mathcal{D}\phi\, e^{-\mathcal{S}_0[\phi]}, \;\; Z_{\mathcal{E}} = \int \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\tilde{\phi}\, e^{-\mathcal{S}^{\mathcal{E}}_{\mathrm{tot}}[\phi,\tilde{\phi}]}. \tag{171}$$

これらの分配関数は境界共形場理論を用いることで計算できる。結果として

$$\log Z_\xi = b_\xi L + \log g_\xi + \mathrm{o}(1), \;\; \xi \in \{\mathcal{I}, \mathcal{E}\} \tag{172}$$

というスケーリング則が得られる。ここでサイズ L に依存しない寄与に現れる因子 g_ξ が「g 関数」として知られる普遍的な量である [Affleck and Ludwig, Phys. Rev. Lett. 67, 161 (1991)]。一方で、係数 b_ξ は理論のカットオフに依存しており、従って系の詳細に依存する。式 (164),(170),(172) を用いれば、S_{SE} のサブリーディングな寄与 s_0 と g 関数は

$$e^{s_0} = \frac{g_{\mathcal{E}}}{g_{\mathcal{I}}}. \tag{173}$$

により関係づく。

具体例として、$|\Psi_0\rangle$ が 1 次元スピン 1/2 鎖の基底状態として実現する朝永-Luttinger 液体（付録を参照）の場合を考える。非ユニタリ発展 $\mathcal{E}$ としては、各格子サイト i のスピンに作用する z 方向の QND 測定

$$\hat{M}_{0,i} = \cos\theta \hat{I}, \;\; \hat{M}_{\pm,i} = \sin\theta \frac{1 \pm \hat{\sigma}^z_i}{2}, \tag{174}$$

を考える。このときボソン化（付録を参照）により、CPTP 写像 $\mathcal{E}$ の経路積分表示として、次のような境界作用 $\mathcal{S}_{\mathcal{E}}$ が得られる：

$$\mathcal{S}_{\mathcal{E}} = \mu \int dx d\tau\, \delta(\tau) \Big[\frac{a}{2\pi^2} \big(\partial_x\phi - \partial_x\tilde{\phi}\big)^2 + \frac{c_1^2}{2a} \big(\cos(2\phi) - \cos(2\tilde{\phi})\big)^2 \Big]. \tag{175}$$

ここで $\phi, \tilde{\phi}$ はボソン場、a は短距離カットオフ、c_1 は系の詳細に依る係数である。μ は測定の強さを特徴付ける変数であり、Kraus 演算子 (174) のパラメータ θ と、次で関係づく：

$$\mu = -\log\cos\theta. \tag{176}$$

朝永-Luttinger 液体を表すバルクの寄与 $\mathcal{S}_0$ と合わせると、実はトータルの作用 $\mathcal{S}^{\mathrm{tot}}_{\mathcal{E}}$ は、後述する回路量子電磁力学における散逸量子相転移の有効理論と全く同じ形をしている。ここでは詳細に立ち入らないが、繰り込み群と境界共形場理論に基づきこの理論を解析することで、g 関数の値が次のように求まる [YA et al., in prep.]：

$$\frac{g_{\mathcal{E}}}{g_{\mathcal{I}}} = \begin{cases} 2K & \forall \mu > 0,\, K < 1/2 \\ 1 & \mu < \mu_c,\, K > 1/2 \\ \sqrt{2K} & \mu > \mu_c,\, K > 1/2 \end{cases}. \tag{177}$$

従って、系-環境間エンタングルメントの普遍性が、朝永-Luttinger 液体パラメータとして知られる正の実数 K で特徴付けられる。興味深いことに、$K > 1/2$ の場合には測定の強さ μ に閾値 μ_c が存在し、この値を超えると g 関数の値が特異的に変化する。つまり、外界環境との結合を強く

することで、エンタングルメント相転移が引き起こされる。従来のエンタングルメント相転移は着目系内部の領域間のエンタングルメントで生じるのに対し、ここでの相転移は着目系-外界環境間のエンタングルメントで発現する現象である。関係式 (177) は XXZ スピン鎖を用いた数値計算でも確認されている。

1.5.3 散逸ロス下の量子多体系

非エルミートハミルトニアンは、測定下のダイナミクスのみならず量子マスター方程式 (84) に従う散逸系の有効記述としても有用な場合がある。このことをまず単純な系で理解するため、自発放射の例を再び考えよう。脱励起に対応する Lindblad 演算子は

$$\hat{L} = \sqrt{\gamma}\hat{\sigma}^{-} \tag{178}$$

であり、非エルミートハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{\Delta - i\gamma}{2}|e\rangle\langle e| \tag{179}$$

である。この時、測定下の非エルミートダイナミクスとマスター方程式に従う散逸ダイナミクスは実質等価になる。例えば初期状態が励起状態の場合を考えよう。量子ジャンプが生じると状態は常に基底状態に射影されるが、これは自明に発展する状態である。(状態の規格化を行わない) 非エルミートダイナミクスを考えると、状態ノルムが 1 から減少するが、これは量子ジャンプによって基底状態に脱励起した事象に由来する。一度基底状態に落ちると励起状態にはその後戻ってこないため、非エルミートダイナミクスを解析すれば、マスター方程式に従う散逸ダイナミクスと等価な情報が得られる[*4]。

このことはより一般のロス散逸系に拡張できる。具体的には、ロスのみが存在する散逸系では量子マスター方程式のリウビリアンが三角行列となり、そのスペクトラムが非エルミートハミルトニアンの固有値から完全に決定されることが示せる [Briegel and Englert, Phys. Rev. A 47, 3311 (1993); Torres, Phys. Rev. A 89, 052133 (2014)]。つまり、平たく言えば量子マスター方程式 (84) に従う散逸系であっても、散逸がロス誘起であればスペクトラムの性質などおおよその物理は非エルミートハミルトニアンの解析から理解できるということになる。

(歴史的には) このことの一例として、核物理の文脈で核子崩壊が非エルミートハミルトニアンで現象論的に理解できたことが挙げられる。またメゾスコピック系において、開放チャネルが存在する電子の散乱問題で非エルミートハミルトニアンが有用であったのも本質的に同じ理由からと考えられる。これらの系では、非エルミートハミルトニアンの複素固有値の実部が実効的なエネルギー、虚部が状態の線幅/寿命として解釈される。

さらにより最近では、AMO 分野の冷却原子系や Cavity-原子系などの理解にも非エルミートハミルトニアンが有用となっている。例として着目系が何らかのボソン量子多体系で、測定過程が粒子ロスに対応する場合を考えよう。Lindblad 演算子はロスが 1 体か 2 体かによって次のように求まる：

$$\hat{L}_{\text{one}}(\boldsymbol{x}) \propto \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \quad \hat{L}_{\text{two}}(\boldsymbol{x}) \propto \hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}). \tag{180}$$

[*4] より正確には、非エルミートダイナミクスで状態ノルムの変化分を基底状態の係数とした混合状態が、マスター方程式の解に一致する。

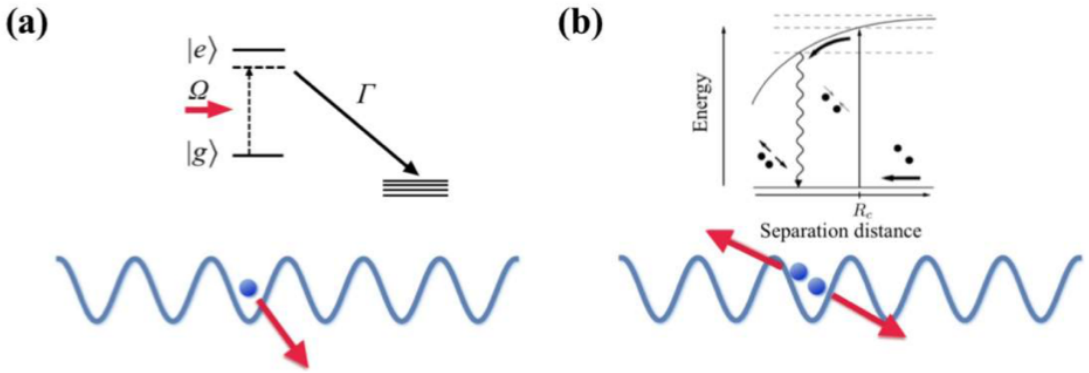

図 5　量子多体系における粒子ロス。

ここで $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ はボソンの消滅演算子である。ロスが生じない時間帯を記述する非エルミートハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\rm eff} = \int d\mathbf{x} \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{\rm r}(\mathbf{x}) - iV_{\rm i}(\mathbf{x}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{g - i\gamma}{2} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\Psi}(\mathbf{x})\hat{\Psi}(\mathbf{x}) \right\}, \tag{181}$$

と一般に書ける。ここで $-iV_{\rm i}(\boldsymbol{x})$ は 1 体ロスに起因する虚数ポテンシャルであり、$-i\gamma$ 項は 2 体ロスに対応した虚数相互作用である。いま初期状態は総粒子数 $\hat{N} = \int d\mathbf{x}\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\Psi}(\mathbf{x})$ の固有状態とし、マスター方程式に従い発展する密度行列 $\hat{\rho}$ を考えよう。この時、粒子数期待値の時間発展は非エルミートハミルトニアンと次式で直接関係づく [Duerr et al., Phys. Rev. A 79, 023614 (2009) や Prog. Theor. Exp. Phys. ptaa094 (2020)]：

$$\frac{dN}{dt} = \frac{d{\rm Tr}(\hat{N}\hat{\rho})}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle \hat{H}_{\rm eff} - \hat{H}_{\rm eff}^\dagger \rangle. \tag{182}$$

つまり、マスター方程式で記述される散逸系の粒子ロスレートが、非エルミートハミルトニアンの固有値虚部で特徴付けられる。

特に、$V_{\rm r}$ が深い周期ポテンシャルで、強束縛近似が有効な場合には

$$\hat{H}_{\rm eff} = \sum_{mn} \left(J^{\rm r}_{mn} - iJ^{\rm i}_{mn} \right) \left(\hat{b}^\dagger_m \hat{b}_n + {\rm H.c.} \right) + \frac{U_{\rm r} - iU_{\rm i}}{2} \sum_m \hat{b}^\dagger_m \hat{b}^\dagger_m \hat{b}_m \hat{b}_m, \tag{183}$$

のように有効ハミルトニアンを単純化できる。ここで $\hat{b}_n$ は格子サイト n のボソン消滅演算子である。このような物理系は、例えば AMO 分野の実験技術を用いて冷却原子気体などで実現される（図を参照）。

話を具体的にするため、冷却原子系でも実現している次の二体ロス下の Bose-Hubbard 模型を考えよう（式 (183) も参照）：

$$H_{\rm eff} = -J \sum_{m=1}^{N} \left(b^\dagger_m b_{m+1} + {\rm H.c.} \right) + \frac{U_{\rm r} - iU_{\rm i}}{2} \sum_{m=1}^{N} n_m \left(n_m - 1 \right). \tag{184}$$

ここで $U_{\rm i}$ が粒子の二体ロスを引き起こす非弾性散乱レートである。この有効非エルミートハミルトニアンの固有値虚部が、粒子のロスレートという測定可能量に対応する。Bose-Hubbard 模型

の固有値を解析的に得ることは難しい。しかし、強結合極限 $U_{\mathrm{r,i}} \gg J$ においては（漸近的に）それが可能で、例えばフィリング 1 のモット絶縁体状態に関するロスレート（つまり固有値虚部）は

$$\frac{\Gamma_{\mathrm{Mott}}}{N} = \frac{3J^2 U_{\mathrm{i}}}{4\left(U_{\mathrm{r}}^2 + U_{\mathrm{i}}^2\right)} \tag{185}$$

と求まる [Phys. Rev. A 94, 053615 (2016)]。ここで、ロスが強い極限 $U_{\mathrm{i}} \to \infty$ でロスレートがその逆乗で抑制されることに注意せよ：

$$\Gamma_{\mathrm{Mott}} \propto \frac{J^2}{U_{\mathrm{i}}}. \tag{186}$$

このように環境・測定器との強い結合によって、被測定系の量子ジャンプを伴うダイナミクス（上の場合、粒子ロス）が抑制される。これは「射影測定を連続して頻繁に行うと被測定系のダイナミクスが凍結する」という従来のゼノ効果を、連続測定へ拡張した概念とも考えられ「連続量子ゼノ効果」とも呼ばれる。連続量子ゼノ効果は、冷却原子系などで観測されており [Syassen et al., Science 320, 1329 (2008)]、Bose-Hubbard 系においては過渡的ダイナミクスにおける超流動的な振る舞いの抑制として観測されている [Tomita et al., Sci. Adv. 3, 1701513 (2017)]。また多体 waveguide QED の有効記述としても非エルミートハミルトニアンが応用され始めている [例えば Zhang & Moelmer, Phys. Rev. Lett. 122, 203605 (2019)]。

2 非エルミート物理

2.1 導入

前節では連続測定下の量子系が、非エルミートハミルトニアンを含んだ時間発展で記述されることを学んだ。本節ではより「広い意味」での非エルミート系を扱い、そこで発現する豊かな物理現象を紹介する [詳細は Adv. Phys. 69, 3 (2021) を参照]。ここで「広い意味」と称したのには主に二つ理由がある。

一つは、非エルミートハミルトニアンが有効な記述となる物理系は、測定下の量子系にとどまらずより広範なものを含むためである。例えば歴史的には、非エルミートハミルトニアンが最初に導入されたのは Gamow や Feshbach など原子核物理の研究においてであった。また、同様の記述は量子ドットなどメゾスコピック系における散乱問題や共鳴状態の解析でも有用であることが良く知られており [Moiseyev, Cambridge Univ. Press (2011)]、最近では固体電子系の文脈でも用いられている [Yoshida et al., Phys. Rev. B 98, 035141 (2018)]。さらに、実験的に古典光学系・電気回路・アクティブマターなど古典的なメタマテリアルを用いて非エルミート系を模倣することも可能となっている [例えば Miri et al., Science 363, 6422 (2019)]。

もう一つの理由は（測定下の量子系に着目したとしても）非エルミートハミルトニアンが有用となるケースは、量子ジャンプ間の時間発展という場合に限定されたものでは必ずしもないためである。例えば前節で紹介したように、量子トラジェクトリーの定常領域で生じる測定誘起臨界性は、非エルミートハミルトニアンに基づく解析で理解できた。また粒子ロスだけが存在する系であれば、測定下のダイナミクスのみならず量子マスター方程式に従う散逸的ダイナミクスも、非エルミートハミルトニアンの解析でしばしば本質的には理解できる。本節では（非エルミート発

展を含む)「測定結果に条件づけられた時間発展」も広い意味での非エルミート系と考え、これに関する最近の発展もいくつか紹介する。

2.2 有効非エルミートハミルトニアン

上で述べたように、非エルミートハミルトニアンが関係する物理系は多岐にわたり、その役割や適用範囲は物理系に依存して異なる。しかし、いずれの場合でも非エルミートハミルトニアンを有効記述として用いることのエッセンスは概ね共通している。いずれも「着目している量子（古典）系のヒルベルト（位相）空間では記述されない、あるいはその範疇を超えた自由度の効果を陽に現れない形で、もとのヒルベルト（位相）空間上で実効的に取り扱う」という共通点を持つ。量子系であれば、ヒルベルト空間の外にある自由度の効果を考えているために、通常の量子力学で守られていたエルミート性・ユニタリ性が実効的に破れる。例えば、前節で扱った測定理論では、測定器・環境の自由度が実効的に消去された後の被測定系のダイナミクスを考えると、それが非ユニタリとなっていた。

このことをもう少し明示的に理解するために、散乱問題の共鳴状態について考えよう。一般論はレビュー論文 [例えば Adv. Phys. 69, 3 (2021) の Sec. 4.1] に譲るとして、ここでは簡単な例として半無限 1 次元空間上の単一粒子を考えよう：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x), \quad x \geq 0, \quad V(x) \in \mathbb{R}. \tag{187}$$

ヒルベルト空間はもちろん二乗可積分な次の波動関数で張られる：

$$\int_0^\infty |\Psi(x)|^2 dx = 1. \tag{188}$$

このヒルベルト空間上で $\hat{H}$ はエルミートである。しかし、つぎのような「共鳴」固有状態 $|\tilde{\Psi}_r\rangle$ がしばしば実際の物理系では観測される：

$$|\langle\tilde{\Psi}_r|e^{-i\hat{H}t}|\tilde{\Psi}_r\rangle|^2 = e^{-\Gamma t}, \quad t > 0, \quad \Gamma \in \mathbb{R}. \tag{189}$$

つまり複素固有値を有した固有状態のように振舞い、そのノルムが指数的に減衰し従って有限の寿命を持っている状態である。素朴にはこの共鳴状態 $|\tilde{\Psi}_r\rangle$ は次の固有値方程式を満たすものとして考えられそうである：

$$\hat{H}|\tilde{\Psi}_r\rangle \stackrel{?}{=} \left(E - \frac{i\Gamma}{2}\right)|\tilde{\Psi}_r\rangle, \quad E \in \mathbb{R}. \tag{190}$$

しかし、$\hat{H}$ はエルミート作用素でありこのような複素固有値は持ち得ないはずなので、式 (190) は矛盾している。

これを解決する上で鍵となるのは、共鳴状態 $|\tilde{\Psi}_r\rangle$ をヒルベルト空間に属さない元として取り扱う可能性に気づくことである。具体的に言えば、$x \to \infty$ で次のように非局在した二乗非可積分な状態として共鳴状態を考えてみよう：

$$\tilde{\Psi}_r(x \to \infty) \sim e^{iax+bx} \to \infty, \quad a, b \geq 0. \tag{191}$$

この状態をもとのヒルベルト空間上で議論しようと思うと、収束因子を導入して二乗可積分にする必要がある。これを実現する一つの真っ正直なやり方は、次のような変換を行うことである：

$$\hat{S} = e^{i\theta x \frac{\partial}{\partial x}}, \ \ \theta \in \mathbb{R}, \tag{192}$$

$$\Psi_r(x) \equiv \hat{S}\tilde{\Psi}_r(x) = \tilde{\Psi}_r(xe^{i\theta}). \tag{193}$$

パラメータ θ を適切に選べば、変換後の波動関数 $\Psi_r(x)$ は二乗可積分となりヒルベルト空間の元になる。この状態 $|\Psi_r\rangle$ について式 (190) を書き直せば

$$\hat{\mathcal{H}}|\Psi_r\rangle = \left(E - \frac{i\Gamma}{2}\right)|\Psi_r\rangle, \tag{194}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}, \ \ |\Psi_r\rangle = \hat{S}|\tilde{\Psi}_r\rangle, \tag{195}$$

となる。ここで新しい有効ハミルトニアン $\mathcal{H}$ は非エルミートである：

$$\hat{\mathcal{H}} \neq \hat{\mathcal{H}}^\dagger. \tag{196}$$

式 (190) とは異なり、式 (194) は非エルミートハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ の二乗可積分な状態 $|\Psi_r\rangle$ に対する通常の well-defined な固有値問題となっている。つまり、上で述べた「もとのヒルベルト空間では考慮されていなかった自由度を、ハミルトニアンのエルミート性を代償にすることで、所望のヒルベルト空間上で実効的に考える」という非エルミート系のエッセンスを表している。

さてこのような非エルミート系は、学部で習うような通常の量子力学とは異なる性質を多く持つため、その取り扱いには注意が必要である。次節では（その物理的起源や適用限界などはいったん忘れて）一般の非エルミート行列を取り扱い、そこで成立する数学的諸性質などを紹介する。

2.3 非エルミート行列の諸性質

（第 I 部では本節以降、演算子や行列のハット記号 $\hat{\cdot}$ は省略する。）

2.3.1 導入：固有空間とエルミート行列

まず線形代数の基礎事項についていくつか復習をしよう。一般に行列 $M \in \mathbb{C}^{n\times n}$ についての固有値問題は

$$M\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}, \ \ \lambda \in \mathbb{C} \tag{197}$$

で定義され、その固有値方程式は

$$p_M(\lambda) = \det(\lambda I - M)\mathbf{v} = \prod_j (\lambda - \lambda_j)^{m_j^{\mathrm{a}}} = 0 \tag{198}$$

で与えられる。ここで m_j^{a} は「代数的」な固有値縮重度である。それぞれの固有値に対応する固有空間は

$$\mathsf{V}_M(\lambda_j) \equiv \mathrm{Ker}(M - \lambda_j I) \equiv \mathrm{span}\{\mathbf{v}_j : M\mathbf{v}_j = \lambda_j\mathbf{v}_j, \mathbf{v}_j \in \mathbb{C}^n\} \tag{199}$$

で定義されるが、この次元を「幾何的」な固有値の縮重度と呼ぶ：

$$m_j^{\mathrm{g}} \equiv \dim\mathsf{V}_M(\lambda_j). \tag{200}$$

行列 M が対角化可能である、つまり何らかの可逆な行列 V と対角行列 D について

$$M = VDV^{-1} \tag{201}$$

が成立するためには、全ての固有値について二つの縮重度が一致することが必要十分である：

$$m_j^{\mathrm{g}} = m_j^{\mathrm{a}} \quad \forall j. \tag{202}$$

このことは、実際に条件 (202) が成立する場合に固有ベクトルを用いて、式 (201) の V が構成できることを確かめればすぐに分かる。

これらの準備のもと、行列がエルミートな場合 $M = M^\dagger$ について復習をしよう。ここで $\dagger$ はもちろん行列の複素共役と転置を表す。エルミート行列 M に関する固有値は次の関係から実である：

$$\lambda = \frac{\mathbf{v}^\dagger M \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\dagger \mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}^\dagger M^\dagger \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\dagger \mathbf{v}} = \lambda^*. \tag{203}$$

また任意の異なる固有値を持つ二つの固有ベクトルは直交する：

$$\mathbf{v}_1^\dagger M \mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{v}_1^\dagger \mathbf{v}_2 = (M\mathbf{v}_1)^\dagger \mathbf{v}_2 = \lambda_1 \mathbf{v}_1^\dagger \mathbf{v}_2 \quad \Rightarrow \quad (\lambda_1 - \lambda_2)\mathbf{v}_1^\dagger \mathbf{v}_2 = 0. \tag{204}$$

これらのことから、エルミート行列がユニタリ行列 U で対角化可能であることが従う：

$$M = UDU^\dagger. \tag{205}$$

ここで D は実固有値の対角行列である。形式的に「左」固有ベクトルが

$$M^\dagger \mathbf{v} = \lambda^* \mathbf{v} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{v}^\dagger M = \lambda \mathbf{v}^\dagger \tag{206}$$

と定義できるが、エルミート行列の場合にはこれは式 (197) を満たす「右」固有ベクトルに自明に一致する。

2.3.2 ジョルダン標準形・非直交性・双直交性

前節で復習したエルミート行列の性質は、いずれも一般には非エルミート行列では成立しない。まず、非エルミート行列は一般には代数的/幾何的縮重度が異なるために、対角化 (201) が可能とは限らない。しかし、任意の行列 $M \in \mathbb{C}^{n\times n}$ について、次のジョルダン標準形には常に変換できることが知られている：

$$M = V \left[\bigoplus_j \bigoplus_{\alpha=1}^{m_j^{\mathrm{g}}} J_{n_{j\alpha}}(\lambda_j) \right] V^{-1}. \tag{207}$$

ここで $J_n(\lambda_j)$ は次で定義される固有値 λ_j、サイズ n のジョルダンブロックと呼ばれる行列である：

$$J_n(\lambda_j) \equiv \begin{bmatrix} \lambda_j & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_j & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_j & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_j & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \lambda_j \end{bmatrix}_{n\times n}. \tag{208}$$

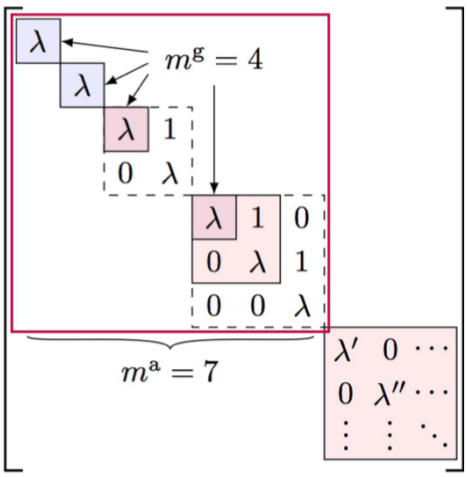

図 6　ジョルダン標準形の例。

整数 $n_{j\alpha}$ は固有値 λ_j に属する α 番目のジョルダンブロックのサイズで、次を満たす：

$$\sum_{\alpha=1}^{m_j^{\mathrm{g}}} n_{j\alpha} = m_j^{\mathrm{a}} \quad \forall j. \tag{209}$$

具体例を図に示す。$m_j^{\mathrm{a}} > m_j^{\mathrm{g}}$ となっているセクターについては、行列のランク（像空間の次元）が欠けているため対角化ができず、ジョルダンブロックまでしか簡単化できない。これは図では固有値 λ のセクターに対応する。一方で、$m_j^{\mathrm{a}} = m_j^{\mathrm{g}}$ が成立している固有空間については対角行列の形に変換できる。これは図では $\lambda', \lambda'', \cdots$ の部分に対応する。ジョルダン標準形に変換できることの証明については標準的な線形代数の教科書を参照されたい。

さて、式 (207) は任意の行列が（適切な基底では）対角成分と、その隣成分に値を持つ「冪零行列」の和で書けることを意味している。このことは行列 M について、一般に次のようなスペクトラム分解が可能なことを意味している：

$$M = \Lambda + N, \tag{210}$$

$$\Lambda = \sum_{j\alpha} \lambda_j P_{j\alpha}, \quad N = \sum_{j\alpha} N_{j\alpha}. \tag{211}$$

ここで $P_{j\alpha}$ と $N_{j\alpha}$ は、それぞれ各セクターに関する射影行列と冪零行列である：

$$P_{j\alpha} P_{j'\alpha'} = \delta_{j'j}\delta_{\alpha'\alpha} P_{j\alpha}, \quad \sum_{j\alpha} P_{j\alpha} = I, \tag{212}$$

$$(N_{j\alpha})^{n_{j\alpha}-1} \neq 0, \quad (N_{j\alpha})^{n_{j\alpha}} = 0. \tag{213}$$

このことは、ジョルダン標準形 (207) を用いればすぐに確認できる。また、スペクトラム分解 (210) は行列の計算上、いろいろな場面で有用である。その一例として次を演習問題とする：

問題：ジョルダン標準形 (207) を用いて、スペクトラム分解 (210) が得られることを確認せよ。また、解析関数 $f(z)$ について次の公式を示せ

$$f(M) = \sum_j \left[f(\lambda_j) P_j + \sum_\alpha \sum_{p=1}^{n_{j\alpha}-1} \frac{1}{p!} f^{(p)}(\lambda_j) (N_{j\alpha})^p \right]. \tag{214}$$

ここで $P_j = \sum_\alpha P_{j\alpha}$ であり $f^{(p)}$ は f の p 階微分である。特に、

$$\mathrm{Tr}[f(M)] = \sum_j m_j^{\mathrm{a}} f(\lambda_j) \tag{215}$$

が成立する。

次に、エルミート行列の場合は異なる固有値を持つ固有状態は直交したが、この直交性は非エルミート行列では一般に破綻することに注意しよう。実際、二つの異なる固有値 $\lambda_{1,2}$ について右固有状態 $\mathbf{v}_{1,2}$ を考えれば、式 (204) に対応するのは

$$\mathbf{v}_1^\dagger M \mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{v}_1^\dagger \mathbf{v}_2 = (M^\dagger \mathbf{v}_1)^\dagger \mathbf{v}_2 \neq \lambda_1 \mathbf{v}_1^\dagger \mathbf{v}_2 \tag{216}$$

であるが、$\mathbf{v}_1$ は $M^\dagger$ の固有状態とは限らないので式 (204) のような直交性は示せない。

しかし、もし $\mathbf{v}_1$ として固有値 λ_1 の左固有ベクトルを用いれば、式 (204) が復活して次が得られる：

$$\mathbf{v}_1^\dagger M \mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{v}_1^\dagger \mathbf{v}_2 = (M^\dagger \mathbf{v}_1)^\dagger \mathbf{v}_2 = \lambda_1 \mathbf{v}_1^\dagger \mathbf{v}_2, \quad \Rightarrow \quad (\lambda_1 - \lambda_2) \mathbf{v}_1^\dagger \mathbf{v}_2 = 0. \tag{217}$$

つまり非エルミート行列でも、左と右固有状態間の直交性は依然として存在する。

簡単のため、M が対角化可能と仮定しよう。すると定義より次のように分解できる：

$$M = \sum_j \sum_{\alpha=1}^{m_j^{\mathrm{a}}} \lambda_j \mathbf{r}_{j\alpha} \mathbf{l}_{j\alpha}^\dagger. \tag{218}$$

ここで $\mathbf{r}_{j\alpha}$（$\mathbf{l}_{j\alpha}$）は右（左）固有ベクトルであり、次の意味で正規直交性を満たす：

$$\mathbf{l}_{j'\alpha'}^\dagger \mathbf{r}_{j\alpha} = \delta_{j'j} \delta_{\alpha'\alpha}. \tag{219}$$

また、分解 (218) は $\mathbf{r}_{j\alpha} \to c_{j\alpha} \mathbf{r}_{j\alpha}$、$\mathbf{l}_{j\alpha} \to \mathbf{l}_{j\alpha} / c_{j\alpha}^*$ というスケール変換で不変なため、右固有状態についていつでも次の条件を課せる：

$$\mathbf{r}_{j\alpha}^\dagger \mathbf{r}_{j\alpha} = 1. \tag{220}$$

しかし、上で述べた理由から右固有状態同士は一般に非直交であることに注意せよ：

$$\mathbf{r}_{j'\alpha'}^\dagger \mathbf{r}_{j\alpha} \neq \delta_{j'j} \delta_{\alpha'\alpha}. \tag{221}$$

このような非エルミート行列の「非直交性」を定量化する指標として、次の Petermann factor が有用である：

$$K_{j'\alpha' j\alpha} \equiv (\mathbf{l}_{j'\alpha'}^\dagger \mathbf{l}_{j\alpha})(\mathbf{r}_{j\alpha}^\dagger \mathbf{r}_{j'\alpha'}). \tag{222}$$

またこれを全てのセクターについて平均をとった次の指標もしばしば有用である：

$$\bar{K}_n = \frac{1}{n}\sum_{j\alpha} K_{j\alpha j\alpha}. \tag{223}$$

簡単な例として

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \kappa & 0 \end{bmatrix}, \tag{224}$$

という行列を考えると、平均 Petermann factor は

$$\bar{K}_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\left(|\kappa| + \frac{1}{|\kappa|}\right) \tag{225}$$

と求まる。これは（直交性が満たされる）エルミート極限 $\kappa = 1$ で最小で、対角化不可能となる点 $\kappa = 0$ で発散する。この特異点は次節でも説明する「例外点」の最も単純な例にもなっている。

2.3.3 例外点

ここでは非エルミート系で重要な概念である「例外点」を導入しよう。このために、$\kappa \in \mathbb{C}$ でパラメータ付けされた行列の族 $M(\kappa) : \mathbb{C} \to \mathbb{C}^{n\times n}$ を考える。行列の各要素は領域 $\kappa \in \mathcal{D}$ で解析的とする。この時、M の異なる固有値の数 J は、$\mathcal{D}$ 上で離散的な点を除いて一定であることが示せる。これらの離散的な点上では J が減少しうるが、それらのうち式 (207) のジョルダンブロックのサイズ $n_{j\alpha}$ が不連続に変化する点を「例外点」と呼ぶ[*5]。言い換えれば、スペクトラム分解 (210) の射影部分 Λ と冪零部分 N の両方が同時に不連続な変化を起こすパラメータ点とも定義できる。

さらに平たく言えば、例外点は「複数の固有値と固有状態の両方が合流するパラメータ点の集合」ともいえる。特に、$\mathcal{D}$ 上のほとんどで対角化が可能な場合は、行列が対角化不可能となる点とも特徴付けられる。しかし（この最後の定義を例外点とする文献がたまに見られるが）一般には対角化不可能性は例外点であることの必要条件ではあるが、十分条件ではないことに注意されたい。

例外点を持つ行列の最も簡単な例として、前節で扱った次の行列を考えよう：

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \kappa & 0 \end{bmatrix}. \tag{226}$$

この行列の固有値と固有ベクトルは次のように求まる：

$$\lambda_\pm(\kappa) = \pm\sqrt{\kappa} \tag{227}$$

$$\mathbf{r}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ \pm\sqrt{\kappa} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{l}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ \pm\frac{1}{\sqrt{\kappa^*}} \end{bmatrix}. \tag{228}$$

$\kappa = 0$ で固有値と固有状態の両方が合流しており、確かにこの点が例外点となっていることがわかる。より厳密には、ここで用いている規格化では右固有状態が合流し（$\kappa = 0$ では対角化可能でないので双直交性が破綻し）左固有ベクトルは well-defined でなくなる。

[*5] このような定義をわざわざ行うのは、これら離散的な点に含まれている「エルミート行列でも生じるような通常の固有値縮退」（diabolic point と呼ぶ）を除外するためである。

ここで行ったような 2×2 行列の解析は、二準位系や Bloch ハミルトニアンを扱う際に直接関係するのみならず、一般の n 準位系を理解する上でも重要な役割を果たす。この理由は多準位系であっても、状態の合流が（多くの場合に）ある特定の二状態間で生じるため、例外点付近の特異性を解析する上ではもとの多準位系をその二状態に射影して得られる 2×2 行列を考えれば十分なためである。このような場合には（多準位系であっても）例外点近くでは、固有値が二乗根のスケーリング (227) で近づきギャップが閉じる。

合流する固有値・固有状態の数が 2 より多いと、固有値差のスケーリングは二乗根から変わってくる。このような例外点をしばしば「高次の例外点」と呼ぶ。具体例として、次の 3×3 行列を考えよう：

$$M(\kappa)=\begin{bmatrix}\kappa+i & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \kappa-i\end{bmatrix}. \tag{229}$$

これは $\kappa=0$ で三つの固有値・固有状態が同時に合流する 3 次の例外点を持つ。この付近では固有値差が

$$\delta\lambda\propto\kappa^{1/3} \tag{230}$$

というスケーリングで縮退する。

この議論は一般化できて、n 個の固有値・固有状態が同時に合流する例外点付近では、固有値差は

$$\delta\lambda\propto\kappa^{1/n} \tag{231}$$

と振舞う。この特異性の物理的に重要な帰結のひとつは、いわゆる「例外点により増強された感受性」である。これは本質的には固有値のパラメータ変化に対する、例外点付近での次の特異的な鋭敏性から理解される：

$$\frac{\partial\,\delta\lambda}{\partial\kappa}\propto\frac{1}{\kappa^{1-\frac{1}{n}}}\to\infty. \tag{232}$$

2.3.4 擬エルミート性・PT 対称性

スペクトラムの実性はエルミート行列の重要な性質の一つであるが、エルミート性は行列が実スペクトラムを持つための必要条件ではない。つまり、非エルミート行列であってもスペクトラムが実である行列が存在する。このことは（少なくとも物理の分野では)、ボーズ気体や可積分系の研究などで 1960 年代頃から既に認識されていた。その後、Yang-Lee singularity と呼ばれる非ユニタリ場の理論の研究に触発されて、1992 年頃に Bessis と Zinn-Justin らは次の一体非エルミートハミルトニアンが実スペクトラムであると予想を行った：

$$H_{BZ}=p^2+ix^3. \tag{233}$$

Bender と Boettcher らはこれを一般化した次のハミルトニアンを考えた [Bender & Boettcher, Phys. Rev. Lett. 80, 5243 (1998)]：

$$H_a = p^2 - (ix)^a, \quad a \in \mathbb{R}. \tag{234}$$

この非エルミートハミルトニアンが $a \geq 2$ で実であることを数値的に確かめ[*6]、実性を担保しているのがハミルトニアンのパリティ-時間（PT）対称性であると議論した：

$$\begin{aligned} PxP^{-1} &= -x, \quad PpP^{-1} = -p, \\ TxT^{-1} &= x, \quad TpT^{-1} = -p, \quad TiT^{-1} = -i. \end{aligned} \tag{235}$$

これは後に擬エルミート性として知られる概念を用いて一般化がなされた。擬エルミート性自体は歴史的にはもともと Dirac や Pauli らにより異なる文脈で導入された考え方であるが、現在では主に非エルミート系の研究で用いられる考え方となっている。本節ではこれらの事項について説明を行う。

簡単のため、対角化可能な行列を考える：

$$M = \sum_j \lambda_j \mathbf{r}_j \mathbf{l}_j^\dagger, \quad \mathbf{l}_{j'}^\dagger \mathbf{r}_j = \delta_{j'j}. \tag{236}$$

このとき M が「η-擬エルミート」であるとは、次のような行列 η が存在することを意味する：

$$M^\dagger = \eta M \eta^{-1}, \quad \eta = \eta^\dagger. \tag{237}$$

特に、$\eta = I$ の場合は通常のエルミート性 $M = M^\dagger$ の条件に帰着する。また、このように何らかのエルミートかつ可逆な η で式 (237) を満たすものが存在すれば単に「M は擬エルミート」という。

固有値スペクトラムの観点からは、M が擬エルミートであることは次と等価である：

> M の固有値は全て実数か、もしあれば複素固有値は複素共役ペアで同じ縮重度で現れる。

このことは次の議論から示される。まず M が擬エルミートとすると、スペクトラム展開を用いて

$$M\mathbf{r}_j = \lambda_j \mathbf{r}_j, \tag{238}$$

$$M\left(\eta^{-1}\mathbf{l}_j\right) = \eta^{-1} M^\dagger \mathbf{l}_j = \lambda_j^* \left(\eta^{-1}\mathbf{l}_j\right) \tag{239}$$

が成立するので、上の主張が成立しているのは明らか。逆に後者が成立するならば、スペクトラムの性質から

$$M = \sum_{j_r} \lambda_{j_r} \mathbf{r}_{j_r} \mathbf{l}_{j_r}^\dagger + \sum_{j_c} \left(\lambda_{j_c} \mathbf{r}_{j_c+} \mathbf{l}_{j_c+}^\dagger + \lambda_{j_c}^* \mathbf{r}_{j_c-} \mathbf{l}_{j_c-}^\dagger \right) \tag{240}$$

と分解が行える。これに対して、η をつぎのように定めれば、M は η-擬エルミートである：

$$\eta = \sum_{j_r} \mathbf{l}_{j_r} \mathbf{l}_{j_r}^\dagger + \sum_{j_c} \left(\mathbf{l}_{j_c-} \mathbf{l}_{j_c+}^\dagger + \mathbf{l}_{j_c+} \mathbf{l}_{j_c-}^\dagger \right). \tag{241}$$

[*6] このことは後に厳密に示されている [Dorey et al., J. Phys. A 34, 5679 (2001)]。

この η が可逆であることは、式 (241) の全ての $\mathbf{l}$ を $\mathbf{r}$ に置換して η^{-1} が構成できることから明らかである。

ここで注意したいのは、一般には擬エルミート性自体はスペクトラムの実性について、必要条件でも十分条件でもない点である。しかし、M の固有値が全て実数であることは次と等価である：

何らかの可逆な O に対して M が $OO^\dagger$-擬エルミート

このことを示すために、まず M が実スペクトラムを持つとしよう。適当な正規直交基底 $\{\mathbf{v}_j\}$ について

$$O = \sum_j \mathbf{r}_j \mathbf{v}_j^\dagger, \quad O^{-1} = \sum_j \mathbf{v}_j \mathbf{l}_j^\dagger, \tag{242}$$

という行列を定義すれば

$$M = \left(OO^\dagger\right) M^\dagger \left(OO^\dagger\right)^{-1} \tag{243}$$

が成立するため、確かに M は $OO^\dagger$-擬エルミートである。逆に、M が $OO^\dagger$-擬エルミートとすると

$$O^{-1} M O = O^\dagger M^\dagger \left(O^{-1}\right)^\dagger \tag{244}$$

が成立する。つまり $M_0 = O^{-1} M O$ とすれば $M_0 = M_0^\dagger$ であり、M_0 は実スペクトラムを持つ。相似変換でスペクトラムは不変なため、もとの M も実スペクトラムを持つ。

さて、本節冒頭で紹介した PT 対称性を満足する非エルミート系は、擬エルミート系の典型例となっている。以下で見るようにこの系は（典型的には）非エルミート性を増強するに従い実から複素スペクトラムへの転移を示し、転移点が例外点となっている。非エルミート系に特有な物理現象の多くが例外点近くで引き起こされるため、PT 対称な非エルミート系は（その概念的な分かりやすさもあり）非エルミート現象を実現する上での物理的にシンプルな設計指針も与える。このような経緯から、歴史的にも PT 対称な系の研究が契機となり非エルミート物理の研究が発展した。

一般に H が PT 対称であるとは次のことを意味する：

$$PTH\,(PT)^{-1} = H. \tag{245}$$

ここで P は何らかのパリティ演算子：

$$P^2 = 1 \tag{246}$$

で、T は時間反転演算子である。T は複素共役として作用し、$H = H^{\mathrm{T}}$ が成り立つと仮定しよう。条件 (245) は次のように書き直せる：

$$PHP^{-1} = H^\dagger. \tag{247}$$

つまり、H は P-擬エルミートであり、上で示した主張から H の固有値は実か複素共役ペアである。次に式 (238) と (239) を、$\eta = \eta^{-1} = P$ と $\mathbf{l}_j = T\mathbf{r}_j$ であること[*7]を用いて書くと、次のようになる：

[*7] これは $THT^{-1} = H^\dagger$ なため、$T\mathbf{r}_j$ が $H^\dagger$ の右固有状態、つまり H の左固有状態であることから従う。

$$M\mathbf{r}_j = \lambda_j \mathbf{r}_j, \tag{248}$$

$$M\left(PT\mathbf{r}_j\right) = \lambda_j^* \left(PT\mathbf{r}_j\right). \tag{249}$$

固有状態が PT 対称で $\mathbf{r}_j \propto PT\mathbf{r}_j$ を満たすならば、この二つの条件は同一状態に対するものであり、固有値が実であることが従う。もし固有状態 $\mathbf{r}_j$ が PT 対称でないならば、この二つは独立な状態に関する条件であり、スペクトラムが複素共役な固有値を持つことが言える。前者が全ての固有状態に対して成立する際「PT 対称性が破れていない（unbroken)」と称し、後者が少なくとも一つの固有状態で成立する際「PT 対称性が破れている（broken)」と呼ぶ。定義より、PT 対称性の「破れ」は実から複素スペクトラムへの「転移」を伴う。

これらの概念を、二準位系の簡単な例で確認しよう：

$$M = \begin{pmatrix} i\gamma & \kappa \\ \kappa & -i\gamma \end{pmatrix}, \quad \gamma, \kappa > 0. \tag{250}$$

この行列は次のパリティ行列について PT 対称であり、従って P-擬エルミートである：

$$P = \sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{251}$$

固有値は非エルミート性が弱い場合に全て実で、強くなると複素共役ペアを形成する：

$$\lambda_\pm = \pm\sqrt{\kappa^2 - \gamma^2}. \tag{252}$$

対応する右固有ベクトルは次のように求まる：

$$\mathbf{r}_\pm = \begin{pmatrix} i\gamma/\kappa \pm \sqrt{1 - \gamma^2/\kappa^2} \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{253}$$

上で用いた呼び方に従えば、これは「$\gamma < \kappa$ で PT unbroken、$\gamma > \kappa$ で PT broken である」とも言える。スペクトラムの転移点直上 $\gamma = \kappa$ では、二つの固有状態が合流することに注意しよう。つまり、この点は例外点となっている。このように PT 対称性の「破れ」が生じる際には、典型的に例外点の構造が生じる。例外点は一般のパラメータ空間では（測度ゼロなため）実現が容易でないが、PT 対称な系を用いればこのように理想的には一つのパラメータを調節すれば良く、最小限のパラメータ調節で例外点の実現が可能となる。これが非エルミート系の研究で PT 対称な系が重宝される理由の一つである。

さて、実スペクトラムの領域では式 (243) にあるような、M が $OO^\dagger$-擬エルミートとなる行列 O が構成できるはずだが、これを行うことは演習問題としよう。

問題：PT unbroken（つまり $\gamma < \kappa$）な場合に、式 (243) を満足する行列 O を与えよ。

もう少しいくつか典型的な例を紹介しよう。冒頭にも述べたように歴史的には、次の一体ハミルトニアンが PT 対称な非エルミートハミルトニアンとして最初に明示的に解析された：

$$H_a = p^2 - (ix)^a, \quad a \in \mathbb{R}. \tag{254}$$

このハミルトニアンは $a = 2$ では調和振動子に一致するので、自明に実スペクトラムであるが、実は非エルミートな $a > 2$ の場合にも実（かつ正定値）スペクトラムを持つ。これを確かめるのは自明ではないが、Bethe 仮設に似た解析を行うことで厳密に示すことができる。

実性がより明示的に理解できる一体非エルミートハミルトニアンとして

$$H_V = p^2 + \cos(2x) + iV\sin(2x), \quad V \in \mathbb{R}, \tag{255}$$

を考えよう。H_V は $|V| < 1$ において実スペクトラムを持つ。このことは、式 (243) を満足する演算子 O として次が構成できることに気づけばすぐに示される：

$$O = e^{\frac{p}{2}\tanh^{-1}V}. \tag{256}$$

実際、この O に対して H_V は $O^\dagger O$-擬エルミートであり、式 (244) に対応するエルミートハミルトニアンが

$$H_0 = O^{-1}HO = p^2 + \sqrt{1-V^2}\cos(2x) \tag{257}$$

と求まる。実スペクトラム $|V| < 1$ の場合には H_V の固有値が H_0 のそれと一致する。H_V は実-複素スペクトラムの転移点 $|V| = 1$ で対角化不可能となる。この点は、H_V のような連続スペクトラムの場合、数学的には spectral singularity と呼ばれる。ハミルトニアン H_V は、古典光学系で実効的に実現されており、転移点付近では光の非相反な伝搬など興味深い非エルミート物理現象が生じる。

まとめも兼ねて、本節で紹介した具体例がいずれも共通の振る舞いを示していることに注意されたい。つまり実スペクトラムのエルミート極限からスタートして、非エルミート性を大きくするに従いエネルギー間のギャップが減少し、次第に固有値と固有状態が合流してゆき、例外点で一致する。さらに非エルミート性を増大すると、最終的には複素共役ペア固有値の異なる状態に分裂する。このような振る舞いは、擬エルミートあるいは PT 対称な非エルミート系で典型的なものである。

2.3.5 無限次元に関する注意

最後に無限次元の場合に関する、技術的な注意点に簡単に言及する。まず非エルミート系の研究では、しばしば「polar 分解」と呼ばれるテクニックが有用である。これは非エルミート行列を含む任意の有限次元の行列について存在する次のような分解である：

$$M = UQ. \tag{258}$$

ここで U はユニタリ行列で、Q は半正定値エルミート行列である。特に、もし M が可逆ならばこの分解は一意に定まる。

しかし、このような分解は無限次元では一般に行えない。これを理解するためには、そのような具体例としてボソンの消滅演算子 a を考えれば十分である。指数を

$$\mathrm{ind}M \equiv \mathrm{dimKer}M - \mathrm{codimIm}M \tag{259}$$

で定義しよう。もし polar 分解できるならば、ユニタリ行列とエルミート行列は常に指数ゼロなため、$\mathrm{ind}M = \mathrm{ind}U + \mathrm{ind}Q = 0$ である。しかし、消滅演算子 a を考えると

$$\mathrm{ind}a = 1 - 0 > 0 \tag{260}$$

なので、式 (258) と矛盾し polar 分解はできないことになる。つまり無限次元では一般に polar 分解は存在しない。

二つ目の注意として、無限次元ではスペクトラムの実性を保証する式 (243) に現れる $\eta = OO^\dagger$ は、必ずしも可逆でなくともよい。このことを考慮するため、次の「準エルミート性（quasi-Hermiticity）」と呼ばれる概念が有用となる場合がある：

$$\xi M = M^\dagger \xi. \tag{261}$$

ここで ξ は正定値エルミート演算子だが、無限次元の場合は必ずしも可逆ではない（つまり ξ^{-1} が有界とは限らない）[*8]。一般に、M が準エルミートであればスペクトラムが実であることが示されている。

例として次の作用素を考えよう：

$$H_{g(\cdot)} = p^2 - \left[g^2(x) + ig'(x)\right]. \tag{262}$$

ここで $g(x)$ は任意の実関数で $g'(x) = dg/dx$ である。これは次の関係を満たす：

$$\zeta H_{g(\cdot)} = H^\dagger_{g(\cdot)} \zeta, \quad \zeta = p + g(x). \tag{263}$$

この時、$g(x)$ をうまく選べば ζ は正定値エルミート演算子にとれて従って $H_{g(\cdot)}$ は実スペクトラムを持つ。しかし、一般には ζ の可逆性は保証されない。

比較のため「擬エルミート性」の定義 (237) を思い出すと、η は可逆エルミートであるが一般に正定値ではなかった。有限次元行列では η が正定値な場合に限り実スペクトラムが保証された。有限次元では正定値演算子は常に可逆なため、準エルミート性は $\eta = OO^\dagger$ なる正定値の擬エルミート性の条件と一致する。

2.4 非エルミート物理に関する話題

ここでは本章冒頭に述べた広い意味での非エルミート系に特有な物理的性質に着目し、いくつかの話題を取り扱う。やや各論的にはなってしまうが、非平衡開放系が示す豊かな物理/数理の一端を紹介したい。非エルミートハミルトニアンに忠実に従う系にとどまらず、測定下の物理系や散逸系、対応する古典系なども含めた、広範な開放系を念頭に置いて紹介する。本講義の目的はこれらの話題を網羅的に紹介することではないため、あくまで基本的事項を紹介するにとどめるが、さらに興味を持たれた方はレビュー論文 [Adv. Phys. 69, 3 (2021)] とそこで言及されている文献などを参照されたい。

2.4.1 非ユニタリ場の理論と臨界現象

臨界現象は Lee と Yang の相転移理論や Michael Fisher の非ユニタリ場の理論などの仕事以来、非エルミート系の分野で最も長く研究されてきた重要なトピックの一つである。ここでは最近のいくつかの進展も含め、臨界現象と非エルミート系の接点について紹介を行う。

[*8] 例えば消滅演算子 a について $O = 1/(1 + a^\dagger a)$ は正定値エルミートだが、有界な逆 O^{-1} が存在せず可逆ではない。

Lee と Yang が行った議論 [Lee & Yang, Phys. Rev. 87, 410 (1952)] から始めよう。次で与えられる、一般の格子 Λ 上の強磁性 Ising 模型を考える：

$$H = -\sum_{j,j'\in\Lambda} J_{jj'}\sigma_j^z\sigma_{j'}^z - h\sum_{j\in\Lambda}\sigma_j^z,\ \ J_{jj'}\geq 0\ \ \forall j,j'\in\Lambda. \tag{264}$$

総スピン数（つまり格子の「体積」）を $|\Lambda|$ と表せば、このハミルトニアンに対応する分配関数は

$$Z \equiv \mathrm{Tr}e^{-\beta H} = e^{-|\Lambda|\beta h}\mathfrak{p}(e^{2\beta h}) \tag{265}$$

と書ける。ここで $\mathfrak{p}(z)$ は次数 $|\Lambda|$ の何らかの多項式である。Lee と Yang はこの多項式の零点が、複素 z 平面上における単位円上に位置することを示した。言い換えれば、分配関数が零値（$Z=0$）をとるのは、磁場が純虚数 $h\in i\mathbb{R}$ の値をとる時に限るということだ。この零点をしばしば Yang-Lee zeros と呼ぶ。熱力学極限で零点は稠密になり連続的なスペクトラムを形成するが、ある $h_c = \pm i\kappa_c$（$\kappa_c\in\mathbb{R}$）を境にしてスペクトラムの分布関数は零値をとる。この特異点を Yang-Lee edge singularities と呼ぶ。

Michael Fisher はその後、Yang-Lee zeros を一般化したものを提案した。つまり、一般のハミルトニアン H について温度 z を複素数に解析接続した分配関数を定義し、その零点を考えた：

$$Z(z) \equiv \mathrm{Tr}e^{-zH} = e^{g(z)}\prod_n\left(1-\frac{z}{z_n}\right). \tag{266}$$

ここで最右辺への分解には Weierstrass の因数分解定理を用い、$g(z)$ は複素平面全体で正則な関数である。この分配関数の零点 z_n をしばしば Fisher zeros と呼ぶ。

さてこれら零点の集合が作り出す特異性は、見方を変えれば非エルミートハミルトニアンの臨界現象を議論しているものともみなせる。実際、例えば虚数磁場の Ising 模型 (264) を考えると、Yang-Lee edge singularity $h_c = i\kappa_c$ 付近では、磁化など種々の物理量が臨界的振る舞いを見せる。Michael Fisher はこの臨界現象を理解するため、次の非ユニタリ場の理論を導入した [Fisher, Phys. Rev. Lett. 40, 1610 (1978)]：

$$S = \int d^d\boldsymbol{x}\left[\frac{1}{2}(\nabla\phi(\boldsymbol{x}))^2 + i(\kappa-\kappa_c)\phi(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{3}ig\phi(\boldsymbol{x})^3\right]. \tag{267}$$

この理論は次元が $d>6$ の場合に平均場的な振る舞いが期待されるため、Fisher は $\epsilon = 6-d>0$ が小さいとして摂動的繰り込み群を行い臨界指数を求めた（ϵ 展開）。

非ユニタリ場の理論 (267) において、$d=2$ かつ $\kappa=\kappa_c$ の場合は共形不変性が存在する。この模型は Cardy により解析がなされ、非ユニタリではあるがミニマル模型と呼ばれる重要なクラスの共形場理論（CFT）に属していることが指摘された[*9]。この帰結として種々の物理量における臨界指数が共形次元から決定される。実際、この共形不変な場の理論に対応する格子模型が次のように構成されており

$$H_{\lambda,\kappa} = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(\sigma_j^z + \lambda\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + i\kappa\sigma_j^x),\quad \lambda,\kappa\in\mathbb{R}, \tag{268}$$

[*9] 具体的には中心電荷が $c=-22/5$ で $\mathcal{M}(5,2)$ のミニマル模型となる。

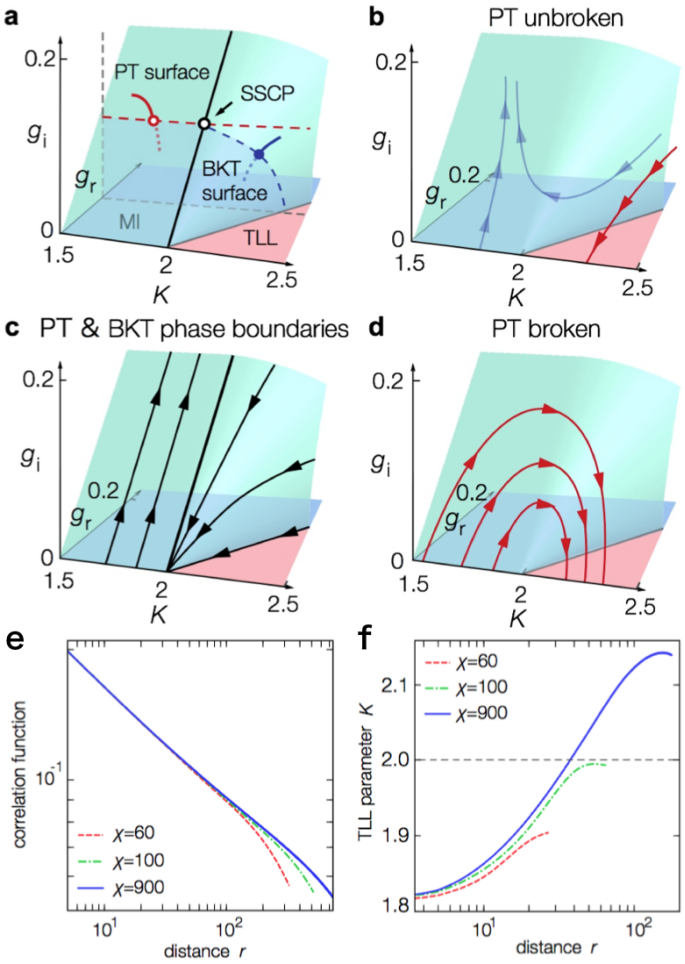

図 7　一般化 sine-Gordon 模型における非エルミート臨界現象。

$\lambda < 1$ において存在する虚数磁場の臨界点 κ_c に関して、その臨界指数が CFT から予言される値と一致することが数値的に確かめられている [von Gehlen, J. Phys. A 24, 5371 (1991)]。

これらの模型 (267),(268) はスピン反転 $\phi \to -\phi$、$\sigma^x \to -\sigma^x$ をパリティ変換とする PT 対称性を満たす。特に場の理論 (267) で $\kappa = \kappa_c$ の場合は、前節で言及した Bessis と Zinn-Justin が考えた一体ハミルトニアン (233) を動機づけたとされる理論に他ならない。また非エルミート格子模型 (268) は PT 対称な非エルミート系で典型的に満たされる性質を満足する。つまり、κ が十分小さい時には実スペクトラムを持ち、ギャップが閉じる臨界点 $\kappa = \kappa_c$ で例外点が生じ、その点を境に実-複素スペクトラム転移（つまり PT 対称性の「破れ」）が生じる。

さて、非エルミート系はこのような実-複素スペクトラム転移に誘起されるユニークな臨界現象をしばしば示す。この典型的な例として、次の一般化 sine-Gordon 模型を考えよう：

$$H_{\alpha_{\rm r},\alpha_{\rm i}} = \int dx \left\{ \frac{\hbar v}{2\pi} \left[K(\partial_x \theta)^2 + \frac{1}{K}(\partial_x \phi)^2 \right] + \frac{\alpha_{\rm r}}{\pi} \cos(2\phi) + \frac{i\alpha_{\rm i}}{\pi} \sin(2\phi) \right\}. \tag{269}$$

ここで ϕ と θ は $[\phi(x), \partial_x \theta(x')] = -i\pi\delta(x-x')$ を満たす場の演算子である。この模型が $\phi \to -\phi$, $x \to -x$ をパリティ変換とする PT 対称性を満足することに注意されたい。この模型を摂動的繰り込み群で解析した結果を図 a-d に示す。まず $\alpha_{\rm r} > \alpha_{\rm i}$ の場合は、PT unbroken な領域に対応し、通常のエルミートな sine-Gordon 模型における BKT 転移の相図と本質的に等価となる（図

b)。実はこれは後に扱う異方近藤模型の繰り込み群相図と等価なため、その物理的性質についてはそちらも参照されたい。

これに対して $\alpha_{\rm r} < \alpha_{\rm i}$ は、PT broken な領域に対応し、c 定理を破るような半円状の繰り込み群フローが生じる（図 d)。ここで c 定理とは任意のユニタリ $1+1$ 次元 CFT において、中心電荷が繰り込み群に沿って単調減少するという定理である。図 d のフローは $c=1$ の朝永ラッティンジャー液体相を始終点の両方に持つため c 定理を満足せず、この意味で非ユニタリ系特有の振る舞いが生じている。このことは、対応する格子模型の朝永ラッティンジャーパラメータ K を数値的に解析することでも確かめられている（図 e,f）[Nat. Commun. 8, 15791 (2017)]。

場の理論 (269) で $\alpha_{\rm r} = \alpha_{\rm i}$ という特別な場合は、理論が共形不変性を持ち Liouville CFT と呼ばれる。この非ユニタリ場の理論はミニマル模型には属さないが、二-三点相関関数が解析的に求まる可解性を有しており、数理物理の文脈からも興味が保たれている。

ところで模型 (269) は、実-複素スペクトラム転移点の位置（$\alpha_{\rm r} = \alpha_{\rm i}$）が解析的にわかっている数少ない多体系の一つである。前節の議論から、実スペクトラム（$\alpha_{\rm r} > \alpha_{\rm i}$）の場合には、対応するエルミートハミルトニアンが適切な相似変換 (244) で構成できるはずである。このことは演習問題とする。また式 (267) と (269) は、それぞれ一体ハミルトニアン (233) と (255) の多体系への拡張と考えることができる。特に後者の一般化 sine-Gordon 模型については、1 次元ボーズ気体系で両者が同じ模型の別極限として自然に関係づく。

問題：$1 > |\alpha_{\rm i}/\alpha_{\rm r}|$ の場合に、非エルミートハミルトニアン (269) をエルミートハミルトニアンに相似変換する演算子 O を構成せよ（式 (244) を参照)。

最後に、前章でも紹介したエンタングルメントエントロピー S_{EE} の臨界性にも言及しておこう。ユニタリ CFT の場合には、中心電荷 c がサイズ l の部分系に関する S_{EE} のスケーリングに現れることが知られている：

$$S_{EE} \sim \frac{c}{3} \ln l. \tag{270}$$

非ユニタリな CFT でもミニマル模型に関しては（次のような修正を行った上で）同様の結果が成立する：

$$S_n \equiv \frac{1}{1-n} \ln {\rm Tr}[\rho_l^n] \sim \frac{c_{\rm eff}(n+1)}{6n} \ln l. \tag{271}$$

ここで S_n は n 次の Rényi エントロピー、ρ_l は長さ l の部分系に対応した密度行列であり、$c_{\rm eff} = c - 24 h_{\rm min}$ は $h_{\rm min}$ を最小共形次元とする実効中心電荷である。

2.4.2 測定誘起臨界性・非平衡ダイナミクス

測定下の（つまり測定結果で条件づけられた）量子状態の時間発展と、散逸系の（つまり測定結果についてアンサンブル平均をとった）密度行列の時間発展は、一般には質的に異なり得る。本節では、そのような（散逸系に類を持たない）測定で誘起されるユニークな多体現象をいくつか紹介する。

まず（前節でも考えた）連続測定下の量子多体系におけるトラジェクトリーの性質を考えよう。今回は相互作用がある次のボソン多体系を考える（図 a)：

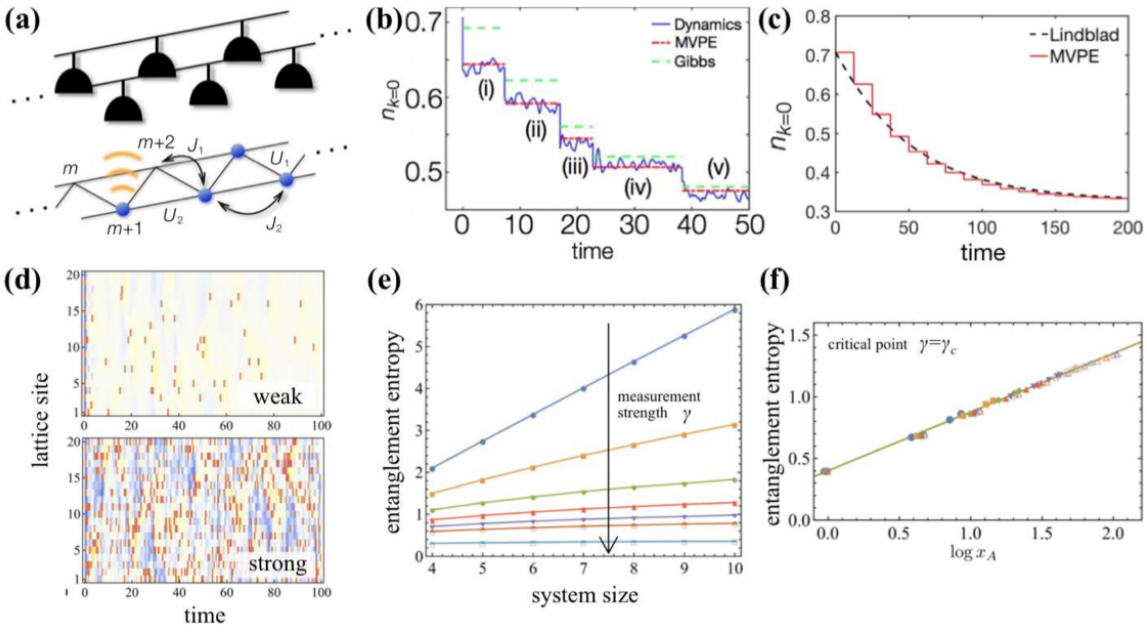

図 8　測定に誘起された量子多体系の heating と臨界現象。

$$H = -\sum_m \left(J_1 b_m^\dagger b_{m+1} + J_2 b_m^\dagger b_{m+2} + \text{H.c.}\right) + \sum_m \left(U_1 n_m n_{m+1} + U_2 n_m n_{m+2}\right), \tag{272}$$

$$L_m = \sqrt{\gamma} n_m. \tag{273}$$

ここで Lindblad 演算子 L_m はサイト m の粒子占有数に関する測定を表すが、これは多体系の位置測定に物理的には対応している。量子ジャンプが生じると、測定の反作用で誘起される波束の収縮に伴い系のエネルギーが増加し、heating が生じる（図 b,c)。測定強度 γ が弱い場合には量子ジャンプの間に十分な時間間隔が存在し、多体系は内部ダイナミクスによって熱平衡状態に緩和する（「熱化」と呼ぶ）[Phys. Rev. Lett. 121, 170402 (2018)]。従って長時間極限では無限温度状態に到達するが、これはマスター方程式のレベルで知られる定常状態 $\rho \propto I$ と矛盾しない[*10]。

逆に測定強度 γ が強い極限を考えると、測定下の量子状態は（実質的に）位置射影測定を連続的に作用されるため、通常の量子 Zeno 効果から期待されるように、粒子が各サイトに局在した状態（つまり Mott 状態）が安定化される。しかし一方で、マスター方程式の定常状態は γ の大きさに依らずに常に無限温度状態である。従って、測定下の量子状態と散逸系としての密度行列では、定常状態の性質が質的に異なることが示唆される。

それでは γ に関する両極限の中間領域では何が起こるだろうか。数値的にではあるが、固有状態の意味での「測定誘起相転移」とも呼ぶべき現象が生じ、さらに相転移点直上 $\gamma = \gamma_c$ で特異な臨界性を示すことが確認されている [Phys. Rev. B 102, 054302 (2020)]。具体的には、測定下状態の定常領域においてエンタングルメントエントロピー S_{EE} を計算することで、そのスケーリン

[*10] より一般に、Lindblad 演算子がエルミートな場合には無限温度状態が定常状態となることが（物理的に妥当な条件の下で）示せる。

グ則が

$$S_{EE} \propto \begin{cases} L & \gamma < \gamma_c \\ \ln L & \gamma = \gamma_c \\ L^0 & \gamma > \gamma_c \end{cases} \tag{274}$$

という転移を起こすことが見つかっている。ここで L は部分系のサイズである。特に臨界点 $\gamma = \gamma_c$ では、S_{EE} の対数スケーリングが定性的にこそ CFT から予言されるもの (270) と一致するが、定量的にはユニタリ CFT やミニマル模型など従来知られている臨界性のいずれとも異なっており、非従来的な普遍クラスに属している可能性がある。このような測定誘起相転移/臨界性は他の模型でも確認されており、また量子回路を用いたモデルでも議論されている。

さて多体系は過渡的（transient）な領域でも興味深い非平衡現象を示す。このような非平衡「ダイナミクス」でも、測定下と散逸系では質的な違いが生じうる。一つの例は、測定下多体系での「局所性」の破れである。特殊相対論で学んだように、情報は光の速さを超えては伝わらず、従ってある時空点から広がる光円錐（light cone）の内側に情報の伝搬が制限される。このような意味での局所性が、非相対論的な局所相互作用する量子多体系にも存在することが Lieb と Robinsion により示されており、対応する実効的な光円錐は「Lieb-Robinson 限界」として知られている [Lieb & Robinson, Comm. Math. Phys. 28, 251 (1972)]。

測定下のダイナミクスではこの光円錐を超えた相関の伝搬が生じ、従来の意味での Lieb-Robinson 限界は破綻する（図 a,b）[Phys. Rev. Lett. 120, 185301 (2018)]。これはマスター方程式において Lieb-Robinson 限界の存在が示されている散逸系とは対照的である。このような測定下多体系における局所性の破れは、量子回路を用いた研究でも指摘されている [Li et al., Phys. Rev. B 104, 104305 (2021)]。特に、測定過程や相互作用が局所的であっても、測定結果に条件づけられた状態の時間発展は局所ユニタリ回路では構成ができないことが示されている [Motta et al., Nat. Phys. 16, 205 (2020)]。また、系が非相反性を持つ場合は、相関の伝搬が非相反になることに伴い、エンタングルメントの定常値は抑制され、相反な場合には生じない振動現象を示す（図 c）[Phys. Rev. Lett. 120, 185301 (2018)]。

最後に開放多体系のダイナミクスに関する注意を一つ述べる。第 II 部で扱う Gaussian 状態は、純粋状態と密度行列どちらも記述できるため、測定下量子系や散逸系におけるダイナミクスの記述にも有用である。特に、ハミルトニアンが二次形式でかつ Lindblad 演算子が生成/消滅演算子について一次であれば、Gaussian 状態の時間発展は Gaussian にとどまるためダイナミクスが厳密に計算できる。一方で、ハミルトニアンが例え二次形式であっても Lindblad 演算子が二次以上であると、状態は一般に非 Gaussian になる。これは非エルミートハミルトニアン H_{eff} が $L_m^\dagger L_m$ という項を通じて相互作用を持つためである。物理的には、環境や測定器を介した実効的な相互作用が被測定系に生じていると解釈できる。言い換えれば、例え被測定系が非相互作用系であっても、測定や散逸が存在する場合のダイナミクスは一般には相互作用を有した多体問題となる。

2.4.3 非エルミートバンドトポロジー

前節までは開放多体系の量子的側面に着目してきたが、最後の本節では開放系のうち特に非エルミート系が示す非従来的なバンドトポロジーについて紹介しよう。以下で議論する物理は古典類似物が存在し、本質的に一粒子描像で理解できる現象ではあるものの、エルミート系に類の無

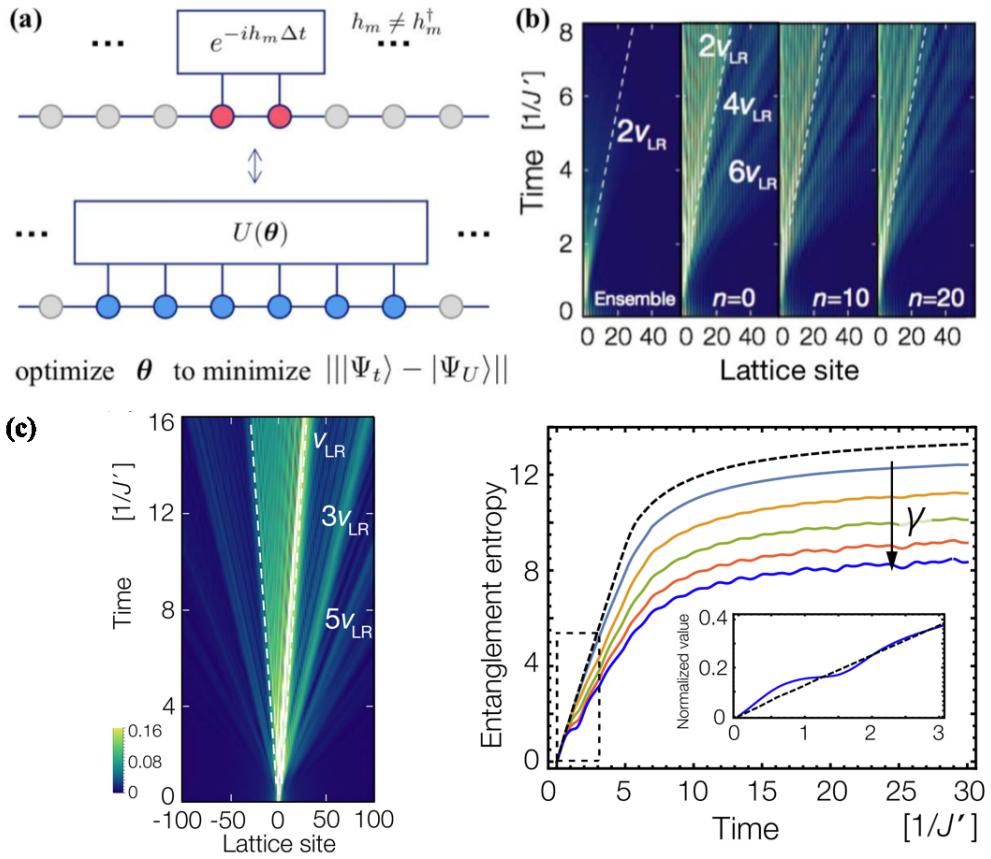

図 9　(a,b) 測定下の量子多体系における局所性の破れ。(c) 相関の伝搬の非相反性 (左) と、それに伴うエンタングルメントの抑制と振動 (右)。

い顕著な性質をいくつか持つという点で興味深い。

まずエルミート系のバンドトポロジーについて簡単に復習しよう。並進対称かつ非相互作用系であれば、固有値問題は波数 $\boldsymbol{k}$ でパラメータ付された $n \times n$ エルミート行列 $H(\boldsymbol{k})$ の固有値を求める問題に帰着する。この行列 $H(\boldsymbol{k})$ が Bloch ハミルトニアンであり、$\boldsymbol{k}$ を連続的に変化させると対応した固有値が連続スペクトラムの「束」を形成する。これは「バンド」と呼ばれ、整数 n がバンドの総数を表す。Bloch の定理より固有関数は $\boldsymbol{k}$ について周期性を持つので、$H(\boldsymbol{k})$ は d 次元トーラス T^d から $n \times n$ エルミート行列への連続写像とみなせる。この写像における連続変形で不変な性質-トポロジー-を調べるのが、トポロジカル物性と呼ばれる分野の主題である。

それでは許容される「連続変形」のクラスはどのように定まるのだろうか。これは（興味のある物理系の性質や対称性に応じて多少違いはあるものの）基本的にはバンドギャップを保つ変形のクラスと考えれば良い。あるフェルミエネルギー E_F と $H(\boldsymbol{k})$ について、バンドが $E > E_F$ と $E < E_F$ という二領域に分割できる時「バンドギャップが存在する」と呼ぶが、この状態が連続変形の任意の段階で保たれているということである。言い換えれば「連続変形において常にバンドが E_F に触れない」ような変形のクラスとも言える。図的に表すと a のようになる。逆にこのような E_F が取れない時、ギャップレスであるという。

以上の概念を非エルミート系に拡張するにはどうすればよいだろうか。一つのやり方は「バンドが $E_F \in \mathbb{R}$ に触れない」というエルミート系のバンドギャップの考え方を、「バンドが $E_B \in \mathbb{C}$

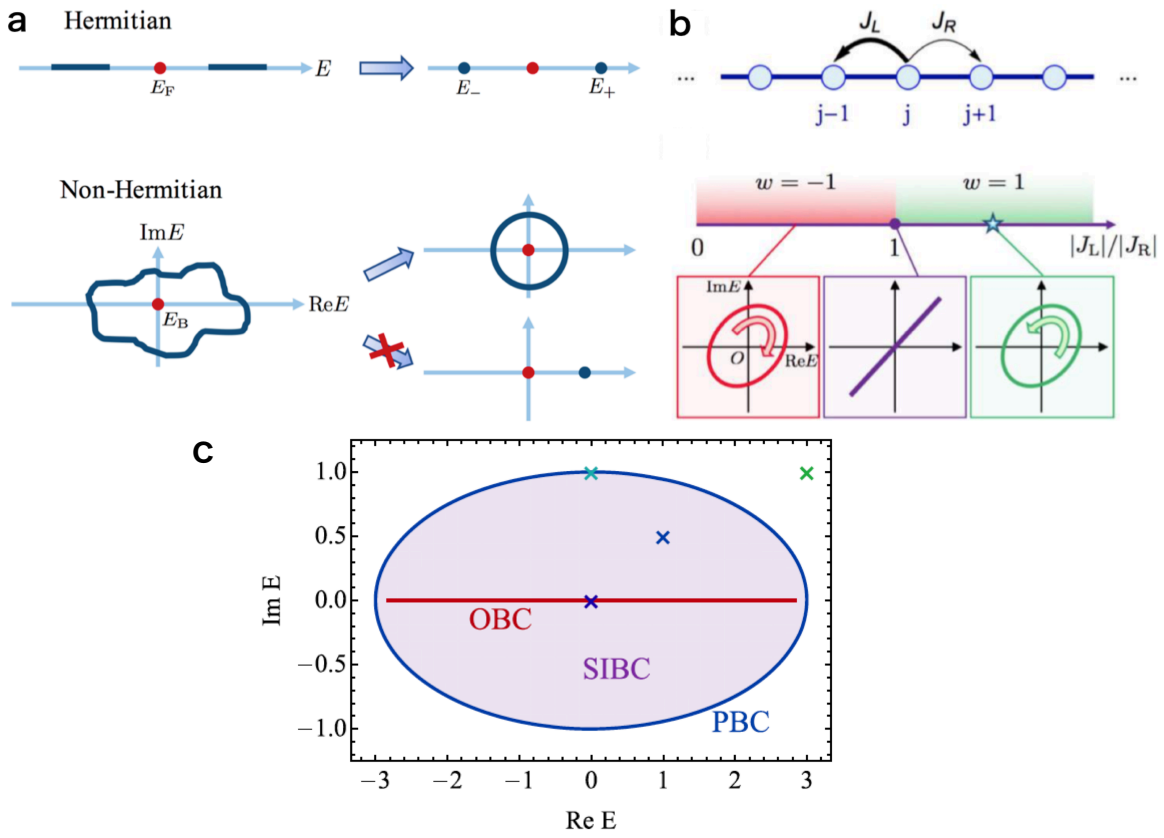

図 10　(a) エルミート/非エルミートバンドトポロジー。(b,c) 羽田野-Nelson 模型の (b) 点ギャップと (c) 境界条件への鋭敏な依存性。

に触れない」という形で、複素固有値をとり得る非エルミート Bloch ハミルトニアン $H(\boldsymbol{k})$ に拡張することである（図 a 下）：

$$\det[H(\boldsymbol{k}) - E_{\mathrm{B}}] \neq 0, \quad \forall \boldsymbol{k} \in T^d. \tag{275}$$

このバンドギャップの定義は、エルミート極限では E_B を E_F と置換すれば従来の定義に一致する。これは図 a 下の点 E_B を複素平面上で巻き付くような非エルミート系特有のトポロジカル構造を許容する [Phys. Rev. X 8, 031079 (2018)]。

このように導入された非エルミート系のバンドトポロジーを例示するために、次の羽田野-Nelson の模型 [Hatano & Nelson, Phys. Rev. Lett. 77, 570 (1996)] を考えよう：

$$H = \sum_j (J_{\mathrm{L}}|j-1\rangle\langle j| + J_{\mathrm{R}}|j\rangle\langle j-1|), \quad J_{\mathrm{L,R}} \in \mathbb{C}. \tag{276}$$

対応する Bloch ハミルトニアンは

$$H(k) = J_{\mathrm{L}}e^{ik} + J_{\mathrm{R}}e^{-ik}, \quad k \in [0, 2\pi) \tag{277}$$

である。$E_B = 0$ と選べば、$|J_L| > |J_R|$ の場合には複素バンドが点 E_B を反時計周りに回り、従ってギャップが存在する（図 b）。エルミート極限 $J_{\mathrm{L}} = J_{\mathrm{R}}^*$ では、式 (275) を満たすような E_B

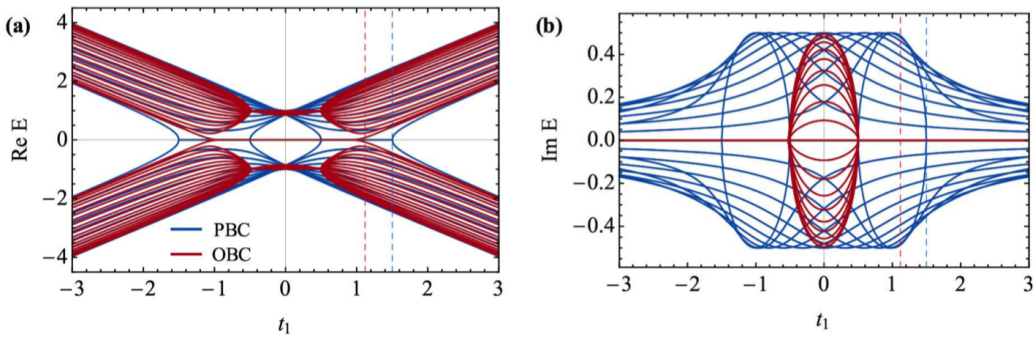

図 11　非エルミート系におけるバルクエッジ対応の破れ。

はとれないため「ギャップレス」である。$|J_L| < |J_R|$ では $E_B = 0$ を複素バンドが時計周りに回るため、再びギャップが生じる。

ここで述べた複素バンドの転移は、非エルミート系に特有なトポロジカル「転移」の最も簡単な例を与えている。つまり $|J_L| > |J_R|$ と $|J_L| < |J_R|$ はそれぞれ異なるトポロジカル「相」であり、ギャップレス点 $J_{\mathrm{L}} = J_{\mathrm{R}}^*$ を境にこれらの間の「転移」が生じる。エルミート系ではこのようなトポロジカル相は、連続変形で不変な「トポロジカル指数」と呼ばれる量で特徴付けられた。上の非エルミート系でもトポロジカル指数が、次式で導入できる：

$$w = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi i} \frac{d}{dk} \ln \det[H(k) - E_{\mathrm{B}}]. \tag{278}$$

これは複素バンドの点 E_B 周りの巻きつき数に対応する。従って、それぞれの相で

$$w = \begin{cases} 1 & |J_L| > |J_R|, \\ -1 & |J_L| < |J_R| \end{cases} \tag{279}$$

という異なる値をとる。

ただし、ここで「相」と呼んでいるものはエルミート平衡系のそれとは質的に異なる点に注意されたい。非エルミート系の複素エネルギー平面上の巻きつき構造で守られている「相」は、その固有値の複素性故に動的に不安定な状態である。従って、非エルミート相はそのような過渡的領域で生じるダイナミクスの定性的違いを特徴づけるような概念と理解すべきものである。これは平衡系で通常議論される静的な相の概念とはむしろ直交するものである。

最後に、非エルミート系のバルクエッジ対応に関する問題にも簡単に言及しよう。エルミート系では周期境界条件を課した Bloch ハミルトニアンのトポロジー（バルクバンドトポロジー）と、開放端を持つ対応する物理系の端固有状態（エッジモード）の存在に対応がある。これはバルクエッジ対応と呼ばれ（典型的には）Bloch ハミルトニアンから計算されたトポロジカル指数が変化する転移点と、端固有状態が出現/消失する点が一致することを意味する。非エルミート系ではこのバルクエッジ対応が一般には（少なくとも素朴な意味で）破綻することが知られている。これは非エルミート系の固有値スペクトラムが、境界条件に鋭敏に依存することに起因している（図 c)。

バルクエッジ対応の破れを示す原型的な例として、次の非エルミート Su-Schrieffer-Heeger モデルが挙げられる：

$$H = \sum_j [(t_1 - \gamma)|jB\rangle\langle jA| + (t_1 + \gamma)|jA\rangle\langle jB| + t_2(|j+1, A\rangle\langle jB| + \text{H.c.})], \quad t_{1,2}, \gamma \in \mathbb{R}. \tag{280}$$

周期境界条件を課して得られる Bloch ハミルトニアンは

$$H(k) = (t_1 + t_2 \cos k)\sigma^x + (t_2 \sin k + i\gamma)\sigma^y \tag{281}$$

である。この $H(k)$ からバルクトポロジーの転移点は $\det H(k) = 0$ を与える $|t_1| = |\gamma \pm t_2|$ と求まる。一方で、開放端系においてゼロエネルギー端状態が出現/消失する点は $|t_1| = \sqrt{\gamma^2 \pm t_2^2}$ と求まる。両者は一致しておらず（図）、従ってバルクエッジ対応が破綻していることがわかる。

実はこの模型に関しては、破綻の原因がホッピングの偏りから生じるバルク固有状態の非対称な局在[*11]に由来することが理解されている。実際、このバルク固有状態の局在化をトポロジカル指数の計算に巧みに取り入れることで、端状態の存在を正しく予言でき、バルクエッジ対応が「回復」できることが示されている [Yao & Wang, Phys. Rev. Lett. 121, 086803 (2018); Yokomizo & Murakami, Phys. Rev. Lett. 123, 066404 (2019)]。しかし、現状任意の物理系でこのような構成が行えるわけではなく、例えば 2 次元以上の非エルミート系でもバルクエッジ対応が「回復」できるかは多くが未解明である。このように（少なくとも）Bloch ハミルトニアンから予言される通常の意味でのバルクエッジ対応は、非エルミート系では一般に破綻する。また非エルミート系に特有な機構（例外点）で（バルクトポロジーとは独立に）出現するエッジモードの存在も提案されている [例えば Nat. Commun. 11, 1 (2020)]。従って Bloch ハミルトニアンに基づいた結果（例えば分類理論など）から、開放端を持つ実際の物理系の性質を類推しようとする際には注意が必要である。つまり、Bloch ハミルトニアンから素朴に計算されるトポロジカル指数は、非エルミート系のトポロジカル端状態の有無の指標としては必ずしも用いることができない。

[*11] しばしば非エルミート表皮効果と呼ばれる。

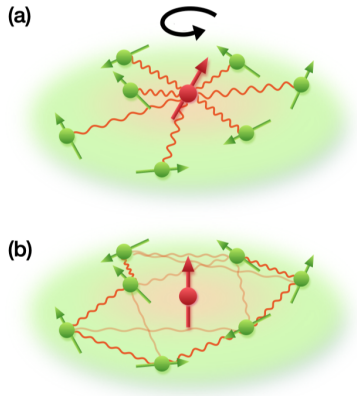

図 12　ディスエンタングリングユニタリ変換。

第 II 部
強結合開放系

第 I 部で扱ったように、AMO 系（冷却原子系など）における測定/散逸下の量子系は、典型的には弱結合開放系として高い精度で記述が可能である。一方、着目系と環境の間に無視できない相関が存在し、ボルン-マルコフ近似が破綻する状況も多く存在する[*12]。そのような状況は凝縮系物理の量子不純物問題の文脈などで標準的であることに加え、AMO 分野の最近の発展（光物質相互作用の超強結合の実現など）でも重要性を増している。

第 II 部ではこのような「強結合開放系」の物理に関する理解を深め、その理論的取り扱いについて学ぶ。特に、着目系が少数自由度系（単一キュービット/粒子など）で、環境がフェルミオン/ボソンからなる多粒子浴の場合を中心に取り扱う。凝縮系物理の文脈では、これらは量子不純物系としても良く知られている。具体的には、Orthogonalization catastrophe、Spin-Boson 模型、近藤問題に関する物理を以下ではまず扱う。1 次元系に着目し、場の理論やボソン化法などの道具も導入しつつ講義を進めるが、ここで説明しきれない詳細や話題については、講義内で紹介する教科書等を参照されたい。また後半ではポーラロンや共振器 QED、ジョセフソン接合系の量子散逸相転移に関する話題についても簡単に触れる。

さて、ユニタリ変換は多体問題を理解する上でしばしば強力な手法となる。例えば、適切なユニタリ変換を行うことで、変換前のもとの frame では平均場理論や回転波近似など標準的な取り扱いが困難であったとしても、変換後の frame ではそのような記述が妥当となる場合がある。つまり、一見困難に見える強相関問題であっても、賢いユニタリ変換を用いればシンプルに問題を理解できることがしばしばある。以下では、系-環境間のエンタングルメントを解く（=ディスエンタングリングする）ことで、このような単純化を実現するユニタリ変換をいくつか導入する（図）。これらを次節で導入する Gaussian 状態や変分原理と組み合わせることで、様々な開放系が統一的に解析できる。特に、それらの基底状態および非平衡ダイナミクスの双方が解析可能となる。

[*12] AMO 系の多くがある種の人工量子系であることを踏まえると、むしろ非マルコフ系の方がより自然に遍在していると言うのがフェアかもしれない。

3　導入：Orthogonalization catastrophe

フェルミ粒子浴環境と着目系が結合した最も簡単な例として、着目系が内部自由度を持たない場合を考えよう。物理的には例えば、金属中に局所不純物ポテンシャルが存在する問題に対応する。簡単のため環境が 1 次元スピンレス自由電子ガスで構成される場合を考える：

$$\hat{H}_{\rm OC} = \sum_p \epsilon_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p + \frac{2\pi v}{\Lambda} \hat{\Psi}^\dagger(0)\hat{\Psi}(0). \tag{282}$$

$\hat{c}_p$ は波数 p のフェルミ粒子の消滅演算子で反交換関係（ここで $\{A,B\} \equiv AB + BA$）

$$\left\{\hat{c}_p, \hat{c}_{p'}^\dagger\right\} = \delta_{pp'}, \ \ \{\hat{c}_p, \hat{c}_{p'}\} = 0 \tag{283}$$

を満たし、$\hat{\Psi}(x)$ はフェルミ演算子の位置基底での表示である：

$$\hat{\Psi}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_p \hat{c}_p e^{ipx}, \quad x \in [-L/2, L/2]. \tag{284}$$

L は系のサイズを表すパラメータ、Λ は波数カットオフであり、v はエネルギーの次元を持ち局所ポテンシャルの強さを表す変数である。$\hat{H}_{\rm OC}$ の第一項は自由電子の運動エネルギー、第二項は位置 $x = 0$ に局在した不純物ポテンシャルによる散乱の寄与を表している。

局所ポテンシャルが存在する場合としない場合それぞれの基底状態を $|\tilde{\rm GS}\rangle$ および $|{\rm GS}\rangle$ とすると、これらが（ポテンシャルの強さに関わらず）熱力学極限で直交することが知られている：

$$\langle \tilde{\rm GS}|{\rm GS}\rangle \to 0 \quad (L \to \infty). \tag{285}$$

このことは新しい基底状態 $|\tilde{\rm GS}\rangle$ が、もとの基底状態 $|{\rm GS}\rangle$ から局所ポテンシャルの大きさに関する摂動展開では移り変われないことを意味しており、量子不純物問題に内在する非摂動性を示唆している。関係 (285) は Anderson により最初に示され [Anderson, Phys. Rev. Lett. 18, 1049 (1967)]、Orthogonalization catastrophe として知られており、固体から冷却原子気体まで幅広い物理系で普遍的に現れる物理現象である。以下ではこの結果をボソン化も援用しながら導出してみよう。

局所ポテンシャルの強さ v がバンド幅に比べて十分小さく、低エネルギー励起をもとに物理が記述できる場合は、フェルミエネルギー付近（$p \sim p_F$）でエネルギーを線形近似できる（図）[*13]。波数 $k = p - p_F$ とフェルミ速度 v_F を導入すれば、線形エネルギー分散は次のように表せる：

$$\epsilon_k = \hbar v_F k, \ \ k = \frac{2\pi}{L} n, \ \ n \in \mathbb{Z}. \tag{286}$$

ここで周期的境界条件 ($\hat{\Psi}(L/2) = \hat{\Psi}(-L/2)$) を系に課した。$\epsilon_k$ は等エネルギー間隔 $\delta\epsilon = hv_F/L$ を持つ一粒子エネルギーに他ならない。

フェルミ面付近で可能な最小のエネルギー励起は、フェルミ面直下の電子が一つ上の準位に励起する過程に対応し、励起エネルギーは $\delta\epsilon$ である（図の青矢印）。二番目に小さい励起過程は、エ

[*13] 実際は Left mover の寄与（$p \sim -p_F$ 付近の寄与）も存在するが、ここでは簡単のため考えないことにする。

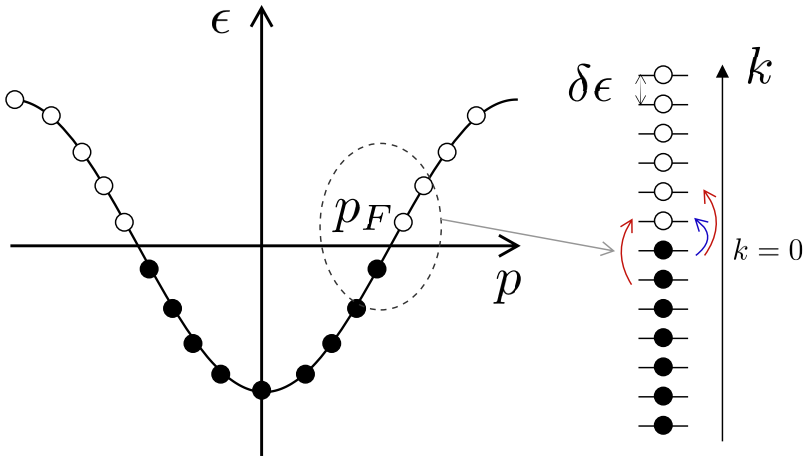

図 13　1 次元自由フェルミ粒子系の低エネルギー有効理論。

ネルギー $2\delta\epsilon$ を持ち二重に縮退している（図の赤矢印）。同様の議論を繰り返すことで、フェルミ粒子の運動エネルギー項の低エネルギー励起スペクトラムが、ボソン演算子を用いて次のように記述できることが分かる：

$$\sum_p \epsilon_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p \to \sum_{k>0} \epsilon_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \tag{287}$$

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = 0. \tag{288}$$

次に、不純物項についてもボソン演算子による表現を求めるため次の様に書き換えよう：

$$\frac{2\pi v}{\Lambda} \hat{\Psi}^\dagger(0)\hat{\Psi}(0) = \frac{2\pi v}{\Lambda L} \sum_{kk'} \hat{c}_{k+k'}^\dagger \hat{c}_{k'}. \tag{289}$$

上で見たように、低エネルギー励起は粒子正孔対の生成で引き起こされる。これを表すため、$\epsilon_{k>0}$ のエネルギーを持つ励起を生成するボソン演算子として次を導入する：

$$\hat{b}_k^\dagger = \sqrt{\frac{2\pi}{kL}} \sum_{k'} \hat{c}_{k+k'}^\dagger \hat{c}_{k'}, \quad k > 0. \tag{290}$$

実際、この演算子が交換関係 (288) を満たすことを後節で確かめる。このボソン演算子により、不純物項の有効記述は次で得られる：

$$\frac{2\pi v}{\Lambda} \hat{\Psi}^\dagger(0)\hat{\Psi}(0) = \frac{2\pi v}{\Lambda L} \sum_{kk'} \hat{c}_{k+k'}^\dagger \hat{c}_{k'} \to \sum_{k>0} g_k \left(\hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k \right), \tag{291}$$

$$g_k = \frac{v}{N} \sqrt{\frac{kL}{2\pi}}, \quad N \equiv \frac{\Lambda L}{2\pi}. \tag{292}$$

以上をまとめると、フェルミ粒子ハミルトニアン (282) の低エネルギー有効模型として、次のボソンハミルトニアンが得られた：

$$\hat{H}_{\rm OC} \simeq \sum_{k>0} \left[\epsilon_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + g_k \left(\hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k \right) \right]. \tag{293}$$

ここで行った一連の操作は、1 次元電子系の低エネルギー集団励起の有効模型を求めるものであり「ボソン化」として知られるものである（次節でより明示的な定義を与える）。

有効ハミルトニアン (293) は二次までの項しか含んでおらず、次のユニタリ変換で容易に対角化できる：

$$\hat{U} = \exp\left[-\sum_{k>0} f_k \left(\hat{b}_k^\dagger - \hat{b}_k\right)\right], \quad f_k = \frac{g_k}{\epsilon_k}. \tag{294}$$

$$\hat{U}^\dagger \hat{H}_{\mathrm{OC}} \hat{U} = \sum_{k>0} \epsilon_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \mathrm{const.} \tag{295}$$

ここでユニタリ変換が次の並進演算子として作用することを用いた：

$$\hat{D}_\beta^\dagger \hat{b} \hat{D}_\beta = \hat{b} + \beta, \quad \hat{D}_\beta \equiv e^{\beta \hat{b}^\dagger - \beta^* \hat{b}} = e^{-\frac{|\beta|^2}{2}} e^{\beta \hat{b}^\dagger} e^{-\beta^* \hat{b}} = e^{\frac{|\beta|^2}{2}} e^{-\beta^* \hat{b}} e^{\beta \hat{b}^\dagger}. \tag{296}$$

従って、もとの基底状態 $|\mathrm{GS}\rangle$ と不純物ポテンシャルがある場合の基底状態 $|\tilde{\mathrm{GS}}\rangle$ は、ボソン $\hat{b}$ の真空状態 $|0\rangle_b$ を用いて、それぞれ次に様に表せる：

$$|\mathrm{GS}\rangle = |0\rangle_b, \quad |\tilde{\mathrm{GS}}\rangle = \hat{U}|0\rangle_b. \tag{297}$$

式 (296) を用いて両者の内積を計算すると、熱力学極限でゼロになり従って直交することが分かる：

$$\langle \tilde{\mathrm{GS}} | \mathrm{GS} \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{k>0} f_k^2\right) = \exp\left(-\frac{v^2}{2w^2}\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{n}\right) = \exp\left(-\frac{v^2}{2w^2}\ln\frac{\Lambda L}{2\pi}\right) \overset{L\to\infty}{\to} 0. \tag{298}$$

ここで w はバンド幅 $w = N\delta\epsilon = \hbar v_F \Lambda$ である。最後の項で指数の肩に現れる $\ln L$ というファクターは、不純物ポテンシャル v に対する素朴な摂動論が対数発散により破綻することを示している。以降の節でも見る様に、量子不純物系や開放系ではこのような非摂動性を取り入れることがしばしば重要である。

4 二準位開放系

環境と結合した量子系の考察に戻ろう。前節では着目系がいわば「一準位」の場合を考えたが、ここでは着目系が二つの準位を持つ場合を考える。はじめに環境がボソン粒子浴の場合を考え、後半でフェルミ環境について議論する。最後に、前節で扱ったボソン化法により、1 次元系ではこれら二つの問題に等価性が存在することを示す。

4.1 Spin-Boson 模型

4.1.1 ディスエンタングリングユニタリ変換

二準位開放系の典型例として、局在スピン 1/2 がボソン環境自由度と相互作用する系を考えよう：

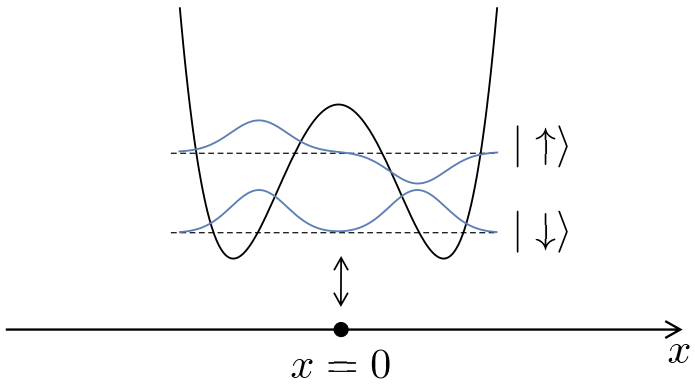

図 14　Double-well potential 中の粒子と $x = 0$ で相互作用する 1 次元自由フェルミ粒子系。

$$\hat{H}_{\rm sb} = \frac{\hbar\Delta}{2}\hat{\sigma}^z + \sum_k \hbar\omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{\hat{\sigma}^x}{2}\sum_k \hbar g_k(\hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k). \tag{299}$$

ここで $\Delta, g_k, \omega_k > 0$ とする。物理的にはこの二準位系は図のような double-well potential 中の単一粒子を考え、下から二つの低エネルギー状態 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ に粒子自由度を射影した有効模型とも考えられる。粒子自由度は巨視的な集団励起モードの有効自由度を表すパラメータともみなせ、散逸下の量子トンネリングを解析するためのミニマルモデルを与える [Caldeira and Leggett, Phys. Rev. Lett. 46, 211 (1981)]。この模型では系-環境結合定数 g_k が十分に小さい場合を除いて、マルコフ近似は一般に破綻するためマスター方程式などの記述が行えない。これはスピンとボソンの自由度がエンタングルし無視できない相関が生じる結果、スピンのダイナミクスに環境からの履歴効果が影響を与えるためである。Spin-Boson 模型の解析の主たる困難は、この系-環境間の (強い) 相関に起因している。

ではこのような系-環境エンタングルメントを（部分的にでも）取り除けるユニタリ変換はあるだろうか。もしそのような変換があれば、変換後の frame では解析が（変換前と比べて）容易になると期待される。この問題については次のユニタリ変換が知られている [Silbey and Harris, J. Chem. Phys. 80, 2615 (1984)]：

$$\hat{U}_{\rm SH} = \exp\left[-\frac{\hat{\sigma}^x}{2}\sum_k f_k\left(\hat{b}_k^\dagger - \hat{b}_k\right)\right]. \tag{300}$$

ここで f_k は基底状態エネルギーを最小化することで決まるパラメーターで、次を満たす：

$$f_k = \frac{g_k}{\tilde{\Delta} + \omega_k}, \quad \tilde{\Delta} = \Delta \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_k f_k^2\right]. \tag{301}$$

変換後のハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\rm sb}^U = \hat{U}_{\rm SH}^\dagger \hat{H}_{\rm sb} \hat{U}_{\rm SH} \tag{302}$$

$$= \frac{\hbar\tilde{\Delta}}{2}\hat{\sigma}^z \hat{B}_{-f}^\dagger \hat{B}_f + \sum_k \hbar\omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{\hat{\sigma}^x}{2}\sum_k \hbar\tilde{\Delta} f_k(\hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k) + \text{const.}, \tag{303}$$

$$\hat{B}_f = \exp\left[\hat{\sigma}^x \sum_k f_k \hat{b}_k\right]. \tag{304}$$

問題：変換後のハミルトニアン (303) を導出し、変換後の真空状態に対する変分エネルギーを最小化する条件から式 (301) を確かめよ。

変換後にはスピン-環境相互作用が実効的に弱くなっており：

$$\tilde{\Delta} f_k = \frac{\tilde{\Delta}}{\tilde{\Delta} + \omega_k} g_k < g_k \tag{305}$$

変換後の frame での基底状態 $|\Psi^U_{\rm GS}\rangle$ はもとの frame よりもエンタングルメントが弱いと期待される。つまり、

$$|\Psi^U_{\rm GS}\rangle \simeq |\downarrow\rangle|0\rangle. \tag{306}$$

ここで

$$\hat{\sigma}^z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle, \;\; \hat{b}_k|0\rangle = 0 \tag{307}$$

である。この意味で、ユニタリ変換 $\hat{U}_{\rm SH}$ はディスエンタングリング変換ともしばしば称される。

この変換により実際どのように解析が容易になるかの明示的な例として、回転波近似の正当化が挙げられる。回転波近似は励起数

$$N_{\rm ex} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}^z + 1) + \sum_k \hat{b}^\dagger_k \hat{b}_k \tag{308}$$

を保存するような項だけをハミルトニアンに残す近似として定義される。もとの frame では、一般に系-環境相互作用 g_k が強い場合にはこの取り扱いが破綻する。しかし、変換後には相互作用が弱くなっている（cf. 式 (305)）ので、回転波近似が (再び) 妥当となると期待される。実際、$H^U_{\rm sb}$ の第一項を展開し、$N_{\rm ex}$ を保存する $O(f^2)$ までの leading term を集めることで次の有効ハミルトニアンが得られる：

$$\hat{H}^U_{\rm sb} \simeq \hat{H}^U_{\rm sb,0} + \hat{H}^U_{\rm sb,1} + \text{const.}, \tag{309}$$

$$\hat{H}^U_{\rm sb,0} = \frac{\hbar\tilde{\Delta}}{2}\hat{\sigma}^z \left[1 - \sum_{kp} f_k f_p \hat{b}^\dagger_k \hat{b}_p\right] + \sum_k \hbar\omega_k \hat{b}^\dagger_k \hat{b}_k, \tag{310}$$

$$\hat{H}^U_{\rm sb,1} = \hbar\tilde{\Delta}\left(\hat{\sigma}^+ \sum_k f_k \hat{b}_k + \text{H.c.}\right). \tag{311}$$

ここで $\hat{H}^U_{\rm sb,0}$ は二次形式であり厳密に解くことができ、$\hat{H}^U_{\rm sb,1}$ は励起数を保存するような単純化された相互作用である。このハミルトニアンが、（もとの frame では回転波近似が破綻するような強結合領域でも）低エネルギーの有効的記述を正しく与えていることが、MPS を用いた計算結果などとの比較により確かめられている。この意味において「強結合では回転波近似が破綻する」という文言には注意が必要である。

たとえ変換後の frame で基底状態が単純な積状態 (306) で表せたとしても、もとの frame に戻るとスピンと環境が強くエンタングルした状態であることに注意されたい。実際、上記の近似的な基底状態 (306) をもとの frame で表すと、

$$|\Psi_{\rm GS}\rangle \simeq \hat{U}_{\rm SH}|\downarrow\rangle|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle|\{-f_k/2\}\rangle - |-\rangle|\{f_k/2\}\rangle\right) \tag{312}$$

となる。ここで

$$\hat{\sigma}^x|+\rangle = \pm|\pm\rangle,\ \ |\{\beta_k\}\rangle = \prod_k \hat{D}_{\beta_k}|0\rangle \tag{313}$$

である。つまりスピンの各成分が、逆方向に変位したコヒーレント状態で表現される環境とエンタングルしていることが分かる。この式からも $\hat{U}_{\rm SH}$ が「ディスエンタングリング変換」と呼ばれる所以が明らかである。

これまでの取り扱いは系-環境相互作用が（$\hat{H}^U_{\rm sb}$ の高次項が無視できる程度には）弱い領域で正当化される。これに対して、系-環境相互作用が非常に強い極限を最後に考えよう。この時は、ハミルトニアン (299) の第一項が無視できて、$\hat{\sigma}^x = \pm 1$ と選べば前節で考えた不純物ポテンシャルの問題 (293) に等価となる。従って基底状態は二重に縮退しており、

$$|+\rangle|\{-f_k/2\}\rangle,\ \ |-\rangle|\{f_k/2\}\rangle \tag{314}$$

という積状態で与えられる。これを double well potential の描像で理解し直すと、$|\pm\rangle$ はそれぞれ左/右の well に粒子が局在した状態であった。つまり、この極限は「強い系-環境相互作用により誘起された局在現象」と解釈できる。これはいわゆる量子連続 Zeno 効果とも類似した現象といえる。つまり、環境との相互作用が連続的な「位置測定」として作用し、粒子の局在が生じている。上記で議論した非縮退なエンタングルした基底状態 (312) と、系-環境が decouple した二重縮退基底状態 (314) は質的に異なるものである。実際、両領域の間には相転移点が存在することが知られている。このことは以下で紹介するように、近藤問題との関連を議論する中で最もよく理解できる。

（詳細には立ち入らないが）もともと量子トンネリングのミニマルモデルとして導入された Spin-Boson 模型であったが、最近では waveguide QED など量子光学/情報分野で重要な物理系とも直接関係するものとなっており、特にその非平衡ダイナミクスを中心に今でも研究がなされている。

4.2 近藤問題

4.2.1 導入

次に局在スピン 1/2 がフェルミ粒子環境と相互作用する問題設定を考える。これは物性物理学では「近藤問題」として広く知られた問題である。近藤効果は「金属中に局在した磁性不純物が引き起こす、低温領域での抵抗増加」の現象を指す。局在スピンと伝導電子はスピン反転を起こす散乱（交換相互作用）を引き起こし、局在スピンの遮蔽が生じる。低温にするに従い、このプロセスが増大し抵抗増加などを引き起こす。次第に局在スピンと伝導電子の実効的な相互作用の強さは素朴な摂動論では扱えないほど増強し、最終的には両者が反強磁性的に結合した Kondo singlet と呼ばれる一重項の多体束縛状態が基底状態として形成される。これにより局在スピンは伝導電

子により完全に遮蔽される。このようなゼロ温度極限での非摂動領域における振る舞いは Wilson の繰り込み群の考え方によって最終的に理解された。

近藤効果は固体物理分野で長年中心的課題の一つであるが、量子ドット系や近年では冷却原子系でもその実現が研究/議論されている。特に平衡状態の性質はほぼ完全に理解されているのに対し、非平衡領域では未解明な部分も多く最近でも研究がなされている。以下では繰り込み群や開放系の視点から近藤問題について考察する。特に、局在スピンを着目系、伝導電子を環境自由度と考えた際、基底状態は両者が強くエンタングルした「Kondo singlet 状態」であることを確認する。

4.2.2 摂動的繰り込み群

近藤問題は、局在スピン 1/2（$\hat{\boldsymbol{s}}_{\rm imp} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\rm imp}/2$）とフェルミ粒子からなる次のハミルトニアンで理解される：

$$\hat{H}_{\rm K} = \sum_{|\boldsymbol{k}|<\Lambda_0} \sum_{\alpha} \epsilon_{\boldsymbol{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\alpha} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha} + J \hat{\boldsymbol{s}}_{\rm imp} \cdot \hat{\boldsymbol{S}}(\boldsymbol{0}) \quad (\alpha = \uparrow, \downarrow), \tag{315}$$

$$\hat{\boldsymbol{S}}(\boldsymbol{0}) = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\alpha\beta} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\alpha} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\alpha\beta} \hat{c}_{\boldsymbol{k}'\beta}. \tag{316}$$

ここで $\hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha}$ は運動量 $\boldsymbol{k}$ でスピン α のフェルミ粒子の消滅演算子で、反交換関係

$$\left\{ \hat{c}_{k\alpha}, \hat{c}^{\dagger}_{k'\alpha'} \right\} = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{kk'}, \ \ \{\hat{c}_{k\alpha}, \hat{c}_{k'\alpha'}\} = 0 \tag{317}$$

を満たす。$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)^{\rm T}$ は Pauli 演算子のベクトルである。ハミルトニアンの第一項は自由電子の運動エネルギー、第二項は位置 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}$ に局在したスピンと電子の散乱による局所相互作用を表している。基底状態の性質は定性的には Anderson の摂動的繰り込み群によって理解される：

$$\frac{dj}{dl} = j^2. \tag{318}$$

ここで $j = \rho_F J$ はフェルミエネルギーでの状態密度 ρ_F により無次元化された結合定数、$l = -\ln(\Lambda/\Lambda_0)$ は Λ_0 を初期カットオフスケールとした対数繰り込みスケールである。

繰り込み群に馴染みのない人のため、その基本的アイデアを簡単に説明しよう：まず波数カットオフ Λ より長波長 $|\boldsymbol{k}| \leq \Lambda$ の自由度しか含まない何らかの模型 $\hat{H}_\Lambda$ を考える。この模型は初期スケール $\Lambda = \Lambda_0$ でもとの微視的な理論と一致（$\hat{H}_{\rm mic} = \hat{H}_{\Lambda_0}$）するように選ぶ。繰り込み群の目的は「このもとの理論 $\hat{H}_{\rm mic}$ と等価な低エネルギー物理（つまり長距離の振る舞い）を保ちつつ、短波長の高エネルギー自由度を取り除く」ことである。この作業により波数 $\Lambda < |\boldsymbol{k}| \leq \Lambda_0$ の短波長自由度が取り除かれた後の理論 $\hat{H}_\Lambda$ が得られるが、これは上でも述べた通りもはや $|\boldsymbol{k}| \leq \Lambda$ 以下の自由度しか含まない。Λ を徐々に小さくしてゆくと、一般に $\hat{H}_\Lambda$ に含まれるパラメータ/項は Λ に依存して変化するが、この変化のことを「繰り込み」と呼び、繰り込まれたパラメータ/項を持つ $\hat{H}_\Lambda$ を「有効低エネルギー理論」という。最終的に $\Lambda \to 0$ の極限で、基底状態（つまりゼロ温度）の物理が決定される。この極限で到達する理論をしばしば「繰り込み群固定点」と呼ぶ。一般にカットオフ Λ は興味のある温度スケール T とも解釈できる。

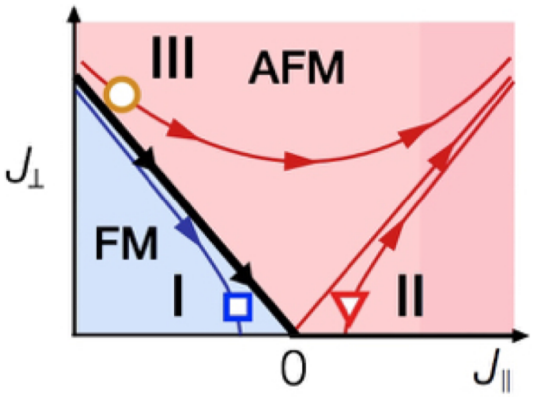

図 15　異方近藤模型の摂動的繰り込み群相図。

近藤問題に戻ろう。この時、初期カットオフ $\Lambda = \Lambda_0$（つまり $l = 0$）における、もとの微視的理論は式 (315) に対応する。短波長の自由度を取り除いてゆくと、近藤結合定数 $j(l)$ はカットオフ $\Lambda = \Lambda_0 e^{-l}$ に依存して繰り込まれてゆく。式 (318) はその摂動領域（つまり相互作用定数 j が小さい領域）での振る舞いを表しており、繰り込み群フロー方程式と呼ばれる。今の場合、フロー方程式の解はすぐに求まる：

$$j(l) = \frac{1}{1/j(0) - l}. \tag{319}$$

初期値 $j(l = 0)$ が小さい正の値とすれば、$l \sim l^* \equiv 1/j(0)$ 付近で、はじめて近藤結合 $j(l)$ が O(1) の大きさになり $l \to l^*$ で発散する。つまりスピン相互作用（式 (315) の第二項）の効果が支配的となる。これは任意の正の結合 $J > 0$ に対し、十分低温でスピン一重項の状態（Kondo singlet）が形成されることを示唆している。このクロスオーバーが生じる温度スケール

$$T_{\rm K} \sim \Lambda_0 e^{-l^*} = \Lambda_0 \exp\left(-\frac{1}{j(0)}\right) \tag{320}$$

は近藤温度として知られている。初期カットオフ Λ_0 は、典型的には固体中のバンド幅などで与えられる。

より一般に、相互作用が非等方な場合には模型は

$$\hat{H}_{\rm aK} = \sum_{\boldsymbol{k}\alpha} \epsilon_{\boldsymbol{k}} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha} + J_\perp \hat{\boldsymbol{s}}^\perp_{\rm imp} \cdot \hat{\boldsymbol{S}}^\perp(\boldsymbol{0}) + J_\parallel \hat{s}^\parallel_{\rm imp} \cdot \hat{S}^\parallel(\boldsymbol{0}) \tag{321}$$

で与えられる。ここで $\perp$ は x, y 方向、$\parallel$ は z 方向を表す。等方な近藤模型がクロスオーバーしか示さないのに対し、この模型は強磁性相と反強磁性相間の量子相転移を生じる。基底状態の相図は再び摂動的繰り込み群によって（定性的に）理解される：

$$\frac{dj_\parallel}{dl} = j_\perp^2, \quad \frac{dj_\perp}{dl} = j_\parallel j_\perp. \tag{322}$$

この繰り込み群方程式に対応したフローダイアグラムを図に示す。実はこれは Berezinskii-Kosterlitz-Thouless（BKT）転移の解析で扱う繰り込み群の流れとも等価である。特に反強磁性相（AFM）では結合定数が無限大に発散するが、これは Kondo singlet の形成を示唆している。本講義では扱わないが、ゼロ温度極限（$l \to \infty$）での物理量を（発散の困難なしに）定量的に計算するためには、Wilson の非摂動的な繰り込み群を用いる必要がある。

4.2.3 ディスエンタングリングユニタリ変換

局在スピンを着目系、伝導電子を環境自由度と考え、近藤模型を開放系として捉え直してみよう。前節で見た通り、反強磁性相での基底状態はスピン一重項で強く相関した状態である。そのため、開放系でしばしば用いられるようなマルコフ的記述は一般に適用できない。しかし、系-環境自由度のエンタングルメントを解くようなユニタリ変換が構成できれば、解析が単純化され有用であると考えられる。

このような変換を構成するために、近藤模型の $\mathbb{Z}_2$ 対称性に着目する：

$$\hat{\mathrm{P}} = \hat{\sigma}^z_{\mathrm{imp}}\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}},\ \ \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} = e^{i\pi\hat{N}_\uparrow},\ \ \hat{\mathrm{P}}^2 = \hat{\mathrm{P}}^2_{\mathrm{bath}} = 1, \tag{323}$$

$$\hat{\mathrm{P}}^{-1}\hat{H}_{\mathrm{K}}\hat{\mathrm{P}} = \hat{H}_{\mathrm{K}}. \tag{324}$$

ここで、$\hat{N}_\uparrow$ はスピン $\uparrow$ の伝導電子数である。パリティ演算子 $\hat{\mathrm{P}}$ は局在スピンと伝導電子スピン全ての x, y 成分を反転する変換を生成する：

$$\hat{\mathrm{P}}^{-1}\hat{\sigma}^{x,y}\hat{\mathrm{P}} = -\hat{\sigma}^{x,y},\ \ \hat{\mathrm{P}}^{-1}\hat{\sigma}^z\hat{\mathrm{P}} = \hat{\sigma}^z. \tag{325}$$

演算子 $\hat{\mathrm{P}}$ は固有値 ±1 を持つので、同じく固有値 ±1 を（伝導電子自由度に関する縮退数も込みで）持つ局在スピン $\hat{\sigma}^x_{\mathrm{imp}}$ に $\hat{\mathrm{P}}$ を移すユニタリ変換が存在するはずである：

$$\hat{U}^\dagger\hat{\mathrm{P}}\hat{U} = \hat{\sigma}^x_{\mathrm{imp}}. \tag{326}$$

実際、次の変換がこの条件を満たすことが示せる [Phys. Rev. Lett. 121, 026805 (2018)]：

$$\hat{U} = \exp\left[\frac{i\pi}{4}\hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}\right]. \tag{327}$$

このことは次の計算から確かめられる：

$$\hat{U}^\dagger\hat{\sigma}^z_{\mathrm{imp}}\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - i\hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}\right)\hat{\sigma}^z_{\mathrm{imp}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + i\hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}\right) \tag{328}$$

$$= \frac{1}{2}\left[\hat{\sigma}^z_{\mathrm{imp}} - i\left(\hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\hat{\sigma}^z_{\mathrm{imp}} - \hat{\sigma}^z_{\mathrm{imp}}\hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\right)\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} + \hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\hat{\sigma}^z_{\mathrm{imp}}\hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\hat{\mathrm{P}}^2_{\mathrm{bath}}\right] \tag{329}$$

$$= \hat{\sigma}^x_{\mathrm{imp}}\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}, \tag{330}$$

$$\hat{U}^\dagger\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - i\hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}\right)\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 + i\hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}}\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}\right) \tag{331}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} + \hat{\mathrm{P}}^3_{\mathrm{bath}}\right) = \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}. \tag{332}$$

従って変換 (327) を用いると、もとの近藤模型の $\mathbb{Z}_2$ 対称性が、変換後には局在スピンの「凍結」を意味することがわかる：

$$[\hat{\mathrm{P}}, \hat{H}_{\mathrm{K}}] = 0 \to [\hat{\sigma}^x_{\mathrm{imp}}, \hat{\tilde{H}}_{\mathrm{K}}] = 0,\ \ \hat{\tilde{H}}_{\mathrm{K}} = \hat{U}^\dagger\hat{H}_{\mathrm{K}}\hat{U}. \tag{333}$$

つまり、変換後には局在スピン演算子は保存量となり c-数（$\sigma^x_{\mathrm{imp}} = \pm1$）にとることができ、時間が経過しても同じ値にとどまる。このように、近藤模型の $\mathbb{Z}_2$ 対称性を用いることで、局在スピ

ンを実効的に環境から完全に切り離す「ディスエンタングリングユニタリ変換」が得られた。

問題：異方近藤模型 $\hat{H}_{\rm aK}$（式 (321)）についても同じユニタリ変換が有用である。変換後のハミルトニアン $\hat{\tilde{H}}_{\rm aK} = \hat{U}^\dagger \hat{H}_{\rm aK} \hat{U}$ の具体系を書き下せ。

変換後には環境から完全にディスエンタングルされるため、(変換後の) ハミルトニアン $\hat{\tilde{H}}_{\rm K}$ の基底状態は、積状態として表される：

$$|\Psi^U_{\rm GS}\rangle = |\pm\rangle|\Psi_{\rm bath}\rangle. \tag{334}$$

これはもとの frame では一般に強くエンタングルした状態である：

$$|\Psi_{\rm GS}\rangle = \hat{U}|\pm\rangle|\Psi_{\rm bath}\rangle = |\uparrow\rangle\hat{\rm P}_\pm|\Psi_{\rm bath}\rangle \pm |\downarrow\rangle\hat{\rm P}_\mp|\Psi_{\rm bath}\rangle. \tag{335}$$

ここで

$$\hat{\rm P}_\pm = \frac{1 \pm \hat{\rm P}_{\rm bath}}{2} \tag{336}$$

は各パリティセクターへの射影演算子である[*14]。

基底状態についてより深く理解するために、$|\Psi_{\rm bath}\rangle$ として次のような単純な変分波動関数を考えよう：

$$|\Psi_{\rm bath}\rangle = \sum_{n>n_{\rm F}} \frac{d_n}{\sqrt{2}} \left(\hat{c}^\dagger_{n\downarrow} - \hat{c}^\dagger_{n\uparrow}\right) |\text{Fermi Sea}\rangle. \tag{337}$$

つまりフェルミ面の上に任意の一粒子励起を許した状態である。すると偶セクター（$\sigma^x_{\rm imp} = +1$）でのもとの frame での基底状態は、式 (335) に式 (337) を代入して

$$|\Psi_{\rm Yosida}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n>n_{\rm F}} d_n \left(|\uparrow\rangle\hat{c}^\dagger_{n\downarrow} - |\downarrow\rangle\hat{c}^\dagger_{n\uparrow}\right) |\text{Fermi Sea}\rangle. \tag{338}$$

となる。つまり、基底状態が局在スピンと伝導電子のスピン一重項の形に書き下せた。この変分関数は芳田奎によって導入されたもので [Yosida, Phys. Rev. 147, 223 (1966)]、Kondo singlet の形成を（定性的に）正しく捉えている。

式 (335) における $|\Psi_{\rm bath}\rangle$ を、より一般的な「Gaussian 状態」として知られるクラスの多体状態に拡張して変分計算を行うことも可能である。これは、平均場理論である Hartree-Fock 法を一般化したものともみなせる。後で見るように、このような比較的シンプルな解析でも、より高コストな数値計算手法と遜色ない精度で基底状態・非平衡ダイナミクスが定量的に理解できる。つまり近藤問題が「平均場理論では理解できない」という文言はこの点においては適切ではない。

問題：総電子数 $\hat{N}$ が偶数の場合には、二つのパリティセクター $\hat{\sigma}^x_{\rm imp} = \pm 1$ に属するエネルギー固有状態が完全に縮退していることを示せ。

[*14] Spin-Boson 模型の場合とは異なり、ここではこれらの表現が厳密に成立していることに注意されたい。

問題：上記で導入したユニタリ変換 (327) を参考にして、セントラルスピン模型（$\hat{H} = \hat{\boldsymbol{s}}_c \cdot \sum_{i=1}^{n} \hat{\boldsymbol{s}}_i$）においてセントラルスピン $\hat{\boldsymbol{s}}_c$ を他のスピン $\{\hat{\boldsymbol{s}}_i\}$ からディスエンタングルする変換を構成せよ。ただし、全てスピン-1/2 とする。

4.3 近藤問題と Spin-Boson 模型の対応

4.3.1 ボソン化法（速習）

前節では 1 次元のフェルミ粒子系の低エネルギー有効理論が、ボソン自由度のみで記述できることを発見的議論に基づいて示した。これは 1 次元量子多体系で一般に成立する手法であり、ボソン化法として広く知られている。ここではボソン化法をもう少し形式的に紹介する。これは、1 次元系の普遍的性質の理解を可能にするだけでなく、いま紹介した近藤問題と Spin-Boson 模型という一見異なる二準位開放系の間に対応が存在することを理解する上でも有用である。

準備

スピンレスな 1 次元フェルミ粒子系を考えよう。前節でも見たように、1 次元ではフェルミ面付近の低エネルギー励起が単純な線形分散で近似できる。その際、運動量の正負に応じて Right mover と Left mover の寄与があったがここでも、まずは簡単のため Right mover のみに着目しよう[*15]。

フェルミ粒子の生成消滅演算子は、周期的境界条件により次の波数 k でラベルされている：

$$\left\{\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}^\dagger\right\} = \delta_{kk'}, \quad \{\hat{c}_k, \hat{c}_{k'}\} = 0, \quad k = \frac{2\pi}{L} n, \quad n \in \mathbb{Z}. \tag{339}$$

基準となる基底状態を $k \leq 0$ の一粒子状態が占有された Fermi sea として定義し、これを「真空」状態 $|0\rangle$ として表す[*16]：

$$\begin{cases} \hat{c}_k |0\rangle = 0 & k > 0 \\ \hat{c}_k^\dagger |0\rangle = 0 & k \leq 0 \end{cases}. \tag{340}$$

以降の議論で、状態 $|0\rangle$ に関する差分を表す記法（正規順序積）を導入するのが便利である：

$$:\hat{O}: \equiv \hat{O} - \langle 0|\hat{O}|0\rangle. \tag{341}$$

フェルミ面は第一励起エネルギー状態 $k = 2\pi/L$ との中間に位置するため、今考えている低エネルギー有効理論ではフェルミ波数 k_F が

$$k_F = \frac{\pi}{L} \tag{342}$$

で定義され、これを基準とした線形エネルギー分散は

$$\epsilon(k) = \hbar v_F \left(k - k_F\right) = \frac{2\pi\hbar v_F}{L} \left(\mathbb{Z} - \frac{1}{2}\right) \tag{343}$$

[*15] Left mover についても以下の議論は $x \to -x$ とすれば同様に成立する（付録を参照）。Right あるいは Left mover のみの寄与しか持たない理論は、カイラル (chiral: 一方向) としばしば称される。

[*16] フェルミ生成消滅演算子 $\hat{c}, \hat{c}^\dagger$ の意味での粒子真空状態ではないことに注意されたい。

で与えられる。第二項 $-\hbar v_F k_F$ はフェルミ面を固定するための化学ポテンシャル項と考えて差し支えない。

実空間でのフェルミ場の演算子は（波数空間と区別するために)、記法 $\hat{\Psi}(x)$ を用いて次のように記述する：

$$\hat{\Psi}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{c}_k e^{ikx}, \quad \hat{c}_k = \frac{1}{2\pi\sqrt{L}} \int_{-L/2}^{L/2} dx\, \hat{\Psi}(x) e^{-ikx}, \quad x \in [-L/2, L/2]. \tag{344}$$

ここで $\hat{\Psi}(x)$ は周期的境界条件と反交換関係を満たす：

$$\hat{\Psi}(x) = \hat{\Psi}(x+L), \tag{345}$$

$$\left\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(x')\right\} = \delta(x-x'), \quad \left\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}(x')\right\} = 0. \tag{346}$$

問題：反交換関係 (346) を確かめよ。

素励起

前節で示したように、素励起はフェルミ面をまたいで形成される粒子正孔対が重ね合わさった状態に対応する。これは正波数 $k > 0$ でラベルされた、次のボソン演算子 $\hat{b}_k^\dagger$ を状態 $|0\rangle$ に作用させることで生成される：

$$\hat{b}_k^\dagger \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{kL}} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{c}_q, \quad , \hat{b}_k \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{kL}} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \hat{c}_q^\dagger \hat{c}_{k+q} \quad k > 0. \tag{347}$$

まず $\hat{b}_k$ の定義より、状態 $|0\rangle$ はボソン演算子の粒子真空状態に対応していることがすぐにわかる

$$\hat{b}_k |0\rangle = 0, \quad \forall k > 0. \tag{348}$$

これは $|0\rangle$ が粒子正孔励起が存在しない状態であることを反映している。またこれらの演算子が、確かにボソンの交換関係を満たすことも確かめられる：

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}, \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = 0. \tag{349}$$

問題：演算子 (347) について交換関係 (349) を確かめよ。ヒント：一つ目の式については、式 (347) を用いて正規順序積と基底状態の期待値の和で表し（つまり $\hat{O} =: \hat{O} : + \langle 0|\hat{O}|0\rangle$)、後者から由来する寄与が消えないことに注意する。

ボソン場

フェルミ場の演算子 $\hat{\Psi}(x)$ と同様に、ここでは $\hat{b}_k$ について（実空間表示の）ボソン場の演算子を導入しよう。フーリエ変換することでボソン場 $\hat{\Phi}(x)$ は次で定義される：

$$\hat{\Phi}(x) \equiv \sum_{k>0} \sqrt{\frac{2\pi}{kL}} e^{-k/\Lambda} \left(\hat{b}_k e^{ikx} + \hat{b}_k^\dagger e^{-ikx} \right). \tag{350}$$

ここで Λ は正則化に必要な波数カットオフである。ボソン場も周期的境界条件を満たしている：

$$\hat{\Phi}(x) = \hat{\Phi}(x+L). \tag{351}$$

後の計算のために、生成演算子と消滅演算子に分けよう：

$$\hat{\Phi}(x) \equiv \hat{\Phi}^{(-)}(x) + \hat{\Phi}^{(+)}(x), \tag{352}$$

$$\hat{\Phi}^{(-)}(x) \equiv \sum_{k>0} \sqrt{\frac{2\pi}{kL}} \hat{b}_k e^{ikx - k/\Lambda}, \quad \hat{\Phi}^{(+)}(x) \equiv \left(\hat{\Phi}^{(-)}(x) \right)^\dagger. \tag{353}$$

これらは次の交換関係を満たす：

$$[\hat{\Phi}^{(+)}(x), \hat{\Phi}^{(+)}(x')] = [\hat{\Phi}^{(-)}(x), \hat{\Phi}^{(-)}(x')] = 0, \tag{354}$$

$$[\hat{\Phi}^{(-)}(x), \hat{\Phi}^{(+)}(x')] = \sum_{k>0} \frac{2\pi}{kL} e^{ik(x-x') - 2k/\Lambda} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} e^{i\frac{2\pi n}{L}\left[(x-x') + 2i/\Lambda\right]} \tag{355}$$

$$= -\ln\left[1 - e^{i\frac{2\pi}{L}\left[(x-x')+2i/\Lambda\right]}\right] \overset{L\to\infty}{\to} -\ln\left[-i\frac{2\pi}{L}\left((x-x') + \frac{2i}{\Lambda}\right)\right]. \tag{356}$$

ここで $-\ln(1-t) = \sum_{n=1}^{\infty} t^n/n$ を用いた。これらの関係式は後で有用となる。

問題：ボソン場における次の交換関係を示せ：

$$[\hat{\Phi}(x), \hat{\Phi}(x')] \overset{L,\Lambda\to\infty}{\to} i\pi \,\mathrm{sgn}(x-x'), \quad \mathrm{sgn}(y) \equiv \begin{cases} 1 & y > 0 \\ 0 & y = 0 \\ -1 & y < 0 \end{cases}. \tag{357}$$

フェルミ場のボソン場公式

さて、ボソン場は式 (347) によりフェルミ場で表現されたが、逆にもとのフェルミ場をボソン場で表すにはどうすればよいだろうか。結論から述べると、次の演算子がフェルミ場として振舞うことが示せる：

$$\hat{\Psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \hat{\psi}\, e^{2\pi i \hat{N} x/L} e^{i\hat{\Phi}^{(+)}(x)} e^{i\hat{\Phi}^{(-)}(x)} \tag{358}$$

$$= \sqrt{\frac{\Lambda}{4\pi}} \hat{\psi}\, e^{2\pi i \hat{N} x/L} e^{i\hat{\Phi}(x)} \tag{359}$$

ここで $\hat{N}$ はもとのフェルミ粒子系での（Fermi sea $|0\rangle$ を基準にした）総粒子数に対応する演算子で、任意の整数値を固有値に持つ。より明示的には

$$\hat{N} \equiv \sum_{k=-\infty}^{\infty} :\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k: \tag{360}$$

と書ける。$\hat{\psi}$ は Klein factor と呼ばれ、$\hat{N}$ の消滅演算子として働き、次の交換関係を満たす：

$$[\hat{N}, \hat{\psi}] = -\hat{\psi}, \quad \hat{\psi}\hat{\psi}^\dagger = \hat{\psi}^\dagger\hat{\psi} = 1, \quad [\hat{\psi}, \hat{b}_k] = 0. \tag{361}$$

$\hat{\psi}$ のより詳細な定義を与えるため、上で導入した状態 $|0\rangle$ よりも N 準位上まで占有された状態（つまり $\hat{N} = N$ の固有値セクターの基底状態）を $|0\rangle_N$ と書こう。Klein factor $\hat{\psi}$ は $|0\rangle_N$ で占有されている一番上の準位のフェルミ粒子を消滅させる演算子として定義される。より明示的には、次のように作用する：

$$\hat{\psi}|0\rangle_N = |0\rangle_{N-1}. \tag{362}$$

ボソン場のみでは、粒子正孔励起しか引き起こせず $\hat{\Psi}(x)$ の役割として果たされるべき「フェルミ粒子を一つ減らす」性質や反交換関係を再現できない。いわばこの「つじつま」をあわせるための項が Klein factor $\hat{\psi}$ である。

実際に、このように構成したフェルミ場 (358) が所望の関係式を再現することを確認しよう。式 (362) ともとの定義 $\hat{\Psi}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\hat{c}_k e^{ikx}$ を思い出せば、次の関係式を得る：

$$ {}_N\langle 0|\hat{\psi}^\dagger\hat{\Psi}(x)|0\rangle_N =_{N-1} \langle 0|\frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k \hat{c}_k|0\rangle_N e^{ikx} = \delta_{k,\frac{2\pi N}{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{2\pi i N x/L}. \tag{363}$$

式 (358) で構成した演算子が、確かに同じ関係式を満たすことがすぐに確認できる。次に式 (358) が反交換関係を正しく再現することも確認しよう。まず $x \neq x'$ に対して

$$\begin{aligned} e^{i\hat{\Phi}^{(+)}(x)}e^{i\hat{\Phi}^{(-)}(x)}e^{-i\hat{\Phi}^{(+)}(x')}e^{-i\hat{\Phi}^{(-)}(x')} &= e^{i\hat{\Phi}^{(+)}(x)}e^{-i\hat{\Phi}^{(+)}(x')}e^{i\hat{\Phi}^{(-)}(x)}e^{-i\hat{\Phi}^{(-)}(x')}e^{[\hat{\Phi}^{(-)}(x),\hat{\Phi}^{(+)}(x')]} \\ &=: e^{i\left(\hat{\Phi}(x)-\hat{\Phi}(x')\right)} : \frac{L}{2\pi}\frac{1}{\frac{2}{\Lambda} - i(x-x')} \end{aligned} \tag{364}$$

が成り立つ。ここで交換関係 (356) と $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$ に対して成立する公式

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]} \tag{365}$$

を用いた。式 (364) より

$$\left\{\hat{\Psi}(x), \hat{\Psi}^\dagger(x')\right\} = e^{\frac{2\pi i\hat{N}}{L}(x-x')} : e^{i\left(\hat{\Phi}(x)-\hat{\Phi}(x')\right)} : \frac{1}{2\pi}\left(\frac{1}{\frac{2}{\Lambda} - i(x-x')} + \frac{1}{\frac{2}{\Lambda} + i(x-x')}\right) \tag{366}$$

$$\overset{\Lambda\to\infty}{\to} e^{\frac{2\pi i\hat{N}}{L}(x-x')} : e^{i\left(\hat{\Phi}(x)-\hat{\Phi}(x')\right)} : \delta(x-x') = \delta(x-x') \tag{367}$$

が成立し、確かに反交換関係 (346) が満たされている。

物理量・系との対応

ここまでは 1 次元量子系の低エネルギー理論で成立する、フェルミ場とボソン場の形式的対応について考えてきた。以下では、実際の物理系にボソン化法を適用する上で有用な関係をいくつか紹介する。これらは上で示した公式を用いることで確認できる。ボソン化法に慣れる上で良い練習となるため、導出は演習問題とする。

密度

フェルミ系における粒子数密度演算子は、ボソン化により次のように表される[*17]：

$$\hat{\rho}(x) \equiv :\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x): = \frac{1}{2\pi}\partial_x\hat{\Phi}(x) + \frac{\hat{N}}{L}. \tag{368}$$

つまりボソン場 $\hat{\Phi}(x)$ はフェルミ系の密度揺らぎを表しており、ボソン演算子 $\hat{b}_k^\dagger$ はその集団運動に対応した素励起-フォノン-を生成する演算子と解釈できる。

問題：式 (368) を確かめよ。ヒント：$\hat{\rho}(x)$ を $\hat{\Psi}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\hat{c}_k e^{ikx}$ により波数表示し、式 (347) と (360) を用いて書き直してみよう。

自由 1 次元電子系のエネルギー

簡単のため、前と同様に相互作用がない 1 次元スピンレスフェルミ系（の Right mover 寄与）をまず考えよう。低エネルギー付近で線形分散（参照：式 (343)）に近似すれば、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{k=-\infty}^{\infty}\epsilon(k) :\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k: \tag{369}$$

$$= \sum_{k=-\infty}^{\infty}\hbar v_F\,(k-k_F) :\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_k: \tag{370}$$

$$= \frac{\hbar v_F}{2\pi}\int_{-L/2}^{L/2} dx\ :\hat{\Psi}^\dagger(x)(-i\partial_x - k_F)\hat{\Psi}(x): \tag{371}$$

と表せる。これをボソン場を用いて書き直せば次の表式が得られる（菅原形式と呼ばれる）：

$$\hat{H} = \hbar v_F\sum_{k>0} k\hat{b}_k^\dagger\hat{b}_k + \frac{\pi\hbar v_F\hat{N}^2}{L} \tag{372}$$

$$= \frac{\hbar v_F}{2\pi}\int_{-L/2}^{L/2} dx\frac{1}{2} :\Big(\partial_x\hat{\Phi}(x)\Big)^2: + \frac{\pi\hbar v_F\hat{N}^2}{L} \tag{373}$$

Left mover の寄与も合わせることで、朝永-Luttinger 液体が構成される（詳細は付録を参照）。

問題：ハミルトニアン (369) のボソン化表式 (372),(373) を確かめよ。ヒント：第一項を確かめるために $[\hat{H}, \hat{b}_k^\dagger] = \hbar v_F k\hat{b}_k^\dagger$ を式 (347),(369) を用いて示そう。第二項を得るために（式 (343) に注意して）期待値 ${}_N\langle 0|\hat{H}|0\rangle_N$ を評価してみよ。

[*17] 無限大の発散を避けるために、正規順序積をとって定義を行う必要がある。

問題：上の模型に任意のポテンシャル項 $V(x)$ が加わった場合を考えよう：

$$\hat{H} = \frac{\hbar v_F}{2\pi}\int_{-L/2}^{L/2} dx\ :\hat{\Psi}^\dagger(x)(-i\partial_x - k_F)\hat{\Psi}(x): + \int dx\, V(x) :\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x): . \tag{374}$$

ボソン場を適切に定義することで、低エネルギー理論が上と同じ自由ボソン場 (372) の問題に帰着できることを示せ。ヒント：前節で行った Orthogonalization catastrophe における議論を参考に、ポテンシャル項をボソン場の並進により吸収しよう。

4.3.2 近藤問題と Spin-Boson 模型の等価性

最後に、前節で導入したボソン化法を用いて近藤問題と Spin-Boson 模型の等価性を示そう。そのために近藤ハミルトニアン (321) で 1 次元かつ低エネルギー（つまり線形分散 $\epsilon_k = k$）の場合を考える（$\hbar = v_F = 1$ とする）：

$$\hat{H}_{\mathrm{aK}} = \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow}\frac{1}{2\pi}\int_{-L/2}^{L/2} dx\ :\hat{\Psi}^\dagger_\alpha(x)(-i\partial_x - k_F)\hat{\Psi}_\alpha(x): + J_\perp \hat{\boldsymbol{s}}^\perp_{\mathrm{imp}}\cdot :\hat{\boldsymbol{S}}^\perp(0): + J_\parallel \hat{s}^\parallel_{\mathrm{imp}} :\hat{S}^\parallel(0): . \tag{375}$$

ここで $\hat{\Psi}_\alpha(x)$ は、位置表示でのスピン α を持つフェルミ粒子の消滅演算子である：

$$\hat{\Psi}_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\hat{c}_{k\alpha}e^{ikx}, \quad k = \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}. \tag{376}$$

正規順序 $:\hat{O}: \equiv \hat{O} - \langle 0|\hat{O}|0\rangle$ は Fermi sea を基準に定義されており、以降は簡単のため $\hat{N}_\alpha \equiv: \sum_k \hat{c}^\dagger_{k\alpha}\hat{c}_{k\alpha} := 0$ に対応するセクターのみを考える。

ボソン化を用いれば、1 次元系の低エネルギー集団励起がボソン場によって一般に記述できるが、今の場合は二種類のフェルミ場に対応して、二種類の独立なボソン場が必要となる：

$$\hat{\Phi}_{\mathrm{c(s)}}(x) = \sum_{k>0}\sqrt{\frac{2\pi}{kL}}e^{-k/\Lambda}\left(\hat{b}_{k,\mathrm{c(s)}}e^{ikx} + \hat{b}^\dagger_{k,\mathrm{c(s)}}e^{-ikx}\right), \tag{377}$$

$$\left[\hat{b}_{k,\xi}, \hat{b}^\dagger_{k',\xi'}\right] = \delta_{kk'}\delta_{\xi\xi'}, \quad \left[\hat{b}_{k,\xi}, \hat{b}_{k',\xi'}\right] = 0. \tag{378}$$

添字 c はチャージ（つまり密度揺らぎ）を表し、s はスピン揺らぎの集団励起に対応する。ボソン化の処方箋に従い、フェルミ演算子とその密度は

$$\hat{\Psi}_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\hat{\psi}_\alpha e^{2\pi i\hat{N}_\alpha x/L}e^{i\hat{\Phi}^{(+)}_\alpha(x)}e^{i\hat{\Phi}^{(-)}_\alpha(x)}, \quad \alpha\in\{\uparrow,\downarrow\} \tag{379}$$

$$\hat{\rho}_\alpha(x) =: \hat{\Psi}^\dagger_\alpha(x)\hat{\Psi}_\alpha(x) := \frac{1}{2\pi}\partial_x\hat{\Phi}_\alpha(x) \tag{380}$$

と表現できる。ただしスピン基底のボソン場を

$$\hat{\Phi}_{\uparrow,\downarrow} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{\Phi}_{\mathrm{c}} \pm \hat{\Phi}_{\mathrm{s}}\right) \tag{381}$$

で定義した。また Klein factor $\hat{\psi}_\alpha$ は N_α の固有値を一つ下げる演算子で、$\hat{\psi}^\dagger_\alpha\hat{\psi}_\alpha = \hat{\psi}_\alpha\hat{\psi}^\dagger_\alpha = 1$ と $\hat{\psi}^\dagger_\uparrow\hat{\psi}_\downarrow = -\hat{\psi}_\downarrow\hat{\psi}^\dagger_\uparrow$ などの関係式を満たす（詳細は前節を参照）。

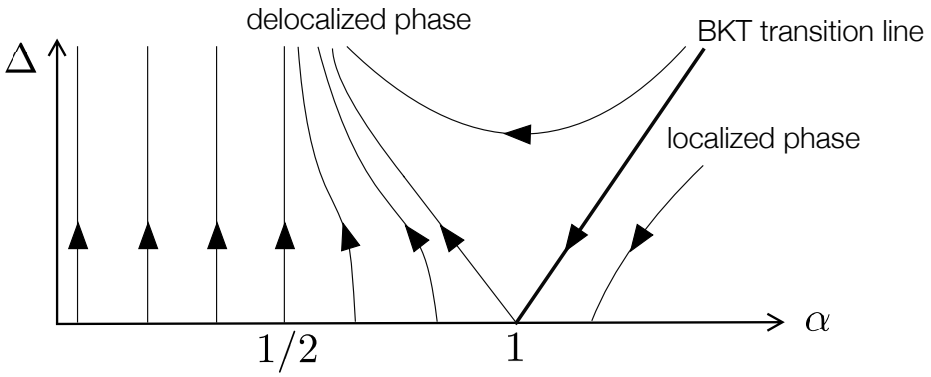

図 16　Spin-Boson 模型の繰り込み群相図。

ボソン場を用いるともとの近藤ハミルトニアン (375) は、charge と spin パートに完全に分割される：

$$\hat{H}_{\rm aK} = \hat{H}_{\rm c} + \hat{H}_{\rm s}, \tag{382}$$

$$\hat{H}_{\rm c} = \sum_{k>0} k\hat{b}^\dagger_{k,{\rm c}}\hat{b}_{k,{\rm c}}, \tag{383}$$

$$\hat{H}_{\rm s} = \sum_{k>0} k\hat{b}^\dagger_{k,{\rm s}}\hat{b}_{k,{\rm s}} + \frac{J_\parallel}{4\sqrt{2}\pi}\hat{\sigma}^z_{\rm imp}\partial_x\hat{\Phi}_{\rm s}(0) + \frac{\Lambda J_\perp}{8\pi}[\hat{\sigma}^+_{\rm imp}\hat{\psi}^\dagger_\downarrow\hat{\psi}_\uparrow e^{i\sqrt{2}\hat{\Phi}_{\rm s}(0)} + {\rm H.c.}] \tag{384}$$

スピンパートについてユニタリ変換 $\hat{U}_{\rm s} = e^{i\sqrt{2}\hat{\sigma}^z_{\rm imp}\hat{\Phi}_{\rm s}(0)/2}$ を行い、$\hat{b} \to i\hat{b}$、$\hat{\sigma}^+_{\rm imp}\hat{\psi}^\dagger_\downarrow\hat{\psi}_\uparrow \to \hat{\sigma}^+_{\rm imp}$ と置換すれば（この置換は代数を変えないため可能である）

$$\begin{aligned}\hat{\tilde{H}}_{\rm s} &= \hat{U}^\dagger_{\rm s}\hat{H}_{\rm s}\hat{U}_s \\ &= \sum_{k>0} k\hat{b}^\dagger_{k,{\rm s}}\hat{b}_{k,{\rm s}} + \frac{\hat{\sigma}^z_{\rm imp}}{2}\sum_{k>0} g_k(\hat{b}^\dagger_{k,{\rm s}} + \hat{b}_{k,{\rm s}}) + \frac{\Lambda J_\perp}{8\pi}\hat{\sigma}^x_{\rm imp} + {\rm const.}\end{aligned} \tag{385}$$

というハミルトニアンに帰着する。ここで

$$g_k = \left(2\pi - \frac{J_\parallel}{2}\right)\sqrt{\frac{k}{\pi L}}e^{-k/\Lambda} \equiv 2\pi\sqrt{\frac{\alpha k}{\pi L}}e^{-k/\Lambda}. \tag{386}$$

と定義した。式 (385) は式 (299) で考えた Spin-Boson 模型と（自明なスピン回転 $\hat{\sigma}^{z\leftrightarrow x}$ を行った上で）等価であることがわかる。式 (386) で定義した無次元パラメータ α は系-環境相互作用の強さを特徴付けるパラメータである。まとめると、Spin-Boson 模型と近藤問題のパラメータは次の様に関係づく：

$$\Delta \leftrightarrow \frac{\Lambda J_\perp}{4\pi}, \tag{387}$$

$$\alpha \leftrightarrow \left(1 - \frac{J_\parallel}{4\pi}\right)^2. \tag{388}$$

ここで示した近藤模型との等価性と前述の繰り込み群の結果から、式 (386) の結合定数を持つ Spin-Boson 模型は、スピンギャップ Δ が十分小さい時に、$\alpha = 1$ で非局在-局在転移を起こすことが分かる。これは近藤模型では $J_\parallel = 0$ での強磁性-反強磁性相転移に対応する。摂動的繰り込

み群が妥当な領域（$\alpha \sim 1$ かつ Δ が小さい）では、近藤模型の結果 (322) より即座に相図が決定される。それ以外の範囲では、一般に別の手法が必要となる。特に、$\alpha = 1/2$ は模型が可解となる特別な点（Toulouse 点）として知られており、繰り込み群の固定点を与える。このことを理解するために、ハミルトニアン (385) をさらに次の様にユニタリ変換しよう：

$$\hat{U}^\dagger \hat{\tilde{H}}_{\rm s} \hat{U} = \sum_{k>0} k \hat{b}^\dagger_{k,{\rm s}} \hat{b}_{k,{\rm s}} + \frac{\Lambda J_\perp}{8\pi} \left(\hat{\sigma}^+_{\rm imp} \hat{\Psi}\left(0\right) + \hat{\sigma}^-_{\rm imp} \hat{\Psi}^\dagger(0) \right), \tag{389}$$

$$\hat{U} = \exp\left[-\frac{\hat{\sigma}^z}{2} \sum_{k>0} \frac{g_k}{k} \left(\hat{b}^\dagger_k - \hat{b}_k \right) \right]. \tag{390}$$

ここで次の演算子を導入した：

$$\hat{\Psi}(x) \equiv \exp\left[\sum_{k>0} \sqrt{\frac{4\alpha\pi}{kL}} \left(\hat{b}^\dagger_k e^{-ikx} - \hat{b}_k e^{ikx} \right) \right]. \tag{391}$$

この式をフェルミ演算子とボゾン化表示の対応関係 (377),(379) を見比べると、$\alpha = 1/2$ の時に（$\hat{b} \to i\hat{b}$ という位相変化を行えば）両者がおおよそ等価となることが分かる。従って、演算子 $\hat{\Psi}(x)$ をフェルミ場の演算子として解釈できると期待される。これは実際に正しく、ボソン化において運動項が式 (287) と対応づくことを思い出せば、最終的に有効模型として次のフェルミ粒子系に帰着する（refermionization という）：

$$\hat{U}^\dagger \hat{\tilde{H}}_{\rm s} \hat{U} = \sum_{k>0} k \hat{\Psi}^\dagger_k \hat{\Psi}_k + \frac{\Lambda J_\perp}{8\pi} \left(\hat{\sigma}^+_{\rm imp} \hat{\Psi}\left(0\right) + \hat{\sigma}^-_{\rm imp} \hat{\Psi}^\dagger(0) \right). \tag{392}$$

これはフェルミ粒子の二次形式で書けるため可解な模型であり、この可解性はスケール変換しても不変である。従って、$\alpha = 1/2$ の繰り込み群フローは垂直な半直線となる。$0 < \alpha < 1/2$ でも同様の繰り込み群フローが生じると考えられている。以上をまとめると、Spin-Boson 模型の繰り込み群相図は図のように求まる [Guinea et al., Phys. Rev. B 32, 4410 (1985)]。

問題：前節で導入したボソン化法を用い、近藤問題と Spin-Boson 模型の等価性 (385) を確かめよ。ヒント：上に示した方針に沿って計算を行ってみよう。

5　多準位開放系

これまでは（局在スピンなど）少数準位を持つ系が、環境自由度と相互作用するタイプの開放系を考えてきた。これに対し以下では、位置や運動量という連続変数を自由度として持つ単一粒子（つまり多準位系）が、ボソン環境自由度と相互作用するタイプの開放系を取り上げる。

5.1　ポーラロン

一つ目の例として、固体中の電子が結晶格子の集団励起（フォノン）と相互作用する状況を考える。この時、電子はボソン励起の衣を着た準粒子（＝ポーラロン）を形成して運動する。この

電子-フォノン間の散乱過程を記述するための標準的な模型が、次の Froehlich ハミルトニアンである：

$$\hat{H}_{\rm F} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_e} + \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}} \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}} \hat{b}_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{k}} V_k \left(\hat{b}_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}} + \text{H.c.} \right). \tag{393}$$

ここで最後の相互作用項における $\hat{\boldsymbol{r}}$ は電子の位置演算子を表すことに注意されたい。この相互作用により、一般に電子-フォノン間には相関が生じ、このままでは（素朴な）平均場理論などの解析が困難である。

これを解決するため、Lee, Low, Pines らは次のユニタリ変換を用いることを提案した [Lee, Low, Pines, Phys. Rev. 90, 297 (1953)]：

$$\hat{U}_{\rm LLP} = e^{i\hat{\boldsymbol{P}}_{\rm bath}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}, \;\; \hat{\boldsymbol{P}}_{\rm bath} = \sum_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{k} \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}} \hat{b}_{\boldsymbol{k}}. \tag{394}$$

物理的には、これは電子の共動系に移ることに対応する：

$$\hat{U}^\dagger_{\rm LLP} \hat{b}_{\boldsymbol{k}} \hat{U}_{\rm LLP} = \hat{b}_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}, \;\; \hat{U}^\dagger_{\rm LLP} \hat{\boldsymbol{p}} \hat{U}_{\rm LLP} = \hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{P}}_{\rm bath}. \tag{395}$$

従って変換後のハミルトニアンは

$$\hat{\tilde{H}}_{\rm F} = \hat{U}^\dagger_{\rm LLP} \hat{H}_{\rm F} \hat{U}_{\rm LLP} = \frac{\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{P}}_{\rm bath} \right)^2}{2m_e} + \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}} \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}} \hat{b}_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{k}} V_k \left(\hat{b}_{\boldsymbol{k}} + \hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}} \right). \tag{396}$$

変換後の frame では電子運動量 $\boldsymbol{p}$ はハミルトニアンと可換であり、c-数として扱える。つまり、この変換が電子とフォノンのディスエンタングリングユニタリ変換として働いていることがわかる。この保存量は、もとの frame では系全体の並進対称性に伴う総運動量の保存に対応する：

$$\hat{U}^\dagger_{\rm LLP} \left(\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{P}}_{\rm bath} \right) \hat{U}_{\rm LLP} = \hat{\boldsymbol{p}}, \;\; [\hat{H}_{\rm F}, \hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{P}}_{\rm bath}] = \boldsymbol{0}. \tag{397}$$

特に、もとの frame で総運動量がゼロの場合には、変換後の frame では $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}$ ととることができ、電子は常に「静止」しており確かに電子の「共動系」に移っていることがわかる。

変換後には、電子-フォノン間の相関が取り除かれているため、コヒーレント状態（平均場理論）や Gaussian 状態を用いた、比較的シンプルな解析が可能である。実際、これによりポーラロンの平衡状態の性質から非平衡ダイナミクスに至るまで様々な研究がこれまで行われている。ポーラロンは歴史的には固体中の電子の運動、あるいは原子核中の核子運動の文脈で主に研究がされてきたが、最近では冷却原子気体などの人工量子系でも研究が活発になされている。これは AMO 実験系の高い制御性により、ポーラロンの非平衡下での振る舞いが定量的なレベルで詳細に調べることが可能となった点が、大きなモチベーションとなっている。

5.2 共振器/導波管量子電磁力学（Cavity/Waveguide QED）

二つ目の例として、量子電磁場と物質の相互作用を考える。最も簡単な場合として電磁場の単一モードが単一粒子と結合した系（このような状況は共振器を用いることで実験的にも実現され

ている）を考えよう。非相対論的量子電磁力学に従えば、（長波長近似における）クーロンゲージでのハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\mathrm{C}} = \frac{\left(\hat{p} - q\hat{A}\right)^2}{2m} + V\left(x\right) + \hbar\omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a}, \;\; \hat{A} = \mathcal{A}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right) \tag{398}$$

とかける。まず Bogoliubov 変換を電磁場 $\hat{a}$ に行いボソン演算子 $\hat{b}$ を導入することで、次のように書き直せる：

$$\hat{H}_{\mathrm{C}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V\left(x\right) + \hbar\Omega \hat{b}^\dagger \hat{b} - g x_\Omega \hat{p}\left(\hat{b} + \hat{b}^\dagger\right), \tag{399}$$

$$g = q\mathcal{A}\sqrt{\frac{\omega_c}{m\hbar}}, \;\; x_\Omega = \sqrt{\frac{\hbar}{m\Omega}}, \;\; \Omega = \sqrt{\omega_c^2 + 2g^2}. \tag{400}$$

$$\hat{b} = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\Omega}{\omega_c}} + \sqrt{\frac{\omega_c}{\Omega}}\right)\hat{a} + \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\Omega}{\omega_c}} - \sqrt{\frac{\omega_c}{\Omega}}\right)\hat{a}^\dagger. \tag{401}$$

このクーロンゲージでは光物質相互作用 g が強くなるにつれて、物質-フォトン間のエンタングルメントが大きくなり回転波近似など種々の近似が破綻するため、解析がより困難になる。

この困難を解消するため、次のユニタリ変換が導入できる [Phys. Rev. Lett. 126, 153603 (2021)]：

$$\hat{U} = \exp\left[-i\frac{\xi_g \hat{p}\hat{\pi}}{\hbar}\right], \;\; \xi_g = \frac{g x_\Omega}{\Omega}, \;\; \hat{\pi} = i\left(\hat{b}^\dagger - \hat{b}\right). \tag{402}$$

この変換は次のような並進を引き起こす：

$$\hat{U}^\dagger \hat{x} \hat{U} = \hat{x} + \xi_g \hat{\pi}, \;\; \hat{U}^\dagger \hat{b} \hat{U} = \hat{b} + \xi_g \hat{p}/\hbar. \tag{403}$$

変換後には光-物質相互作用はポテンシャル項に吸収される：

$$\hat{H}_U = \hat{U}^\dagger \hat{H}_{\mathrm{C}} \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m_{\mathrm{eff}}} + V(x + \xi_g \hat{\pi}) + \hbar\Omega \hat{b}^\dagger \hat{b}, \;\; m_{\mathrm{eff}} = m\left[1 + 2\left(g/\omega_c\right)^2\right]. \tag{404}$$

ここで変換後のハミルトニアン $\hat{H}_U$ では、相互作用の強さが実効的に ξ_g で決まる点に注意されたい。強結合極限 $g \to \infty$ では $\xi_g \propto 1/\sqrt{g}$ と振る舞い、従って漸近的に光物質結合を取り除き両者をディスエンタングルできる。これにより、（クーロンゲージでは強結合領域で破綻してしまっていた）強束縛近似など、種々の標準的な取り扱いが再び可能となる。特に、外場ポテンシャル $V(x)$ がない場合は、g の値によらず完全にデカップルできる点に注意されたい。

次により一般に電磁場が連続的な自由度を持つ場合のハミルトニアン

$$\hat{H}_{\mathrm{C}} = \frac{\left[\hat{p} - q\hat{A}\right]^2}{2m} + V(\hat{x}) + \sum_k \hbar\omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \;\; \hat{A} = \sum_k \mathcal{A}_k(\hat{a}_k + \hat{a}_k^\dagger) \tag{405}$$

を考えよう。物理的には、1 次元導波管に閉じ込められた電磁場モードと物質自由度が相互作用する状況に対応する。この場合も、上と同様に漸近的なディスエンタングリングが可能である。これを見るために、まずフォトン自由度について二次の項を、Bogoliubov 変換により対角化しよう：

$$\frac{q^2\hat{A}^2}{2m_e} + \sum_k \hbar\omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \sum_n \hbar\Omega_n \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n + \text{const.} \tag{406}$$

$$\hat{a}_k = \sum_n (O)_{kn} \left[\cosh(r_{nk})\hat{b}_n - \sinh(r_{nk})\hat{b}_n^\dagger\right]. \tag{407}$$

ここで $r_{nk} \in \mathbb{R}$ はスクイーズパラメータであり、O は適当な直交行列である。変換後のハミルトニアンは係数 ζ_n を適切に定義することで

$$\hat{H}_{\rm C} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + V(\hat{x}) - \hat{p}\sum_n \zeta_n(\hat{b}_n + \hat{b}_n^\dagger) + \sum_n \hbar\Omega_n \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n \tag{408}$$

となる。最後に次のユニタリ変換 [Phys. Rev. Res. 4, 023194 (2022)]

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{p}\hat{\Xi}\right), \quad \hat{\Xi} \equiv \sum_k i\frac{\zeta_n}{\Omega_n}\left(\hat{b}_n^\dagger - \hat{b}_n\right) \tag{409}$$

を行うと、

$$\hat{H}_U = \hat{U}^\dagger \hat{H}_{\rm C} \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m_{\rm eff}} + V(\hat{x} + \hat{\Xi}) + \sum_n \hbar\Omega_n \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n, \tag{410}$$

$$m_{\rm eff} = m\left(1 + 2\sum_k \frac{q^2\mathcal{A}_k^2}{m\hbar\omega_k}\right) \tag{411}$$

が得られる。変換後は強結合極限 $q \to \infty$ で実効質量 $m_{\rm eff}$ が発散し、物質と電磁場が漸近的にディスエンタングルされることがわかる。この変換はジョセフソン接合からなる回路 QED 系や、そこで生じる量子散逸相転移を解析する上でも有用である（詳細は付録を参照）。

Cavity/Waveguide QED の研究は伝統的に量子光学や量子情報の文脈で、キュービットなど少数自由度の量子系で主になされてきた。より最近では、固体物理、冷却原子や量子化学分野でも、共振器などにより光物質の超強結合が実験的に実現している。特に、共振器中の量子電磁場との結合を用いることで、量子多体物性を制御する可能性が近年盛んに議論されている [例えば, Schlawin et al., Appl. Phys. Rev. 9, 011312 (2022); Bloch et al., Nature 606, 41 (2022)]。

問題：式 (410),(411) を導出せよ。ヒント：直交行列 O が満たすべき関係式を求め、ζ_n に対する次の関係を導いてみよう：

$$\frac{1}{1 - 2\sum_n \frac{m\zeta_n^2}{\hbar\Omega_n}} = 1 + 2\sum_k \frac{q^2\mathcal{A}_k^2}{m\hbar\omega_k} \tag{412}$$

6 Gaussian 状態と変分原理

これまで強結合開放系について例を交えて学んできた。以下ではこれらの物理系を解析するための理論手法について学ぶ。そのため、Gaussian 多体波動関数や変分原理に関する一般論を導入する。それらを開放系のいくつかの例に応用し、その基底状態や非平衡ダイナミクスを調べる。

6.1 変分多体波動関数

一般に、量子多体問題を解く上での困難は粒子数 N と共に指数的に増大するヒルベルト空間の次元 $\sim e^N$ に起因する。従って、多体問題を解明する上での一つの指導原理として「背後にある物理の本質を正しく抽出した、できる限り単純な変分波動関数をデザインする」という観点が挙げられる。このような変分状態は（指数的な困難を避け）粒子数について高々多項式的な数 $\sim N^p$ の変数しか含まないという意味で、理論家の「手に負える」ものであってほしい。

典型的な例として、特定のモードがマクロな数の粒子で占有された状態である Bose-Einstein 凝縮（BEC）を考えよう。BEC の最も重要な特徴の一つは（後でも述べるように）非対角長距離秩序の存在である。この特徴を有した変分状態として、コヒーレント状態がまず有用である。さらに、これを第ゼロ近似として、その低エネルギー励起を Bogoliubov 理論で取り入れた変分波動関数を用いれば、弱く相互作用する Bose 系の低エネルギー物理はおおよそ理解できる。フェルミ粒子系の変分状態に興味を移せば、従来的な超伝導体は「二つのフェルミ粒子がペアリングを生じ凝縮した状態」である Bardeen-Cooper-Schrieffer（BCS）変分状態で、平衡状態の性質が理解できる。より明示的にこれらの変分関数を書き下すと次のようになる：

$$|\Psi_{\mathrm{Bog}}\rangle \propto e^{i\beta\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}=0}+\sum_{\boldsymbol{k}} f_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^\dagger_{\boldsymbol{k}}\hat{b}^\dagger_{-\boldsymbol{k}}}|0\rangle, \tag{413}$$

$$|\Psi_{\mathrm{BCS}}\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}}\left(u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)|0\rangle \propto e^{\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{v_{\boldsymbol{k}}}{u_{\boldsymbol{k}}}\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}}|0\rangle. \tag{414}$$

これらの変分状態が有用であるということは、言葉を換えれば、BEC や BCS 超伝導が「平均場理論で基本的には理解できる」ということである。

有用な変分状態の他の代表例として、行列積状態（Matrix Product States (MPS)）がある。MPS は（平均場的な記述があまり有用でない）1 次元系の解析などに極めて有用である。特に、エンタングルメントが（適切な意味で）「小さい」状態（例えば局所相互作用する 1 次元系の基底状態）であれば、一般に MPS で高精度に記述が行えることが知られている。

これらは平衡状態の話であったが、非平衡な多体状態を記述するのはより挑戦的な課題といえる。可積分系などで well-defined な準粒子励起が存在したり、流体力学を用いた記述が妥当な限られた場合を除けば、非平衡多体系を記述する変分状態を一般的に構成することは大変難しい。従って、これらを「手に負える」理論で扱うには、何らかの大胆な近似に頼らざるを得ないわけであるが、その変分状態は非平衡状態の物理を捉えるに十分な「柔軟性（flexibility）」と手に負えるだけの「効率性（efficiency）」を兼ね備えたものであってほしい。

本節では「Gaussian 多体状態」を変分状態のクラスとして導入する。名前が示唆するように、この状態はボソン/フェルミ粒子の生成消滅演算子の二次形式を指数の肩に置いた形で基本的には書ける（式 (413),(414) の状態はこの一例である）。必要なパラメータ数は $\sim N^2$ のオーダーで、

物理量は Wick の定理を用いて解析計算が可能であり、従って「手に負える」状態である。以下で見るように、従来的な平均場理論である Hartree-Fock 理論などよりも広いクラスの状態が表現可能であり、この意味で高い「柔軟性」も備えている。適切なユニタリ変換と Gaussian 状態を組み合わせることでその表現力はさらに広がり、非 Gaussian 状態と呼ぶべき変分状態が定義できる。これにより、従来は平均場的解析が困難と思われていた近藤問題などの強相関問題にも適用が可能となる。実際、具体的な例に対して MPS より少ないパラメータ数で（しかし同等の高精度で）定量的に基底状態が記述できることや、MPS が不得手な非平衡領域の解析も可能とすることを紹介する。

6.2 Bosonic Gaussian 多体状態

6.2.1 導入：cavity QED, BEC

この節ではボソン系の Gaussian 状態を導入する。一般論を展開する前に、簡単な例を取り上げよう。

まず前節でも扱った Cavity QED ハミルトニアンの photon part を考える：

$$\hat{H}_{\mathrm{C,ph}} = \hbar\omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\hbar g^2}{2\omega_c}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)^2 \tag{415}$$

これを対角化するために次のユニタリ変換を用いる：

$$\hat{b} = \cosh r\hat{a} + \sinh r\hat{a}^\dagger \equiv \hat{U}^\dagger \hat{a} \hat{U}, \tag{416}$$

$$e^r = \sqrt{\frac{\Omega}{\omega_c}},\ \ \Omega = \sqrt{\omega_c^2 + 2g^2},\ \ \hat{U} = e^{\frac{r}{2}\left(\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2\right)}. \tag{417}$$

ユニタリ変換なので、変換後のボソン演算子 $\hat{b}$ は交換関係 $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$ を引き続き満たすことに注意されたい。これによりハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\mathrm{C,ph}} = \hbar\Omega \hat{b}^\dagger \hat{b} + \mathrm{const.} \tag{418}$$

と対角化される。

この変換が「スクイージング」と呼ばれる所以を見るために、運動量・位置演算子を導入する：

$$\hat{x} = \hat{a} + \hat{a}^\dagger,\ \ \hat{p} = i\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right),\ \ [\hat{x}, \hat{p}] = 2i. \tag{419}$$

定義に $1/\sqrt{2}$ のファクターをつけておらず、交換関係に定数 2 が生じることに注意せよ[*18]。するとハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\mathrm{C,ph}} = \frac{\hbar\omega_c}{4}\left(\hat{p}^2 + \hat{x}^2\right) + \frac{\hbar g^2}{2\omega_c}\hat{x}^2 + \mathrm{const.} = \frac{\hbar\omega_c}{4}\left(\hat{p}^2 + \frac{\Omega^2}{\omega_c^2}\hat{x}^2\right) + \mathrm{const.} \tag{420}$$

$\hat{H}_{\mathrm{C,ph}}$ の基底状態を考えると

$$|\psi(r)\rangle = |0\rangle_b = \hat{U}^\dagger |0\rangle_a = e^{\frac{r}{2}\left(\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2}\right)}|0\rangle_a = e^{\frac{ir}{4}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})}|0\rangle_a \tag{421}$$

[*18] これは量子光学で良く用いられるノーテーションであり、ここでもそれに従う。

となる。つまり $\hat{A}^2$ 項を含んだハミルトニアンの基底状態は、もとの $\hat{a}$ 演算子で考えると真空 $|0\rangle_a$ がスクイーズ演算子で変化を受けた状態 $e^{\frac{r}{2}\left(\hat{a}^2-\hat{a}^{\dagger 2}\right)}|0\rangle_a$ である。これは $\hat{A}^2$ 項が調和トラップの振動数を大きくする役割を果たし、従って、固有状態をより $x=0$ 付近に強く束縛（スクイーズ）する作用を持つ：

$$\hat{U}\begin{pmatrix}\hat{x}\\ \hat{p}\end{pmatrix}\hat{U}^\dagger=\begin{pmatrix}e^{-r}\hat{x}\\ e^{r}\hat{p}\end{pmatrix}. \tag{422}$$

実はこれは Gaussian 変分法の最も簡単な例ともみなせる。式 (421) を変分パラメータ r でパラメータ付けされた変分波動関数と考え、エネルギー期待値 $\langle\psi(r)|\hat{H}_{\mathrm{C,ph}}|\psi(r)\rangle$ をパラメータ r について最小化させる。今の問題は二次形式で、この方法で厳密な基底状態が $r^*=\sqrt{\Omega/\omega_c}$ という最適値の場合に求まるが、相互作用（つまり $\hat{x}^4$ などの非線形項）があり厳密に解けない場合には一般に近似的な変分解が得られることになる。

以上を踏まえて、次に弱く相互作用するボーズ気体を考えよう：

$$\hat{H}=\int d\boldsymbol{r}\hat{\psi}^\dagger_{\boldsymbol{r}}\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\hat{\psi}_{\boldsymbol{r}}+\frac{U}{2}\int d\boldsymbol{r}\hat{\psi}^\dagger_{\boldsymbol{r}}\hat{\psi}^\dagger_{\boldsymbol{r}}\hat{\psi}_{\boldsymbol{r}}\hat{\psi}_{\boldsymbol{r}}. \tag{423}$$

この低エネルギー物理を記述するのに適した変分状態を構成したい。まず相互作用がない場合（$U=0$）は、波数 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ の状態に全ての粒子が占有された BEC 状態が基底状態である：

$$|\Psi^{U=0}_{\mathrm{GS}}\rangle\propto\hat{a}^{\dagger N}_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}}|\mathrm{vac}\rangle. \tag{424}$$

この BEC の本質的特徴は、非対角長距離秩序（ODLRO）の存在である：

$$\lim_{|\boldsymbol{r}|\to\infty}\langle\hat{\psi}^\dagger_{\boldsymbol{r}}\hat{\psi}_{\boldsymbol{0}}\rangle=\frac{N}{V}\neq 0. \tag{425}$$

従って「BEC の物理を正しく捉えた変分波動関数」を考える場合、この ODLRO を有した状態であってほしい。そのようなもののうち、最もシンプルなものは、次のコヒーレント状態ということになる：

$$|\Psi^{U=0}_{\mathrm{var}}\rangle=e^{\sqrt{N}\left(\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}}-\hat{a}_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}}\right)}|\mathrm{vac}\rangle. \tag{426}$$

この状態を用いるご利益は、平均場解析など種々の理論解析が単純化される点である。粒子数固有状態ではないが、マクロな系では粒子数揺らぎは相対的に無視でき、粒子数がほとんど確定した状態と考えられる。また、例えメゾスコピックな系（例えば $N\sim O(10^2)$）であっても（後で見るように）時間依存の変分原理を用いれば、その粒子数期待値が時間発展の過程で保存されるように定式化できる。この意味で粒子数固有状態でなくとも、また厳密な熱力学極限でなくとも、系の粒子数保存は矛盾なく理論に取り入れられる。

次に非ゼロな（弱い）斥力相互作用がある場合（$U>0$）を考える。基底状態は、上の状態を第ゼロ近似としてそれを少し修正した状態と期待される。つまり $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ に凝縮した粒子数が $N_0<N$ に変更を受けると考えられる。残りの粒子は $\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}$ の非ゼロな運動量状態を占有することになるが、総運動量は保存するので、$\boldsymbol{k}$ と $-\boldsymbol{k}$ がペアになって励起を起こす必要がある。これらの点を正しく捉えた変分波動関数を構築したい。

ここで式 (421) でスクイージングによってエネルギーを減少できたこと、そしてこの演算子がまさに 2 粒子ペアの励起を起こす形のものであることを思い出そう。すると、$U > 0$ の場合の変分波動関数として次のようなものが自然に思い浮かぶ：

$$|\Psi_{\rm var}^{U>0}\rangle = e^{\sum_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}} \frac{r_{\boldsymbol{k}}}{2}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}} - \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{-\boldsymbol{k}}^\dagger\right)} e^{\sqrt{N_0}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}}^\dagger - \hat{a}_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}}\right)}|{\rm vac}\rangle. \tag{427}$$

ここでパラメータ $r_{\boldsymbol{k}}$ は新たな変分パラメータであり、エネルギー期待値を最小にする条件から決定される[*19]。

上で行った議論は一見あまり馴染みがないかもしれないが、実は標準的な Bogoliubov 理論と実質的に等価である。このことを理解するために、通常の平均場理論に従い、$\hat{a}_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{N_0}\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{0}} + \delta\hat{a}_{\boldsymbol{k}}$ と展開し、ハミルトニアンに代入して $\delta\hat{a}$ について高次項を無視すると、いわゆる「平均場ハミルトニアン」として

$$\hat{H}_{\rm MF} = \frac{nUN}{2} + \sum_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}}\left[\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + nU\right)\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger\hat{a}_{\boldsymbol{k}} + \frac{nU}{2}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}^\dagger + \hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}\right)\right], \quad n = \frac{N}{V} \tag{428}$$

を得る。これは二次形式であり、上で行ったのと同様に線形変換（Bogoliubov 変換）で対角化できる：

$$\hat{b}_{\boldsymbol{k}} = \cosh r_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}} + \sinh r_{-\boldsymbol{k}}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{U}, \tag{429}$$

$$\hat{U} = e^{-\sum_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}} \frac{r_{\boldsymbol{k}}}{2}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}} - \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}^\dagger\right)}, \tag{430}$$

$$\sinh 2r_{\boldsymbol{k}} = \frac{nU}{\sqrt{\epsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + 2nU\right)}}. \tag{431}$$

対角化した平均場ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\rm MF} = {\rm const.} + \sum_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}}\sqrt{\epsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + 2nU\right)}\hat{b}_{\boldsymbol{k}}^\dagger\hat{b}_{\boldsymbol{k}}. \tag{432}$$

よって、$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ では凝縮が生じ、$\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{0}$ では変換後のボソン演算子 $\hat{b}$ の真空状態で表される状態が平均場理論の基底状態である：

$$|\Psi_{\rm MF}^{U\geq 0}\rangle = |{\rm vac}\rangle_{b_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}}}|{\rm BEC}_{\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}}\rangle, \tag{433}$$

ここで $\hat{b}$ の真空はもとのボソン演算子 $\hat{a}$ では真空がスクイーズされた状態であることに注意されたい：

$$|{\rm vac}\rangle_{b_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}}} = \hat{U}^\dagger|{\rm vac}\rangle = e^{\sum_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}} \frac{r_{\boldsymbol{k}}}{2}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{-\boldsymbol{k}} - \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger\hat{a}_{-\boldsymbol{k}}^\dagger\right)}|{\rm vac}\rangle. \tag{434}$$

実際、

$$\hat{b}_{\boldsymbol{k}\neq 0}|{\rm vac}\rangle_{b_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}}} = \hat{U}^\dagger\hat{a}_{\boldsymbol{k}\neq 0}\hat{U}\hat{U}^\dagger|{\rm vac}\rangle = \hat{U}^\dagger\hat{a}_{\boldsymbol{k}\neq 0}|{\rm vac}\rangle = 0. \tag{435}$$

[*19] より正確には、粒子数に関する拘束条件 $N = \hat{a}_{\boldsymbol{0}}^\dagger\hat{a}_{\boldsymbol{0}} + \sum_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger\hat{a}_{\boldsymbol{k}}$ のもとでの $(\{r_{\boldsymbol{k}}\}, N_0)$ に関する変分問題になる。拘束条件を課すため Lagrange 未定乗数を導入する必要があるが、これは化学ポテンシャル μ に他ならない。

以上をまとめると平均場理論から求まった基底状態 (433) は、まさに上で構成した式 (427) の変分波動関数 $|\Psi_{\mathrm{var}}^{U>0}\rangle$ と等価な形をしている。従って勿論、この変分状態を用いれば Wick の定理から物理量の期待値が 2 点相関関数の積で表せて、これにより平均場解析のプロセスと等価なことが行われる。例えば、相互作用項を運動量表示で期待値を計算すると

$$\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}} \left\langle \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}} \hat{a}_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{p}} \right\rangle \simeq N_0^2 + N_0 \sum_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}} \left(4 \left\langle \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{k}} \right\rangle + \left\langle \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}} \hat{a}^\dagger_{-\boldsymbol{k}} \right\rangle + \langle \hat{a}_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{-\boldsymbol{k}} \rangle \right) \tag{436}$$

となるが、右辺の 2 点相関関数をスクイージングパラメータ $r_{\boldsymbol{k}}$ について最適化するプロセスが、まさに上の平均場解析で $\hat{H}_{\mathrm{MF}}$ を対角化して基底状態を求めたプロセスに相当する。次節ではこのような変分法を系統的に行うための理論を展開する。

6.2.2 一般論

前節で導入した状態 (421) や (427) は、ボソン Gaussian 状態と呼ばれるより広いクラスの多体状態の一例である。二次形式で書ける（つまり相互作用がない）ハミルトニアンで生成されるユニタリ変換により、ボソン Gaussian 状態そのもの及びその空間上の操作は完全に特徴付けられる。ここではその一般論を展開する。以下では $\hbar = 1$ とする。

[導入：単一モード]

まずノーテーションの導入も含めて、最も簡単な場合の単一モードの Gaussian 状態に関する結果をまとめよう。位置・運動量演算子を

$$\hat{x} = \hat{a} + \hat{a}^\dagger, \;\; \hat{p} = i(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \tag{437}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = 2i, \;\; [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{438}$$

で導入し、真空状態を $\hat{a}|0\rangle = 0$ で定義する。Gaussian(純粋) 状態は、$|0\rangle$ に高々 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ の二次多項式を指数の肩に持つユニタリ演算子 $\hat{U}_{\mathrm{GS}}$ を作用させて得られる状態を指す：

$$|\psi\rangle = \hat{U}_{\mathrm{GS}}|0\rangle. \tag{439}$$

後で一般的に示すように、そのような任意の $\hat{U}_{\mathrm{GS}}$ は三つの基本操作の積として表現できる。ひとつ目は次のスクイージング演算子である：

$$S(r) = e^{\frac{r}{2}(\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2)}, \;\; r \in \mathbb{R} \tag{440}$$

$$\hat{S}^\dagger(r) \hat{a} \hat{S}(r) = \cosh r \hat{a} + \sinh r \hat{a}^\dagger. \tag{441}$$

二つ目は位相回転で

$$\hat{R}(\theta) = e^{i\theta \hat{a}^\dagger \hat{a}}, \;\; \theta \in \mathbb{R} \tag{442}$$

で与えられる。三つ目が並進演算子で

$$\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}}, \;\; \alpha \in \mathbb{C} \tag{443}$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha \tag{444}$$

のように作用する。以上より、任意の単一モード Gaussian 状態は

$$|\psi(\alpha,\theta,r)\rangle = \hat{D}(\alpha)\hat{R}(\theta)\hat{S}(r)|0\rangle \tag{445}$$

$$= e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} e^{i\theta\hat{a}^\dagger\hat{a}} e^{\frac{r}{2}(\hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2)}|0\rangle \tag{446}$$

と書ける。

これは $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ 表示だが、$\hat{x}, \hat{p}$ を用いた表示も有用である。このため並進演算子を

$$\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}} \equiv \exp\left[\frac{i}{2}\begin{pmatrix} \hat{x} & \hat{p} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}\right] \tag{447}$$

$$= \exp\left(\frac{i}{2}\hat{\boldsymbol{\phi}}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\xi}\right) \tag{448}$$

と表す。ここで

$$\hat{\boldsymbol{\phi}} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{p} \end{pmatrix}, \quad \sigma \equiv i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{449}$$

であり、

$$\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\hat{\boldsymbol{\phi}}\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}} = \hat{\boldsymbol{\phi}} + \boldsymbol{\xi} \iff \hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}^\dagger\begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{p} \end{pmatrix}\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}} = \begin{pmatrix} \hat{x} + \xi_1 \\ \hat{p} + \xi_2 \end{pmatrix} \tag{450}$$

のように作用する。よって Gaussian 状態は $\hat{x}, \hat{p}$ 表示で次のようになる：

$$|\psi(\phi_1,\phi_2,\theta,r)\rangle = e^{\frac{i}{2}(\hat{x}\phi_2 - \hat{p}\phi_1)} e^{\frac{i\theta}{4}\left(\hat{x}^2 + \hat{p}^2\right)} e^{-\frac{ir}{4}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})}|0\rangle \tag{451}$$

$$\phi_1 = 2\mathrm{Re}[\alpha], \quad \phi_2 = 2\mathrm{Im}[\alpha], \quad \phi_{1,2} \in \mathbb{R}. \tag{452}$$

これらの実数パラメータ $\phi_1, \phi_2, \theta, r$ は Gaussian 状態の一次・二次モーメントと関係づく。一次モーメントについては単に

$$\langle\psi|\hat{\boldsymbol{\phi}}|\psi\rangle = \langle 0|\hat{D}_{\boldsymbol{\phi}}^\dagger\hat{\boldsymbol{\phi}}\hat{D}_{\boldsymbol{\phi}}|0\rangle = \boldsymbol{\phi} \tag{453}$$

により $\phi_{1,2}$ で与えられる。二次モーメントは共分散行列

$$(\Gamma_\phi)_{\xi\eta} \equiv \frac{1}{2}\langle\psi|\left\{\delta\hat{\phi}_\xi, \delta\hat{\phi}_\eta\right\}|\psi\rangle, \quad \delta\hat{\boldsymbol{\phi}} = \hat{\boldsymbol{\phi}} - \boldsymbol{\phi}, \quad \xi,\eta \in \{1,2\} \tag{454}$$

で特徴付けられるが、これは θ, r で表せる（演習問題）。これにより、Gaussian 状態は次の特性関数で特徴付けられる：

$$\chi_\psi(\boldsymbol{\xi}) \equiv \langle\psi|\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}|\psi\rangle = \exp\left[-\frac{1}{8}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\sigma^{\mathrm{T}}\Gamma_\phi\sigma\boldsymbol{\xi} + \frac{i}{2}\boldsymbol{\phi}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\xi}\right], \quad \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^2. \tag{455}$$

問題：単一モード Gaussian 純粋状態 (451) を考える。共分散行列 Γ_ϕ を θ, r で表せ。また式 (455) を導出せよ。

[準備：複数モード]

議論を一般の複数モードの場合に拡張しよう。モード i のボソンの生成消滅演算子 $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ を用いて、位置・運動量演算子のベクトルを導入する：

$$\hat{\boldsymbol{\phi}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \ldots, \hat{x}_{N_b}, \hat{p}_1, \hat{p}_2, \ldots, \hat{p}_{N_b})^{\mathrm{T}}, \tag{456}$$

$$\hat{x}_i = \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger, \;\; \hat{p}_i = i\left(\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i\right), \tag{457}$$

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\right] = \delta_{ij}, \;\; [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad i, j \in \{1, 2, \ldots, N_b\} \tag{458}$$

ここで N_b は全モード数である。交換関係は

$$\left[\hat{\phi}_\xi, \hat{\phi}_\eta\right] = 2i\sigma_{\xi\eta}, \;\; \sigma \equiv i\sigma^y \otimes \mathrm{I}_{N_b} = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{I}_{N_b} \\ -\mathrm{I}_{N_b} & 0 \end{pmatrix} \quad \xi, \eta \in \{1, 2, \ldots, 2N_b\}. \tag{459}$$

次に演算子 $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ の並進を引き起こす Weyl 演算子を導入する：

$$\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}} = e^{\frac{i}{2}\hat{\boldsymbol{\phi}}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\xi}}, \;\; \hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}^\dagger \hat{\boldsymbol{\phi}} \hat{D}_{\boldsymbol{\xi}} = \hat{\boldsymbol{\phi}} + \boldsymbol{\xi}, \;\; \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^{2N_b}. \tag{460}$$

この演算子は「$\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}$ の重ね合わせで任意の N_b モードボソン多体状態上の演算子が表せる」という意味で完備である。このことをより明示的に表すため、演算子 $\hat{A}$ の特性関数（characteristic function）を次で定義する：

$$\chi_A(\boldsymbol{\xi}) \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}\right]. \tag{461}$$

逆変換によりもとの演算子は次のように表される：

$$\hat{A} = \int_{\mathbb{R}^{2N_b}} \frac{d^{2N_b}\boldsymbol{\xi}}{(4\pi)^{N_b}} \chi_A(\boldsymbol{\xi}) \hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}^\dagger. \tag{462}$$

これは次の公式から確かめられる：

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{D}_{\boldsymbol{\zeta}}\right] = (4\pi)^{N_b}\delta(\boldsymbol{\zeta}). \tag{463}$$

この変換は演算子（$\hat{A}$）と適切な複素関数（χ_A）を一対一に対応させる、ある種の Fourier 変換と考えることもできる。実際、例えば Fourier 解析で Parseval の関係が成立したように、特性関数についても同様の等式が成立する：

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\right] = \int_{\mathbb{R}^{2N_b}} \frac{d^{2N_b}\boldsymbol{\xi}}{(4\pi)^{N_b}} \chi_A(-\boldsymbol{\xi})\chi_B(\boldsymbol{\xi}). \tag{464}$$

演算子がエルミートな場合は、特性関数は次の性質を満たす：

$$\chi_A^*(\boldsymbol{\xi}) = \chi_A(-\boldsymbol{\xi}). \tag{465}$$

これらの関係式の応用として、密度行列 $\hat{\rho}$ を演算子に選ぶことでその purity が次で求まる：

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}^2] = \int_{\mathbb{R}^{2N_b}} \frac{d^{2N_b}\boldsymbol{\xi}}{(4\pi)^{N_b}} \chi_\rho(-\boldsymbol{\xi})\chi_\rho(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\mathbb{R}^{2N_b}} \frac{d^{2N_b}\boldsymbol{\xi}}{(4\pi)^{N_b}} |\chi_\rho(\boldsymbol{\xi})|^2. \tag{466}$$

また、特性関数の定義 (461) より、任意の相関関数が特性関数の微分（と適切な定数倍）から得られる：

$$\begin{aligned}&\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}\left[\hat{x}_1^{p_1}\cdots\hat{x}_{N_b}^{p_{N_b}}\hat{p}_1^{q_1}\cdots\hat{p}_{N_b}^{q_{N_b}}\right]_S\right]\\&=2^{\sum_i q_i+p_i}i^{\sum_i q_i-p_i}\left.\frac{\partial^{q_1}}{\partial\xi_1^{q_1}}\cdots\frac{\partial^{q_{N_b}}}{\partial\xi_{N_b}^{q_{N_b}}}\frac{\partial^{p_1}}{\partial\xi_{1+N_b}^{p_1}}\cdots\frac{\partial^{p_{N_b}}}{\partial\xi_{2N_b}^{p_{N_b}}}\right|_{\boldsymbol{\xi}=\mathbf{0}}\chi_\rho(\boldsymbol{\xi})\end{aligned}\tag{467}$$

ここで $[\cdots]_S$ は括弧内の演算子を対称化する操作である（例えば $[\hat{x}_i\hat{p}_j]_S=(\hat{x}_i\hat{p}_j+\hat{p}_j\hat{x}_i)/2$）。また特性関数のフーリエ変換で得られる Wigner 関数も良く用いられる：

$$W(\boldsymbol{\zeta})=\int_{\mathbb{R}^{2N_b}}\frac{d^{2N_b}\boldsymbol{\xi}}{(4\pi)^{2N_b}}e^{-\frac{i}{2}\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\xi}}\chi(\boldsymbol{\xi}).\tag{468}$$

問題：交換関係 $[\hat{x},\hat{p}]=2i$ を満たす演算子について、次の McCoy の公式を示せ：

$$[\hat{x}^m\hat{p}^n]_S=\frac{1}{2^m}\sum_{l=0}^{m}\begin{pmatrix}m\\l\end{pmatrix}\hat{x}^l\hat{p}^n\hat{x}^{m-l}=\exp\left(-i\frac{\partial}{\partial\hat{x}}\frac{\partial}{\partial\hat{p}}\right)\hat{x}^m\hat{p}^n\tag{469}$$

[ボソン Gaussian 状態]

ボソン Gaussian 状態 $\hat{\rho}_{\mathrm{G}}$ は、相関関数の二次モーメントまでで完全に特徴付けられるクラスの状態として定義される。より明示的には、特性関数を用いて次のように定義される：

$$\chi_{\rho_{\mathrm{G}}}(\boldsymbol{\xi})=\exp\left[-\frac{1}{8}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\sigma^{\mathrm{T}}\Gamma_\phi\sigma\boldsymbol{\xi}+\frac{i}{2}\boldsymbol{\phi}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\xi}\right],\tag{470}$$

$$\hat{\rho}_{\mathrm{G}}=\int_{\mathbb{R}^{2N_b}}\frac{d^{2N_b}\boldsymbol{\xi}}{(4\pi)^{N_b}}\,\chi_{\rho_G}(\boldsymbol{\xi})\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}^{\dagger}.\tag{471}$$

ここで一次モーメント $\boldsymbol{\phi}$ は平均場ベクトル、二次モーメント Γ_ϕ は共分散行列を意味する：

$$\boldsymbol{\phi}=\langle\hat{\boldsymbol{\phi}}\rangle_{\mathrm{G}},\ \ (\Gamma_\phi)_{\xi\eta}=\frac{1}{2}\left\langle\left\{\delta\hat{\phi}_\xi,\delta\hat{\phi}_\eta\right\}\right\rangle_{\mathrm{G}},\tag{472}$$

$$\langle\cdots\rangle_{\mathrm{G}}\equiv\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{G}}\cdots],\ \ \delta\hat{\boldsymbol{\phi}}=\hat{\boldsymbol{\phi}}-\boldsymbol{\phi}.\tag{473}$$

共分散行列 Γ_ϕ は $\langle\delta\hat{x}\delta\hat{p}\rangle$ $\langle\delta\hat{x}\delta\hat{x}\rangle$ $\langle\delta\hat{p}\delta\hat{p}\rangle$ などの二点相関関数の情報を完全に含むものである。定義より Γ_ϕ は $2N_b\times2N_b$ の実対称行列である。またこれは次の一般化された Heisenberg の不確定性関係を満たす：

$$\Gamma_\phi+i\sigma\geq0.\tag{474}$$

$\sigma=-\sigma^{\mathrm{T}}$ より、この条件は $\Gamma_\phi-i\sigma\geq0$ と等価であり、従って $\Gamma_\phi\geq0$ も意味する。特に Γ_ϕ が対角な場合には、式 (474) から良く知られた通常の関係式が導かれる：

$$\left\langle\delta\hat{x}_i^2\right\rangle\left\langle\delta\hat{p}_i^2\right\rangle\geq1.\tag{475}$$

不等式 (474) 自体は交換関係 (459) から導かれるもので、任意の状態 $\hat{\rho}$ について成立する。特に、Gaussian 状態の場合には関係式 (474) と $\hat{\rho}_{\rm G}$ の正値性の条件 $\hat{\rho}_{\rm G} \geq 0$ は等価となる。このことを言い換えれば、ボソン Gaussian 状態 (470) は「条件 (474) を満たす実対称行列 Γ_ϕ と (任意の) 実ベクトル $\boldsymbol{\phi}$」のセット $(\boldsymbol{\phi}, \Gamma_\phi)$ からなる集合で完全に特徴付けられる、ということになる。

問題：不等式 (474) を交換関係 (459) から導け。Gaussian 状態については不等式 (474) が密度行列の正値性 $\hat{\rho}_{\rm G} \geq 0$ と等価であることを確かめよ。

問題：Gaussian 状態の内積 $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2]$ の表式を求めよ。特に purity が $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}^2] = 1/\sqrt{\det(\Gamma_\phi)}$ と書けることを確認せよ。ヒント：実対称正定値行列 A と実ベクトル $\boldsymbol{v}$ について成立する次の公式を用いても良い：

$$\int_{\mathbb{R}^N} d^N r \; e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{r}^{\rm T} A \boldsymbol{r} + \boldsymbol{v}^{\rm T}\boldsymbol{r}} = \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det(A)}} e^{\frac{1}{2}\boldsymbol{v}^{\rm T} A^{-1} \boldsymbol{v}}. \tag{476}$$

Gaussian 状態の任意の多点相関関数は、公式 (467) と Gaussian 特性関数 (470) から、二点相関関数 Γ_ϕ と平均場ベクトル $\boldsymbol{\phi}$ の積に分解されることがわかる（Wick 定理)。

基底として $(\hat{x}, \hat{p})$ 表示でなく、$(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ 表示を用いる場合には次の複素変数を導入する：

$$\lambda_i = \frac{\xi_i + i\xi_{i+N_b}}{2}, \;\; \lambda_i^* = \frac{\xi_i - i\xi_{i+N_b}}{2}. \tag{477}$$

この複素ベクトルと消滅演算子のベクトル

$$\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_{N_b})^{\rm T}, \;\; \hat{\boldsymbol{a}} = (\hat{a}_1, \hat{a}_2, \ldots, \hat{a}_{N_b})^{\rm T}, \tag{478}$$

から、Weyl 演算子の $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ 表示が次のように求まる：

$$\hat{D}_{\boldsymbol{\lambda}} = e^{\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger \boldsymbol{\lambda} - \hat{\boldsymbol{a}}^{\rm T} \boldsymbol{\lambda}^*}. \tag{479}$$

これは $(\hat{x}, \hat{p})$ 表示のもの (460) と等価である。一般に、これら二つの表示は次の変換行列により移り変われる：

$$\hat{\boldsymbol{\phi}} = T \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{a}} \\ \hat{\boldsymbol{a}}^* \end{pmatrix}, \;\; T \equiv \begin{pmatrix} \mathrm{I}_{N_b} & \mathrm{I}_{N_b} \\ -i\mathrm{I}_{N_b} & i\mathrm{I}_{N_b} \end{pmatrix}. \tag{480}$$

また相関関数については次の簡単な関係式が成立する：

$$\Gamma_b \equiv \left\langle \begin{pmatrix} \delta\hat{\boldsymbol{a}} \\ \delta\hat{\boldsymbol{a}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\hat{\boldsymbol{a}}^\dagger & \delta\hat{\boldsymbol{a}}^{\rm T} \end{pmatrix} \right\rangle_{\rm G} = \frac{1}{2}\mathrm{I}_{2N_b} + \frac{1}{4} T^\dagger \Gamma_\phi T \tag{481}$$

ここで $\delta\hat{\boldsymbol{a}} = \hat{\boldsymbol{a}} - \langle\hat{\boldsymbol{a}}\rangle_{\rm G}$ である。Γ_b は $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ 表示で、$\langle\delta\hat{a}\delta\hat{a}^\dagger\rangle\langle\delta\hat{a}\delta\hat{a}\rangle\langle\delta\hat{a}^\dagger\delta\hat{a}\rangle\langle\delta\hat{a}^\dagger\delta\hat{a}^\dagger\rangle$ という形の相関の情報を完全に含む共分散行列である。

[Gaussian 操作]

次に Gaussian 状態を別の Gaussian 状態に移すユニタリ操作（Gaussian 操作）を特徴付けたい。そのために反対称行列 σ を不変に保つ、実行列 S の集合（シンプレクティック群）を導入する：

$$S\sigma S^{\mathrm{T}} = \sigma. \tag{482}$$

物理的には、これは交換関係 (459) を不変に保つ線形変換を表している。Γ_ϕ は正定値行列である（関係式 (474) から従う）ため、次の定理が有用となる：

定理（Williamson 分解）任意の $2N_b \times 2N_b$ 実対称正定値行列 Γ はシンプレクティック変換で次のように対角化される：

$$S\Gamma S^{\mathrm{T}} = \mathrm{diag}\left(\kappa_1, \ldots, \kappa_{N_b}, \kappa_1, \ldots, \kappa_{N_b}\right), \tag{483}$$

ここで実数 $1 \leq \kappa_1 \cdots \leq \kappa_{N_b}$ は Williamson 固有値と呼ばれる。

(証明) 式 (483) は次を満たす行列 S の存在を意味する：

$$S = (D \oplus D)^{1/2} O \Gamma^{-1/2} \tag{484}$$

ここで O は直交行列で、$D = \mathrm{diag}(\kappa_1, \ldots, \kappa_{N_b})$ である。S がシンプレクティックであることは次を意味する：

$$O\Gamma^{-1/2}\sigma\Gamma^{-1/2}O^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 0 & D^{-1} \\ -D^{-1} & 0 \end{pmatrix} \tag{485}$$

$\Gamma^{-1/2}\sigma\Gamma^{-1/2}$ は実反対称行列であり、直交行列 O で右辺の形に変形ができる。 □

$(\boldsymbol{\phi}, \Gamma_\phi)$ から $(\boldsymbol{\phi}', \Gamma'_\phi)$ で定義される Gaussian 状態に移るためのユニタリ操作を見出したい。Williamson 分解の定理より、二つの共分散行列は必ず何らかのシンプレティック変換で関連づくことが示せる：

$$\Gamma'_\phi = S\Gamma_\phi S^{\mathrm{T}}. \tag{486}$$

これは、共分散行列の定義より、基底 $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ にシンプレクティック変換を作用させて $S\hat{\boldsymbol{\phi}}$ に変換させることと同値である。一方で平均場ベクトルについては、単純に並進を起こせば $\boldsymbol{\phi} \to \boldsymbol{\phi}'$ に移せる。従って、これらの変換を引き起こす次のユニタリ変換が求めたい Gaussian 操作ということになる：

$$\hat{U}^\dagger_{S,\boldsymbol{\Delta}} \hat{\boldsymbol{\phi}} \hat{U}_{S,\boldsymbol{\Delta}} = S\hat{\boldsymbol{\phi}} + \boldsymbol{\Delta}, \quad \boldsymbol{\Delta} = \boldsymbol{\phi}' - S\boldsymbol{\phi}. \tag{487}$$

実際、この変換により $(\boldsymbol{\phi}, \Gamma_\phi)$ で定義される Gaussian 状態 $\hat{\rho}_{\mathrm{G}}$ は

$$\hat{\rho}'_{\mathrm{G}} = \hat{U}_{S,\boldsymbol{\Delta}} \hat{\rho}_{\mathrm{G}} \hat{U}^\dagger_{S,\boldsymbol{\Delta}} \tag{488}$$

に移り、変換後の Gaussian 状態 $\hat{\rho}'_{\mathrm{G}}$ の平均場ベクトルと共分散行列は、構成から $\boldsymbol{\phi}' = S\boldsymbol{\phi} + \boldsymbol{\Delta}$ と $\Gamma'_\phi = S\Gamma_\phi S^{\mathrm{T}}$ を満たす。

変換 (487) を引き起こすユニタリ変換 $\hat{U}_{S,\boldsymbol{\Delta}}$ の具体形を知るため、シンプレクティック群の Lie 代数の性質から一般に次のように書けることに注意する：

$$S = e^{\sigma R}, \;\; R = R^{\mathrm{T}}. \tag{489}$$

この実対称行列 R で定義される次の変換

$$\hat{U}_{S,\boldsymbol{\Delta}} = \exp\left[i\hat{H}_{\boldsymbol{\Delta}}\right]\exp\left[-i\hat{H}_S\right],\; \hat{H}_{\boldsymbol{\Delta}} = \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\phi}}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\Delta},\; \hat{H}_S = \frac{1}{4}\hat{\boldsymbol{\phi}}^{\mathrm{T}}R\hat{\boldsymbol{\phi}} \tag{490}$$

が条件 (487) を満たすことがすぐに示せる。

式 (490) はボソン演算子 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ について二次までの項を含むハミルトニアンで生成されるユニタリ時間発展ともみなせる。逆に、任意の二次形式ハミルトニアンで生成される時間発展は、適切な R と $\boldsymbol{\Delta}$ で式 (490) のように表せる。従って、初期状態が Gaussian 状態で、時間発展が二次形式ハミルトニアンならば状態は常に Gaussian 状態に留まることが分かる。

シンプレクティック変換 S の物理的意味を考える上で、次の分解が有用である：

定理（Euler/Bloch-Messiah 分解）任意の $2N_b \times 2N_b$ 実シンプレクティック行列は次のように分解できる：

$$S = KDL. \tag{491}$$

K と L はシンプレクティックな直交行列で、D は次の対角行列：

$$D = \mathrm{diag}\left(e^{-r_1}, e^{-r_2}, \ldots, e^{-r_{N_b}}, e^{r_1}, e^{r_2}, \ldots, e^{r_{N_b}}\right), \;\; r_i \in \mathbb{R} \tag{492}$$

つまり、シンプレクティック変換 S は 2 回の座標の基底変換（回転）と、ボソンモードのスクイージングの合成変換から構成されている。ここで $\{r_j\}$ はスクイーズパラメータとしばしば呼ばれる。

[Gaussian 純粋状態の例]

以上の諸性質をまとめる意味でも、$\hat{\rho}_{\mathrm{G}}$ が純粋状態の場合を考えよう。Williamson の分解定理と purity の表式 $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}^2] = 1/\sqrt{\det(\Gamma_\phi)}$ から、Gaussian 状態が pure であることの必要十分条件は Williamson 固有値が $\kappa_1 = \cdots = \kappa_{N_b} = 1$ を満たすことである。従って、純粋状態の場合には何らかのシンプレクティック行列 S によって共分散行列が

$$\Gamma_\phi = S^{\mathrm{T}}S \tag{493}$$

と表せる。この関係式から、$(\sigma\Gamma_\phi)^2 = -\mathrm{I}_{2N_b}$ も従う。

純粋状態 $\hat{\rho}_{\mathrm{G}} = |\psi\rangle\langle\psi|$ の場合は、Gaussian 操作 (490) を真空場 $|0\rangle$ に作用させることで、任意の Gaussian 状態が表せる：

$$|\psi\rangle = \hat{U}_{S,\boldsymbol{\Delta}}|0\rangle = e^{\frac{i}{2}\hat{\boldsymbol{\phi}}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\phi}}e^{-\frac{i}{4}\hat{\boldsymbol{\phi}}^{\mathrm{T}}R\hat{\boldsymbol{\phi}}}|0\rangle. \tag{494}$$

実際、式 (487) を用いればその平均場ベクトルと共分散行列は次のように求まる：

$$\langle\hat{\boldsymbol{\phi}}\rangle = \langle 0|\hat{U}^\dagger_{S,\boldsymbol{\phi}}\hat{\boldsymbol{\phi}}\hat{U}_{S,\boldsymbol{\phi}}|0\rangle = \langle 0|S\hat{\boldsymbol{\phi}} + \boldsymbol{\phi}|0\rangle = \boldsymbol{\phi}, \tag{495}$$

$$\frac{1}{2}\left\langle\left\{\delta\hat{\phi}_\xi,\delta\hat{\phi}_\eta\right\}\right\rangle=\frac{1}{2}\left\langle 0\right|\left\{\left(S\delta\hat{\phi}\right)_\xi,\left(S\delta\hat{\phi}\right)_\eta\right\}\left|0\right\rangle=\left(SS^{\mathrm{T}}\right)_{\xi\eta}=\left(\Gamma_\phi\right)_{\xi\eta}. \tag{496}$$

最も単純な例として、単一モード（$N_b=1$）の場合を考える。式 (491) より

$$S=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-r} & 0\\ 0 & e^{r}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\phi & -\sin\phi\\ \sin\phi & \cos\phi\end{pmatrix}. \tag{497}$$

並進も含めると、最も一般的な単一モード Gaussian 純粋状態が次で書き下せる：

$$|\psi(\phi_1,\phi_2,\theta,r)\rangle=e^{\frac{i}{2}(\hat{x}\phi_2-\hat{p}\phi_1)}e^{\frac{i\theta}{4}\left(\hat{x}^2+\hat{p}^2\right)}e^{-\frac{ir}{4}(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})}|0\rangle. \tag{498}$$

$(\hat{a},\hat{a}^\dagger)$ 表示では

$$|\psi(\alpha,\theta,r)\rangle=e^{\alpha\hat{a}^\dagger-\alpha^*\hat{a}}e^{i\theta\hat{a}^\dagger\hat{a}}e^{\frac{r}{2}\left(\hat{a}^2-\hat{a}^{\dagger 2}\right)}|0\rangle. \tag{499}$$

ここで、式 (497) の最右辺の回転は真空に自明に作用するため、状態が不変であることに注意せよ。

複数モードの Gaussian 純粋状態の例として、前節で扱った弱く相互作用する Bose 気体の基底状態を近似する変分状態 (427) が挙げられる。これは Gaussian 状態の特殊な部分空間を定義してはいるが、一般の Gaussian 状態はより広い変分空間を許容することに注意されたい。後節では、このような最も一般の Gaussian 状態空間上で、基底状態や多体ダイナミクスに関する最適な変分解を与えるための理論を、変分原理の一般論に基づいて展開する。

6.3 Fermionic Gaussian 多体状態

6.3.1 導入：BCS 理論

フェルミ粒子系の Gaussian 状態の一般論を展開する前に、典型的で重要な例として超伝導体における BCS 変分状態の復習を行う。

[導入：単一モード]

まず記法の導入も兼ねて、最も単純なスピン-1/2 で単一モードのフェルミ粒子を考える。生成消滅演算子は $\hat{c}_\sigma,\hat{c}_\sigma^\dagger$ $(\sigma\in\{\uparrow,\downarrow\})$ で以下の反交換関係を満たす：

$$\left\{\hat{c}_\sigma,\hat{c}_{\sigma'}^\dagger\right\}=\delta_{\sigma\sigma'},\ \ \{\hat{c}_\sigma,\hat{c}_{\sigma'}\}=0,\ \ \sigma\in\{\uparrow,\downarrow\}. \tag{500}$$

いま、生成演算子を用いて作られる状態のうち

$$\langle\hat{c}_\uparrow^\dagger\hat{c}_\uparrow\rangle_\theta=\langle\hat{c}_\downarrow^\dagger\hat{c}_\downarrow\rangle_\theta=\sin^2\theta,\ \ \langle\hat{c}_\uparrow^\dagger\hat{c}_\downarrow^\dagger\rangle_\theta=\langle\hat{c}_\downarrow\hat{c}_\uparrow\rangle_\theta=\sin\theta\cos\theta \tag{501}$$

なる期待値を有する状態を考える。以下ですぐに見るように、物理的にはこれは「異なるスピン状態の二電子が対を形成し凝縮した状態」の変分状態として有用なものである。条件 (501) を満たす状態は次の二状態の重ね合わせ

$$\hat{c}_\uparrow^\dagger\hat{c}_\downarrow^\dagger|0\rangle,\ \ |0\rangle \tag{502}$$

で構成され、式 (501) の成分を再現するには

$$|\Psi(\theta)\rangle = \left(\cos\theta + \sin\theta \hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger\right)|0\rangle \tag{503}$$

と係数を選べば良い。これは実は

$$\hat{U}_\theta = e^{-\theta\left(\hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger + \hat{c}_\uparrow \hat{c}_\downarrow\right)} \tag{504}$$

というユニタリ変換を用いて

$$|\Psi(\theta)\rangle = \hat{U}_\theta^\dagger |0\rangle = \hat{U}_{-\theta}|0\rangle \tag{505}$$

と書ける。このことを示すため、

$$\hat{U}_\theta^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger \end{pmatrix} \hat{U}_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger \end{pmatrix} \tag{506}$$

という関係式に注意する。すると $\langle\Psi(\theta)|\hat{c}_\downarrow \hat{c}_\uparrow|\Psi(\theta)\rangle$ という期待値は

$$\begin{aligned} \langle 0|\hat{U}_\theta \hat{c}_\downarrow \hat{c}_\uparrow \hat{U}_\theta^\dagger|0\rangle &= \langle 0|\hat{U}_{-\theta}^\dagger \hat{c}_\downarrow \hat{c}_\uparrow \hat{U}_{-\theta}|0\rangle \\ &= \langle 0|\left(-\sin\theta \hat{c}_\uparrow^\dagger + \cos\theta \hat{c}_\downarrow\right)\left(\cos\theta \hat{c}_\uparrow + \sin\theta \hat{c}_\downarrow^\dagger\right)|0\rangle \qquad (507) \\ &= \sin\theta\cos\theta \qquad (508) \end{aligned}$$

であり、式 (501) を確かに満たしている。

以上をまとめると、変分状態は

$$|\Psi(\theta)\rangle = \left(\cos\theta + \sin\theta \hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger\right)|0\rangle = e^{\theta\left(\hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger + \hat{c}_\uparrow \hat{c}_\downarrow\right)}|0\rangle \tag{509}$$

と表せる。

あとで用いる Majorana 表示もここで導入しておこう：

$$\hat{\psi}_{1\sigma} = \hat{c}_\sigma + \hat{c}_\sigma^\dagger, \;\; \hat{\psi}_{2\sigma} = i(\hat{c}_\sigma^\dagger - \hat{c}_\sigma), \tag{510}$$

$$\left\{\hat{\psi}_{\xi\sigma}, \hat{\psi}_{\eta\sigma'}\right\} = 2\delta_{\xi\eta}\delta_{\sigma\sigma'} \quad \xi,\eta \in \{1,2\}\,. \tag{511}$$

関係式 $\hat{\psi}_{\xi\sigma} = \hat{\psi}_{\xi\sigma}^\dagger$ が成立するという意味で「実」である Majorana 演算子を用いた $(\hat{\psi}_1, \hat{\psi}_2)$ 表示は、いわばボソンの場合の $(\hat{x}, \hat{p})$ 表示に相当するものといえる。ただし、ボソンの場合は $\hat{x}$ と $\hat{p}$ が可換でなかったのに対し、Majorana 表示では $\hat{\psi}_1$ と $\hat{\psi}_2$ が反可換で、またそれら同士が反可換ではない（$\hat{\psi}_1^2 = \hat{\psi}_2^2 = 1$）ことに注意されたい。上の変分状態 (509) は Majorana 表示では

$$|\Psi(\theta)\rangle = e^{\theta\left(\hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger + \hat{c}_\uparrow \hat{c}_\downarrow\right)}|0\rangle = e^{\frac{\theta}{2}\left(\hat{\psi}_{1\uparrow}\hat{\psi}_{1\downarrow} - \hat{\psi}_{2\uparrow}\hat{\psi}_{2\downarrow}\right)}|0\rangle \tag{512}$$

と表される。

[BCS モデル]

これらの準備を踏まえて、次に超伝導の BCS モデルを考えよう：

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} - \frac{g}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{q}} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \hat{c}_{-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{k}'\uparrow}. \tag{513}$$

ここで $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \hbar^2 k^2/(2m) - \mu$ は化学ポテンシャルも含めた一粒子エネルギーで、$\Omega = \sum_{\boldsymbol{k}} 1$ はモード数である。第二項は（例えばフォノンを介した）電子間の実効的な引力相互作用を表している。この模型の基底状態である BCS 超伝導相の本質的特徴は、異なるスピン状態の二電子からなるクーパー対の形成とその凝縮である。これは即ち次の意味での ODLRO の存在を示唆する：

$$\langle \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{r}_1\uparrow} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{r}_2\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{r}_3\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{r}_4\uparrow} \rangle \to O\left(\frac{N^2}{V^2}\right) \neq 0, \;\; \hat{c}_{\boldsymbol{r}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\boldsymbol{k}} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{514}$$

ここで極限 $\to$ は $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ と $(\boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4)$ が遠く離れている極限を意味している。条件 (514) を満たすような状態を、真っ正直に書くなら

$$\prod_{\boldsymbol{k}} \left(g_{\boldsymbol{k}} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \right) |\mathrm{vac}\rangle \tag{515}$$

という二電子状態の直積状態がまず思い浮かぶだろう。しかし、この状態は種々の物理量を計算する際に扱いがあまり簡便ではない。そこで上に示した物理的に重要な特徴（ODLRO）は保っておりかつ扱いが容易な変分状態を考えたい。

単一モードの例で考えた状態 (509) を思い出せば、そのような状態として $\langle \hat{c}^\dagger_\uparrow \hat{c}^\dagger_\downarrow \rangle$ や $\langle \hat{c}_\downarrow \hat{c}_\uparrow \rangle$ などの期待値が非ゼロな値をもつ

$$|\Psi^{\mathrm{BCS}}_{\mathrm{var}}\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} \left(\cos\theta_{\boldsymbol{k}} + \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \right) |\mathrm{vac}\rangle = e^{\sum_{\boldsymbol{k}} \theta_{\boldsymbol{k}} \left(\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \right)} |\mathrm{vac}\rangle \tag{516}$$

が変分状態として自然に思い浮かぶ（$\boldsymbol{k}$ と $-\boldsymbol{k}$ が対になるのは運動量を保存するため）。実際、この状態は

$$\langle \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{r}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{r}\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{0}\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{0}\uparrow} \rangle \to \langle \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{r}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{r}\downarrow} \rangle \langle \hat{c}_{\boldsymbol{0}\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{0}\uparrow} \rangle = \frac{\left(\sum_{\boldsymbol{k}} \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \cos\theta_{\boldsymbol{k}} \right)^2}{V^2} \sim O\left(\frac{N^2}{V^2}\right) \tag{517}$$

であり BCS 超伝導相の本質的特徴であるクーパー対の凝縮という物理を正しく捉えている。状態 (516) は、総粒子数の固有状態ではないが（BEC がコヒーレント状態で正しく記述できたのと同様に）熱力学極限で変分状態の粒子数揺らぎが相対的に無視できる。BCS 変分状態 (516) は $\theta_{\boldsymbol{k}}$ という変数を含むが、これはエネルギー期待値を最小にする条件から定まる変分パラメータである：

$$\min_{\theta_{\boldsymbol{k}}} \langle \Psi^{\mathrm{BCS}}_{\mathrm{var}} | \hat{H} | \Psi^{\mathrm{BCS}}_{\mathrm{var}} \rangle \tag{518}$$

さてここで最後の「エネルギー期待値を最小にする」プロセスは、通常の平均場解析のプロセスと等価であることに注意されたい。これは BCS 変分状態 (516) が Gaussian 状態と呼ばれるクラスの多体状態に属しており、期待値を計算する際に Wick の定理が適用できるためである。こ

のことは以下で Gaussian 状態の考え方を導入するとより明らかになるが、ここでは従来の平均場解析の議論に沿ってこの等価性を明示的に確認しよう。

まず次のクーパー対を表す演算子を「平均場」の周りで展開する：

$$\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow} \equiv \Delta_{\boldsymbol{k}} + \delta\hat{\Delta}_{\boldsymbol{k}},\ \ \Delta_{\boldsymbol{k}} \equiv \langle \hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle \in \mathbb{R}. \tag{519}$$

ここで一般性を失わず $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ は実数とした。展開 (519) をハミルトニアン (513) に代入し $\delta\hat{\Delta}_{\boldsymbol{k}}$ について高次項を無視すると、次の平均場ハミルトニアンを得る：

$$\hat{H}_{\mathrm{MF}} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \epsilon_{\boldsymbol{k}}\hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} - g\Omega\bar{\Delta}^2 - g\bar{\Delta}\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right), \tag{520}$$

$$\bar{\Delta} \equiv \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}. \tag{521}$$

これはもはや二次形式ハミルトニアンであるため、次のユニタリ変換で対角化できる（単一モードの式 (506) を参照）：

$$\begin{pmatrix} \hat{d}_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ \hat{d}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix} = \hat{U}^{\dagger}\begin{pmatrix} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ \hat{c}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix}\hat{U} = \begin{pmatrix} \cos\theta_{\boldsymbol{k}} & -\sin\theta_{\boldsymbol{k}} \\ \sin\theta_{\boldsymbol{k}} & \cos\theta_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ \hat{c}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix} \tag{522}$$

$$\hat{U} = e^{-\sum_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)} \tag{523}$$

対角化の条件から $\theta_{\boldsymbol{k}}$ は次のように表される：

$$\cos(\theta_{\boldsymbol{k}}) = \sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{k}} + \epsilon_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}}},\ \ \sin(\theta_{\boldsymbol{k}}) = \sqrt{\frac{E_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}}}{2E_{\boldsymbol{k}}}},\ \ E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\bar{\Delta}^2 + (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)^2}. \tag{524}$$

対角化された平均場ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\mathrm{MF}} = \mathrm{const.} + \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} E_{\boldsymbol{k}}\hat{d}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{\sigma}}\hat{d}_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{525}$$

で与えられる。求めたい変分基底状態 $|\Psi^{\mathrm{BCS}}_{\mathrm{MF}}\rangle$ は、$\hat{d}$ 演算子で生成される準粒子励起に関する真空状態 $|\mathrm{vac}\rangle_d$ である：

$$|\Psi^{\mathrm{BCS}}_{\mathrm{MF}}\rangle = |\mathrm{vac}\rangle_d. \tag{526}$$

これをもとの $\hat{c}$ 演算子に関する真空 $|\mathrm{vac}\rangle$ で表すと

$$|\Psi^{\mathrm{BCS}}_{\mathrm{MF}}\rangle = |\mathrm{vac}\rangle_d = \hat{U}^{\dagger}|\mathrm{vac}\rangle \tag{527}$$

$$= e^{\sum_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)}|\mathrm{vac}\rangle \tag{528}$$

$$= \prod_{\boldsymbol{k}}\left(\cos\theta_{\boldsymbol{k}} + \sin\theta_{\boldsymbol{k}}\hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)|\mathrm{vac}\rangle \tag{529}$$

となる。実際この状態は

$$\hat{d}_{\boldsymbol{k}\sigma}|\mathrm{vac}\rangle_d = \hat{U}^{\dagger}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}|\mathrm{vac}\rangle = \hat{U}^{\dagger}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}|\mathrm{vac}\rangle = 0 \tag{530}$$

を満たし確かに所望の変分基底状態になっていることがわかる。平均場基底状態 (529) はまさに上の議論で考えた BCS 変分状態 (516) に一致する。

最後に、変分パラメータ $\theta_{\boldsymbol{k}}$ の値を具体的に定めるため、それらを式 (524) を通じて関係付けていた平均場パラメータ $\overline{\Delta}$ 自身も変分パラメータで決まる量であったことに注意する：

$$\bar{\Delta} \equiv \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \langle \hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \sin\theta_{\boldsymbol{k}}\cos\theta_{\boldsymbol{k}}. \tag{531}$$

関係式 (524) を用いてこの条件を書き直せば、次の条件（自己無撞着方程式）を満たせば良いことがわかる：

$$\bar{\Delta} = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{g\bar{\Delta}}{2\sqrt{\bar{\Delta}^2 + \epsilon_{\boldsymbol{k}}^2}}. \tag{532}$$

超伝導相では $\bar{\Delta} \neq 0$ なので、結局

$$1 = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{g}{2\sqrt{\bar{\Delta}^2 + \epsilon_{\boldsymbol{k}}^2}} \tag{533}$$

から $\bar{\Delta}$ の値が定まる。これを、式 (524) に代入すれば変分パラメータ $\theta_{\boldsymbol{k}}$ の値も定まる。このようにして平均場基底状態 (529) を決定するプロセスは、BCS 変分状態 (516) についてエネルギー最小化の条件 (518) から変分パラメータ $\theta_{\boldsymbol{k}}$ を最適化するプロセスと等価である。次節ではボソンの場合に行ったのと同様に、フェルミ粒子系の Gaussian 状態の概念を導入し、このような変分法をより一般的に行うための理論を展開する。

6.3.2 一般論

前節で導入した BCS 変分状態の一般化により、フェルミ Gaussian 状態という概念に行き着く。ここではその一般論を展開する。

いま N_f モードのフェルミ粒子系：

$$\left\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\right\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = 0 \quad i,j \in \{1,2,\ldots,N_f\} \tag{534}$$

を考える。「実性」を満たす Majorana 表示を次で導入する：

$$\hat{\psi}_{1,i} = \hat{c}_i + \hat{c}_i^\dagger, \quad \hat{\psi}_{2,i} = i\left(\hat{c}_i^\dagger - \hat{c}_i\right), \tag{535}$$

$$\left\{\hat{\psi}_\xi, \hat{\psi}_\eta\right\} = 2\delta_{\xi\eta}, \quad \hat{\psi}_\xi = \hat{\psi}_\xi^\dagger, \quad \xi,\eta \in \{1,2,\ldots,2N_f\}. \tag{536}$$

ここで Majorana 表示での演算子のベクトルを

$$\hat{\boldsymbol{\psi}} = \left(\hat{\psi}_{1,1}, \hat{\psi}_{1,2}, \ldots, \hat{\psi}_{1,N_f}, \hat{\psi}_{2,1}, \hat{\psi}_{2,2}, \ldots, \hat{\psi}_{2,N_f}\right)^{\mathrm{T}} \tag{537}$$

で定義し、その要素を添字 $\xi \in \{1,2,\ldots,2N_f\}$ を持つ $\hat{\psi}_\xi$ として表した。これはボソン系における $(\hat{x},\hat{p})$ 表示の式 (456) に相当する。

実はフェルミ粒子系の場合も、ボソン系で扱ったコヒーレント状態や Weyl 演算子/特性関数の対応物を構成できて、これに立脚して Gaussian 状態を導入することも可能である。このような導入は次節で行うことにして、ここではまず（等価だが）より明示的で簡便な定義から Gaussian 状態を導入しよう。

任意の $2N_f \times 2N_f$ 実反対称行列 X に対し、次式で与えられる密度行列をフェルミ Gaussian 状態として定義する：

$$\hat{\rho}_{\mathrm{G}} = \mathcal{N} \exp\left[-\frac{i}{4} \hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}} X \hat{\boldsymbol{\psi}} \right]. \tag{538}$$

ここで $\mathcal{N}$ は規格化定数である。この状態は次の二点相関関数で完全に特徴付けられる：

$$(\Gamma_\psi)_{\xi\eta} = \frac{i}{2} \left\langle \left[\hat{\psi}_\xi, \hat{\psi}_\eta \right] \right\rangle_{\mathrm{G}}, \quad \langle \cdots \rangle_{\mathrm{G}} \equiv \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{G}} \cdots] \tag{539}$$

共分散行列 Γ_ψ も $2N_f \times 2N_f$ 実反対称行列である。平均場ベクトルが BEC の記述に必要だったボソンの場合と異なり、フェルミ Gaussian 状態は共分散行列のみで表現される。X と Γ_ψ を関係づけるため、まず前者が適当な直交行列 O を用いて実反対称行列の標準形に変換できることに注意する：

$$OXO^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 0 & D \\ -D & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \mathrm{diag}\left(\beta_1, \ldots, \beta_{N_f}\right), \quad \beta_i \in \mathbb{R}. \tag{540}$$

この変換に対応して変換後の状態ベクトル

$$\hat{\tilde{\boldsymbol{\psi}}} = O \hat{\boldsymbol{\psi}} \tag{541}$$

を定義し、対応する生成消滅演算子を $\hat{\tilde{c}}_i^\dagger, \hat{\tilde{c}}_i$ と表す。O は直交行列なので、反交換関係 (536) が保たれていることに注意されたい。変換後の基底では Gaussian 状態は

$$\hat{\rho}_{\mathrm{G}} = \tilde{\mathcal{N}} \exp\left[-\sum_{j=1}^{N_f} \beta_j \hat{\tilde{c}}_j^\dagger \hat{\tilde{c}}_j \right] \tag{542}$$

とかける。この直積状態に対しては二点相関関数が即座に計算できて、対応する共分散行列は

$$O \Gamma_\psi O^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 0 & -\tanh(D/2) \\ \tanh(D/2) & 0 \end{pmatrix} \tag{543}$$

と求まる。これは純虚数の固有値 $\pm i \tanh(\beta_j/2)$ を持つため、共分散行列が次の条件を満たすことが分かる：

$$-\mathrm{I}_{2N_f} \leq i\Gamma_\psi \leq \mathrm{I}_{2N_f} \iff -\Gamma_\psi^2 \leq \mathrm{I}_{2N_f}. \tag{544}$$

逆に、この条件を満たす任意の $2N_f \times 2N_f$ 実反対称行列 Γ_ψ に対し、それを共分散行列として持つ Gaussian 状態が存在する。

$\hat{\rho}_{\mathrm{G}}$ が純粋状態である条件は $\beta_i \to \pm\infty \ \forall i$ であり、これは $\tanh^2(\beta_i/2) = 1$ を意味するので、共分散行列に対する次の条件として表せる：

$$\hat{\rho}_{\mathrm{G}}^2 = \hat{\rho}_{\mathrm{G}} \iff \Gamma_\psi^2 = -\mathrm{I}_{2N_f}. \tag{545}$$

問題：Gaussian 状態の purity の公式を示せ：

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{G}}^2] = \sqrt{\det\left[\left(\mathrm{I}_{2N_f} - \Gamma_\psi^2\right)/2\right]}. \tag{546}$$

より一般に任意の多点相関関数は、次の公式で Γ_ψ の成分の積に分解される（Wick 定理）：

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_{\mathrm{G}}\hat{\psi}_1^{p_1}\hat{\psi}_2^{p_2}\cdots\hat{\psi}_{2N_f}^{p_{2N_f}}\right] = \mathrm{Pf}\left[(-i)\Gamma_\psi|_P\right],\ \ p_\xi \in \{0,1\}. \tag{547}$$

ここで $\Gamma_\psi|_P$ は $p_\xi = 1$ となる成分の行と列のみ含んだ Γ_ψ の部分行列であり、Pf は任意の $2n\times 2n$ 反対称行列 M に対して定義されるパフィアン（Pfaffian）と呼ばれる量である：

$$\mathrm{Pf}(M) = \frac{1}{2^n n!}\sum_{\sigma\in S_{2n}} \mathrm{sgn}(\sigma) M_{\sigma(1)\sigma(2)}\cdots M_{\sigma(2n-1)\sigma(2n)}. \tag{548}$$

ここで S_{2n} は置換群である。パフィアンの重要な性質として

$$\mathrm{Pf}(M)^2 = \det(M) \tag{549}$$

が成立する。相関関数の公式 (547) から、例えば $\xi_1 < \xi_2 < \xi_3 < \xi_4$ について

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_{\mathrm{G}}\hat{\psi}_{\xi_1}\hat{\psi}_{\xi_2}\hat{\psi}_{\xi_3}\hat{\psi}_{\xi_4}\right] = -\Big((\Gamma_\psi)_{\xi_1\xi_2}(\Gamma_\psi)_{\xi_3\xi_4} - (\Gamma_\psi)_{\xi_1\xi_3}(\Gamma_\psi)_{\xi_2\xi_4} + (\Gamma_\psi)_{\xi_1\xi_4}(\Gamma_\psi)_{\xi_2\xi_3}\Big) \tag{550}$$

が求まる。Wick 定理の公式 (547) は次節で導入するフェルミコヒーレント状態を用いて、一般の Gaussian 状態に対して後で導出する。逆に、Wick 定理が成立する任意の多体状態は何らかの Gaussian 状態で表せる。

Majorana 表示ではなく元の生成消滅演算子を用いた表現（南部表示）もしばしば有用である。このために消滅演算子のベクトルを

$$\begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{c}} \\ \hat{\boldsymbol{c}}^* \end{pmatrix},\ \ \hat{\boldsymbol{c}} = \left(\hat{c}_1, \hat{c}_2, \ldots, \hat{c}_{N_f}\right)^{\mathrm{T}} \tag{551}$$

と表すと、二つの表示は次の変換行列により移り変われる：

$$\hat{\boldsymbol{\psi}} = T\begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{c}} \\ \hat{\boldsymbol{c}}^* \end{pmatrix},\ \ T \equiv \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix}\otimes \mathrm{I}_{N_f} = \begin{pmatrix} \mathrm{I}_{N_f} & \mathrm{I}_{N_f} \\ -i\mathrm{I}_{N_f} & i\mathrm{I}_{N_f} \end{pmatrix}. \tag{552}$$

相関関数についてはボソンの場合と同様に、次の簡単な関係式が成立する：

$$\Gamma_f \equiv \left\langle \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{c}} \\ \hat{\boldsymbol{c}}^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{c}}^\dagger & \hat{\boldsymbol{c}}^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}\right\rangle_{\mathrm{G}} = \frac{1}{2}\mathrm{I}_{2N_f} - \frac{i}{4}T^\dagger\Gamma_\psi T. \tag{553}$$

[Gaussian 操作]

次に Gaussian 状態を別の Gaussian 状態に移すユニタリな操作（Gaussian 操作）を特徴付けたい。まずそのようなユニタリ変換のもとで式 (542) の組 $\{\beta_j\}$ は不変である。従って、ユニタリ操作で移り変われる二つの Gaussian 状態に対して、それぞれの共分散行列は何らかの直交変換で必ず関連づく：

$$\tilde{\Gamma}_\psi = O\Gamma_\psi O^{\mathrm{T}}. \tag{554}$$

従って、この直交変換 (554) を引き起こす次のユニタリ変換が求めたい Gaussian 操作ということになる：

$$\hat{\tilde{\boldsymbol{\psi}}} = \hat{U}_O^\dagger \hat{\boldsymbol{\psi}} \hat{U}_O = O\hat{\boldsymbol{\psi}}. \tag{555}$$

ここで、一般に直交群が鏡映と回転から生成されたことを思い出そう。このうち鏡映 ($\hat{\psi}_\xi \to \hat{\psi}_\xi$, $\hat{\psi}_\eta \to -\hat{\psi}_\eta \ \forall \eta \neq \xi$) を生成するユニタリ演算子としては、

$$\hat{U}_O = \hat{\psi}_\xi \tag{556}$$

と選べば良い。ユニタリ演算子 $\left\{\hat{\psi}_\xi\right\}$ の任意の積で定義される変換の集合全体が、直交変換の鏡映を与える。回転については Lie 代数の性質から直交行列 O を実反対称行列 X の指数の形で表すことができる：

$$O = e^X, \ \ X = -X^{\mathrm{T}}. \tag{557}$$

変換 (557) を生成するユニタリ演算子として

$$\hat{U}_O = \exp\left[-i\hat{H}_O\right], \ \hat{H}_O = \frac{i}{4}\hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}} X \hat{\boldsymbol{\psi}} \tag{558}$$

が条件 (555) を満たすことが分かる。変換 (557) は単位行列と $X \to 0$ の極限で連続に繋がる直交行列の集合を生成するが、これは特殊直交群に他ならない。例えばユニタリ時間発展 $\hat{U}(t)$ は $t \to 0$ で恒等演算子に連続に繋がるので、ユニタリ時間発展に対応した変換 (555) は特殊直交群をなす。

以上の Gaussian 操作を南部表示で表すと

$$\begin{pmatrix} \hat{\tilde{\boldsymbol{c}}} \\ \hat{\tilde{\boldsymbol{c}}}^* \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{c}} \\ \hat{\boldsymbol{c}}^* \end{pmatrix} \tag{559}$$

となる。ここで $U \equiv T^{-1}OT$ はユニタリ行列である。

式 (558) は演算子 $\hat{c}, \hat{c}^\dagger$ について二次までの項を含むハミルトニアンで生成されるユニタリ時間発展ともみなせる。逆に、任意の二次形式ハミルトニアンで生成される時間発展は、適切な X で式 (558) のように表せ、これが共分散行列を式 (554) のように直交変換させることがわかる。従って、初期状態が Gaussian 状態で、時間発展が二次形式ハミルトニアンで生成されるならば、状態は常に Gaussian 状態に留まることが分かる。

最後に、スピン自由度を明示的に表して Gaussian 操作の標準形を書き下そう。スピン依存の Majorana 演算子を次のように並べたベクトルを考える：

$$\hat{\boldsymbol{\psi}} = \left(\hat{\psi}_{1,1\uparrow}, \ldots, \hat{\psi}_{1,N_f\uparrow}, \hat{\psi}_{1,1\downarrow}, \ldots, \hat{\psi}_{1,N_f\downarrow}, \hat{\psi}_{2,1\uparrow}, \ldots, \hat{\psi}_{2,N_f\uparrow}, \hat{\psi}_{2,1\downarrow}, \ldots, \hat{\psi}_{2,N_f\downarrow}\right)^{\mathrm{T}}. \tag{560}$$

反対称行列 X の標準形を用いることで、適切な基底のもとでは Gaussian 操作が常に

$$\hat{U}_O = e^{\frac{1}{4}\hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}} X \hat{\boldsymbol{\psi}}} = e^{\sum_{i=1}^{N_f} \theta_i \left(\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger + \hat{c}_{i\uparrow}\hat{c}_{i\downarrow}\right)} e^{\sum_{i=1}^{N_f} \varphi_i \left(\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} + \hat{c}_{i\uparrow}\hat{c}_{i\downarrow}^\dagger\right)}, \ \ \theta_i, \varphi_i \in \mathbb{R} \tag{561}$$

と表現できる。右辺の第一項は BCS 状態でも登場した生成・消滅演算子を混ぜる変換であり、第二項はスピンの回転を生成する変換である。

[Gaussian 純粋状態]

ここでは Gaussian 純粋状態に関する諸性質をまとめる。ボソンの場合と同様に、最も一般的なフェルミ Gaussian 純粋状態は Gaussian ユニタリ操作を真空場に作用させることで次のように得られる：

$$|\psi\rangle = \hat{U}\left[\left\{\hat{\psi}_\xi\right\}, \left\{e^{\frac{X_{\xi\eta}}{2}\hat{\psi}_\xi\hat{\psi}_\eta}\right\}\right]|0\rangle. \tag{562}$$

ここでユニタリ演算子 $\hat{U}$ は、鏡映 (556) と回転 (558) を生成するユニタリ演算子の任意の積で与えられる。この状態は一般に粒子数固有状態ではないが、常に次のパリティ演算子の固有状態である：

$$\hat{P} = (-1)^{\sum_{i=1}^{N_f}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_i} = (-i)^{N_f}\hat{\psi}_1\hat{\psi}_2\cdots\hat{\psi}_{2N_f} \equiv (-i)^{N_f}\prod_{\xi=1}^{2N_f}\hat{\psi}_\xi, \tag{563}$$

$$\hat{P}|\psi\rangle = P|\psi\rangle, \quad P \in \{1,-1\}. \tag{564}$$

このことはパリティ演算子 $\hat{P}$ が鏡映変換と反可換・回転変換と可換であること、および真空場がパリティ偶であることから明らかである：

$$\left\{\hat{P}, \hat{\psi}_\xi\right\} = 0, \quad \left[\hat{P}, e^{\frac{X_{\xi\eta}}{2}\hat{\psi}_\xi\hat{\psi}_\eta}\right] = 0, \quad \hat{P}|0\rangle = |0\rangle. \tag{565}$$

Gaussian 状態のパリティ固有値は共分散行列を用いて

$$P = (-1)^{N_f}\mathrm{Pf}(\Gamma_\psi) \tag{566}$$

から計算できる。式 (566) は、後節でフェルミコヒーレント状態を用いて導出する。

フェルミ Gaussian 純粋状態に関する便利な公式として内積の公式を紹介する。すなわち二つの Gaussian 純粋状態 $|\psi_{1,2}\rangle$ について

$$|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 = \begin{cases} (-2)^{-N_f}\, P\mathrm{Pf}\left(\Gamma_{\psi_1}+\Gamma_{\psi_2}\right) & P = P_1 = P_2 \\ 0 & P_1 \neq P_2 \end{cases} \tag{567}$$

が成立する。ここで $P_{1,2}$ はそれぞれ Gaussian 状態 $|\psi_{1,2}\rangle$ のパリティ固有値である。導出は後節で与える。

Gaussian 純粋状態のうち、粒子数固有状態である特殊な場合、Gaussian 状態はいわゆる Slater 行列として良く知られた状態を与える:

$$|\psi_{\mathrm{Slater}}\rangle = \left(\hat{c}_1^\dagger\right)^{p_1}\left(\hat{c}_2^\dagger\right)^{p_2}\cdots\left(\hat{c}_{N_f}^\dagger\right)^{p_{N_f}}|0\rangle, \quad p_i \in \{0,1\}. \tag{568}$$

この粒子数固有状態空間上に制限された Gaussian 操作は、直交行列 O 全体のうち生成演算子と消滅演算子を混ぜない部分集合に対応した操作であり、一般に

$$\hat{U}_{O_{\mathrm{Slater}}}|\psi_{\mathrm{Slater}}\rangle = \left(\hat{\tilde{c}}_1^\dagger\right)^{p_1}\left(\hat{\tilde{c}}_2^\dagger\right)^{p_2}\cdots\left(\hat{\tilde{c}}_{N_f}^\dagger\right)^{p_{N_f}}|0\rangle, \quad \hat{\tilde{c}}_i = \sum_{i=1}^{N_f}U_{ij}\hat{c}_j \tag{569}$$

と書ける。ここで、$\hat{U}_{O_{\text{Slater}}}$ は指数の肩に $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$ というタイプの項のみを含む Gaussian 操作で U は $N_f \times N_f$ ユニタリ行列である。この多体状態を U の行列要素を変分パラメータとして用いることが、Slater 行列の一粒子波動関数について最適化を行うことに対応し、いわゆる Hartree-Fock 法を与える。

しかし、一般の Gaussian 状態はこれより広いクラスの多体状態を含んでいる。例えば BCS 変分状態も含むので、超伝導など引力相互作用があるフェルミ粒子系の記述も可能である。これは Slater 行列では記述できない状態である。実際、一般の Gaussian 状態が Slater 行列に比べて良い記述を与えることが、相互作用を有した (特定のクラスの) 模型に対して厳密に示されている [Bravyi et al., J. Math. Phys. 60, 032203 (2019)]。

さて、スピン自由度を取り入れてパリティ偶の次の Gaussian 状態を考えよう：

$$|\psi\rangle = e^{\frac{1}{4}\hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}} X \hat{\boldsymbol{\psi}}}|0\rangle. \tag{570}$$

相関関数と指数の肩の反対称行列 X の関係は定義より、次で与えられる：

$$(\Gamma_\psi)_{\xi\eta} = \frac{i}{2}\langle\psi|\left[\hat{\psi}_\xi, \hat{\psi}_\eta\right]|\psi\rangle = -\left(e^X \sigma e^{-X}\right)_{\xi\eta}. \tag{571}$$

これは式 (554) の右辺に真空に対する相関関数 $-\sigma$ を代入したものとも考えられる。上で導入した Gaussian 演算子の標準形 (561) を用いれば（真空場は回転で自明に変換するので）

$$|\psi\rangle = e^{\sum_{i=1}^{N_f}\theta_i\left(\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger + \hat{c}_{i\uparrow}\hat{c}_{i\downarrow}\right)}|0\rangle = \prod_{i=1}^{N_f}\left(\cos\theta_i + \sin\theta_i \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger\right)|0\rangle \tag{572}$$

と表せる。これはまさに BCS 変分状態 (516) そのものである[*20]。このことは、式 (570) で書ける任意の Gaussian 状態は常に適切な直交変換で BCS 変分状態の形に変換できることを示している。

最後の重要な性質として、任意の Gaussian 純粋状態は常に何らかの二次形式ハミルトニアンの基底状態であることに注意されたい。実際、標準形 (572) を用いれば、そのような「親」ハミルトニアンとして

$$\hat{H}_0 = \sum_i \left(\cos(2\theta_i)\left[\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow} + \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}\right] - \sin(2\theta_i)\left[\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger + \hat{c}_{i\downarrow}\hat{c}_{i\uparrow}\right]\right) \tag{573}$$

が構成できる。状態 (572) がハミルトニアン (573) の基底状態を与えることは各自確認されたい。

以上のことをまとめる意味でも、冒頭のスピン-1/2 で単一モード（$N_f = 1$）の場合を考えよう。状態ベクトルを

$$\hat{\boldsymbol{\psi}} = \left(\hat{\psi}_{1\uparrow}, \hat{\psi}_{1\downarrow}, \hat{\psi}_{2\uparrow}, \hat{\psi}_{2\downarrow}\right)^{\mathrm{T}} \tag{574}$$

で表し

[*20] 厳密には BCS 状態は異なるモード $(\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k})$ のペアリングで記述されるが、式 (561) の X として別の標準形を選べば、Gaussian 状態 (572) も任意の 2 モードがペアリングした形に表せる。

$$X = \begin{pmatrix} & \theta & & \\ -\theta & & & \\ & & & -\theta \\ & & \theta & \end{pmatrix} \tag{575}$$

を用いると、Gaussian 純粋状態の標準形として

$$|\psi\rangle = \hat{U}_O|0\rangle = e^{\frac{1}{4}\hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}} X \hat{\boldsymbol{\psi}}}|0\rangle = e^{\frac{\theta}{2}\left(\hat{\psi}_{1\uparrow}\hat{\psi}_{1\downarrow} - \hat{\psi}_{2\uparrow}\hat{\psi}_{2\downarrow}\right)}|0\rangle = e^{\theta\left(\hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger + \hat{c}_\uparrow \hat{c}_\downarrow\right)}|0\rangle \tag{576}$$

が得られる。これは冒頭に得たものと同一である。

次章では、変分原理を一般の Gaussian 状態空間上に適用することで、基底状態や多体ダイナミクスに関する最適な変分解を与えるための理論を展開する。Gaussian 状態は一般には粒子数固有状態ではないが、ボソンのときと同様に時間発展における粒子数保存は矛盾なく厳密に取り入れられる。また、熱力学極限では粒子数揺らぎが相対的に無視できる。結果的に、Gaussian 状態を用いた変分法は（本来は粒子数固有状態である）物理的な状態を、高効率かつ柔軟に記述するための強力な手法を与える。

変分原理の導入に移る前に、実際の計算で有用となるフェルミコヒーレント状態・特性関数などの考え方と、その Gaussian 状態への応用を説明する。これにより上でも紹介した種々の公式が容易に導出できる。

[フェルミコヒーレント状態・特性関数とその Gaussian 状態への応用]

消滅演算子の固有状態であるコヒーレント状態は、ボソンの場合にはよく知られた概念だが、実はフェルミオンでもその対応物が存在する。重要な違いは、フェルミ粒子では消滅演算子の固有値である c-数が、次の反交換関係を満たす Grassmann 数で与えられる点である：

$$\{\eta_i, \eta_j\} = \{\eta_i^*, \eta_j\} = \left\{\eta_i^*, \eta_j^*\right\} = 0 \quad \forall i, j \in \{1, 2, \ldots, N_f\} \tag{577}$$

ここで η_i^* は η_i の複素共役である。これらはフェルミ演算子とも反可換とする：

$$\{\eta_i, \hat{c}_i\} = \left\{\eta_i, \hat{c}_i^\dagger\right\} = 0. \tag{578}$$

またエルミート共役の際には演算子と同様に順序を入れ替えるものとする：

$$(\eta_i \eta_j)^\dagger = \eta_j^* \eta_i^*. \tag{579}$$

Grassmann 数 $\boldsymbol{\eta}$ を用いれば、フェルミ演算子の並進演算子として

$$\hat{D}_{\boldsymbol{\eta}} = e^{\hat{\boldsymbol{c}}^\dagger \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}^\dagger \hat{\boldsymbol{c}}} = \prod_{i=1}^{N_f} \left[1 + \hat{c}_i^\dagger \eta_i - \eta_i^* \hat{c}_i + \left(\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - \frac{1}{2}\right) \eta_i^* \eta_i\right] \tag{580}$$

が

$$\hat{D}_{\boldsymbol{\eta}}^\dagger \hat{c}_i \hat{D}_{\boldsymbol{\eta}} = \hat{c}_i + \eta_i \tag{581}$$

を満たすことはすぐに示せる。これによりフェルミコヒーレント状態が次で生成される：

$$\hat{c}_i \hat{D}_{\boldsymbol{\eta}} |0\rangle = \eta_i \hat{D}_{\boldsymbol{\eta}} |0\rangle. \tag{582}$$

ボソン系とは異なり、フェルミ粒子系の場合には実は生成演算子の固有状態も作れる：

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{D}_{\boldsymbol{\eta}} |1\rangle = \eta_i^* \hat{D}_{\boldsymbol{\eta}} |1\rangle. \tag{583}$$

ここで $|1\rangle \equiv \prod_i \hat{c}_i^\dagger |0\rangle$ は全モードが粒子に占有された状態である。

次に Grassmann 数の Majorana 表示を次で導入しよう：

$$\xi_{1,i} = \eta_i + \eta_i^*, \;\; \xi_{2,i} = i(\eta_i^* - \eta_i), \tag{584}$$

$$\boldsymbol{\xi} = (\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2)^{\mathrm{T}}. \tag{585}$$

並進演算子 (580) は Majorana 表示で

$$\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}} = e^{\frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\xi}}, \;\; \hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}^\dagger \hat{\boldsymbol{\psi}} \hat{D}_{\boldsymbol{\xi}} = \hat{\boldsymbol{\psi}} + \boldsymbol{\xi} \tag{586}$$

となるが、これはボソンの Weyl 演算子 (460) に相当するものである。

さて Majorana 表示を用いれば、任意の Grassmann 数の関数は

$$f(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{n=0}^{2N_f} \sum_{i_1 < i_2 < \cdots < i_n} f_{i_1 i_2 \cdots i_n} \xi_{i_1} \xi_{i_2} \cdots \xi_{i_n} \tag{587}$$

と展開できる。Grassmann 数の関数の積分を定義するために、各成分の積分について次のような定義を行う：

$$\int d\xi_i = 0, \;\; \int d\xi_{j_n} \cdots d\xi_{j_1} \xi_{i_1} \cdots \xi_{i_n} = \epsilon \begin{pmatrix} i_1, \cdots, i_n \\ j_1, \cdots, j_n \end{pmatrix}. \tag{588}$$

ここで $(i_1, \cdots, i_n)$ は互いに異なる整数の組で、右辺はこれが $(j_1, \cdots, j_n)$ と組として等しくない場合にはゼロ、等しい場合で偶（奇）置換で結びつく時に 1（-1）の値をとる関数である。

例として指数関数の積分は次で与えられる：

$$\int d\xi_i d\xi_j e^{-\xi_i \xi_j} = \int d\xi_i d\xi_j \, (1 - \xi_i \xi_j) = \int d\xi_i d\xi_j \xi_j \xi_i = 1. \tag{589}$$

有用な Grassmann 数の公式として、反対称行列 M について次が成立する：

$$\int \mathcal{D}\boldsymbol{\xi} \, \exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}} M \boldsymbol{\xi}\right) = \mathrm{Pf}\,(M), \;\; \int \mathcal{D}\boldsymbol{\xi} \equiv \int d\xi_{2N_f} \cdots d\xi_1, \tag{590}$$

$$\int \mathcal{D}\boldsymbol{\xi} \exp\left(\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\xi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}} M \boldsymbol{\xi}\right) = \mathrm{Pf}(M) \exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{T}} M^{-1} \boldsymbol{\zeta}\right). \tag{591}$$

上で導入した Majorana 表示のご利益の一つは、演算子の内積を計算する際に有用な、次の単純化である：

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\right] = (-2)^{N_f} \int \mathcal{D}\boldsymbol{\zeta}\mathcal{D}\boldsymbol{\xi} e^{\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\zeta}} A_{\boldsymbol{\xi}} B_{\boldsymbol{\zeta}}. \tag{592}$$

ここで演算子 $\hat{A}$ に対して Grassmann 数の関数 $A_{\boldsymbol{\xi}}$ を割り当てているが、この対応は演算子 $\hat{A}$ を Majorana 演算子 $\hat{\psi}$ で展開し、$\hat{\psi}$ を Grassmann 数 ξ で置換することで定義される：

$$\hat{A} = \sum_{\{p_i\}} A_{p_1\cdots p_{2N_f}} \hat{\psi}_1^{p_1} \cdots \hat{\psi}_{2N_f}^{p_{2N_f}} \to A_{\boldsymbol{\xi}} = \sum_{\{p_i\}} A_{p_1\cdots p_{2N_f}} \xi_1^{p_1} \cdots \xi_{2N_f}^{p_{2N_f}}, \tag{593}$$

$$p_i \in \{0, 1\}. \tag{594}$$

公式 (592) は逐次計算を行えば示せるので、各自確認されたい。

演算子から Grassmann 数への対応 (593) の例の一つとして、Gaussian 状態

$$\hat{\rho}_{\mathrm{G}} = \mathcal{N} \exp\left[-\frac{i}{4}\hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}} X \hat{\boldsymbol{\psi}}\right] \tag{595}$$

について考えると、その共分散行列 Γ_ψ を用いて

$$\rho_{\mathrm{G},\boldsymbol{\xi}} = \frac{1}{2^{N_f}} \exp\left(\frac{i}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\Gamma_\psi\boldsymbol{\xi}\right) \tag{596}$$

が対応する Grassmann 数の関数として割り当てられる。

問題：Gaussian 状態 (595) が式 (596) に対応することを確認せよ。ヒント：標準形 (540) を用いて $\hat{\psi}_{1,2}^2 = 1$ や $\xi^2 = 0$ に注意せよ。

フェルミ粒子系の場合も、ボソン系と同様に特性関数を導入することができる：

$$\chi_A(\boldsymbol{\xi}) \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}\right] = 2^{N_f} A_{\boldsymbol{\xi}/2} \tag{597}$$

ここで最後の等式によって（定数倍を別にして）上で導入した Grassmann 数の関数が、特性関数と等価であることに注意されたい。特に Gaussian 状態 (595) の特性関数は式 (596) を用いることで

$$\chi_{\rho_{\mathrm{G}}}(\boldsymbol{\xi}) = \exp\left[\frac{i}{8}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\Gamma_\psi\boldsymbol{\xi}\right] \tag{598}$$

と求まる。逆に（ボソン系で行ったのと同様に）特性関数がこのように表せる状態をフェルミ Gaussian 状態の定義として理論を展開しても等価である。フェルミ粒子系における特性関数の逆変換は次で与えられる：

$$\hat{A} = \int \mathcal{D}\boldsymbol{\zeta}\, \chi_A(\boldsymbol{\zeta}) \hat{E}_{\boldsymbol{\zeta}}, \tag{599}$$

$$\hat{E}_{\boldsymbol{\zeta}} = 4^{N_f} \int \mathcal{D}\boldsymbol{\lambda} e^{\frac{i}{8}\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\zeta} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\zeta}} \hat{D}_{\boldsymbol{\lambda}} |0\rangle\langle 0| \hat{D}_{\boldsymbol{\lambda}}. \tag{600}$$

この式が逆変換を与えていることは、次の公式から示せる：

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{E}_{\boldsymbol{\zeta}}\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}\right] = \delta(\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\xi}) \equiv (\zeta_1 - \xi_1)\cdots(\zeta_{2N_f} - \xi_{2N_f}). \tag{601}$$

ここで $\delta(\boldsymbol{\zeta}-\boldsymbol{\xi})$ は Grassmann 数に対するデルタ関数である。公式 (601) は次の関係式（各自確かめてみよう）を用いれば示すことができる：

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{O}\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}|0\rangle\langle 0|\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}'}\right] = \langle 0|\hat{D}^{\dagger}_{\boldsymbol{\xi}'}\hat{O}\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}|0\rangle, \tag{602}$$

$$\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}}\hat{D}_{\boldsymbol{\lambda}} = \hat{D}_{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\lambda}}e^{\frac{1}{4}\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\xi}}, \tag{603}$$

$$\langle 0|\hat{D}^{\dagger}_{\boldsymbol{\lambda}}\hat{D}_{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\lambda}}|0\rangle = e^{\frac{1}{4}\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\xi}-\frac{i}{8}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\sigma\boldsymbol{\xi}}. \tag{604}$$

特性関数を用いた計算の練習問題として、前節で紹介したいくつかの公式を導こう。多点相関関数の公式 (547) については、Gauss 積分の公式 (590) を用いれば

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}_{\mathrm{G}}\hat{\psi}_1^{p_1}\hat{\psi}_2^{p_2}\cdots\hat{\psi}_{2N_f}^{p_{2N_f}}\right] = (-1)^{N_f}\int\mathcal{D}\boldsymbol{\zeta}\mathcal{D}\boldsymbol{\xi}e^{\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\zeta}}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\Gamma_{\psi}\boldsymbol{\xi}}\zeta_1^{p_1}\cdots\zeta_{2N_f}^{p_{2N_f}} \tag{605}$$

$$= (-1)^{N_f}\int\mathcal{D}\boldsymbol{\xi}\mathcal{D}\boldsymbol{\zeta}e^{\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\zeta}}\zeta_1^{p_1}\cdots\zeta_{2N_f}^{p_{2N_f}}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\Gamma_{\psi}\boldsymbol{\xi}} \tag{606}$$

$$= (-1)^{\sum_i p_i/2}\int\mathcal{D}\boldsymbol{\xi}\xi_1^{1-p_1}\cdots\xi_{2N_f}^{1-p_{2N_f}}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\Gamma_{\psi}\boldsymbol{\xi}} \tag{607}$$

$$= (-1)^{\sum_i p_i/2}\int\mathcal{D}\boldsymbol{\xi}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\Gamma_{\psi}|_P\boldsymbol{\xi}} = \mathrm{Pf}\left[(-i\Gamma_{\psi})|_P\right] \tag{608}$$

と示せる。パリティ固有値の公式 (566) は、$\hat{P} = (-i)^{N_f}\prod_{\xi=1}^{2N_f}\hat{\psi}_{\xi}$ と表せることに気づけば上の式で $p_1 = \cdots = p_{2N_f} = 1$ の場合として即座に求まる。内積の公式 (567) も同様に

$$|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{G},1}\hat{\rho}_{\mathrm{G},2}] \tag{609}$$

$$= (-2)^{-N_f}\int\mathcal{D}\boldsymbol{\zeta}\mathcal{D}\boldsymbol{\xi}e^{\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\zeta}}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\Gamma_{\psi,1}\boldsymbol{\xi}}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{T}}\Gamma_{\psi,2}\boldsymbol{\zeta}} \tag{610}$$

$$= (-2)^{-N_f}\,\mathrm{Pf}\,(i\Gamma_{\psi,2})\int\mathcal{D}\boldsymbol{\xi}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}(\Gamma_{\psi,1}-\Gamma_{\psi,2}^{-1})\boldsymbol{\xi}} \tag{611}$$

$$= (-2)^{-N_f}\,\mathrm{Pf}\,(i\Gamma_{\psi,2})\,\mathrm{Pf}\,(i(\Gamma_{\psi,1}+\Gamma_{\psi,2})) \tag{612}$$

$$= (-2)^{-N_f}\,P\mathrm{Pf}\,(\Gamma_{\psi,1}+\Gamma_{\psi,2}) \tag{613}$$

と導出できる。ここで Gauss 積分の公式 (591) とパリティ固有値が $P = (-1)^{N_f}\mathrm{Pf}(\Gamma_{\psi,1})$ であること、純粋状態について $\Gamma_{\psi,2}^{-1} = -\Gamma_{\psi,2}$ が成り立つことを用いた。

6.4 時間依存変分原理

6.4.1 導入

量子多体系の困難は粒子数 N に対して指数的に増大する計算コストに起因している。（狭義の）量子計算機ができない限りは、現時点で行えることは (1) 高々多項式倍 $\sim O(N^p)$ のコストしか要さない変分波動関数に基づいて多体物理を理解する（例：MPS と 1 次元平衡系）、(2) 十分に小さ

な有限系で指数コストをかけて計算を行う（例：厳密対角化など）、(3) 興味のあるハミルトニアンを忠実に模した実験系を用意する（例：量子シミュレーションなど）といった試みに概ね分類されるだろう。本講義で興味があるのは (1) であり、そのためには物理的本質を捉えるに十分な柔軟性と、古典計算機でも取り扱える効率性を併せ持った変分波動関数のクラスを定義する必要がある。前節で導入した Gaussian 状態はそのような波動関数の一つの例である。

それでは変分状態のクラスを定義したとして、時間発展する物理系を実際に理解するためにはどのようにしたらよいだろうか。ヒルベルト空間全体は指数的な次元を持つため、（高々多項式次元の）変分空間よりも遥かに膨大な空間である。従って、変分空間において時間発展を記述しようと思うと、量子状態が変分空間の外に出ないように「うまく」近似しながら量子状態を変化させていく必要がある。そのような手法を与えてくれるのが、以下で紹介する「時間依存変分原理（TDVP）」である。

本節では、まず一般の変分状態に対して時間依存の変分原理を導入する。実数変数の場合には採用する変分原理に依存して、微妙な（しかし時に重要な）差異が生じうることに言及する。次に前節で導入した Gaussian 状態に関して変分原理を適用し、その時間発展方程式を導出する。Gaussian 状態は実数変数の変分状態であるが、その変分空間の接空間が良い性質を持っているため変分原理の選び方に依存した曖昧さは存在せず、エネルギー保存や系の対称性が矛盾なく変分時間発展方程式で満足されることを示す。

6.4.2 複素変数における変分原理

まず始めに、複素変数 $\boldsymbol{z}$ で記述される変分状態 $|\Psi_{\boldsymbol{z}}\rangle$ を考えよう。ただし以降、変分状態は常に規格化されているとする $\langle\Psi_{\boldsymbol{z}}|\Psi_{\boldsymbol{z}}\rangle = 1$。この時間発展方程式として、素朴にシュレーディンガー方程式を書き下すと

$$\frac{d}{dt}|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle \stackrel{?}{=} -i\hat{H}|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle \tag{614}$$

となる。ここで左辺は変分状態の微分で表せる状態なので、一般に許される任意の多体状態に比べると非常に特別な状態ということになる。一方で右辺は、色々な相互作用を含み得るハミルトニアン $\hat{H}$ が変分状態に作用して得られる状態であり、左辺と等号では一般に結び付けられない。このことをより数学的に言えば、「左辺は変分波動関数で定義される多様体の接空間に属するベクトルなのに対し、右辺は接空間には一般に属さないベクトルである」ともいえる。

従って、各時刻でシュレーディンガー方程式を変分状態上で最もよく近似するためには、以下の量を最小化する必要がある：

$$\min_{\boldsymbol{z}(t)} \left\| \left(\frac{d}{dt} + i\hat{H} \right) |\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle \right\|. \tag{615}$$

このための条件はより幾何的には

$$\frac{d}{dt}|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle = \hat{\mathrm{P}}_{\partial} \left(-i\hat{H} \right) |\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle \tag{616}$$

と表せる。ここで $\hat{\mathrm{P}}_{\partial}$ は変分多様体の座標 $\boldsymbol{z}(t)$ における接空間 $\mathcal{T}_{\boldsymbol{z}(t)}$（つまり基底 $\left\{ \frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle}{\partial z_i} \right\}$ と複素係数で張られる線形空間）への射影である。このことを明示的に書くと

$$\hat{\mathrm{P}}_\partial|\Psi\rangle \equiv \arg\min_{|v\rangle\in\mathcal{T}_{\boldsymbol{z}}} \||\Psi\rangle - |v\rangle\| \tag{617}$$

$$\mathcal{T}_{\boldsymbol{z}} \equiv \left\{ |v\rangle \,\middle|\, |v\rangle = \sum_i c_i \frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{z}}\rangle}{\partial z_i},\ c_i \in \mathbb{C} \right\} \tag{618}$$

となる。式 (616) は McLachlan の変分原理として知られているものである。

一方で、もとの条件 (615) 自体は次を満たすことでも満足される：

$$\hat{\mathrm{P}}_\partial i\frac{d}{dt}|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle = \hat{\mathrm{P}}_\partial \hat{H}|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle. \tag{619}$$

これは作用に基づく変分原理として一般に知られているものである。実際、作用を次のように定義して

$$S = \int dt\, L,\ \ L = \langle\Psi_{\boldsymbol{z}^*(t)}| \left(i\frac{d}{dt} - \hat{H} \right) |\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle, \tag{620}$$

この変分を $\boldsymbol{z}^* \to \boldsymbol{z}^* + \delta\boldsymbol{z}^*$ に対して計算すると、それがゼロになる条件は

$$\delta_{\boldsymbol{z}^*} S = \sum_i \delta z_i^* \frac{\partial\langle\Psi_{\boldsymbol{z}^*(t)}|}{\partial z_i^*} \left(i\frac{d}{dt} - \hat{H} \right) |\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle = 0 \quad \forall\delta z_i^* \tag{621}$$

$$\iff \hat{\mathrm{P}}_\partial \left(i\frac{d}{dt} - \hat{H} \right) |\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle = 0 \tag{622}$$

と書き直せる。これは式 (619) に一致する。

実は複素変数の場合は上の McLachlan の変分原理 (616) と作用変分原理 (619) は等価である。これは複素変数の場合には、接空間 $\mathcal{T}_{\boldsymbol{z}}$ が i 倍する操作に対して不変、つまり $\hat{\mathrm{P}}_\partial$ と i をかける操作が可換 $[\hat{\mathrm{P}}_\partial, i] = 0$ なためである。

変分変数 $\boldsymbol{z}(t)$ が従う時間発展方程式は、式 (616) に左から $\frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle}{\partial z_i}$ をかければ求まる：

$$\sum_j g_{ij}\frac{dz_j}{dt} = -ih_i, \tag{623}$$

$$g_{ij} \equiv \frac{\partial\langle\Psi_{\boldsymbol{z}^*(t)}|}{\partial z_i^*}\frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle}{\partial z_j},\ \ h_i = \frac{\partial\langle\Psi_{\boldsymbol{z}^*(t)}|}{\partial z_i^*}\hat{H}|\Psi_{\boldsymbol{z}(t)}\rangle. \tag{624}$$

6.4.3 実数変数における変分原理

続いて、変分状態が実数 $\boldsymbol{x}$ で記述される場合の変分原理を考える。この場合は変分原理の選び方に注意が必要である。これは次の最小化問題

$$\min_{\boldsymbol{x}(t)} \left\| \left(\frac{d}{dt} + i\hat{H} \right) |\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle \right\| \tag{625}$$

に関する二つの変分原理 (McLachlan の変分原理と作用変分原理) が、一般に等価とは限らないためである。この原因は、変分多様体の接空間が i 倍に対して不変ではない、つまり $\hat{\mathrm{P}}_\partial$ と i 倍の操作が一般に非可換 $[\hat{\mathrm{P}}_\partial, i] \neq 0$ となるためである。実際、接空間 $\mathcal{T}_{\boldsymbol{x}}$ は次のように基底 $\left\{ \frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle}{\partial x_i} \right\}$ と実数係数で張られる線形空間であり

$$\hat{\mathrm{P}}_\partial|\Psi\rangle = \arg\min_{|v\rangle\in\mathcal{T}_{\boldsymbol{x}}} \||\Psi\rangle - |v\rangle\| \tag{626}$$

$$\mathcal{T}_{\boldsymbol{x}} \equiv \left\{ |v\rangle \,\middle|\, |v\rangle = \sum_i a_i \frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{x}}\rangle}{\partial x_i},\ a_i \in \mathbb{R} \right\} \tag{627}$$

確かに i 倍する操作により、ベクトルが接空間 $\mathcal{T}_{\boldsymbol{x}}$ から外に出てしまう恐れがあることがわかる。

この点に注意してまず McLachlan の変分原理を考える：

$$\frac{d}{dt}|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle = \hat{\mathrm{P}}_\partial \left(-i\hat{H}\right)|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle. \tag{628}$$

この場合は左から $\frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle}{\partial x_i}$ をかけて実部をとることで[*21]、

$$\sum_j g^{\mathrm{R}}_{ij}\frac{dx_j}{dt} = \mathrm{Re}\left[-iv_i\right], \tag{629}$$

$$g^{\mathrm{R}}_{ij} \equiv \mathrm{Re}\left[\frac{\partial\langle\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}|}{\partial x_i}\frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle}{\partial x_j}\right],\ \ v_i = \frac{\partial\langle\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}|}{\partial x_i}\hat{H}|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle \tag{630}$$

と時間発展方程式が求まる。

作用の変分原理の場合は

$$\hat{\mathrm{P}}_\partial i\frac{d}{dt}|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle = \hat{\mathrm{P}}_\partial\hat{H}|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle \tag{631}$$

となるが、同様に左から $\frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle}{\partial x_i}$ をかけて実部をとることで

$$\sum_j g^{\mathrm{I}}_{ij}\frac{dx_j}{dt} = -\mathrm{Re}[v_i], \tag{632}$$

$$g^{\mathrm{I}}_{ij} \equiv \mathrm{Im}\left[\frac{\partial\langle\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}|}{\partial x_i}\frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle}{\partial x_j}\right] \tag{633}$$

が時間発展方程式として得られる。二つの変分時間発展方程式 (629) と (632) は一般には等価ではない。

それぞれの変分原理には一長一短がある。まず McLachlan の変分原理 (628) では、系の対称性とそれに伴う保存則が変分時間発展方程式でも正しく保たれる。これを見るために、演算子 $\hat{O}$ が $[\hat{O},\hat{H}]=0$ を満足し、かつ $\hat{O}|\psi\rangle$ が接区間に属すると仮定する。この時、式 (628) よりその期待値の時間発展は

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{O}\rangle_{\boldsymbol{x}(t)} = \langle\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}|(i\hat{H})\hat{\mathrm{P}}_\partial\hat{O} - \hat{O}\hat{\mathrm{P}}_\partial(i\hat{H})|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle \tag{634}$$

$$= \langle\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}|(i\hat{H})\hat{O}\hat{\mathrm{P}}_\partial - \hat{\mathrm{P}}_\partial\hat{O}(i\hat{H})|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle \tag{635}$$

$$= i\langle\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}|[\hat{H},\hat{O}]|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle = 0 \tag{636}$$

[*21] 射影 $\hat{\mathrm{P}}_\partial$ は実数系数の線形空間への射影なので、実部をとる必要がある。

となり確かに保存している。ここで $[\hat{O}, \hat{\mathrm{P}}_\partial] = 0$ と $\hat{\mathrm{P}}_\partial \hat{O}|\psi\rangle = \hat{O}|\psi\rangle$ を用いた。ただし、ハミルトニアン自身は一般に接空間を不変に保たない（$[\hat{H}, \hat{\mathrm{P}}_\partial] \neq 0$）ので、$\hat{H}$ は上の演算子 $\hat{O}$ には一般になり得ないことに注意されたい。つまり、McLachlan の変分原理ではエネルギーが必ずしも保存されない。

一方で、作用の変分原理ではエネルギーが常に保存されることが示せる。ただし、この場合はそれ以外の系の対称性と保存則が必ずしも守られない。これを確かめることは演習問題とする。

問題：実数変数の変分状態について、作用の変分原理 (631) を用いた場合にはエネルギーが保存されるが、それ以外の保存則は必ずしも守られないことを示せ。

6.4.4 虚時間発展

前節では実時間発展を考えたが、ここでは次で定義される虚時間発展を考えよう：

$$\frac{d}{d\tau}|\Psi_\tau\rangle = -\left(\hat{H} - \langle\hat{H}\rangle_\tau\right)|\Psi_\tau\rangle \tag{637}$$

$$\iff |\Psi_\tau\rangle = \frac{e^{-\hat{H}\tau}|\Psi_0\rangle}{\left\|e^{-\hat{H}\tau}|\Psi_0\rangle\right\|}. \tag{638}$$

これは系の基底状態に興味がある時に有用である。この理由は（原理的には）初期状態が基底状態と非ゼロな overlap さえ持っていれば、$\tau \to \infty$ で基底状態に収束するからである。

虚時間発展を変分状態で（各時刻に）最も良く近似するためには、次の最小化を行えばよい：

$$\min_{\boldsymbol{x}(\tau)} \left\| \left[\frac{d}{d\tau} + \left(\hat{H} - E_{\mathrm{var}}\right)\right]|\Psi_{\boldsymbol{x}(\tau)}\rangle \right\| \tag{639}$$

$$E_{\mathrm{var}} = \langle\Psi_{\boldsymbol{x}(\tau)}|\hat{H}|\Psi_{\boldsymbol{x}(\tau)}\rangle. \tag{640}$$

（実時間発展と異なり）虚数単位 i が上の式には現れないので、実数変数の変分状態であったとしても前節で言及したような微妙な点は存在せず、McLachlan/作用変分原理の二つは等価となる。

ここでは McLachlan 変分原理から、実数変数の変分状態 $|\Psi_{\boldsymbol{x}(\tau)}\rangle$ に対する虚時間発展方程式を求めよう：

$$\frac{d}{d\tau}|\Psi_{\boldsymbol{x}(\tau)}\rangle = \hat{\mathrm{P}}_\partial\left(E_{\mathrm{var}} - \hat{H}\right)|\Psi_{\boldsymbol{x}(\tau)}\rangle = -\hat{\mathrm{P}}_\partial\hat{H}|\Psi_{\boldsymbol{x}(\tau)}\rangle. \tag{641}$$

式の最後で $\hat{\mathrm{P}}_\partial|\Psi_{\boldsymbol{x}}\rangle = 0$ を用いたが、これは定義 (626) より明らかである。変数に関する虚時間発展は、左から $\frac{\partial|\Psi_{\boldsymbol{x}(t)}\rangle}{\partial x_i}$ をかけて実部をとることで

$$\sum_j g^{\mathrm{R}}_{ij}\frac{dx_j}{d\tau} = -\mathrm{Re}\left[v_i\right] \tag{642}$$

と書き下せる。行列 g^{R}_{ij} が正定値の時、虚時間発展では変分エネルギーが単調に減少することが示せる：

$$\frac{dE_{\mathrm{var}}}{d\tau} \leq 0. \tag{643}$$

また g^{R}_{ij} の逆行列が存在すれば、次のように式 (642) を書き直せる：

$$\frac{dx_j}{d\tau} = -\sum_i \left[(g^{\mathrm{R}})^{-1}\right]_{ji} \mathrm{Re}\left[v_i\right]. \tag{644}$$

これは変分多様体上の（一般に平坦ではない）計量の効果を取り入れた勾配降下法とみなせる。機械学習や情報幾何の分野で Natural Gradient descent あるいは Riemannian gradient descent と呼ばれているものの類似物でもある。より簡便な勾配降下法として広く用いられているのは

$$x_j(\tau+\delta\tau) = x_j(\tau) - \eta\delta\tau \frac{\partial}{\partial x_j}\langle \hat{H}\rangle_\tau \tag{645}$$

であるが、計量が平坦でない場合は式 (644) に基づいた最適化のほうが、実用上収束が早いケースが多い。

虚時間発展では（エネルギーはもちろんのこと）対称性があったとしても対応する保存量が一般には保存しない。しかし、各時刻で局所的に保存量に関する適切な部分空間に射影するよう、時間発展方程式をいつでも修正できて、これにより粒子数などが正しく保存されるようにできる。また、ハミルトニアンに penalty term を加えることでも、保存則を実効的に虚時間発展で満足することが可能である。

6.4.5 Gaussian 変分状態における変分原理

以上の変分原理の一般論を Gaussian 純粋状態へ適用しよう。まずフェルミ系については

$$|\psi\rangle = \hat{U}_{\mathrm{G}}\left[\left\{\hat{\psi}_\xi\right\}, \left\{e^{\frac{X_{\xi\eta}}{2}\hat{\psi}_\xi\hat{\psi}_\eta}\right\}\right]|0\rangle, \;\; X_{\xi\eta}\in\mathbb{R} \tag{646}$$

と任意の Gaussian 純粋状態が書けた。より明示的に、例えば次のような場合

$$|\psi\rangle = e^{\frac{1}{4}\hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}}X\hat{\boldsymbol{\psi}}}|0\rangle, \;\; X\in\mathbb{R}^{2N_f\times 2N_f}, \;\; X=-X^{\mathrm{T}}, \tag{647}$$

には共分散行列が

$$\Gamma_\psi = -e^X\sigma e^{-X}, \;\; \sigma = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{I}_{N_f} \\ -\mathrm{I}_{N_f} & 0 \end{pmatrix} \tag{648}$$

で表された。

変分原理を適用するにあたり、いくつか注意点を挙げる。一点目として、フェルミ Gaussian 状態を表す上で X は変数としては冗長であり、変分状態を必要十分に記述する変数として適切なのは Γ_ψ であることに注意されたい。実際、例えば式 (648) の行列 X のうち、$\hat{\psi}_{1i}\hat{\psi}_{2i}$ に該当する成分の寄与は式 (648) で相殺してしまい、Γ_ψ を変化させず従って冗長である。

二点目として、Gaussian 変分状態は実変数で記述されるが、$[\hat{\mathrm{P}}_\partial, i] = 0$ を満たすため McLachlan/作用変分原理の両者は等価となる（これは以下のボソン系の場合も同様である）。従って、エネルギーや（もしあれば）その他の系の保存則も時間発展で正しく保存される。このことを明示的に見るためには、Gaussian 状態を変数である Γ_ψ について微分をとって接空間を決定すれば良い。実際に計算を行うと接空間が次と等価となる（示してみよう）：

$$\mathcal{T}_f \equiv \left\{ |v\rangle \,\middle|\, |v\rangle = \hat{U}_{\mathrm{G}}\left(\sum_{1\le i<j}^{N_f} c_{ij}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j^\dagger\right)|0\rangle, \; c_{ij}\in\mathbb{C} \right\} \tag{649}$$

この空間 $\mathcal{T}_f$ は明らかに i 倍の操作に対して不変であり、従って $[\hat{\mathrm{P}}_\partial, i] = 0$ である。

これらの点を踏まえて、変数 Γ_ψ に関する時間発展方程式を求めよう。これは前節の式 (629) からも求まるが、ここでは変数が共分散行列であることを利用したより直接的な導出を行おう。いま次を満たす任意のフェルミ Gaussian 状態を考える：

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}_\mathrm{G}|0\rangle,\ \ \hat{U}_\mathrm{G}^\dagger \hat{\boldsymbol{\psi}} \hat{U}_\mathrm{G} = O\hat{\boldsymbol{\psi}},\ \ \Gamma_\psi = -O\sigma O^\mathrm{T},\ \ OO^\mathrm{T} = \mathrm{I}_{2N_f}. \tag{650}$$

この状態について次が成立する（ハミルトニアンを $\hat{\boldsymbol{\psi}}$ の多項式に展開して逐次確認することで示せる）：

$$\hat{\mathrm{P}}_\partial \hat{H}|\psi_t\rangle = \hat{\mathrm{P}}_\partial \hat{U}_\mathrm{G} \left(\frac{i}{4} \hat{\boldsymbol{\psi}}^\mathrm{T} O^\mathrm{T} \mathcal{H} O \hat{\boldsymbol{\psi}} + \hat{\delta} \right) |0\rangle \tag{651}$$

$$= \hat{U}_\mathrm{G} \left(: \frac{i}{4} \hat{\boldsymbol{\psi}}^\mathrm{T} O^\mathrm{T} \mathcal{H} O \hat{\boldsymbol{\psi}} : \right) |0\rangle, \tag{652}$$

$$\mathcal{H} \equiv 4 \frac{\delta E_\mathrm{var}}{\delta \Gamma_\psi} = 4 \frac{\delta \langle \hat{H} \rangle_\mathrm{G}}{\delta \Gamma_\psi}. \tag{653}$$

ここで $:\,:$ は演算子の normal order（つまり $:\hat{A}: \equiv \hat{A} - \langle 0|\hat{A}|0\rangle$）を意味し、$\hat{\delta}$ は $\hat{\boldsymbol{\psi}}$ について高次の項で $\hat{\mathrm{P}}_\partial$ によって除外される寄与である。式 (650),(652) を用いて共分散行列の実時間発展を計算すると、

$$\frac{d(\Gamma_\psi)_{\xi\eta}}{dt} = \frac{i}{2} \langle \psi_t | [\hat{\psi}_\xi, \hat{\psi}_\eta] \frac{d|\psi_t\rangle}{dt} + \mathrm{c.c.} \tag{654}$$

$$= \mathrm{Re} \left[\langle 0 | \hat{U}_\mathrm{G}^\dagger [\hat{\psi}_\xi, \hat{\psi}_\eta] \hat{\mathrm{P}}_\partial \hat{H} |\psi_t\rangle \right] \tag{655}$$

$$= \mathrm{Re} \left[\langle 0 | [\left(O\hat{\boldsymbol{\psi}} \right)_\xi, \left(O\hat{\boldsymbol{\psi}} \right)_\eta] : \frac{i}{4} \hat{\boldsymbol{\psi}}^\mathrm{T} O^\mathrm{T} \mathcal{H} O \hat{\boldsymbol{\psi}} : |0\rangle \right] \tag{656}$$

$$= -\mathrm{Re} \left[\left(i \left(1 - i\Gamma_\psi \right) \mathcal{H} \left(1 + i\Gamma_\psi \right) \right)_{\xi\eta} \right]. \tag{657}$$

最後の式は Wick 定理と次の関係式を用いた：

$$\langle 0 | \hat{\psi}_\alpha \hat{\psi}_\beta | 0 \rangle = \left(\mathrm{I}_{2N_f} + i\sigma \right)_{\alpha\beta}. \tag{658}$$

以上から、最終的にフェルミ Gaussian 状態の実時間発展は

$$\frac{d\Gamma_\psi}{dt} = \mathcal{H}\Gamma_\psi - \Gamma_\psi \mathcal{H} \tag{659}$$

と求まる。

虚時間発展もほぼ同様の計算から

$$\frac{d\Gamma_\psi}{d\tau} = -\mathrm{Im} \left[i \left(1 - i\Gamma_\psi \right) \mathcal{H} \left(1 + i\Gamma_\psi \right) \right]$$

$$= -\mathcal{H} - \Gamma_\psi \mathcal{H} \Gamma_\psi \tag{660}$$

と求まる。

続いて、次で定義される任意のボソン Gaussian 状態を考える：

$$|\phi\rangle = \hat{U}_{\rm G}|0\rangle = e^{\frac{i}{2}\hat{\boldsymbol{\phi}}^{\rm T}\sigma\boldsymbol{\Delta}}e^{-\frac{i}{4}\hat{\boldsymbol{\phi}}^{\rm T}R\hat{\boldsymbol{\phi}}}|0\rangle, \tag{661}$$

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & {\rm I}_{N_b} \\ -{\rm I}_{N_b} & 0 \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{\Delta} \in \mathbb{R}^{2N_b}, \ R \in \mathbb{R}^{2N_b\times 2N_b} \ R = R^{\rm T}, \tag{662}$$

$$\Gamma_\phi = SS^{\rm T}, \ S = e^{\sigma R}, \ S\sigma S^{\rm T} = \sigma. \tag{663}$$

ここでも変分状態を特徴付ける上で必要十分な変数は $(\boldsymbol{\Delta}, \Gamma_\phi)$ であることに注意しよう（行列 R は一般に冗長)。接空間については、

$$\mathcal{T}_{\rm b} \equiv \left\{ |v\rangle \,\middle|\, |v\rangle = \hat{U}_{\rm G}\left(\sum_{1\le i\le j}^{N_b} c_{ij}\hat{b}_i^\dagger\hat{b}_j^\dagger + \sum_{i=1}^{N_b} c_i\hat{b}_i^\dagger\right)|0\rangle, \ c_{ij}\in\mathbb{C} \right\} \tag{664}$$

と求まり、確かに i 倍の操作について不変であることがわかる。

上のフェルミ系の場合と同様の計算により、次の実時間発展方程式が求まる：

$$\frac{d\boldsymbol{\Delta}}{dt} = \sigma\mathcal{H}_{\boldsymbol{\Delta}}, \ \frac{d\Gamma_\phi}{dt} = \sigma\mathcal{H}_\Gamma\Gamma_\phi - \Gamma_\phi\mathcal{H}_\Gamma\sigma, \tag{665}$$

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{\Delta}} \equiv 2\frac{\delta E_{\rm var}}{\delta\boldsymbol{\Delta}}, \ \mathcal{H}_\Gamma = 4\frac{\delta E_{\rm var}}{\delta\Gamma_\phi}. \tag{666}$$

虚時間発展は

$$\frac{d\boldsymbol{\Delta}}{d\tau} = -\Gamma_\phi\mathcal{H}_{\boldsymbol{\Delta}}, \ \frac{d\Gamma_\phi}{d\tau} = -\sigma\mathcal{H}_\Gamma\sigma - \Gamma_\phi\mathcal{H}_\Gamma\Gamma_\phi \tag{667}$$

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{\Delta}} \equiv 2\frac{\delta E_{\rm var}}{\delta\boldsymbol{\Delta}}, \ \mathcal{H}_\Gamma = 4\frac{\delta E_{\rm var}}{\delta\Gamma_\phi} \tag{668}$$

と求まる。この導出は演習問題とする。

問題：フェルミ系の導出を参考にしてボソン系の時間発展方程式を導け。

ハミルトニアンが二次形式で書ける場合にはこれらの時間発展方程式は厳密であり、相互作用がある場合には Gaussian 変分状態上で（各時刻で）最適な近似解を与えることになる。虚時間発展の場合は $\tau\to\infty$ で変分基底状態が求まる。次節では、この変分法を非マルコフ的開放系の原型的な例である量子不純物系に適用する。

6.5 強結合開放系への応用

ここでは Gaussian 状態変分法を、強結合開放系の基底状態・非平衡多体ダイナミクスの解析に適用する。話を具体的にするために、ここでは前節で扱った問題のうち特に近藤問題に着目する。このような強相関系が（ある種の一般化された平均場理論である）Gaussian 変分法で取り扱える

のか疑問に思われるかもしれないが、これを可能とする上で本質的な点は「ディスエンタングリングユニタリ変換を行った後に Gaussian 状態を用いる」ことである。つまり、もとの frame では強い系-環境相関が存在する多体問題だったが、変換により Gaussian 状態でも十分に記述が可能なより易しい問題に帰着できる。これをさらに言い換えれば（もとの frame では）Gaussian 状態にユニタリ変換を作用させた、いわば「非 Gaussian 状態」を用いて問題を解いているともみなせる。

6.5.1 量子不純物系

ここでは次の量子不純物ハミルトニアンを考える：

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{bath}} + \hat{H}_{\mathrm{imp}} + \hat{H}_{\mathrm{int}}. \tag{669}$$

ただし

$$\hat{H}_{\mathrm{bath}} = \sum_{lm\alpha} \hat{\Psi}^{\dagger}_{l\alpha} h_{lm} \hat{\Psi}_{m\alpha}, \;\; l \in \{1, 2, \ldots, n\}, \;\; \alpha \in \{\uparrow, \downarrow\}, \tag{670}$$

は環境自由度を記述するハミルトニアンで、$\hat{\Psi}_{l\alpha}$ ($\hat{\Psi}^{\dagger}_{l\alpha}$) はモード l、スピン α のフェルミオンあるいはボソンの消滅（生成）演算子、行列 h は一粒子ハミルトニアンを記述する $n \times n$ エルミート行列である。次に

$$\hat{H}_{\mathrm{imp}} = -h_z \hat{s}^z_{\mathrm{imp}}, \;\; \hat{s}^{\gamma}_{\mathrm{imp}} = \hat{\sigma}^{\gamma}_{\mathrm{imp}}/2, \;\; \gamma \in \{x, y, z\} \tag{671}$$

は不純物スピン-1/2 項で

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{imp}} \cdot \hat{\mathbf{\Sigma}} \tag{672}$$

はその環境との相互作用項である。ここではできる限り一般的な形の相互作用を考えたいので

$$\hat{\Sigma}^{\gamma} = \frac{1}{2} \sum_{lm\alpha\beta} g^{\gamma}_{lm} \hat{\Psi}^{\dagger}_{l\alpha} \sigma^{\gamma}_{\alpha\beta} \hat{\Psi}_{m\beta}, \tag{673}$$

としてエルミート行列 g^{γ} により相互作用を特徴付ける。例えば後で考える (異方) 近藤模型の場合は不純物サイト 0 に局在した相互作用なので

$$g^z_{lm} = \delta_{l0}\delta_{m0} J_{\parallel}, \;\; g^{x,y}_{lm} = \delta_{l0}\delta_{m0} J_{\perp} \tag{674}$$

となる。

さて、前節で述べたように、このハミルトニアンは次の $\mathbb{Z}_2$ 対称性

$$\hat{\mathrm{P}} = \hat{\sigma}^z_{\mathrm{imp}} \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}, \;\; \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} = e^{i\pi \hat{N}_{\uparrow}} \tag{675}$$

を持ち、ユニタリ変換

$$\hat{U} = \exp\left[\frac{i\pi}{4} \hat{\sigma}^y_{\mathrm{imp}} \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \right], \;\; \hat{U}^{\dagger} \hat{\mathrm{P}} \hat{U} = \hat{\sigma}^x_{\mathrm{imp}} \tag{676}$$

により不純物と環境自由度が完全にディスエンタングルできる。実際この変換で、もとのハミルトニアン $\hat{H}$ の $\mathbb{Z}_2$ 対称性が、変換後には局在スピンの保存を意味することがわかる：

$$[\hat{\mathrm{P}}, \hat{H}] = 0 \to [\hat{\sigma}^x_{\mathrm{imp}}, \hat{\tilde{H}}] = 0, \;\; \hat{\tilde{H}} = \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U}. \tag{677}$$

変換後のハミルトニアンを実際に書き下すと、

$$\hat{\tilde{H}} = \hat{H}_{\mathrm{bath}} - h_z \hat{s}^x_{\mathrm{imp}} \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} + \hat{s}^x_{\mathrm{imp}} \hat{\Sigma}^x + \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \left(-\frac{i\hat{\Sigma}^y}{2} + \hat{s}^x_{\mathrm{imp}} \hat{\Sigma}^z \right) \tag{678}$$

と求まる。この変換後の frame で、前節で導入した Gaussian 変分状態 $|\Psi_{\mathrm{G}}\rangle$ を適用する：

$$|\tilde{\Psi}_{\mathrm{var}}\rangle = |\pm\rangle |\Psi_{\mathrm{G}}\rangle, \;\; \hat{\sigma}^x_{\mathrm{imp}} |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle. \tag{679}$$

言い換えれば、これはもとの frame では次の「非」Gaussian 状態を変分状態として用いることに対応する：

$$|\Psi_{\mathrm{var}}\rangle = \hat{U} |\tilde{\Psi}_{\mathrm{var}}\rangle = |\uparrow\rangle \hat{\mathrm{P}}_{\pm} |\Psi_{\mathrm{G}}\rangle \pm |\downarrow\rangle \hat{\mathrm{P}}_{\mp} |\Psi_{\mathrm{G}}\rangle. \tag{680}$$

ここで

$$\hat{\mathrm{P}}_{\pm} = \frac{1 \pm \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}}{2} \tag{681}$$

は以前に導入した偶/奇パリティ空間への射影演算子である。

6.5.2 基底状態

Gaussian 状態を用いた変分法のベンチマークを行うために、まずは (異方) 近藤模型（もちろんフェルミ粒子系）の基底状態を考えよう。そのために、前節で導出した次の虚時間発展を用いる：

$$\frac{d\Gamma_\psi}{d\tau} = -\mathcal{H} - \Gamma_\psi \mathcal{H} \Gamma_\psi, \;\; \mathcal{H} \equiv 4 \frac{\delta E_{\mathrm{var}}}{\delta \Gamma_\psi} = 4 \frac{\delta \langle \hat{H} \rangle_{\mathrm{G}}}{\delta \Gamma_\psi}. \tag{682}$$

この $\mathcal{H}$ の解析的表式を求めるために、まずエネルギー期待値が

$$E_{\mathrm{var}} = \frac{1}{4} \mathrm{Tr} \left(\mathcal{H}_0^{\mathrm{T}} \Gamma_\psi \right) - \frac{h_z}{2} \sigma^x_{\mathrm{imp}} \langle \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \rangle_{\mathrm{G}} + \frac{1}{4} \mathrm{Tr} \left(\mathcal{G}^T \Gamma^{\mathrm{P}} \right) \tag{683}$$

と表せることに注意しよう。第一項は二次形式の相互作用がない部分のハミルトニアンに対応しており、$\mathcal{H}_0$ はそれを Majorana 表示（$i\hat{\boldsymbol{\psi}}^{\mathrm{T}} \mathcal{H}_0 \hat{\boldsymbol{\psi}}/4$）したときの次の行列である：

$$\mathcal{H}_0 = \sigma \otimes \left[\mathrm{I}_2 \otimes h_{lm} + (\sigma^x_{\mathrm{imp}}/4)\, \sigma^x \otimes g^x_{lm} \right]. \tag{684}$$

次に式 (683) の第二項は変換後の frame での「不純物」項であり、前節で導出した公式を用いることで次のように計算できる：

$$\langle \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \rangle_{\mathrm{G}} = (-1)^{N_f} \mathrm{Pf} \left[\frac{\Gamma_F}{2} \right], \tag{685}$$

$$\Gamma_F = \sqrt{\mathrm{I}_{4N_f} + \Lambda}\, \Gamma \sqrt{\mathrm{I}_{4N_f} + \Lambda} - (\mathrm{I}_{4N_f} - \Lambda)\sigma. \tag{686}$$

ここで N_f はスピンとは別の環境モード $l = 1, 2, \ldots, N_f$（例えば格子サイト）の数であり、スピンも含めた総モード数は $2N_f$ であることに注意されたい。最後に式 (683) の第三項は、次で定義される二つの $2N_f \times 2N_f$ 行列の積のトレースに対応する：

$$\mathcal{G} = -\sigma \otimes g^{y}_{lm} + \sigma^{x}_{\mathrm{imp}}\sigma^{z} \otimes g^{z}_{lm}, \tag{687}$$

$$\Gamma^{\mathrm{P}} = \langle \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \hat{\mathbf{\Psi}}^{\dagger} \hat{\mathbf{\Psi}} \rangle_{\mathrm{G}}. \tag{688}$$

ここでフェルミ演算子のベクトルを次で導入した：

$$\hat{\mathbf{\Psi}} = (\hat{\Psi}_{1\uparrow}, \ldots, \hat{\Psi}_{N_f\uparrow}, \hat{\Psi}_{1\downarrow}, \ldots, \hat{\Psi}_{N_f\downarrow}). \tag{689}$$

Γ^{P} は前節で説明した Gaussian 状態の特性関数表示を用いることで解析的に計算ができて、次で与えられる：

$$\Gamma^{\mathrm{P}} = \frac{1}{4}\langle \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \rangle_{\mathrm{G}} \Sigma_z (\mathrm{I}_{2N_f}, -i\mathrm{I}_{2N_f}) \Upsilon^{-1} \big(\Gamma\sigma - \mathrm{I}_{4N_f}\big) \begin{pmatrix} \mathrm{I}_{2N_f} \\ i\mathrm{I}_{2N_f} \end{pmatrix}, \tag{690}$$

$$\Upsilon = \mathrm{I}_{4N_f} + \frac{1}{2}\left(\Gamma\sigma - \mathrm{I}_{4N_f}\right)\left(\mathrm{I}_{4N_f} + \Lambda\right), \tag{691}$$

$$\Lambda = \mathrm{I}_2 \otimes \Sigma_z, \;\; \Sigma_z = \sigma^{z} \otimes \mathrm{I}_{N_f}. \tag{692}$$

以上の式を足し合わせれば、$\mathcal{H}$ は次の行列微分を計算すれば求まることになる：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \frac{\delta}{\delta\Gamma}\left[-2h_z\sigma^{x}_{\mathrm{imp}}\langle \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \rangle_{\mathrm{G}} + \mathrm{Tr}(\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\Gamma^{\mathrm{P}})\right]. \tag{693}$$

行列に関する解析計算の後に、次の公式が得られる（余裕がある人は確かめてみよう）：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \left[h_z\sigma^{x}_{\mathrm{imp}}\langle \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \rangle_{\mathrm{G}} - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\Gamma^{\mathrm{P}})\right]\mathcal{P} - \frac{i}{4}\langle \hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}} \rangle_{\mathrm{G}}\, \mathcal{A}\left[\mathcal{V}\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\Sigma_z\mathcal{V}^{\dagger}\right]. \tag{694}$$

ここで $\mathcal{P}$ と $\mathcal{V}$ はつぎで定義される行列とベクトル

$$\mathcal{P} = \sqrt{\mathrm{I}_{4N_f} + \Lambda}\,\Gamma_F^{-1}\sqrt{\mathrm{I}_{4N_f} + \Lambda}, \quad \mathcal{V} = (\Upsilon^{\mathrm{T}})^{-1}\begin{pmatrix} \mathrm{I}_{2N_f} \\ i\mathrm{I}_{2N_f} \end{pmatrix} \tag{695}$$

であり、シンボル $\mathcal{A}[\cdots]$ は反対称化を表している：

$$\mathcal{A}[M] = \frac{M - M^{\mathrm{T}}}{2}. \tag{696}$$

基底状態の性質を調べるには、公式 (694) を虚時間発展 (682) に代入して、$\tau \to \infty$ という極限を考えれば良い[*22]。

ここからはベンチマークの結果を少し紹介しよう。基底状態のスピン相関関数：

$$\chi^{\gamma}_{l} = \frac{1}{4}\langle \hat{\sigma}^{\gamma}_{\mathrm{imp}}\hat{\sigma}^{\gamma}_{l} \rangle, \;\; \gamma \in \{x, y, z\} \tag{697}$$

と基底状態エネルギー E_{var} について、上記の非 Gaussian 状態（NGS）、MPS、Yosida ansatz の結果を比較した図を示す。参考までに、MPS は次のように行列積の形で表せる変分状態のクラス

[*22] 勿論、実際には基底状態エネルギーの収束に十分なほど大きい有限な τ を用いる。

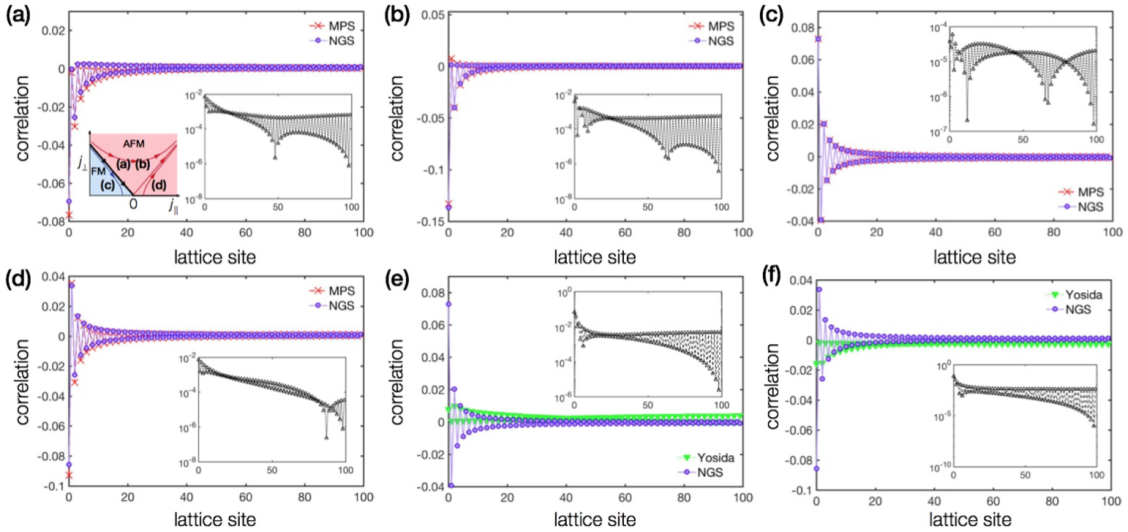

図 17　ベンチマーク結果：スピン相関関数の非 Gaussian 状態（NGS）, MPS, Yosida ansatz の比較。

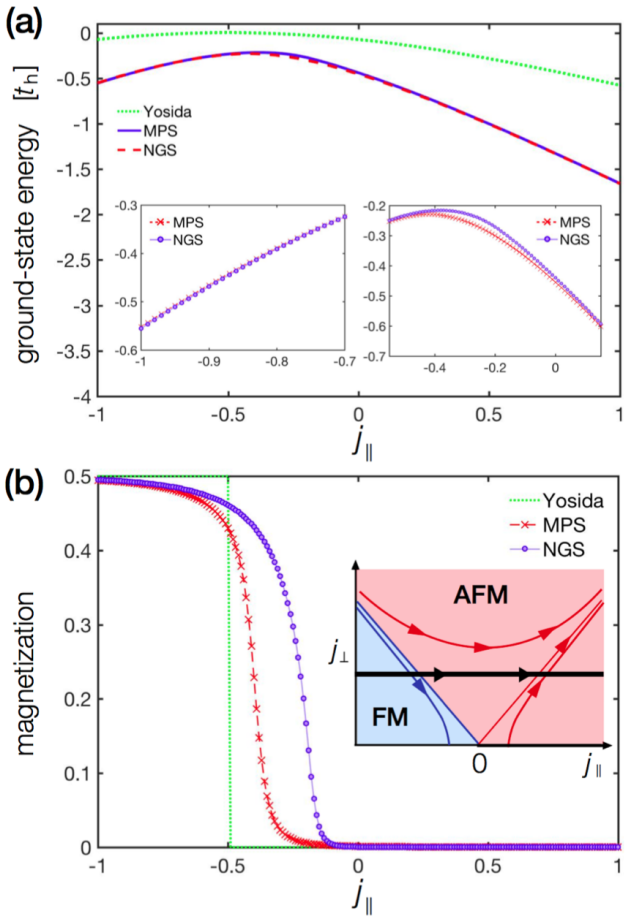

図 18　ベンチマーク結果：基底状態エネルギーの非 Gaussian 状態（NGS）, MPS, Yosida ansatz の比較。

$$|\Psi_{\mathrm{MPS}}\rangle = \sum_{\{i_k\}} \mathrm{Tr}\big(A[0]^{i_0} A[1]^{i_1} \cdots A[N-1]^{i_{N-1}}\big)\, |i_0 i_1 \cdots i_{N-1}\rangle, \tag{698}$$

であり、1 次元平衡系の解析に適したものとして知られている。Yosida ansatz は前節でも言及したものであり、

$$|\Psi_{\mathrm{Yosida}}\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n>n_{\mathrm{F}}} d_n \left(|\uparrow\rangle_{\mathrm{imp}} \hat{c}^\dagger_{n\downarrow} - |\downarrow\rangle_{\mathrm{imp}} \hat{c}^\dagger_{n\uparrow} \right) |\mathrm{FS}\rangle & (-J_\parallel \le J_\perp); \\ \sum_{n>n_{\mathrm{F}}} d_n |\uparrow\rangle_{\mathrm{imp}} \hat{c}^\dagger_{n\uparrow} |\mathrm{FS}\rangle & (-J_\parallel > J_\perp), \end{cases} \tag{699}$$

で与えられる。これは環境自由度の変分状態として「Fermi Sea + 一粒子励起」という特殊な Gaussian 状態を選んだものと解釈できる。図から分かる通り、NGS が MPS と同等の精度を達成していることがわかる。重要な点は、これらの精度が MPS より遥かに高効率に達成されていることである[*23]。他にも相関関数の臨界的振る舞い、遮蔽電子雲の大きさ（Kondo length）のスケーリング、Bethe ansatz など既存の厳密な結果など、いずれも正しく再現することが確かめられている。これらの結果は、ユニタリ変換と Gaussian 状態を組み合わせた変分状態が、近藤問題に現れる物理を定性的・定量的に正しく捉えたものであることを示唆している（詳細は PRB 98, 024103 (2018) を参照）。

6.5.3 非平衡多体ダイナミクス

上と同じ模型について、今度は非平衡ダイナミクスを考えよう。近藤問題は長い研究の歴史があり平衡状態に関してはほぼ完全に理解されている一方で、非平衡現象についてはまだ未解明な部分が多い。また、MPS など従来の変分状態では短時間領域の非平衡現象しか記述できないと一般に考えられており、この意味でも非平衡ダイナミクスを今回の変分法で解析してみることは意義深い。

フェルミ粒子系において、実時間発展は

$$\frac{d\Gamma_\psi}{dt} = \mathcal{H}\Gamma_\psi - \Gamma_\psi \mathcal{H} \tag{700}$$

と書き下せた。この $\mathcal{H}$ は虚時間発展の際に用いたものと同じであり、虚時間発展の方程式を少し修正するだけで実時間ダイナミクスも解析が可能である。短時間領域では MPS との比較によりベンチマークを行い、正しく記述が行えることを確認している。今回の解析で初めて明らかになった、興味深い振る舞いの一例を図に示す。講義の中でも説明するが、これは BKT タイプの繰り込み群フローを実時間で模した非平衡ダイナミクスと解釈できる。実時間発展は、他にも輸送現象などの解析にも応用がなされており、既存の結果を正しく捉えていることが確かめられている（詳細は PRL 121, 026805 (2018) を参照）。

最後に、ボソン系への応用についても言及しておこう。実時間発展方程式は

$$\frac{d\boldsymbol{\Delta}}{dt} = \sigma \mathcal{H}_{\boldsymbol{\Delta}}, \quad \frac{d\Gamma_\phi}{dt} = \sigma \mathcal{H}_\Gamma \Gamma_\phi - \Gamma_\phi \mathcal{H}_\Gamma \sigma, \tag{701}$$

[*23] 例えば図の結果では NGS が $\sim 10^4$ 程度の変数なのに対し、MPS は $\sim 10^{6-7}$ 程度の変数を用いている。また、収束性も前者の方が良く、典型的な計算時間は前者が数時間のオーダーなのに対し後者は数日を要する。

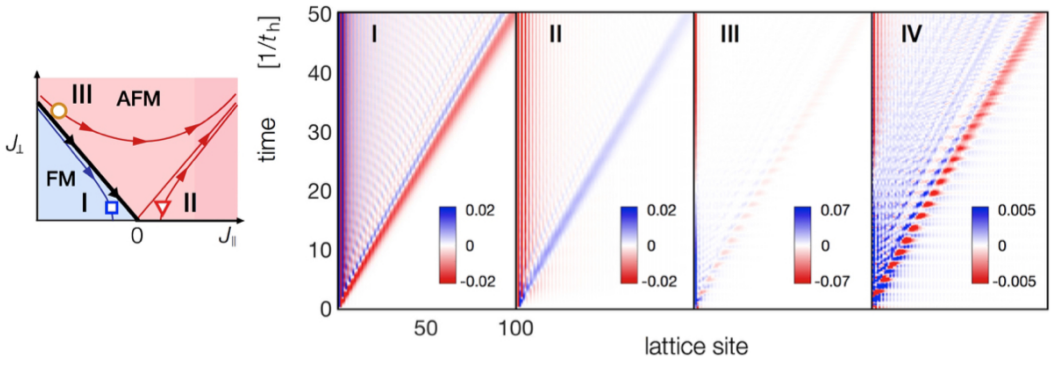

図 19　繰り込み群フローを模した時空間ダイナミクス。IV は III と同じ図を違うスケールでプロットしたもの。

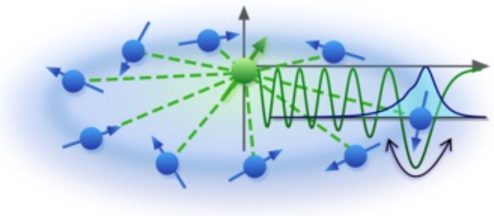

図 20　Rydberg 原子と相互作用する冷却原子気体。

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{\Delta}} \equiv 2\frac{\delta E_{\rm var}}{\delta \boldsymbol{\Delta}},\quad \mathcal{H}_{\Gamma} = 4\frac{\delta E_{\rm var}}{\delta \Gamma_\phi}. \tag{702}$$

である。これを計算するために、まずエネルギー期待値が

$$E_{b,\rm var} = \frac{1}{4}{\rm Tr}\left[\mathcal{H}_{b,0}^{\rm T}\Gamma_\phi\right] + \frac{1}{4}\boldsymbol{\Delta}^{\rm T}\mathcal{H}_{b,0}\boldsymbol{\Delta} + \frac{1}{4}{\rm Tr}\left[\mathcal{G}^{\rm T}\Gamma_b^{\rm P}\right] - \frac{1}{4}{\rm Tr}\left[\mathcal{H}_{b,0}\right], \tag{703}$$

$$\mathcal{H}_{b,0} = {\rm I}_2 \otimes h_0,\quad h_0 = {\rm I}_2 \otimes {\rm diag}(h_{lm}) + (\sigma^x_{\rm imp}/4)\sigma^x \otimes g^x_{lm} \tag{704}$$

で与えられることに注意する（簡単のため $h_z = 0$ として不純物項は除いた）。ここで各変数は次のように解析的に求まる：

$$\Gamma_b^{\rm P} = -\Sigma_z \langle \hat{\rm P}_{\rm bath}\rangle_{\rm G}({\rm I}_{2N_b}, -i{\rm I}_{2N_b})\left(\Gamma_B^{-1}\right)^{\rm T}\left[\frac{1}{2}(\Gamma_\phi - {\rm I}_{4N_b}) + \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\Delta}^{\rm T}\Gamma_B^{-1}\right]\begin{pmatrix}{\rm I}_{2N_b}\\ i{\rm I}_{2N_b}\end{pmatrix}, \tag{705}$$

$$\langle \hat{\rm P}_{\rm bath}\rangle_{\rm G} = \frac{1}{\sqrt{\det(\Gamma_B/2)}} e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\Delta}^{\rm T}\Gamma_B^{-1}(1+\Lambda)\boldsymbol{\Delta}}, \tag{706}$$

$$\Gamma_B = ({\rm I}_{4N_b} + \Lambda)\Gamma_\phi + {\rm I}_{4N_b} - \Lambda \tag{707}$$

これらを用いて微分を計算すると、$\mathcal{H}_{\boldsymbol{\Delta},\Gamma}$ の公式が次のように得られる（余裕のある人は確かめてみよう）：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\boldsymbol{\Delta}} = \mathcal{H}_{b,0}\boldsymbol{\Delta} &- \frac{1}{2}{\rm Tr}\left[\mathcal{G}^{\rm T}\Gamma_b^{\rm P}\right]\Gamma_B^{-1}(1+\Lambda)\boldsymbol{\Delta}\\ &- \langle \hat{\rm P}_{\rm bath}\rangle \Gamma_B^{-1}\mathcal{S}\left[\begin{pmatrix}{\rm I}_{2N_b}\\ -i{\rm I}_{2N_b}\end{pmatrix}\Sigma_z\mathcal{G}({\rm I}_{2N_b}, i{\rm I}_{2N_b})\right](\Gamma_B^{-1})^{\rm T}\boldsymbol{\Delta},\end{aligned} \tag{708}$$

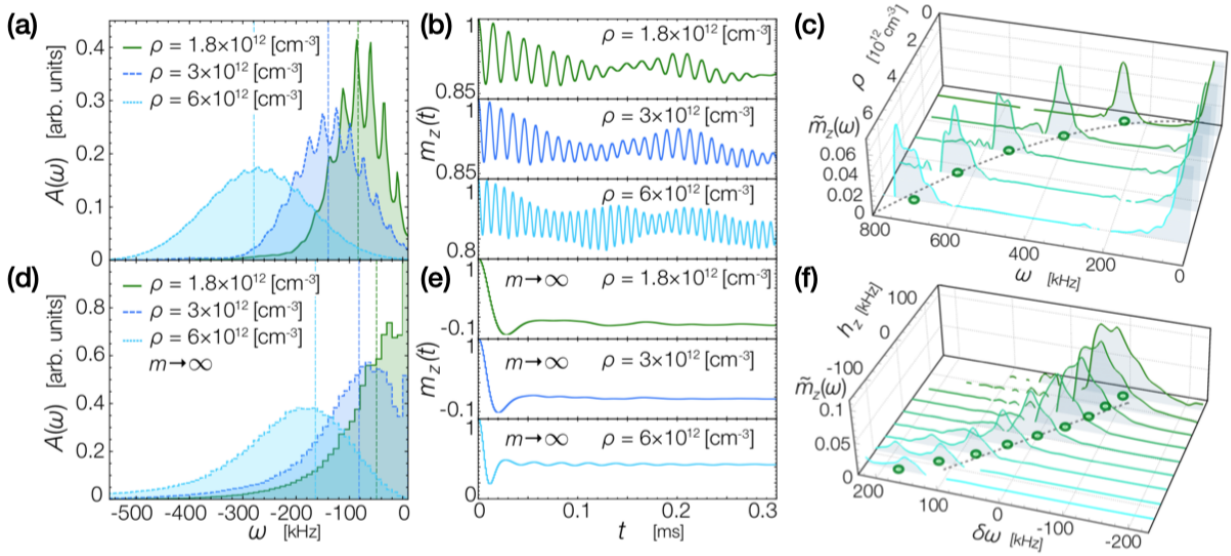

図 21　Rydberg 原子と冷却原子が相互作用する系の非平衡ダイナミクス。

$$\mathcal{H}_\Gamma = \mathcal{H}_{b,0} + \mathcal{S}\Bigg[\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[\mathcal{G}^{\mathrm{T}}\Gamma_b^{\mathrm{P}}\right]\Gamma_B^{-1}(1+\Lambda)\left(\Upsilon_b - \mathrm{I}_{4N_b}\right), \\ + \langle\hat{\mathrm{P}}_{\mathrm{bath}}\rangle_{\mathrm{G}}\Gamma_B^{-1}\begin{pmatrix}\mathrm{I}_{2N_b}\\ -i\mathrm{I}_{2N_b}\end{pmatrix}\Sigma_z\mathcal{G}(\mathrm{I}_{2N_b}, i\mathrm{I}_{2N_b})(\Gamma_B^{-1})^{\mathrm{T}}\left(2\Upsilon_b - \mathrm{I}_{4N_b}\right)\Bigg]. \tag{709}$$

ここで

$$\Upsilon_b = \mathbf{\Delta}\mathbf{\Delta}^{\mathrm{T}}\Gamma_B^{-1}(1+\Lambda) \tag{710}$$

であり $\mathcal{S}[\cdots]$ は対称化操作

$$\mathcal{S}[A] \equiv \mathrm{Re}\left[\frac{A + A^{\mathrm{T}}}{2}\right] \tag{711}$$

に対応する。

これらの解析の応用例の一つとして、冷却原子気体中に Rybderg 原子が存在する物理系の非平衡ダイナミクスを考える（図を参照）。

この系は環境自由度が immmobile（つまり無限の質量を持つ）極限で、セントラルスピン模型という可積分スピン系に帰着する。この模型では可積分性に伴う保存量の存在故に、系が熱化せずスピンが振動を続けることが知られている。Rydberg 原子を用いたここで考えている物理系は、有限の質量を持ち環境自由度が mobile なため、非可積分であり最終的には熱化することが期待される。しかし、有限時間領域において可積分性の名残（remnant）の結果として、振動現象が残り得るかどうかという問題は興味深い。

この問いに答えるため、上記の変分法が適用可能である。実際に得られた結果を図に示す。これらの結果は比較的長寿命の振動現象が生じることを示しており、確かに可積分性の名残が存在するものと解釈できる。この多体系は既存の（他の）理論では解析が困難であり、今回得られた理論予測の実験による検証が待たれる（詳細は PRL 123, 183001 (2019); PRA 100, 043618 (2019)）。

付録 A　回路量子電磁力学（Circuit QED）

回路 QED の基礎と量子散逸相転移に関する話題について簡単に述べる。

A.1　基礎的事項

LC 回路

まず LC 回路を考えよう。超伝導転移温度よりも十分温度が低く、量子効果が重要な領域では、回路は量子化されたハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{Q}^2}{2C} + \frac{1}{2}C\omega^2\hat{\Phi}^2, \ \ \omega \equiv \frac{1}{\sqrt{LC}} \tag{712}$$

で記述される。$\hat{Q}$ はコンデンサの電荷、$\hat{\Phi}$ はインダクタを貫く磁束で交換関係

$$[\hat{\Phi}, \hat{Q}] = i\hbar \tag{713}$$

を満たす。調和振動子との類似で、$\hat{\Phi}, \hat{Q}$ をそれぞれ位置、運動量とみなせば生成消滅演算子により

$$\hat{\Phi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega C}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \ \ \hat{Q} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega C}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \tag{714}$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{715}$$

と表せ、回路ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{716}$$

となる。ω は典型的にマイクロ波領域の振動数である。

ジョセフソン接合

上で見たように LC 回路のハミルトニアンは二次形式で書けるため、これだけではガウシアンの量子操作しか行えない。ジョセフソン接合を回路に組み込むことで回路に非線形性が導入でき、非ガウシアン操作が可能となる。具体的には、ジョセフソン接合は以下の非線形インダクタンス

$$\frac{1}{2}C\omega^2\hat{\Phi}^2 \to -E_J\cos\left(\frac{2\pi\hat{\Phi}}{\Phi_0}\right), \ \ \Phi_0 = h/2e \tag{717}$$

として記述ができる。この結果を導くために、超伝導体の平均場ハミルトニアン

$$\hat{H}_{\mathrm{MF}} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\epsilon_{\boldsymbol{k}}\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} - g\Omega|\bar{\Delta}|^2 - g\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\bar{\Delta}\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \bar{\Delta}^*\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right) \tag{718}$$

を考えよう。ここで

$$\bar{\Delta} = |\bar{\Delta}|e^{i\varphi}, \ \ \varphi \in [0, 2\pi) \tag{719}$$

は一般の位相 φ を含んだ秩序パラメータである。基底状態は

$$|\Psi_\varphi\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} \left(\cos\theta_{\boldsymbol{k}} + \sin\theta_{\boldsymbol{k}} e^{i\varphi} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right) |\mathrm{vac}\rangle \tag{720}$$

というガウシアン状態で記述され

$$|\Psi_\varphi\rangle = |\Psi_{\varphi+2\pi}\rangle \tag{721}$$

を満たす。従って、φ を変数とみなしてフーリエ変換を行うと、クーパーペアの数が N の空間への射影として作用する：

$$|\Psi_N\rangle = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} e^{-iN\varphi} |\Psi_\varphi\rangle = \hat{P}_N |\Psi_{\varphi=0}\rangle, \ \ N \in \mathbb{Z} \tag{722}$$

このように変数 $\varphi \in [0, 2\pi)$ と $N \in \mathbb{Z}$ は、それぞれ「位置」と「運動量」(つまり $\hat{N} = -id/d\varphi$) とみなせそうだが、φ は 2π 周期を持つ位相であり演算子として定義できない。正しくは、2π の不定性が無い次の交換関係

$$[\hat{T}, \hat{N}] = \hat{T}, \ \ \hat{T} = e^{-i\varphi} \tag{723}$$

を考えれば良い。この関係より、演算子 $\hat{T}$ の N 基底での表現は

$$\hat{T} = \sum_N |N+1\rangle\langle N| \tag{724}$$

と得られる。つまり $\hat{T}$ は超伝導体内のクーパーペアを一個増やす操作に対応している。

以上の結果を用いて、薄い絶縁体で繋がれ、位相 $\varphi_{1,2}$ を持つ二つの超伝導体を記述しよう。クーパーペアが超伝導体間のポテンシャル障壁を超えてトンネルする過程は、次の実効ハミルトニアンで記述される：

$$\hat{H}_J = -\frac{E_J}{2}\left(\hat{T}_1^\dagger \hat{T}_2 + \mathrm{H.c.}\right) = -E_J \cos\varphi, \ \ \varphi \equiv \varphi_1 - \varphi_2. \tag{725}$$

ここで φ は二つの超伝導体の位相差であり、$E_J > 0$ はジョセフソンエネルギーと呼ばれる。クーパーペアの輸送は電気双極子の変化を伴うため、静電エネルギーの変化

$$\hat{H}_C = 4E_C \left(\hat{N} - N_g\right)^2 \tag{726}$$

も引き起こす。ここで $E_C = e^2/2C$ は回路の総電気容量 C とした時の 1 電子あたりの静電エネルギーで、ファクターの 4 はクーパーペアが電荷 $2e$ を持つことによる。N_g はバイアス電圧に対応する。以上をまとめると、ジョセフソン回路のハミルトニアンとして

$$\hat{H}_{JJ} = \hat{H}_C + \hat{H}_J = 4E_C \left(\hat{N} - N_g\right)^2 - E_J \cos\varphi \tag{727}$$

を得る。電荷 $\hat{Q}$ と磁束 $\hat{\Phi}$ を用いた形に書き直すと

$$\hat{H}_{JJ} = \frac{\left(\hat{Q} - 2eN_g\right)^2}{2C} - E_J \cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}\right), \tag{728}$$

$$\hat{Q} = 2e\hat{N}, \;\; \Phi = \frac{\Phi_0}{2\pi}\varphi = \frac{\hbar}{2e}\varphi, \tag{729}$$

となる。

超伝導キュービット

ジョセフソン接合は非線形素子であり、適切なパラメータ領域では二準位系として振舞う。まず $E_C \gg E_J$ の場合を考えるため N 基底でハミルトニアン

$$\hat{H}_{JJ} = 4E_C\left(\hat{N} - N_g\right)^2 - \frac{E_J}{2}\sum_N \left(|N\rangle\langle N+1| + \text{H.c.}\right) \tag{730}$$

を書き下す。$E_J = 0$ の場合には基底状態は $(N - N_g)^2$ を最小化する状態となるが、励起状態のエネルギー間隔が縮退している。このため、共鳴周波数を持つ周期外場による制御を試みても、複数準位間の遷移が同時に生じてしまい二準位系としては動作しない。非線形項 $E_J > 0$ の導入によりエネルギー準位が非一様に変化し、エネルギー間隔の縮退が解ける。これにより下の二つの準位を二準位系として使えるようになる。これを charge qubit としばしば呼ぶ。

実際には、charge qubit はボルテージノイズにより生じる N_g の揺らぎにより、デコヒーレンスの影響を強く受けてしまう。これを克服する一つの方法は $E_C \ll E_J$ というパラメータ領域を考えることである。この場合、位相はポテンシャル中に良く局在するので、$\langle\varphi^2\rangle - \langle\varphi\rangle^2 \ll 1$ を仮定し、φ を連続空間上の位置変数とみなして

$$\hat{H}_{JJ} \simeq 4E_C\left(\hat{N} - N_g\right)^2 + \frac{1}{2}E_J\hat{\varphi}^2 - \frac{1}{4!}E_J\hat{\varphi}^4 \tag{731}$$

という非調和振動子として近似できる。非調和性によりエネルギー間隔の縮退は解け、下の二準位をキュービットとして用いることができる。これを transmon qubit と呼ぶ。

光物質相互作用：回路 QED

LC 回路とジョセフソン素子をつなぐことで、量子回路上で光物質相互作用の物理を研究することが可能となる（回路 QED)。LC 素子（マイクロ波光子）とジョセフソン素子（物質自由度）を一つずつつないだ単純な場合には、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = 4E_C\left(\hat{N} - \hat{N}_g\right)^2 - E_J\cos\varphi + \hbar\omega_r\hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{732}$$

でバイアス電圧を LC 回路の電圧で置き換えることで得られる：

$$\hat{N}_g = \frac{C_g}{C}\frac{\hat{Q}}{2e} = \frac{C_g}{2e}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2C}}i(\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \tag{733}$$

一般にはマイクロ波電磁場環境は複数モードであり、例えば導波管を用いることで、連続的な自由ボソン場がジョセフソン接合と結合した「量子散逸系」の量子シミュレーションが可能となる（以下を参照)。

A.2　ジョセフソン接合系の量子散逸相転移

ジョセフソン接合系が抵抗 R に繋がれた「量子散逸系」を考えよう。これは講義で扱う強結合開放系の文脈でも重要な問題である。上で見たように、ジョセフソン接合では二つの超伝導体の位相差 φ が (巨視的) 変数として取り扱える。抵抗に繋ぐことで散逸が生じるが、これはボソン環境自由度（つまり多数の調和振動子）との相互作用としてモデル化できる。具体的には次の回路ハミルトニアンで記述される：

$$\hat{H} = E_C \left(\hat{N} - \hat{n}_r\right)^2 - E_J \cos(\varphi) + \sum_{0<k\le\Lambda_0} \hbar\omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \tag{734}$$

$$\hat{n}_r = \frac{\sqrt{\alpha}}{2\pi} \sum_{0<k\le\Lambda_0} \sqrt{\frac{2\pi}{kL}} (\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k). \tag{735}$$

ボソン環境自由度は線形分散

$$\omega_k = vk = \frac{v\pi}{L} m, \quad m = 1, 2, \ldots, M \tag{736}$$

と波数カットオフ $\Lambda_0 = M\pi/L$ を持ち、環境との相互作用は次の無次元パラメータで特徴付けられる：

$$\alpha = \frac{R_Q}{R}, \quad R_Q = \frac{h}{4e^2}. \tag{737}$$

模型 (734) は、量子散逸の影響を受けながら周期ポテンシャル中を運動する単一粒子を記述しているとも解釈できる。

この模型は前節で扱った waveguide QED のハミルトニアン (405) に属しており、同様のデカップリングユニタリ変換が使える。まず二次形式の部分 $E_C \hat{n}_r^2 + \sum_k \hbar\omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$ を Bogoliubov 変換で対角化することで、次のような解析的表現が得られる：

$$\hat{H} = E_C \hat{N}^2 - E_J \cos(\varphi) - \hat{N} \sum_{0<k\le\Lambda_0} \hbar g_k (\hat{b}_k + \hat{b}_k^\dagger) + \sum_{0<k\le\Lambda_0} \hbar\omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \tag{738}$$

$$g_k = \sqrt{\frac{2\pi v}{\alpha L} \frac{\omega_k}{1 + \left(\frac{\nu\omega_k}{W}\right)^2}}, \quad \nu \equiv \frac{\pi}{\alpha\epsilon_C}, \quad \epsilon_C = \frac{E_C}{\hbar v \Lambda_0}. \tag{739}$$

続いてユニタリ変換 [Phys. Rev. Res. 4, 023194 (2022)]

$$\hat{U} = \exp(-i\hat{N}\hat{\Xi}), \quad \hat{\Xi} = i \sum_k \frac{g_k}{\omega_k} (\hat{b}_k^\dagger - \hat{b}_k) \tag{740}$$

を用いると[*24]

$$\hat{H}_U = \hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{U} = -E_J \cos\left(\varphi + \hat{\Xi}\right) + \sum_{0<k\le\Lambda_0} \hbar\omega_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \tag{741}$$

[*24] 線形分散の場合は、実効質量 m_{eff} が赤外発散するため $\frac{\hat{p}^2}{2m_{\text{eff}}}$ に対応する項がない。

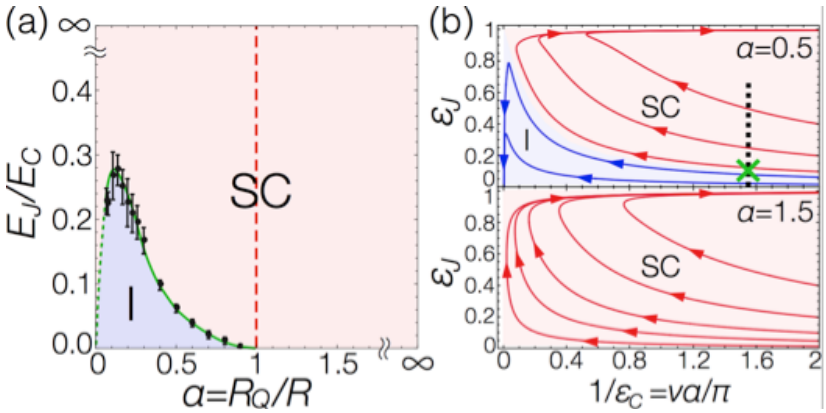

図 22　抵抗に結合されたジョセフソン接合系の非摂動繰り込み群相図 [Masuki et al., Phys. Rev. Lett. 129, 087001 (2022)]。

となり、物質自由度 φ はもはや c 数であり、ボソン環境自由度しか含まない理論が得られる。

この模型の基底状態を解析するため、初期の研究では摂動的繰り込み群が用いられた。得られた繰り込み群方程式は、対数スケール $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$ について

$$\frac{d\alpha}{dl} = 0, \quad \frac{d\ln\epsilon_J}{dl} \overset{\epsilon_J,\nu\ll 1}{\simeq} 1 - \frac{1}{\alpha}, \quad \frac{d\ln\nu}{dl} \overset{\epsilon_J,\nu\ll 1}{\simeq} -1. \tag{742}$$

ここで $\epsilon_J = E_J/\hbar v\Lambda_0$ は、初期カットオフで無次元化したジョセフソンエネルギー（つまりポテンシャルの深さ）である。この結果は $\alpha > 1$ で ϵ_J が次第に増加し、超伝導位相 φ がポテンシャルの谷に局在するため、基底状態でコヒーレンスが保たれ超伝導相が実現していることを示唆している。一方で、$\alpha < 1$ ではゼロ温度極限で $\epsilon_J \to 0$ となるため、位相は不確定となりコヒーレンスが量子ゆらぎにより消失する。従ってこの極限では絶縁体相[*25]となると期待される。この両者間の基底状態の相転移、すなわち「散逸に誘起された量子相転移」が、$\alpha_c = 1$ で常に（つまり E_J/E_C の比に依らずに）生じることが結論できそうに思える。

しかし、Schmid らによる最初の予言から 40 年近く経過した現在も、まだこの相転移に関する確たる実験的証拠は得られていない。むしろ予言されたパラメータ領域で相転移が生じないという報告が最近になってなされるなど、未だに論争が絶えない問題である。ごく最近、一つの解決案として非摂動効果により従来信じられてきた相図が質的に修正される可能性が指摘された。詳細は省くが、Wilson の数値的繰り込み群や汎関数繰り込み群といった非摂動な取り扱いをすることで、図のような修正された相図が提案されている。

これを理解するため、汎関数繰り込み群で得られる次の非摂動繰り込み群方程式を考えよう：

$$\frac{d\ln\epsilon_J}{dl} = 1 - \int_0^\infty \frac{dy}{\pi} g(y) \overset{\epsilon_J\ll 1}{\simeq} \begin{cases} 1 - \frac{1}{8}\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha\nu}} > 0 & \nu \gg 1 \\ 1 - \frac{1}{\alpha} & \nu \ll 1 \end{cases} \tag{743}$$

$$\frac{d\ln\nu}{dl} = -1 + \epsilon_J^2 \int_0^\infty \frac{dy}{\pi} h(y), \tag{744}$$

[*25] コンダクタンスは有限なので本来は通常金属相と呼ぶべきではあるが、文献に倣って「絶縁体相」と呼ぶことにする。

この方程式は非摂動な領域でも有効であり、g, h は正の積分値を与える関数である。これまで看過されていたポイントは、繰り込みの初期で、$\epsilon_{J,C}(l=0) \ll 1$ が典型的な物理系で満たされる点である。このことは ν の初期値が大きい値 $\nu(l=0) \gg 1$ をとることを意味しており、従来ゼロに単調に収束すると思われていた ν 項が、非摂動領域で（式 (744) 第二項の効果により）増加に転じる可能性を示唆している。実際に繰り込み群方程式を解くと、このような非単調な振る舞いが確認されており、結果として相図が大きな修正を受ける（右図）。これは統計力学でいわゆる dangerously irrelevant operator として知られる寄与で、摂動領域では irrelevant と素朴に期待されるが非摂動効果まで正しく取り入れると実は relevant となっている項である。以上は理論的な結果であるが、最終的には回路 QED などを用いた実験的検証が待たれる[*26]。

[*26] 追記：最近、Schmid 転移を超伝導回路で観測したという報告が arXiv:2304.05806 でなされた。FRG を用いた解析については、その後の研究（arXiv:2307.04835, PRA 107, 043709 (2023)）も参照されたい。

付録 B　朝永-Luttinger 液体

B.1　基礎的事項

ボソン化に関する簡単な補足を行う。もとの 1 次元フェルミ系の理論では、左右それぞれのフェルミ面付近（$p \sim p_F$）の寄与に応じて、Right mover と Left mover という二つの自由度があったことを思い出そう。また実際の系では相互作用も存在する。前節の定式化はこれら実際上重要な場合に容易に拡張できる。

このことを見るため、次の 1 次元スピンレスフェルミ系を考えよう：

$$\hat{H} = \hat{H}_{\rm kin} + \hat{H}_{\rm int}, \tag{745}$$

$$\hat{H}_{\rm kin} = \frac{\hbar v_F}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} dx \, \left[: \hat{\Psi}_R^\dagger(x)(-i\partial_x - k_F)\hat{\Psi}_R(x) + \hat{\Psi}_L^\dagger(x)(i\partial_x - k_F)\hat{\Psi}_L(x) : \right], \tag{746}$$

$$\hat{H}_{\rm int} = 2\pi U \int_{-L/2}^{L/2} dx \, : \hat{\Psi}_R^\dagger(x)\hat{\Psi}_R(x)\hat{\Psi}_L^\dagger(x)\hat{\Psi}_L(x) : . \tag{747}$$

第一項は運動エネルギーを表し、第二項が相互作用項である[*27]。$\hat{\Psi}_{R,L}$ はそれぞれ Right mover と Left mover に対応する独立なフェルミ場である。まず Right mover のボソン化表示はこれまでの議論より

$$\hat{\Psi}_R(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \hat{\psi}_R e^{2\pi i \hat{N}_R x/L} e^{i\hat{\Phi}_R^{(+)}(x)} e^{i\hat{\Phi}_R^{(-)}(x)}, \tag{748}$$

$$\hat{\Phi}_R(x) \equiv \hat{\Phi}_R^{(-)}(x) + \hat{\Phi}_R^{(+)}(x) = \sum_{k>0} \sqrt{\frac{2\pi}{kL}} e^{-k/\Lambda} \left(\hat{b}_{k,R} e^{ikx} + \hat{b}_{k,R}^\dagger e^{-ikx} \right) \tag{749}$$

で与えられる。次に Left mover では、運動する向きが Right mover と逆（$x \to -x$）であることに注意して、

$$\hat{\Psi}_L(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \hat{\psi}_L e^{-2\pi i \hat{N}_L x/L} e^{i\hat{\Phi}_L^{(+)}(x)} e^{i\hat{\Phi}_L^{(-)}(x)}, \tag{750}$$

$$\hat{\Phi}_L(x) \equiv \hat{\Phi}_L^{(-)}(x) + \hat{\Phi}_L^{(+)}(x) = \sum_{k>0} \sqrt{\frac{2\pi}{kL}} e^{-k/\Lambda} \left(\hat{b}_{k,L} e^{-ikx} + \hat{b}_{k,L}^\dagger e^{ikx} \right) \tag{751}$$

と求まる。またそれぞれに対応する密度演算子のボソン化表示として

$$\hat{\rho}_R(x) =: \hat{\Psi}_R^\dagger(x)\hat{\Psi}_R(x) := \frac{1}{2\pi}\partial_x \hat{\Phi}_R(x) + \frac{\hat{N}_R}{L}, \tag{752}$$

$$\hat{\rho}_L(x) =: \hat{\Psi}_L^\dagger(x)\hat{\Psi}_L(x) := -\frac{1}{2\pi}\partial_x \hat{\Phi}_L(x) + \frac{\hat{N}_L}{L}, \tag{753}$$

が導入される。

[*27] Right, Left mover のブランチ間の散乱過程（例えば $\left(\hat{\Psi}_R^\dagger \hat{\Psi}_L\right)^2 + \text{H.c.}$ で表されるウムクラップ散乱）が存在する場合は、有効模型が二次形式にならず相互作用項が残る（典型的には sine-Gordon 模型となる）。ここではスピンレスフェルミオンを考えているため、そのような過程は消えている。別の前方散乱の項（$\left(\hat{\Psi}_R^\dagger \hat{\Psi}_R\right)^2$ など）も一般には存在するが簡単のため無視している。

以上を用いると、ハミルトニアン (745) は、ボソン場を用いて次のように書き直せる：

$$\hat{H} = \frac{\hbar v}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} dx : \pi^2 \left[K \left(\hat{\rho}_R - \hat{\rho}_L \right)^2 + \frac{1}{K} \left(\hat{\rho}_R + \hat{\rho}_L \right)^2 \right] :, \tag{754}$$

$$v = v_F \sqrt{1-u^2}, \quad K = \sqrt{\frac{1-u}{1+u}}. \tag{755}$$

ここで $u \equiv U/\hbar v_F$ は無次元化した相互作用パラメータである。v は相互作用の効果によりもとの値 v_F から繰り込まれたフェルミ速度である。K は朝永-Luttinger パラメータとして知られる無次元量で、相互作用がない場合は $K=1$、斥力では $K<1$、引力では $K>1$ となる。異なる成分のフェルミ場は独立に振る舞い、例えば以下の関係が成り立つことに注意されたい：

$$\left\{ \hat{\psi}_\alpha^\dagger, \hat{\psi}_\beta \right\} = 2\delta_{\alpha\beta}, \ \ [\hat{N}_\alpha, \hat{\psi}_\beta] = -\delta_{\alpha\beta}\hat{\psi}_\beta, \ \ \text{for all } \alpha, \beta \in \{R, L\} \tag{756}$$

$$\left\{ \hat{\psi}_\alpha, \hat{\psi}_\beta \right\} = \left\{ \hat{\psi}_\alpha^\dagger, \hat{\psi}_\beta^\dagger \right\} = 0, \ \ \text{for } \alpha \neq \beta \tag{757}$$

$$[\hat{b}_{k\alpha}, \hat{b}_{k'\beta}^\dagger] = \delta_{kk'}\delta_{\alpha\beta}, \ \ \text{for all } \alpha, \beta \tag{758}$$

問題：式 (754) を確かめよ。ヒント：運動エネルギー項については式 (373) の結果を用いてよい。

最後に、Right, Left mover モードの線型結合で定義される

$$\hat{\theta}(x) = \frac{1}{2} \left[\hat{\Phi}_R(x) + \hat{\Phi}_L(x) + 2\pi x \frac{\hat{N}_R - \hat{N}_L}{L} \right], \tag{759}$$

$$\hat{\phi}(x) = \frac{1}{2} \left[\hat{\Phi}_R(x) - \hat{\Phi}_L(x) + 2\pi x \frac{\hat{N}_R + \hat{N}_L}{L} \right], \tag{760}$$

というボソン場演算子を導入すれば、朝永-Luttinger 液体ハミルトニアンの良く知られた簡潔な形が得られる：

$$\hat{H} = \frac{\hbar v}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} dx : \left[K \left(\partial_x \hat{\theta} \right)^2 + \frac{1}{K} \left(\partial_x \hat{\phi} \right)^2 \right] : . \tag{761}$$

もとのフェルミ系 (745) では相互作用のある多体問題であったが、ボソン化により相互作用がない（つまり二次形式の）自由なボソン場の理論 (761) に帰着された。相互作用の効果は単一のパラメータ K を通してしか現れない。励起エネルギーはギャップレスな線形分散であり、次節で見るように基底状態は臨界性を示す（つまり、相関関数が距離に対して指数的ではなく臨界指数を伴った冪的振る舞いを示す)。また臨界指数は単一のパラメータ K で特徴付けられる。これらの性質はフェルミ系に限らず、スピン鎖やボソン系などにおける一般の 1 次元ギャップレス相で成り立つ普遍的性質である。実験的には、例えば 1 次元光ポテンシャルに捕捉された冷却原子系などで実現され、その臨界的性質が朝永-Luttinger 理論と一致することが確かめられている。このようにボソン化法は 1 次元量子多体系を理解する上で強力な解析手法を与えている。

問題：式 (357) と $\partial_y \mathrm{sgn}(y) = 2\delta(y)$ を用いて、次の交換関係を示せ：

$$[\hat{\phi}(x), \partial_{x'}\hat{\theta}(x')] \overset{L,\Lambda\to\infty}{\to} -i\pi\delta(x-x'). \tag{762}$$

ボソン場 $\hat{\phi}(x)$ はフェルミ系の密度揺らぎを表す場であったが、関係式 (762) は $\partial_x\hat{\theta}$ がそれと共役なボソン場の演算子として振る舞うことを表している。

B.2 臨界現象と共形次元

これまで議論してきた (1+1) 次元の量子臨界系は、実は共形不変性[*28]という対称性を有している。共形不変性自体は一般の次元の臨界系で成立するが、特に (1+1) 次元では共形変換の種類が無限個存在するため、相関関数の臨界指数を同定する上で決定的な役割を果たす。詳細には立ち入らないが、ここではその一例として、上で考えた相互作用する 1 次元スピンレスフェルミオン系（式 (745)）の基底状態における臨界指数を、共形場理論の結果を用いつつ決定してみよう（詳細は例えば川上・梁、共形場理論と 1 次元量子系、岩波書店 (1997)）。

まず前節で導いた、低エネルギー有効理論（朝永-Luttinger 液体 (761)）を考えよう。その有限サイズ励起スペクトラムが、次のように書ける点に注意する：

$$\hat{H} = \hbar v \sum_{k\neq 0} |k| \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{\pi\hbar v}{2L}\left[K\left(\hat{N}_R - \hat{N}_L\right)^2 + \frac{1}{K}\left(\hat{N}_R + \hat{N}_L\right)^2\right] \tag{763}$$

$$= \frac{2\pi\hbar v}{L}\left(\hat{n}_r + \hat{n}_l + \frac{K}{4}\hat{J}^2 + \frac{\hat{N}^2}{4K}\right). \tag{764}$$

ここで $\hat{J}$ は左右フェルミ面間の粒子数変化を伴う（つまり粒子カレントを伴う）励起を表す量子数、$\hat{N}$ は左または右フェルミ面近傍に粒子を加える励起に対応した量子数である：

$$\hat{J} \equiv \hat{N}_R - \hat{N}_L, \quad \hat{N} \equiv \hat{N}_R + \hat{N}_L. \tag{765}$$

$\hat{n}_{r(l)}$ は右 (左) 方向に伝搬する粒子正孔対の励起に対応した量子数である：

$$\hat{n}_r \equiv \sum_{k>0} \frac{kL}{2\pi}\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \quad \hat{n}_l \equiv \sum_{k<0} \frac{|k|L}{2\pi}\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k. \tag{766}$$

これらをまとめることで、低エネルギー励起は次の量子数のセットで特徴付けられる：

$$I = (n_r, n_l, J, N). \tag{767}$$

式 (765) より、整数 J と N は選択則を満たすことがわかる：

$$(-1)^J = (-1)^N. \tag{768}$$

共形場理論の有限サイズスケーリングの結果を用いると、それぞれの量子数 I に対応したスケーリング次元（つまり臨界指数）が次のように決定される：

$$\Delta_I = \frac{1}{8}\left(\frac{N}{\sqrt{K}} + \sqrt{K}J\right)^2 + n_r, \quad \overline{\Delta}_I = \frac{1}{8}\left(\frac{N}{\sqrt{K}} - \sqrt{K}J\right)^2 + n_l. \tag{769}$$

[*28] 時空上の各点に依存した局所スケール変換のもとでの不変性。

言い換えると、このことは演算子積展開により一般の相関関数が次の形で表せることを意味している：

$$\langle \hat{O}(x,t)\hat{O}(0,0)\rangle = \sum_I c_I \frac{\exp\left(ip_I x\right)}{\left(x-ivt\right)^{2\Delta_I}\left(x+ivt\right)^{2\overline{\Delta}_I}}. \tag{770}$$

ここで p_I は量子数 I を持つスケーリング演算子が運ぶ波数であり次で定義される[*29]：

$$p_I = \left[p_F + \frac{\pi N}{L}\right] J + \frac{2\pi}{L}\left(n_r - n_l\right). \tag{771}$$

第一項は左右フェルミ面間の粒子数変化を伴うカレント J で運ばれるフェルミ波数に対応している。値が p_F から $\pi N/L$ ずれているのは、$N \neq 0$ なる粒子の変化を伴う場合にはフェルミ面の位置がもとの状態から変化することに起因する。第二項は粒子正孔対励起が運ぶ波数である。以上の結果を用いていくつかの相関関数を計算してみよう。

1 粒子 Green 関数

もとの 1 次元スピンレスフェルミオン系に戻り、そのフェルミ場の演算子を

$$\hat{\Psi}(x) = e^{ip_F x}\hat{\Psi}_R(x) + e^{-ip_F x}\hat{\Psi}_L(x) \tag{772}$$

で表そう。対応する相関関数 $\langle\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(0)\rangle$ の振る舞いを考えると、フェルミ粒子を一個消すことで生じる励起が重要となる。これは N_L または N_R の値を 1 減少させることに対応し、励起の量子数は $(n_r, n_l, J, N) = (0,0,1,-1), (0,0,-1,-1)$ で与えられる。式 (769) と (771) を用いると、対応する臨界指数と運動量は

$$2\Delta_I + 2\overline{\Delta}_I = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{K} + K\right), \;\; p_I = \pm p_F + O(1/L) \tag{773}$$

と求まる。従って式 (770) から、相関関数の漸近的な振る舞いが

$$\langle\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(0)\rangle \propto \frac{\cos(p_F x)}{|x|^{\frac{1}{2}\left(K+\frac{1}{K}\right)}} \tag{774}$$

と決定される。相互作用がない場合（$K = 1$）にはよく知られた結果（$\langle\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(0)\rangle \propto \cos(p_F x)/|x|$）が再現されるが、相互作用がある場合には臨界指数が K に依存して連続的に変化する。つまり、臨界点の集まり–臨界線–が形成されている。

密度相関関数

フェルミ粒子密度の演算子

$$\hat{\rho}(x) =: \hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x): \tag{775}$$

$$= \hat{\rho}_R(x) + \hat{\rho}_L(x) + e^{2ip_F x} : \hat{\Psi}^\dagger_L(x)\hat{\Psi}_R(x) : + e^{-2ip_F x} : \hat{\Psi}^\dagger_R(x)\hat{\Psi}_L(x) : \tag{776}$$

[*29] ここで p_F はもとの理論におけるフェルミ波数の値で、最高占有状態を基準 ($k = 0$) にして定義した k_F とは異なる点に注意されたい。

に伴う相関関数 $\langle\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)\rangle$ を考えよう。この場合は、粒子数 $N = N_L + N_R$ を変化しない次の二通りの励起が重要となる：一つ目は左右のフェルミ面間で粒子をやり取りする励起（N_R を一つ増やし N_L を一つ減らすまたはその逆）に対応し、量子数 $(n_r, n_l, J, N) = (0, 0, \pm 2, 0)$ で与えられる。臨界指数と運動量は式 (769) と (771) から

$$2\Delta_I + 2\overline{\Delta}_I = 2K, \;\; p_I = \pm 2p_F \tag{777}$$

となる。二つ目はそれぞれのフェルミ面付近での粒子・正孔対励起に対応し、量子数 $(n_r, n_l, J, N) = (1, 0, 0, 0), (0, 1, 0, 0)$ で表され

$$2\Delta_I + 2\overline{\Delta}_I = 2, \;\; p_I = O(1/L) \tag{778}$$

となる。以上をまとめると、式 (770) から密度相関関数の漸近的な振る舞いが

$$\langle\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)\rangle \propto \text{const.} + \frac{A_1 \cos(2p_F x)}{|x|^{2K}} + \frac{A_2}{|x|^2} \tag{779}$$

と決定される。

問題：相関関数の冪的振る舞い (774),(779) を、前節で導入したボソン化に基づく演算子形式により導出せよ。ヒント：フェルミ場の演算子 $\hat{\Psi}_{L,R}(x)$ を式 (748),(750) を用いてボソン場のバーテックス演算子の形で表し、相関関数 $\langle\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(0)\rangle$,$\langle\hat{\rho}(x)\hat{\rho}(0)\rangle$ を真空状態 $|0\rangle$ について計算してみよう。密度相関関数については式 (752),(753) も有用である。

B.3　1 次元スピン系の臨界状態

ここではスピン 1/2 鎖で実現する朝永-Luttinger 液体について簡単に紹介する。話を具体的にするため、次の XXZ スピン鎖

$$\hat{H}_{\text{XXZ}} = J \sum_i \left(\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y + \Delta \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z \right), \;\; J > 0 \tag{780}$$

を考える。ボソン化を行うために、まず Jordan-Wigner 変換によりスピン演算子が (スピンレス) フェルミ演算子と関係づくことに注意する[*30]：

$$\hat{\sigma}_j^+ = \hat{\Psi}_j^\dagger \frac{\left[e^{i\pi \sum_{l=-\infty}^{j-1} \left(\hat{\Psi}_l^\dagger \hat{\Psi}_l - 1 \right)} + \text{H.c.} \right]}{2}, \tag{781}$$

$$\hat{\sigma}_j^z = 2\hat{\Psi}_j^\dagger \hat{\Psi}_j - 1. \tag{782}$$

ここで j は 1 次元格子サイトのラベルである。連続空間上でのフェルミ場の演算子 $\hat{\Psi}(x)$ はボソン化により式 (748),(750),(772) で表される。スピン系に磁場はかかっておらず、基底状態が $\sum_j \hat{\sigma}_j^z = 0$ セクターに存在する。これはフェルミ粒子系の言葉では half-filling の場合に対応し、従って格子間隔を a とすればフェルミ運動量は $p_F = \pi/(2a)$ となり、ボソン化の際に定義する真空状態 $|0\rangle$ は $\langle 0|\hat{\Psi}_l^\dagger \hat{\Psi}_l|0\rangle = 1/2$ を満たす。

[*30] 後で見るように、ここでの String 演算子は式 (787) の表式が対称になるよう選んでいる。便宜上このようにしたが、従来通り $\hat{\sigma}_j^+ = \hat{\Psi}_j^\dagger e^{i\pi \sum_{l=-\infty}^{j-1} \hat{\Psi}_l^\dagger \hat{\Psi}_l}$ としても勿論同様の議論が可能である。

以上の結果を用いることで、スピン演算子の場の理論による表現が得られる。まず $\hat{\sigma}^z(x)$ については、式 (782) でフェルミ粒子数密度と関係づくため、式 (760),(776) などを用いると

$$\hat{\sigma}^z(x) = 2 : \hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x) : \tag{783}$$

$$= 2\left[\hat{\rho}_R(x) + \hat{\rho}_L(x) + e^{2ip_F x} : \hat{\Psi}_L^\dagger(x)\hat{\Psi}_R(x) : + e^{-2ip_F x} : \hat{\Psi}_R^\dagger(x)\hat{\Psi}_L(x) :\right] \tag{784}$$

$$= \frac{2}{\pi}\partial_x\hat{\phi} + \frac{4}{L}\cos\left(2\hat{\phi}(x) - 2p_F x\right) \tag{785}$$

を得る。次に $\hat{\sigma}^+(x)$ については

$$\hat{\sigma}^+(x) = \hat{\Psi}^\dagger(x)\frac{1}{2}\left[e^{i\pi\int_{-\infty}^{x} dx\left[:\hat{\Psi}^\dagger(x)\hat{\Psi}(x):-\frac{1}{2a}\right]} + \text{H.c.}\right] \tag{786}$$

$$= \frac{2}{\sqrt{L}}e^{-i\hat{\theta}}\cos\left(\hat{\phi} + p_F x\right)\cos\left(\hat{\phi} - p_F x\right) \tag{787}$$

となる。以上のことから、$p_F = \pi/(2a)$ に注意すれば、格子位置 $x_j = ja$ におけるスピン演算子のボソン化表示として次を得る：

$$\hat{\sigma}_j^z = a\hat{\sigma}^z(x_j) = \frac{2a}{\pi}\partial_x\hat{\phi} + c_1\,(-1)^j\cos\left(2\hat{\phi}\right), \tag{788}$$

$$\hat{\sigma}_j^+ = \sqrt{a}\hat{\sigma}^z(x_j) = e^{-i\hat{\theta}}\left[c_2\,(-1)^j + c_3\cos\left(2\hat{\phi}\right)\right]. \tag{789}$$

ここで $c_{1,2,3}$ はカットオフに依存し、従って系の詳細に依存する係数である。これらのボソン化表示により、$|\Delta| < 1$ における臨界状態の低エネルギー有効理論として朝永-Luttinger 液体 (761) が得られる。XXZ スピン鎖の場合は、Bethe 仮設により朝永-Luttinger 液体パラメータ K の解析式が次のように知られている：

$$K = \frac{\pi}{2\left(\pi - \cos^{-1}\Delta\right)}. \tag{790}$$