“非〇〇”物理学入門
～非エルミート・非マルコフ・非線形応答～

理化学研究所　　　　道下　佳寛

中央大学セミナー(2022/07/04)

Outline

1. 非エルミート物理学と開放量子系
2. 開放量子系と強相関系・非マルコフ性
3. 非線形応答～強相関の立場から～
4. これから研究する人たちへ

開放量子系と強相関系・非マルコフ性

□ 非線形な系とその処方箋〜時間スケールの分離〜

- 唐突ではあるが力学系(多変数の非線形方程式)を考える

$$\frac{dx}{dt} = f(x,y),\ \ \frac{dy}{dt} = g(x,y)$$

一般に多変数の非線形方程式は解く事が難しいので、有効的に変数を減らしたい。

上手く減らせる事が出来る成功例として、時間スケールが分離している系がある($||f|| \ll ||g||$)

変数yの緩和のスピードがxに比べ十分早い時、yは一瞬でxを固定した時の定常状態におちる

$$\frac{dy}{dt} = g(x,y) = 0 \quad \Rightarrow \quad y^* = G(x) \ \ \left(g\left(x, G(x)\right) = 0\right)$$

この時、xの緩和の時間スケールで見れば、yはxの関数になっているので

$$\frac{dx}{dt} = f\left(x, G(x)\right) = f^*(x),\ (\text{本来は } \frac{dx}{dt} = f(x, \int_0^t ds\, g\left(x(s), y(s)\right)) \text{ である})$$

(System-Bath couplingで摂動をしないタイプのMarkov近似)

開放量子系と強相関系・非マルコフ性

◻ 非線形な系とその処方箋〜時間スケールの分離〜

- もう少しgeneralに考えてみる

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{f}(\vec{x}),\ \frac{d\overrightarrow{x^*}}{dt} = \vec{f_0}(\overrightarrow{x^*},\vec{y}),\ \frac{d\vec{y}}{dt} = \vec{g}(\overrightarrow{x^*},\vec{y}),\qquad \vec{x} = (\overrightarrow{x^*},\vec{y})$$

$$\begin{aligned}\vec{y}(t) &= \vec{y}(0) + \int_0^t ds\vec{g}\left(\overrightarrow{x^*}(s),\vec{y}(s)\right)\\ &= \vec{y}(0) + \int_0^t ds\vec{g}\left(\overrightarrow{x^*}(s),\vec{y}(0) + \int_0^s ds_1\vec{g}\left(\overrightarrow{x^*}(s_1),\vec{y}(s_1)\right)\right)\\ &= \hat{G}(t,0,\{x^*(s)\})\ \vec{y}(0)\end{aligned}$$

$$\hat{G}(t,0,\{x^*(s)\}) = T_{\rightarrow}\exp[\int_0^t ds\ \widehat{g_s}\circ],\qquad \widehat{g_s}\circ\vec{y} = \int_0^s ds'\ \vec{g}\left(\overrightarrow{x^*}(s'),\vec{y}\right)$$

$$\frac{d\overrightarrow{x^*}}{dt} = \vec{f_0}\left(\overrightarrow{x^*},\hat{G}(t,0,\{x^*(s)\})\ \vec{y}(0)\right) = F\ \left(\{\overrightarrow{x^*}(s)\},\vec{y}(0)\right)$$

もちろん力学系においても変数を削減すると非マルコフ(表式もNakajima-Zwanzigとほぼ同じ)

開放量子系と強相関系・非マルコフ性

□ 非線形な系とその処方箋〜時間スケールの分離〜

- (確認)時間スケールが分離できていれば、以下の表式に落とせる。

$$\frac{d\overrightarrow{x^*}}{dt} = \overrightarrow{f_0}(\vec{x}) = F\left(\left\{\overrightarrow{x^*}(s)\right\}\right) \simeq f^*\left(\overrightarrow{x^*(t)}\right)$$

ここで量子マスター方程式でのマルコフ近似の条件を思い出してみる
“長時間極限(steady stateの近く)” = (systemの時間スケールが長い)
or “$\gamma^2\tau_B \ll 1$(弱結合 or Bathの相関時間小)” = (Bathの緩和時間が十分短い)

なので、確かに時間スケールの分離こそがマルコフ近似の本質なのだと分かる。
(逆に、様々なスケールが分離できず絡み合った世界が非マルコフの世界である。)

ちなみに一番上の式を見て気づくことはないだろうか？変数削減をすることにより、

$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{f}(\vec{x}) \Rightarrow \frac{d\overrightarrow{x^*}}{dt} = \overrightarrow{f^*}\left(\overrightarrow{x^*}\right)$ として関数を更新している。これは`くりこみの処方’でもある。

開放量子系と強相関系・非マルコフ性

□ くりこみの処方と開放量子系

- $\vec{x} = \{\phi_k\ |0 \le k \le l\Lambda\}$, $\vec{y} = \{\phi_k\ |\ l\Lambda \le k \le \Lambda\}$ とすると、実際に繰り込みの(ような)操作になっている

また$\{S\} = \{\phi_k\ |0 \le k \le l\Lambda\}$, $\{B\} = \{\phi_k\ |\ l\Lambda \le k \le \Lambda\}$ とすると、

(2-loopの計算をする) = (開放系においてSについての量子マスター方程式を導出する)

(＊1-loopまでで(例えばϕ^4模型で)繰り込むと、非マルコフ性が発生しない。

これは量子マスター方程式(NZ方程式)の導出の仮定で$\mathcal{P}\mathcal{L}^{2n+1}\mathcal{P} = 0$を落としている($H_S$に繰り込んでいる)のと対応

(＊前回のスライドを参照))

開放量子系(NZ方程式)＋摂動 ⇨ 量子マスター方程式

開放量子系で、短時間で緩和する自由度をBathと思えば対応

非線形方程式＋特異摂動(別の時間スケールを導入し短時間での緩和の情報を長時間での緩和のパラメータに繰り込む)

⇨ 繰り込み群(厳密には、特異摂動よりも繰り込み群の方が裾野が広いはず)

開放量子系と強相関系・非マルコフ性

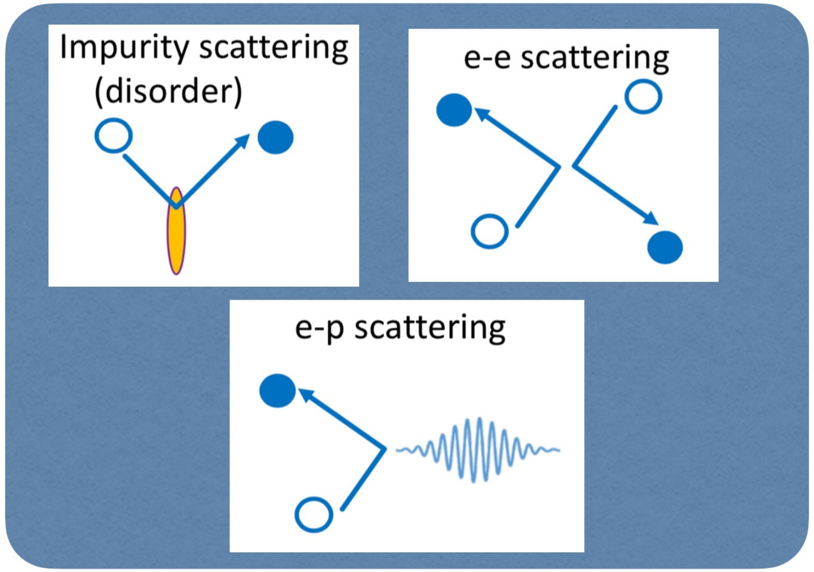
□ 強相関系における非エルミート性

PHYSICAL REVIEW LETTERS **120,** 146402 (2018)

Topological Band Theory for Non-Hermitian Hamiltonians

Huitao Shen,[1] Bo Zhen,[1,2] and Liang Fu[1]

力学系同様、相互作用する多体系を我々はそのままでは理解できないのであくまでその中の代表の1粒子の運動方程式を導く事で、物性を理解する
（多体系＋相互作用 => 自己エネルギー）



$$G^R(k,\omega) = \left(\omega - H_0 - \Sigma^R(k,\omega)\right)^{-1} = \left(\omega - H^R_{eff}(k,\omega)\right)^{-1}$$

$-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}$

Vertex補正を無視

スペクトル関数: $A(k,\omega)$
ARPESで測定可能

応答関数: $\chi(q,\omega)$
種々の実験で測定可能

開放量子系と強相関系・非マルコフ性

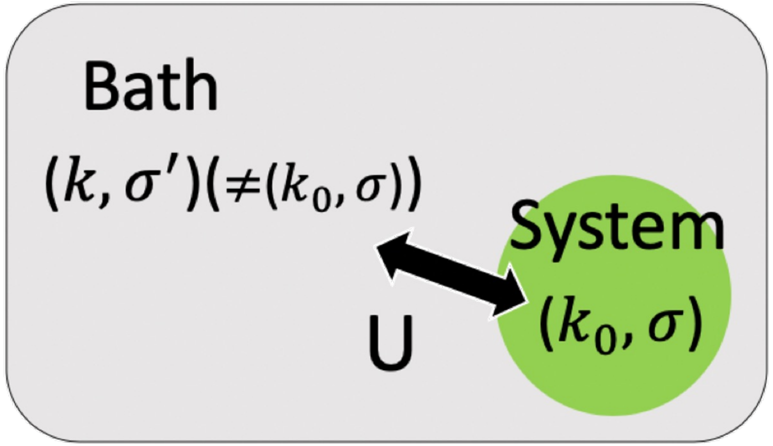
◻ 自己エネルギーの描像と開放量子系

PHYSICAL REVIEW LETTERS **124**, 196401 (2020)

Equivalence of Effective Non-Hermitian Hamiltonians in the Context of Open Quantum Systems and Strongly Correlated Electron Systems

Yoshihiro Michishita* and Robert Peters†

SCES(isolated in total)



$$\mathcal{H}_{Hubbard} = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma}(\epsilon_{\boldsymbol{k}}+\mu)c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}c_{\boldsymbol{k},\sigma} + \frac{U}{N}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}c^\dagger_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q},\bar{\sigma}}c^\dagger_{\boldsymbol{k}',\bar{\sigma}}$$
$$= \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_c$$

$$\mathcal{H}_S = (\epsilon_{\boldsymbol{k}_0}+\mu_c+Un_{\bar{\sigma}})c^\dagger_{\boldsymbol{k}_0\sigma}c_{\boldsymbol{k}_0\sigma} = \xi c^\dagger_{\boldsymbol{k}_0\sigma}c_{\boldsymbol{k}_0\sigma}$$

$$\mathcal{H}_B = \sum_{(\boldsymbol{k},\sigma')\neq(\boldsymbol{k}_0,\sigma)}(\epsilon_{\boldsymbol{k}}+\mu_c)c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma'}c_{\boldsymbol{k}\sigma'} + \frac{U}{N}\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_4\neq\boldsymbol{k}_0}\delta_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_4}c^\dagger_{\boldsymbol{k}_1\sigma'}c_{\boldsymbol{k}_2\sigma'}c^\dagger_{\boldsymbol{k}_3\bar{\sigma}'}c_{\boldsymbol{k}_4\bar{\sigma}'}$$

$$\mathcal{H}_c = \frac{U}{N}\sum_{\boldsymbol{k}_0,\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3}\delta_{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_3,\boldsymbol{k}_0+\boldsymbol{k}_2}\left(c^\dagger_{\boldsymbol{k}_0\sigma}c_{\boldsymbol{k}_1\sigma}c^\dagger_{\boldsymbol{k}_2\bar{\sigma}}c_{\boldsymbol{k}_3\bar{\sigma}} + h.c.\right)$$

BathをTrace out
+ Postselection
▷

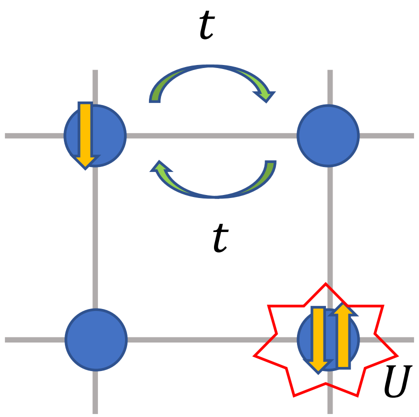
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_s(t) = -i\left[\mathcal{H}_S + \Sigma^R(\xi)c^\dagger_{\boldsymbol{k}_0\sigma}c_{\boldsymbol{k}_0\sigma}, \rho_S(t)\right] + \mathrm{Im}\Sigma^R(\xi)\left\{c^\dagger_{\boldsymbol{k}_0\sigma}c_{\boldsymbol{k}_0\sigma}, \rho_S(t)\right\}$$
$$= -i\left(\mathcal{H}_{eff}\rho_S(t) - \rho_S(t)\mathcal{H}^\dagger_{eff}\right)$$

開放量子系と強相関系・非マルコフ性

Hubbard模型における非マルコフ性

- Mott絶縁体

  … 元々は１軌道だが、相互作用により絶縁化したもの



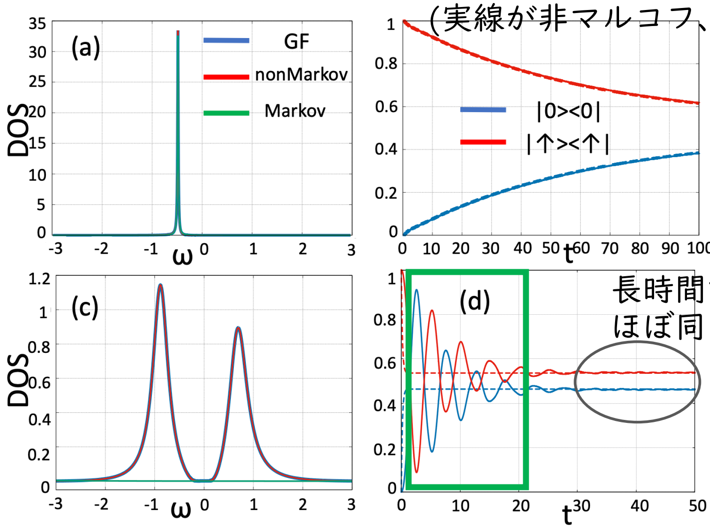
Markov近似下では、$G^R(k,\omega) = \left(\omega - H_{eff}\right)^{-1}$ なので、poleが１つしか持ち得ない

(Green関数のpoleはある種物理的な実体)

$G^R(k,\omega) = \left(\omega - H_{eff}(k,\omega)\right)^{-1}$で有効ハミルトニアンがω依存性を持って初めてpoleが２つ以上になり得る。

(ちなみにω一次の展開は繰り込みに対応。二次以上からpoleを増やす)

相互作用(System-bath coupling)が小さいときはマルコフ的
(実線が非マルコフ、点線がマルコフ)



長時間でマルコフとほぼ同じダイナミクス

ここのうねうねの短時間のダイナミクスは非マルコフの証拠

Cf) $\frac{d\rho}{dt} = \int ds\, K(t-s)\rho(s) \quad \Rightarrow \quad i\omega\rho(\omega) - \rho(0) = K(\omega)\rho(\omega)$

$\Rightarrow \quad \rho(\omega) = \rho(0)/(i\omega - K(\omega))$ (見る成分を選べばGreen関数)

Markovの場合は$\frac{d\rho}{dt} = K\,\rho(t) \quad \Rightarrow \quad \rho(\omega) = \rho(0)/(i\omega - K)$

開放量子系と強相関系・非マルコフ性

◻ 非マルコフで(ある程度)上手くいっていること *個人の感想です

- DMFT(動的平均場理論)
  - Bathのダイナミクスを Systemのダイナミクスと同じと仮定して自己無撞着に解く
  - 固体物理でのNon-Markovな物性の解明に一役買っている

- フィードバックのある系の記述
  - 過去の情報を用いて、ダイナミクスにフィードバックをかける系。(Maxwellの悪魔など)
  - 確率過程で研究されているが、量子マスター方程式の側から研究があっても良いのかも(すでにあるかも)

  (例えばブラウン運動において、不可解な動きを「バスのメモリー効果」と見るか「ランダムなノイズ項」としてみるかは、双対的な立場にある。ある種確率過程と決定論的な非マルコフは相補的な部分があると個人的には思っている。(確率過程の方が解析が楽なのだが))

- RMSProp, Adam
  - 機械学習分野での最適化関数に用いられる
  - Neural Netのパラメータの更新に、過去の情報を用いる事で、効率よく学習を行える

Outline

1. 非エルミート物理学と開放量子系

2. 開放量子系と強相関系・非マルコフ性

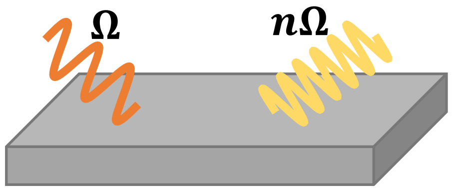
3. 非線形応答〜強相関の立場から〜

4. これから研究する人たちへ

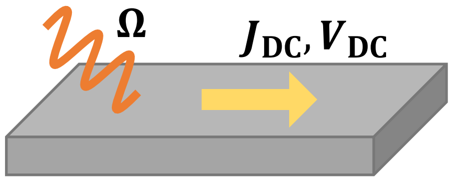
非線形応答～強相関の立場から～

□ バルクにおける非線形応答

- 高次高調波発生(HHG) … コンパクトな素子へ

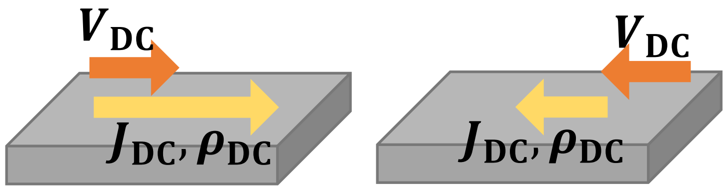


- 光起電力効果(Photo-voltaic effect)
  … 高周波領域で作動する素子へ



- 非線形ホール効果(Nonlinear Hall effect)

- 非相反伝導(Non-Reciprocal transport)
  … 超伝導体で巨大な非相反性を実現



バルクの対称性の同定, 超高速ダイナミクスの測定
光検知器,高周波整流素子への応用

非線形応答～強相関の立場から～

□ 非線形応答で消える制約・増える制約

- Onsagerの相反定理
  - 時間反転対称性の下で　$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\beta\alpha}$
  - 平衡状態からの線形応答に対する制約なので、非線形応答(ある種の「n-1次の外場に駆動された非平衡状態」からの線形応答)には適用されない

- 対称性による制約
  - 線形応答よりも、対称性による制約は受けやすくなる。(PT対称性、結晶の対称性など)

PHYSICAL REVIEW X **11,** 011001 (2021)

TABLE I. Classification of photocurrent responses in terms of $\mathcal{T}$ and $\mathcal{PT}$ symmetries and of linearly polarized (↕) and circularly polarized (↻) light. Note that the entries with the superscript “*” are allowed in metals. The italic font is for classes clarified by this work.

	$\mathcal{T}$	$\mathcal{PT}$
(↕)	Shift current	Drude term* Magnetic injection current *Intrinsic Fermi surface effect**
(↻)	Berry curvature dipole effect* Electric injection current Intrinsic Fermi surface effect*	*Gyration current*

arXiv:2204.08365v1

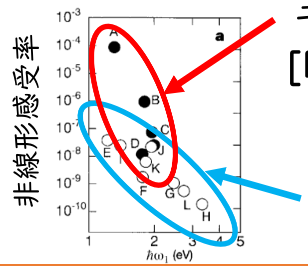
TABLE I. Symmetry classification and τ-dependence

term	$\mathcal{T}$	$\mathcal{PT}$	τ-dependence
σ_{M}	-	-	$\mathcal{O}(\tau^{-1})$
σ_{Drude}	×	✓	$\mathcal{O}(\tau^{2})$
σ_{BCD}	✓	×	$\mathcal{O}(\tau)$
σ_{ChS}	×	✓	$\mathcal{O}(\tau^{0})$ $(\mathcal{O}(\tau^{2}))$
σ_{gBC}	✓	×	$\mathcal{O}(\tau^{-1})$

非線形応答～強相関の立場から～

◻ 強相関電子系における非線形応答～実験からの結果～

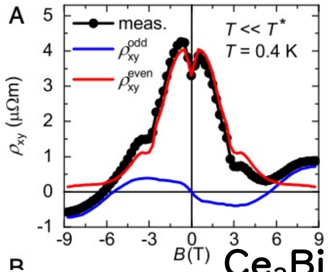
- Mott絶縁体における巨大な非線形感受率
  H. Kishida, et al, Nature:405,929-935(2000)



モット絶縁体
[Ni(chxn)$_2$Br]Br$_2$など

相互作用の
小さい系

- Weyl近藤半金属における巨大な非線形ホール応答
  S. Dsaber, et al, PNAS:118,e2013386118(2021)



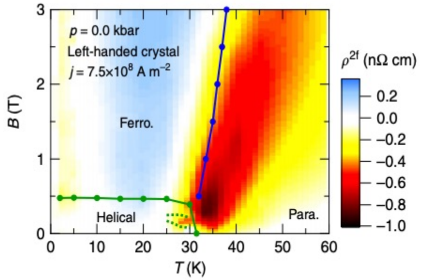
$Ce_3Bi_4Pd_3$

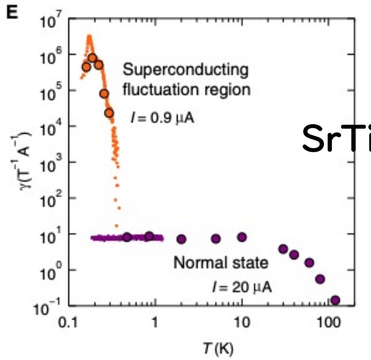
＊ $\tan\theta_H/E$ はWTe$_2$(相互作用の小さいワイル半金属)より3桁大きい

- 臨界領域における巨大非線形応答
  T. Yokouchi, et al, Nature Comm.:8.866(2017)
  Y. M. Itahashi, et al, Sci Adv.:eaay9120(2020)

(＊Memo：臨界領域＝いろんなスケールが絡まり合った領域
なので非マルコフが効いてきそうという期待は持っている)

MnSi





$SrTiO_3$

非線形応答〜強相関の立場から〜

◻ 非線形応答に対する理論的アプローチ

- Floquet理論
  長所：非摂動的に計算可能　　短所：高周波領域に使いたい、どこまで正当性があるのか難しい
- 実時間発展をダイレクトに計算
  長所：非摂動的に計算可能、愚直に計算　　短所：解釈が難しい(ある種“結果が得られるだけ”)
- 半古典Boltzmann, 既約密度演算子法(reduced density matrix)
  長所：比較的簡単、寄与が分かりやすい　　短所：相互作用・散逸の効果が入れづらい
- Green関数による摂動論
  長所：相互作用・散逸の効果が入れやすい　　短所：計算が大変

比較的解析が簡単な部分を研究すれば、デメリットを踏み倒せる

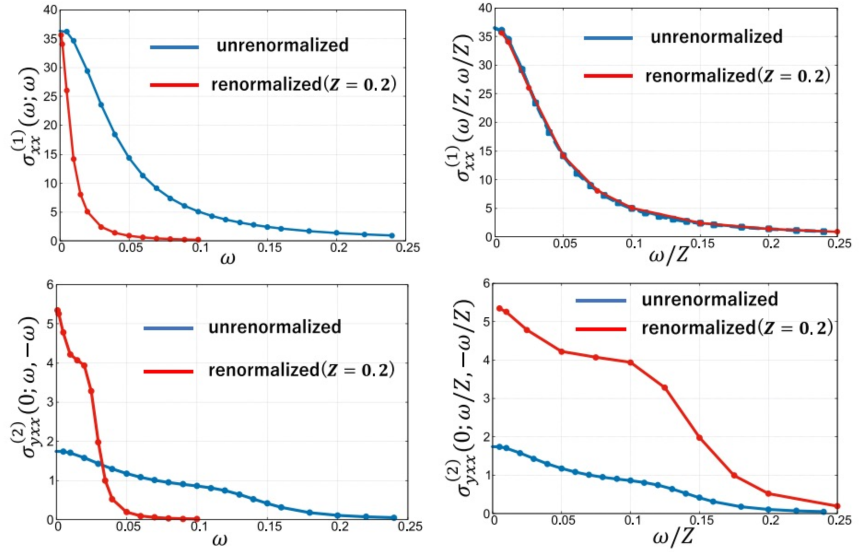
非線形応答～強相関の立場から～

□ 理論からどうアプローチするか？

PHYSICAL REVIEW B **103**, 195133 (2021)

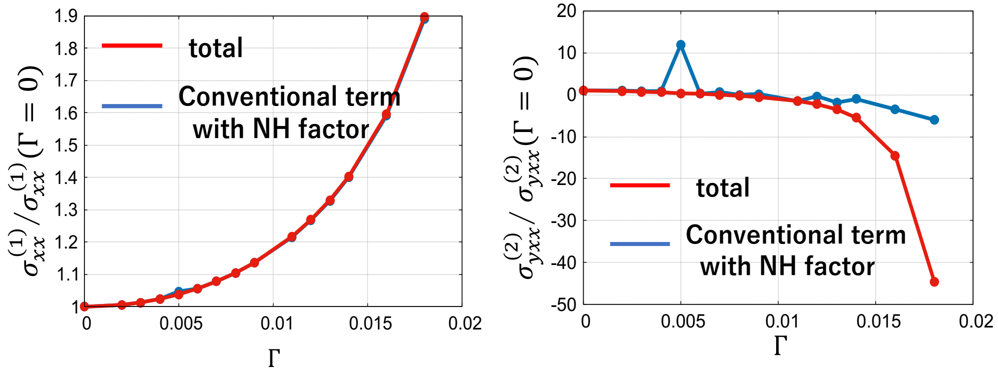
- 巨大な有効質量($\gamma = 10^3$) ▷ 繰り込みの効果

N次の非線形応答は、γ^{n-1}倍に増強される
(特にⅠバンド系についての結果)



- f電子系物質(自由度ごとに散逸の強度が違う) ▷ 非エルミート効果

通常の輸送項が$< n_L|n_L >< n_R|n_R >/|< n_L|n_R >|^2$
だけ増強＋緩和モードの融合に由来する新しい寄与



これから研究する人たちへ(＊若輩者の個人的な意見です)

□ 研究会には行った方が良い

- 発表を聞いた後に知り合いと発表の感想を議論する時間が一番勉強になる
- 質問もできると100点満点

□流行りものをやる際は、流速の遅い(が自分にとって重要な)研究を

- 流行りものの研究をする時、流行り物の中心はすごいスピードで研究が進んでいくのでキャッチアップも大変
- 自分の研究スピードに自信があるor良いアイデアがある場合を除いて、流速のはやい所の研究はお勧めしない
- 流速の遅い所でちゃんと勉強しつつ、自分のペースで研究する方が僕は合ってた

□研究室(外もOK)のスタッフ・先輩をちゃんと頼る

□推しの研究者を作る

- 研究内容というよりは、研究スタイルを真似しよう