“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(2022/06/27)

“非〇〇”物理学入門
～非エルミート・非マルコフ・非線形応答～

中央大学
理化学研究所　　　　道下　佳寛
RIKEN
中央大学セミナー(2022/06/27)

Introduction

◻ 非〇〇物理学

- そもそも「〇〇物理学」とは？
  - 現時点で人類が手出し出来るのは、少数パラメータで性質の良い問題。対象を絞って解析。
    （cf: 凝縮系物理学 … 低温において低エネルギー励起の少数自由度に着目）
  - (多くの場合)ある程度素性が明らかになっている領域でもある

- 「非〇〇物理学」を考えるメリット・デメリット
  - 性質の良さを捨てて、扱える対象を拡げた物理。(性質は良く無いので行き詰まる事も多い)
  - 「〇〇ではない」物理という意味なので、素性はあまり分かっていない
    (ある意味ブルーオーシャン)

▽

究極的には名前が変わるようになる(△△物理学と呼ばれるようになる)まで解明するべき

Introduction

- **本セミナーで考える“〇〇”**
  - **非エルミート** ⇔ エルミート(量子力学)
    - ~~固有値が実~~
    - ~~(有限次元で)対角化可能~~
    - ~~固有状態で正規直交基底が張れる~~
  - **非マルコフ** ⇔ マルコフ(特にGKSL方程式)
    - ~~CPTP性(Kraus演算子で書ける)~~
    - ~~Perron-Frobeniusの定理が使える(定常状態がただ１つある事が担保される)~~
    - ~~考える次元が小さい~~
  - **非線形応答** ⇔ 線形応答
    - ~~Onsagerの相反定理~~

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. まとめ

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. まとめ

非エルミート物理学と開放量子系

□ 非エルミート物理学の対象と目的意識

…(何らかの意味での)開放系。ダイナミクスが有効的に非エルミート行列で表せる系。

➢ Photonics	Gain and loss of photon	Maxwell equation
➢ Cold Atoms	Gain and Loss of atoms (+postselection)	quantum master equation
➢ アクティブマター	Self-propelled force + linearization	Eg) Toner-Tu equation

➢ etc)力学系、Machine Learningなど。(ほとんど全てと言っていい。)

Conventionalな(Hermite系での)物理がどのように変化するか？
上記の広範なtopicを“非エルミート”という観点から統一的に理解できるか？

非エルミート物理学と開放量子系

◻ 非エルミート行列特有の性質

➢ 例外点

… 非エルミート行列が対角化出来ないパラメータ空間上の点(固有状態が縮退)

N次の例外点は一般に $(\delta k)^{\frac{1}{n}}$ の分散を持つ(パラメータの変化に対して鋭敏)

➢ 固有状態の非直交性(biorthogonality) ＋ 非正規性

… 左右の固有状態はそれぞれ自身と直交では無い。

＋ (右右)、(右左)、(左左)の全てのnormを１にするようにに正規化できない

$$H|n_R> = \epsilon_n|n_R> , \quad <n_L|H = \epsilon_n <n_L|, \quad <n_L| \neq (|n_R>)^{\dagger}$$

$$<m_L|n_R> = \delta_{m,n} , \quad <m_L|n_L> (<m_R|n_R>) \neq \delta_{m,n} , \quad <n_R|n_R> = 1, \quad <n_L|n_L> \geq 1$$

非エルミート物理学と開放量子系

□ どんな付随する現象が期待できるか？

➢ 例外点

● センサー感度の向上

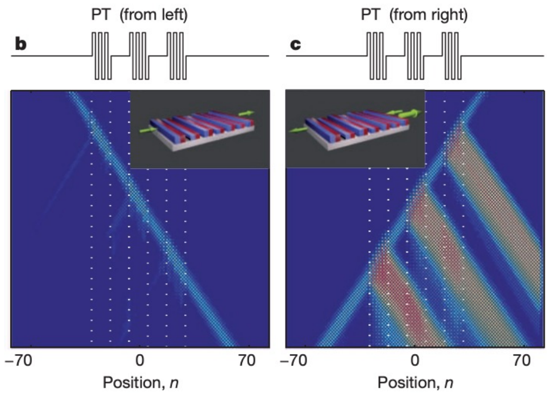
(W. Chen, et al, Nature, **548**,192-196(2017))

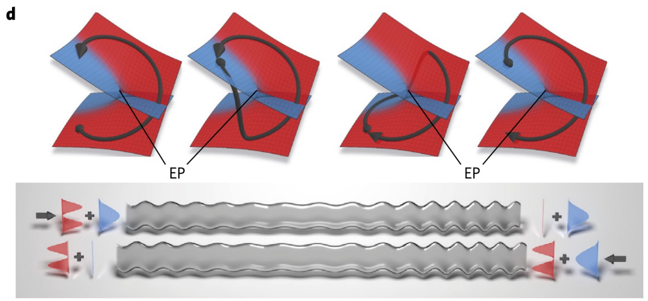
● 光の一方向通過(マジックミラー)

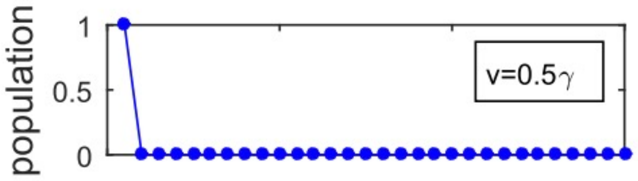
(A. Regensburger, et al, Natue, **488**,67-171(2012))

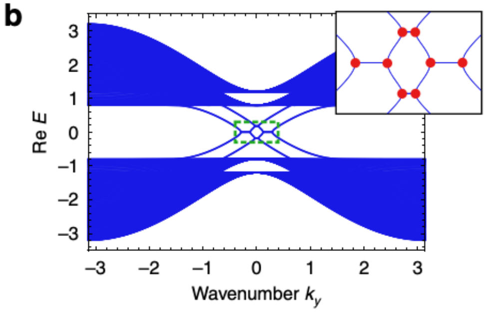
● 特殊なエッジ状態

(K. Sone, et al, Natue commn, 11,1-11(2020))







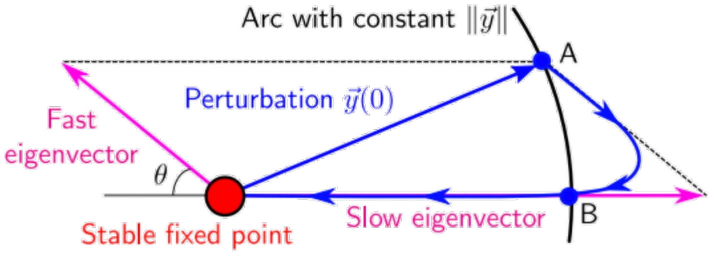


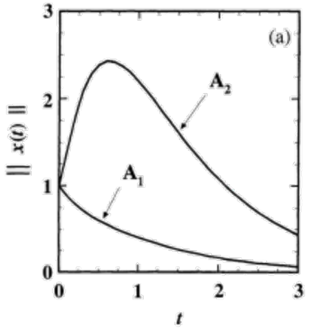
非エルミート物理学と開放量子系

□ どんな付随する現象が期待できるか？

➢ 固有状態の非直交性(biorthogonality) ＋ 非正規性

- **緩和モードの融合**(M.G.Neubert, et al Ecology 87,635-665(1997), T.Biancalani, et al, PRL.118,108101(2017))





- **緩和時間の延長**(T. Haga, et al, PRL:127.070402(2021), T. Mori, and T. Shirai, PRL:125.230604(2020))

$$\frac{d}{dt}\rho = -\mathcal{L}\rho, \quad \mathcal{L}\rho_n = g_n\rho_n, \quad g = (g_0 = 0,\ g_1, g_2, \dots) \quad \text{緩和時間 } \tau = 1/g_1?$$

$$\triangleright \quad \tau_{eff} = \ln(e < n_L | n_L >) / g_1 \qquad \rho(t=0) = \sum_n c_n \rho_n, \quad c_n \propto < n_L | n_L >$$

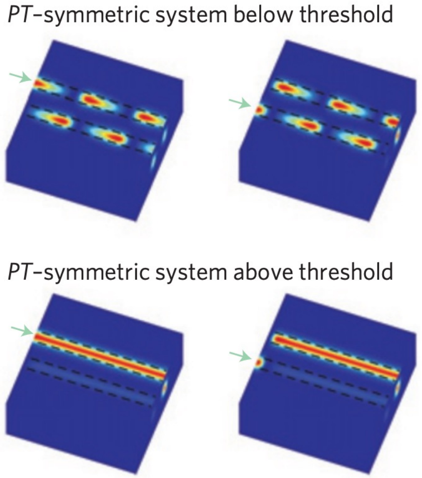
非エルミート物理学と開放量子系

□ 非エルミート系の有用なクラス ～qsuedo Hermiticity～

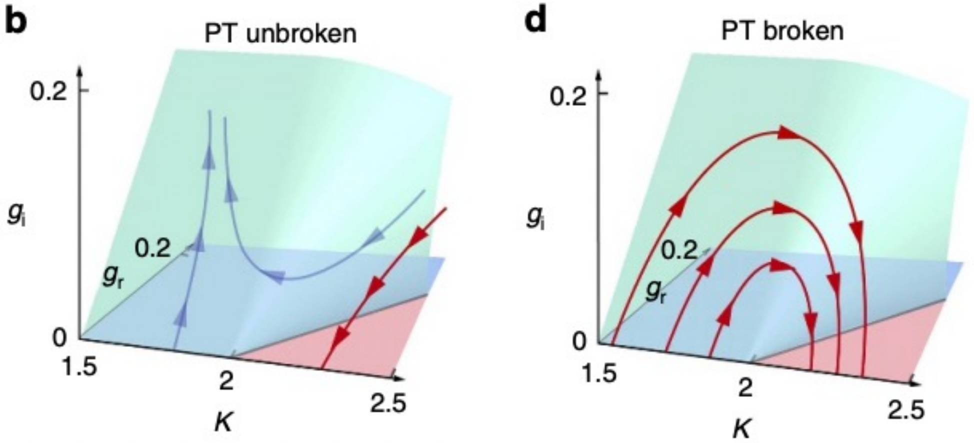
- 定義： $\hat{M}^{\dagger} = \hat{\eta}\hat{M}\hat{\eta}^{-1}$ を満たすηが存在(ηはエルミートかつ逆行列を持つ)

- 性質： 固有値が複素共役のペアを必ず持つ(必要十分条件)
  固有値が実の時、固有状態はηが表す対称性を持ち、複素ペアの時は持たない

- 関連現象： C. E. Ruter, et al, Nat. Phys. 6,192-195(2010)



Y. Ashida, et al, Nat. Commun. 8,15791(2017)



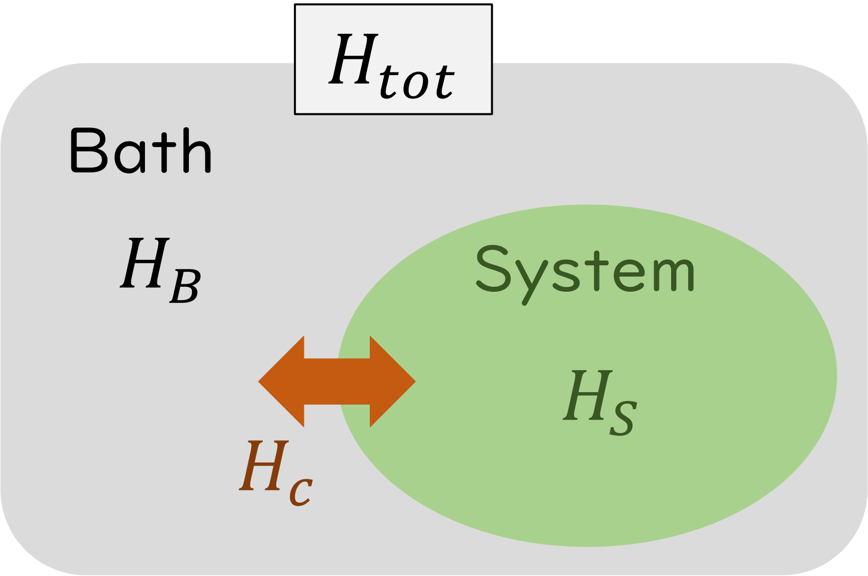
非エルミート物理学と開放量子系

◘ 開放量子系の一般的記述

Von-Neumann equation

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho_{tot}(t) = -i[H_{tot}\,,\rho_{tot}(t)]}$$

$$H_{tot} = H_S + H_B + H_c\,,\quad H_c = \textstyle\sum_a(\gamma_a \mathcal{S}_a \otimes \mathcal{B}_a^\dagger + h.c.)$$



SystemとBathの相関を切る射影： $\mathcal{P}\rho = \mathrm{tr_B}[\rho_{tot}] \otimes \rho_B$

相関がある状態への射影　： $\mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P}$

以降、相互作用描像に移る(^Iは以降省略)： $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\rho_{tot}^I(t) = -i\,[H_c^I(t),\ \rho_{tot}^I(t)] \equiv \mathcal{L}(t)\rho_{tot}^I(t)$

簡単のため以下を仮定： $\mathrm{Tr_B}\left[H_c(t_1)\ldots H_{c(t_{2n+1})}\mathcal{P}\rho\right] = 0 \Leftrightarrow \mathcal{P}\mathcal{L}^{2n+1}\mathcal{P} = 0$

(＊Bathが熱平衡状態でかつ上記が有限の場合は、例えば$\mathcal{B}^\dagger = b^\dagger b$のような形で、平均場のような取り扱いで H_Sに取り込む事が出来る)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\rho_P(t) = \mathcal{P}\mathcal{L}(t)\rho_{tot}(t) = \mathcal{L}_{PQ}(t)\rho_Q(t) \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\rho_Q(t) = \mathcal{Q}\mathcal{L}(t)\rho_{tot}(t) = \mathcal{L}_Q(t)\rho_Q(t) + \mathcal{L}_{QP}(t)\rho_P(t)$$

非エルミート物理学と開放量子系

◻ 弱結合の開放量子系の記述

$$\rho_Q(t) = \rho_Q(t_0) + \int_{t_0}^{t} ds(\mathcal{L}_Q(s)\rho_Q(s) + \mathcal{L}_{QP}(s)\rho_P(s))$$

$$= \left(1 + \int_{t_0}^{t} ds\mathcal{L}_Q(s)\right)\rho_Q(t_0) + \int_{t_0}^{t} ds\mathcal{L}_Q(s)\int_{t_0}^{s} ds_1(\mathcal{L}_Q(s_1)\rho_Q(s_1))$$

$$+ \int_{t_0}^{t} ds\,(1 + \int_{s}^{t} ds_1\mathcal{L}_Q(s_1))\mathcal{L}_{QP}(s)\rho_P(s)$$

＊以下積分の展開を繰り返す

$$= G(t,t_0)\rho_Q(t_0) + \int_{t_0}^{t} dsG(t,s)\mathcal{L}_{QP}(s)\rho_P(s)$$

$$G(t,s) = T_{\rightarrow}\exp[\int_{s}^{t} ds'\mathcal{L}_Q(s')]$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho_P(t) = \mathcal{L}_{PQ}(t)\left\{G(t,t_0)\rho_Q(t_0) + \int_{t_0}^{t} dsG(t,s)\mathcal{L}_{QP}(s)\rho_P(s)\right\}} \simeq \mathcal{L}_{PQ}(t)\int_{t_0}^{t} dsG(t,s)\mathcal{L}_{QP}(s)\rho_P(s)$$

Nakajima-Zwanzig equation

$||H_c||$が十分小さい(systemとbathが弱結合)
とすると、$\mathcal{L}(t)$について最低次を考えれば良い
($G(t,s) \simeq 1$と近似)

量子マスター方程式(quantum master equation)

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\int_{t_0}^{t} ds\,Tr[H_c(t),[H_c(s),\rho_S(s)\otimes\rho_B]]}$$

一般に部分系の時間発展を知るためには、部分系の状態の時系列の情報が必要！(non-Markovness)

非エルミート物理学と開放量子系

□ Markov近似で見えるもの

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -\int_{t_0}^{t} ds\, Tr[H_c(t), [H_c(s), \rho_S(s)]]$$

量子マスター方程式(quantum master equation)

Markov近似($t_0 \to -\infty, \rho_s(s) \simeq \rho_s(t)$)
: 長時間極限(steady stateの近く) or $\gamma^2\tau_B \ll 1$(弱結合 or Bathの相関時間小)

$$\frac{d}{dt}\rho_S^I(t) = \sum_{a,b}\left\{\frac{\gamma_{g(ab)}e^{i(\xi_a-\xi_b)t}}{2}\left[\{\mathcal{S}_a\mathcal{S}_b^\dagger, \rho_S^I(t)\} - 2\mathcal{S}_b^\dagger\rho_S^I(t)\mathcal{S}_a\right] + \frac{\gamma_{l(ab)}e^{-i(\xi_a-\xi_b)t}}{2}\left[\{\mathcal{S}_a^\dagger\mathcal{S}_b, \rho_S^I(t)\} - 2\mathcal{S}_b\rho_S^I(t)\mathcal{S}_a^\dagger\right]\right\}$$

Redfield方程式

$$\gamma_{g(ab)} = \gamma_a\gamma_b^* \int_0^\infty dse^{i\xi_a s}\mathrm{tr_B}\left[\mathcal{B}_a^\dagger(s)\mathcal{B}_b\rho_B\right], \qquad \gamma_{l(ab)} = \gamma_a^*\gamma_b \int_0^\infty dse^{-i\xi_a s}\mathrm{tr_B}\left[\mathcal{B}_a(s)\mathcal{B}_b^\dagger\rho_B\right]$$

(正確には、この式からKMS条件を用いてより簡素にした$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = -i[H_s, \rho_s(t)] - \sum_k[X_k,\ R_k\rho_S(t) - \rho_s(t)R_k^\dagger]$ の事を言う。)

回転波近似($\Delta\tau \gg 1$, Δはシステムギャップ, τはシステムの緩和時間。ある種の時間スケールの粗視化)

$$\frac{d}{dt}\rho_S^I(t) = \sum_{k}\left\{\frac{\gamma'_{g(k)}}{2}\left[\{\mathcal{S}_k\mathcal{S}_k^\dagger, \rho_S^I(t)\} - 2\mathcal{S}_k^\dagger\rho_S^I(t)\mathcal{S}_k\right] + \frac{\gamma'_{l(k)}}{2}\left[\{\mathcal{S}_k^\dagger\mathcal{S}_k, \rho_S^I(t)\} - 2\mathcal{S}_k\rho_S^I(t)\mathcal{S}_k^\dagger\right]\right\}$$

GKSL方程式
(Lindblad方程式)

▷ $$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = -i[H_S, \rho_s(t)] + \sum_k\{\frac{\gamma_{g,k}}{2}[\{S_kS_k^\dagger, \rho_s(t)\} - 2S^\dagger\rho_s(t)S] + \frac{\gamma_{l,k}}{2}[\{S_k^\dagger S_k, \rho_s(t)\} - 2S\rho_s(t)S^\dagger]\}$$

非エルミート物理学と開放量子系

GKSL自体を非エルミート行列とみなす場合

- Bathにくっついている２準位系を考える

$\rho_S(t) = a(t)|e><e| + b(t)|g><g| + c(t)|e><g| + d(t)|g><e|$ 　　($|e> = S^\dagger|g>$とする)
(密度演算子の条件として、$a(t) + b(t) = 1$ ($\mathrm{Tr}[\rho_S(t)] = 1$), $c(t) = d^*(t)$)

$\rho_S(t)$をベクトル表示(doubled Hilbert spaceで考えている事と透過)：$\overrightarrow{\rho_S(t)} = \left(a(t), b(t), c(t), c^*(t)\right)^T$

$H_S = 0|g><g| + \Omega|e><e|,\ \gamma_g = -e^{-\beta\Omega}/(1+e^{-\beta\Omega}),\ \gamma_l = -1/(1+e^{-\beta\Omega})$ 　　(βはBathの逆温度)

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_S, \rho_S(t)] + \sum_k \{\frac{\gamma_{g,k}}{2}[\{S_k S_k^\dagger, \rho_S(t)\} - 2S^\dagger\rho_S(t)S] + \frac{\gamma_{l,k}}{2}[\{S_k^\dagger S_k, \rho_S(t)\} - 2S\rho_S(t)S^\dagger]\}$$

$$\frac{d}{dt}\overrightarrow{\rho_S(t)} = \begin{pmatrix} -\gamma_l & \gamma_g & \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{0}} \\ \gamma_l & -\gamma_g & & \\ \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{\boxed{0}}} & -i\Omega & 0 \\ & & 0 & i\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \\ c(t) \\ c^*(t) \end{pmatrix}$$

Traceに関わる部分

H_cの奇数次のtraceをゼロとした帰結

Traceに関わらず、初期状態から位相のみ変化させる

非エルミート物理学と開放量子系

GKSLを行列表示したものの性質

$$\frac{d}{dt}\overrightarrow{\rho_s(t)} = \begin{pmatrix} -\gamma_l & \gamma_g & & \\ \gamma_l & -\gamma_g & & 0 \\ & & -i\Omega & 0 \\ & 0 & 0 & i\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \\ c(t) \\ c^*(t) \end{pmatrix}$$

▷ $$\frac{d}{dt}\overrightarrow{\rho_{S;T}(t)} = \begin{pmatrix} \boxed{\begin{matrix} -\gamma_l \\ \gamma_l \end{matrix}} & \begin{matrix} \gamma_g \\ -\gamma_g \end{matrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

列の和は必ずゼロ(任意の状態のTraceを保存するためにはこの条件が必要になる)
この行列の固有値は必ず０以下となる(正の値を持つとTraceが保存しないor a(t),b(t)が負の値を取る)

この性質ゆえに、GKSLの行列表示は必ず左固有状態 $< SS_L| = (\frac{1}{N}, \dots, \frac{1}{N})$ を持ち、その固有値はゼロとなる($N = size(\overrightarrow{\rho_{S;T}})$)
=>　固有値がゼロの右固有状態も存在(Perron-Frobeniusより、固有値がゼロの右固有状態はただ一つ=定常状態が一意)

＊ちなみに$|SS_R> = (e^{-\beta\Omega}/(1+e^{-\beta\Omega}), 1/(1+e^{-\beta\Omega}))$ となり、定常状態は逆温度βの熱平衡状態となる。
（熱浴の温度と等しい熱平衡状態になるので、ある種当たり前。）

非エルミート物理学と開放量子系

□ 非エルミート有効ハミルトニアンの導出

$$\boxed{\frac{d}{dt}\rho_S^I(t) = \sum_k \left\{ \frac{\gamma'_{g(k)}}{2} \left[\{\mathcal{S}_k \mathcal{S}_k^\dagger, \rho_S^I(t)\} - 2\mathcal{S}_k^\dagger \rho_S^I(t) \mathcal{S}_k \right] + \frac{\gamma'_{l(k)}}{2} \left[\{\mathcal{S}_k^\dagger \mathcal{S}_k, \rho_S^I(t)\} - 2\mathcal{S}_k \rho_S^I(t) \mathcal{S}_k^\dagger \right] \right\}}$$

GKSL方程式
(Lindblad方程式)

Bathに射影測定を行う　　$Tr_B[\mathcal{L}(t_n)\mathcal{L}(t_m)\rho_B] \;\rightarrow\; Tr_B[\mathcal{P}_A(\mathcal{L}(t_n)\mathcal{L}(t_m)\rho_B)]$

射影測定の種類・結果によっては

$\mathcal{P}_A\left(\mathcal{B}(t_n)\rho_B\mathcal{B}^\dagger(t_m)\right) \otimes \mathcal{S}^\dagger(t_n)\rho_S(t_n)\mathcal{S}(t_m) = 0$　(gainの項がゼロ)

$\mathcal{P}_A\left(\mathcal{B}^\dagger(t_n)\rho_B\mathcal{B}(t_m)\right) \otimes \mathcal{S}(t_n)\rho_S(t_n)\mathcal{S}^\dagger(t_m) = 0$　(lossの項がゼロ)

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho'_S(t) = -i\left\{\mathcal{H}_{eff}\rho'_S(t) - \rho'_S(t)\mathcal{H}_{eff}^\dagger\right\}}$$

ここまでの話の参考文献

◻ 非エルミート行列の性質やpseudo Hermiticity

- Y. Ashida, Advances in Physics: 69,3,249-435(2021)

◻ 量子マスター方程式の導出

- H. P. Breuer “The Theory of Open Quantum Physics”。
沙川・上田のSGC本はGKSLまで簡潔かつ天下り的に導出するがどういう近似・領域を考えてるのか分かりにくいかも

◻ GKSLまでの落とし方

- 森貴司さんの講義ノートが詳細かつ分かりやすい(https://drive.google.com/file/d/1kIO-FOECVftg8b8Bb0KxFo1y_o0W-RbL/view, 28P～32Pの部分)

◻ 非マルコフ性の定量的な指標(セミナー後の議論での話)

- H. P. Breuer, et al, arXiv:1505.01385(2015)(7P～9P,Eq(34))

来週の予定

- 簡単な(?)例として力学系を提示し、力学系における変数消去とマルコフ近似の関係性を確認
- 少し発展させ繰り込み群の処方を開放系の観点から捉え直す
- Green関数の自己エネルギーの表現と開放系の関係を学ぶ
- 非マルコフな問題についての個人的お気持ち表明
- 非線形応答と強相関系