統計力学特論レポート

g1840624 鷲津 優維

2019/01/31

1

1.1　問い

密度行列 ρ が純粋状態を表すためには、等号 $\rho^2 = \rho$ が成り立つことが必要かつ十分であることを示せ。

1.2　解

1.2.1　純粋状態（$\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$）$\rightarrow \rho^2 = \rho$ が成立することを示す

$$
\begin{aligned}
\rho^2 &= |\phi\rangle\langle\phi|\phi\rangle\langle\phi| \\
&= |\phi\rangle\langle\phi| \\
&= \rho
\end{aligned}
$$

なので、成立。

1.2.2　純粋状態 $\leftarrow \rho^2 = \rho$ が成立することを示す

混合状態の密度行列は $\rho = \sum_j \Pi_j |\phi\rangle\langle\phi|$ なので、

$$
\begin{aligned}
\rho^2 &= \left(\sum_j \Pi_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\right)^2 \\
&= \left(\sum_j \Pi_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\right) \times \left(\sum_k \Pi_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|\right) \\
&= \sum_j \sum_k \delta_{jk}\Pi_j\Pi_k |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\phi_k\rangle\langle\phi_k| \\
&= \sum_j \Pi_j^2 |\phi_j\rangle\langle\phi_j| \\
&= |\phi\rangle\langle\phi| \\
&= \rho
\end{aligned}
$$

2

2.1　問い

規格化された 2 つの線形独立なベクトル $|a\rangle$、$\langle b|$ と実パラメータ λ を用いて、演算子 $\rho = (1-\lambda)\,|a\rangle\,\langle a| + \lambda\,|b\rangle\,\langle b|$ を定義する。ただし、$\langle a|b\rangle \neq 0$ と仮定。このとき、演算子 ρ が量子状態を表すためにパラメータ λ が満たすべき条件と演算子 ρ が純粋状態を表すための条件を求めよ。

2.2　解

演算子 ρ が量子状態を表すとき、任意の状態ベクトル $|\phi\rangle$ に対して、$\langle\rho\rangle \geq 0$

$$\begin{aligned}\langle\phi|\,\rho\,|\phi\rangle &= (1-\lambda)\,\langle\phi|a\rangle\,\langle a|\phi\rangle + \lambda\,\langle\phi|b\rangle\,\langle b|\phi\rangle \\ &= (1-\lambda)|\,\langle\phi|a\rangle\,|^2 + \lambda|\,\langle\phi|b\rangle\,|^2\end{aligned}$$

1 $|\,\langle\phi|a\rangle\,|^2 \geq 0$、$|\,\langle\phi|b\rangle\,|^2 \geq 0$ なので以上より、

$$\begin{cases}1-\lambda \geq 0 \\ \lambda \geq 0\end{cases}$$

すなわち、$0 \leq \lambda \leq 1$ が必要条件。
また、純粋条件を表すための条件は $\rho^2 = \rho$ なので、

$$\begin{aligned}\rho^2 &= (1-\lambda)^2\,|a\rangle\,\langle a|a\rangle\,\langle a| + (1-\lambda)\lambda\,|a\rangle\,\langle a|b\rangle\,\langle a| \\ &\quad +(1-\lambda)\lambda\,|b\rangle\,\langle b|a\rangle\,\langle a| + \lambda^2\,|b\rangle\,\langle b|b\rangle\,\langle b| \\ &= (1-\lambda)^2\,|a\rangle\,\langle a| + (1-\lambda)\lambda\,(|a\rangle\,\langle a|b\rangle\,\langle b| + |b\rangle\,\langle b|a\rangle\,\langle a|)\,\lambda^2\,|b\rangle\,\langle b|\end{aligned}$$

$$\rho = (1-\lambda)\,|a\rangle\,\langle a| + \lambda\,|b\rangle\,\langle b|$$

以上より、

$$\begin{cases}(1-\lambda)^2 = 1-\lambda \\ \lambda^2 = \lambda \\ (1-\lambda)\lambda = 0\end{cases}$$

すなわち、$\lambda = 0, 1$ が必要な条件となる。

3

3.1　問い

次の式で与えられる 4×4 行列が量子状態を表すための条件を求めよ。

$$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 & x \\ 0 & b & y & 0 \\ 0 & z & c & 0 \\ w & 0 & 0 & d \end{pmatrix} = \rho$$

3.2 解

必要な条件は以下の 4 つ

$$\begin{cases} \rho^\dagger = \rho \\ \mathrm{Tr}\left[\rho\right] = 1 \\ \mathrm{Tr}\left[\rho^2\right] \geq 1 \\ \text{固有値が正} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & x \\ 0 & b & y & 0 \\ 0 & z & c & 0 \\ w & 0 & 0 & d \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & x \\ 0 & b & y & 0 \\ 0 & z & c & 0 \\ w & 0 & 0 & d \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a^2+xw & 0 & 0 & (a+d)x \\ 0 & b^2+yz & (b+c)y & 0 \\ 0 & (b+c)z & c^2+yz & 0 \\ (a+d)w & 0 & 0 & d^2+xw \end{pmatrix} \end{aligned}$$

なので、$\mathrm{Tr}[\rho^2]$ は

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}[\rho^2] &= a^2+xw+b^2+yz+yz+c^2+xw+d^2 \\ &= a^2+b^2+c^2+d^2+2xw+2yz \geq 1 \end{aligned}$$

すなわち、以下のように書き直せる。

$$\begin{cases} \text{全ての成分がエルミート共役} \\ a+b+c+d = 1 \\ a^2+b^2+c^2+d^2+2xw+2yz \geq 1 \\ \text{固有値が正} \end{cases}$$

4

4.1 問い

大きさ 1/2 のスピンの状態を表す密度行列 $\rho(t)$ の時間発展が次の量子マスター方程式によって決定される場合を考える。

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -\frac{i}{2}\omega[\sigma_z, \rho(t)] + \gamma[\sigma_x\rho(t)\sigma_z - \rho(t)]$$

ここで、ω と γ は正の定数、σ_z はスピンの z 成分を表すパウリ行列である。また、初期時刻は $t=0$ とする。初期時刻での密度行列を $\rho(0)$ として、この方程式の解 $\rho(t)$ を求め、スピンがどのような運動をするのか説明せよ。

4.2 解

密度行列は、

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \frac{1}{2}(I+\vec{a}(t)\cdot\vec{\sigma}) \\ &= \frac{1}{2}+\frac{1}{2}a_z(t)\cdot\sigma_z + a(t)\sigma_- + a^*(t)\sigma_+ \end{aligned}$$

$$
\begin{cases}
\langle\sigma_+(t)\rangle = \mathrm{Tr}[\sigma_+\rho(t)] = a(t) \\
\langle\sigma_-(t)\rangle = \mathrm{Tr}[\sigma_+\rho(t)] = a^*(t)
\end{cases}
$$

以上より、σ_+、σ_-、σ_z それぞれの期待値を求めれば、時刻 t での状態がわかる。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\langle\sigma_+\rangle &= \mathrm{Tr}\left[\sigma_+\frac{\partial}{\partial t}\rho(t)\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\sigma_+\cdot -\frac{i}{2}\omega[\sigma_z,\rho(t)] + \gamma[\sigma_x\rho(t)\sigma_z - \rho(t)]\right] \\
&= -\frac{i}{2}\mathrm{Tr}\left[\sigma_+[\sigma_z,\rho(t)]\right] + \gamma\mathrm{Tr}\left[\sigma(\sigma_z\rho\sigma_z - \rho(t))\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\left[\sigma_+\left[\sigma_z,\rho(t)\right]\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\sigma_+\sigma_z\rho(t) - \sigma_+\rho(t)\sigma_z\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\sigma_+ 2\sigma_+\sigma_-\rho(t) - \sigma_+\rho(t) - \sigma_+\rho(t)2\sigma_+\sigma_- + \sigma_+\rho(t)\right] \\
&= -2\langle\sigma_+(t)\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\left[\sigma_+\left(\sigma_z\rho(t)\sigma_z - \rho(t)\right)\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\sigma_+\sigma_z\rho(t)\sigma_z - \sigma_+\rho(t)\right] \\
&= -2\langle\sigma_+(t)\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= 2\cdot\frac{i}{2}\omega\langle\sigma_+(t)\rangle - 2\gamma\langle\sigma_+(t)\rangle \\
&= (i\omega - 2\gamma)\langle\sigma_+(t)\rangle
\end{aligned}
$$

同様に、

$$
\frac{\partial}{\partial t}\langle\sigma_-\rangle = (i\omega - 2\gamma)\langle\sigma_-(t)\rangle
$$

また、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\langle\sigma_z\rangle &= \mathrm{Tr}\left[\sigma_z\frac{\partial}{\partial t}\rho(t)\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[-\frac{i\omega}{2}(\rho(t) - \sigma_z\rho(t)\sigma_z) + (\rho(t)\sigma_z - \sigma_z\rho(t)\right] \\
&= \frac{i\omega}{2}(\mathrm{Tr}(\rho(t)) - \mathrm{Tr}[\sigma_z\rho(t)\sigma_z]) + \gamma(\mathrm{Tr}[\rho(t)\sigma_z] - \mathrm{Tr}[\sigma_z\rho(t)]) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

以上より、それぞれを $t=0$ の状態を用いて表すと、

$$
\begin{aligned}
\langle\sigma_+\rangle &= e^{(i\omega-2\gamma)t}\langle\sigma_+(0)\rangle = e^{(i\omega-2\gamma)t}\mathrm{Tr}\left[\sigma_+\rho(0)\right] = a(t) \\
\langle\sigma_-\rangle &= e^{(i\omega-2\gamma)t}\langle\sigma_-(0)\rangle = e^{(i\omega-2\gamma)t}\mathrm{Tr}\left[\sigma_-\rho(0)\right] = a^*(t) \\
\langle\sigma_z\rangle &= 0
\end{aligned}
$$

なので、以上より、密度行列 $\rho(t)$ は以下のように求められる。

$$
\begin{aligned}
\rho(t) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\langle\sigma_z(t)\rangle\cdot\sigma_z + \langle\sigma_+(t)\cdot\rangle\sigma_z + \langle\sigma_-(t)\cdot\rangle\sigma_z \\
\rho(t) &= \frac{1}{2} + \left(e^{(i\omega-2\gamma)t}\mathrm{Tr}\left[\sigma_+\rho(0)\right]\right)\cdot\sigma_- + \left(e^{(i\omega-2\gamma)t}\mathrm{Tr}\left[\sigma_-\rho(0)\right]\right)\cdot\sigma_+
\end{aligned}
$$

シュレディンガー描像で書くと、

$$\rho(t)=\frac{1}{2}+\left(e^{(i\omega-2\gamma)t}\mathrm{Tr}\left[\sigma_+\rho(0)\right]\right)\cdot\sigma_-e^{-i\omega t}+\left(e^{(i\omega-2\gamma)t}\mathrm{Tr}\left[\sigma_-\rho(0)\right]\right)\cdot\sigma_+e^{-i\omega t}$$

5

5.1 問い

ハミルトニアン H のシステムが熱平衡状態にある。このシステムに十分に弱い静的な害ば F をかけて十分に時間が経過したあとと考える。ただし、外場とシステムの相互作用ハミルトニアンを $H=-FX$ とする。X はシステムの物理量である。このとき、線形応答理論を用いて、外場 F が物理量 X の平均値に及ぼす影響を調べよ。

5.2 解

熱平衡状態にかけた外場は、弱い外場なので、温度は変化せず、ハミルトニアンのみ微小変化するとする。外場をかける前の密度行列を

$$\rho=\frac{1}{Z}e^{-\beta H}\,(\beta=1/k_BT)$$

外場をかけた後の密度行列を

$$\rho'=\frac{1}{Z}e^{-\beta H'}\,(H'=H-FA)$$

と書くと、

$$e^{-\beta(H-FX)}=e^{-\beta H}+\int_0^\beta d\lambda e^{-(\beta-\lambda)H}Xe^{-\lambda H}F$$

積分の部分が 1 次の項、2 重積分の項、3 重積分の項と出てくるが、今回は線形応答理論なので、1 次の項まで考えればよい。

$$\begin{aligned}Z' &= \mathrm{Tr}e^{-\beta(H-FX)}\\ &= Z+\beta\mathrm{Tr}(e^{-\beta H}A)F\\ &= Z+\beta Z\langle A\rangle F\end{aligned}$$

以上の 2 式を ρ' の式に代入すると、

$$\begin{aligned}\rho' &= \frac{1}{Z(1+\beta\langle A\rangle F)}e^{-\beta H}\left[1+\int_0^\beta d\lambda e^{-(\beta-\lambda)H}Xe^{-\lambda H}F\right]\\ &\simeq \rho\left[1+\int_0^\beta d\lambda e^{\lambda H}Ae^{\lambda H}F-\beta\langle A\rangle F\right]\end{aligned}$$

以上より、外場 F が物理量 X の平均値 $\langle X\rangle$ に与える影響は差を比較すると、

$$\begin{aligned}\Delta\langle X\rangle &= \langle X\rangle'-\langle X\rangle\\ &= \mathrm{Tr}(X\rho')-\mathrm{Tr}(X\rho)\\ &= \left[\int_0^\beta d\lambda\mathrm{Tr}\rho e^{\lambda H}Ae^{-\lambda H}X-\beta\langle A\rangle\langle X\rangle\right]F\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
\langle A;B\rangle &= \frac{1}{\beta}\frac{\int_0^\beta \mathrm{Tr}\left[e^{-(\beta-\lambda)H}Ae^{-\lambda H}B\right]d\lambda}{\mathrm{Tr}e^{-\beta H}} \\
&= \frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\lambda \mathrm{Tr}\left[\rho e^{\lambda H}Ae^{-\lambda H}B\right] \\
\langle B;A\rangle &= \frac{1}{\beta Z}\int_0^\beta d\lambda \mathrm{Tr}\left[\rho e^{-(\beta-\lambda)H}Be^{-\lambda H}A\right] \\
&= \langle A;B\rangle
\end{aligned}$$

なので、

$$\begin{aligned}
\Delta\langle X\rangle &= \left[\int_0^\beta d\lambda \mathrm{Tr}\rho e^{\lambda H}Ae^{-\lambda H}X-\beta\langle A\rangle\langle X\rangle\right]F \\
&= \beta\langle(A-\langle A\rangle)\,;(X-\langle X\rangle)\rangle F
\end{aligned}$$

以上のようになる。
例えば、磁場 $H_{\mathrm{ext}}=-HM$（H：磁場、M：磁気モーメント）とすると、

$$\begin{aligned}
\Delta\langle M\rangle &= \chi_{MH}H \\
\chi_{MH} &= \beta\langle(H-\langle H\rangle)\,;(M-\langle M\rangle)\rangle
\end{aligned}$$

となり、χ_{MH} は磁化率で、磁気モーメントのカノニカル相関を表すものとなる。