量子系における確率熱力学

大上由人

2025 年 10 月 23 日

Yoshimura-Maekawa-Nagayama-Ito および大賀さんのトークのスライドを参考に量子系の確率熱力学をまとめる。

1 GKSL 方程式

GKSL 方程式

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -i[H,\rho] + \sum_{\mu\in\mathcal{L}_L} D_\mu[\rho] \tag{1.1}$$

$$D_\mu[\rho] = \sum_{\mu\in\mathcal{L}_L} [\gamma_\mu^+ (L_\mu \rho L_\mu^\dagger - \frac{1}{2}\{L_\mu^\dagger L_\mu, \rho\}) + \gamma_\mu^- (L_\mu^\dagger \rho L_\mu - \frac{1}{2}\{L_\mu L_\mu^\dagger, \rho\})] \tag{1.2}$$

である。ただし、$\gamma_\mu^\pm \in \mathbb{R}$ はパラメータ、L_μ は jump op. である。また、$\mu \in \mathcal{L}_L$ は jump の添字である。Hamiltonian は

$$H = \sum_{\mu\in\mathcal{L}_H} (\zeta_\mu^* V_\mu + \zeta_\mu V_\mu^\dagger) \tag{1.3}$$

と表される。また、$\mathcal{L} = \mathcal{L}_L \cup \mathcal{L}_H$ とし、[*1] S_μ を

$$S_\mu = \begin{cases} L_\mu & (\mu \in \mathcal{L}_L) \\ V_\mu & (\mu \in \mathcal{L}_H) \end{cases} \tag{1.4}$$

と定義する。

2 カレント

Observable current と呼ばれる量を考える。

[*1] 便宜のため $\mathcal{L}_L \cap \mathcal{L}_H = \emptyset$ とする。

Def.Observable current

jump に対応する Observable current は

$$Q_\mu(\rho) = \gamma_\mu^+ \operatorname{Tr}\big[L_\mu^\dagger L_\mu \rho\big] - \gamma_\mu^- \operatorname{Tr}\big[L_\mu L_\mu^\dagger \rho\big] \tag{2.1}$$

で定義される。また、Hamiltonian に対応する Observable current は

$$Q_\mu(\rho) = \operatorname{Tr}\big[\rho(-i\zeta_\mu V_\mu^\dagger + i\zeta_\mu^* V_\mu)\big] \tag{2.2}$$

で定義される。また、全 Observable current は

$$\vec{Q}(\rho) = \{Q_\mu(\rho)\}_{\mu \in \mathcal{L}_L \cup \mathcal{L}_H} \tag{2.3}$$

と表される。

jump に対応する Observable current は単位時間当たりの jump μ の正味の発生回数に対応する。また、Hamiltonian に対応する Observable current は我々がよく知っているカレント (粒子流、電流など) に対応する。[*2]

また、Dynamical current と呼ばれる量も考えることができる。

Def.Dynamical current

jump に対応する Dynamical current は

$$J_\mu(\rho) = \frac{1}{2}(\gamma_\mu^+ L_\mu \rho - \gamma_\mu^- \rho L_\mu) \tag{2.4}$$

で定義される。また、Hamiltonian に対応する Dynamical current は

$$J_\mu(\rho) = i\zeta_\mu(\Pi_\mu^+ \rho + \rho \Pi_\mu^- - \Pi_\mu^+ \rho \Pi_\mu^-) \tag{2.5}$$

で定義される。ただし、Π_μ^+ は $\operatorname{Im} V_\mu$ への射影演算子であり、Π_μ^- は $\operatorname{Im} V_\mu^\dagger$ への射影演算子である。

これらは Observable current よりも抽象的な定義であるが[*3]、これらは時間発展や Observable current を表現するのに便利である。実際、以下の関係式を示すことができる。

Thm.

時間発展や Observable current は Dynamical current を用いて以下のように表される。

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \sum_{\mu \in \mathcal{L}} \big([J_\mu(\rho), S_\mu^\dagger] - [J_\mu^\dagger(\rho), S_\mu]\big) \tag{2.6}$$

$$Q_\mu(\rho) = \operatorname{Tr}\big[J_\mu^\dagger(\rho) S_\mu\big] + \operatorname{Tr}\big[J_\mu(\rho) S_\mu^\dagger\big] \tag{2.7}$$

[*2] ほげほげ

[*3] 定義自体は GKSL 方程式での最適輸送から持ち込んでいるらしい。要確認？

Prf.

$$
\begin{aligned}
[J_\mu(\rho), V_\mu^\dagger] &= i\zeta_\mu \left[\Pi_\mu^+ \rho (1-\Pi_\mu^-) + \rho \Pi_\mu^-\right] V_\mu^\dagger + i V_\mu^\dagger \left[\Pi_\mu^+ \rho + (1-\Pi_\mu^+)\rho V_\mu^-\right] && (2.8)\\
&= i\zeta_\mu (\rho V_\mu^\dagger - V_\mu^\dagger \rho) && (2.9)\\
&= i\zeta_\mu [\rho, V_\mu^\dagger] 1 && (2.10)
\end{aligned}
$$

を用いることで、

$$
[J_\mu(\rho), V_\mu^\dagger] - [J_\mu^\dagger(\rho), V_\mu] = -i[\zeta_\mu V_\mu^\dagger + \zeta_\mu^* V_\mu, \rho] \tag{2.11}
$$

が得られる。また、

$$
[J_\mu(\rho), L_\mu^\dagger] = \frac{1}{2}\gamma_\mu^+ (L_\mu \rho L_\mu^\dagger - L_\mu^\dagger L_\mu \rho) + \frac{1}{2}\gamma_\mu^- (L_\mu^\dagger \rho L_\mu - \rho L_\mu L_\mu^\dagger) \tag{2.12}
$$

を用いることで、

$$
[J_\mu(\rho), L_\mu^\dagger] - [J_\mu^\dagger(\rho), L_\mu] = \gamma_\mu^+ \left(L_\mu \rho L_\mu^\dagger - \frac{1}{2}\{\rho, L_\mu^\dagger L_\mu\} \right) + \gamma_\mu^- \left(L_\mu^\dagger \rho L_\mu - \frac{1}{2}\{\rho, L_\mu L_\mu^\dagger\} \right) \tag{2.13}
$$

が得られる。これらを合わせることで、時間発展の表式が得られる。 □

3　内積構造

上で導いた時間発展の表式は双対構造を誘導する。dynamical current の空間とエルミート演算子の空間のそれぞれで内積を導入する。dynamical current の空間 $\mathfrak{J} := \mathrm{opr}(H)^{\mathcal{L}} \ni \mathbb{A}, \mathbb{B}$ 上の内積を

$$
\langle \mathbb{A}, \mathbb{B} \rangle := \sum_{\mu\in\mathcal{L}} \left(\mathrm{Tr}\left[A_\mu^\dagger B_\mu\right] + \mathrm{Tr}\left[A_\mu B_\mu^\dagger\right] \right) \in \mathbb{R} \tag{3.1}
$$

で定義する。[*4] また、エルミート演算子の空間 Herm(H) $\ni A, B$ 上の内積を

$$
\langle A, B \rangle := \mathrm{Tr}[AB] \in \mathbb{R} \tag{3.2}
$$

で定義する。

ここで、グラディエント $\nabla_{\mathbb{S}} : \mathrm{Herm}(H) \to \mathbb{J}$ を、

$$
\nabla_{\mathbb{S}} A = \{[A, S_\mu]\}_{\mu\in\mathcal{L}} \tag{3.3}
$$

と定義する。また、ダイバージェンス $\nabla_{\mathbb{S}}^* : \mathbb{J} \to \mathrm{Herm}(H)$ を、

$$
\nabla_{\mathbb{S}}^* \mathbb{A} = \sum_{\mu\in\mathcal{L}} \left([A_\mu, S_\mu^\dagger] - [A_\mu^\dagger, S_\mu] \right) \tag{3.4}
$$

[*4] 実数になってくれるのは $\mathrm{Tr}[X] = \mathrm{Tr}[X]^*$ と $z + z^* \in \mathbb{R}$ が成り立つため。

と定義する。このとき、これらは双対であることが示される。
$(\because)$

$$\langle \nabla_{\mathbb{S}} A, \mathbb{B} \rangle = \sum_{\mu \in \mathcal{L}} \left(\mathrm{Tr}\left[[A, S_\mu]^\dagger B_\mu \right] + \mathrm{Tr}\left[[A, S_\mu] B_\mu^\dagger \right] \right) \tag{3.5}$$

$$= \sum_{\mu \in \mathcal{L}} \left(\mathrm{Tr}\left[S_\mu^\dagger A - A S_\mu^\dagger \right] B_\mu + \mathrm{Tr}[A S_\mu - S_\mu A] B_\mu^\dagger \right) \tag{3.6}$$

$$= \sum_{\mu \in \mathcal{L}} \left(\mathrm{Tr}\left[A (B_\mu S_\mu^\dagger - S_\mu^\dagger B_\mu) \right] + \mathrm{Tr}\left[A (S_\mu B_\mu^\dagger - B_\mu^\dagger S_\mu) \right] \right) \tag{3.7}$$

$$= \mathrm{Tr}\left[A \sum_{\mu \in \mathcal{L}} \left([B_\mu, S_\mu^\dagger] - [B_\mu^\dagger, S_\mu] \right) \right] \tag{3.8}$$

$$= \langle A, \nabla_{\mathbb{S}}^* \mathbb{B} \rangle \tag{3.9}$$

□

このもとで、時間発展は

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \nabla_{\mathbb{S}}^* \mathbb{J}(\rho) \tag{3.10}$$

と表される。

4 詳細つり合い条件の下での EPR

以下、局所詳細つりあい条件

$$k_{\mathrm{B}} \ln \frac{\gamma_\mu^+}{\gamma_\mu^-} = \sigma_\mu \tag{4.1}$$

を仮定する。このとき、着目系/環境系/全体の EPR を以下のように定義する:

$$\dot{\sigma}_{\mathrm{sys}} = -k_{\mathrm{B}}\, \mathrm{Tr}[\dot{\rho}(t) \ln \rho(t)] \tag{4.2}$$

$$\dot{\sigma}_{\mathrm{bath}} = \sum_{\mu \in \mathcal{L}_L} \sigma_\mu Q_\mu(\rho(t)) \tag{4.3}$$

$$\dot{\sigma}_{\mathrm{tot}} = \dot{\sigma}_{\mathrm{sys}} + \dot{\sigma}_{\mathrm{env}} \tag{4.4}$$

また、Thermodynamic force op. を

$$F_\mu(\rho) \begin{cases} 0 & (\mu \in \mathcal{L}_H) \\ \sigma_\mu L_\mu + k_{\mathrm{B}} [L_\mu, \ln \rho] & (\mu \in \mathcal{L}_L) \end{cases} \tag{4.5}$$

と定義する。このとき、

$$\dot{\sigma}_{\mathrm{tot}} = \langle \mathbb{J}(\rho), \mathbb{F}(\rho) \rangle \tag{4.6}$$

が成り立つ。

$(\because)$

$$\begin{aligned}
\dot{\sigma}_{\mathrm{sys}} &= -k_{\mathrm{B}}\,\mathrm{Tr}[\dot{\rho}(t)\ln\rho(t)] && (4.7)\\
&= -k_{\mathrm{B}}\,\mathrm{Tr}[\nabla^*_{\mathbb{S}}\mathbb{J}(\rho)\ln\rho(t)] && (4.8)\\
&= -k_{\mathrm{B}}\,\langle\nabla^*_{\mathbb{S}}\mathbb{J}(\rho),\ln\rho(t)\rangle && (4.9)\\
&= -k_{\mathrm{B}}\,\langle\mathbb{J}(\rho),\nabla_{\mathbb{S}}\ln\rho(t)\rangle && (4.10)\\
&= -k_{\mathrm{B}}\sum_{\mu\in\mathcal{L}}\Bigl(\mathrm{Tr}\bigl[J^\dagger_\mu(\rho)[\ln\rho,S_\mu]\bigr]+\mathrm{Tr}\bigl[J_\mu(\rho)[\ln\rho,S^\dagger_\mu]\bigr]\Bigr) && (4.11)\\
&= k_{\mathrm{B}}\sum_{\mu\in\mathcal{L}_L}\Bigl(\mathrm{Tr}\bigl[J^\dagger_\mu[L_\mu,\ln\rho]\bigr]+\mathrm{Tr}\bigl[J_\mu(\rho)[\ln\rho,L^\dagger_\mu]\bigr]\Bigr) && (4.12)
\end{aligned}$$

が成り立つ。[*5]

　また、

$$\begin{aligned}
\dot{\sigma}_{\mathrm{bath}} &= \sum_{\mu\in\mathcal{L}_L}\sigma_\mu Q_\mu(\rho(t)) && (4.17)\\
&= \sum_{\mu\in\mathcal{L}_L}\sigma_\mu\Bigl(\mathrm{Tr}\bigl[J^\dagger_\mu(\rho)L_\mu\bigr]+\mathrm{Tr}\bigl[J_\mu(\rho)L^\dagger_\mu\bigr]\Bigr) && (4.18)
\end{aligned}$$

を合わせることで、

$$\begin{aligned}
\dot{\sigma}_{\mathrm{tot}} &= \sum_{\mu\in\mathcal{L}_L}\Bigl(\mathrm{Tr}\bigl[J^\dagger_\mu(\rho)(\sigma_\mu L_\mu+k_{\mathrm{B}}[L_\mu,\ln\rho])\bigr]+\mathrm{Tr}\bigl[J_\mu(\rho)(\sigma_\mu L^\dagger_\mu+k_{\mathrm{B}}[L^\dagger_\mu,\ln\rho])\bigr]\Bigr) && (4.19)\\
&= \langle\mathbb{J}(\rho),\mathbb{F}(\rho)\rangle && (4.20)
\end{aligned}$$

が成り立つ。 □

　2 つの超演算子 $\mathbb{B}^+,\mathbb{B}^-$ について、

$$(\mathcal{M}_{\mathbb{B}^\pm})_\mu(\mathbb{A}) := \int_0^1 \mathrm{d}s\,(B^-_\mu)^s A_\mu (B^+_\mu)^{1-s} \tag{4.21}$$

を定義する。ここで、

$$B^\pm_\mu = \sum_n b^{\mu\pm}_n \left|\chi^{\mu\pm}_n\middle\rangle\middle\langle\chi^{\mu\pm}_n\right| \tag{4.22}$$

[*5] ただし、

$$\begin{aligned}
[J_\mu,V^\dagger_\mu] &\propto [\rho,V^\dagger_\mu] && (4.13)\\
[J_\mu,V_\mu] &\propto [\rho,V_\mu] && (4.14)\\
\mathrm{Tr}\Bigl[\ln\rho[\rho,V^\dagger_\mu]\Bigr] &= 0 && (4.15)\\
\mathrm{Tr}[\ln\rho[\rho,V_\mu]] &= 0 && (4.16)
\end{aligned}$$

が成り立つため、Hamiltonian 項は寄与しない。

と展開すると、

$$[\mathcal{M}_{\mathbb{B}^\pm}(\mathbb{A})]_\mu = \sum_{nm} \frac{b_n^{\mu-} - b_m^{\mu+}}{\ln\left(b_n^{\mu-}/b_m^{\mu+}\right)} \left\langle \chi_n^{\mu-} \middle| A_\mu \middle| \chi_m^{\mu+} \right\rangle \left| \chi_n^{\mu-} \right\rangle \left\langle \chi_m^{\mu+} \right| \tag{4.23}$$

と計算できる。このとき、以下の関係が成り立つ。

$$\mathbb{J}(\rho) = \mathcal{M}_{\mathbf{\Gamma}^\pm}(\mathbb{F}(\rho) \tag{4.24}$$

$$\mathbf{\Gamma}_\mu^\pm = \{\Gamma_\mu^\pm\}_{\mu\in\mathcal{L}} \tag{4.25}$$

$$\Gamma_\mu^\pm = \frac{1}{2}\gamma_\mu^\pm \rho \tag{4.26}$$

Prf.
詳細つり合い条件を用いることで、

$$\begin{aligned} F_\mu(\rho) &= \sigma_\mu L_\mu + k_{\mathrm{B}}[L_\mu, \ln\rho] \quad (4.27)\\ &= k_{\mathrm{B}}\left[L_\mu \ln\left(\gamma_\mu^+\rho\right) - \ln\left(\gamma_\mu^-\rho\right)L_\mu\right] \quad (4.28)\\ &= k_{\mathrm{B}}\left[L_\mu(\ln\Gamma_\mu^+) - (\ln\Gamma_\mu^-)L_\mu\right] \quad (4.29) \end{aligned}$$

となる。これを用いて、

$$\begin{aligned} \int_0^1 (\Gamma_\mu^-)^s \left[L_\mu(\ln\Gamma_\mu^+) - (\ln\Gamma_\mu^-)L_\mu\right](\Gamma_\mu^+)^{1-s}\,ds &= -\int_0^1 \frac{d}{ds}\left(e^{s\ln\Gamma_\mu^-}L_\mu e^{(1-s)\ln\Gamma_\mu^+}\right)ds \quad (4.30)\\ &= L_\mu\Gamma_\mu^+ - \Gamma_\mu^- L_\mu \quad (4.31)\\ &= \frac{1}{2}\gamma_\mu^+ L_\mu\rho - \frac{1}{2}\gamma_\mu^-\rho L_\mu = J_\mu(\rho) \quad (4.32) \end{aligned}$$

が成り立つ。 □

　このとき、前の話から

$$\begin{aligned} \dot{\Sigma}_{\mathrm{tot}}(\rho) &= \langle \mathbb{F}(\rho), \mathbb{J}(\rho)\rangle \quad (4.33)\\ &= \langle \mathbb{F}(\rho), \mathcal{M}_{\Gamma^\pm}(\mathbb{F}(\rho))\rangle \quad (4.34)\\ &= \left\langle \mathbb{J}(\rho), \mathcal{M}_{\Gamma^\pm}^{-1}(\mathbb{J}(\rho))\right\rangle \quad (4.35) \end{aligned}$$

である。ここで、内積

$$\langle \mathbb{A}, \mathbb{C}\rangle_{\mathbb{B}^\pm} := \langle \mathbb{A}, \mathcal{M}_{\mathbb{B}}(\mathbb{C})\rangle \in \mathbb{R}, \tag{4.36}$$

を以下のように導入すると、

$$\langle \mathbb{A}, \mathbb{A}\rangle_{\mathbb{B}^\pm} \geq 0, \tag{4.37}$$

をきちんと満たしてくれる。したがって、

$$\dot{\Sigma}_{\mathrm{tot}}(\rho) = \langle \mathbb{F}(\rho), \mathbb{F}(\rho)\rangle_{\Gamma^+} \geq 0 \tag{4.38}$$

が成り立つ。