統計力学特論レポート

お茶の水女子大学人間文化創成科学研究科理学専攻
1940620
前田実津季

2020 年 1 月 25 日

1. 密度行列 ρ が純粋状態を表すための必要かつ十分条件が $\rho^2 = \rho$ で与えられることを示す。

＊まず必要条件であることを示す。
密度行列 ρ が純粋状態であるとき、ある一つの状態 $|\psi\rangle$ を使って、

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{1}$$

と表すことができる。

$$\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi| \cdot |\psi\rangle\langle\psi| \tag{2}$$

となり、ベクトルの規格直交性から $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ であるので、

$$\underline{\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho} \tag{3}$$

＊次に十分条件であることを示す。
ρ の固有値 λ_j、固有状態 $|\lambda_j\rangle$ を使用して、

$$\rho|\lambda_j\rangle = \lambda_j|\lambda_j|rangle$$

ρ について解くと、

$$\rho = \sum_j \lambda_j |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j| \tag{4}$$

今、このとき $\rho^2 = \rho$ であるので、(4) 式から

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \sum_j \lambda_j^2 |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j| \\ &= \sum_j \lambda_j |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j| \end{aligned} \tag{5}$$

となり、つまり次の式が成り立つ。

$$\lambda_j^2 = \lambda_j \tag{6}$$

この (6) 式が成り立つのは、$\lambda_j = 1, 0$ である。
このとき、λ_j については、$\sum_j \lambda_j = 1$ で、$\lambda_j \geq 0$ であるので、

$$\lambda_j = 1$$

よって、$\rho^2 = \rho$ の時は、1 つの固有値は 1 で、残りの固有りは 0 であることがわかった。

$$\underline{\rho = |\psi\rangle\langle\psi|} \tag{7}$$

よって、必要かつ十分条件を示すことができた。

2. 規格化された２つの線形独立なベクトル $|a\rangle$、$|b\rangle$ と実パラメータ λ を用いて演算子 $\rho = (1-\lambda)|a\langle\rangle a| + \lambda|b\rangle\langle b|$ を定義する。ただし、$\langle a|b\rangle \neq 0$ と仮定する。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 が満たすべき条件を求める。

演算子 ρ が量子状態を表すために、必要な条件としては、
①$\rho > 0$
②$Tr\rho = 1$
の２つがある。
この①の条件に関しては、等価な条件として、

$$\begin{cases} \rho\text{の固有値} \quad > 0 \\ \text{任意の状態ベクトル } |\psi\rangle \text{ について } \langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0 \end{cases}$$

がある。これらの条件を調べることで①条件を満たすので、実際に計算を行ってみると、任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して

$$\begin{aligned} \langle\psi|\rho|\psi\rangle &= (1-\lambda)\langle\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle + \lambda\langle\psi|b\rangle\langle b|\psi\rangle \\ &= (1-\lambda)|\langle\psi|a\rangle|^2 + \lambda|\lambda\langle\psi|b\rangle|^2 \\ &\geq 0 \end{aligned} \tag{8}$$

(8) 式について、$|\langle\psi|a\rangle|^2, \lambda\langle\psi|b\rangle|^2 \geq 0$ より、

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

よって、①の条件を満たすには、

$$0 \leq \lambda \leq 1 \tag{9}$$

である。次に、②については、

$$\begin{aligned} Tr\rho &= (1-\lambda)|a\rangle\langle a| + \lambda Tr|b\rangle\langle b| \\ &= (1-\lambda)\langle a|a\rangle + \lambda\langle b|b\rangle \\ &= 1-\lambda+\lambda = 1 \end{aligned} \tag{10}$$

よって (9)、(10) 式から、

$$\underline{0 \leq \lambda \leq 1} \tag{11}$$

3. 時間 t に依存した演算子 $A(t)$ に対して次の方程式の解 $X(t)$ を求める。

$$\frac{\partial}{\partial t}X(t) = X(t)A(t)$$

初期条件：$X(0)=1$
ただし、$[A(t_1),A(t_2)]\neq 0(t_1\neq t_2)$ である。

$X(t)$ について、まず次の形を仮定する。

$$X(t)=[1+\int_0^t dt'A(t')+\frac{1}{2}\int_0^t dt_1A(t_1)\int_0^t dt_2A(t_2)+\cdots]X(0) \tag{12}$$

実際に微分してみる。

$$\frac{d}{dt}X(t)=[A(t)+\frac{1}{2}A(t)\int_0^t dt'A(t')+\underline{\frac{1}{2}\int_0^t dt'A(t')A(t)}+\cdots]X(0) \tag{13}$$

下線部の項が前後入れ替わり、$A(t)$ を前にくくり出すことができれば、(13) 式は、

$$\frac{d}{dt}X(t)=A(t)X(t)$$

となる。
そこで、時間順序積 T を用いて、時間の順序で並べてくれる特徴を活かす。
(12) 式に関して、

$$X(t)=T[1+\int_0^t dt'A(t')+\frac{1}{2}\int_0^t dt_1A(t_1)\int_0^t dt_2A(t_2)+\cdots]X(0)$$

であれば、

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}X(t) &= T[A(t)+\frac{1}{2}A(t)\int_0^t dt'A(t')+\underline{\frac{1}{2}\int_0^t dt'A(t')A(t)}+\cdots]X(0)\\ &= A(t)T[1+\int_0^t dt'A(t')+\frac{1}{2}\int_0^t dt_1A(t_1)\int_0^t dt_2A(t_2)+\cdots]X(0)\\ &= A(t)X(t) \end{aligned} \tag{14}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned}X(t) &= T[1+\int_0^t dt'A(t')+\frac{1}{2}\int_0^t dt_1A(t_1)\int_0^t dt_2A(t_2)+\cdots]X(0)\\ &= \underline{T\exp(\int_0^t dt'A(t))X(0)} \end{aligned} \tag{15}$$

4. 次の式で与えられる 4×4 行列が量子状態を表すための必要十分条件を求める。

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

上記の行列が量子状態を表すためな条件としては、
①$\rho > 0$
②$Tr\rho = 1$
である。
①の条件に関して、言い換えると、 $\rho^{+} = \rho$ である。
よって①に関して、満たすためには、ρ はエルミート共役な行列である。
②については、

$$Tr\begin{pmatrix} a & 0 & 0 & x \\ 0 & b & y & 0 \\ 0 & z & c & 0 \\ w & 0 & 0 & d \end{pmatrix} = a + b + c + d = 1$$

である。よって、

$$\begin{cases} \text{行列はエルミート共役な行列である。} \\ a + b + c + d = 1 \end{cases}$$

である必要がある。

5. 大きさ **1/2** のスピンの状態 $\rho(t)$ 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。

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -\frac{i}{2}\omega[\sigma_z, \rho(t)] + \gamma[\sigma_z\rho(t)\sigma_z - \rho(t)] \tag{16}$$

ただし、ω と、γ は正の定数、σ_z はスピンの z の成分を表すパウリ行列である。初期状態がスピンの x 成分の固有状態であるとき、任意の時刻での状態 $\rho(t)$ を求め、スピンがどのような運動をするかを定性的に説明する。

まずパウリ行列に関して、まとめる。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{17}$$

またこれらを利用して、次の行列を定義する。

$$\sigma_+ = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_- = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

密度演算子は、

$$\rho(t) = \frac{1}{2}[1 + \vec{a}(t)\vec{\sigma}] \tag{19}$$

この時、

$$\begin{aligned} \vec{a}(t) &= (a_x(t), a_y(t), a_z(t)) \\ \vec{\sigma} &= (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \end{aligned} \tag{20}$$

である。また、

$$\begin{aligned} \langle\sigma_x\rangle &= a_x \\ \langle\sigma_y\rangle &= a_y \\ \langle\sigma_z\rangle &= a_z \end{aligned}$$

であるので、(19) 式は、

$$\rho(t) = \frac{1}{2}(1 + a_z\sigma_z + a_+\sigma_+ + a_-\sigma_-) \tag{21}$$

時刻 t での $\rho(t)$ を知るには、(19) 式より、$\langle\sigma_z(t)\rangle$、$\langle\sigma + (t)\rangle$ が分かれば良い。
($\langle\sigma_+(t)\rangle^* = \langle\sigma_-(t)\rangle$ ので $\langle\sigma_+\rangle$、$\langle\sigma_z\rangle$ について解いていく。)
(16) 式の両辺に σ_+ をかけて、トレースをとる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle\sigma_+\rangle &= Tr\sigma_+\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) \\ &= Tr[\sigma_+(-\frac{i}{2}w[\sigma_z, \rho(t)] + \gamma[\sigma_z\rho(t)\sigma_z - \rho(t)])] \\ &= -\frac{i}{2}w\underline{Tr[\sigma_+, [\sigma_z, \rho(t)]]} + \gamma\underline{Tr[\sigma_+(\sigma_z\rho\sigma_z) - \rho]} \end{aligned} \tag{22}$$

下線部の項について、計算していく。下線部の 1 項目に関して、

$$\begin{aligned} Tr[\sigma_+, [\sigma_z, \rho(t)]] &= Tr(\sigma_+\sigma_z\rho(t) - \sigma_+\rho(t)\sigma_z) \\ &= Tr(\sigma_+2\sigma_+\sigma_-\rho(t) - \sigma_+\rho(t) - \sigma_+\rho(t)2\sigma_+\sigma_- + \sigma_+\rho(t)) \\ &= Tr(2\sigma_+^2\sigma_-\rho(t) - \sigma_+\rho(t)2\sigma_+\sigma_-) \\ &= -2Tr\rho(t)\sigma_+\sigma_-\sigma_+ = -2\langle\sigma_+(t)\rangle \end{aligned} \tag{23}$$

($\sigma_+^2 = 0$ であるため。)
次に下線部の 2 項目に関して、

$$\begin{aligned} Tr[\sigma_+(\sigma_z\rho\sigma_z)-\rho] &= Tr\sigma_+(2\sigma_+\sigma_-\rho(t)\sigma_z - \rho\sigma_z - \rho) \\ &= Tr\sigma_+(2\sigma_+\sigma_-\rho(2\sigma_+\sigma_- - 1) - \rho(2\sigma_+\sigma_- - 1) - \rho) \\ &= Tr\sigma_+(4\sigma_+\sigma_-\rho\sigma_+\sigma_- - 2\sigma_+\sigma_-\rho - 2\rho\sigma_+\sigma_- + \rho - \rho) \\ &= Tr(-2\rho\sigma_+\sigma_-\sigma_+) \\ &= -2\langle\sigma_+(t)\rangle \end{aligned} \tag{24}$$

よって (22) 式は、

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\sigma_+\rangle = (iw - 2\gamma)\langle\sigma_+\rangle \tag{25}$$

これが、x-y 平面での緩和を示している。
同様にして、z 方向も考える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle\sigma_z\rangle &= Tr(\sigma_z\frac{\partial}{\partial t}\rho(t)) \\ &= Tr\sigma_z(-\frac{i}{2}w\sigma_z\rho(t) + \frac{i}{2}w\rho(t)\sigma_z + \gamma\sigma_z\rho(t)\sigma_z - \gamma\rho(t)) \end{aligned}$$

$\sigma_z^2 = 1$ より、

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\sigma_z\rangle = 0 \tag{26}$$

よって、まとめると、

$$\begin{cases} \langle\sigma_+\rangle = e^{(iw-2\gamma)t}\langle\sigma_+(0)\rangle \\ \langle\sigma_-\rangle = e^{(-iw-2\gamma)t}\langle\sigma_-(0)\rangle \\ \langle\sigma_z\rangle = 0 \end{cases} \tag{27}$$

(21) 式より、時刻 t での密度演算子は、

$$\underline{\rho(t) = \frac{1}{2} + e^{(iw-2\gamma)t}\langle\sigma_+(0)\rangle\sigma_+ + e^{(-iw-2\gamma)t}\langle\sigma_-(0)\rangle\sigma_-} \tag{28}$$

となる。
t での z 成分は初期状態のまま 0 で、初期状態の x 成分の 1/2 のスピンは、xy 平面上で、振動数 w で回転することがわかった。

6. ハミルトニアンが H で与えられる物理系が熱平衡状態にある。この系に十分に弱い静的な外場 F を掛けて十分に時間が経過した後を考える。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、外場 F の物理系への影響を線形応答理論を用いて調べる。

F が時間によらない弱い静的な外場の場合である。
全体のハミルトニアンは、
系のハミルトニアン H' と、
相互作用のハミルトニアン $H = -FX$
がある。
影響を見るためには、外場 $F = 0$ の時と、$F \neq 0$ の時を考え、その差を見てみる。
(a)$F = 0$ の時は、系は熱平衡状態にある。この時系の状態は、

$$\rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H'} \tag{29}$$

となる。
ここで、分配関数 $Z_0 = Tre^{-\beta H'}$ で、$\beta = 1/kT$ である。(b)$F \neq 0$ の時も十分に時間が経過したので、系は熱平衡状態にある。
この時の系の状態は、

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H'+H)} \tag{30}$$

となり、

$$Z = Tre^{-\beta(H'+H)} \tag{31}$$

と表される。(30) 式を外場に関して一次まで展開して求める。
H' と H は非可換なので、$[X, H'] \neq 0$ である。ここで次の $f(\beta)$ を考える。

$$\begin{aligned} f(x) &= e^{xH'} e^{-x(H'+H)} \qquad (32) \\ f(0) &= 1 \\ \frac{d}{dx} &= -e^{xH'} e^{-x(H'+H)} \\ &= -e^{xH'} H e^{-xH'} e^{xH'} e^{-x(H'+H)} \\ &= -e^{xH'} H e^{-xH'} f(x) \end{aligned}$$

$$f(\beta) = 1 - \int_0^\beta dx \underline{e^{xH'} H e^{-\beta H'}} f(x) \tag{33}$$

下線部部分は外場に対しての 1 次の項である。
つまり、$f(x)$ は 0 次となるには、$H = 0$ の時に、(32) 式より、$f(x) = 1$ と

なる。よって、

$$f(\beta) = 1 - \int_0^\beta dx e^{xH'} H e^{-xH'} \tag{34}$$

左辺も (32) 式より展開すると、

$$e^{\beta H'} e^{-\beta(H'+H)} = 1 - \int_0^\beta dx e^{xH'} H e^{-xH'} \tag{35}$$

両辺に $e^{-\beta H'}$ をかける。(35) 式は、

$$\begin{aligned} e^{-\beta(H'+H)} &= e^{-\beta H'} - \int_0^\beta dx e^{-(\beta-x)H')} H e^{-xH'} \\ &= e^{-\beta H'} - \int_0^\beta dx e^{-xH'} H e^{-(\beta-x)H'} \end{aligned} \tag{36}$$

分配関数を求めると、(36) 式より、両辺トレースをとると、

$$\begin{aligned} Z &= Z_0 - \int_0^\beta dx Tr(e^{-(\beta-x)H'} H e^{-xH'}) \\ &= Z_0 - \beta Tr(e^{-\beta H'} H) \\ &= Z_0 \beta Tr(e^{-\beta H'}/Z_0 H) Z_0 \\ &= Z_0 (1 - \beta \langle H \rangle_0)(\text{(29) 式より}) \end{aligned} \tag{37}$$

今この時、$\langle H \rangle_0 = Tr(H\rho_0)$ である。H は今、$H = -FX$ なので、(37) 式は、

$$Z = Z_0(1 + \beta \langle x \rangle_0 F) \tag{38}$$

となる。(38) 式より、

$$\frac{1}{Z} = \frac{1}{Z_0}(1 - \beta \langle x \rangle_0 F) \tag{39}$$

となる。系の状態 β は、

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H'+H)} \tag{40}$$

ここに、(39) 式と (36) 式を代入する。

$$\rho = \frac{1}{Z_0}(1 - \beta \langle x \rangle_0 F)(e^{-\beta H'} + \int_0^\beta dx e^{-(\beta-x)H'} x e^{-xH'} F) \tag{41}$$

F の 1 次で展開すると、

$$\begin{aligned} \rho &\simeq \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H'} + \frac{1}{Z_0} \int_0^\beta dx e^{-(\beta-x)H'} x e^{-xH'} \\ &= \rho_0 + [\frac{1}{Z_0} \int_0^\beta dx e^{-(\beta-x)H'} x e^{-xH'} - \beta \langle x \rangle_0 \rho_0] F \end{aligned} \tag{42}$$

よって、系の状態の変化は、

$$\rho - \rho_0 = \underline{[\frac{1}{Z_0} \int_0^\beta dx e^{-(\beta-x)H'} x e^{-xH'} - \beta \langle x \rangle_0 \rho_0] F} \tag{43}$$

となる。