基研研究会・iTHEMS研究会
非平衡系の物理学－階層性と普遍性－
2018年 12月27日

# 熱力学的距離を用いた緩和過程での状態追跡

橋爪洋一郎（東理大），鈴木秀則（日大），鈴木増雄（理研）

Physica A 517 (2019) 400

# 熱場ダイナミクス(thermo field dynamics; TFD)

量子力学的期待値:

$$\langle Q\rangle_{\mathrm{q}} = \langle\phi|Q|\phi\rangle$$

統計力学的期待値:

$$\langle Q\rangle_{\mathrm{s}} = \mathrm{Tr}Q\rho$$

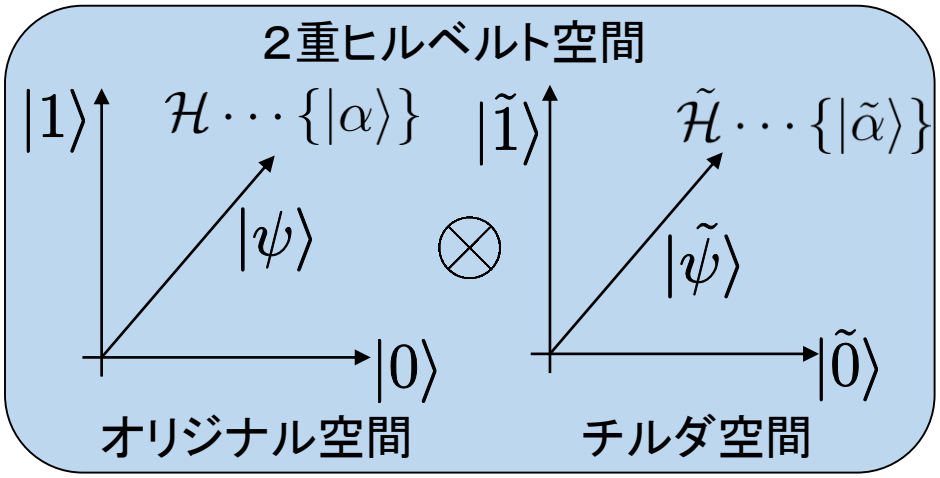
状態の空間を拡張して、表現形式を統一する。

$$\langle Q\rangle_{\mathrm{s}} = \langle\Psi|Q|\Psi\rangle$$

TFD状態ベクトル(平衡状態): $|\Psi(\beta)\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{Z(\beta)}}e^{-\beta\mathcal{H}/2}|I\rangle$

$$|I\rangle = \sum_{\alpha}|\alpha\rangle\otimes|\tilde{\alpha}\rangle$$

$$= \sum_{\alpha}|\alpha\rangle|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{\alpha}|\alpha,\tilde{\alpha}\rangle$$





U.Fano, Rev.Mod.Phys.**A42**(1957)74
I.Prigogine et al.,Chemica Scripta **4**(1973)5
T.Takahashi and H.Umezawa, Collect Phenom.**2**(1975)55


c.f. 松原グリーン関数(1955)

# 幾何学距離との関係

quantum distance

$$D_{\mathrm{q}} = 1 - |\langle\psi(x)|\psi(x+dx)\rangle|^2 \qquad x = \{x^\mu\} = \{x^1, x^2, x^3, \dots\}$$

$$= \left(\langle\partial_\mu\psi(x)|\partial_\nu\psi(x)\rangle - \langle\partial_\mu\psi(x)|\psi(x)\rangle\langle\psi(x)|\partial_\nu\psi(x)\rangle\right) dx^\mu dx^\nu$$

Fubini-Study metric （混合状態についてはBures metric）

$|\psi(x)\rangle \to |\Psi(x)\rangle = e^{-\mathcal{S}(x)/2k_{\mathrm{B}}}|I\rangle$ として （TFDを導入して有限温度にする）

$$D = \frac{1}{4k_{\mathrm{B}}^2}\left[\langle\partial_\mu\mathcal{S};\partial_\nu\mathcal{S}\rangle - \langle\partial_\mu\mathcal{S}\rangle\langle\partial_\nu\mathcal{S}\rangle\right] dx^\mu dx^\nu$$

$\langle\partial_\mu\mathcal{S}\rangle = 0$ だったので $D = \frac{1}{4k_{\mathrm{B}}^2}\langle\partial_\mu\mathcal{S};\partial_\nu\mathcal{S}\rangle dx^\mu dx^\nu$ ・・・今回はこの特別な場合（温度のみの1変数）

$\mathcal{S} = -k_{\mathrm{B}}\log\rho$ として，$\langle\partial_\mu\log\rho;\partial_\nu\log\rho\rangle = -\langle\partial_\mu\partial_\nu\log\rho\rangle$ を考慮すると

$$D = -\frac{1}{4}\langle\partial_\mu\partial_\nu\log\rho\rangle dx^\mu dx^\nu = \frac{1}{4}g_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu$$

・・・Fisher metric

$\mathcal{S} = \dfrac{\mathcal{H} - F}{T}$ を用いて書きなおすと Ruppeiner, Weinhold 型になる．

# 散逸系への適用について

散逸系なので Dissipative von Neumann equation から密度行列を求める.

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar}[\mathcal{H}, \rho(t)] - \varepsilon(\rho(t) - \rho_{\mathrm{eq}})$$

$$\Longrightarrow \quad \rho(t) = e^{-\varepsilon t}U^{\dagger}(t)\rho_0 U(t) + (1 - e^{-\varepsilon t})\rho_{\mathrm{eq}}$$

$$\mathcal{S}(t) = k_{\mathrm{B}} \log \rho(t) \qquad U(t) = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$$

なので時間成分について状態がどのように変わるかについては

$$D = \frac{1}{4k_{\mathrm{B}}}\langle \dot{\mathcal{S}}(-i\hbar\lambda); \dot{\mathcal{S}}\rangle dt^2$$

とすれば良い.

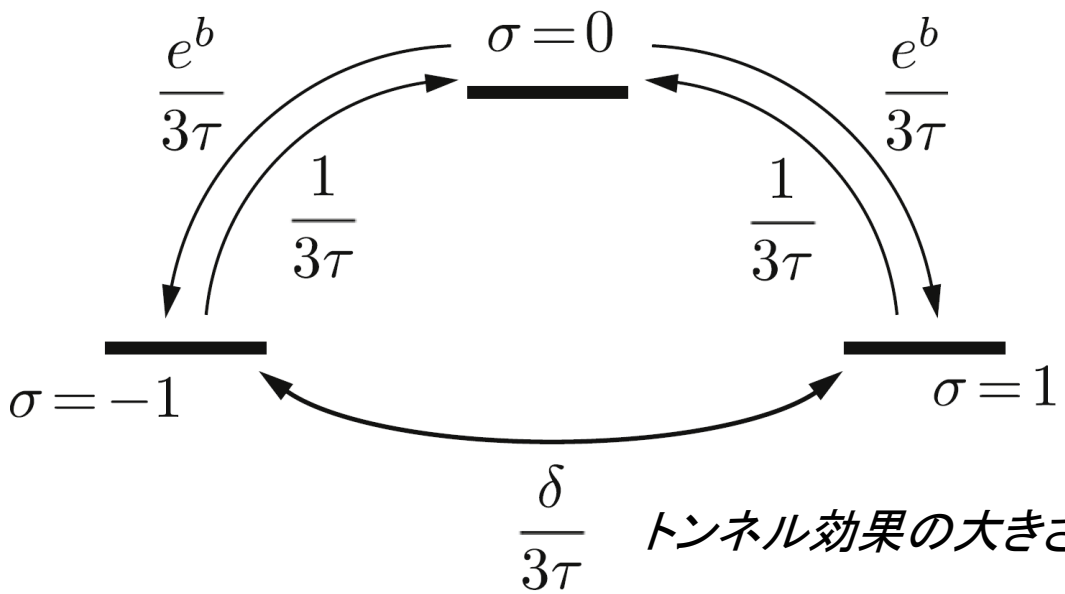
いきなり量子系を取り扱うのは難しいので, ここでは古典的に考える.

# 緩和過程の状態変化

簡単のため，3準位系で考える　　$\sigma = 0, \pm 1$

$$\beta \mathcal{H}_1 = -a\sigma - b\sigma^2 \qquad \eta_1 = \langle \sigma \rangle, \quad \eta_2 = \langle \sigma^2 \rangle$$

$$\frac{dp(\sigma,t)}{dt} = \sum_{\sigma \neq \sigma'} [-w(\sigma \to \sigma')p(\sigma,t) + w(\sigma' \to \sigma)p(\sigma',t)]$$



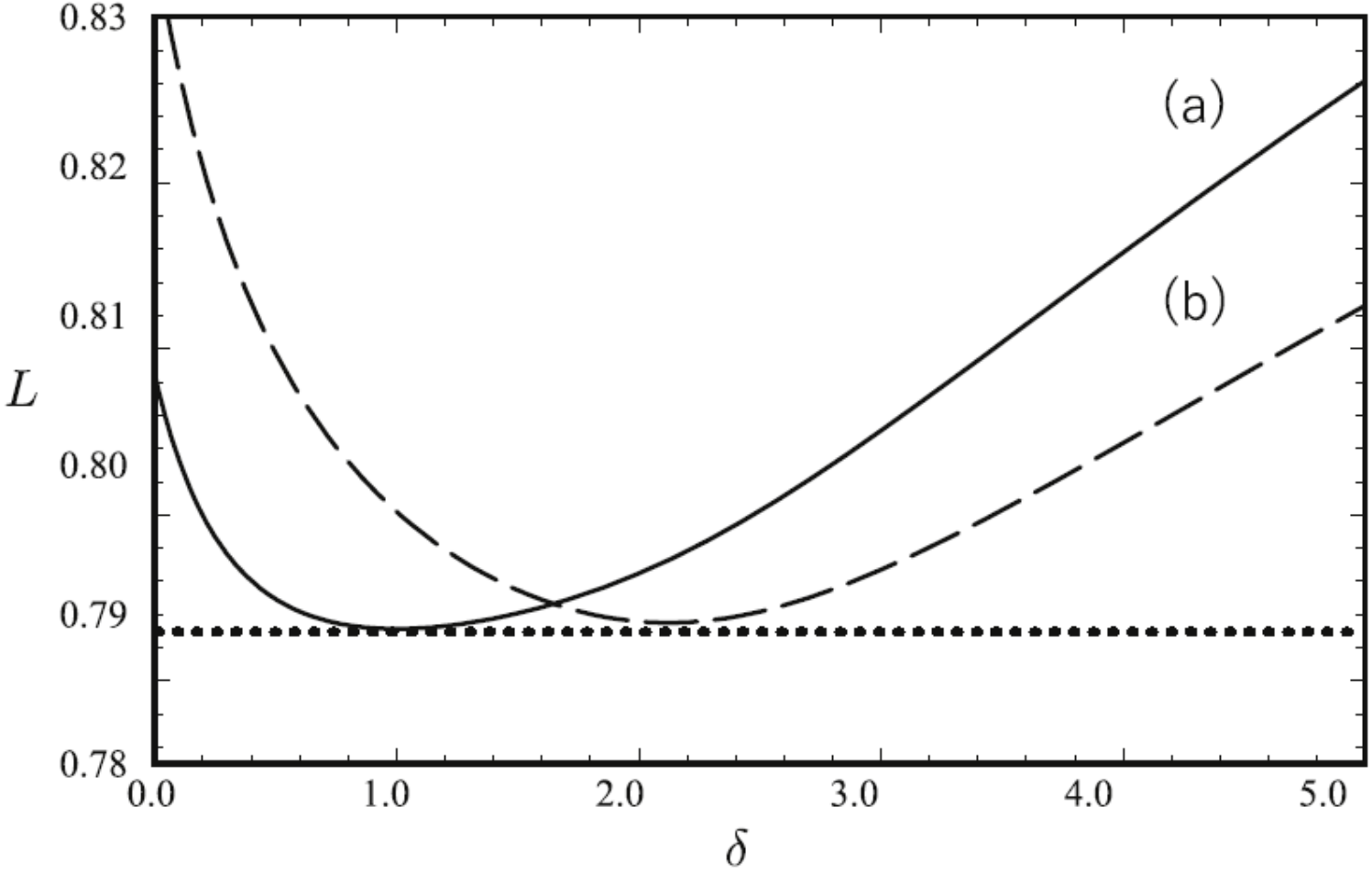

遷移確率は
詳細つり合いを
満たすようにとる

このときの計量テンソルは

$$(g^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} -\frac{\eta_2}{\eta_1^2 - \eta_2^2} & \frac{\eta_1}{\eta_1^2 - \eta_2^2} \\ \frac{\eta_1}{\eta_1^2 - \eta_2^2} & \frac{1}{1-\eta_2} - \frac{\eta_2}{\eta_1^2 - \eta_2^2} \end{pmatrix}$$

となる.

# 緩和過程の状態変化




トンネル効果の大きさによって緩和までの状態変化の大きさが異なることがわかる.

# まとめ

## コンセプト

熱力学的状態の変化をTFD波動関数の変化としてとらえると,
状態の変化を定量的に追跡できる.

## これまで

準静的過程については, 既存の研究を再現することがよくわかっている.

## 今回の結果

緩和過程についての古典的モデルによって, 緩和過程全体における熱力学的状態距離が量子効果の強さに依存することが分かった.

## 今後の課題

- 直接的に状態変化を密度行列で表したときの性質などについて検討する必要がある.
- 孤立状態の熱化過程(ETHなど)との関連は？
- 断熱過程・量子アニーリングの取扱いについて