

内因性量子熱力学に基づく 量子ナノ系の散逸緩和ダイナミクス

山梨大学大学院医工農学総合教育部
博士1年 森下 天平

共著者：石川 陽, 小林 潔

アウトライン

1. 背景と目的

1-1. 量子散逸緩和理論の体系

1-2. Steepest Entropy Ascent Quantum Thermodynamics

1-3. SEAQTの問題点

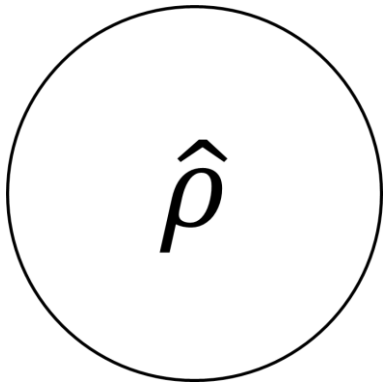
2. SEAQTにおける新しい近似手法の提案

- ・ 相互作用の取り扱い
- ・ Coherent-Mixed-State近似

3. 具体的な量子ナノ系への適用

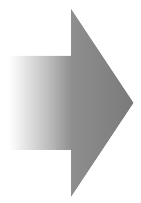
- ・ 励起子-フォノン結合系における励起移動への適用
- ・ CM近似の妥当性の評価

4. まとめと展望



$$\hat{\rho} = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$$

$$p_k = 1$$



Liouville-von Neumann方程式

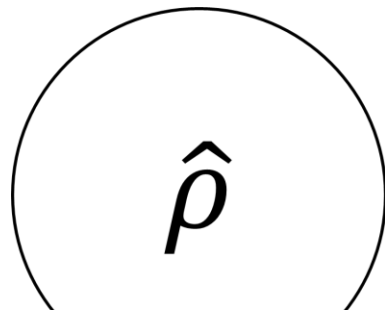
$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

◆ 一般に， **不可逆性**は密度演算子の混合状態が記述

$$\frac{dp_k}{dt} = 0$$



$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]$$



unknown

$$\frac{dp_k}{dt} \neq 0$$

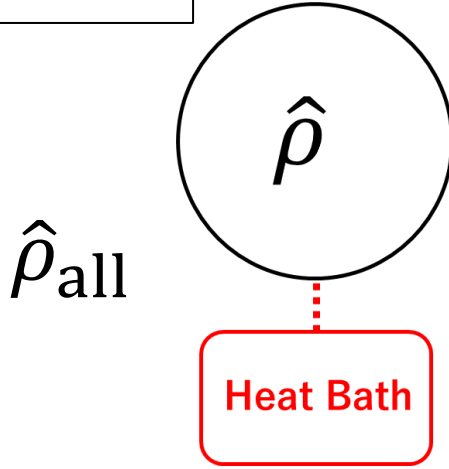


$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{D}$$

外因,
内因

どう決めるか

外因



Tr_{HB}

$$\frac{d\hat{\rho}_{all}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{all}, \hat{\rho}_{all}]$$
$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{i}{\hbar} \text{Tr}_{HB} \left[[\hat{H}_{int}, \hat{\rho}_{all}] \right]$$

外的環境(熱浴)との
相関・相互作用による
不可逆性

量子マスター方程式
(Born-Markov近似)

※ 熱浴と強結合で破綻

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_i \gamma_i \left[\hat{A}_i \hat{\rho} \hat{A}_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{A}_i^\dagger \hat{A}_i, \hat{\rho} \} \right]$$

内因

$\hat{\rho}$
?

内的要因(非自明)の
影響による
不可逆性 「ミクロの熱」?

孤立系に不可逆性が内在する

G. N. Hatsopoulos, et.al., Found. Phys. 6. 15 (1976).

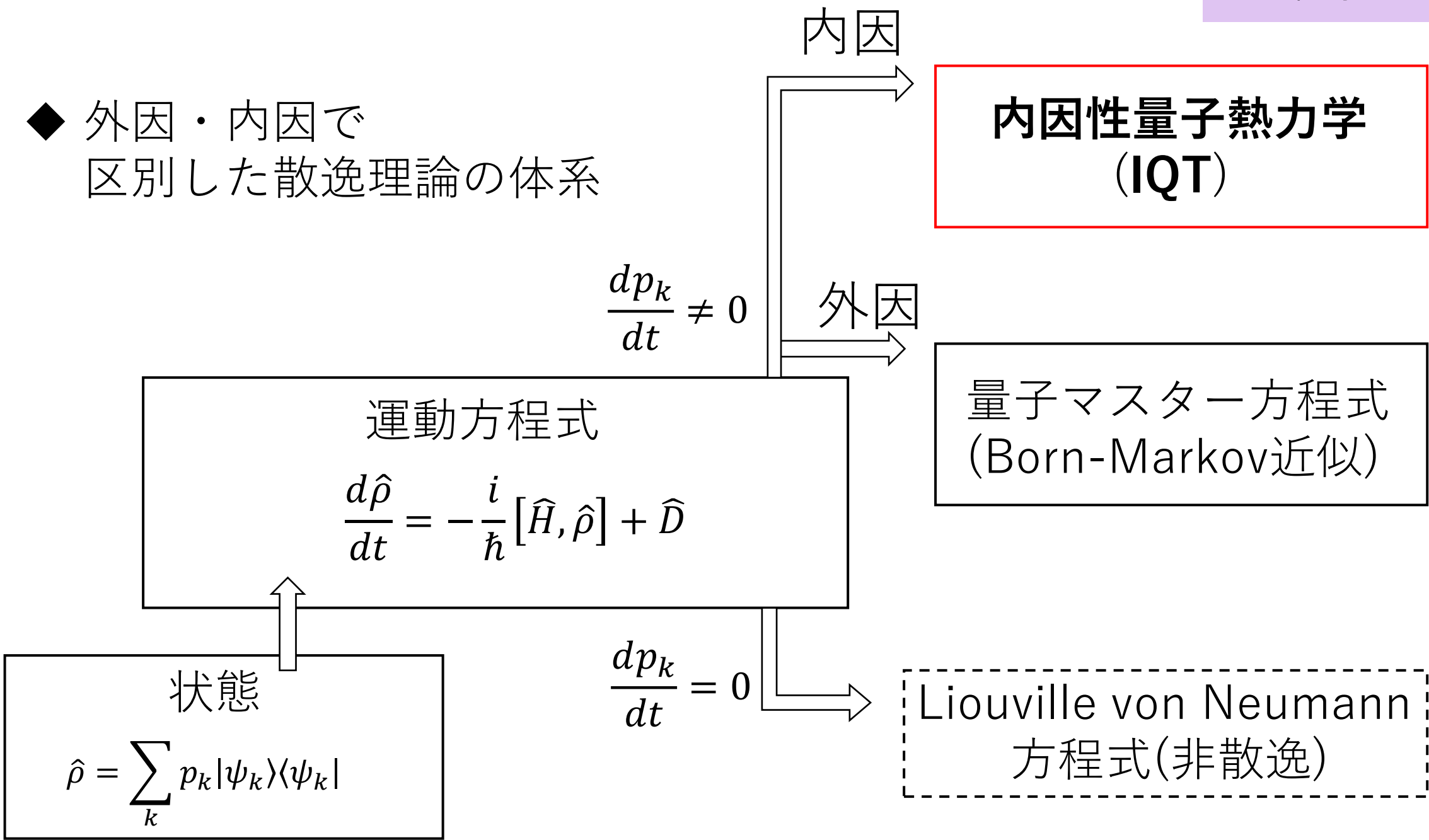
内因性量子熱力学

(Intrinsic Quantum Thermodynamics : **IQT**^[1])

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{D} \quad ? \quad \boxed{\text{自発散逸}}$$

[1] G. P. Beretta, Phys. Rev. E 90, 042113 (2014).

◆ 外因・内因で
区別した散逸理論の体系



Steepest Entropy Ascent QT (SEAQT)

体系化されたIQT理論

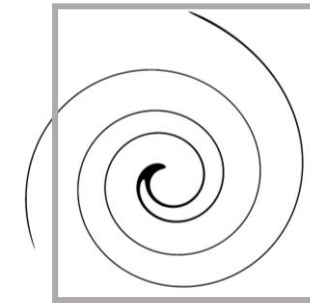
◆ Steepest-Entropy-Ascent 仮説^[2] (SEA仮説)

量子孤立系が自発散逸する(IQT). その際,

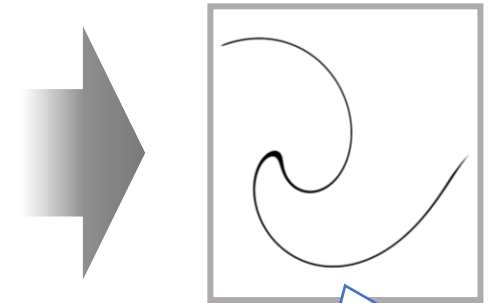
孤立系全体のエントロピー生成は
孤立系内の構造のみに依存し **最大化**される

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{D}$$

直感的な解釈



isolated



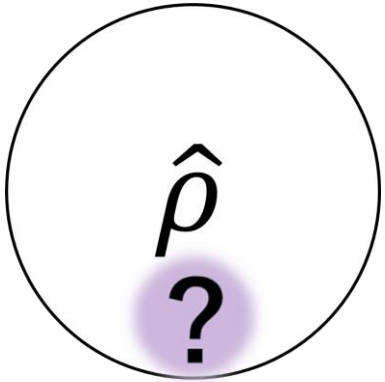
渦の消失速度は
最大だろう

熱力学の第二法則
を満たす(エントロピー非減少)

基本的定式化

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \hat{D}$$

どう決めるか



内因不可逆性
(非自明)

SEA

エントロピー生成が最大

$$\frac{ds}{dt} = (\hat{E}_D | \hat{S} \hat{\gamma}) = \max.$$

constraint

- 最大値を持つ ↑
- 確率 保存
- エネルギー 保存

von Neumann エントロピー

$$s = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{S}]$$
$$(\hat{\rho} \hat{S} = -k_B \hat{\rho} \ln \hat{\rho})$$

$$\sqrt{(\hat{E}_D | \hat{E}_D)} = \text{const.}$$

$$d\langle \hat{I} \rangle / dt = (\hat{E}_D | \hat{I} \hat{\gamma}) = 0$$

$$d\langle \hat{H} \rangle / dt = (\hat{E}_D | \hat{H} \hat{\gamma}) = 0$$

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \quad p_k \geq 0$$
$$\hat{\rho} = \hat{\gamma} \hat{\gamma}^\dagger$$
$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{d\hat{\gamma}}{dt} \hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma} \frac{d\hat{\gamma}^\dagger}{dt}$$

$$\frac{d\hat{\gamma}}{dt} := -\frac{i}{\hbar} \Delta \hat{H} \hat{\gamma} + \hat{E}_D$$
$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + (\hat{E}_D \hat{\gamma}^\dagger + \hat{\gamma} \hat{E}_D^\dagger)$$

SEA

エントロピー生成が最大

$$\frac{ds}{dt} = (\hat{E}_D | \hat{S} \hat{\gamma}) = \max.$$

constraint

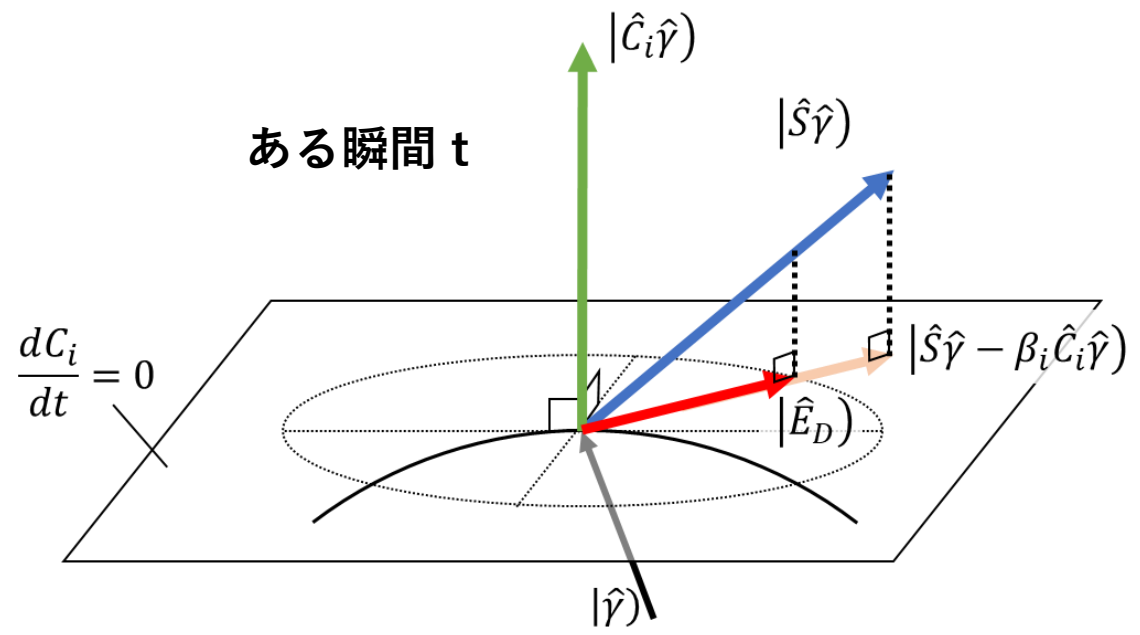
- 最大値を持つ ↑
- 確率 保存
- エネルギー 保存

von Neumann エントロピー

$$s = \text{Tr}[\hat{\rho} \hat{S}]$$
$$(\hat{\rho} \hat{S} = -k_B \hat{\rho} \ln \hat{\rho})$$
$$\sqrt{(\hat{E}_D | \hat{E}_D)} = \text{const.}$$
$$d\langle \hat{I} \rangle / dt = (\hat{E}_D | \hat{I} \hat{\gamma}) = 0$$
$$d\langle \hat{H} \rangle / dt = (\hat{E}_D | \hat{H} \hat{\gamma}) = 0$$

内積

$$(\hat{X} | \hat{Y}) = \frac{1}{2} \text{Tr}[\hat{X}^\dagger \hat{Y} + \hat{Y}^\dagger \hat{X}]$$



[1] G. P. Beretta, Phys. Rev. E 90, 042113 (2014).

SEAQT

導出された基本運動方程式

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{\beta}{2\tau} \{\Delta\hat{F}, \hat{\rho}\}$$

ユニタリーな時間発展
相互作用ダイナミクス

自発散逸項

$$\beta = \frac{1}{k_B} \frac{\langle \{\Delta\hat{S}, \Delta\hat{H}\} \rangle}{2\langle \Delta\hat{H} \Delta\hat{H} \rangle}$$

非平衡逆温度関数

$$\hat{F} = \hat{H} - \frac{1}{k_B\beta} \hat{S}$$

ヘルムホルツの自由エネルギーと同形

$$(\Delta\hat{F} = \hat{F} - \langle \hat{F} \rangle \hat{I})$$

τ : 緩和時間

SEAQT

導出された基本運動方程式

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] - \frac{\beta}{2\tau} \{\Delta\hat{F}, \hat{\rho}\}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B} \frac{\langle \{\Delta\hat{S}, \Delta\hat{H}\} \rangle}{2\langle \Delta\hat{H} \Delta\hat{H} \rangle} \quad \hat{F} = \hat{H} - \frac{1}{k_B\beta} \hat{S} \quad \ln\hat{\rho} = \sum_{k=1}^w (\ln p_k) |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

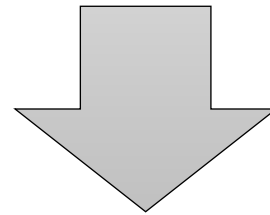
von Neumann エントロピー

$$s = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{S}] \quad (\hat{\rho}\hat{S} = -k_B\hat{\rho}\ln\hat{\rho})$$

: 固有値展開 ($p_k \neq 0$)

w : 状態数 $\rightarrow \infty$ 原理上, 計算できない

- 解析において, **全体系のエントロピー**を計算



全体の状態情報が**全て必要**

□ 問題点 :

ボソン
(フォトン)
(フォノン)

無限状態数系の厳密解析が, 原理的に**不可能**

無限状態数系の計算：直交直和分解に基づく近似

系の状態を
有限個の部分状態
に分ける

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \hat{\rho}_x \oplus \hat{\rho}_y & \ln \hat{\rho} &= \ln \hat{\rho}_x \oplus \ln \hat{\rho}_y \\ (\hat{\rho}_x | \hat{\rho}_y) &= \text{Tr}[\hat{\rho}_x \hat{\rho}_y] = 0 & \hat{\rho}_x \hat{\rho}_y &= \hat{\rho}_y \hat{\rho}_x = 0 \end{aligned}$$

SEAQTで
計算可能な形の

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_x, \hat{\rho}_y \\ (\hat{\rho}_x \hat{\rho}_y = \hat{\rho}_y \hat{\rho}_x = 0) \\ \text{を与える} \end{aligned}$$

- $\hat{\rho}_x, \hat{\rho}_y$ が有限個の変数で記述される
- $\ln \hat{\rho}_x, \ln \hat{\rho}_y$ 演算子をlogの外へ出せる
有限個の展開で書ける

Hypo-equilibrium state 近似 ^[3] (HE近似)

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_x \oplus \hat{\rho}_y$$

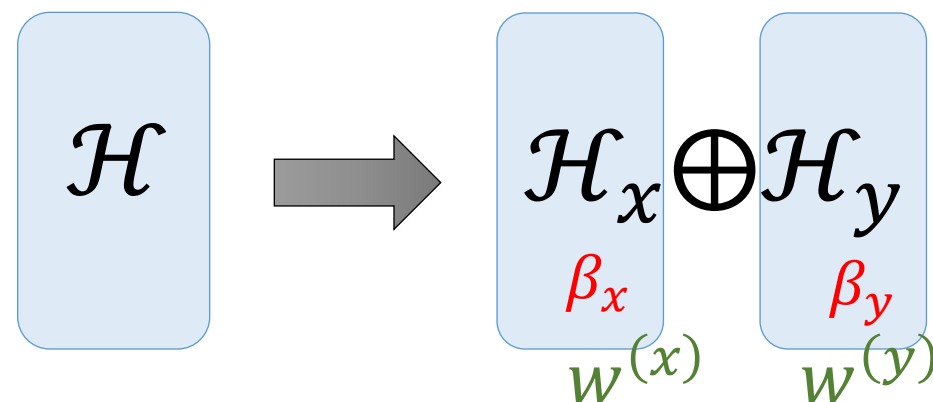
HE状態

$$\rho_k^{(x)} \rightarrow \frac{e^{-\beta_x \epsilon_k^{(x)}}}{\sum_{k \in \mathcal{H}_x} e^{-\beta_x \epsilon_k^{(x)}}} w^{(x)}$$

直交直和分解した $\hat{\rho}_x, \hat{\rho}_y$ に
HE状態を課す

$$\ln \hat{\rho}_x = \sum_{k \in \mathcal{H}_x}^{\infty} (\ln \rho_k^{(x)}) |\epsilon_k\rangle \langle \epsilon_k|$$

有限個の異なる熱平衡状態
のブロックに分割



SEAQTによる
無限状態数系の近似計算が可能
ただし…

Hypo-equilibrium state 近似の問題点

HE近似の前提(HE状態)

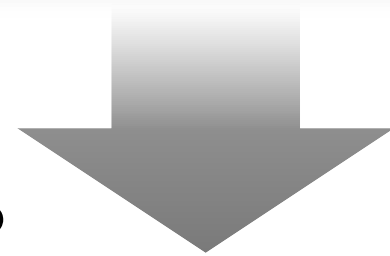
$$[\hat{H}, \hat{\rho}] = [\hat{H}, \hat{\rho}_x \oplus \hat{\rho}_y] = 0$$

相互作用ダイナミクスを含む

$$\hat{H} = \sum_k^{\infty} \epsilon_k \underline{|\epsilon_k\rangle\langle\epsilon_k|} \quad \hat{\rho}_x = \sum_{k \in \mathcal{H}_x}^{\infty} \rho_k^{(x)} \underline{|\epsilon_k\rangle\langle\epsilon_k|}$$

HE近似

相互作用の効果を扱えない



新しい近似？

$$\square [\hat{H}, \hat{\rho}] = [\hat{H}, \hat{\rho}_x \oplus \hat{\rho}_y] \neq 0$$

□ 何らかの物理的意味

目的

➤ SEAQTによる無限状態数系の近似計算手法を構築

直交直和分解に基づく新しい近似手法

Hypo-equilibrium state 近似

- ◆ 無限状態数系を扱える
- ◆ 相互作用ダイナミクスを記述できる 手法
- ◆ 具体的系に適用し，有効性を確認

相互作用を
記述できない

Coherent Mixed state 近似

コヒーレント状態

$$\hat{\rho} = |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

無限個の情報を
1つの複素変数で表示

ただし…

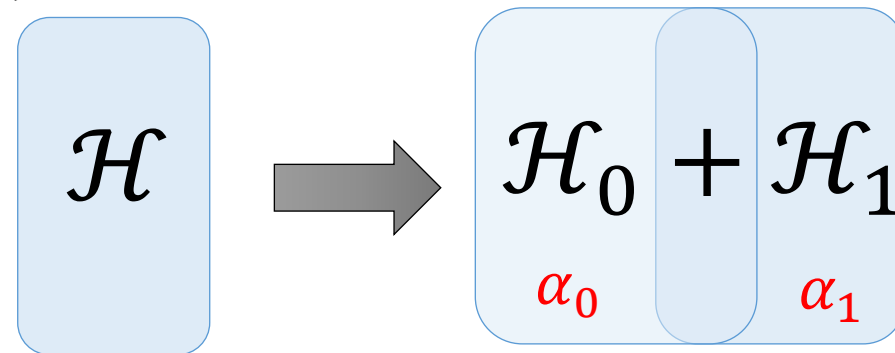
$$s = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{S}] = 0$$

◆ 2つの異なる コヒーレント状態 $(|\alpha_0\rangle, |\alpha_1\rangle)^{[4]}$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|\alpha_0\rangle\langle\alpha_0| + |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|)$$

コヒーレント混合状態

Coherent Mixed (CM) state



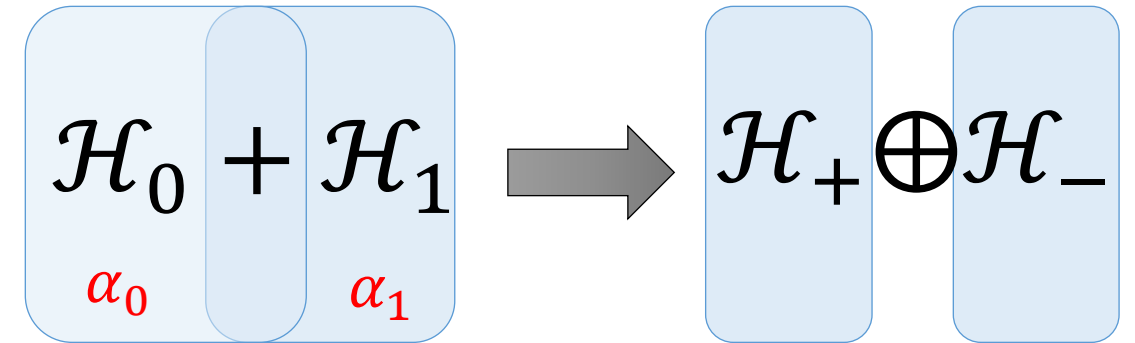
[4] 加野 泰, 物性研究 18, B2-B6 (1972).

Coherent Mixed state 近似

2. SEAQTにおける新しい近似手法の提案

直交直和分解 $\hat{\rho} = \hat{\rho}_x \oplus \hat{\rho}_y$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|\alpha_0\rangle\langle\alpha_0| + |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|) = c_+ |c_+\rangle\langle c_+| \oplus c_- |c_-\rangle\langle c_-|$$



$$\ln \hat{\rho} = (\ln c_+) |c_+\rangle\langle c_+| \oplus (\ln c_-) |c_-\rangle\langle c_-|$$

$$\langle c_k | c_{k'} \rangle = \delta_{kk'}$$

$$|c_{\pm}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{c_{\pm}}} \left(|\alpha_1\rangle \pm \frac{\langle\alpha_0|\alpha_1\rangle}{|\langle\alpha_0|\alpha_1\rangle|} |\alpha_0\rangle \right)$$

$$c_{\pm} = \frac{1 \pm |\langle\alpha_0|\alpha_1\rangle|}{2}$$

Coherent Mixed state 近似

2. SEAQTにおける新しい近似手法の提案

一般に非可換(CM状態)

$$\checkmark [\hat{H}, \hat{\rho}] = [\hat{H}, \hat{\rho}_x \oplus \hat{\rho}_y] \neq 0$$

相互作用ダイナミクスを含む

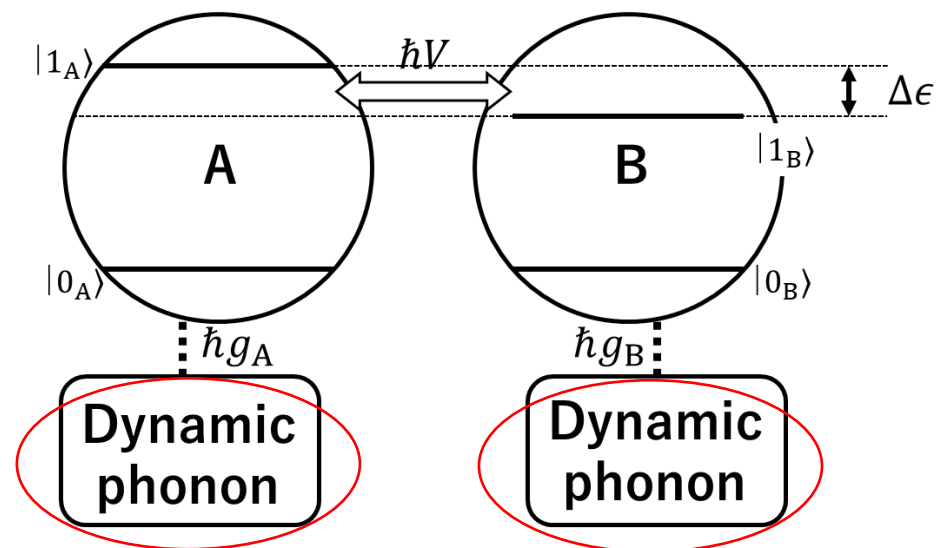
$$\hat{H} = \sum_k^{\infty} \epsilon_k \underline{|\epsilon_k\rangle\langle\epsilon_k|} \quad \hat{\rho}_x = c_+ \underline{|c_+\rangle\langle c_+|}$$

CM状態の下,

◆**SEAQT**による,
相互作用を考慮した
無限状態数系の

計算が可能

無限状態数系を含む相互作用モデル



励起子-フォノン結合系

◆ 無限状態数系：動的フォノン

$$\hat{H} = \hat{H}_{AB} \otimes \hat{I}_p + \hat{H}_p \otimes \hat{I}_{AB} + \hat{H}_{\text{int}}$$

二準位系

$$\hat{H}_{AB} = \sum_{\ell, \ell' = A, B} \left(\hbar \omega_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \otimes \hat{I}_{\ell'} + \hbar V \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \otimes \hat{a}_{\ell'} \right)$$

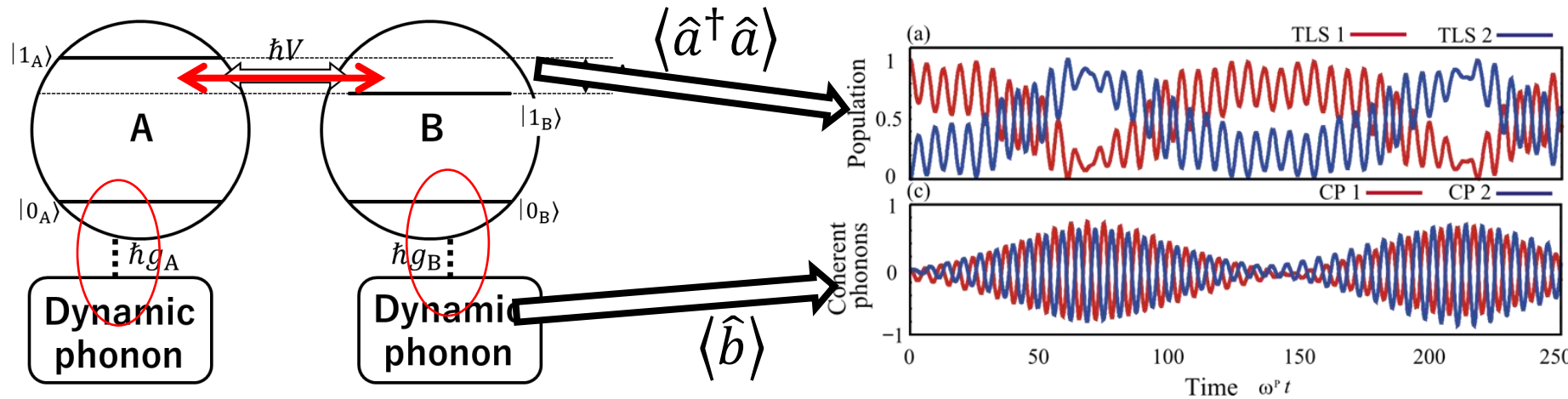
フォノン系

$$\hat{H}_p = \sum_{\ell, \ell' = A, B} \hbar \omega_{\ell}^p \hat{b}_{\ell}^{\dagger} \hat{b}_{\ell} \otimes \hat{I}_{p\ell'}$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{\ell, \ell' = A, B} \hbar g_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \otimes (\hat{b}_{\ell} + \hat{b}_{\ell}^{\dagger}) \otimes \hat{I}_{\ell'} \otimes \hat{I}_{p\ell'}$$

平均場近似

◆ 相互作用ダイナミクス

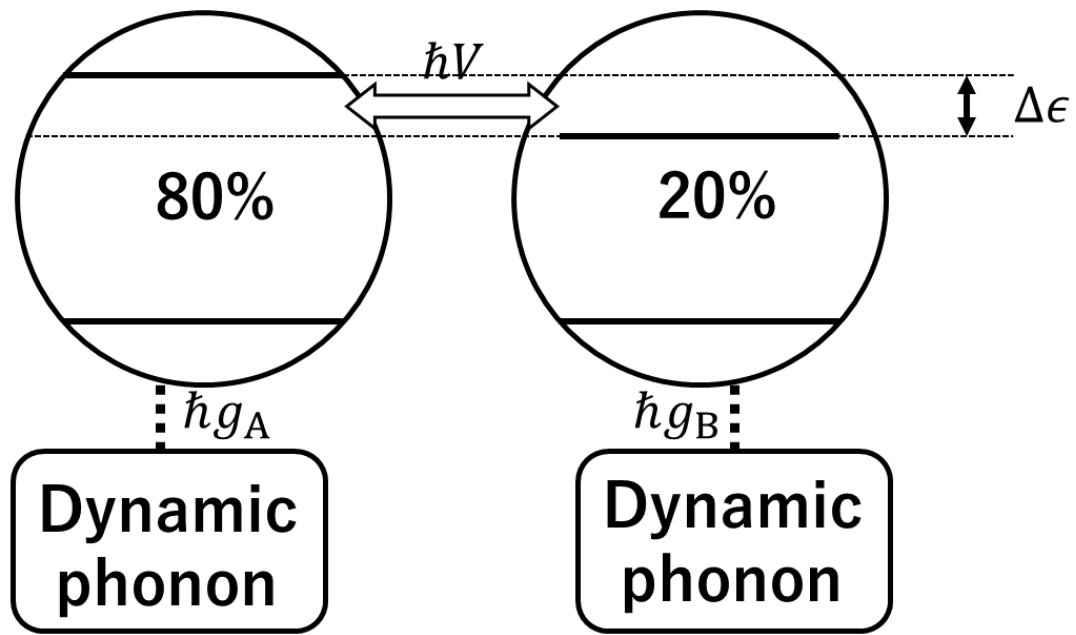


動的フォノンによる
非共鳴**励起移動**支援
[5]

◆ 励起子-フォノン間相互作用に注目

CM近似により，コヒーレントフォノン支援による
非共鳴二準位系間の励起移動が記述されるか

初期値・パラメータ



二準位系

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_A^\dagger \hat{a}_A \rangle &= 0.80 \\ \langle \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B \rangle &= 0.20 \\ \langle \hat{a}_A \rangle &= 0.35 \\ \langle \hat{a}_B \rangle &= 0.30 \end{aligned}$$

フォノン系

$$\begin{aligned} \langle \hat{b}_\ell^\dagger \hat{b}_\ell \rangle &= 1.0 \\ \langle \hat{b}_\ell \rangle &= -0.16 \end{aligned}$$

エネルギーパラメータ

二準位系 $\frac{\hbar\omega_A}{\Delta\epsilon} = 1.5 \quad \frac{\hbar\omega_B}{\Delta\epsilon} = 0.50$

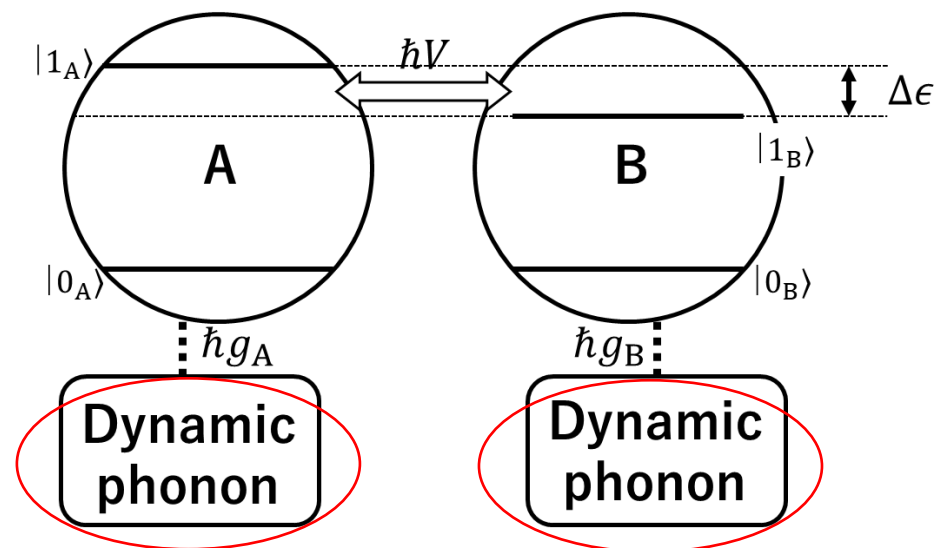
フォノン系 $\hbar\omega_\ell^p = \sqrt{\Delta\epsilon^2 + (2\hbar V)^2}$
(コヒーレントフォノン支援)

(int) $\frac{\hbar V}{\Delta\epsilon} = \frac{\hbar g_\ell}{\Delta\epsilon} = 0.20$

(緩和時間) $\tau_J = 10$

初期値

無限状態数系を含む相互作用モデル



励起子-フォノン結合系

◆ 無限状態数系：動的フォノン

$$\hat{H} = \hat{H}_{AB} \otimes \hat{I}_p + \hat{H}_p \otimes \hat{I}_{AB} + \hat{H}_{\text{int}}$$

二準位系

$$\hat{H}_{AB} = \sum_{\ell, \ell' = A, B} \left(\hbar \omega_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \otimes \hat{I}_{\ell'} + \hbar V \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \otimes \hat{a}_{\ell'} \right)$$

フォノン系

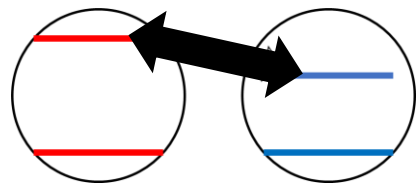
$$\hat{H}_p = \sum_{\ell, \ell' = A, B} \hbar \omega_{\ell}^p \hat{b}_{\ell}^{\dagger} \hat{b}_{\ell} \otimes \hat{I}_{p\ell'}$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{\ell, \ell' = A, B} \hbar g_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \otimes (\hat{b}_{\ell} + \hat{b}_{\ell}^{\dagger}) \otimes \hat{I}_{\ell'} \otimes \hat{I}_{p\ell'}$$

平均場近似

CM近似・HE近似の比較

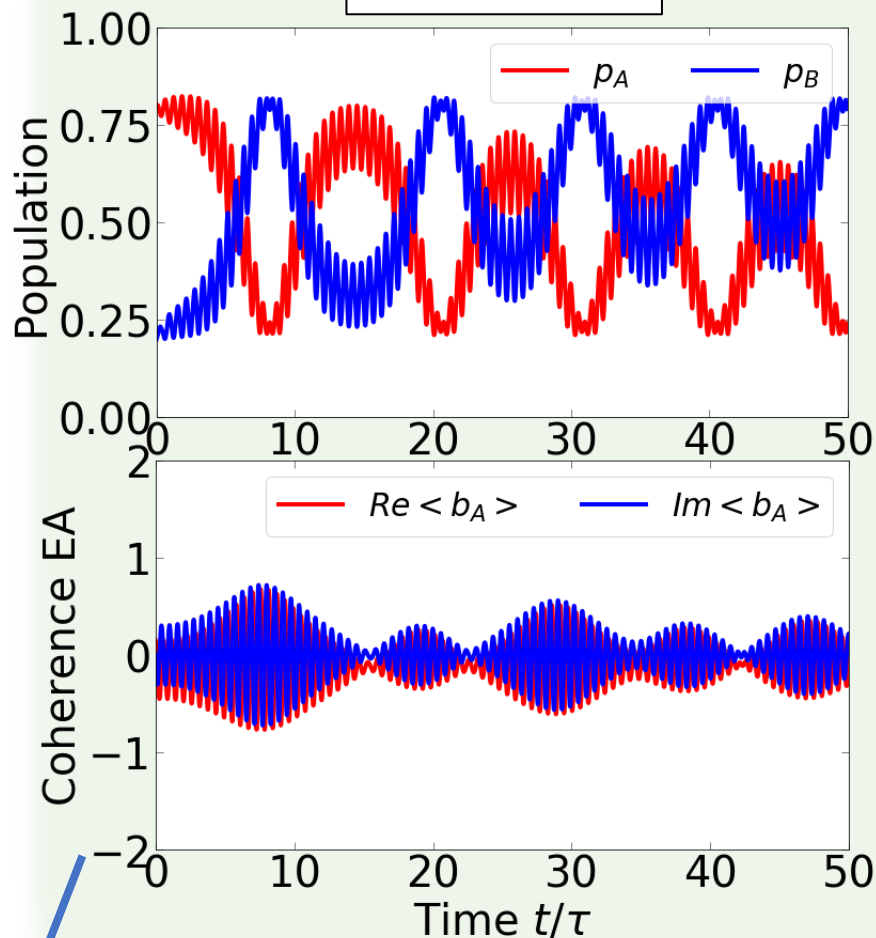
3. 具体的な量子ナノ系への適用



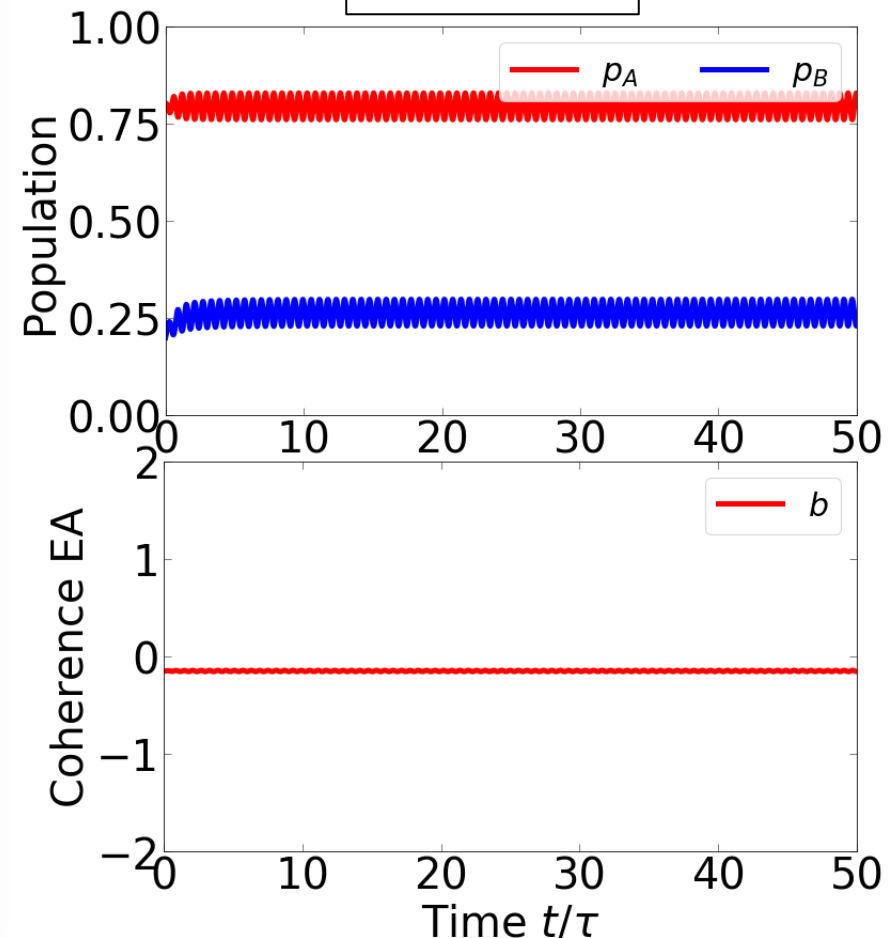
ポピュレーション
(二準位系)
 $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$

コヒーレント
フォノン(CP)
 $\langle \hat{b} \rangle$

CM近似



HE近似



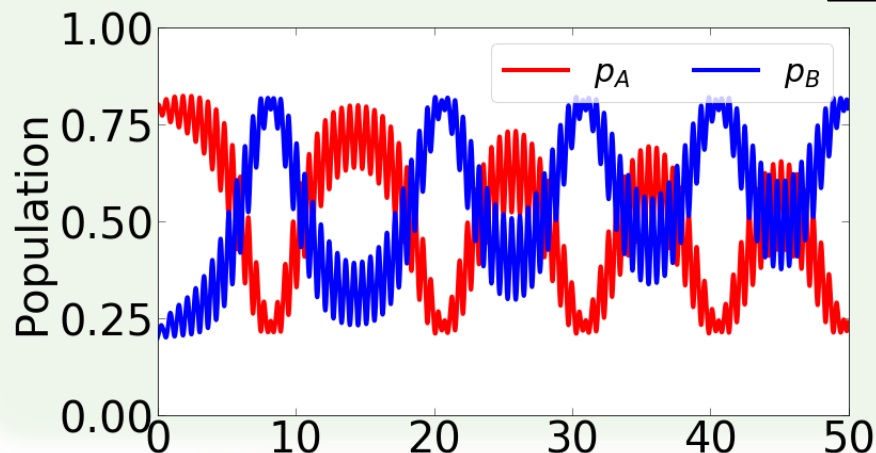
- ◆ 励起移動とCPが互いに誘起し合う,
モデル系の励起移動ダイナミクスが記述できている

励起移動の自発散逸ダイナミクス

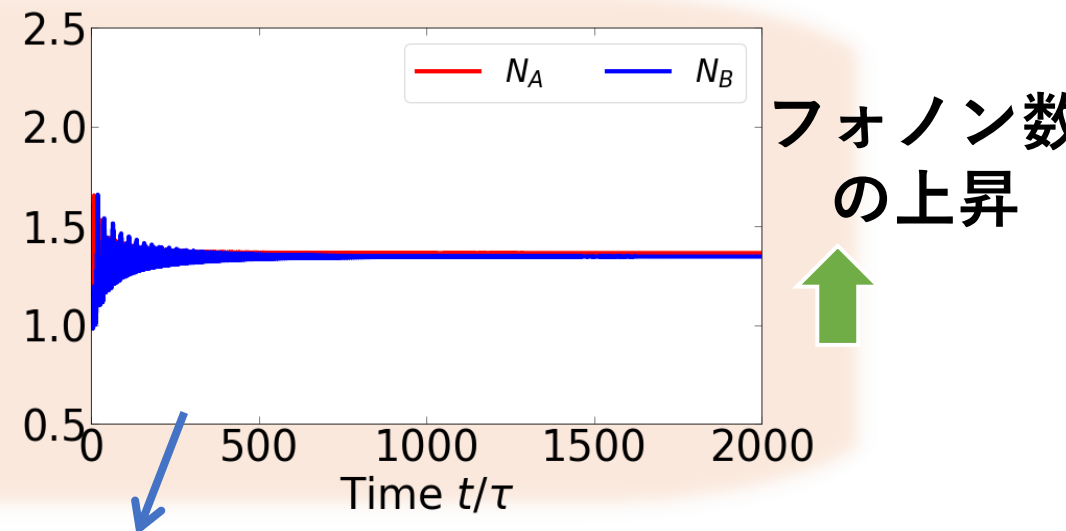
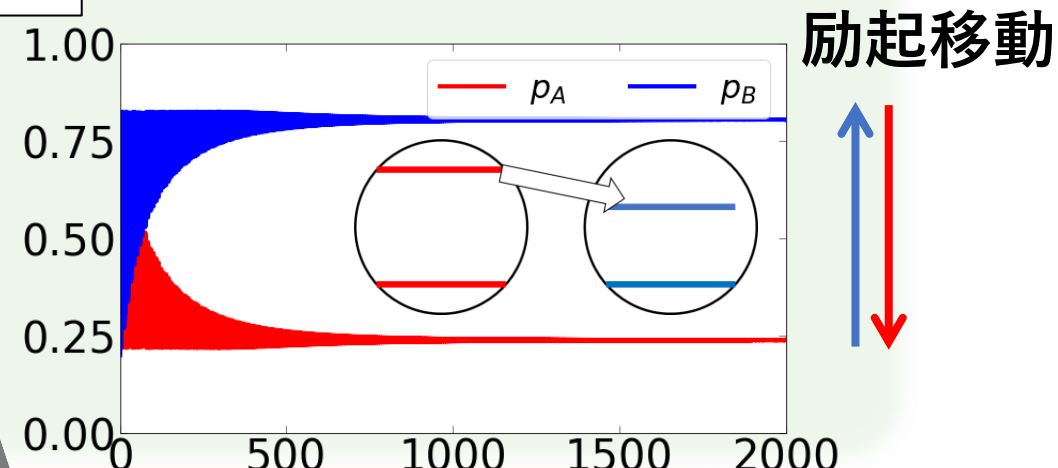
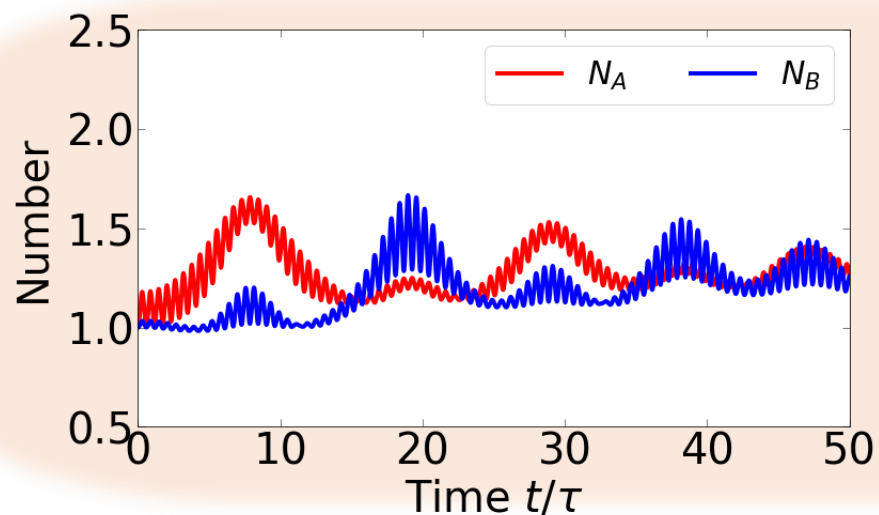
3. 具体的な量子ナノ系への適用

CM近似

(二準位系)
 $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$



フォノン系
個数
 $\langle \hat{b}^\dagger \hat{b} \rangle$



◆ フォノン系が二準位系エネルギーを吸収

まとめ

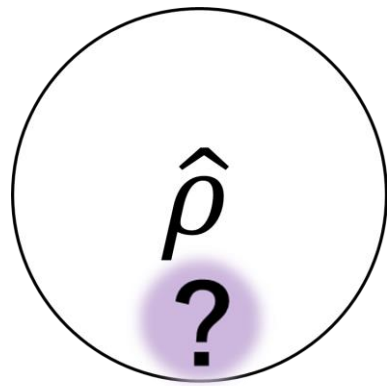
- ✓ IQT理論：**SEAQT**の定式化
- ✓ SEAQTにより，**無限状態数系の相互作用過程**
を記述できる近似計算手法を構築 → **CM近似**
- ✓ 具体的モデル(励起子－フォノン結合系)において**有効性を確認**

展望

□ SEA仮説(現象論)の検証

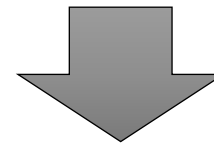
直感的説明だけでなく、理論的保証・物理的、微視的意味付けが必要

◆ 研究の方針



内因不可逆性
(非自明)

SEA仮説は **?** それ自体の構造・
物理的意味に言及しない

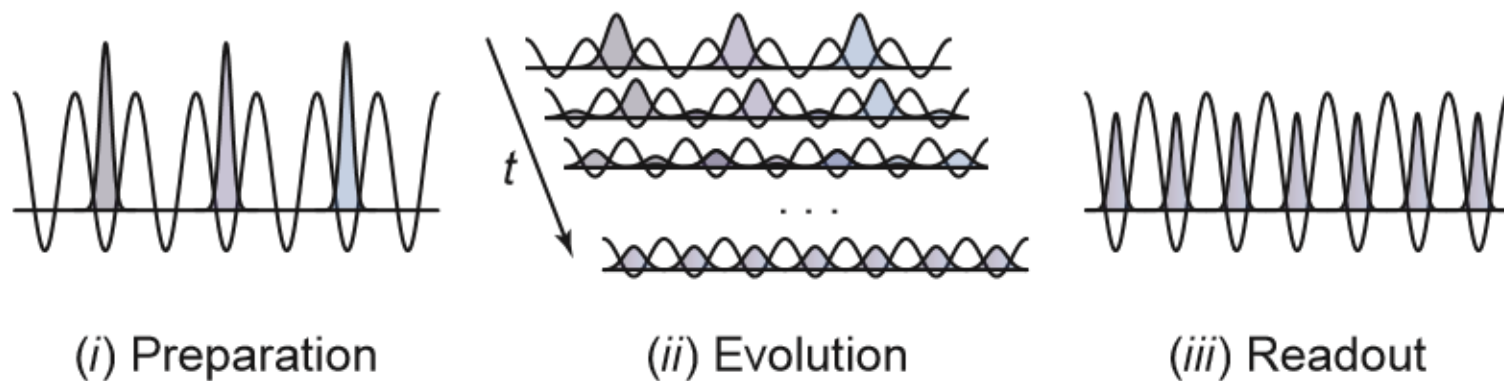


非自明な内在不可逆性の構造・物理的意味を追求する

IQTにおける「熱」，ミクロにおける熱とは？

捕捉

◆ 孤立系量子系の熱平衡化



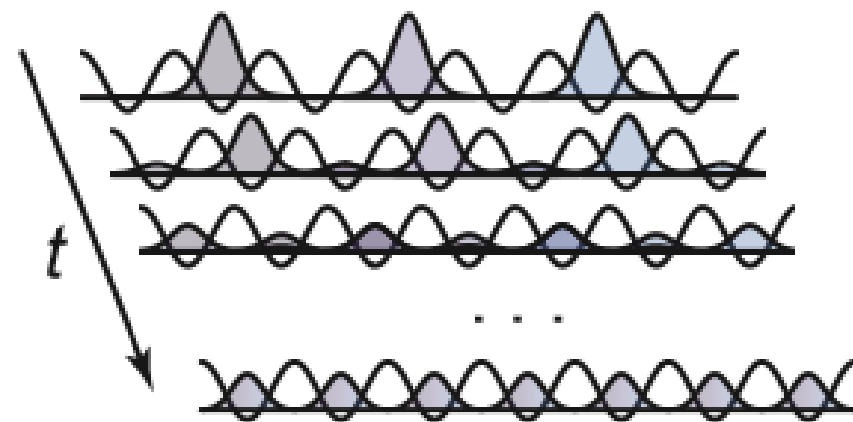
[6] Trotzky et al, Nature Phys. 8, 325 (2012).

- レーザートラップ: $\lambda_x=1530\text{nm}$ & 765nm ($\lambda_{y,z}=844\text{nm}$)
- 45×10^3 ^{87}Rb
- 各サイト 1個以下
- $N_{\text{max}} \sim 43$, $N_{\text{mean}} \sim 31$

孤立系と見なせる実験系

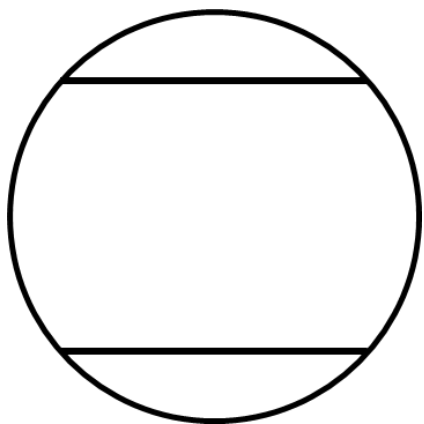
(超高真空・冷却原子)における,
1次元ボソン気体の**緩和**

(→熱平衡)



◆ SEAQT : 解析結果例①

1TLS



初期値

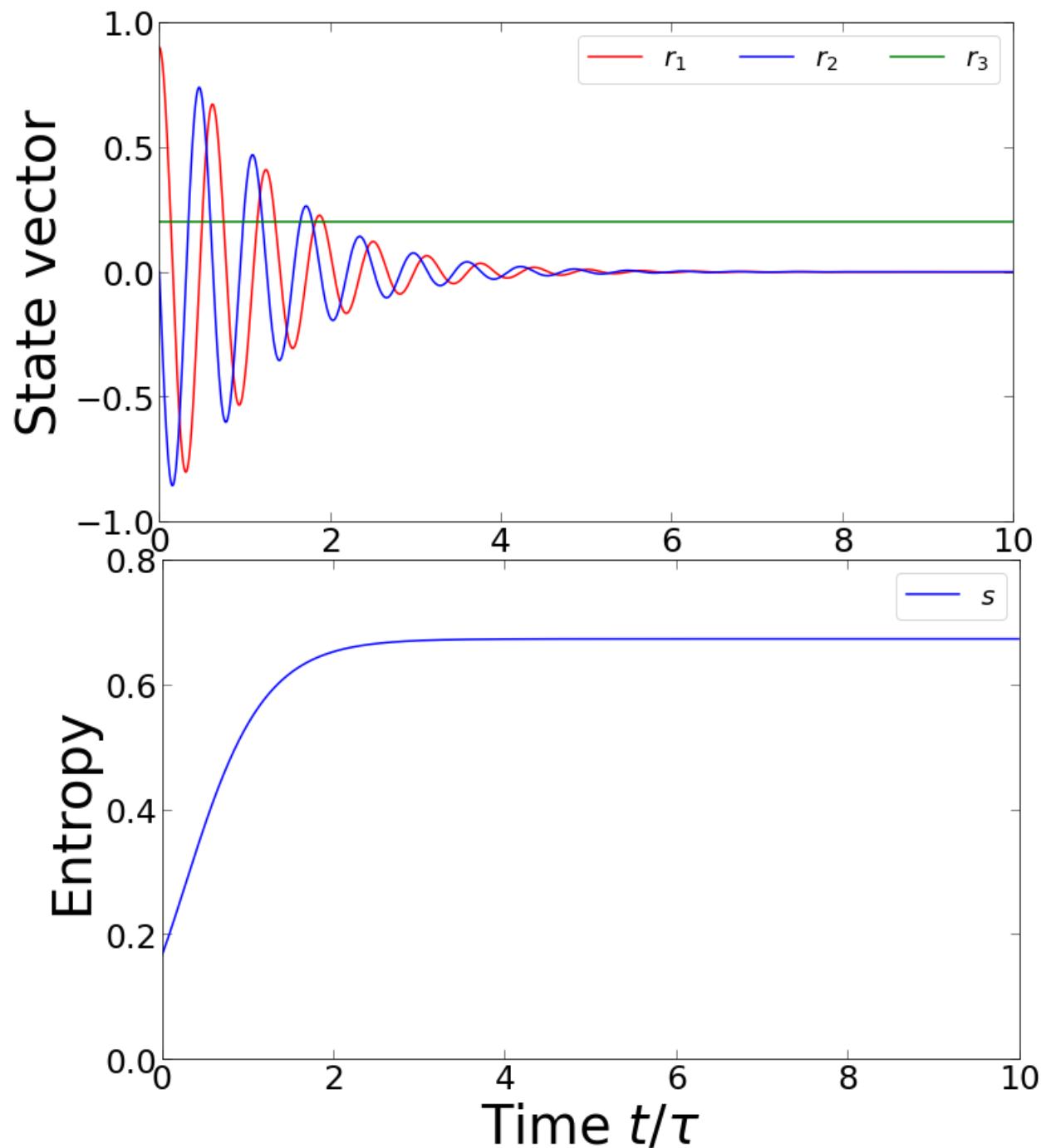
$$\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle = 0.60$$

$$\langle \hat{a} \rangle = 0.45$$

パラメータ

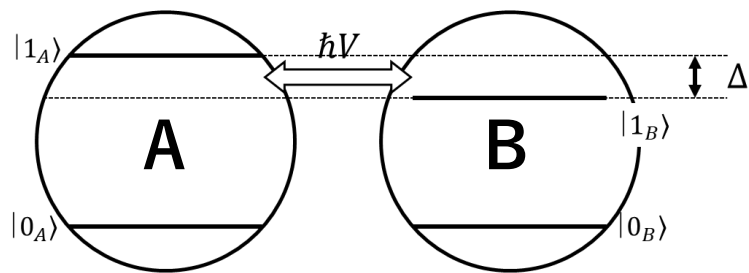
$$\hbar\omega = 1$$

(緩和時間 $\tau = 10$)



◆ SEAQT : 解析結果例②

2TLS



初期値

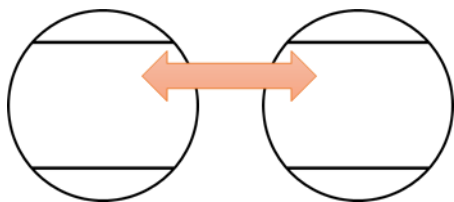
$$\langle \hat{a}_A^\dagger \hat{a}_A \rangle = 0.80$$

$$\langle \hat{a}_A \rangle = 0.35$$

$$\langle \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B \rangle = 0.20$$

$$\langle \hat{a}_B \rangle = 0.35$$

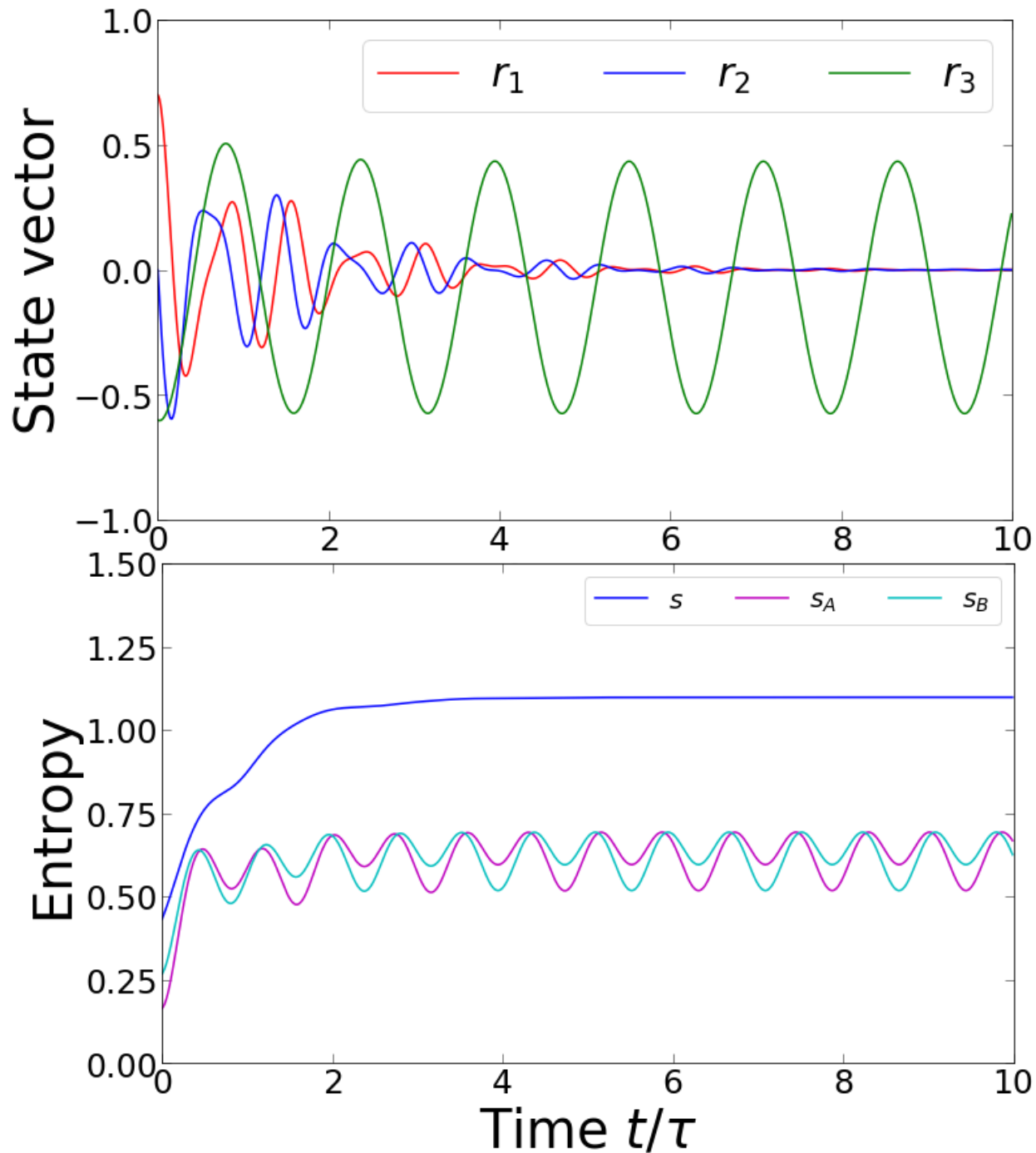
パラメータ

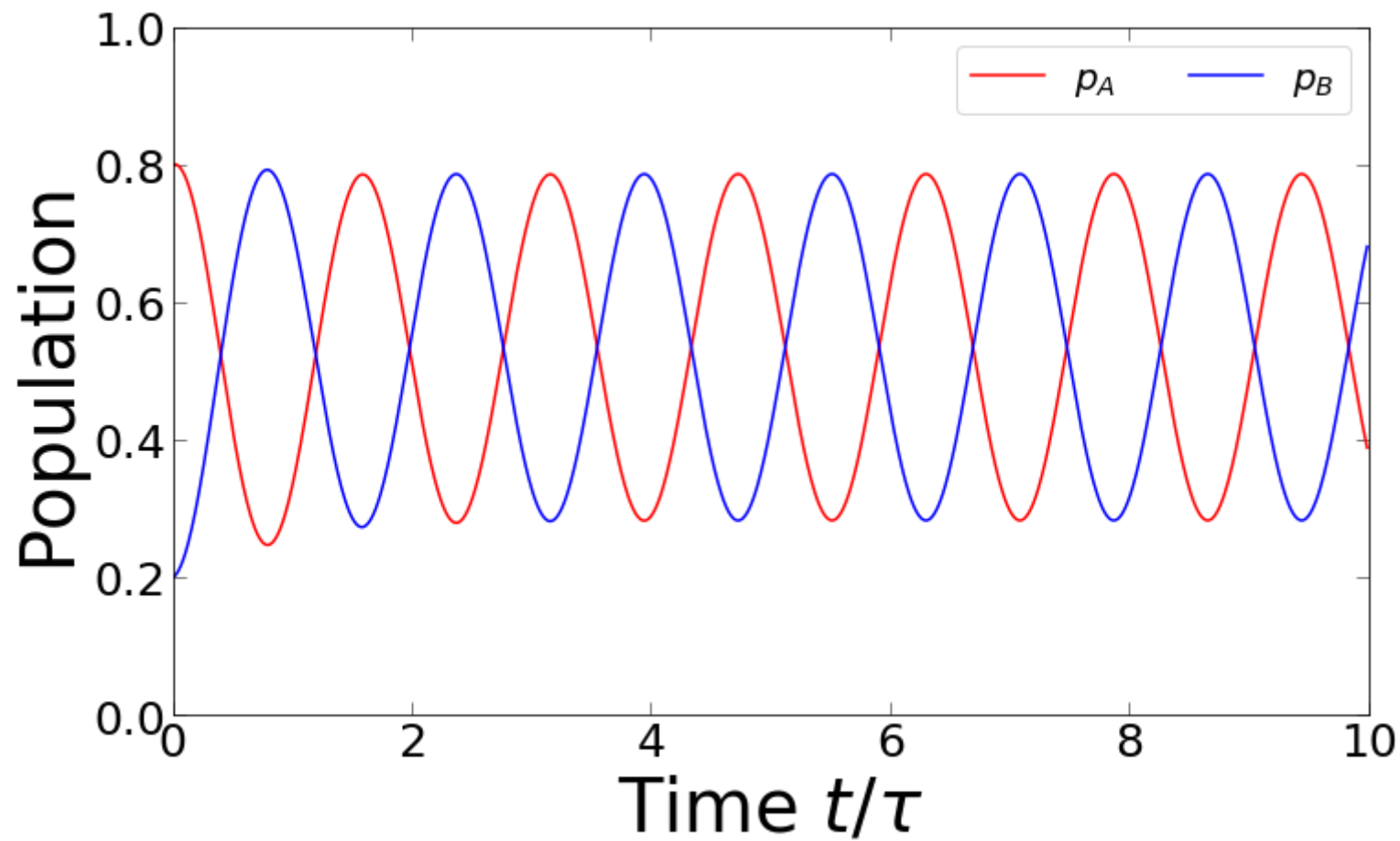
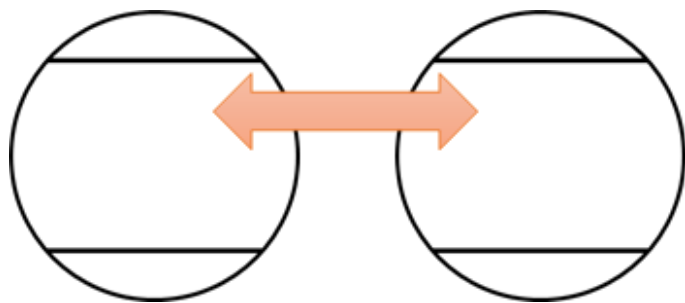


$$\hbar\omega_A = \hbar\omega_B = \hbar\omega$$

$$\frac{\hbar V}{\hbar\omega} = 0.20$$

(緩和時間 $\tau = 10$)

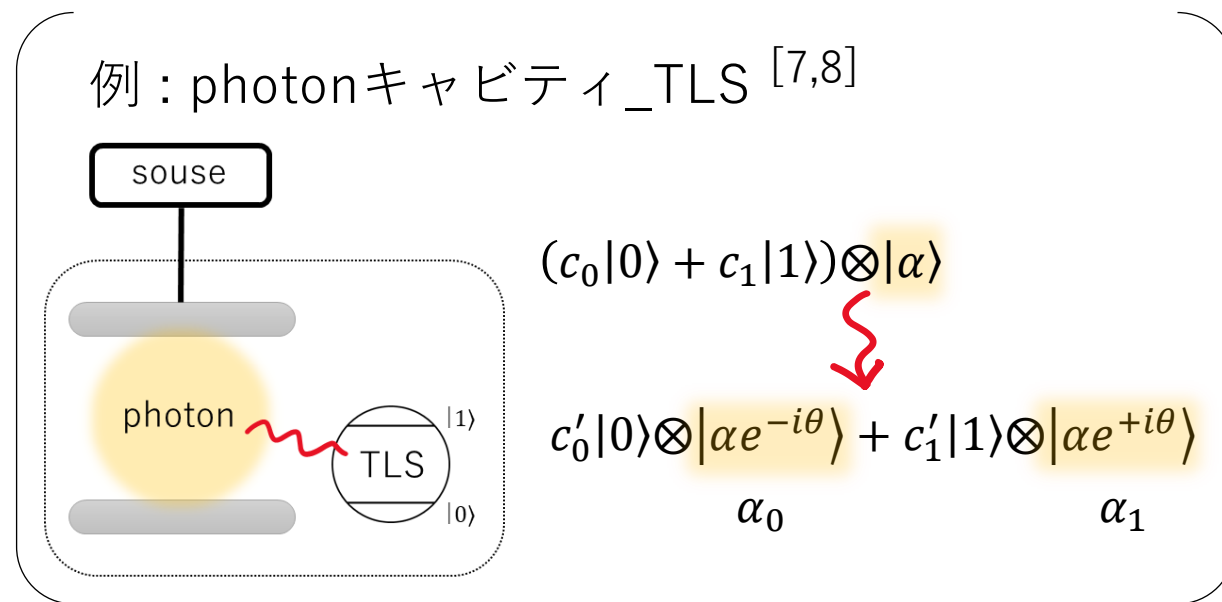




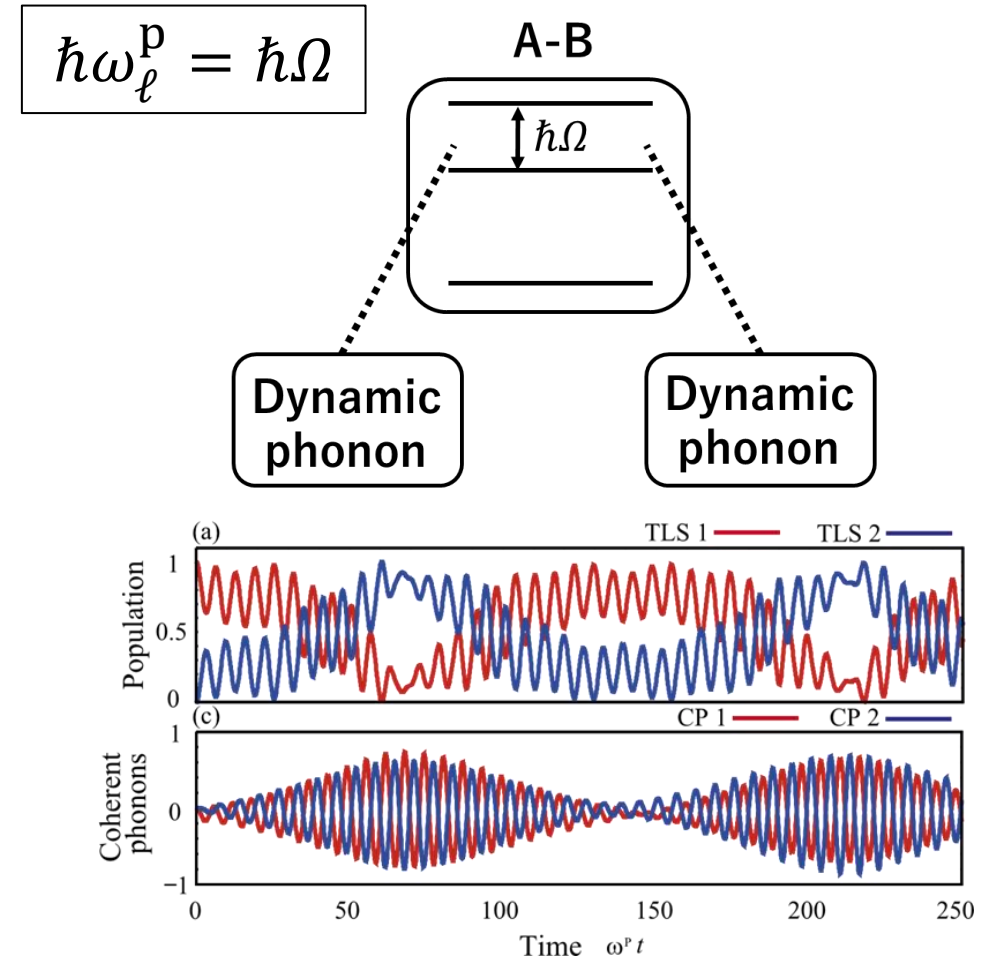
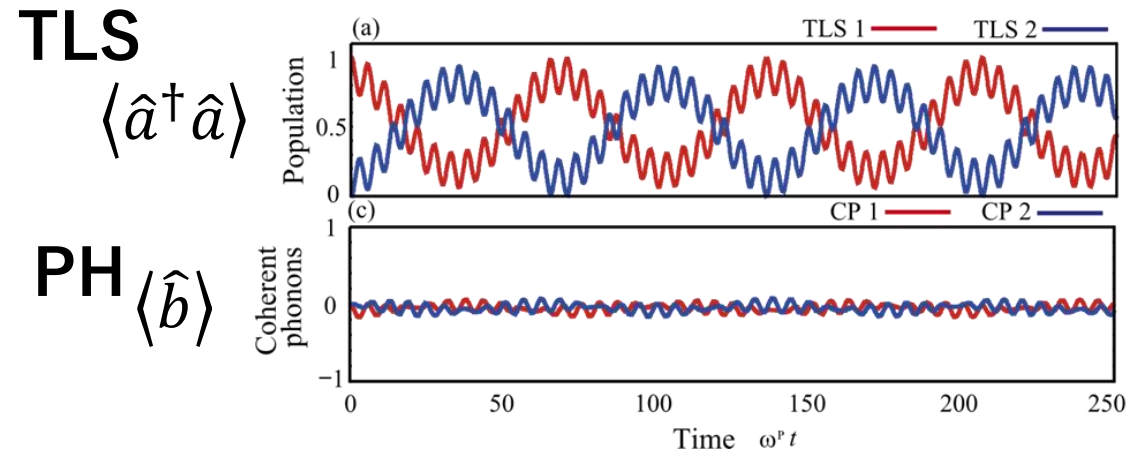
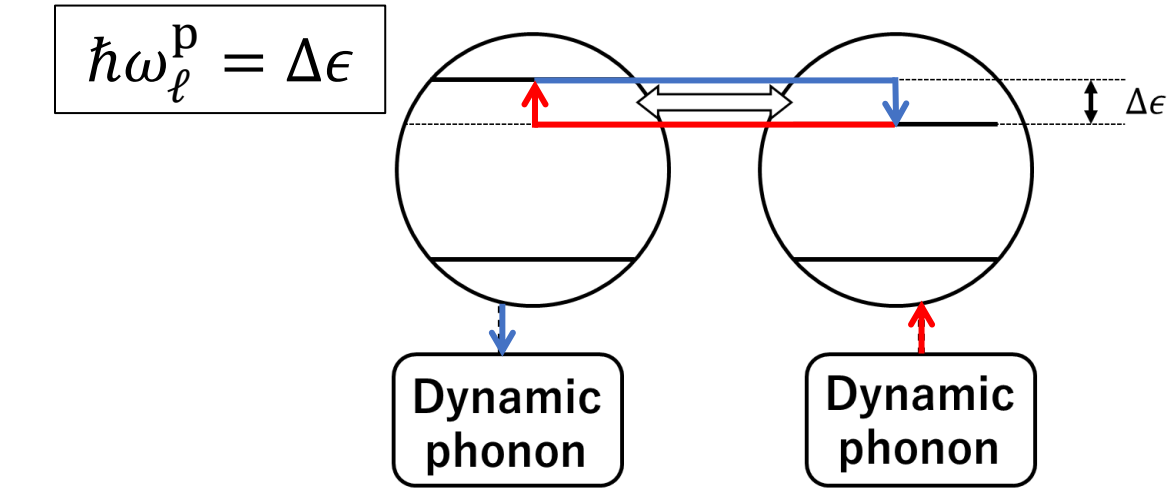
- ◆ ポピュレーションは振動し続ける，定常状態
- ◆ 孤立系全体のエントロピーは上昇し，飽和

◆ CM状態の実験的再現例

$$\hat{\rho}_p = \frac{1}{2} (|\alpha_0\rangle\langle\alpha_0| + |\alpha_1\rangle\langle\alpha_1|)$$



◆ 動的フォノンによる**励起移動**支援 [5]



◆ 複合孤立系に対するSEAQT基本運動方程式

SEAQT

複合孤立系(M体)

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + \sum_{J=1}^M \{\hat{D}_J, \hat{\rho}_J\} \otimes \hat{\rho}_{\bar{J}}$$

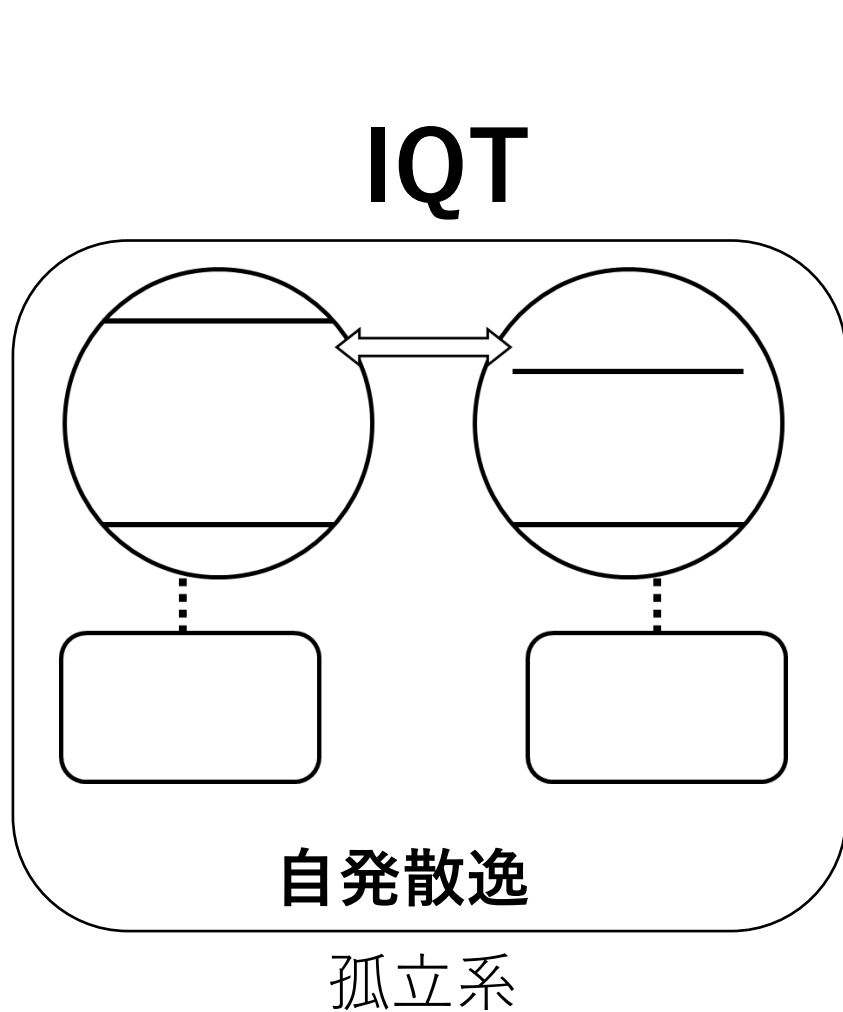
$$\hat{D}_J = -\frac{1}{2\tau_J} \Delta \left((\hat{S})^{(J)} + \beta_J (\hat{H})^{(J)} \right)$$

$$(\hat{F})^{(J)} = \text{Tr}_{\bar{J}} [\hat{I}_J \otimes \hat{\rho}_{\bar{J}} \hat{F}]$$

SEA仮説に追加

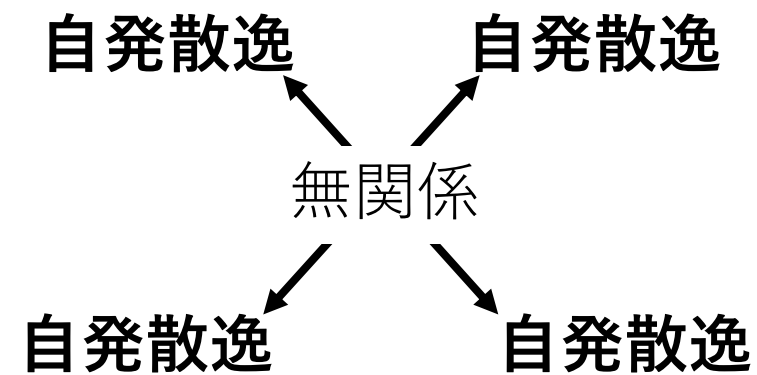
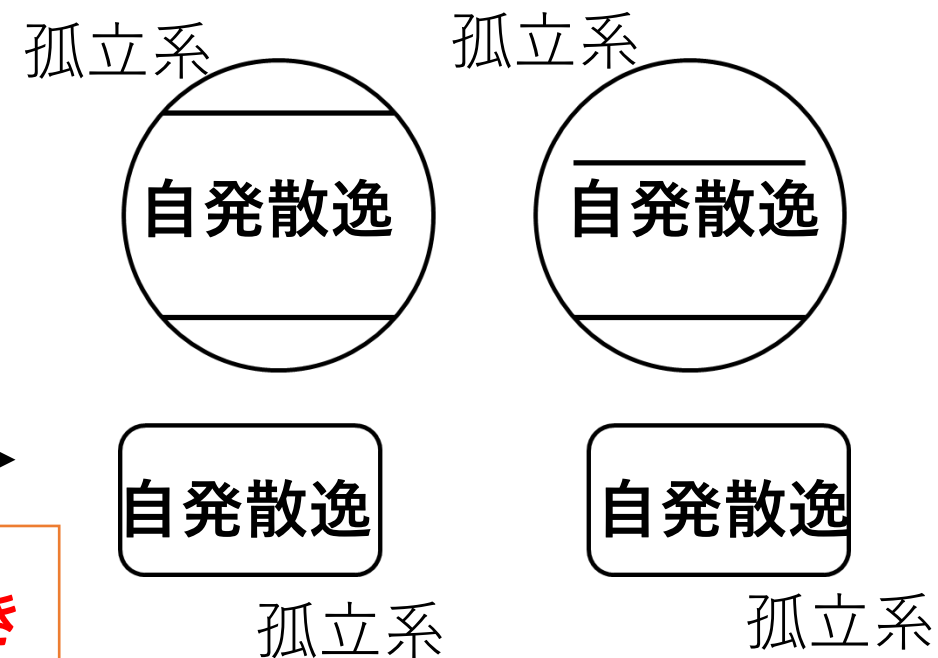
$$\hat{E}_D \hat{\gamma}^\dagger = \sum_{J=1}^M \hat{E}_{DJ} \hat{\gamma}_J^\dagger \otimes \hat{\rho}_{\bar{J}}$$

因果律
(孤立系内の部分系)



→

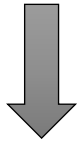
無相関のとき



◆ 励起子-フォノン結合系：ハミルトニアン の平均場近似

平均場近似

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{\substack{\ell, \ell' = \text{A, B} \\ (\ell \neq \ell')}} \hbar g_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \otimes (\hat{b}_{\ell} + \hat{b}_{\ell}^{\dagger}) \otimes \hat{I}_{\ell'} \otimes \hat{I}_{\text{p}\ell'}$$



$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{int}} = \sum_{\substack{\ell, \ell' = \text{A, B} \\ (\ell \neq \ell')}} \hbar g_{\ell} \big\{ & \langle \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \rangle (\hat{b}_{\ell} + \hat{b}_{\ell}^{\dagger}) \otimes \hat{I}_{\text{AB}} \otimes \hat{I}_{\text{p}\ell'} \\ & + \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} (\langle \hat{b}_{\ell} \rangle + \langle \hat{b}_{\ell}^{\dagger} \rangle) \otimes \hat{I}_{\ell'} \otimes \hat{I}_{\text{p}} \\ & - \langle \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \rangle (\langle \hat{b}_{\ell} \rangle + \langle \hat{b}_{\ell}^{\dagger} \rangle) \otimes \hat{I} \big\} \end{aligned}$$

初期無相関

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_{\text{A}} \otimes \hat{\rho}_{\text{B}} \otimes \hat{\rho}_{\text{pA}} \otimes \hat{\rho}_{\text{pB}}$$

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_{\text{AB}} \otimes \hat{\rho}_{\text{pA}} \otimes \hat{\rho}_{\text{pB}}$$

見かけ上、
無相関
(TLS-phonon)

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{AB}} &= \sum_{\substack{\ell, \ell' = \text{A, B} \\ (\ell \neq \ell')}} \left(\hbar \omega'_{\ell} \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \otimes \hat{I}_{\ell'} + \hbar V \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \otimes \hat{a}_{\ell'} \right) \\ \omega'_{\ell} &= \omega_{\ell} + g_{\ell} \left(\langle \hat{b}_{\ell} \rangle + \langle \hat{b}_{\ell}^{\dagger} \rangle \right) \end{aligned}$$

$$\tilde{H}_{\text{p}} = \sum_{\substack{\ell, \ell' = \text{A, B} \\ (\ell \neq \ell')}} \hbar \left\{ \omega_{\ell}^{\text{p}} \hat{b}_{\ell}^{\dagger} \hat{b}_{\ell} + g_{\ell} \langle \hat{a}_{\ell}^{\dagger} \hat{a}_{\ell} \rangle (\hat{b}_{\ell} + \hat{b}_{\ell}^{\dagger}) \right\} \otimes \hat{I}_{\text{p}\ell'}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{AB}} + \hat{H}_{\text{p}} + \hat{H}_{\text{int}} \longrightarrow \tilde{H} = \tilde{H}_{\text{AB}} + \tilde{H}_{\text{p}}$$

見かけ上、非相互作用 (TLS-phonon)

$$\ln \hat{\rho} = \ln \hat{\rho}_{\text{AB}} \otimes \hat{I}_{\text{p}} + \left(\sum_{\ell = \text{A, B}} \ln \hat{\rho}_{\text{p}\ell} \otimes \hat{I}_{\text{p}\ell'} \right) \otimes \hat{I}_{\text{AB}}$$

◆ 励起子-フォノン結合系：運動方程式

TLS

$$\frac{d \hat{\rho}_{AB}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{AB}, \hat{\rho}_{AB}] + \sum_{J=A,B} \{\hat{D}_J, \hat{\rho}_J\} \otimes \hat{\rho}_{\bar{J}}$$

$$\ln \hat{\rho}_{AB} = \sum_i^4 \ln p_i^{AB} |p_i^{AB}\rangle \langle p_i^{AB}|$$

$$\dots \hat{D}_J = -\frac{1}{2\tau_J} \Delta \left((\ln \hat{\rho}_{AB})^{(J)} + \beta_J (\tilde{H}_{AB})^{(J)} \right)$$

PH

$$\frac{d \hat{\rho}_{p\ell}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{p\ell}, \hat{\rho}_{p\ell}] + \{\hat{D}_{p\ell}, \hat{\rho}_{p\ell}\}$$

$$\dots \hat{D}_{p\ell} = -\frac{1}{2\tau_{p\ell}} \Delta (\ln \hat{\rho}_{p\ell} + \beta_{p\ell} \tilde{H}_{p\ell})$$

PH

$$\frac{d \langle \hat{b}_\ell \rangle}{dt} = -i \left(\omega_\ell^p \langle \hat{b}_\ell \rangle + g_\ell \langle \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \rangle \right) + D_{\langle b \rangle}$$

$$\hat{\rho}_{p\ell} \ln \hat{\rho}_{p\ell} = \sum_{k=+,-} c_k \ln c_k |c_k\rangle \langle c_k|$$

PH

$$\frac{d \langle \hat{b}_\ell^\dagger \hat{b}_\ell \rangle}{dt} = i g_\ell \langle \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \rangle \left(\langle \hat{b}_\ell \rangle - \langle \hat{b}_\ell^\dagger \rangle \right) - \left(\frac{g_\ell}{\omega_\ell^p} \right) (D_{\langle b \rangle} + D_{\langle b \rangle}^*)$$

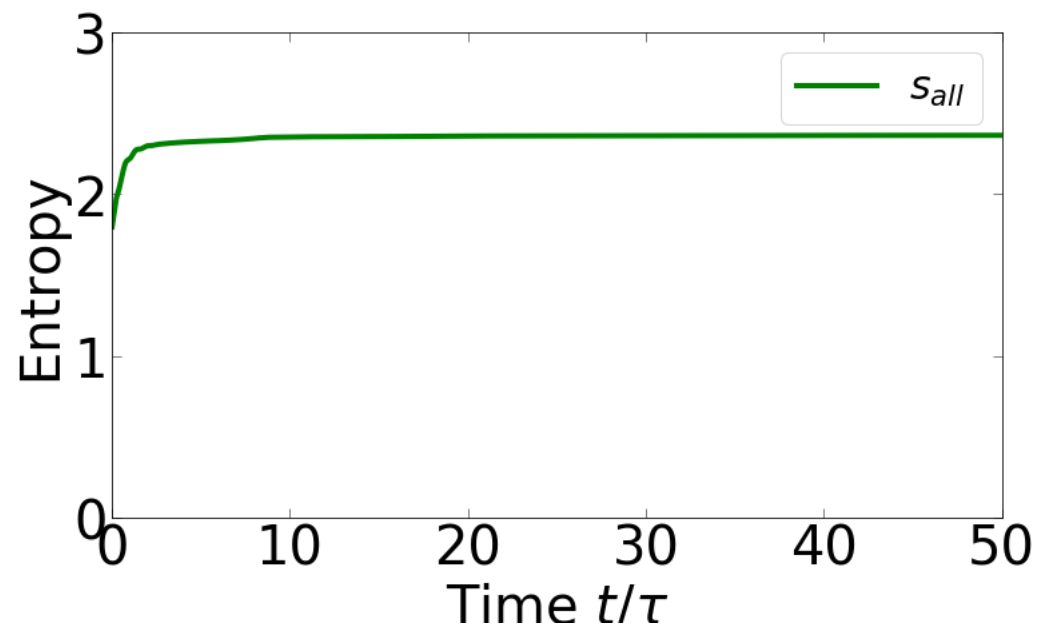
$$D_{\langle b \rangle} = -\frac{1}{2\tau_{p\ell}} \left\{ \omega_\ell^p \langle \hat{b}_\ell \rangle + g_\ell \langle \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \rangle + 2g_\ell \langle \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \rangle \left(\langle \Delta \hat{b}_\ell \Delta \hat{b}_\ell \rangle + \langle \Delta \hat{b}_\ell^\dagger \Delta \hat{b}_\ell \rangle \right) \right\}$$

※ 今, $|\alpha_0\rangle, |\alpha_1\rangle$ は

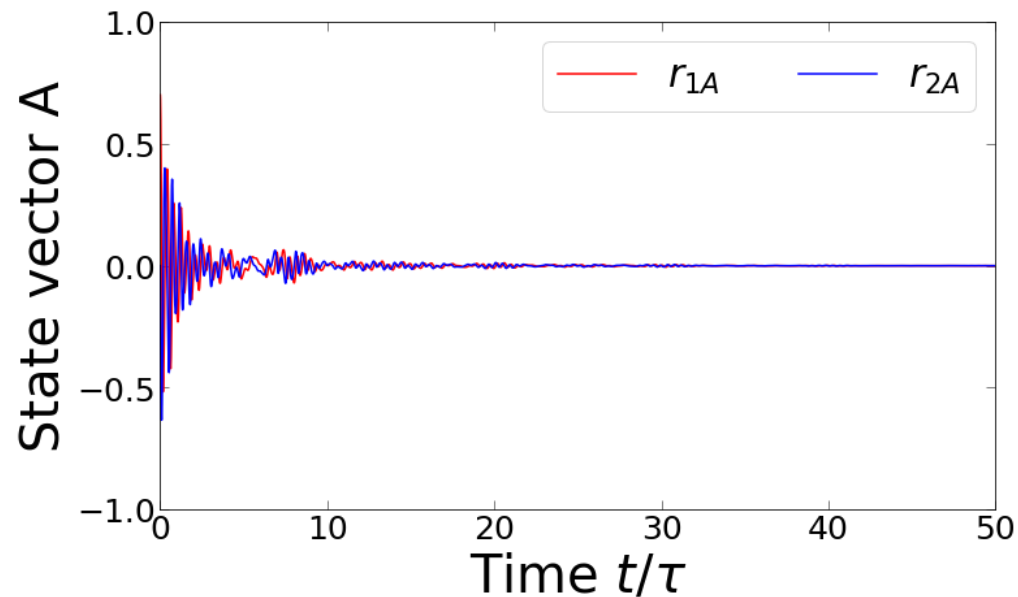
$$\alpha_0 = r e^{i\theta_0} \quad \alpha_1 = r e^{i\theta_1}$$

としている

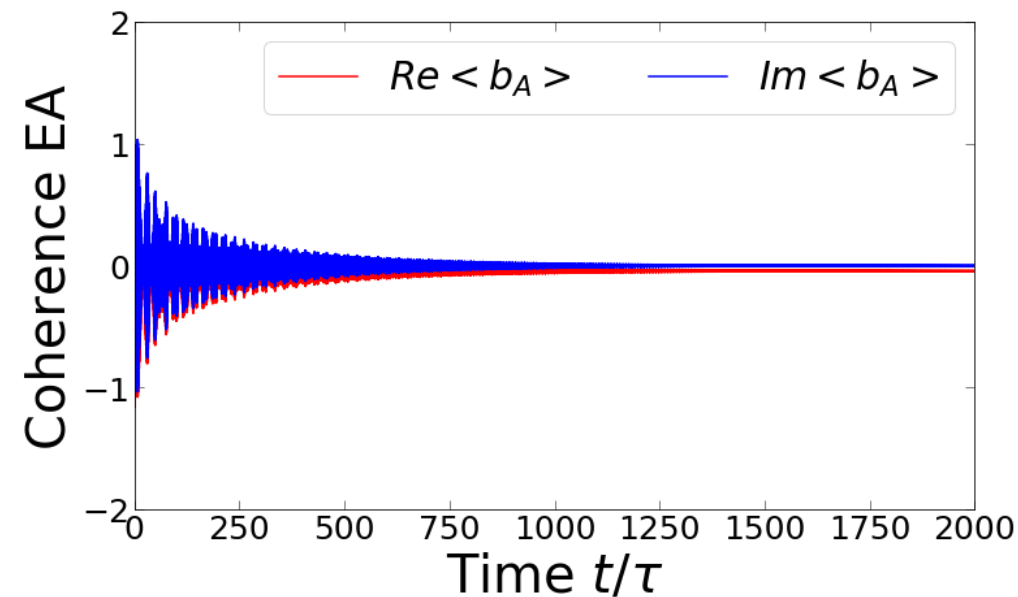
◆ 励起子-フォノン結合系
: 解析結果



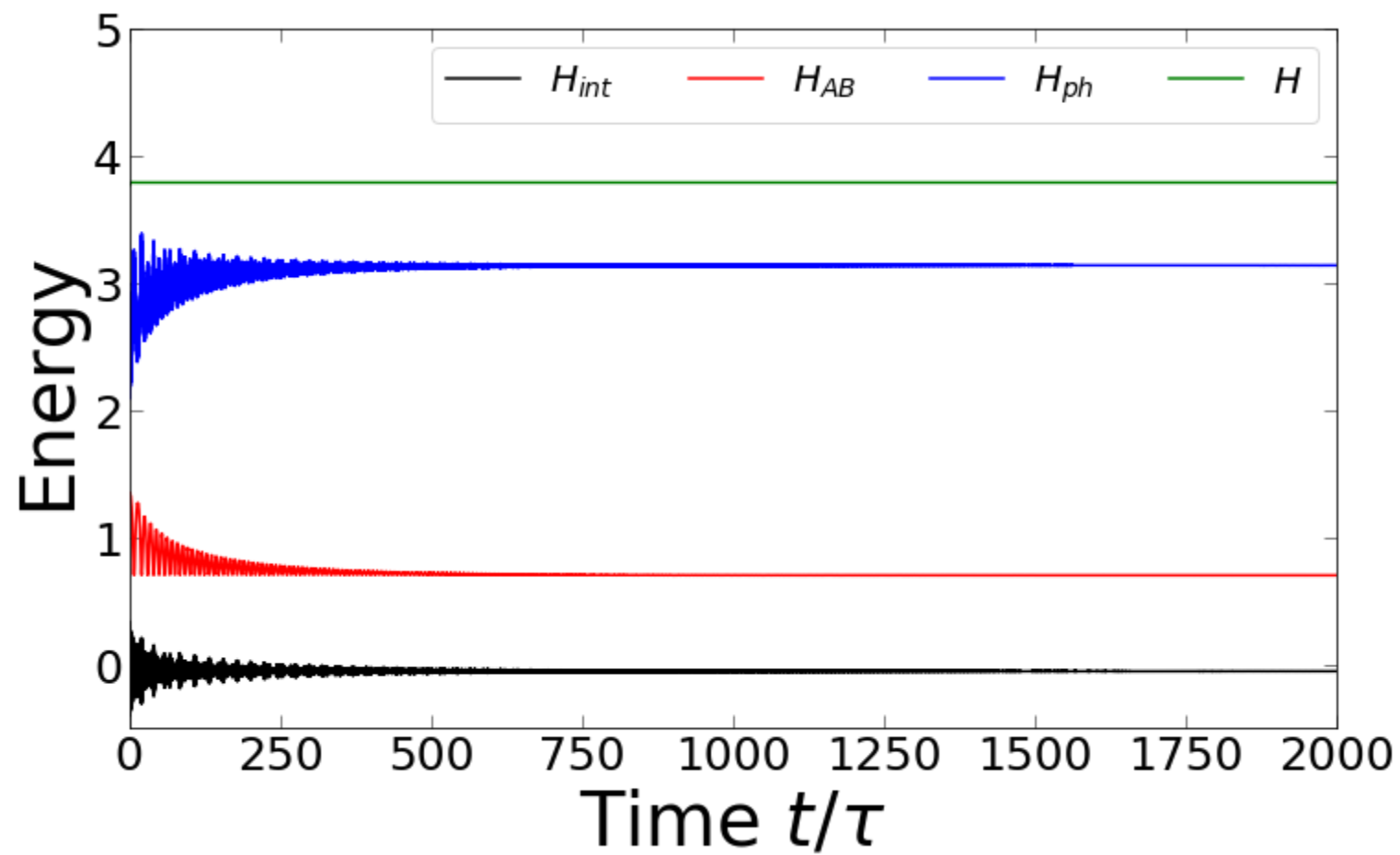
全体エントロピー



二準位系状態ベクトル r_1, r_2



コヒーレントフォノン $$



各エネルギー期待値