3E01

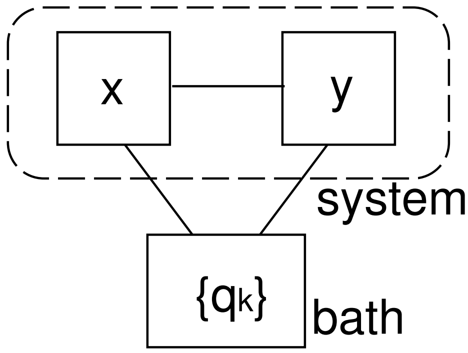
経路積分影響汎関数理論を用いた熱浴中の二自由度系における状態緩和とデコヒーレンス過程の解析

(分子研) ○三上泰治・岡崎 進

【序論】

本研究では、デコヒーレンスを異なる量子状態間の干渉項の消失として定義する。分子動力学計算の一手法である量子古典混合計算という方法論的な見地から、密度行列のコヒーレンス項をどのように処理するべきか常に意識しなければならず、デコヒーレンスは非常に重要な問題である。このような学術的な興味にとどまらず、デコヒーレンスは量子通信・量子コンピューターの実現の障害ともなっており、工学的な分野においても非常に関心が高いトピックとなっている。本研究では、Caldeira-Leggett の方法 [1] を拡張し、熱浴に接続した 2 つの自由度 x および y の状態間コヒーレンスがどのように消失していくかについて理論計算・考察を行った。

【計算方法】



熱浴 $\{q_k\}$ に接続した自由度 x、y を考える。すべての自由度 x、y、$\{q_k\}$ は調和振動子として取り扱うことができるとする。また、x と y の間、x と $\{q_k\}$ の間、y と $\{q_k\}$ の間にはそれぞれ線形の相互作用 $\lambda^2 xy$、$C_{xk}xq_k$、$C_{yk}yq_k$ が存在するとする。初期状態において系と熱浴を分割して記述することができ、また熱浴が平衡状態 $e^{-\beta H_b}$ にあると仮定するとシステムに関する縮約密度行列 $\rho(x_i, x_i', y_i, y_i')$ のプロパゲーター $\mathcal{J}(x_f, x_f', y_f, y_f', t; x_i, x_i', y_i, y_i')$ を厳密な形で得ることができる [2]。本研究では厳密解を経路積分影響汎関数の方法を用いて導出した。得られたプロパゲーターはガウス関数として記述されているので、x と y の初期状態を調和振動子の基底関数 $\{\phi_n(x)\phi_m(y)\}$ で張るならば、縮約密度行列の時間発展

$$\rho(x_f, x_f', y_f, y_f', t) = \int \mathrm{d}x_i \mathrm{d}x_i' \mathrm{d}y_i \mathrm{d}y_i' \mathcal{J}(x_f, x_f', y_f, y_f', t; x_i, x_i', y_i, y_i')\rho(x_i, x_i', y_i, y_i') \qquad (1)$$

は単純な、しかし膨大な量のガウス積分を実行すると計算することができる。調和振動子の基底関数は完全性を備えているので、この理論は原理的にシステムの任意の初期密度行列の時間発展に対して適用可能である。

【結果】

自由度 x および y の振動子の振動数 ω_x、ω_y をそれぞれ $\omega_x = 100\mathrm{cm}^{-1}$、$\omega_y = 101\mathrm{cm}^{-1}$ とした。また、x と y の間の相互作用 λ を $\lambda = (1/5)\omega_x$ とした。調和振動子浴はオーミック熱浴として近似し、スペクトル密度を $\mathbf{I}(\omega) = \gamma\omega\exp(-\omega/\omega_\mathbf{c})$ で表した。γ は定数を行列要素として持つ (2×2) 行列であり、x と $\{q_k\}$ および y と $\{q_k\}$ の間の相互作用の強度を表す。ここでは $\gamma_{xx} = \gamma_{yy} = 0.1\,\mathrm{ps}^{-1}$、$\gamma_{yx} = \gamma_{xy} = 0$ とした。ω_c はカットオフ周波数であり、$\omega_c = 30\,\omega_x$ とした。ここで x、y の初期状態を $\psi(x,y) = (1/\sqrt{2})(\phi_0(x)+\phi_1(x))\phi_0(y)$ として、自由度 x がもつ状態間コヒーレンスが系の時間発展によりどのように変化するのか x に関する縮約密度行列を用いて解析する。x と y の同時観測も可能であるが、ここではまず $\{q_k\}$ だけではなく自由度 y についてもさらに縮約し、x についてのみ観測を行うとする。図 1 に自由度 x の振動状態に基底を変換した縮約密度行列 $\rho_{mn}(t) = \int dxdx'dy\phi_n^*(x)\rho(x,x',y,y,t)\phi_m(x')$ の対角成分の経時変化を示す。密度行列の対角成分は状態の存在確率を表しているので、$t = 0$ においては当然 $\rho_{00} = \rho_{11} = 1/2$、$\rho_{22} = 0$ となる。x と y は共鳴しあうので、ρ_{00}、ρ_{11} は 10 ps 程度の周期のうなりを持ち、時間が経つにつれ減衰する。そして、$t \to \infty$ で平衡状態に到達する。図 2 に縮約密度行列の非対角項の実部 $Re\rho_{10}(t)$(コヒーレンス項) の経時変化を示す。$Re\rho_{10}(t)$ は x の周波数 ω_x で振動しながら減衰していき、デコヒーレンスする。図から明らかなように、$Re\rho_{10}(t)$ も密度行列の対角項と同様に単調な減衰とはならず、y との共鳴によって x のコヒーレンスの生成・消滅が行われる。今後、この方法論を化学的に、また物理的に興味深い様々な現象、特にエンタングルメントの基本的理解に応用していく予定である。

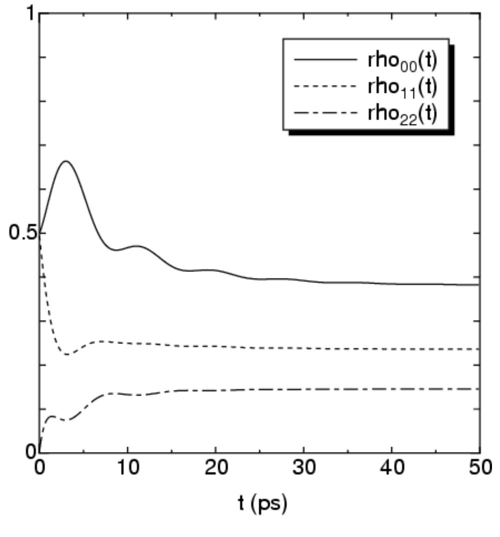


図 1: 縮約密度行列の対角項の経時変化

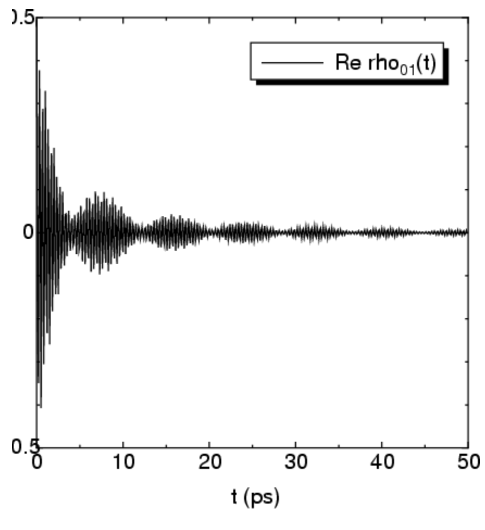


図 2: 縮約密度行列の非対角項の経時変化

【参考文献】

[1] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Physica A, **587**, 121 (1983).

[2] H. Grabert, P. Schramm, and G.-L. Ingold, Phys. Rep., **168**, 115 (1988).