2P10

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デコヒーレンス過程の解析

(分子研) ○三上泰治・岡崎 進

【序論】

デコヒーレンスは異なる量子状態間の干渉項の消失として定義される。デコヒーレンスは波動関数の収縮問題を解決するための一つの可能性として考えられており、たくさんの研究者から注目を集めている。一方で、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しても、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ないので、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のかについて理論計算・考察を行った。

【計算方法・結果】

熱浴に接続した自由度 x、y を考える。この 2 つの自由度 x、y をシステムと呼ぶことにする。自由度 x、y はここでは調和振動子で構成した。x と y の間には線形の相互作用 $\lambda^2 xy$ が存在する。熱浴は調和振動子浴 $\{q_k\}$ であり、x と q_k、y と q_k の間にはそれぞれ線形の相互作用 $C_{xk}xq_k$、$C_{yk}yq_k$ が存在する。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 $\rho(x,x',y,y')$ のプロパゲーターを厳密な形で得ることができる。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。また、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できる。

ハミルトニアンのパラメーターを $\omega_x = 100\mathrm{cm}^{-1}$、$\omega_y = 101\mathrm{cm}^{-1}$、$\lambda = (1/5)\omega_x$ 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、$\gamma_{xx} = \gamma_{yy} = 0.1\,\mathrm{ps}^{-1}$、$\gamma_{yx} = \gamma_{xy} = 0$ 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 に縮約密度行列の対角成分の経時変化を示す。ρ_{00}、ρ_{11} は 0.5 から出発し、$t\to\infty$ で平衡状態に到達する。x と y は共鳴しあうので、ρ_{00}、ρ_{11}、ρ_{22} は $10\,\mathrm{ps}$ 程度のうなりを持つようになる。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。

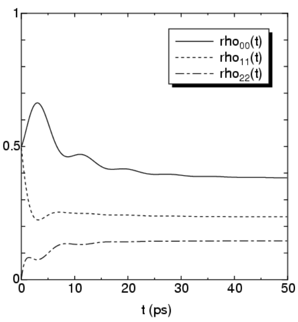

図 1: 縮約密度行列の対角項の経時変化

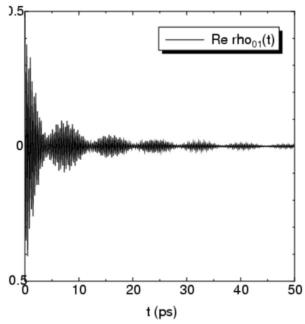

図 2: 縮約密度行列の非対角項の経時変化