学位論文の要約

題目　Quantum mechanics of periodic dissipative systems: Application to rotational systems and finite dimensional systems

(周期散逸系の量子力学: 回転系と有限次元系への応用)

氏名　岩元　佑樹

・背景

分子の運動が周りの環境からどのような影響を受けるかというのは物理的、化学的に重要な問題である。古典的には並進運動、回転運動に関して、摩擦力とランダム力を含んだランジュバン方程式に従うことが知られている。このような系に関して量子化を行う方法はいくつかあるが、その中でも System-Bath model が最も成功を収めている。散逸環境中の並進運動の量子化については以下の Caldeira-Leggett model(CL model)が良く用いられている。この時 Hamiltonian から系の自由度と熱浴の自由度に関して正準運動方程式を書き下し、熱浴の自由度について消去すると、上記のランジュバン方程式が得られる。したがってこの Hamiltonian を用いれば、ランジュバン系を量子化することができる。また系＋熱浴の密度演算子を考え、熱浴の自由度について消去した縮約密度演算子を考えると、系の運動が熱浴にどのような影響を受けるかが分かる。ここで十分温度が高いとすると以下の CL Master 方程式が導出される。縮約密度演算子はこの方程式にしたがって時間発展する。温度が低い場合や一般のスペクトル密度を考える場合は階層型運動方程式による方法が用いることができる。

・回転不変なシステムバスハミルトニアンを用いて計算された量子二次元回転子の線形吸収スペクトル

散逸環境下の並進運動は CL model を用いれば量子化できるが、二次元の回転運動に関してはランジュバン方程式の形が同じであるにもかかわらず問題が起こる。

実際 CL model を用いて回転子の吸収スペクトルを計算した先行研究では離散化された角運動量由来のスペクトルが微小の散逸でも消えてしまうことが示されている。この問題は Hamiltonian の相互作用項が回転角に対して周期的になっていないことに起因して起こるものであるため、2 つの調和振動子熱浴に 2 次元の方向ベクトルが結合している Rotationally Invariant System-Bath model (2D-RISB model)を導入した。この model を用いても CL model と

同様にランジュバン方程式を導出することができ、また回転角に関して周期的になっているという点で優れている。この Hamiltonian から 2 次の量子マスター方程式を導出し、吸収スペクトルを計算した。摩擦が弱いときは回転準位間の遷移のスペクトルがローレンチアンの形に広がることが確認できた。また摩擦が大きいときは古典的なランジュバン方程式による解析解の結果と一致した。このように古典的な領域と量子的な領域を統一的に扱える枠組みは今までになかったものであり、この結果はこの Hamiltonian の正当性を裏付けるものである。

・回転不変なシステムバスハミルトニアンを用いて計算された三次元回転子の量子開放系ダイナミクス：線形回転スペクトルと二次元回転スペクトル

上記の 2D-RISB model の拡張としてより現実的な系に応用できる 3 次元回転への適用が考えられる。2D-RISB model が 2 つの調和振動子熱浴に 2 次元の方向ベクトルを結合させたものであったことから、これを拡張し 3 つの調和振動子熱浴に 3 次元の方向ベクトルを結合させた 3D-RISB model を導入した。この Hamiltonian からランジュバン方程式を導出すると、塩化水素などのような線形分子の天頂角と方位角に関するランジュバン方程式を得ることができるため、この Hamiltonian はそのような系の量子化に利用できることがわかる。この場合も同様に量子マスター方程式を導出し、吸収スペクトルを計算した。また 2 次元回転子の時とは異なり、3 次元回転では方位量子数と磁気量子数の情報を含み、散逸環境下で電場をかけた時の Stark シフトなども数値計算で見られることを確認した。

・離散ウィグナー関数の周期的なシステムバスモデルに基づく量子開放系ダイナミクスの理論

上記の Hamiltonian で散逸環境下での並進運動や回転運動の量子化をすることができるが、実際に CL model や 2D-RISB model をもとに数値計算するとき、無限次元 Hilbert 空間であることから、微分を差分に置き換えるということが必要である。この差分の取り方は色々なものがあり、計算が収束するように適宜方法を選ぶということが行われているのが実情であり、この差分の取り方を下手に選んだりメッシュ幅が荒すぎたりすると発散する。そこで初めから空間を有限次元 Hilbert 空間に近似することを考える。ここで 2D-RISB model を一般の周期に拡張し、有限次元の Hilbert 空間に適用した Periodic Invariant System-Bath model(PISB model)を導入する。このモデルは周期を 2π にとると二次元の回転、周期を無限に近づけていくと並進運動とこれらを統一的に表すことができる。こうすると、時間発展方程式を一意に得ることができ、また微分を差分に置き換えるという操作がないため、数値計算を極めて安定に行うことができることを示した。またこの有限次元の定式化は量子

情報分野で生まれた離散 Wigner 分布を用いることができ、この Wigner 分布を用いた離散量子 Fokker-Planck 方程式を導出した。この式を用いて 2 次元回転子と調和振動子に関して数値計算を行った。この結果従来の方法では数値的に発散するような少ない状態数でも安定に計算することができ。状態数を増やすと真の解に近づくことを確認した。この PISB model は CL model や 2D-RISB model を統一的に表し、また数値的に安定な計算方法を与えるという点で有用である。