

( 続紙 1 )

京都大学	博士 ( 理 学 )	氏名	岩元 佑樹
論文題目	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)		
(論文内容の要旨)			
<p>散逸環境下での分子の振動運動や回転運動は物理化学的問題において重要である。古典的領域においては、これらの運動はLangevin方程式に従うことが知られている。この系を量子化するのに、並進運動や振動運動に関してはCaldeira-Leggettモデルがよく用いられる。しかし二次元の回転運動に関してこのモデルを用いると、系と熱浴の相互作用が系の自由度に対して周期的になっていないため、本来出るはずの量子的な回転バンドをつぶしてしまうという問題があった。</p> <p>そこで本学位論文では、系の自由度に対して周期的で、かつLangevin方程式を導出することができるRotationally Invariant System-Bathモデル(RISBモデル)を導入した。このモデルから量子マスター方程式を導出し、回転の線形吸収スペクトルを数値的に計算した。その結果、摩擦が小さい領域では量子的な個々の回転バンドを再現し、摩擦が大きい領域になると古典的なLangevin方程式による解析解と一致した。またこのモデルを三次元の回転に拡張した。この三次元のRISBモデルに関して、このモデルハミルトニアンから線形分子のEuler-Langevin方程式を導くことができることを示した。そしてこの場合についても二次元の時と同様に量子マスター方程式を導出して数値計算を行い、高摩擦領域においてはEuler-Langevin方程式による解析解と一致することを確かめた。また電場をかけた時の回転スペクトルの変化や二次元回転スペクトルについても論じた。</p> <p>またこのRISBモデルの周期を一般化し次元を有限次元にしたPeriodic Invariant System-Bathモデル(PISBモデル)を導入した。このモデルハミルトニアンは周期を変化させることでCaldeira-LeggettモデルとRISBモデルを統一的に表すことが出来る。また従来は密度行列の時間発展を計算する際、微分を差分に置き換えるということが必要であったが、この定式化では最初から有限次元であるため、差分に置き換えるという操作が存在しない。このとき、ポピュレーションの時間微分が0になることを示すことが出来て、それ故に安定に数値計算することができる。そのことを示すため、二次元回転子と調和振動子について数値計算を行った。その結果、従来の方法では計算できないような少ない状態数でも発散せず計算できることが示された。また従来の方法では計算できないような極端に局在化した初期状態からはじめても、平衡分布に至るまで計算できることが示された。</p>			

(続紙 2 )

(論文審査の結果の要旨)

本学位論文では、散逸環境下での回転運動を記述するSystem-Bathモデルを提案し、量子マスター方程式を用いて回転スペクトルを数值的に計算した。回転運動に関して古典的な領域と量子的な領域を統一的に記述することができるモデルを用いた解析は、本研究により初めて行われこの結果は意義深いものであると考えられる。

また申請者は散逸環境下での並進運動と回転運動を統一的に表す有限次元のSystem-Bathモデルを提案した。この方法により従来の方法では計算することが難しかった状況においても数值的に安定に行うことができることを示した。この有限次元化の方法は空間を離散的で有限個の状態とみるもので数値計算との相性が良く、コンピュータの計算能力が大きく向上している現代において重要であり、今後当該分野における影響も大きいと考えられる。

よって、本論文は博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。また、令和4年1月18日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。

要旨公表可能日： 2022 年 4 月 1 日以降