

学位論文の要約

題目 Hierarchical equations of motion for open quantum systems consisting of many energy states

(大規模量子散逸系を対象とした階層型運動方程式の開発)

氏名 中村 清人

序論

科学的に関心を持たれる対象は殆どの場合孤立系として取り扱うことは不可能であり、興味ある系の解析にはそれを取り巻く環境の効果を適切に取り入れる必要がある場合が多い。特に、近年発展が目覚ましい高速分光実験に代表される量子ダイナミクスの解析においては、励起状態の緩和現象やデコヒーレンス現象等において環境が果たす役割が大きく、環境までを含めた系全体の理論的・数値的解析が必要不可欠となっている。

全自由度を興味ある制御可能な「系」と、興味がなく制御不可能な「熱浴」とに分け、熱浴の自由度を縮約し系の揺動・散逸的ダイナミクスを解析するモデルは系-熱浴モデルと呼ばれている。また、このような熱浴と結合している系のことを「散逸系」や「開放系」と呼ぶ。

量子散逸系のダイナミクスを解析する手法が長年にわたって提案されており、Lindblad 方程式や Redfield 方程式は数多くの量子散逸機構の解析に多大な貢献をしてきた最たる例である。また、階層型運動方程式と呼ばれる方程式は、上述の方程式では取り扱うことの出来なかった非摂動・非マルコフ的な熱浴と結合した量子散逸系の時間発展を追うことが可能であり、量子散逸系の数値的解析対象を大きく広げること成功している。

これらの方程式は密度行列と呼ばれる量の時間発展を記述するという特徴がある。密度行列の大きさは N 準位量子系に対して $N \times N$ であり、 N 準位に対してサイズ N のベクトルで記述可能な波動方程式と比較して数値計算上不利な点を持っている。このため、準位数 N が膨大となるような系を量子散逸系の枠組みで解析することはほぼ不可能であり、殆ど行われてきていない。階層型運動方程式では、取り扱う密度演算子の個数が Lindblad 方程式や Redfield 方程式に比べて多いため、この準位数の問題は特に深刻である。密度行列繰り込み群や量子モンテカルロ法で取り扱われる様な、巨大なスピン格子系や強相関電子系を量子散逸系として捉え、その実時間ダイナミクスを追うことは現状不可能である。

一方で、これら大規模量子系の散逸的ダイナミクスに近年注目が集まっている。アルカ

リ金属をドーピングしたフラーレンは超伝導相を示すことが知られているが、レーザー励起により超伝導転移温度以上で超伝導状態に励起することが知られている。この励起状態は熱浴の効果により非超伝導状態である基底状態に緩和していくが、この緩和過程の解析は殆どなされていない。

量子キュビットはスピン熱浴による揺動散逸の影響を受けることが知られているが、スピン熱浴を解析的に縮約することは一部の例外を除いて不可能である。このため、量子キュビット+周囲のスピンを系として捉え直して解析する研究がなされている。しかしながら、この「キュビット+周囲のスピン」は孤立系として取り扱われており、温度効果や緩和ダイナミクスは正しく導入されていない。

これらの問題を解決すべく、本論文では階層型運動方程式の計算コストを減らす手法を2つ開発した。これらの手法と、それを用いた大規模散逸系の解析結果を以下に述べる。

1. 一般化 Bloch ベクトルによる基底変換

階層型運動方程式で記述される密度演算子や交換子、反交換子のエルミート性に着目し、複素数で記述される階層型運動方程式を実数のみで記述する方法を開発した。これにより、計算に必要となるメモリ容量が半減することを示した。

これを用いて、超伝導フラーレン誘導体の模型として解析されてきたホルスタイン-ハバード (HH) 模型が熱浴と結合している場合の光学応答を解析した。低温では現れていた導体的な相が、温度上昇と共に消失することが示された。また、連続波により駆動される熱浴付き HH 模型の光学応答を現実系に対応する形で初めて解析した。電子を直接駆動する場合、オンサイトのクーロン斥力の寄与がフォノンの寄与よりも小さい場合には超伝導的な振る舞いが抑制されることが示唆された。フォノンの駆動では超電導的な振る舞いは促進されないことが示された。

2. 階層型シュレディンガー方程式

階層型運動方程式を時間積分する際、複素時間平面上に与えられる経路に沿った線積分を考えることにより、密度行列の列を独立に評価する方法（階層型シュレディンガー方程式, HSEOM）を開発した。これにより、一度の数値計算に必要な行列サイズを $N \times N$ から N に減らすことに成功した。

初期の HSEOM は、それぞれの時間 t に対し $0 \rightarrow t \rightarrow 0$ の線積分を独立に行う必要があり、計算時間が掛かるものであった。この問題を解決し、計算時間が t に線形となるような新しい HSEOM の導出を示した。

HSEOM を用いて、熱浴付き 10 キュビット量子アニーリング系の解析を行った。熱浴の効果により基底状態探索が効率化されることが示された。系-熱浴間の相互作用の大きさ

が弱～中程度の場合には、結合強度の増加に伴いより効率的になるが、中程度以上の場合には、基底状態のポピュレーションが結合強度によらずほぼ一定となることが示された。

上記に加えて、熱浴と相互作用する XXZ スピン鎖と結合している 1 キュビットの解析も行った。キュビット–スピン鎖間の相互作用の形や、スピン鎖のサイズ、温度によるキュビットのダイナミクスの違いを示した。また、 XXZ スピン鎖の異方性によるキュビットのダイナミクスの変化について論じた。