

京都大学	博士 (理学)	氏名	中村 清人
論文題目	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)		
(論文内容の要旨)			
<p>化学は実際的な学問であり、分子の性質を調べるにあたっては、溶液や分子性結晶などの環境の中での効果を調べるのが重要である。特に量子ダイナミクスの解析は、量子生物学や量子情報学などとも結びついた重要な分野である。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分野は、開放系の量子力学、あるいは、量子散逸系の統計力学と呼ばれる。</p> <p>量子散逸系のダイナミクスを記述する方程式は密度行列と呼ばれる量を用い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関数に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。この問題を解決すべく、申請者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。これらの手法を以下に述べる。</p> <p>1. 一般化 Bloch ベクトルによる基底変換</p> <p>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、計算に必要なメモリ容量が半減することを示した。また、この手法を用いてホルスタイン-ハバード模型の光学応答を解析した。</p> <p>2. 階層型シュレディンガー方程式</p> <p>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。</p> <p>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るため、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。</p> <p>この手法を用いて、量子アニーリング系、スピン鎖副環境の解析を行った。</p>			

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

申請者は本学位論文にて、熱浴の非摂動・非マルコフな挙動を厳密に記述できる階層型運動方程式の計算コストを低減する手法を二つ開発した。強相関電子系や多スピン系の分野において、熱浴による揺動散逸の効果を取り入れた非平衡ダイナミクスに対する関心は近年高まってきており、これら大規模量子散逸系を厳密に、低コストでシミュレーションできる手法を提案したことは意義深いと考えられる。階層型シュレディンガー方程式の応用例では階層型運動方程式のみならず従来用いられてきたLindblad方程式よりもコストが抑えられる可能性が示唆され、大規模量子散逸系の実時間シミュレーションの今後の発展に大きく寄与するものと考えられる。

申請者はこれら手法の応用例として、光駆動されるホルスタイン-ハバード模型の非平衡定常状態の解析を行った。ホルスタイン-ハバード模型の緩和ダイナミクスに関する理論的研究は殆どなく、当該分野への影響も大きいと考えられる。

また、申請者は応用例の一つとして、スピン熱浴をスピン鎖とボソン熱浴で近似するという試みも行った。従来、有限サイズ・孤立系として扱われてきたスピン熱浴を別の立場から定式化しようとするものであり、当該分野へ大きな影響を与えるものと考えられる。

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