

離散準位を反映した量子ダイナミクス

—物理現象から制御まで—

東京大学 理学研究科 齊藤圭司

急速な微細加工技術の進歩により、ナノスケールの物理現象の研究が盛んになってきている。特に離散準位系の量子ダイナミクスは、応用面においても重要性を増してきている。ここでは、離散準位が関与する物理系に重要になる解析手段として、純粋量子系の代表的で基本的な外場に対するレスポンスや、離散系が熱浴及び粒子浴接したときの取り扱い方法を説明する。

1 離散準位における純粋量子系のダイナミクス

最も基礎的な離散準位は2準位系である。2準位系と言っても、いったんHamiltonianの中に時間が入れば、任意の時間の波動関数を書き下すことは一般的には不可能になる。様々な外場の入れ方の中でも、最も基本的でかつ重要なものとして、時間に線形に外場をいれて行く Landau-Zener の問題や、回転波近似が可能になる外場 (ESR や NMR)、また回転波近似がもはや適用できないが解析が可能な強振動外場の問題があり得る。これらの知見から一見数値計算に頼らざるを得ないように見える可解でない問題でも、定量的な解析が可能になることが多い。

Landau-Zener 非断熱遷移

時間に線形に外場をいれて行く最も単純な問題は、次のハミルトニアンを扱う。

$$\mathcal{H}(t) = v t \sigma_z + \gamma \sigma_x, \quad (1)$$

今ここに $\sigma_\alpha (\alpha = x, y, z)$ はパウリ行列。 v は掃引速度であり、 2γ は共鳴時間 $t = 0$ における系のギャップを与える。この系で $t = -\infty$ に $|\downarrow\rangle$ であったスピンの $t = \infty$ で $|\uparrow\rangle$ になる確率 P はどうなるか？この問題は、様々な方法で解析可能で、Landau がとったやりかたは複素ゼロ点の方法であり、Zener はよく知られた特殊関数 (ウエーバー関数) を通して厳密に解析する方法をとった。ほかにも一般ラプラス変換の方法や、 $\gamma \sigma_x$ を摂動項とみなして摂動を無限次までとる方法もある。解は以下のような単純な値を持つ [1]。

$$P = 1 - \exp\left(-\frac{\pi\gamma^2}{v}\right). \quad (2)$$

この確率は Mn_{12} や Fe_8 など分子磁性体に対する実験で、非断熱遷移に起因する磁化過程を解析する上で重要になった [2]。また Landau-Zener の機構においては、実は波動関数における位相も

解析でき、重要な情報を与えてくれる。このような情報はコヒーレンスが重要になる物理現象の解析には非常になると思われる。

Photo asisted tunneling, Coherent destruction of tunneling

離散準位に高速の振動外場を与えると、サブバンドが形成し、そのバーチャルな準位が関与するダイナミクスが重要になることがある。典型的なハミルトニアンは、以下のようになる。

$$\mathcal{H}(t) = (h_0 + A \cos(\omega t)) \sigma_z + \gamma \sigma_x, \quad (3)$$

系の持つ固有の時間スケール $1/\gamma$ に比べ、外場の周期 $2\pi/\omega$ は非常に短いとする。このとき近似解析が可能になり、時刻 $t = 0$ で $|\downarrow\rangle$ を向いていたスピンの $|\uparrow\rangle$ になる振動数 Ω は以下のように表される。

$$\Omega = \begin{cases} 2\gamma J_n\left(\frac{2A}{\omega}\right) & 2h_0 = n\omega \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$

ここに、 $J_n(\dots)$ は n 次のベッセル関数である。有限な値 Ω は振動外場によってアシストされたトンネルを表し、photo asisted tunneling (PAT) と呼ばれ最近実験でも確認されている。またベッセル関数はゼロ点を持つので、トンネルが消えるパラメータが存在し coherent destruction of tunneling (CDT) と呼ばれている [3]。

2 環境の効果: 熱浴、粒子浴

2.1 熱浴を表すマスター方程式

ナノスケールの物理系でコヒーレンス時間が一般に長いといっても一般には熱的環境の効果は無視できない。とくに分子磁性体などでは環境の効果はむしろ現象を大幅に変え、それがゆえに興味深い現象が観測されることがある [4]。ここでは熱的環境を記述するためのマスター方程式を書き、それがどのように数値計算できるかを説明する。全系を注目する系のハミルトニアン H と熱浴 H_R とそれらの相互作用部分とに分ける; $H_T = H + H_R + H_{\text{int}}$ 。チルダ付きの演算子を $H + H_R$ の分だけ先に繰り込んだ相互作用描像の演算子として表すと、標準的な射影演算子の方法を用いて容易に以下の方程式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\tilde{\rho}(t) = \mathcal{P}\tilde{\mathcal{L}}_{\text{int}}(t)\mathcal{P}\tilde{\rho}(t) + \int_{-\infty}^t du \mathcal{P}\tilde{\mathcal{L}}_{\text{int}}(t) \exp_{\leftarrow} \left(\int_u^t \mathcal{Q}\tilde{\mathcal{L}}_{\text{int}}(s) ds \right) \mathcal{P}\tilde{\rho}(u). \quad (5)$$

ここに $\mathcal{L}_{\text{int}}A = -i[H_{\text{int}}, A]$ であり射影演算子は $\mathcal{P} = \rho_R \text{Tr}_R$ ととる (ρ_R は熱浴の平衡分布)。 $\mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P}$ である。相互作用に関して2次までとり、熱浴を free ボゾン $H_R = \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha}$ とし、相互作用を線型結合 $H_{\text{int}} = X \sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} (b_{\alpha} + b_{\alpha}^{\dagger})$ ととる。このときシュレディンガー描像で以下のマスター方程式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) &= \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \rho(t)] - \Gamma \rho(t) \quad , \\ \Gamma \rho(t) &= \left([X, R\rho(t)] + [X, R\rho(t)]^{\dagger} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

ここで演算子 R は熱浴の温度などの情報が入る演算子で、 \mathcal{H} の固有状態で行列表現すると、

$$\langle \ell | R | m \rangle = \langle \ell | X | m \rangle \Phi(E_\ell - E_m), \quad \Phi(\omega) = \frac{I(\omega) - I(-\omega)}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}, \quad (7)$$

となる。 $I(\omega)$ はスペクトル密度と言われ大雑把に言うとボソンの振動数分布に関係した量である。演算子 R のこの表現を使えば、この方程式の定常状態がカノニカル分布になっている事は容易に確かめられる。マスター方程式の形から分かるように、系が小さい限り、数値計算は対角化のサブルーチンがあれば瞬時に可能となる。注目する系の固有値固有ベクトルが分かりさえすれば、標準的な数値計算アルゴリズム、例えば Runge-Kutta 法などで数値計算可能となる。また全固有値固有ベクトルが分からなくても、低温のごく限られた物理に興味がある場合は、ランチョス法やパワー法で低温で有効な固有ベクトルと固有値を求めて R を求めておけば大きな系でも数値計算可能となる。

2.2 粒子浴を表すマスター方程式

熱浴を表すマスター方程式の導出方法は、まったく同様に粒子浴を表すマスター方程式にも応用できる。リード線につながれた量子ドットがクーロンブロッケード領域にあるときなどには、有効になる。以下量子ドットを意識して話をする。全系をリードの部分 \mathcal{H}_L 、注目するドット系とその相互作用 \mathcal{H}_{Ld} と分ける； $\mathcal{H}_T = \mathcal{H}_L + \mathcal{H} + \mathcal{H}_{Ld}$ 。このとき形式的には式 (5) を得る。ここで典型的な相互作用とリードのハミルトニアンを $\mathcal{H}_{Ld} = \sum_{k,\sigma} \gamma_k (c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{h.c.})$ 、 $\mathcal{H}_L = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ とする。射影演算子を $\mathcal{P} = \rho_L \text{Tr}_L(\rho_L$ はリードの平衡分布)。とすれば、このときシュレディンガー描像で以下のマスター方程式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) &= -i[\mathcal{H}, \rho(t)] - \Gamma \rho(t) \quad , \\ \Gamma \rho(t) &= -\gamma^2 \sum_{\sigma} \left([d_\sigma, R_\sigma \rho(t)] + [X, R_\sigma \rho(t)]^\dagger + [\rho(t) S_\sigma, d_\sigma] + [\rho(t) S_\sigma, d_\sigma]^\dagger \right), \end{aligned} \quad (8)$$

ここに R_σ および、 S_σ は $f(x)$ をフェルミ分布関数 $f(x) = \frac{1}{e^{\beta x} + 1}$ として \mathcal{H} の固有状態で行列表現すると、

$$\langle k | R_\sigma | \ell \rangle = f((E_k - E_\ell) - \mu) \langle k | d_\sigma^\dagger | \ell \rangle \quad (9)$$

$$\langle k | S_\sigma | \ell \rangle = (1 - f((E_k - E_\ell) - \mu)) \langle k | d_\sigma^\dagger | \ell \rangle \quad (10)$$

になる。またいま wide-band limit $\gamma = 2\pi \sum_k \gamma_k^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon)$ をとった。定常解としてギブス分布 $\rho = e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu N)} / Z$ になることも確かめられる。今はクーロンブロッケード領域に適用できるマスター方程式を導出したが、リードとドットのコヒーレンスが強い近藤状態などの解析では、また違う解析が必要となる。

3 非断熱遷移に現れる重要な位相とその応用

セクション 1 では離散準位の物理を解析する際の最も基礎的なダイナミックスを説明したが、ここではもっと踏み込んでその応用例を示す。ここでは、最初に説明した Landau-Zener 非断熱遷

移における位相の項の解析が如何に量子ダイナミックスの解析に有用かを説明する。また注目する系に熱浴や粒子浴を付けた際のダイナミックスも興味深いがここでは純粋量子系のダイナミックスに絞る [5]。

量子計算ではキュービットの上げ下げが任意に操作できなければならない。そのようなコヒーレント操作は、パルス場をかけたり振動外場を何度もかけて PAT を利用したりして操作するのが普通である。ここではまったく違うやりかたをしてははじめ $|\downarrow\rangle$ にいるビットを $|\uparrow\rangle$ にする。考えるのは 2 準位系のハミルトニアンで外場として振動場を 1 周期だけ作用させる。

$$\mathcal{H}(t) = f(t)\sigma_z + \gamma\sigma_x \quad (11)$$

$$f(t) = A(1 + \cos(\omega t)) \quad (12)$$

ここで図 1(a) のように準位は変化する。特徴は 2 回の準位交差が存在することである。このときどのようにパラメーターをチューニングすれば操作に成功するか？ 答えは実は Zener によって求められていた Landau-Zener 非断熱遷移に伴う位相を考慮すればよい。1 過程は時間発展行列 $U(\tau_2, \tau_1)$ で表される。それがどのように書き表されるか？ 当然この系は可解でない。と言って数値計算でやみくもにやって、分類分けするのも健全でない。以下のように Landau-Zener の知識があればこの系は、よく理解される。答えを言うと行列 $U(\tau_2, \tau_1)$ はいくつかの行列のかけ算でよく近似できることが示される。つまり、

$$U(\tau_2, \tau_1) = P_3 M' P_2 M P_1, \quad (13)$$

ここに行列 M は、

$$M = \begin{pmatrix} \sqrt{q} & -\sqrt{1-q}e^{i\phi} \\ \sqrt{1-q}e^{-i\phi} & \sqrt{q} \end{pmatrix} \quad (14)$$

とかける。行列 M' は転置である。 q は非断熱遷移確率 $q = e^{-2\pi\delta}$ ($\delta = \frac{\gamma^2}{\hbar v}$) であり、掃引速度 $v = \left| \frac{de(t)}{dt} \right|$ は準位交差のところでのものとする。位相 ϕ はストークス位相と呼ばれ Γ 関数を用いて

$$\phi = \pi/4 + \arg\Gamma(1 - i\delta) + \delta(\ln \delta - 1), \quad (15)$$

と表される。 P_α ($\alpha = 1, \dots, 3$) は対角行列で位相だけを獲得する行列であり、

$$P_1 = \text{diag}(w_1(t_1, \tau_1), w_2(t_1, \tau_1)), P_2 = \text{diag}(w_2(t_2, t_1), w_1(t_2, t_1)), P_3 = \text{diag}(w_1(\tau_2, t_2), w_2(\tau_2, t_2))$$

と表される。ここで w_1 と w_2 は、時刻 u での固有値 $E_1(u)$ と $E_2(u)$ (図 1(a) 参照) を用いて以下のように表される。 $w_1(s', s) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_s^{s'} du E_1(u)}$, $w_2(s', s) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_s^{s'} du E_2(u)}$ 。図の斜線部分の面積を

$$S = \frac{1}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} du (E_1(u) - E_2(u)). \quad (16)$$

で表せば、時間発展行列 $M' P_2 M = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar} \int_{t_1}^{t_2} du \{E_1(u) + E_2(u)\}\right) K$ を具体的に書き下すことが可能になる。ここで行列 K は以下ようになる。

$$K = \begin{pmatrix} qe^{i\frac{S}{2}} + (1-q)e^{-i(2\phi+\frac{S}{2})} & -2\sqrt{q(1-q)}\sin\left(\phi + \frac{S}{2}\right) \\ -2\sqrt{q(1-q)}\sin\left(\phi + \frac{S}{2}\right) & qe^{-i\frac{S}{2}} + (1-q)e^{i(2\phi+\frac{S}{2})} \end{pmatrix},$$

これから結局 $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$ のためには

$$q = 1/2, \quad \text{かつ} \quad S = 2n\pi + \pi - 2\bar{\phi} \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (17)$$

を満たせばよい。 $\bar{\phi} = 0.495039\dots$ である。図 1(b) にその例を示す。 P_k は $k = 1$ が \downarrow にいる確率、 $k = 2$ が \uparrow の確率である。

逆に $|\downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle$ という場合もあって、それは

$$S = 2n\pi - \phi, \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (18)$$

で実現される。これは上述した coherent destruction of tunneling に相当する現象である。以上のように非自明なダイナミクスが非常にクリアーに解析された。

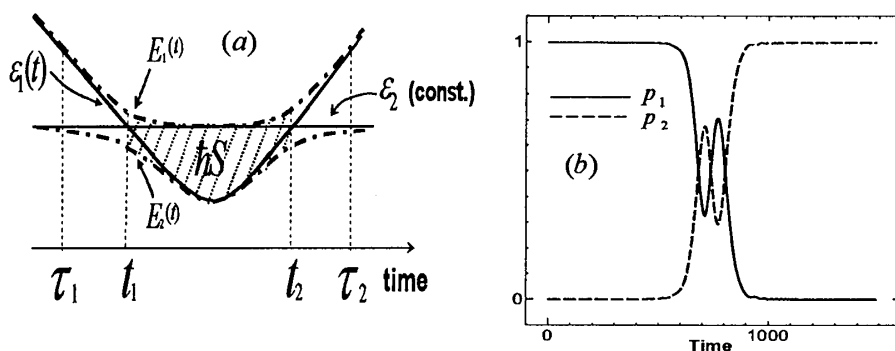


図 1: (a) 準位の時間依存性 (b) 粒子のコヒーレント操作の実演

4 まとめ

非断熱遷移の理解は離散準位の時間発展を理解する重要な鍵となる。ここではそれへ向けての一部を説明したが、粒子浴に接した離散準位系のダイナミクスに関しての数値計算の実演は省略した。開放系を取り扱うときに、マスター方程式以外の方法として、例えばケルディッシュグリーン関数を用いた解析は非常に重要であり、非断熱制御をしながらの輸送現象などはこの方法で可能になる。

謝辞

非断熱制御の部分は大阪府立大学の萱沼洋輔教授との共同研究に基づくものであることを明記する。

参考文献

- [1] L. Landau, *Phys. Z. Sowjetunion* **2**, 46 (1932), C. Zener, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **137**, 696 (1932).
- [2] H. De Raedt, S. Miyashita, K. Saito, D. Garcia-Pablos, and N. Garcia, *Phys. Rev. B* **56**, 11761 (1997).
- [3] F. Grossman, T. Dittrich, P. Jung, and P. Hänggi, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 516.
- [4] K. Saito, S. Miyashita, and H. De Raedt, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 14553, K. Saito and S. Miyashita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **70** (2001) 3238.
- [5] K. Saito and Y. Kayanuma, *Phys. Rev. B* **70** (2004), 201304(R).