

量子結合散逸系における位相緩和とエネルギー緩和

お茶の水女子大学 人間文化研究科

村尾美緒

1 はじめに

ジェインズ・カミングスモデル [1] は、回転波近似の下で厳密解を持つ量子結合系のモデルであり、2準位原子（または分子）と量子化された単モードの光子（電磁場）の相互作用を記述するものである。我々は、散逸が無い場合に系が厳密解を持つ点に注目して、このジェインズ・カミングスモデルに散逸機構を持たせた量子結合散逸系を扱う。

散逸機構のあるジェインズ・カミングスモデルは、レーザーモデル等と結び付いて、量子光学の分野で盛んに研究がなされてきた。[2] これら従来の研究は、独立な緩和機構を持つ2準位原子系と単モードの光子系を力学的に結合させたモデルに基づいていた。このモデルでは、緩和の機構に2準位原子系と単モードの光子系との相互作用の効果が取り入れられていないので、相互作用も含めた結合系全体の熱平衡状態への緩和過程（カノニカル分布の形成）を記述することはできなかった。[3]

我々は、緩和の機構に2準位原子系と単モードの光子系との相互作用の効果をとり入れた量子マスター方程式によって緩和過程を記述し、熱浴との結合が *narrowing limit* の条件の下で、量子マスター方程式を *dressed state* で展開することによって、これを解いた。[4, 5, 6] この定式化により、量子力学的運動、位相緩和、エネルギー緩和からなる、量子結合散逸系の非平衡状態から熱平衡状態に到るまでのダイナミックスを、統一的に記述することができる。

本報告では、定式化をまとめた後、量子結合散逸系の密度行列の数値計算の結果を示す。単モードの光子系の量子数についての対角成分のダイナミックスと、単モードの光子系の擬確率密度分布関数を求めて、量子結合散逸系のダイナミックスと位相緩和、エネルギー緩和について定性的に調べる。

2 Dressed state と量子マスター方程式

従来の回転波近似下のジェインズ・カミングスモデルを拡張して、2準位原子系と単モードの光子系との相互作用部分に非断熱的な相互作用を加えたものを扱う。量子結合系のハミルトニアン

は次のように与えられる。[4, 5, 6]

$$H = H_S + H_b + H_i \quad (2.1)$$

ただし、

$$H_S = \hbar\omega_0 S_z, \quad (2.2)$$

$$H_b = \hbar\omega_b b^\dagger b, \quad (2.3)$$

$$H_i = \hbar g_{\parallel} b^\dagger b S_z + \hbar g_{\perp} (b S_+ + b^\dagger S_-) \quad (2.4)$$

ここで、 ω_0 は、2準位原子系のラーモア角振動数、 ω_b は光子系の角振動数であり、2準位原子系と単モードの光子系との相互作用は、断熱的な相互作用 g_{\parallel} と非断熱的な相互作用 g_{\perp} からなる。非断熱的な相互作用の部分が従来のジェインズ・カミングスモデルを拡張した部分である。

量子結合系のハミルトニアン(2.1)は、次のような固有値をもつ。

$$E_{\pm}^n = \hbar \left\{ \omega_b \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{g_{\parallel}}{4} \pm \lambda(n) \right\}, \quad (2.5)$$

$$E_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}, \quad (2.6)$$

ただし、

$$\lambda(n) = \sqrt{\frac{1}{4} \left(\Delta\omega - \frac{g_{\parallel}(2n+1)}{2} \right)^2 + g_{\perp}^2 (n+1)}, \quad (2.7)$$

$$\tan \theta_n = \frac{g_{\perp} \sqrt{n+1}}{\frac{1}{2} \left(\Delta\omega - \frac{g_{\parallel}(2n+1)}{2} \right) + \lambda(n)}, \quad (2.8)$$

$$\Delta\omega = \omega_b - \omega_0. \quad (2.9)$$

固有状態は、

$$|\varphi(n, 1)\rangle = \cos \theta_n |n+1, -1\rangle + \sin \theta_n |n, +1\rangle, \quad (2.10)$$

$$|\varphi(n, 2)\rangle = -\sin \theta_n |n+1, -1\rangle + \cos \theta_n |n, +1\rangle, \quad (2.11)$$

$$|0, -1\rangle. \quad (2.12)$$

これらの固有状態(2.10)-(2.12)を dressed state を呼ぶ。[7] ここで、ケット $|n, +1(-1)\rangle$ は、光子系が占有数 n であり、2準位原子系が up(down) である状態を表わす。非断熱的な相互作用は、従来のジェインズ・カミングスモデルの固有エネルギー値に光子系の量子数に応じたシフトを与えるが、エネルギー固有状態は変えない。

次に、量子結合系(上記のジェインズ・カミングスモデル)が周りの環境より受ける影響を、温度 T でカノニカル分布をしている多ボードのボソンからなる熱浴と量子結合系が弱く結合するモ

デル (system plus reservoir approach) で記述する。本報告では、簡単のため、特に単モードの光子系と熱浴のボソンとの結合

$$H_{bB} = \hbar (b + b^\dagger) g_{bB} \sum_l (B_l^\dagger + B_l) \quad (2.13)$$

のみを考える。(その他の結合の結果については、[5, 6] を参照。) 熱浴と量子結合系との相互作用の効果、射影演算子の方法 (TCL の定式化) [8] を用いて取り入れ、見ている系 (量子結合系) の密度行列の時間発展を記述する、次のマスター方程式を得た。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)] + \Gamma_b \rho(t) \quad (2.14)$$

ただし、

$$\begin{aligned} \Gamma_b \rho(t) = & \sum_l g_b^2 \int_0^t dt' \left\{ \left(\langle B_l^\dagger(t') B_l \rangle_B + \langle B_l(t') B_l^\dagger \rangle_B \right) \right. \\ & \times \left([b^\dagger(-t') \rho(t), b] + [b(-t') \rho(t), b^\dagger] \right) \\ & + \left(\langle B_l^\dagger(-t') B_l \rangle_B + \langle B_l(-t') B_l^\dagger \rangle_B \right) \\ & \left. \times \left([b^\dagger, \rho(t) b(-t')] + [b, \rho(t) b^\dagger(-t')] \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$b(t) = e^{iHt/\hbar} b e^{-iHt/\hbar}, \quad b^\dagger(t) = e^{iHt/\hbar} b^\dagger e^{-iHt/\hbar}, \quad (2.16)$$

$$B_l(t) = e^{iH_B t/\hbar} B_l e^{-iH_B t/\hbar}, \quad B_l^\dagger(t) = e^{iH_B t/\hbar} B_l^\dagger e^{-iH_B t/\hbar}. \quad (2.17)$$

このマスター方程式の特徴的な点は、方程式の減衰項に現れる量子結合系の演算子の時間発展が、見ている系全体、すなわち、相互作用も含めた量子結合系全体のハミルトニアン (2.1) によって記述されているところにある。このことにより、見ている系の密度行列が、量子結合系の正しい平衡状態に向けて時間発展することが保証される。よって、量子結合系の緩和のダイナミックスを、短時間領域から、長時間領域まで記述することのできる、マスター方程式を得たことになる。これは、従来の独立に減衰する部分系同士を結合させた緩和モデルでは、保証されなかった点である。

3 基本方程式

前節で求めた量子マスター方程式を、dressed state で展開することによって、展開係数からなる基本方程式を求める。

まず、見ている系の密度行列を dressed state で展開した係数を次のように表わす。

$$\rho_{\alpha\beta}^{nm}(t) = \langle \varphi(n, \alpha) | \rho(t) | \varphi(m, \beta) \rangle, \quad (3.1)$$

$$\rho_{0\beta}^m(t) = \langle 0, -1 | \rho(t) | \varphi(m, \beta) \rangle, \quad (3.2)$$

$$\rho_{\alpha 0}^n(t) = \langle \varphi(n, \alpha) | \rho(t) | 0, -1 \rangle, \quad (3.3)$$

$$\rho_{00}(t) = \langle 0, -1 | \rho(t) | 0, -1 \rangle \quad (3.4)$$

ただし、 $\alpha, \beta = 1, 2$ 。これらの展開係数は、2 準位原子系についての2つの量子数の指標 $\{\alpha, \beta\}$ と、単モードの光子系の量子数の2つの指標 $\{n, m\}$ (ただし、 $n, m = 0, 1, \dots, \infty$) を持っている。そこで、単モードの光子系について同じ指標を持つ2 準位原子系の成分をまとめて、単モードの光子系の指標 $\{n, m\}$ のみから成る、次のような4つの成分をもつベクトルを導入する。

$$\rho^{nm}(t) \equiv \begin{pmatrix} \rho_{11}^{nm}(t) \\ \rho_{12}^{nm}(t) \\ \rho_{21}^{nm}(t) \\ \rho_{22}^{nm}(t) \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

$$\rho^{-1 m}(t) \equiv \begin{pmatrix} \rho_{01}^m(t) \\ \rho_{02}^m(t) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

$$\rho^{n -1}(t) \equiv \begin{pmatrix} \rho_{10}^n(t) \\ \rho_{20}^n(t) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$$\rho^{-1 -1}(t) \equiv \rho_{00}(t). \quad (3.8)$$

ただし、 $n, m \geq 0$ 。

量子マスター方程式(2.14)における、見ている系のすべての演算子 $\rho(t)$, H , $b(t)$, $b^\dagger(t)$ を dressed states (2.10)-(2.12) で展開し、熱浴の変数部分については、先鋭化の極限をとってから、上記のベクトルを用いてまとめると、次のような見ている系の密度行列の展開係数の運動方程式(基本方程式)を得る。[4, 5, 6]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho^{nm}(t) &= \kappa' \mathbf{p}^{nm} \rho^{n-1 m-1}(t) \\ &- (i \mathbf{L}^{nm} + \kappa \mathbf{q}^{nm}) \rho^{nm}(t) \\ &+ \kappa' \mathbf{r}^{nm} \rho^{n+1 m+1}(t), \end{aligned} \quad (3.9)$$

ただし、 $n, m \geq -1$ 。 κ は減衰定数であり、 \mathbf{L}^{nm} 、 \mathbf{p}^{nm} 、 \mathbf{q}^{nm} 、 \mathbf{r}^{nm} は係数行列である。この基本方程式は、単モードの光子系の量子数に関しての3項間関係微分方程式で表されている。更にラプラス変換をほどこすと、連分数の形での厳密解を持つ。

4 物理的描像

基本方程式(3.26)を用いて、見ている系の密度行列の展開係数のダイナミックスを、量子強結合系の緩和の物理的描像と結び付けて考察する。我々の定式化では、展開係数の対角成分 $\rho_{\alpha\alpha}^{nn}$ は、エ

エネルギー固有状態 $|\varphi(n, \alpha)\rangle$ への分配確率を表し、非対角成分 $\rho_{\alpha\beta}^{nm}$ (ただし、 $\alpha \neq \beta, n \neq m$) は量子的相関、すなわち、量子的位相を表す。

熱平衡状態においては、非対角成分は消滅し、対角成分が温度 T でカノニカル分布

$$\begin{aligned} \rho_{eq} = & \frac{1}{Z} \sum_n \left(e^{-E_n^+/k_B T} |\varphi(n, 1)\rangle \langle \varphi(n, 1)| + e^{-E_n^-/k_B T} |\varphi(n, 2)\rangle \langle \varphi(n, 2)| \right) \\ & + \frac{e^{\hbar\omega_0/2k_B T}}{Z} + |\varphi(0, -1)\rangle \langle \varphi(0, -1)| \end{aligned} \quad (4.1)$$

を形成するように緩和することが、保証されている。ただし、式(4.27)において、 Z は次のように与えられる分配関数である。

$$Z = \sum_n \left(e^{-E_n^+/k_B T} + e^{-E_n^-/k_B T} \right) + e^{\hbar\omega_0/2k_B T} \quad (4.2)$$

非対角要素の消滅は、量子的相関が環境の影響によって失われていくことを示すものである。

展開係数の運動方程式(基本方程式)が、単モードの光子系の量子数 $\{n, m\}$ についての3項間関係微分方程式で表されるとは、方程式が $\{n-1, m-1\}$ 、 $\{n, m\}$ 、 $\{n+1, m+1\}$ の3つ指標を持つ成分のみで表されることであり、指標となる単モードの光子系の二つの量子数の差、 $n-m$ の異なる係数の成分、例えば $\{n, m+1\}$ の展開係数との相関がないことを表す。また、様々な物理量の期待値は、次のように指標となる単モードの光子系の二つの量子数の差の等しい展開係数のみで記述される。

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle_t = & \frac{1}{2} \sum_n \left\{ -\cos 2\theta_n (\rho_{11}^{nn}(t) - \rho_{22}^{nn}(t)) \right. \\ & \left. + \sin 2\theta_n (\rho_{12}^{nn}(t) + \rho_{21}^{nn}(t)) - \rho_{00}(t) \right\}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \langle b^\dagger b \rangle_t = & \sum_n \left\{ (n + \cos^2 \theta_n) \rho_{11}^{nn}(t) \right. \\ & - \cos \theta_n \sin \theta_n (\rho_{12}^{nn}(t) + \rho_{21}^{nn}(t)) \\ & \left. + (n + \sin^2 \theta_n) \rho_{22}^{nn}(t) \right\}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \langle S_+ \rangle_t = & \sum_n \left\{ \cos \theta_n \sin \theta_{n+1} \rho_{11}^{n, n+1}(t) + \cos \theta_n \cos \theta_{n+1} \rho_{12}^{n, n+1}(t) \right. \\ & \left. + -\sin \theta_n \sin \theta_{n+1} \rho_{21}^{n, n+1}(t) - \sin \theta_n \cos \theta_{n+1} \rho_{22}^{n, n+1}(t) \right\} \\ & + \sin \theta_0 \rho_{01}^0(t) + \cos \theta_0 \rho_{02}^0(t). \end{aligned} \quad (4.5)$$

5 量子ダイナミックスの数値計算

2単位原子系の初期状態を U_p 状態、単モードの光子系の初期状態を $|z\rangle$ のコヒーレント状態とおく。時刻 $\tau = \kappa t = 0$ でこれらの2単位原子系と単モードの光子系が結合して量子結合系を形成

し、同時に温度 T の熱浴とも結合するとして、基本方程式 (3.26) の数値計算を行い、量子結合散逸系の時間発展を求めた。本報告では、単モードの光子系の初期状態を $z = 3.0$ にとり、量子強結合系 (2 準位原子系と単モードの光子系の結合が強いもの) が低温の熱浴と弱く結合している場合の数値計算の結果を次に示す。各パラメータは減衰定数 κ でスケールしたものである。

前節で述べたように、見ている量子結合系の密度行列をダイナミックスを特徴づける量として、 $l \equiv |n - m|$ で定義される、非対角度数 (off-diagonality number) を導入すると、基本方程式は l が異なる展開係数の基本方程式とは相関がないので、 l の異なる展開係数は独立に計算することができる。非対角度数 l 用いると、展開係数は、 $\rho_{\alpha}^{m+l}{}_{\beta}{}^m$ と書くことができる。

まず、単モードの光子系の量子数についての対角成分、すなわち $l = 0$ の部分の展開係数のダイナミックスに注目する。対角成分は、熱平衡状態を形づくるので、特に重要である。ただし、 $l = 0$ の展開成分は、2 準位原子系の量子数については、非対角成分を含む。そこで、エネルギー緩和のみならず、位相緩和も生じる。図 1 は、 $l = 0$ の展開係数から得られる量子結合系の物理量の平均値 ($\langle S_z \rangle_t$ と $\langle b^\dagger b \rangle_t$) の時間発展を示す。2 準位原子系と単モードの光子系がエネルギーのやりとりをしながら、熱平衡状態に緩和していく様子を観察する事ができる。一般に、 $z \neq 0$ のコヒーレント状態を初期状態とすると、 $\langle S_z \rangle_t$ には短時間の領域で、ジェインズ・カミングスモデルに特有の量子崩壊 (ラビ振動の急激な減衰) と量子回復 (ラビ振動の回復) 現象が現れる。この現象は、量子力学的な運動の重ねあわせの効果によるものである。図 1 では、散逸の影響によって位相緩和が起こり、量子回復現象は抑制されている。

次に、展開係数のダイナミックス自体を詳しく調べるために、時刻 τ における数列

$$\left\{ \rho_{00}, \rho_{11}^{00}, \rho_{12}^{00}, \rho_{21}^{00}, \rho_{22}^{00}, \rho_{11}^{11}, \rho_{12}^{11}, \rho_{21}^{11}, \rho_{22}^{11}, \dots \right\}_{\tau} \quad (5.1)$$

を定義する。この数列の $(4n + 3)$ 番目の成分と $(4n + 4)$ 番目の展開係数は、2 準位原子系の量子数に関して非対角成分となる。図 2 に様々な時刻における、この数列の絶対値のヒストグラムを示す。短時間の時間スケール ($\tau < 1$) で、これらの非対角成分が消滅し、(位相緩和) その後に長時間の時間スケール ($\tau > 1$) で残った対角成分間でカノニカル分布へ向けて遷移が起こる様子 (エネルギー緩和) を観察することができる。

さらに、 $l > 0$ の展開係数の消滅 (位相緩和) の様子を調べるために、すべての l の展開係数の情報を含む、単モードの光子系の擬確率密度分布関数を $F(z, t)$ をコヒーレント状態 $|z\rangle$ を用いて次のように定義する。

$$F(z, t) = \langle z | \text{tr}_S \rho(t) | z \rangle \quad (5.2)$$

ただし、 tr_S は、2 準位原子系の自由度についてトレースをとる演算を表わす。展開係数を用いて単モードの光子系の擬確率密度分布関数を表わすと、

$$\begin{aligned}
 F(z, t) = & e^{-|z|^2} \left[\sum_{n,m} \frac{z^{*n} z^m}{\sqrt{n!m!}} \left\{ \left(\sin \theta_n \sin \theta_m + \frac{|z|^2}{\sqrt{(n+1)(m+1)}} \cos \theta_n \cos \theta_m \right) \rho_{11}^{nm}(t) \right. \right. \\
 & + \left(\sin \theta_n \cos \theta_m - \frac{|z|^2}{\sqrt{(n+1)(m+1)}} \cos \theta_n \sin \theta_m \right) \rho_{12}^{nm}(t) \\
 & + \left(\cos \theta_n \sin \theta_m - \frac{|z|^2}{\sqrt{(n+1)(m+1)}} \sin \theta_n \cos \theta_m \right) \rho_{21}^{nm}(t) \\
 & + \left. \left(\cos \theta_n \cos \theta_m + \frac{|z|^2}{\sqrt{(n+1)(m+1)}} \sin \theta_n \sin \theta_m \right) \rho_{22}^{nm}(t) \right\} \\
 & + \sum_n \frac{z^{*n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} (\cos \theta_n \rho_{10}^n(t) - \sin \theta_n \rho_{20}^n(t)) \\
 & + \left. \sum_m \frac{z^{m+1}}{\sqrt{(m+1)!}} (\cos \theta_m \rho_{01}^m(t) - \sin \theta_m \rho_{02}^m(t)) + \rho_{00}(t) \right] \quad (5.3)
 \end{aligned}$$

を得る。擬確率密度分布関数を求めることによって、単モードの光子系の量子数についての非対角成分 ($l \neq 0$ の展開係数) の消滅 (位相緩和) と $l = 0$ の展開係数からなる対角成分間でのカノニカル分布への遷移 (エネルギー緩和) を調べることができる。

様々な時間における擬確率密度分布関数を z の実軸と虚軸に関してプロットしたのが、図 3 (1) ~ (12) である。同じ時間の擬確率密度分布関数を左側に 3 次元グラフ、右に等高線グラフで表わした。擬確率密度分布関数は初期時刻 ($\tau = 0$) には、 $z = 3.0$ のコヒーレント状態にあるので、 $z = 3.0$ を中心にガウス分布している (1)。分布関数の packet は、位相空間上を回転し始めるが、2 準位原子系との結合によりエネルギーレベルが分裂する事によって、次第に二つの packet に別れ、いわゆる、Schrödinger Cat State を形成する (2)-(4)。その後、二つの packet は近づいて (6)、再び一つになる。ここまでは、ジェインズ・カミングスモデルに特有の量子力学的運動が顕著にあらわれている部分である。しかし、(7)-(9) では位相緩和の効果によって、非対角度数 l の大きい展開係数による寄与が小さくなり、次第に分布関数は、原点について対称に分布し、ドーナツ型に近づく。さらに長時間スケールでは、エネルギー緩和の効果によって、原点をピークとした分布をとるようになる (10)-(11)。最終的には、低温の熱浴との結合の効果によって、熱平衡状態では基底状態 (単モードの光子系は真空) に落ち込み、原点を中心にガウス分布をするように緩和する (12)。

以上の数値計算の結果、量子結合散逸系の熱平衡状態へのダイナミクスを支配しているものは、初期においては、量子力学的運動、短時間領域においては、位相緩和、そして、長時間領域においてはエネルギー緩和である、ということが定性的に明らかになった。

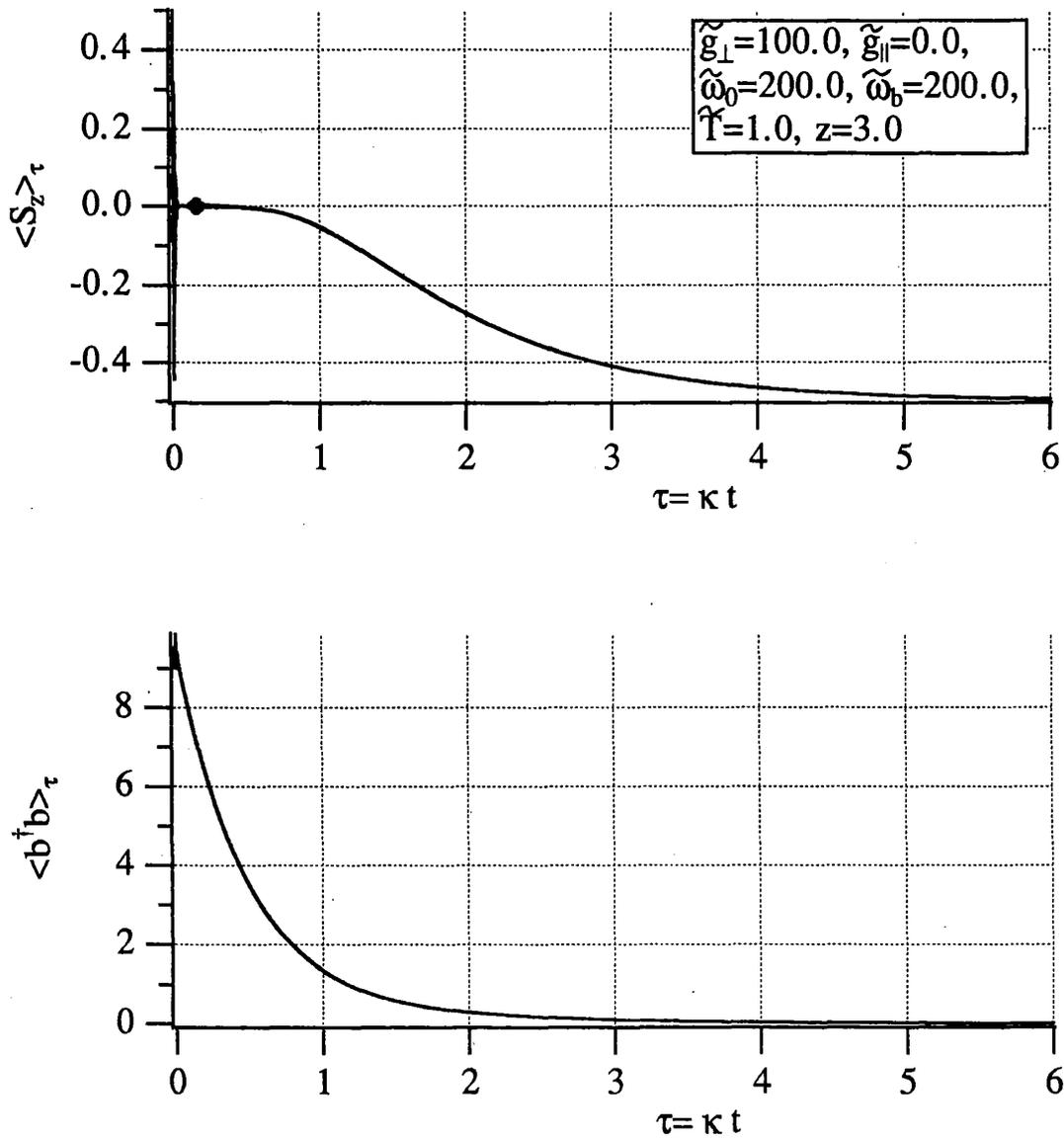


図1 $l=0$ の展開係数から得られる平均量 $\langle S_z \rangle_\tau$ と $\langle b^\dagger b \rangle_\tau$ の時間発展。パラメータの値は、図中に与えてある。

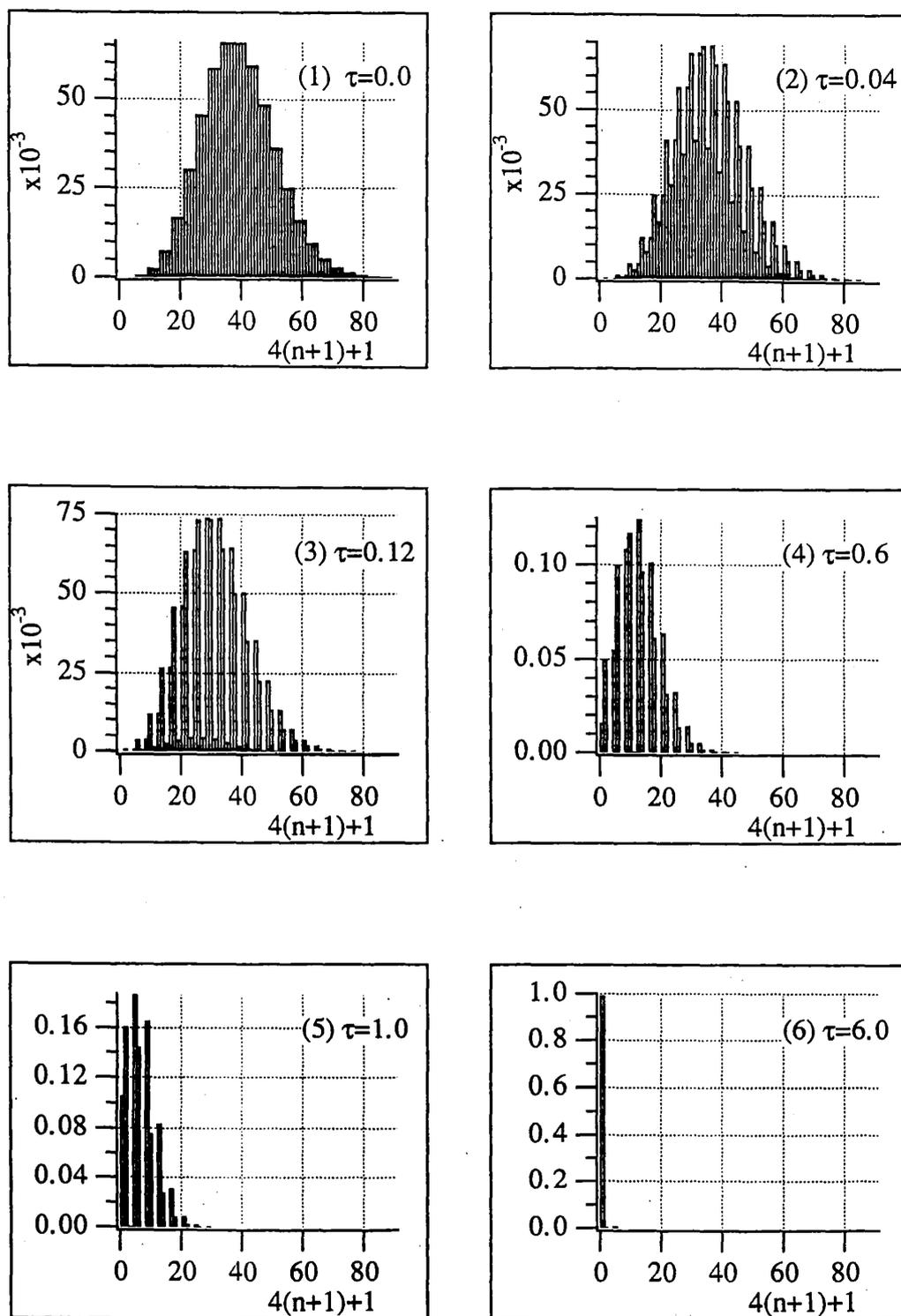


図2 様々な時刻における、 $l=0$ の展開係数からなる数列の絶対値のヒストグラム。量子結合系、熱浴のパラメータは、図1と同じ値にとった。

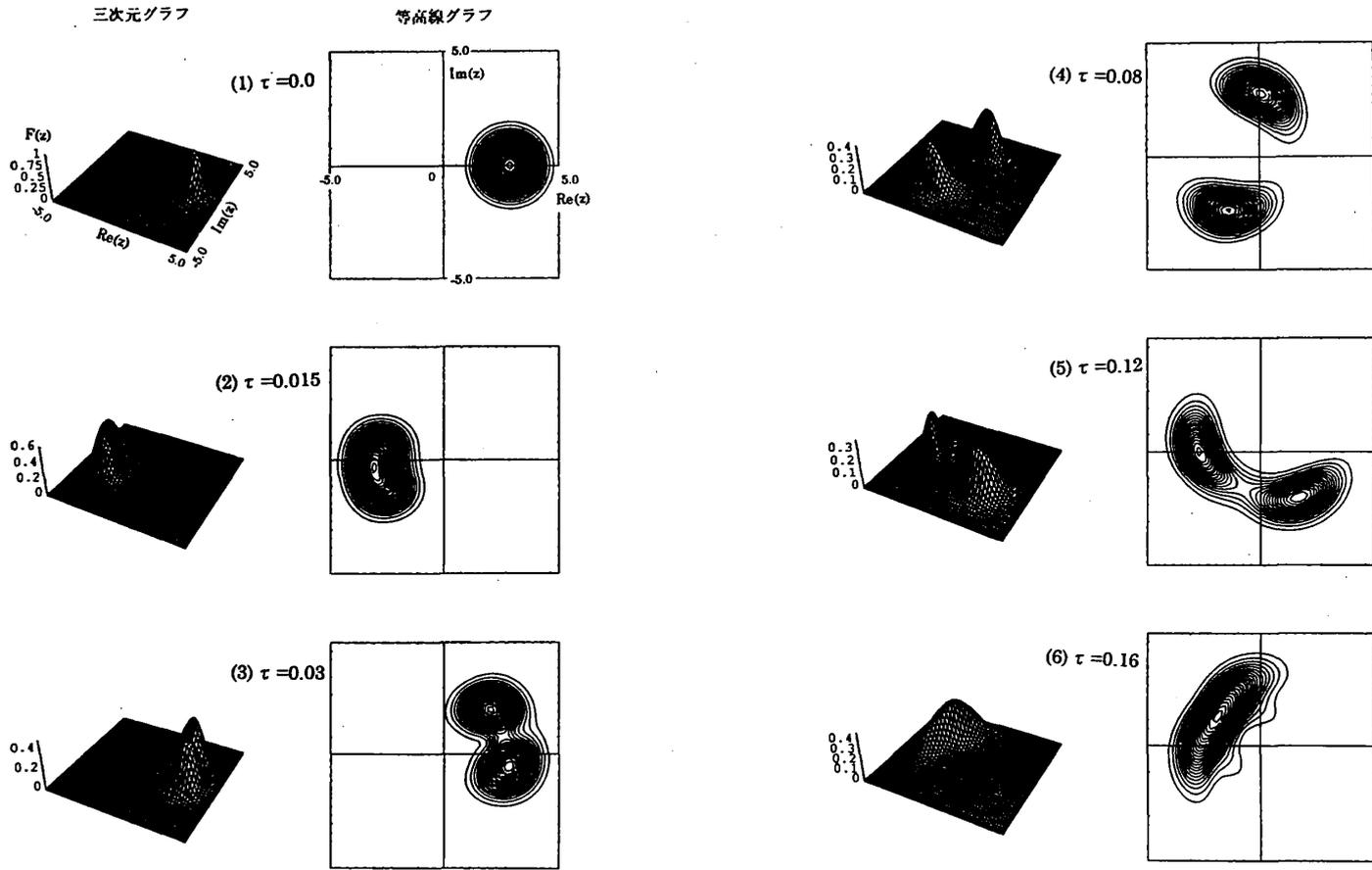


図3 様々な時刻の単モードボソンの擬確率密度分布関数。右側が3次元グラフで、左側が等高線グラフ。座標のとりかたは、 $\tau=0$ の場合とすべて同じ。量子結合系、熱浴のパラメータは、図1と同じ値にとった。

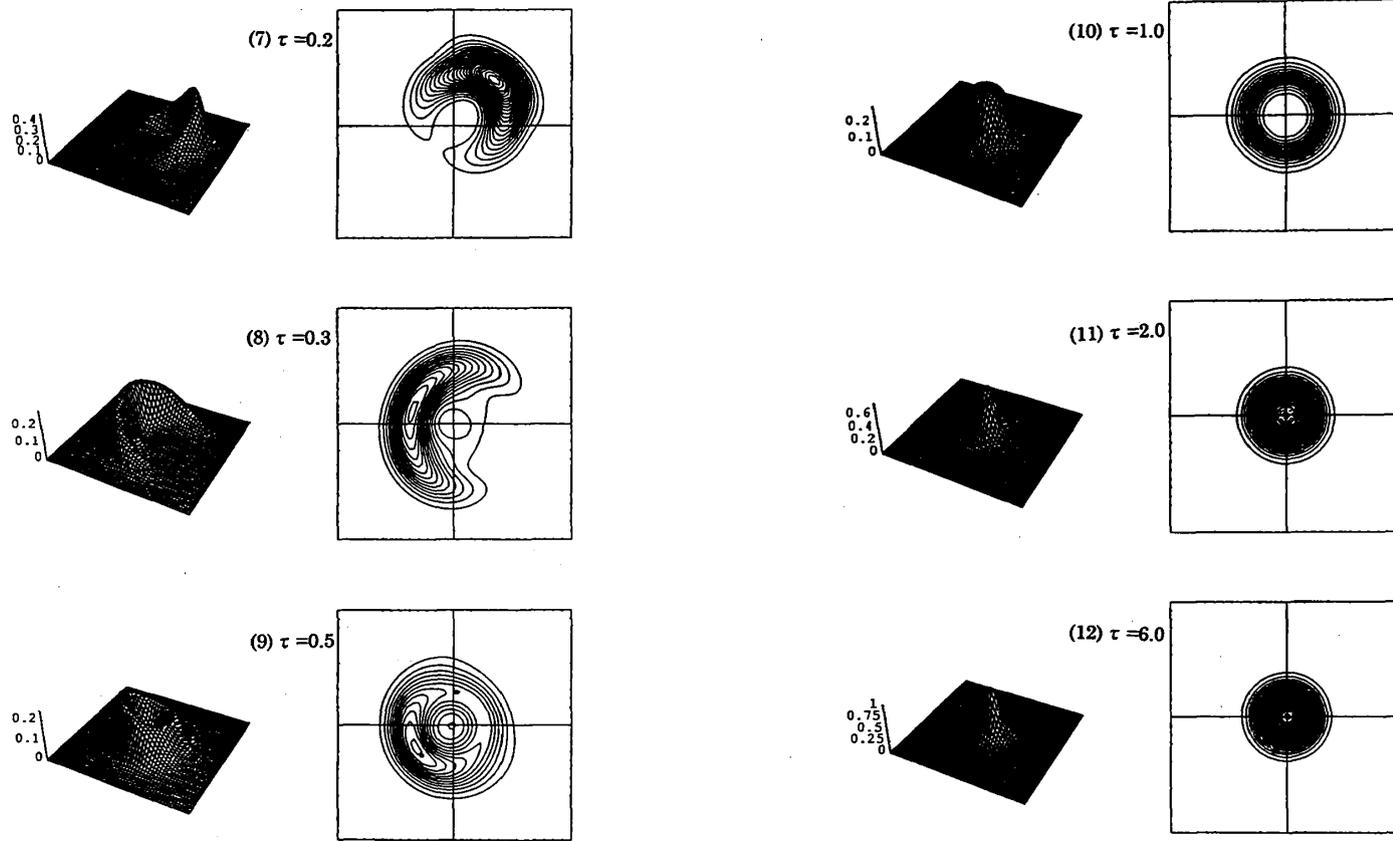


図3 様々な時刻の単モードボソンの擬確率密度分布関数。右側が3次元グラフで、左側が等高線グラフ。座標のとりかたは、 $\tau=0$ の場合とすべて同じ。量子結合系、熱浴のパラメータは、図1と同じ値にとった。

6 まとめ

量子結合系 (ジェインズ・カミングスモデル) が、そのまわりをとりかこむ環境の影響をうけて、熱平衡状態でカノニカル分布を形成するに至る、緩和過程をミクロなメカニズムから定式化し、量子結合散逸系の緩和過程を「カノニカル分布の形成」という観点から、密度行列の展開成分のダイナミックスに注目して考察した。

密度行列の成分の運動方程式 (基本方程式) は、三項間微分方程式であらわされ、これは連分数の形での厳密解を持つ。密度行列の展開成分の対角成分は、エネルギー固有状態への分配確率を表わし、非対角成分は量子的相関、すなわち、位相を表わす。

光子系の初期状態をコヒーレント状態にとって、光子系の擬確率密度関数を数値計算で求めた。極短時間領域においては、状態の重ねあわせに起因する、ジェインズ・カミングスモデルに特徴的な、いわゆるシュレディンガーの猫状態をとり、次に非対角要素の消滅 (位相緩和) が短時間スケールで起き、そして長時間スケールで正しい熱平衡状態にむけて残った対角成分間で遷移がおきる (エネルギー緩和)、ということが定性的に明らかになった。さらに定量的な分析は、今後の課題としたい。

References

- [1] E. T. Jaynes and F. W. Cummings, Proc. IEEE **51** (1963) 89.
- [2] See for instance, B. W. Shore and P. L. Knight, J. mod. optics, **40** (1993), 1195, and references cited therein.
- [3] See for instance, R. Kubo, M. Toda and N. Hashitsume, *Statistical Physics II*, 89, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1985).
- [4] M. Murao and F. Shibata, to be published in Physica A.
- [5] M. Murao and F. Shibata, to be published in J. Phys. Soc. Jpn.
- [6] M. Murao and F. Shibata, to be published in Physica A.
- [7] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, *Atom-Photon Interactions: basic processes and applications*, (John Wiley & Sons, Inc., New York Chichester, 1992).
- [8] F. Shibata and T. Arimitsu, J. Phys. Soc. Jpn. **49** (1980), 891.