

スピنبゾン模型における準安定状態の量子ゆらぎによる緩和

東大 理 小林 礼人・羽田野 直道・鈴木 増雄

1 はじめに

近年、巨視的量子現象への関心が高まってきている。特に、量子ゆらぎによる準安定状態の緩和は、トンネル現象として興味深い問題である。Chudnovsky ら [1] は、量子ゆらぎによる微粒子の磁化の反転の問題について考察し、トンネル確率が十分観測可能な程度であると指摘した。また、牛の脾臓中の蛋白を用いた Awschalom ら [2] の実験では、量子コヒーレンスを観測したと考えられている。我々は、理論・実験の両面から注目を浴びている準安定状態の緩和の問題を、スピنبゾン模型 [3] を用いて考察する。

準安定状態が基底状態へ緩和していくためには、状態の遷移とともにエネルギーの散逸が必要である。ここでは、2 準位系にボソンを結合させたスピنبゾン模型 [3] を考え、ボソン系とのエネルギーのやりとりを取り入れることで準安定状態の緩和を考察する。スピنبゾン模型については、これまでも様々な視点から多くの研究 [4-7] がなされてきている。我々は、スピンとボソンの状態をミクロに取り扱い、ボソン系が熱浴の働きをするかどうか議論する。また、スピンの磁化の振動の周期や振幅が相互作用の強さによりどのように変化するか調べる。

2 時間発展演算子

ここで扱うスピنبゾン模型 [3] のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_I, \quad (1)$$

$$\mathcal{H}_S = -\frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_x + \frac{1}{2}\varepsilon\sigma_z, \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_B = \sum_{\alpha} \hbar\Omega_{\alpha} \left(n_{\alpha} + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

$$\mathcal{H}_I = \sum_{\alpha} V_{\alpha}\sigma_z(b_{\alpha}^{\dagger} + b_{\alpha}) \quad (4)$$

で与えられる。スピンの磁化の時間変化を数値計算で求めるために、時間発展演算子 $e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}}$ を時間 t について2次まで正しい指数積公式 $S_2(t)$ で近似する。2次近似 $S_2(t)$ は、

$$S_2(t) = e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_S} e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_B} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_I} e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_B} e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_S} \quad (5)$$

で与えられる。また、 t について4次まで正しい近似 $S_4(t)$ は、 $p_2 = (4 - 4^{1/3})^{-1}$ 、 $q_2 = 1 - 4p_2$ として、

$$S_4(t) = [S_2(p_2t)]^2 S_2(q_2t) [S_2(p_2t)]^2 \quad (6)$$

で与えられる [8]。実際の計算においては、時間軸を等分割して、微小時間における発展演算子に対して上述の近似を行う。高い精度が要求される場合には、高次の分解を用いて、短い時間間隔で計算するのが効率的である [9]。

時間発展の数値計算には、転送行列法を用いる。この計算に必要な3つの指数演算子 $e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_S}$ 、 $e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_B}$ 、 $e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_I}$ の行列要素を予め求めておく。スピンの状態を σ_z で、ボゾン数を n_α で表して、基底 $|\sigma_z, n_1, n_2, \dots\rangle$ をとる。また、エネルギーの単位を ε に、時間の単位を $\hbar/\varepsilon$ にとり、変数 τ 、 δ 、 ω_α 、 v_α を

$$\tau = \frac{t}{\hbar/\varepsilon}, \quad \delta = \frac{\hbar\Delta}{\varepsilon}, \quad \omega_\alpha = \frac{\hbar\Omega_\alpha}{\varepsilon}, \quad v_\alpha = \frac{V_\alpha}{\varepsilon} \quad (7)$$

と定義しておく。これにより、指数演算子 $e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_S}$ 、 $e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_B}$ 、 $e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_I}$ は

$$e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_S} = \cos\left(\frac{\tau}{4}\sqrt{1+\delta^2}\right) - i \sin\left(\frac{\tau}{4}\sqrt{1+\delta^2}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}\sigma_z - \frac{\delta}{\sqrt{1+\delta^2}}\sigma_x\right), \quad (8)$$

$$e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{H}_B} = \prod_\alpha \left[\cos\left\{\frac{\tau}{2}\omega_\alpha\left(n_\alpha + \frac{1}{2}\right)\right\} - i \sin\left\{\frac{\tau}{2}\omega_\alpha\left(n_\alpha + \frac{1}{2}\right)\right\} \right], \quad (9)$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_I} = \prod_\alpha e^{-i\tau v_\alpha \sigma_z (b_\alpha^\dagger + b_\alpha)} \quad (10)$$

と表される。さらに、行列要素 $\langle n' | e^{-i\tau v_\alpha \sigma_z (b_\alpha^\dagger + b_\alpha)} | n \rangle$ は、 $n + n'$ が偶数の時

$$\langle n' | e^{-i\tau v_\alpha \sigma_z (b_\alpha^\dagger + b_\alpha)} | n \rangle = \sum_{r=0}^{\min\{n, n'\}} \frac{\sqrt{n!}\sqrt{n'!}}{r!(n-r)!(n'-r)!} e^{-\frac{1}{2}\tau^2 v^2} (-\tau^2 v^2)^{\frac{n+n'}{2}-r}, \quad (11)$$

$n + n'$ が奇数の時

$$\langle n' | e^{-i\tau v_\alpha \sigma_z (b_\alpha^\dagger + b_\alpha)} | n \rangle = -i\tau v_\alpha \sigma_z \sum_{r=0}^{\min\{n, n'\}} \frac{\sqrt{n!}\sqrt{n'!}}{r!(n-r)!(n'-r)!} e^{-\frac{1}{2}\tau^2 v^2} (-\tau^2 v^2)^{\frac{n+n'-1}{2}-r} \quad (12)$$

と書き直すことができる。以上のようにして、2次近似 $S_2(t)$ 、及び、4次近似 $S_4(t)$ の行列要素が具体的に求められた。

各ボゾンのモードがとり得るボゾン数には上限がない。したがって、全系の状態の種類は無限個ある。しかし、実際の数値計算で扱える状態数には限界があるので、ボゾンのレベルにカッ

トオフを入れ、エネルギーの低い N_L 個のレベルのみを考慮に入れることにする。このとき、ユニタリー性を保つために指数演算子 $e^{-\frac{i}{\hbar}H_L}$ を規格化し直す必要がある。ボゾン数にカットオフを入れる近似は、スピンとボゾンの相互作用が弱いときにより近似になる。実際、相互作用が弱いとき、 $N_L = 4$ とした数値計算の結果と $N_L = 8$ とした結果は、図1のように概ね合っている。一方、相互作用が強くなると図2のように結果が大きく異なり、近似が成り立たなくなることがわかる。

3 数値計算の結果

2次近似 $S_2(t)$ を用いて、スピンの磁化の時間変化を異なる相互作用の強さに対して求めた。まず、ボゾンのモード数は4個とし、すべてのモードの振動数 ω_α を0.5とした。カットオフ N_L を8とし、初期条件として $\sigma_z = 1$ 、 $n_\alpha = 0$ をとる。ここでは、 $\delta = \hbar\Delta/\varepsilon$ が0.2と小さい場合を考えるので、相互作用がないときにはスピンは準安定状態からほとんどトンネルしない。実際、図3のように、スピンとボゾンの相互作用が非常に弱いときには、スピンの局在していることがわかる。一方、相互作用がある程度大きくなると、スピンはトンネルし、磁化は大きく振動するようになる。

次に、ボゾンのモードごとに振動数を変えて磁化のふるまいを調べた。モード数を4個とし、それぞれのモードの振動数は、

$$\omega_1 = \frac{1}{\sqrt{13}}, \omega_2 = \frac{1}{\sqrt{11}}, \omega_3 = \frac{1}{\sqrt{7}}, \omega_4 = \frac{1}{\sqrt{5}} \quad (13)$$

とした。振動数を式(13)のように無理数にとったのは、ボゾン系全体としての短周期振動を避けるためである。実際、図4のように、よりゆっくりした振動がみられる。さらに注目すべき点は、一度反転した磁化が元の方向にもどらないことである。また、スピンと結合させるモード数を変えて磁化のふるまいを計算した結果が図5 - 図7である。モード数を増やすと、磁化の振動の振幅は大きくなり、周期は長くなることがわかる。こうしたことから、モード数が十分大きい場合には、ボゾン系はスピンに対し熱浴の働きをするものと考えられる。

4 磁化の振動

相互作用が弱いとき、数値シミュレーションから得られる磁化の振動の周期は、スピンとボゾンの振動数の差から求めた値とよく一致している。実際、ボゾンのモード数 $N_B = 4$ 、振動数 $\omega_\alpha = 0.5$ 、相互作用の強さ $v_\alpha = 0.02$ のとき、 $\delta = \hbar\Delta/\varepsilon = 1/5$ の場合は、スピン系の特徴的な振動数 $\sqrt{1+\delta^2}$ とボゾンの振動数 ω の2倍との差 ΔE

$$\Delta E = \sqrt{1+\delta^2} - 2\omega \quad (14)$$

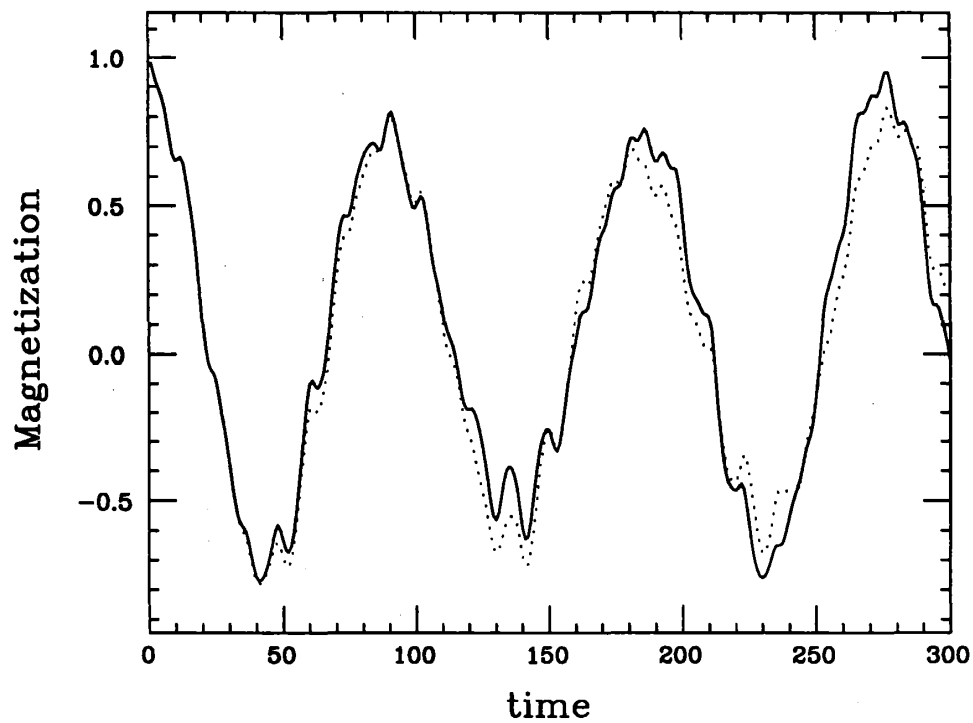


図 1: 相互作用が弱い場合の磁化の時間変化。実線は $N_L = 8$ のとき、点線は $N_L = 4$ のときである。縦軸は σ_z の期待値。横軸は $\hbar/\varepsilon$ でスケールされている。

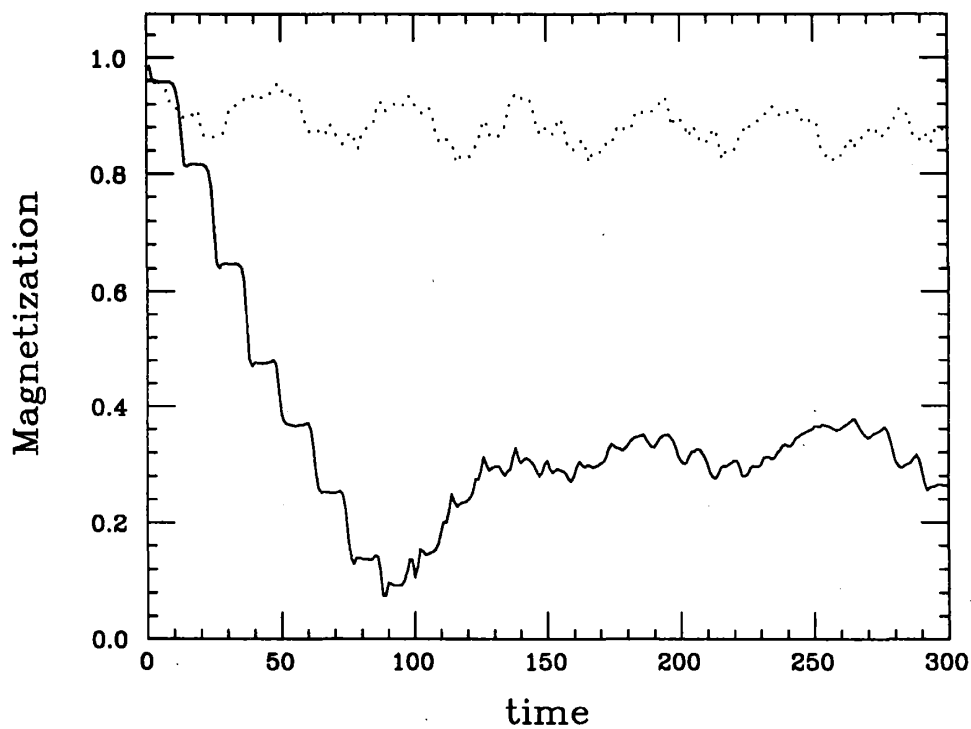


図 2: 相互作用が強い場合の磁化の時間変化。実線は $N_L = 8$ のとき、点線は $N_L = 4$ のときである。

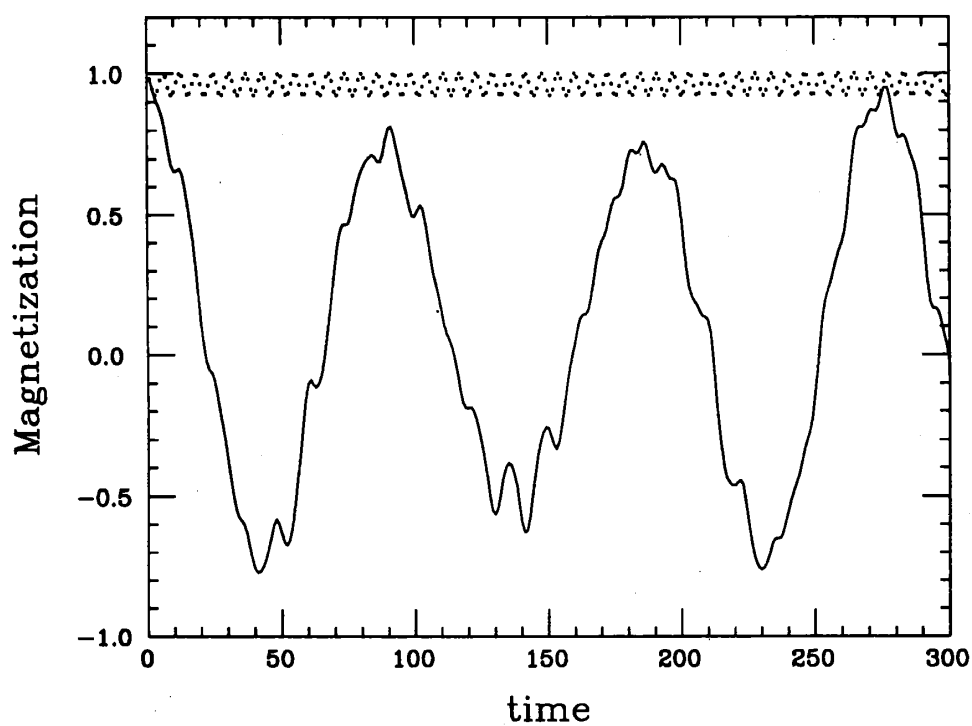


図 3: 磁化の時間変化。実線は $v_\alpha = 0.1$ のとき、点線は $v_\alpha = 0.001$ のときである。

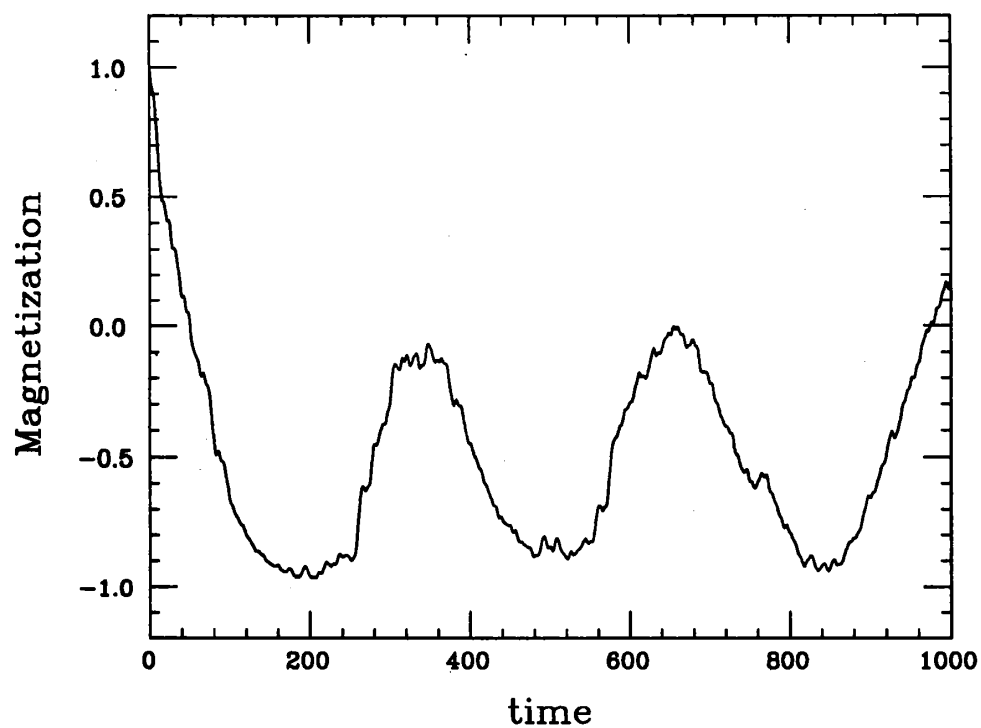


図 4: モードごとに振動数を変えた場合の磁化の時間変化。

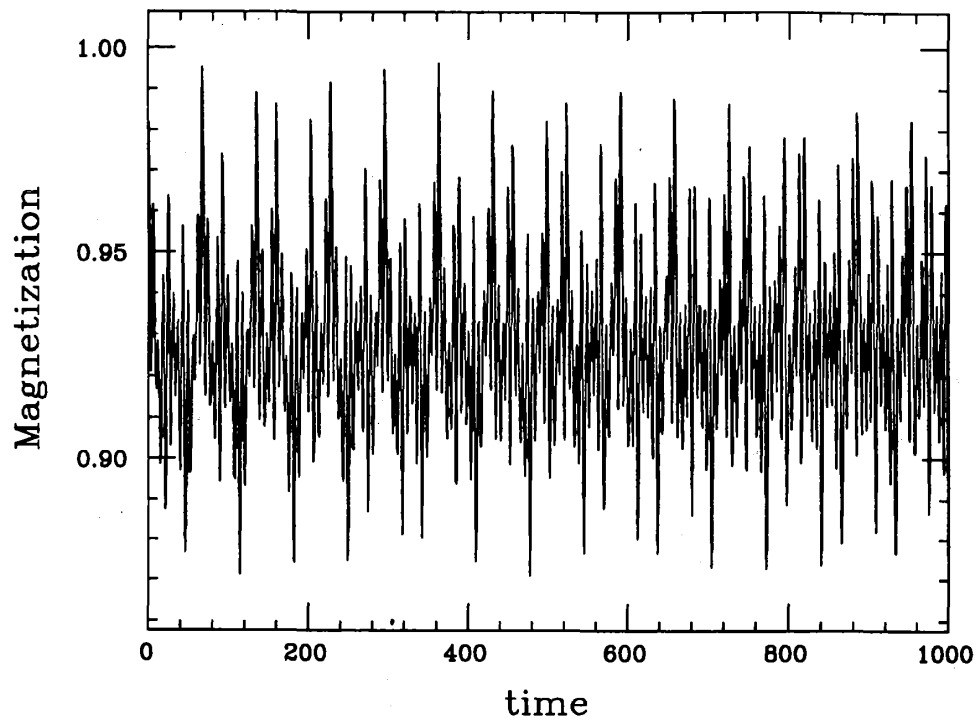


図 5: モード数1のときの磁化の時間変化。

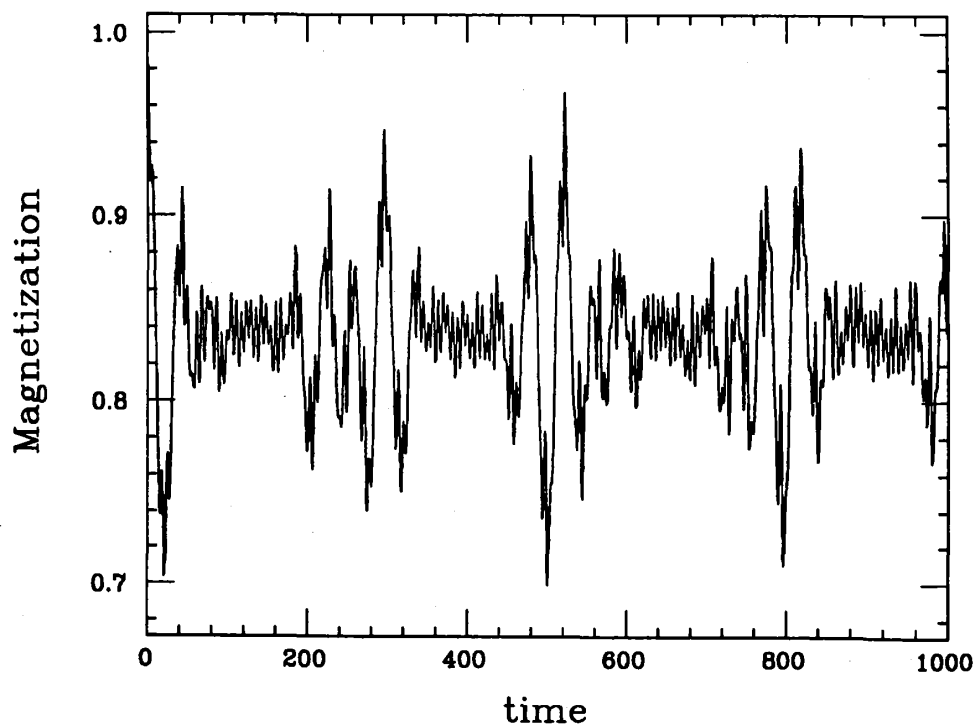


図 6: モード数2のときの磁化の時間変化。

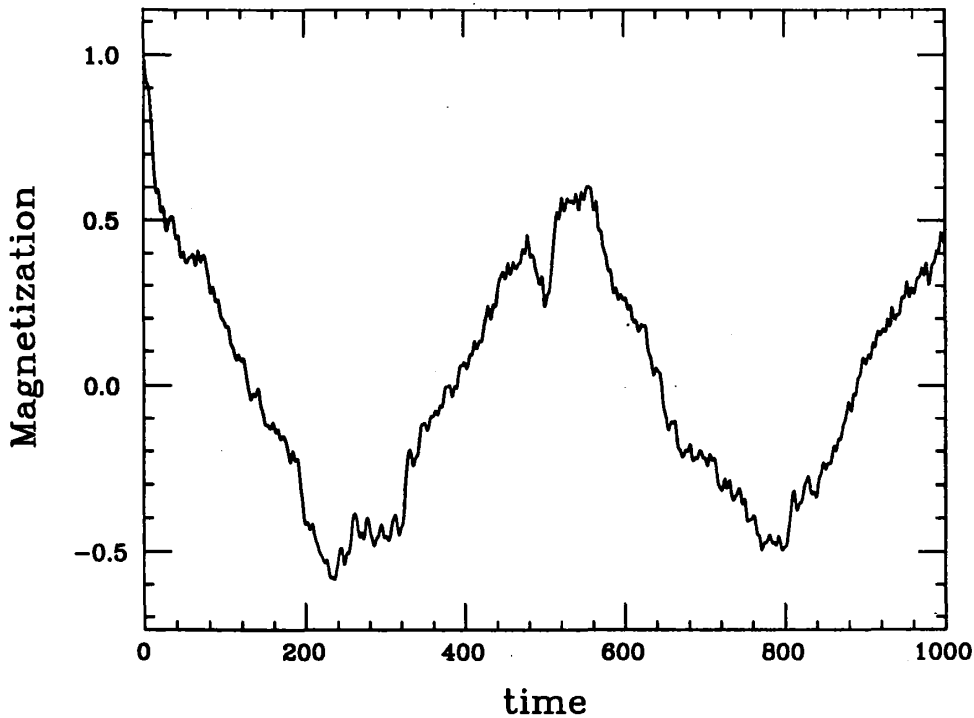


図 7: モード数 3 のときの磁化の時間変化。

から、周期 T は

$$T = 2\pi/\Delta E \simeq 317 \quad (15)$$

と与えられる。また、 $\delta = \sqrt{2}/5$ の場合は、

$$T = 2\pi/\Delta E \simeq 160 \quad (16)$$

が得られる。これらの値は、図 8、図 9 のように、数値シミュレーションから得られるスピンのエネルギーの振動の周期とよく一致している。このエネルギーの振動は、エネルギー準位差が ΔE に近い状態間の量子的干渉効果と考えられる。

次に、相互作用が磁化の振動の周期や振幅にどのような影響を与えるのか調べた。図 10 - 図 13 のように、相互作用が強くなるにつれ、振幅は大きくなり、周期は短くなる傾向が見られる。周期 T を $\Delta E = 2\pi/T$ によってエネルギー差に換算し、相互作用がないときからのずれを示したのが図 14 である。また、振幅についても、相互作用による変化を図 15 に示した。相互作用がないときからのずれ方は ω_α の値に依存し、 $\omega_\alpha = 0.5$ のとき 2 次のずれ、 $\omega_\alpha = 1.0$ のとき 1 次のずれであると考えられる。

ここで、相互作用の項を摂動と考え、無摂動系からのエネルギーのずれを求める。摂動ハミルトニアン $\mathcal{H}'$ は

$$\mathcal{H}' = \sum_{\alpha} v_{\alpha} \sigma_z (b_{\alpha}^{\dagger} + b_{\alpha}) \quad (17)$$

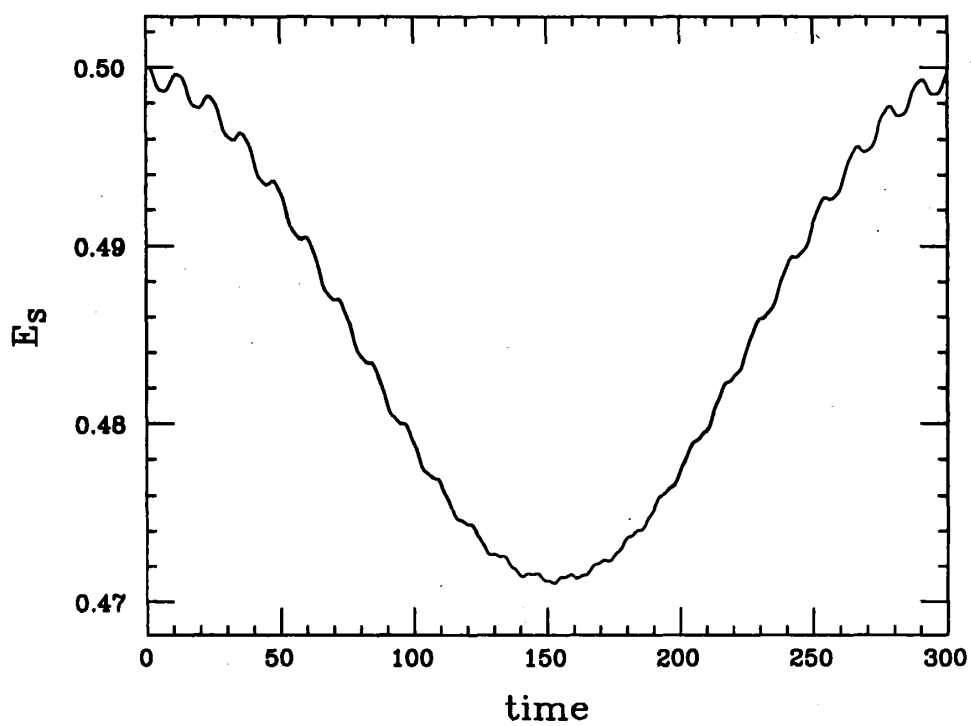


図 8: $\delta = 1/5$ のときのスピンのエネルギーの時間変化。

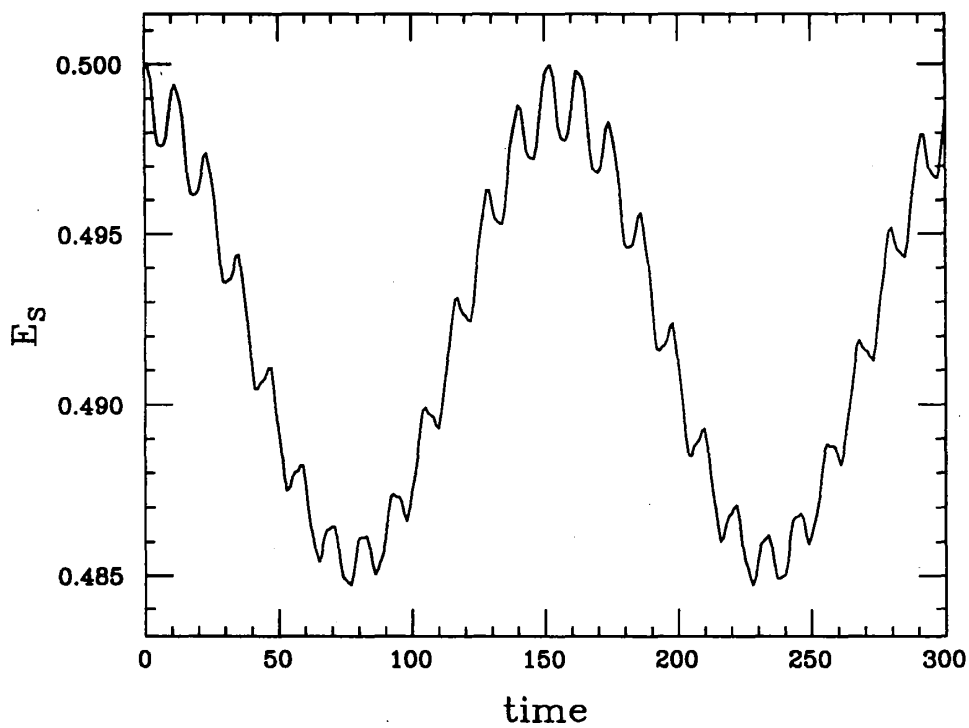


図 9: $\delta = \sqrt{2}/5$ のときのスピンのエネルギーの時間変化。

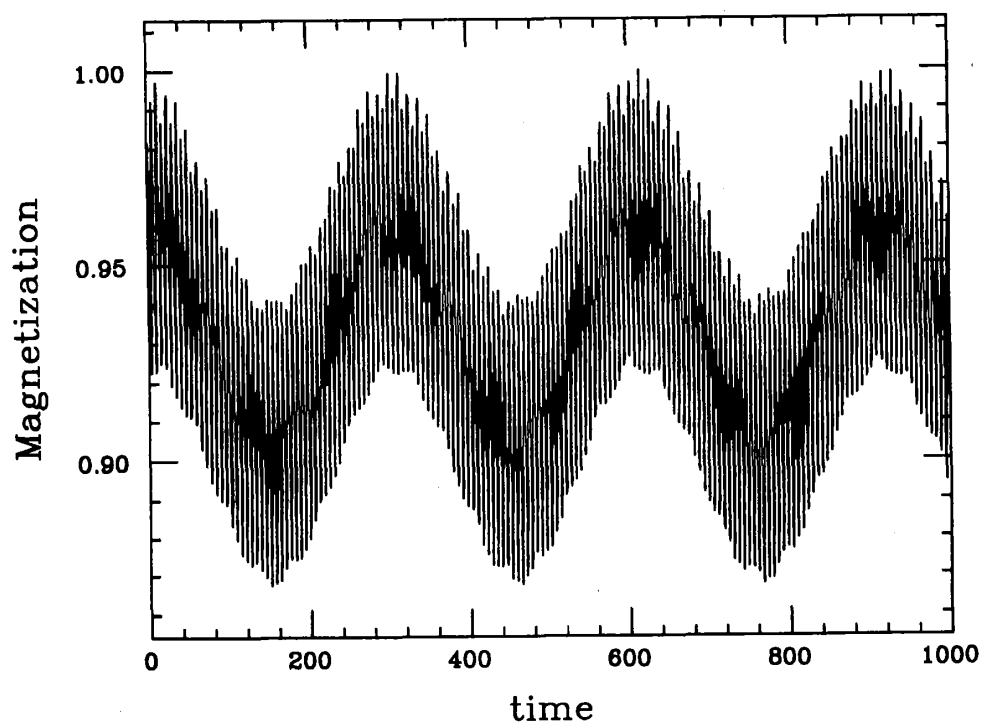


図 10: $\omega_\alpha = 0.5$ 、 $v_\alpha = 0.02$ の場合の磁化の時間変化。

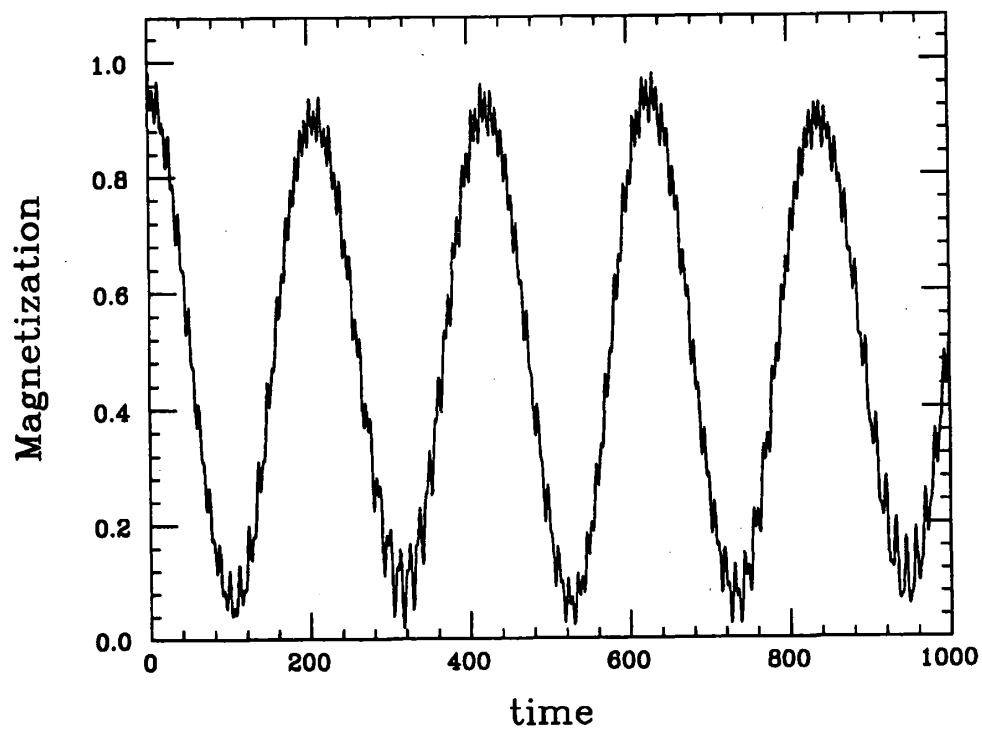


図 11: $\omega_\alpha = 0.5$ 、 $v_\alpha = 0.05$ の場合の磁化の時間変化。

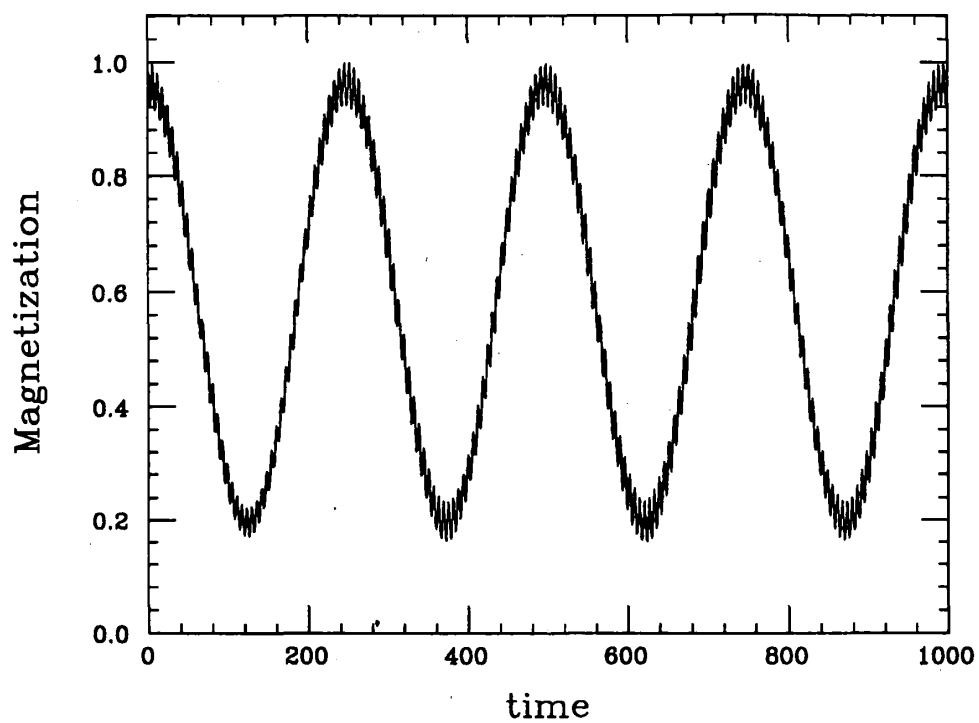


図 12: $\omega_\alpha = 1.0$ 、 $v_\alpha = 0.02$ の場合の磁化の時間変化。

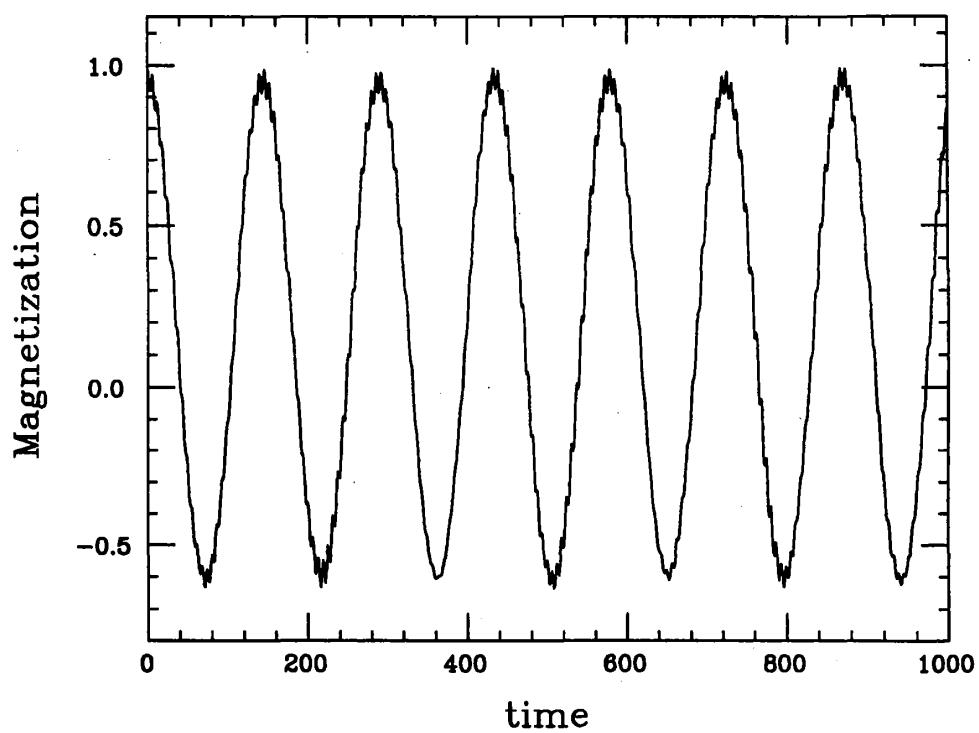


図 13: $\omega_\alpha = 1.0$ 、 $v_\alpha = 0.05$ の場合の磁化の時間変化。

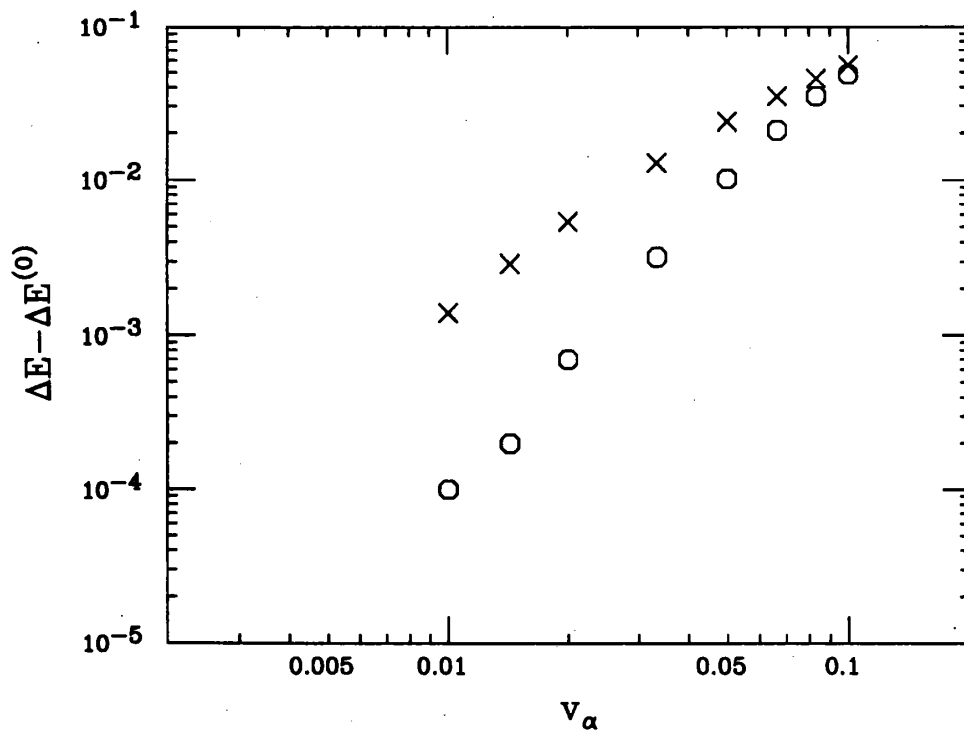


図 14: エネルギー差の相互作用による変化。○は $\omega_\alpha = 0.5$ のとき、×は $\omega_\alpha = 1.0$ のときである。

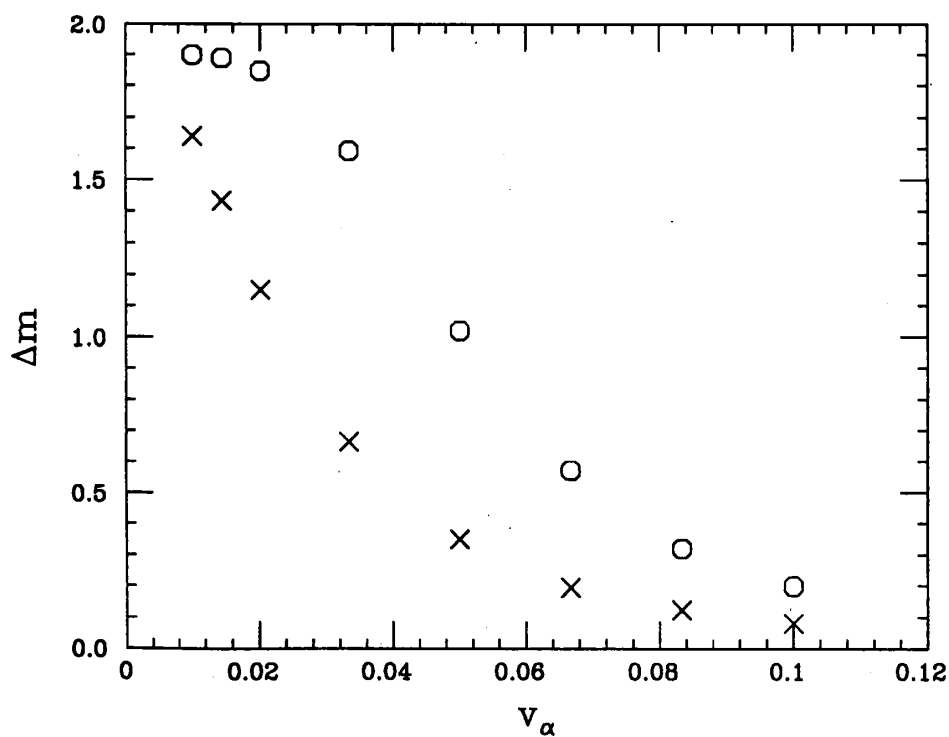


図 15: 磁化の振幅の相互作用による変化。縦軸には、振動磁化の極小値とスピンの基底状態での磁化との差をとった。○は $\omega_\alpha = 0.5$ のとき、×は $\omega_\alpha = 1.0$ のときである。

であり、無摂動系の固有状態のエネルギー $E^{(0)}$ は

$$E^{(0)} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + \delta^2} + \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \left(n_{\alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (18)$$

で与えられる。

モード数 $N_B = 4$ 、振動数 $\omega_{\alpha} = 0.5$ の場合、初期状態 $\sigma_z = 1$ 、 $n_{\alpha} = 0$ でのエネルギーは $E = 1.5$ である。無摂動系の固有状態を $|\pm, n_1 n_2 n_3 n_4\rangle$ で表すと、エネルギー固有値 $E^{(0)} = 1.51$ を持つ固有状態 $|+, 0000\rangle$ が初期状態のほとんどを占めている。ゆっくりした振動を見るために、他の固有状態のうちエネルギーの値の近いもののみを考えると、エネルギー固有値 $E^{(0)} = 1.49$ を持つ $|-, 1100\rangle$ 、 $|-, 2000\rangle$ などに限られる。一方、摂動ハミルトニアン $\mathcal{H}'$ によってこれらの状態の間に遷移が起こることはない。すなわち、

$$\langle -, 1100 | \mathcal{H}' | +, 0000 \rangle = 0 \quad (19)$$

である。したがって、一次摂動によるエネルギーのずれはないことがわかる。

モード数 $N_B = 4$ 、振動数 $\omega_{\alpha} = 1.0$ の場合、初期状態 $\sigma_z = 1$ 、 $n_{\alpha} = 0$ でのエネルギーは $E = 2.5$ である。このとき、エネルギー固有値 $E^{(0)} = 2.51$ を持つ固有状態 $|+, 0000\rangle$ が初期状態のほとんどを占めている。他の固有状態のうちエネルギーの値の近いものは、エネルギー固有値 $E^{(0)} = 2.49$ を持つ $|-, 1000\rangle$ などである。これらの状態の間には摂動ハミルトニアン $\mathcal{H}'$ による遷移があり、

$$\langle -, 1000 | \mathcal{H}' | +, 0000 \rangle = v_1 \frac{\delta}{\sqrt{1 + \delta^2}} \quad (20)$$

である。したがって、一次摂動によるエネルギーのずれがある。この摂動計算によるエネルギーのずれの程度と、数値シミュレーションで見られるエネルギー差のずれの程度はおおよそ一致している。

5 まとめ

スピンボゾンモデルをミクロに取り扱い、準安定状態の緩和の問題を考察した。ここで扱ったボゾンの自由度はあまり大きくないが、スピンとボゾンの相互作用により、スピンの振動する [10, 11] 様子が見られた。この磁化の振動は、微粒子による電磁波の共鳴吸収を観測した Awschalom ら [2] の実験と関連して興味深いものである。また、ボゾンのモード数を増やすと磁化の振動は長周期化することから、モード数が十分大きいときボゾンはスピンに対し熱浴の働きをするものと考えられる。

参考文献

- [1] E. M. Chudnovsky and L. Gunther: Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 661.
- [2] D. D. Awschalom, J. F. Smyth, G. Grinstein, D. P. DiVincenzo and D. Loss: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 3092, *ibid.* **70** (1993) 2199. D. D. Awschalom, D. P. DiVincenzo, G. Grinstein and D. Loss: Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 4276. A. Garg: Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 2198, *ibid.* **71** (1993) 4249.
- [3] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg and W. Zwerger: Rev. Mod. Phys. **59** (1987) 1.
- [4] U. Weiss: *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, 1993).
- [5] M. Takasu and D. Chandler: in *Computer Aided Innovation of New Materials II*, eds. M. Doyama, J. Kihara, M. Tanaka and R. Yamamoto (Elsevier Science Publishers, 1993) 375.
- [6] Y. Tanimura and S. Mukamel: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 66.
- [7] T. Tsuzuki: Prog. Theor. Phys. **92** (1994) 709.
- [8] M. Suzuki: Physica A **205** (1994) 65.
- [9] H. Kobayashi, N. Hatano and M. Suzuki: Physica A **211** (1994) 234.
- [10] C. Aslangul, N. Pottier and D. Saint-James: Physica A **149** (1988) 535. K. Awaka, G. Tatara and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993) 1939. 福山秀敏: 固体物理 **30** (1995) 1.
- [11] K. Fujikawa, S. Iso, M. Sasaki and H. Suzuki: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 1093.