開放量子系のリウビリアンの共鳴状態の厳密計算

Exact Calculation of Resonant States of the Liouvillian of Open Quantum Systems

（日本物理学会推薦）

代表研究者	東京大学	羽田野　直道	The University of Tokyo	Naomichi HATANO
協同研究者	バトラー大学	オルドネス　ゴンザロ	Butler University	Gonzalo ORDONEZ
	大阪府立大学	ガーモン　サバンナ	Osaka Prefectural University	Savannah GARMON
	テキサス大学	ペトロスキー　トミオ	University of Texas	Tomio PETROSKY

Study of time evolution of open quantum system is of great importance to various fields of physics because a nanodevice connected to leads of quantum wires as well as unstable nuclides are typical examples of open quantum systems. We here analyze the time evolution of open quantum systems according to the Schrödinger equation and the Liouville-von Neumann equation, which are fundamental equation governing the time evolution of quantum systems. We first make clear that they can have time-reversal symmetry breaking solutions in spite of the fact that the equations themselves are time-reversal symmetric. We next show that, out of the time-reversal symmetry breaking solutions, we always have decaying solutions when we solve the initial boundary condition problem of these first-order differential equations. We also develop a numerically rigorous method of finding the eigenvalues of the time-reversal symmetry breaking solutions. The time-reversal symmetry breaking solutions of the Louville-von Neumann equation may explain the increase of the entropy in the level of microscopic description of quantum dynamics.

研究目的

まず題名のキーワードについて説明します。開放量子系とは、一般に粒子の出入りがあるような量子系です。例えば量子ドットのような微小な量子系に導線が接続され、そのさらに外側に巨視的な熱浴が接続されている系では、導線を通して熱浴から量子ドットに粒子が入射し、量子的に散乱された粒子が導線を通って熱浴に出て行きます。このような系は境界が開放されているために開放量子系と呼ばれます。開放量子系はナノデバイスのモデルとして非常に重要ですが、それだけではなく不安定核のモデルでもあります。安定原子核に放射線が入射して不安底核となり、やがてそれが崩壊して放射線が遠方に出て行くからです。

開放量子系では一般に共鳴現象が起こります。共鳴現象とは、例えば熱浴から入射した電子が量子ドットにトラップされ、ある時間を経てから出て行く現象です。トラップされている時間が共鳴現象の寿命です。共鳴現象は量子状態の時間発展の過程で起こる現象なので、単純な場合には量子時間発展を記述する方程式であるシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle = H\left|\psi(t)\right\rangle \tag{1}$$

を解くことによって説明できます。ここでHはハミルトニアン、$\left|\psi(t)\right\rangle$は量子系の純粋状態です。

シュレーディンガー方程式(1)の解は、それに対応する固有値問題

$$H\left|\varphi\right\rangle = E\left|\varphi\right\rangle \tag{2}$$

の解である、ハミルトニアンHの固有状態を重ね合わせて得るのが簡単です。特に共鳴現象は、共鳴状態と反共鳴状態という固有状態の重ね合わせで表現されます。固有値問題(2)を、境界で粒子が外に流れ

出すという境界条件で解いた解が共鳴状態、逆に境界で粒子が外から流入するという境界条件で解いた解が反共鳴状態です。ハミルトニアン H の共鳴状態と反共鳴状態を求めることは、シュレーディンガー方程式(1)の解である共鳴現象の記述のために重要なだけでなく、量子ドットの電気伝導特性を計算したり、不安定原子核の寿命を求めるために重要です。

次にリウビリアンについて説明します。シュレーディンガー方程式(1)は純粋状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展を記述する方程式です。しかし、量子系は一般には純粋状態をとるとは限らず、純粋状態が確率的に重ね合わされた状態である混合状態をとることもあります。例えば温度 T の平衡状態にある量子系は混合状態にあります。混合状態は密度行列

$$\rho(t)=\sum_{m,n}c_{mn}(t)|\varphi_m\rangle\langle\varphi_n| \tag{3}$$

で表されます。密度行列の時間発展を記述する方程式がリウビル・フォンノイマン方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t)=[H,\rho] \tag{4}$$

です。ここで

$$[H,\rho]=H\rho-\rho H \tag{5}$$

は交換関係です。

仮にヒルベルト空間が N 次元だとすると純粋状態 $|\psi(t)\rangle$ は N 次元ベクトルで表現されますが、ハミルトニアン H は $N\times N$ 行列で表現されます。したがってハミルトニアン H は N 次元ベクトルの純粋状態を別の N 次元ベクトルの純粋状態に射影する演算子であると言えます。それに対して混合状態 $\rho(t)$ は $N\times N$ 行列で表現されます。そのため交換関係(5)は $N\times N$ 行列を $N\times N$ 行列へ射影する写像となりますが、それを超演算子と呼ぶことがあります。とくに ρ を $[H,\rho]$ に射影する超演算子をリウビル演算子あるいはリウビリアンと呼び、L と書きます。つまり

$$L\rho=[H,\rho] \tag{6}$$

と書くことにします。するとリウビル・フォンノイマン方程式(4)は

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho(t)=L\rho(t) \tag{7}$$

となり、形式的にシュレーディンガー方程式(1)と同じ形に書けます。

固有値問題(2)によって定義されたハミルトニアン H の共鳴状態と反共鳴状態の求め方についてはこれまでに多くの研究があります。それらを用いてシュレーディンガー方程式(1)の解である共鳴現象をどのように記述すればよいかも、おおよそがわかってきました。同様のことを混合状態についても行うのが本研究の目的です。つまり、固有値問題

$$L\rho=z\rho \tag{8}$$

の解である、リウビリアン L の固有状態として共鳴状態と反共鳴状態を適切に定義し、それによってリウビル・フォンノイマン方程式(7)の解である混合状態の共鳴現象を記述する手法を開発します。特に、共鳴状態と反共鳴状態を近似的に、あるいは現象論的に導入するのではなく、厳密に、あるいは数値的厳密に求めるのが目的です。

研究経過

開放量子系の多くの研究では、熱浴を具体的に与えます。特に無数のボゾンの集合体として計算を進めるのが一般的です。それに対して本研究では、ランダウアー公式の考え方に基づいて、熱浴の代わりに無限に長い導線を用いるのが出発点です[1-9]。

そこで、ランダウアー公式について説明します。量子ドットが左右の導線を介して左右の熱浴とつながっている開放量子系を考えます。左右の熱浴に電位差をつけて量子ドットのコンダクタンス（抵抗の逆数）を測定する状況を考えましょう。ランダウアー公式によると、このコンダクタンスは、量子ドットの左右の導線が無限遠方まで続いていると考えて量子的に散乱問題を計算することによって理論的に求められます。

そこには重要な考え方が潜んでいます。開放量子系において熱浴が果たす役割というのは、量子ドットで散乱されてきた粒子を吸収し、平衡化し、量子的な情報を完全に奪ってから粒子を吐き出すというというものです。言い換えれば、熱浴が吸収した粒子と熱浴が吐き出す粒子の間には全く相関がありません。相関を失わせるのが熱浴の役割なのです。

この熱浴の役割は半無限の導線で代用できます。半無限の導線においては、量子ドットで散乱された粒子は無限遠方に去ったまま戻ってきません。一方で無限遠方から入射する粒子は、彼方にあるはずの熱浴のフェルミ分布を反映していると仮定します。無限遠方に去る粒子と、無限遠方から入射する粒子の間に全く相関がないとすると、熱浴が接続されている場合とちょうど同じ状況が実現されます。

そこで本研究では熱浴を具体的に与えず、ランダウアー公式の精神に則って半無限の導線を考えます。これによって計算を大いに簡単化しているのが本研究の大きな特徴の一つです。

以上の考察から、本研究ではタイトバインディング模型の量子散乱体にタイトバインディング模型の半無限導線が接続されている系を解析しました。まず純粋状態の時間発展を記述するシュレーディンガー方程式(1)について、以下の成果を挙げました。

第一に、固有値問題(2)の固有状態として得られる共鳴状態と反共鳴状態の物理的意味づけを明確にしました。系に磁場がない場合、シュレーディンガー方程式(1)は時間反転に関して対称になっています。しかし、その解である共鳴状態と反共鳴状態がそれぞれ時間反転対称性を破っていることを明確にしました。

共鳴状態と反共鳴状態はいずれも複素運動量と複素エネルギーを持っています。共鳴状態は複素運動量の実部が正、複素エネルギーの虚部が負になっており、これは粒子がトラップから外に漏れ出して粒子数が減少すると解釈できます。逆に反共鳴状態の複素運動量の実部は負、複素エネルギーの虚部は正なので、粒子が外から入射して粒子数が増加すると解釈できます。それぞれの解は時間反転対称性を破っていますが、共鳴状態と反共鳴状態は必ず組で現れるので、解全体としては時間反転対称性を保っており、元の方程式が時間反転対称性を持っていることと矛盾しません。

なお、共鳴状態も反共鳴状態も波動関数が遠方で発散するために通常の規格化が行えず、多くの研究で非物理的と見なされていました。しかしこの発散は粒子が最終的に遠方に逃げることを表しており、確率解釈が可能であることも示せます。

第二に、共鳴状態や反共鳴状態を含めた点スペクトルを持つ状態のみで完全系を構成することに成功しました。開放量子系の完全系は、通常は束縛状態と連続散乱状態で構成されており、共鳴状態をとりいれるには連続散乱状態の積分路を変更しますが、必ず物理的意味のない背景積分が残ります。また反共鳴状態を同時に取り込むことができず、時間反転対称性を手で破ってしまうことになります。それに対して我々が新たに発見した完全系には背景積分が存在せず、時間反転対称性も保っています。

この完全系を使って時間発展演算子 e^{-iHt} を展開した結果、$t>0$ においては自動的に共鳴状態のみが寄与し、$t<0$ においては自動的に反共鳴状態のみが寄与することがわかりました。言い換えると次のようなことになります。シュレーディンガー方程式(1)は時間の一階微分方程式なので、解を求めるに当たっては一つの境界条件を与えます。その境界条件は初期条件か終末条件です。初期条件問題としてシュレーディンガー方程式(1)を解くと、自動的に共鳴状態のみが採用され、粒子が漏れ出して崩壊する現象が現れます。逆に終末条件として解くと、自動的に反共鳴状態のみが採用され、粒子が入射して励起される現象が現れます。つまり、初期条件問題として解くか終末条件問題として解くかを選択する段階で初めて時間反転対称性が破れることを明確にしました。

シュレーディンガー方程式(1)に対する以上の成果を踏まえ、リウビル・フォンノイマン方程式(7)に拡張したときに新しい現象が現れる場合を明確にしました。散乱体に粒子が存在すると同時に、その励起エネルギーに等しいモードの輻射場が無数にある場合、リウビリアンの固有値問題(8)の解に、ハミルトニアンの固有値問題(2)の解の組み合わせでは書けない非自明な解が現れることを明らかにしました。例えばレーザー光の中に、それと共鳴する二準位を持つ原子が存在する場合がそれに当たります。定常状態ではラビ振動が起こりますが、その定常状態に向けての緩和は非自明な寿命を持つのです。

最後に、リウビリアンの固有値問題を数値的厳密に解く手法を開発しました。リウビリアンのグリーン関数を定義し、その極を数値的に求めます。その結果、上記の議論で非自明な解に相当する極を発見しました。

考察

今後の展望について述べます。リウビリアンの固有値問題(8)の解である共鳴状態と反共鳴状態が求

まったので、これを基にリウビル・フォンノイマン方程式(7)の共鳴現象を議論します。

上に述べたように、シュレーディンガー方程式(1)の時間発展演算子 e^{-iHt} については、初期値問題を解くことによって崩壊する共鳴状態が自動的に採用されることを明らかにしました。同様のことを、リウビル・フォンノイマン方程式の時間発展演算子 e^{-iLt} についても議論します。これによって密度行列 $\rho(t)$ の時間発展を解析できるようになります。

これは統計物理学にとって大きな意味を持っています。密度行列を使ってエントロピーが

$$S(t) = -\mathrm{Tr}\,\rho(t)\ln\rho(t) \qquad (9)$$

と表されるからです。初期値問題においては密度行列 $\rho(t)$ の時間発展に必ず崩壊状態のみが採用されるのであれば、エントロピー(9)が必ず増大することを微視的に示せることになります。

これは通常のエントロピー増大の議論と大きく異なります。通常の議論では、エントロピーの大きい状態は状態数が多く、したがってそこに落ち着く確率が高いとされます。この議論では、微視的な状態変数を縮約して巨視的な変数のみを残すことによってエントロピー増大が得られると結論していることになります。ここで、微視的な変数を縮約する過程において時間反転対称性を手で破っていることに注意が必要です。なぜなら、エントロピーなどの巨視的状態変数を指定しただけでは系の時間発展を過去へ遡れないからです。このことから、時間反転対称性の破れは状態変数の縮約が原因であるとする考えが支配的になっています。

一方、我々の議論は、微視的な時間発展の段階で既に時間反転対称性の破れた解が選ばれることを示唆しています。つまり、微視的変数を縮約せずに密度行列 $\rho(t)$ の時間発展を正確に追っていてもエントロピーが増大する可能性があるのです。我々の議論では密度行列 $\rho(t)$ の時間発展を過去に遡れるのが通常の議論との大きな違いです。この議論に成功すれば統計物理学にとっての非常に大きな成果になると考えています。

参考文献

1. N. Hatano, G. Orodonez: Resonatn-state expansion of the Green's function of open quantum systems, International Journal of Theoretical Physics **50** (2011) 1105—1115.
2. R. Nakano, N. Hatano, T. Petroksky: Nontrivial eigenvalues of the Liouvillian of an open quantum system, International Journal of Theoretical Physics **50** (2011) 1134—1142.
3. K. Sasada, N. Hatano, G. Orodonz: Resonant spectrum analysis of the couductance of an open quantum system and three types of Fano parameter, Journal of the Physical Society of Japan **80** (2011) 104707 (27 pages).
4. S. Klaiman, N. hatano: Resonance theory for discrete models: Methodology and isolated resonances, Journal of Chemical Physics 134 (2011) 154111 (9 pages).
5. N. Hatano: Resonant states of open quantum systems, Progress of Theoretical Physics Supplement **184** (2010) 497—515.
6. N. Hatano, T. Kawamoto, J. Feinberg: Probabilistic interpretation of resonant states, Pramana Journal of Physics **73** (2009) 553—564.
7. S. Garmon, H. Nakamura. N. Hatano, T. Petrosky, Two-channel quantum wire with an adatom impurity: Role of the quasibound state in continuum, decay rate amplification, and the Fano effect, Phsical Review B **80** (2009) 115318 (31 pages).
8. N. Hatano, K. Sasada, H. Nakamura, T. Petrosky: Some properties of the resonant states in quantum mechanics and its computation, Progress of Theoretical Physics **119** (2008) 187—222.
9. K. Sasada, N. Hatano: Calculation of the self-energy of open quantum systems, Journal of the Physical Society of Japan **77** (2008) 025003 (2 pages).

研究の発表

口頭発表

1. N. Hatano: Exact solutions of complex eigenvalue problems of an open quantum-dot system, Invited talk in "Complex Spectral Representation of the Hamiltonian and the Liouvillian in Nanoscience" (University of Texas at Austin, 2012 年 5 月 25 日)
2. N. Hatano: Complex Eigenvalue Problem of the Hamiltonian and the Liouvillian of a Open Quantum Dot System, Invited talk in "Non-Hermitian

Operators in Quantum Physics" (Diderot University, Paris, 2012 年 8 月 28 日)

3. N. Hatano: Complex eigenvalue problem of the Liouvillian of an open quantum system, Invited talk in "Many-body Open Quantum Systems: From Atomic Nuclei to Quantum Optics" (ECT*, Trento, Italy, 2012 年 9 月 28 日)
4. N. Hatano: Complex eigenvalue problem of the Liouvillian of an open quantum dot system, Invited talk in "Resonances and non-Hermitian systems in quantum mechanics" (京都大学基礎物理学研究所, 2012 年 12 月 13 日)
5. 羽田野直道：リウビリアンの複素固有値問題を無近似で解く，一般講演，第 67 回日本物理学会秋季大会（横浜国立大学 2012 年 9 月 20 日）
6. N. Hatano: Complete and bi-orthgonal basis for resonant states, Invited talk in "12th International Workshop on Pseudo-Hermitian Hamiltonians in Quantum Physics" (Koc University, Istanbul, 2013 年 7 月 5 日)
7. 羽田野直道：２次固有値問題による共鳴状態の双直交基底の構成，一般講演，第 67 回日本物理学会秋季大会（徳島大学，2013 年 9 月 25 日）
8. 羽田野直道：開放量子系における時間反転対称性の破れ，招待講演，物性理論研究会（神山温泉，徳島，2013 年 9 月 28 日）

誌上発表

1. N. Hatano, G. Ordonez: Time-reversal symmetric resolution of unity without background integrals in open quantum systems (2013) arXiv.1405.6683.
2. N. Hatano: Equivalence of the effective Hamiltonian approach and the Siegert boundary condition for resonant states, Fortschritte der Physik, **61** (2013) 1-27.
3. S. Garmon, I. Rotter, N. Hatano, D. Segal: Analysis technique for exceptional points in open quantum systems and QPT analogy for the appearance of irreversibility, International Journal of Theoretical Physics, **51** (2012) 3536-3550.