

## 強結合状態の断熱分離による波束の集中

遠藤 隆\*

### Wave Packet Localization by Adiabatic Decoupling between Strongly Coupled States

By  
Takasi ENDO

**Abstract:** Adiabatic decoupling between two nondegenerate quantum states is considered. If the coupling between the two states is switched off suddenly, the probability is distributed over the two states. If the coupling is weakened adiabatically, the probability is localized into the lower state.

**Key words:** adiabatic passage, Landau-Zener tunneling, quantum annealing

#### 1. はじめに

最近, Julio Gea-Babacloche は, 量子力学において興味深い現象が生じることを示した<sup>(1)</sup>.

ある箱の中に粒子を一個入れておく。その波動関数は箱全体に広がっている。図1のように, 中央から少しずれた位置で壁を入れて箱を二つの部分LとRに分ける。LとRはほぼ等しい大きさであるが, 少しだけLの方が大きいとする。

もし急に壁で仕切ると, 粒子が発見される確率はほぼ半々になるであろう。Lの方が大きいので, それだけLで発見される確率が大きくなるが, その差は小さい。

ところが, 徐々に障壁の大きさを大きくしていくと, 粒子の波束はLに集中し, その結果, 粒子はほぼ確実にLで発見されるようになる。

障壁の時間変化, すなわちポテンシャルの時間変化が, 粒子を特にLの側に追いやる理由はないように思われるので, この現象はいささか奇妙に感じられる。そこで, この問題をもっと単純化して図2のような系を考察することによって, 問題を明確化する。

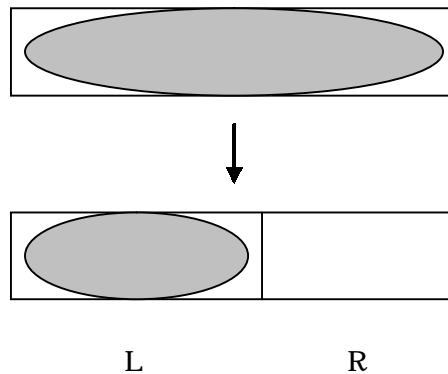


Fig.1 Wave packet in a box divided into two parts. When the splitting is adiabatic, the wave packet is localized in the larger box.

今, 電子などの粒子が二つのサイトLとRに局在できるような場合を考え, それを二つの状態ベクトル $|L\rangle$ と $|R\rangle$ で表す。この二つの状態は, 縮退していないものとし, そのエネルギー差を $\hbar\Delta = \hbar\Delta/2\pi$ とする。

最初, 両者の間には $\hbar\Delta$ よりも強い結合 $\hbar\Omega$ があるとする。その場合, 系のエネルギーは, 粒子の波束が一方に局在しているよりも, 両者にまたがって分布している方が低い。この状態から出発して, 結合を小さくしていき, 最終的には完全に結合を無くして( $\hbar\Omega = 0$ )分離する。その場合, 最終的には粒子

はほぼ 1 の確率でエネルギーの低い方(すなわち L) で発見されることになる。このことを理論的に議論し、数値計算によって確かめる。

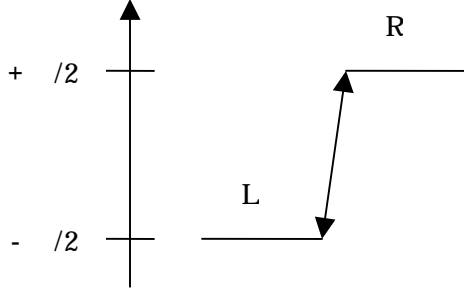


Fig.2 Model system.

The system accommodates a particle with two sites: L and R. Energy levels of the two sites are not degenerate. The spacing between the two levels is  $\hbar\Delta$ . The coupling between the two sites is  $\hbar\Omega$ .

## 2. 理論

図 2 の系の二つの状態を

$$|L\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

$$|R\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

とする。この二つの状態を基底として結合がない場合のハミルトニアン  $H$  を表すと、

$$H = \hbar \begin{pmatrix} \Delta/2 & 0 \\ 0 & -\Delta/2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

となる。

次に両状態が結合している場合、ハミルトニアンは、

$$H = \hbar \begin{pmatrix} \Delta/2 & \Omega/2 \\ \Omega/2 & -\Delta/2 \end{pmatrix} \quad (3)$$

と表すことができる。このハミルトニアンの固有方程式は、

$$\begin{vmatrix} \Delta/2 - \omega & \Omega/2 \\ \Omega/2 & -\Delta/2 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (4)$$

となる。この解、すなわち固有値は、

$$\omega = \pm \frac{\beta}{2} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} \quad (5)$$

である。

それぞれの固有値に対応する固有状態は、

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Omega}{\sqrt{\beta^2 - \Delta\beta}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\beta - \Delta}{\sqrt{\beta^2 - \Delta\beta}} \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Omega}{\sqrt{\beta^2 + \Delta\beta}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{-\beta - \Delta}{\sqrt{\beta^2 + \Delta\beta}} \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

である。これらは結合が大きい極限、すなわち  $\Omega \gg \Delta$  では、

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|R\rangle + |L\rangle) \quad (7.1)$$

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|R\rangle - |L\rangle) \quad (7.2)$$

となる。

逆に  $\Delta \gg \Omega$  では、

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |R\rangle \quad (8.1)$$

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -|L\rangle \quad (8.2)$$

となる。

結合の大きさによるエネルギー準位の変化を図 3

に示す。

この図からわかるように、強結合の固有状態  $|+\rangle$  が弱結合での固有状態  $|R\rangle$  に、 $|-\rangle$  が状態  $-|L\rangle$  に断熱的に推移することがわかる。 $-|L\rangle$  は  $|L\rangle$  と位相因子を除いて同じ状態を表している。

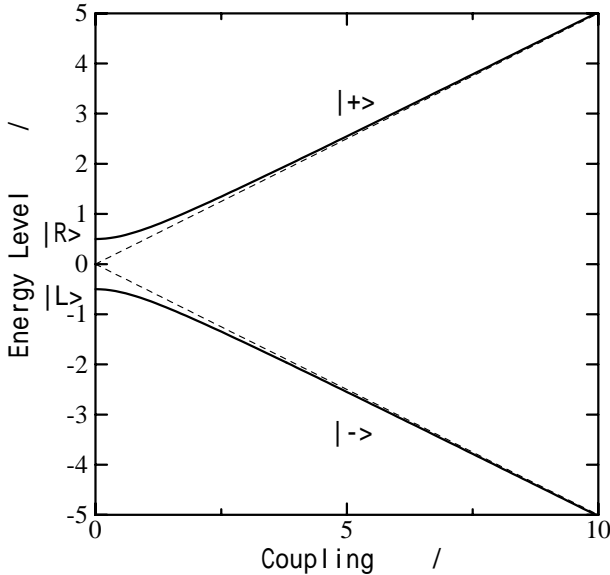


Fig.3 Energy level diagram  
The upper and lower branches correspond to R and L sites at coupling  $\hbar\Omega = 0$ , respectively.

したがって  $|-\rangle$  から断熱的に結合を弱くしていけば確率 1 で  $|L\rangle$  に移ると考えられる。すなわち、

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle - |L\rangle) \rightarrow |L\rangle \quad (9)$$

という変化をする。

この予想を確かめるために、いわゆるブロッホ方程式を用いて計算する。

### 3. 数値計算

2準位系の運動は、2準位原子系でよく知られているブロッホベクトルのモデル<sup>(2)</sup>で記述することができる。

2準位系のブロッホベクトルは次のように定義される。

$$\begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_R^* c_L + c_R c_L^* \\ -i(c_R^* c_L - c_R c_L^*) \\ c_R^* c_R - c_L^* c_L \end{pmatrix} \quad (10)$$

この定義によれば、 $w = 1$  が R にいる状態、 $w = -1$  が L にいる状態を表す。

このベクトルは次の運動方程式に従う。

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta & 0 \\ +\Delta & 0 & \Omega \\ 0 & -\Omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (11)$$

この運動方程式は、 $\Delta$  と  $\Omega$  が定数であれば解析的に解くことができ、次のような、いわゆる Rabi 振動解が得られる。

$$\begin{cases} u(t+\tau) = \frac{\Omega^2 + \Delta^2 \cos\beta\tau}{\beta^2} u(t) - \frac{\Delta}{\beta} \sin\beta\tau v(t) - \frac{\Delta\Omega}{\beta^2} (1 - \cos\beta\tau) w(t) \\ v(t+\tau) = \frac{\Delta}{\beta} \sin\beta\tau u(t) + \cos\beta\tau v(t) + \frac{\Omega}{\beta} \sin\beta\tau w(t) \\ w(t+\tau) = -\frac{\Delta\Omega}{\beta^2} (1 - \cos\beta\tau) u(t) - \frac{\Omega}{\beta} \sin\beta\tau v(t) - \frac{\Delta^2 + \Omega^2 \cos\beta\tau}{\beta^2} w(t) \end{cases} \quad (12)$$

しかし  $\Omega$  が時間変化する場合は、一般的な解は知られていない。ただし  $\Delta$  が一定の割合で時間変化する場合は放物柱関数を用いた解析解が得られており<sup>(3)</sup>、これは後述するように  $\Omega$  が一定の割合で時間変化する場合と等価であるので、解析解が得られることになる。

結合が一定の割合で減少する場合について式(11)を数値的に積分した。ただし、 $\Omega$  が時間変化するので、時間を角振動数  $\beta$  に比べて短く分割し、その時間間隔  $\tau$  内では式(11)に従って運動するものとし、式(12)を用いた。

状態  $|L\rangle$  で発見される確率  $P_L = |c_L|^2 - |c_R|^2$  は  $w$  を用いて、

$$P_L = \frac{1}{2}(1-w) \quad (13)$$

と表すことができる。

結合  $\Omega(t)$  は、次のように時間変化するものとした。

$$\Omega(t)/\Delta = -\alpha t \quad (14)$$

$t = -\infty$  では無限に強い結合 ( $\Omega(t) = +\infty$ ) があり、

$t=0$  で完全に結合が消滅し ( $\Omega(t)=0$ ) 二つのサイトが分離する。

図 4 に数値計算の結果を示す。

図 4 を見ると、結合の時間変化率  $\alpha$  が大きい場合は、L で発見される確率はほぼ 0.5 であり、二つの状態の確率がほぼ等しくなる。しかし  $\alpha$  が小さい場合、すなわち断熱的に結合を切っていく場合は L で発見される確率が 1 になっている。

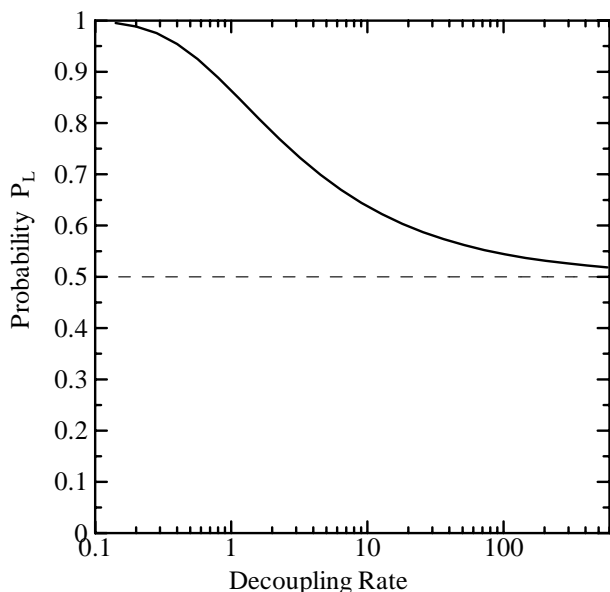


Fig.4 Probability of the particle to be found in the lower state.

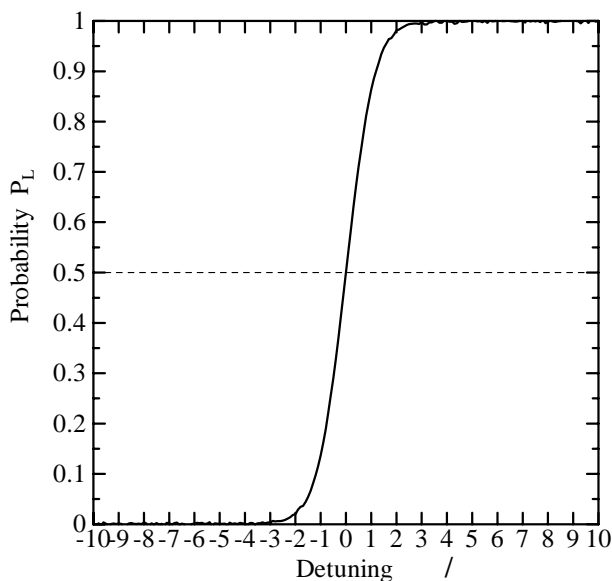


Fig.5 Detuning dependence of probability  $P_L$

分離したときのエネルギー差  $\hbar\Delta$  が 0 であればこのようなことは起きないであろう。では、どの程度

のエネルギー差があれば、このような波束の集中が起こるのであろうか。

図 5 は、 $\alpha$  を 1 に固定して  $\Delta$  を変えて計算した結果を示す。これを見ると、 $\Delta$  が  $\alpha$  に比べて大きいと L に集中することがわかる。逆に  $\Delta$  が負の場合は L で発見される確率が 0 になっている。すなわち R で発見されることになる。

#### 4 . Landau-Zener 過程 と の 関 係

ここで考察した量子力学は、NMR や二準位原子における断熱高速通過 (adiabatic rapid passage), すなわち Landau-Zener 過程と密接な関係がある。Landau-Zener 過程は、スピンの下向き状態と上向き状態をそれぞれ

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (15.1)$$

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (15.2)$$

とするならば、

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta(t) & 0 \\ +\Delta(t) & 0 & \Omega \\ 0 & -\Omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (16)$$

という運動方程式に従う運動とみなせる。ここで

$$\Delta(t)/\Omega = -\alpha t \quad (17)$$

である。すなわち結合  $\Omega$  を時間変化させるのではなく、離調  $\Delta$  を時間変化させる。

しかしながら、次の変数変換を行うならば、式(16)は式(11)と等価になる。

$$\begin{cases} (\Delta, \Omega) \rightarrow (\Omega, \Delta) \\ (u, w) \rightarrow (w, u) \end{cases} \quad (18)$$

Landau-Zener 過程では、十分に大きな離調 ( $\Delta = -\infty$ ) から共鳴状態 ( $\Delta = 0$ ) を経て再び大きな離調 ( $\Delta = +\infty$ ) に至る場合、スピンは共鳴状態で半々の重ね合わせ状態となり、最後は反転する。共鳴状態では、

$$|\downarrow\rangle \rightarrow |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \quad (19)$$

という推移をほぼ確率 1 で実現する。そこで、

$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \quad (20.1)$$

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (20.2)$$

と置いてやれば、Landau-Zener 過程における共鳴状態までの変化は、

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle - |L\rangle) \rightarrow |L\rangle \quad (21)$$

という変化になる。これは、ここで考察した断熱的分離の場合の変化、すなわち式(9)と同じである。

## 5. おわりに

箱を非対称的に分割した場合に、広い方に波束が集中するのは奇妙な感じがするが、2準位系で結合を断熱的に弱くする場合は、よく知られた Landau-Zener 過程と類似した現象になっていることがわかった。

近年、メゾスコピック系における量子現象に関心が集まっているが、量子井戸中に単一の電子を出し入れすることが可能になっており、井戸のポテンシャルを制御することで、ここで考察したような量子現象が観測できるかもしれない。また複数の量子ドットが結合している場合に、結合強度を断熱的に変化させることで、一つのドットに確率 1 で電子を局在させることが可能になるであろう。

ただし、ここで考察した理論においては位相緩和は一切考慮されておらず、現実には位相緩和、すなわち横緩和が大きな制約となるであろう。実際、筆者らの光領域での実験<sup>(4)</sup>でも、環境系による位相緩和のために離調変化率が小さいとかえって反転率が減少していることが示された。

核スピン系の場合は、縦緩和及び横緩和を十分に長くすることが可能であるので、むしろ核スピン系の NMR によって実証する方が技術的には容易であろう。

スピン系にスピンを反転させる強い相互作用（すなわち横磁場）を印加し、それを徐々に弱くすれば反転相互作用の無い場合の最低エネルギー状態に達することが、量子アニーリング<sup>(5)</sup>との関係で興味を持たれている。最近、その手法の有効性が Ising スピングラスに関して示された<sup>(6)</sup>。

大域的な最小値を求めるための手法としては熱的

アニーリング法が知られているが、量子アニーリング法では波動関数がトンネル効果によって広い範囲に広がって大域的な最小値をほぼ確率 1 で探し当てることを利用する。これは、波束が断熱的に結合を切断することで最低エネルギー状態に集中することと等価である。そのための最適な分離条件がわかれば、新しい計算手法として有用であろう。

## 参考文献

- (1) Julio Gea-Banacloche, "Splitting the wave function of a particle in a box", Am. J. Phys. Vol.70, pp.307-312 (2002).
- (2) L.Allen and J.H.Eberly, "Optical Resonance and Two-Level Atoms" (Wiley, New York, 1975).
- (3) N.V.Vitanov and B.M.Garraway, "Landau-Zener model: Effects of finite duration", Phys. Rev. A53, pp.4288-4304(1996), erratum Phys. Rev. A54, pp.5458(1996).
- (4) S.Nakanishi, T.Endo, T.Muramoto and T.Hashi, "Optical Adiabatic Rapid Passage by Linear Frequency Chirping in Ruby", Opt. Commun. Vol.38, pp.419-422 (1981).
- (5) T.Kadowaki and H.Nishimori, "Quantum Annealing in the Transverse Ising Model", Phys. Rev. E Vol.58, pp.5355-5363(1998).
- (6) Giuseppe E. Santoro, Roman Martonak, Erio Tosatti and Roberto Car, "Theory of Quantum Annealing of an Ising Spin Glass", Science Vol.295, pp.2427-2430 (2002).