

量子ランジュバン方程式

発表者：仲宗根 将志

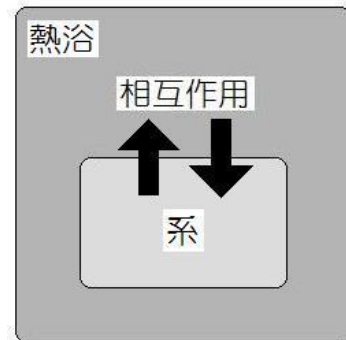
指導教官：賀数 清孝

ブラウン運動という現象は、アインシュタインによって初めて理論的に説明されたわけであるが、ブラウン粒子（ブラウン運動する粒子のこと）に対する運動方程式を最初に書き下したのはランジュバンであった。その運動方程式は、ランジュバン方程式と呼ばれ

$$m\ddot{x}(t) = -\gamma\dot{x}(t) + \xi(t)$$

(γ ；粘性係数、 $\xi(t)$ ；ゆらぎの効果を表す力)と書かれる。この古典的な式から導かれる結果は、ブラウン運動の実験結果をよく説明するが、より基本的な物理法則である量子力学を使っても実験結果を説明することができるはずであるし、さらには量子力学を使うことにより、古典力学では分からなかった何か新しいことが分かるかもしれない。この考えを元にブラウン運動を量子力学的に見ていくことにする。

そのためにまず系と調和振動子の集まりでできている熱浴とが、右図のように相互作用しているという状況を考える。そして、その相互作用ハミルトニアンが熱浴演算子と系演算子の積の形をしていると仮定し、色々と計算すると任意の系演算子の運動方程式が求められ、さらにこの式にマルコフ近似を使うと、一般的な量子ランジュバン方程式



$$\dot{Y} = \frac{i}{\hbar} [H_{\text{sys}}, Y] - \frac{i}{2\hbar} \left[[X, Y], \xi(t) - \gamma\dot{X} \right]_+$$

(Y ；任意の系演算子、 X ；熱浴と結合している系演算子、 $[A, B]_+ \equiv AB + BA$) が求められる。

そして、上の量子ランジュバン方程式をブラウン粒子に適用し、方程式を解き、ブラウン粒子の平均エネルギーと平均二乗変位、純粋に量子力学的な効果が表れる温度が0の場合の平均二乗変位を求めてみる。すると結果は、それぞれ近似的に $\frac{1}{2}kT$ 、 $\frac{2kT}{\gamma} |t_2 - t_1|$ 、 $\frac{2\hbar}{\pi\gamma} \log\left(\frac{\gamma(t_2 - t_1)}{m}\right)$ となり、これから先の2つは古典的な結果と一致していることが分かり、最後のは熱的なゆらぎの影響ではなく、古典力学では分からなかった零点エネルギーのゆらぎから現れる効果であることが分かる。