周期的に変動する外力をうける２準位系— Rabi システム—

filename=Rabi-system090701.tex

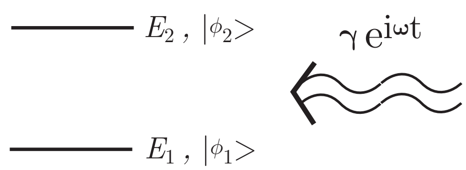
全系のハミルトニアンは、無摂動系のハミルトニアンを $\hat{H}_0$、摂動ポテンシャルを $\hat{V}$ として

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{1}$$

であり、時間に依存しない無摂動系のシュレディンガー方程式は

$$\hat{H}_0 \left|\psi_k^{(0)}\right\rangle = E_k \left|\psi_k^{(0)}\right\rangle, \quad (k = 1, 2) \tag{2}$$

である。



ここで, 無摂動状態は、つぎのように、直交規格化条件を満たすとする。

$$\langle\psi_k^{(0)}|\psi_{k'}^{(0)}\rangle = \delta_{kk'}\ (k, k' = 1, 2) \tag{3}$$

周期的に変動する外力のポテンシャル演算子 $\hat{V}$ の行列要素は

$$\begin{aligned}
\langle\psi_1^{(0)}|\hat{V}|\psi_1^{(0)}\rangle &= \langle\psi_2^{(0)}|\hat{V}|\psi_2^{(0)}\rangle = 0, & (4)\\
\left\langle\psi_1^{(0)}|\hat{V}|\psi_2^{(0)}\right\rangle &= \gamma\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t},\ \left\langle\psi_2^{(0)}|\hat{V}|\psi_1^{(0)}\right\rangle = \left\langle\psi_1^{(0)}|\hat{V}|\psi_2^{(0)}\right\rangle^* = \gamma\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} & (5)
\end{aligned}$$

で与えられているとする。また、時間依存の定常状態は

$$|\psi_k(t)\rangle \equiv \left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_k t/\hbar} = \left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t},\ (\omega_k \equiv E_k/\hbar,\ k = 1, 2) \tag{6}$$

と表することができる。これらを用いて時間的に変動する量子状態は、次のように表すことができる。

$$\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &\equiv c_1(t)\,|\psi_1(t)\rangle + c_2(t)\,|\psi_2(t)\rangle \\
&\equiv c_1(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle + c_2(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}\left|\psi_2^{(0)}\right\rangle
\end{aligned} \tag{7}$$

そこで、全系の、時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\Psi(t)\rangle \tag{8}$$

について、初期条件 $c_1(0)=1, c_2(0)=0$ の下で解くことを考える。
まず、左辺の計算を行うと

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(t)\right\rangle = [i\hbar\frac{dc_1}{dt}+c_1\cdot E_1]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle + [i\hbar\frac{dc_2}{dt}+c_2\cdot E_2]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}\left|\psi_2^{(0)}\right\rangle \tag{9}$$

となり、続いて右辺の計算を行うと

$$\begin{aligned}\hat{H}\left|\Psi(t)\right\rangle = c_1\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}\cdot E_1\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle + c_2\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}\cdot E_2\left|\psi_2^{(0)}\right\rangle \\ +c_1\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}\cdot\hat{V}\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle + c_2\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}\cdot\hat{V}\left|\psi_2^{(0)}\right\rangle\end{aligned} \tag{10}$$

が得られる。そこで、両辺に左から $\left\langle\psi_1^{(0)}\right|$ との内積をとると

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dc_1}{dt} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_1-\omega_2)t}\cdot\gamma\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\cdot c_2 \\ &= \gamma\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega-\omega_{21})t}\cdot c_2. \end{aligned} \tag{11}$$

となる。ここで、式 (3), (4),(5) と定義

$$\omega_{21}\equiv\omega_2-\omega_1=(E_2-E_1)/\hbar \tag{12}$$

を用いた。同様にして、左から $\left\langle\psi_2^{(0)}\right|$ との内積をとると

$$i\hbar\frac{dc_2}{dt}=\gamma\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega-\omega_{21})t}\cdot c_1 \tag{13}$$

が得られる。さらに、式 (11) と式 (13) の両辺を時間 t で微分を行い、それぞれに式 (11),(13) を用いて整理すると

$$\frac{d^2c_1}{dt^2}=\mathrm{i}(\omega-\omega_{21})\frac{dc_1}{dt}-\left(\frac{\gamma}{\hbar}\right)^2 c_1 \tag{14}$$

$$\frac{d^2c_2}{dt^2}=-\mathrm{i}(\omega-\omega_{21})\frac{dc_2}{dt}-\left(\frac{\gamma}{\hbar}\right)^2 c_2 \tag{15}$$

となり、係数 c_1, c_2 それぞれの微分方程式を得ることができる。次に、この式から 1 階微分の係数を消去するために、次のような変数変換を行う。

$$c_1(t) = a_1(t)\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega-\omega_{21})t/2}=a_1(t)\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}Wt}, \tag{16}$$

$$c_2(t) = a_2(t)\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega-\omega_{21})t/2}=a_2(t)\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Wt}, (W\equiv(\omega-\omega_{21})/2). \tag{17}$$

ここで、文字変数 W を数式の変形上の煩雑さをさけるために導入した。係数 c_1 の 1 階、2 階微分係数を計算すると、それぞれ

$$\dot{c}_1 = \dot{a}_1\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}Wt}+\mathrm{i}W\cdot a_1\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}Wt}, \tag{18}$$

$$\ddot{c}_1 = \ddot{a}_1\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}Wt}+2\mathrm{i}\dot{a}_1\cdot W\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}Wt}-a_1\cdot W^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}Wt} \tag{19}$$

が得られる。同様に、係数 c_2 の 1 階、2 階微分係数を計算すると

$$\begin{aligned} \dot{c}_2 &= \dot{a}_2 \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Wt} - \mathrm{i}W \cdot a_2 \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Wt}, & (20) \\ \ddot{c}_2 &= \ddot{a}_2 \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Wt} - 2\mathrm{i}\dot{a}_2 \cdot W \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Wt} - a_2 \cdot W^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Wt} & (21) \end{aligned}$$

となる。これらの式 (16),(18),(19) を式 (14) 代入すると、時間についての 1 階微分の項が相殺されて

$$\begin{aligned} \frac{d^2 a_1}{dt^2} &= -\left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}\right] a_1 & (22) \\ &= -\Omega^2 a_1, & (23) \end{aligned}$$

$$\Omega \equiv \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} \ (\Omega : \text{Rabi 振動数}) \tag{24}$$

が得られる。同様にして、式 (17),(20),(21) を式 (15) 代入すると

$$\frac{d^2 a_2}{dt^2} = -\Omega^2 a_2 \tag{25}$$

が得られる。係数 a_1, a_2 の一般解は、適当な積分定数 A_1, B_1, A_2, B_2 を用いて

$$\begin{aligned} a_1(t) &= A_1 \cos \Omega t + B_1 \sin \Omega t, & (26) \\ a_2(t) &= A_2 \cos \Omega t + B_2 \sin \Omega t & (27) \end{aligned}$$

と書ける。係数 c_1, c_2 の一般解は

$$\begin{aligned} c_1(t) &= (A_1 \cos \Omega t + B_1 \sin \Omega t)\, e^{\mathrm{i}(\omega - \omega_{21})\mathrm{t}/2}, & (28) \\ c_2(t) &= (A_2 \cos \Omega t + B_2 \sin \Omega t) e^{-\mathrm{i}(\omega - \omega_{21})\mathrm{t}/2} & (29) \end{aligned}$$

となる。初期条件 $t = 0$ のとき $c_1(0) = 1, c_2(0) = 0$ より、$A_1 = 1, A_2 = 0$ が得られる。このとき、係数 c_1, c_2 の特殊解は

$$\begin{aligned} c_1(t) &= (\cos \Omega t + B_1 \sin \Omega t)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega - \omega_{21})\mathrm{t}/2}, & (30) \\ c_2(t) &= B_2 \sin \Omega t \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega - \omega_{21})\mathrm{t}/2} & (31) \end{aligned}$$

となる。ここで、式 (30),(31) の両辺を時間 t で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{dc_1}{dt} &= [-\Omega \sin \Omega t + \Omega B_1 \cos \Omega t]\, e^{i(\omega - \omega_{21})t/2} \\ &\quad + [\cos \Omega t + B_1 \sin \Omega t]\, \frac{i(\omega - \omega_{21})}{2} e^{i(\omega - \omega_{21})t/2}, & (32) \\ \frac{dc_2}{dt} &= \Omega B_2 \cos \Omega t e^{-i(\omega - \omega_{21})t/2} - B_2 \sin \Omega t \frac{i(\omega - \omega_{21})}{2} e^{-i(\omega - \omega_{21})t/2} & (33) \end{aligned}$$

が得られる。さらに、式 (32) を式 (11) に、式 (33) を式 (13) に代入して、再び初期条件 $c_1(0) = 1, c_2(0) = 0$ を用いると積分定数が

$$B_1 = -\frac{\mathrm{i}(\omega - \omega_{21})}{2\Omega}, \quad B_2 = \frac{\gamma}{\mathrm{i}\hbar\Omega} \tag{34}$$

のように決まる。したがって、量子状態の時間的遷移を表す係数は

$$c_1(t) = \left[\cos\Omega t - \frac{\mathrm{i}(\omega - \omega_{21})}{2\Omega}\sin\Omega t\right] e^{i(\omega-\omega_{21})t/2}, \tag{35}$$

$$c_2(t) = \frac{\gamma}{i\hbar\Omega}\sin\Omega t \cdot \mathrm{e}^{-i(\omega-\omega_{21})t/2} \tag{36}$$

と求まる。そして、元のエネルギー準位にある相対的確率は、それぞれ、

$$|c_1(t)|^2 = \cos^2\Omega t + \left[\frac{(\omega - \omega_{21})}{2\Omega}\right]^2 \sin^2\Omega t, \tag{37}$$

$$|c_2(t)|^2 = \left[\frac{\gamma}{\hbar\Omega}\right]^2 \sin^2\Omega t \tag{38}$$

$$\tag{39}$$

となる。無論、$|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1$ は成立している。