

自己収束性波束の散乱問題における共鳴構造の崩壊と捕捉効果
Decay of Resonance Structure and Trapping Effect in Potential
Scattering Problem of Self-Focusing Wave Packet

キヤノン株式会社光学技術研究所 藤嶋 浩史 (Hironobu FUJISHIMA)*

Optics R&D Center, CANON INC.

宇都宮大学工学研究科 情報システム科学専攻 矢嶋 徹 (Tetsu YAJIMA)†

Department of Information Systems Science, Graduate School of Engineering,
Utsunomiya University

Abstract

Potential scattering problems governed by the time dependent Gross-Pitaevskii equation are investigated numerically for various values of coupling constants. The initial condition is assumed to have the Gaussian type envelope, which differs from the soliton solution. The potential is chosen to be a box or well type. We estimate dependencies of reflectance and transmittance on width of the potential and compare these results with those given by the stationary Schrödinger equation. We attribute the behaviors of these quantities to limitation on width of nonlinear wave packet. The coupling constant and the width of the potential play an important role in distribution of the waves appearing in the final state of the scattering.

1 序論

1995年に希薄中性アルカリ原子気体のボーズ=アインシュタイン凝縮 (BEC) が実験的に実現してから、量子気体の研究は実験・理論の両面で爆発的な進歩を遂げた。凝縮相が現れると、U(1) ゲージ対称性の自発的破れに伴う秩序変数として、“凝縮体の巨視的波動関数”が定義できるようになる。極低温においてほぼすべての原子が凝縮相にある場合には、凝縮体の挙動は場の演算子に対するハイゼンベルグ方程式の平均場近似であるグロス=ピタエフスキー方程式 (TDGPE) でよく記述されることが分かっている。

$$i\phi_t + \nabla\phi + V(\mathbf{x})\phi + g|\phi|^2\phi = 0 \quad (1)$$

TDGPE(1) は実質的には外力ポテンシャル項 $V(\mathbf{x})$ を含んだ非線形シュレディンガー方程式 (NLSE) である。式中において非線形項は原子同士の二体衝突の影響を表しており、結

*E-mail address: fujishima.hironobu@canon.co.jp

†E-mail address: yajimat@is.utsunomiya-u.ac.jp

合定数 g が負なら斥力相互作用、正なら引力相互作用していることに対応する。BEC 系において特筆すべきはこれら外力ポテンシャル項 $V(x)$ や結合定数 g が自由に調整できる実験手段が存在することである。レーザー技術によってさまざまな形状の原子トラップが実現しているし、磁場によるフェッシュバハ共鳴と呼ばれる現象を利用すると、結合定数 g をその符号も含めて自由に制御することができる。また、凝縮体の挙動は光学的手段によりリアルタイムでその変化を観測することができる。このように BEC 系は非線形科学の立場から見て理想的な実験場の一角を占めている。このあたりの事情は参考文献 [1][2] が詳しい。

BEC の実現により、NLSE は新たな適用分野を獲得し再注目されるにいたったわけであるが、その解析において外力ポテンシャル項 $V(x)$ の存在は相当に曲者である。中でも、非周期的な局在ポテンシャルによる散乱問題は実験的にも興味があるが、非常に困難な問題である。先行研究をみると、定常解に関するものはそれなりの数を見出すことができるが [3]、凝縮体の運動に対応する波束ダイナミクスの追跡にまで及んでいる解析的研究はほとんどない。以下、簡単のため議論を一次元系に限ったとしても、系の可積分性は完全に失われており、よく知られた逆散乱法による定式化 [4, 5, 6] は一般には全く機能しない(線形もしくは二次ポテンシャルの場合はある程度解析的な議論が可能である [7, 8])。一方、数値的な先行研究は非常に多く存在するが、初期条件としてソリトン波形を採用したものが多く [9, 10]。この場合、初期位置からポテンシャル相互作用領域に侵入するまでの波束の時間発展の影響を評価することはできない。また、散乱問題の結果には様々な非線形効果が表れることが期待されるが、その結合定数 g 依存性を調べているケース [11] は多くない。

そこで本稿では次元を一次元に限定し、異なる結合定数 g ごとに TDGPE(2)

$$i\phi_t + \phi_{xx} + V(x)\phi + g|\phi|^2\phi = 0 \quad (2)$$

を数値的に解いて局在ポテンシャルによる散乱波束の時間発展を追跡する。ポテンシャル形状は箱型 (3) もしくは井戸型 (4) とする。

$$V_{\text{box}} = -\theta(x) + \theta(x - a) \quad (3)$$

$$V_{\text{well}} = V_0(\theta(x) - \theta(x - a)) \quad (4)$$

ただし、 a はポテンシャル幅でありこれも可変パラメタとする。(4)における V_0 は 10 とした。一方、初期波束はソリトン型とは異なるガウシアン形状 (5) を採用する。

$$\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x+x_0)^2 + i\nu(x+x_0)} \quad (5)$$

波束中心の初期位置 x_0 は 5 と 100 の場合を計算した。波束群速度の半分当たる ν は $\sqrt{1.5}$ である。以下では、局在波束の挙動に興味があるため、速やかに波束が拡散してしまう斥力相互作用の場合 ($g < 0$) は考えないものとする。なお計算スキームは二次のシンプレクティック法を採用した [12]。

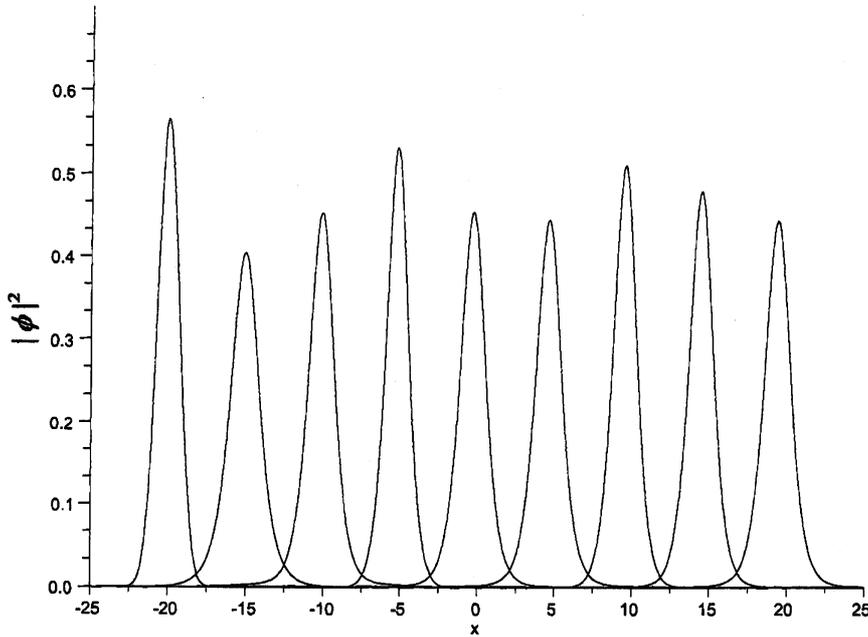


Figure 1: Free propagating breather-like motion of a wave packet starting from the initial wave packet (5) with $x_0 = 20$, $v = \sqrt{1.5}$ and $g = 4$. The nine wave packets show $|\phi|^2$ at $t=0, 2, \dots, 14$ and 16 from the left to the right.

2 結果 1 : 自由発展

まず $V(x) = 0$ で、外力ポテンシャルが存在しない場合を考える。ソリトンを初期条件にとった時は波形が平行移動するだけであるが、ガウシアン初期条件 (5) からスタートすると波束はブリーザー解的な進行波となる。振動周期はほぼ単色のスペクトルをもつ。Fig. 1 の縦軸は凝縮体のプロファイルである $|\phi|^2$ を表している。我々はこの波束の時間発展を波数空間でも計算した。 $\tilde{\phi}$ を

$$\tilde{\phi}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x, t) e^{ikx} dx. \quad (6)$$

で定義し $t = 16$ における $|\tilde{\phi}|^2$ のスナップショットを示したものが Fig. 2 である。波数空間においてもブリーザー的な挙動が見られる。また鋸状の構造が波束表面に成長しているのがわかる。このブリーザー的な挙動は、ガウシアン初期条件が 2-ソリトン束縛状態の解軌道の付近に存在している可能性を示唆している。実際には我々の初期条件は完全な 2-ソリトン束縛状態解とは異なるため、波束は速やかに拡散する微小振幅の輻射を放出している。鋸構造はこの輻射と振動する波束本体の干渉によるものとして解釈することができる。ソリトン本体は原点付近に空間的に局在し、かつ単色の周期を持ち振動するもので

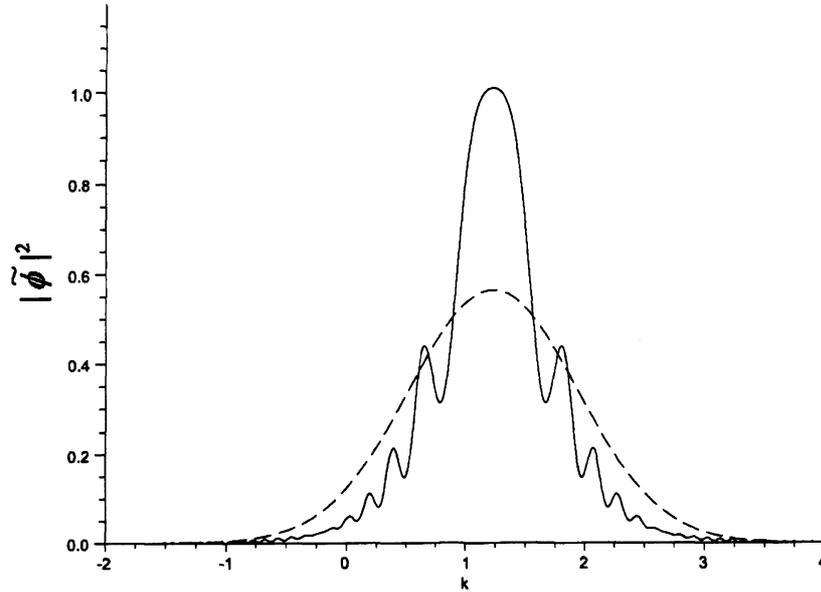


Figure 2: Solid line shows $|\tilde{\phi}|^2$, freely propagating breather-like wave packet observed in wave number space at $t = 16$. The parameters are the same as the ones used in Fig. 1. The dashed line for $t = 0$.

あったので

$$\psi_{\text{sol}}(x, t) = e^{i\omega t} \delta(x)$$

と近似することができる。一方、輻射部分は振幅が非常に小さいことから非線形相互作用が無視できる。つまり線形の Schrödinger 方程式に従う。また群速度0なので任意の実のエンベロープ $\tilde{f}(k)$ を用い、

$$\psi_{\text{rad}}(x, t) = \int \tilde{f}(k) e^{-ik^2 t} e^{ikx} dk$$

と表現できるはずである。このとき波数空間での干渉ノルム

$$|\tilde{\psi}_{\text{sol}} + \tilde{\psi}_{\text{rad}}|^2$$

を考える。明らかに $\tilde{\psi}_{\text{sol}}(k, t) = e^{i\omega t}$ 、 $\tilde{\psi}_{\text{rad}}(k, t) = \tilde{f}(k) e^{-ik^2 t}$ であるので、

$$|\tilde{\psi}_{\text{sol}} + \tilde{\psi}_{\text{rad}}|^2 = |e^{i\omega t} + \tilde{f}(k) e^{-ik^2 t}|^2 = 1 + |\tilde{f}(k)|^2 + 2\text{Re}(\tilde{f}(k) e^{i(\omega - k^2)t})$$

$\tilde{f}(k)$ は実であったから、

$$|\tilde{\psi}_{\text{sol}} + \tilde{\psi}_{\text{rad}}|^2 = 1 + f^2(k) + 2f(k) \cos(\omega - k^2)t$$

これを k, t の関数としてみたとき、 k が大きいほど振動の周期が短くなっていくこと、また原点からエンベロープ内で振動が送り出されるような挙動をすることがわかる。実際

には (1) に従う孤立波は輻射を放出し尽くしたのちに完全なソリトンになることが知られている [13]。よってこのブリーザー解的挙動は有限の寿命をもつ過渡的な現象だと考えられる。

3 結果 2 : 箱型ポテンシャル

この節では (3) で表される箱型ポテンシャルを用いた時の散乱問題における非線形効果について考える。 $g = 0$ における定常問題に関しては量子力学の初歩的な例題で、

$$R_s = \left[1 + \frac{4v^2(v^2 - 1)}{\sin^2(a\sqrt{v^2 - 1})} \right]^{-1} \quad (7)$$

のように解析的な反射率が得られる。今回はこれと比較すべき量として

$$R_{\text{box}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^0 |\phi|^2 dx \quad (8)$$

で定義された反射率を用いる。 R_{box} の g と a 依存性を Fig. 3 と Fig. 4 に示す。前者が $x_0 = 5$ のケース、後者が $x_0 = 100$ のケースである。図中実線で描かれているのが (7) に対応する解であり、 a の増加に伴って周期的に完全透過が起きている。これは一種の共鳴散乱である。

これに対して、TDGPE(1) の数値解から計算される R_{box} は大きく様子が異なっている。まず $g > 2$ に対する R_{box} の最大値は非線形効果によって抑制されている。一方で $g = 2$ 程度の弱い非線形領域では反射率の促進が起こっている点も興味深い。そして、(1) 以外のいずれの場合も完全透過は起こらず、 a の増加と共に反射率が一定の値に近づいてゆく様子が観察される。つまり、非線形項による波束拡散の抑制によって、平面波解から大きく状況が変わり、共鳴構造が消失している。さらに、 $x_0 = 100$ のケースでは $g = 2$ の場合に周期的な共鳴構造の復活が起こっている。これは $g = 2$ 程度の弱い自己収束作用では波束拡散を引きとめることができず、ポテンシャル相互作用領域まで伝搬する間に波束が拡散し、平面波的状况に近づいた結果だと考えられる。

4 結果 3 : 井戸型ポテンシャル

この節では (4) で表される井戸型ポテンシャルの場合を取り扱う。定常シュレディンガー方程式から計算される透過率は

$$T_s = \left[1 + \frac{100 \sin^2(a\sqrt{v^2 + 10})}{4v^2(v^2 + 10)} \right]^{-1} \quad (9)$$

である。 $\sin(a\sqrt{v^2 + 10}) = 0$ のとき、完全透過が実現する。しかし、非線形波束のダイナミクスを考える際には、反射率・透過率などの定義により注意深い配慮が必要である。というのは波束のうち一部が引力ポテンシャルに捕捉されて動けなくなってしまう現象が観測されるからである。たとえば Fig. 5 と Fig. 6 はそのような捕捉された波束の例であ

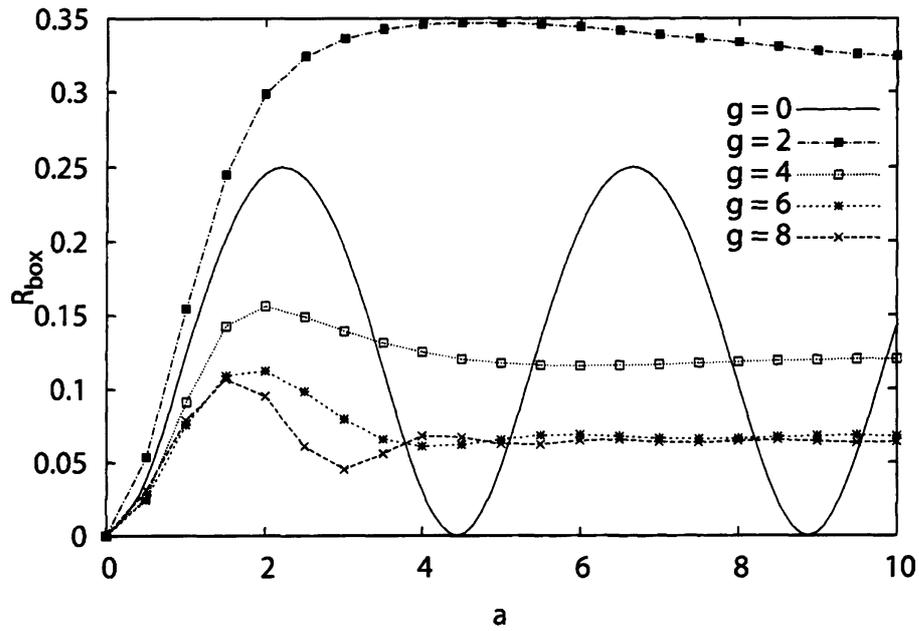


Figure 3: Reflectance R_{box} from the box type potential (3) for various values of g . The initial condition is the Gaussian type wave packet (5) with $x_0 = 5$ and $v = \sqrt{1.5}$ except for $g = 0$. The curve for $g = 0$ corresponds to linear case given by eq. (7).

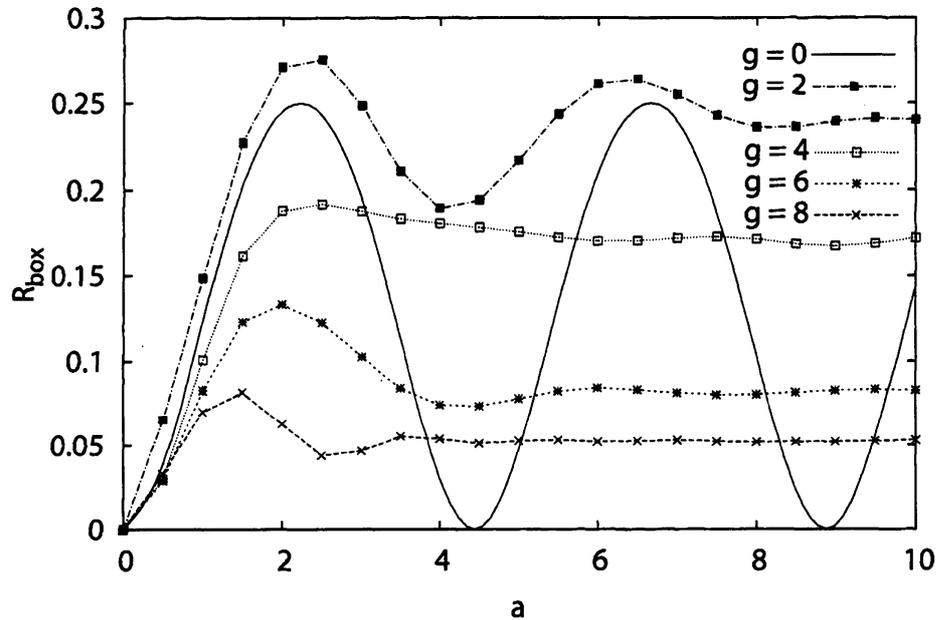


Figure 4: Reflectance R_{box} from the box type potential (3) for various values of g . The initial condition is the Gaussian type wave packet (5) with $x_0 = 100$ and $v = \sqrt{1.5}$ except for $g = 0$. The curve for $g = 0$ corresponds to linear case given by eq. (7).

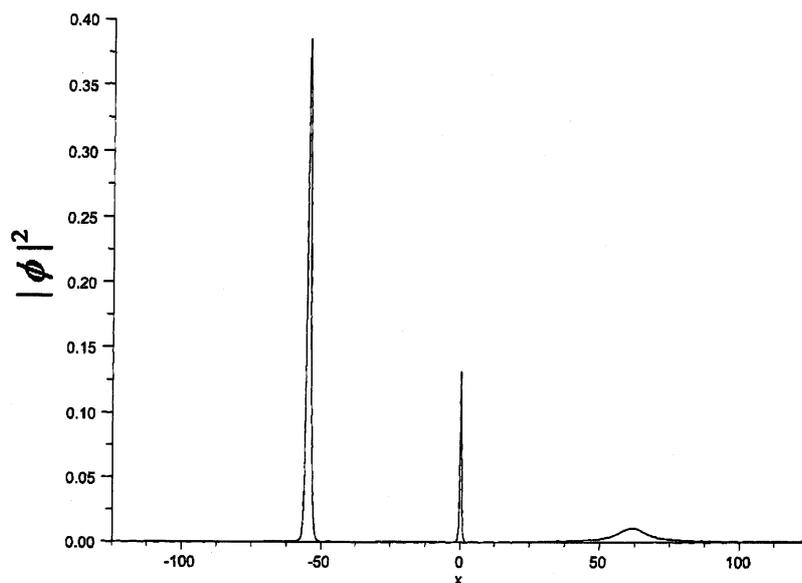


Figure 5: Typical wave shape including the trapped portion by attractive well type potential (4) with $a = 0.5$. The wave packet located near the origin is the trapped portion. The initial condition is the Gaussian type wave packet (5) with $x_0 = 5$, $v = \sqrt{1.5}$ and $g = 8$. This figure shows the snapshot taken at $t = 30$.

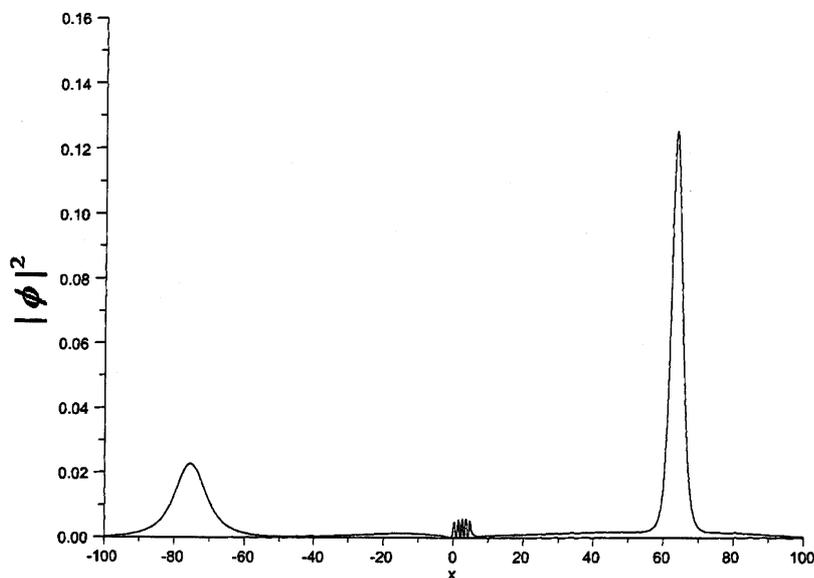


Figure 6: Typical wave shape including the trapped portion by attractive well type potential (4) with $a = 5$. The trapped portion forms standing wave like structure in the potential well. The initial condition is the Gaussian type wave packet (5) with $x_0 = 5$, $v = \sqrt{1.5}$ and $g = 4$. This figure shows the snapshot taken at $t = 30$.

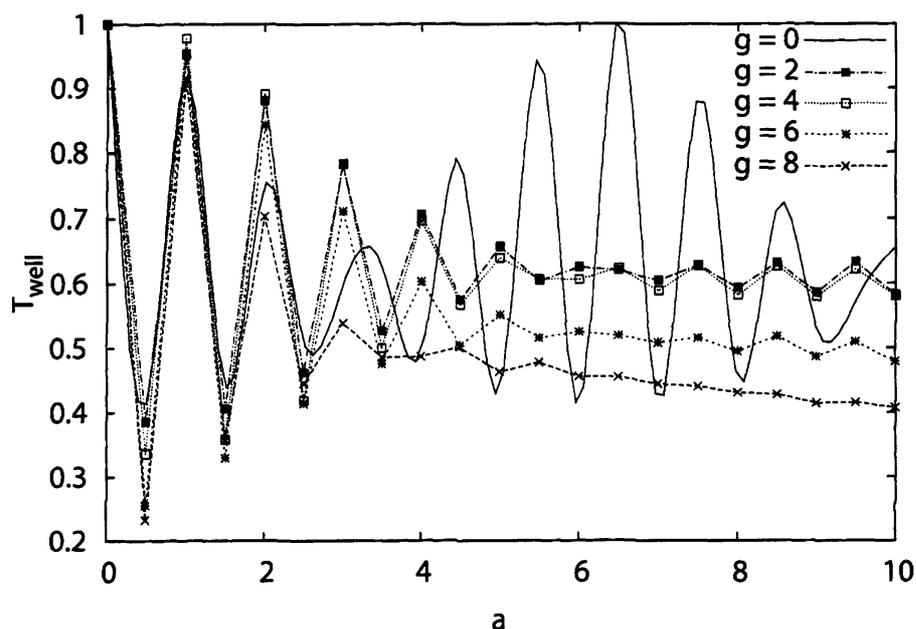


Figure 7: Transmittance T_{well} over the well type potential (4) for various values of g . The initial condition is the Gaussian type wave packet (5) with $x_0 = 5$ and $v = \sqrt{1.5}$. The curve for $g = 0$ corresponds to linear case given by eq. (9).

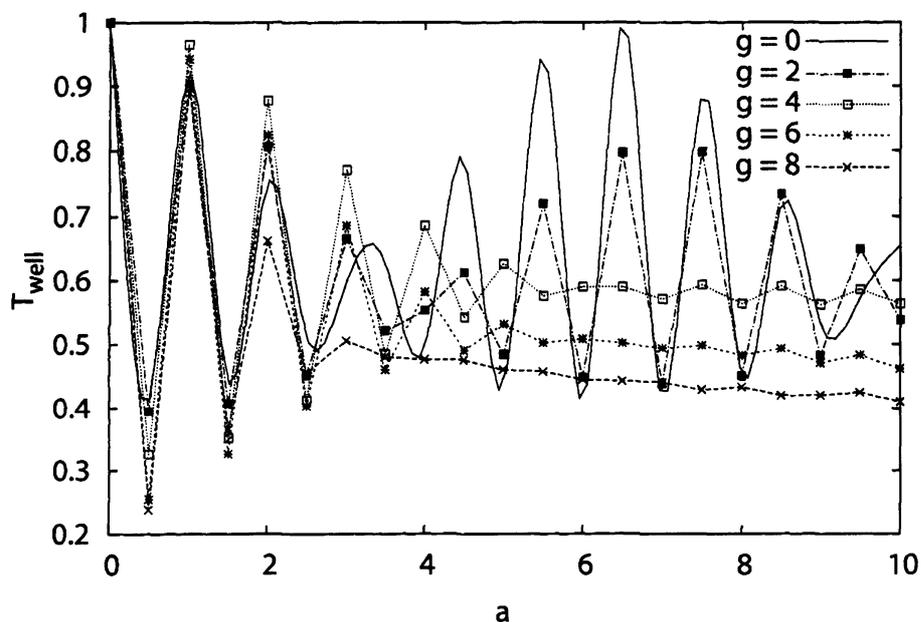


Figure 8: Transmittance T_{well} over the well type potential (4) for various values of g . The initial condition is the Gaussian type wave packet (5) with $x_0 = 100$ and $v = \sqrt{1.5}$. The curve for $g = 0$ corresponds to linear case given by eq. (9).

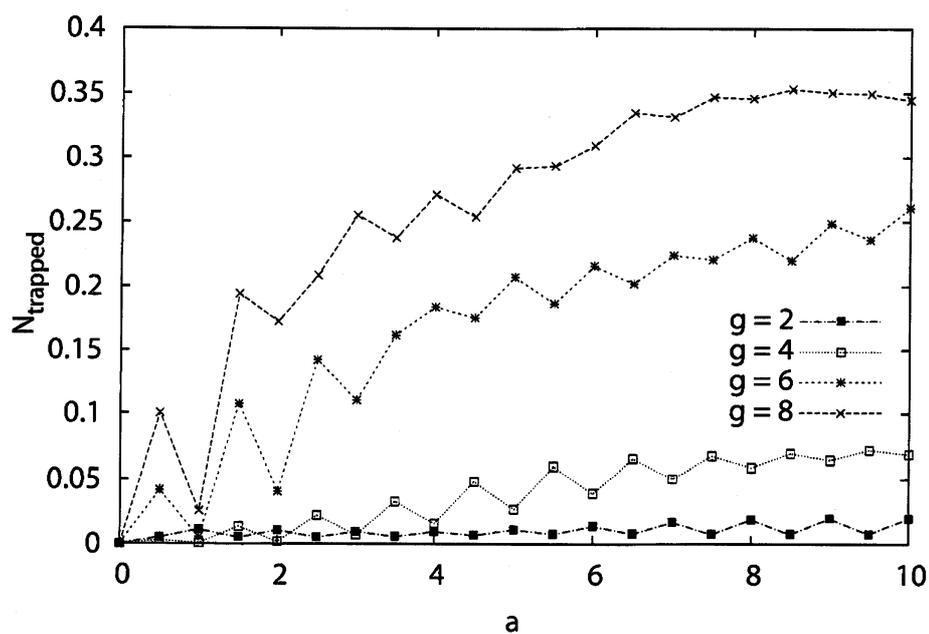


Figure 9: Trapped portion N_{trapped} by the well type potential (4) for various values of g . The initial condition is the Gaussian type wave packet (5) with $x_0 = 5$ and $v = \sqrt{1.5}$.

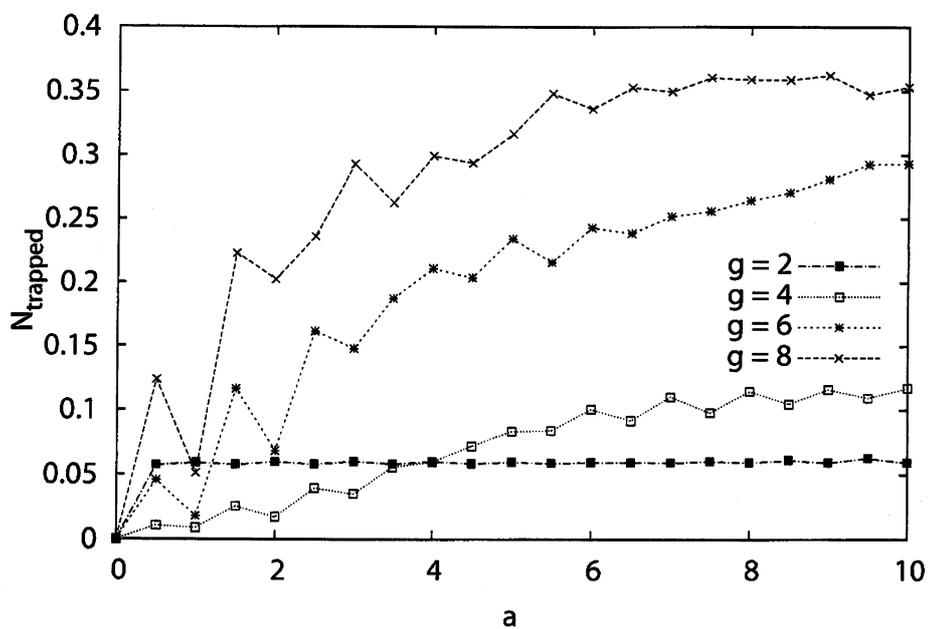


Figure 10: Trapped portion N_{trapped} by the well type potential (4) for various values of g . The initial condition is the Gaussian type wave packet (5) with $x_0 = 100$ and $v = \sqrt{1.5}$.

る。Fig.6では定常波様の構造を観察できるほか、これら捕捉された波束はポテンシャル領域付近で前後に振動する。さらに、これらの捕捉状態は一種の中間状態と思われ、左方に向かって緩やかに輻射を放出し続ける。したがって、(8)で定義された反射率は決して収束しない。そこで本節においては(8)の代わりに

$$T_{\text{well}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{a+30}^{\infty} |\phi|^2 dx \quad (10)$$

で定義される透過率 T_{well} を評価指標として用いることにする。積分領域に現れる 30 という数字は波束の前後振動による透過率 T_{well} の変動を避けるためのマージンである。

T_{well} の g と a 依存性を Fig. 7 と Fig. 8 に示す。前者が $x_0 = 5$ のケース、後者が $x_0 = 100$ のケースである。図中実線で描かれているのが(9)に対応する解である。 T_s も a の増加に伴って周期的に共鳴散乱を経験し、完全透過が実現する。本論の非線形波束の場合であるが、主だった特徴は箱型ポテンシャルの時の傾向に似ている。第一に、 T_{well} の最大値は $g = 2$ で促進されているのを例外として抑制されている。第二に、 g がノンゼロになると完全透過が起こらなくなることも同様である。ここでも共鳴構造の消失が起きており、長い距離を伝搬した場合の $g = 2$ のケースにおける共鳴構造の復活も箱型ポテンシャルの時と同様に解釈できる。

最後に、 $t = 80$ におけるトラップされる凝縮体の割合を調べた。これは前述のようにトラップされた波束が左方に輻射を吐き出しているため、徐々に減少する値であり、収束値ではないことに注意されたい。トラップ率の定義は以下のとおりである。

$$N_{\text{trapped}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-30}^{a+30} |\phi|^2 dx \quad (11)$$

Fig. 9 と Fig. 10 がその結果であり、 N_{trapped} の g と a 依存性を表している。例外はあるものの、基本的には g と a の増加と共にトラップされる量は増加する。

5 議論

本稿で検討した、非線形波束のダイナミクスの研究において顕著な事実として、透過率や反射率などが初期波束の速度 v だけではなく、出発位置 x_0 に大きく依存するということがあげられる。これは第二節で議論したように、非線形波束のフーリエスペクトルが伝搬中に大きく変動することを考えると容易に理解できる。散乱問題にとってポテンシャル相互作用時の波数構成は極めて重要なパラメタであるが、その波数構成が x_0 に依存して大きく変わってくるのである。一方線形の場合には高調波励起や波数混合は一切起こらず初期波束のフーリエスペクトルは自由伝搬中に変化しないので x_0 は重要ではない。本稿では x_0 の値を 5 および 100 をもって初期波束の近接配置と遠方配置を代表させた。

次に第四節において我々は自己収束性波束の引力ポテンシャルによる捕捉を示した。この現象は純然たる非線形現象である。もし $g = 0$ の線形な場合であったとすると、

$$|\phi(0)\rangle = \int c_\lambda |E_\lambda\rangle d\lambda \Rightarrow |\phi(t)\rangle = \int c_\lambda e^{-iE_\lambda t} |E_\lambda\rangle d\lambda \quad (12)$$

で明らかかなようように散乱状態固有関数と束縛状態固有関数同士の混合は決して起こらない。ただし、 λ は各固有関数をラベルする変数である。

このトラップ現象は“動的束縛状態”と考えられる。というのは動的に波束の一部がちぎれて引力ポテンシャルに捕捉され、かつポテンシャル領域でダイナミクスを示すからである。このとき、ポテンシャル領域におけるエネルギー汎関数を計算すると興味深い。今、運動エネルギー K を

$$K = \int_0^a |\phi_x|^2 dx, \quad (13)$$

で、自己相互作用エネルギー I を

$$I = -\frac{1}{2}g \int_0^a |\phi|^4 dx. \quad (14)$$

で、ポテンシャルエネルギー V を

$$V = -\int_0^a V(x) |\phi|^2 dx \quad (15)$$

で定義する。積分領域はいずれもポテンシャル存在領域に限定されていることに注意されたい。このとき非線形性が強くなると局所的に

$$K + I + V < 0 \quad (16)$$

となる。このエネルギーが負となることから“動的束縛状態”との呼称はあながち不当なものではないであろう。

最後に、ポテンシャル散乱において反射率・透過率ともに g と a が大きくなると a に依存しない一定値に近づき、共鳴構造が消失した事実について考察する。これは自己収束性波束は狭い範囲に局在しているため、初期位置からより遠方のポテンシャル端を感じることができず、反射波と進行波が干渉して共鳴がおこらないためであると解釈できる。すなわち a が大きくなると、波束から見た有効ポテンシャルは

$$V_{\text{box-eff}} = -\theta(x). \quad (17)$$

のような階段ポテンシャルに見えるのであろうと推察される。

6 Summary

In this paper, we have numerically studied free propagation of wave packets governed by the TDGPE for various values of coupling constants g . The initial condition is taken to be the Gaussian form, which is different from the soliton solution. For the strongly self-interacting wave packets, diffusion in real space is suppressed and they exhibited breather-like behaviors. In wave number space, the breathing motion is also observed and a notched structure grows on the surface of the wave packet.

We have also numerically investigated the potential scattering problems under the same developing equation and initial conditions. The potential forms are chosen to be the box or the well type. We have obtained the reflectance R_{box} and the transmittance T_{well} for the different values of the coupling g and the width of the potential a , and we compared

them with the predictions by stationary Schrödinger equations. The role of nonlinearity is rather complicated, i.e., it sometimes enhances R_{box} or T_{well} but sometimes the opposite. However, there is a tendency that large g decreases both R_{box} and T_{well} . For larger values of g and a , R_{box} and T_{well} approach constant values and do not depend on a .

We have also observed the dynamically trapped portion of the wave packet. We estimated the amount of it N_{trapped} changing g and a and found that N_{trapped} is an increasing function of g and a except for small g and a region. We interpreted these phenomena by squeezing of nonlinear wave packet's width. Whether this trapping effect is a perpetual or just transitional one is not obvious and would be subject of future works.

Finally, we make small remarks on the possibility of real experiments. The control of external environments is relatively easy in the BEC systems where we can confine condensate particles along quasi rectilinear line by tightening laser beam trap. In addition, we can freely change the coupling constants by application of the Feshbach resonance technique[14]. Soliton-like pulses of BEC have already been created[15]. If controllable local potential are realized, the possibility to observe and confirm our results by real experiment is promising.

7 Acknowledgment

著者はその価値あるご助言と励ましをいただいたことに関して東京理科大学の和達三樹教授に感謝します。また、第一著者は温かいアドバイスを受けたことに関して早稲田大学の山中由也教授、大場一郎名誉教授に感謝します。また、素晴らしい作業場所を提供していただいたことに関して宇都宮大学に謝意を表します。

参考文献

- [1] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii and S. Stringari: Rev. Mod. Phys. **71** (1999) 463.
- [2] L.P. Pitaevskii and S. Stringari: *Bose-Einstein Condensation* (Oxford University Press, Oxford, 2003).
- [3] T. Hyouguchi, S. Adachi and M. Ueda: Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 170404.
- [4] C.S. Gardiner, J.M. Greene, M.D. Kruskal and R.M. Miura: Phys. Rev. Lett. **19** (1967) 1095.
- [5] V.E. Zakharov and A.B. Shabat: Sov.Phys. JETP **34** (1972) 62.
- [6] J. Satsuma and N. Yajima: Prog. Theor. Phys. Suppl. **55** (1974) 284.
- [7] H.H. Chen and C.S. Liu: Phys. Rev. Lett. **37** (1976) 693.

- [8] R. Balakrishnan: Phys. Rev. A **32** (1985) 1145.
- [9] H. Frauenkron and P. Grassberger: Phys. Rev. E **53** (1996) 2823.
- [10] H. Sakaguchi and M. Tamura: J. Phys. Soc. Jpn **73** (2004) 504.
- [11] L. Salasnich, A. Parola and L. Reatto: Phys. Rev. A **64** (2001) 023601.
- [12] N. Sasa and H. Yoshida: Transactions of the Japan Society for Industrial and Applied Mathematics **10** (2000) 119 [in Japanese].
- [13] M.J. Ablowitz and H. Segur: *Solitons and the Inverse Scattering Transform* (SIAM, Philadelphia, 1981).
- [14] Ph. Courteille, R.S. Freeland, D.J. Heinzen, F.A. van Abeelen and B.J. Verhaar: Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 69.
- [15] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L. D. Carr, Y. Castin, C. Salomon: Science **296** (2002) 1290.