

周期変動するポテンシャルにおける散乱問題

九工大情報工 高橋 公也、立命館大理工 池田 研介

量子カオスの研究では、古典カオスが量子現象へどのように反映されるかを半古典論を用いて解釈する事が重要である。トンネル現象は純粋な量子効果であるが、古くから知られているように古典力学を複素領域まで拡張すると半古典論を用いた解釈が可能である。近年、非可積分系のトンネル効果に対する古典カオスの影響について複素半古典論を用いた研究が行われはじめた。

我々の研究では特に散乱問題に注目した。そのような例題として、原子分子の散乱問題があげられる。原子分子の多くは非線形力学の立場からみれば非可積分系であり、そこに現れるトンネル現象はおそらくカオス的なトンネル現象である。したがって、原子分子におけるカオストンネル現象を詳細に研究する場合には複素半古典論を用いた解釈が有効であると考えられる。この報告では、その第一歩として、複素半古典論の計算に必要な定式化を行い、簡単なモデルを用いて複素半古典論の適用可能性と複素領域に拡張したときに起きる特有の問題点について議論する。

原子分子の散乱問題はチャンネル座標を持つ多自由度散乱問題である。しかし、本質的な問題を議論する場合には系は簡単な方がよい。そこで、チャンネル座標を反応座標系に対する周期外力に読み替えると、一自由度の周期変動するポテンシャルを持つ散乱問題に帰着できる。ハミルトニアンを書けば以下のようになる。

$$H(Q, P, \omega t) = \frac{1}{2M} P^2 + V(Q, \omega t) \quad (V(Q, \omega(t+T)) = V(Q, \omega t), \lim_{|Q| \rightarrow \infty} V(Q, \omega t) \rightarrow 0)$$

ポテンシャルは無限遠方でゼロになるので、入射波を運動量一定の平面波に設定できる。しかし、ポテンシャルが周期変動するので散乱領域を通過した後の波動関数の確率振幅は外力の周期に合わせて周期的に変動し定常状態に達することはない。このような状態は準定常状態と呼ばれる。波動行列及びS行列は自励系の定常散乱問題では定義されているが、我々が扱っているような非自励系の準定常状態では定義されていない。そこで、準定常散乱問題にあわせて、波動行列及びS行列を定義し直す必要がある。波動行列を例に取り簡単に説明しよう。時間 t を $\theta = \omega t$ と置く事により、一自由度非自励系は二自由度の自励系 $H_{tot} = H(Q, P, \omega t) + \omega I$ (θ, I : チャンネルの角変数作用変数) に書き直せる。したがって、逆に、 (Q, θ) 表示で見た二自由度波動行列のチャンネル角変数 θ を時間に読み替えれば一自由度非自励系の波動行列が求まる。そのようにして定義された波動行列 Ω^+ の具体的な形は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \langle Q_2, t_2 | \Omega^+ | P_1(E_1) \rangle = & \lim_{|Q_1| \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{|P_1|}{2\pi\hbar M}} \int_0^\infty ds \\ & \langle Q_2 | T \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^s ds' H(Q, P, s' + (t_2 - s))\right\} | Q_1 \rangle \exp\left\{\frac{i}{\hbar} (P_1 Q_1 + E_1 s)\right\} \end{aligned}$$

ここで t_2 は観測時刻であり、 Q_2 は観測点の座標である。 P_1 及び E_1 は入射波の運動量及びエネルギーである。また、右辺の Q_1 は波源の位置を表すが、観測点での波動行列の値には影響しない。波動行列は位相ファクターを除いて準定常状態の波動関数そのものであり、波動行列の絶対値2乗は確率振幅を与える。この波動行列の半古典近似を求めると以下のようになる。

$$\begin{aligned} \langle Q_2, t_2 | \Omega^+ | P(E_1) \rangle \sim & \sqrt{\frac{|P_1|}{2\pi\hbar M}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} P_1 Q_1\right) \left[\frac{M}{P_1} \frac{\partial^2 S_\Omega}{\partial E_1 \partial Q_2} \right]^{1/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S_\Omega(Q_2, Q_1, t_2, E_1)\right\} \\ S_\Omega(Q_2, Q_1, t_2, E_1) \equiv & \int_{Q_1}^{Q_2} P dQ - \int_0^{t_2} ds' H(Q, P, t_2 - s + s') + E_1 s \end{aligned}$$

この半古典近似を実行するためには、初期点 (Q_1, E_1) と到達点 (Q_2, t_2) を固定しなければならない。初期点は無限遠方にあるので入射エネルギー E_1 を固定すると運動量 P_1 も固定される。これらの境界条件を満た

たすように未知パラメータである初期時刻 t_1 を設定する。複素半古典論では観測量は実数に取るが、非観測量は不確定なので複素値を取ることを許す。この場合は、初期時刻 t_1 が不確定量なので複素値を取ると考える。したがって、軌道を求める積分は、複素時間平面上の積分となる。一般に複素時間平面上には特異点が表れ、解は多価関数となり、積分路の選択が複素半古典論を実行する上で重要な問題となる。以下に示す様な簡単な例題でも、この問題は避けて通れない。

振動する指数関数的なポテンシャル壁による散乱を考えよう。

$$H(Q, P, \omega t) = \frac{1}{2}P^2 + (\alpha + \epsilon(1 + \sin \omega t)) \exp \left\{ -\frac{Q - Q_0}{\beta} \right\}$$

ここでシステムパラメータを $\alpha = 5.0, \beta = 0.3, Q_0 = 5.0, \epsilon = 1.2, \omega = 2.0$ と設定し、プランク定数を $\hbar = 1600/(2\pi \times 2^{12}) \sim 0.062 \dots$ とおいた。入射波のエネルギーを $E_1 = 4.0$ とした場合を扱う。半古典近似では初期点を $Q_1 = 20$ に取った。この点はポテンシャル壁から十分に遠い漸近領域にある。到達時刻は特に断らない限り、 $t_2 = 0$ とする。到達点 Q_2 が実数値になるような軌道の(複素)初期時刻 t_1 を求める。

図1に境界条件を満たす複素初期時刻の集合 $\{t_1\}$ を示す。これを M -Set と呼ぶ。上下対称に現れる複素ブランチは複素共役解である。図2に到達点 (Q_2, P_2) を実 (Q, P) 面に射影したものを示す (L -Set)。 L -Set の記号 R で示した曲線(実マニホールド)は、 M -Set の実軸の各点から出発した実軌道の到達点である。実解の転回点からでる複素ブランチ a は障壁に潜り込むトンネル解である。 M -Set 上で複素ブランチ a をみると有限の深さのところで特異点に衝突して終わっている。この特異点を初期点とする軌道は、 L -Set 上で $Re(Q_2) \rightarrow -\infty$ の発散解になる。反射波の領域に目を転ずると L -Set 上の実マニホールド R が外力の周期を反映してビートを打っているのが分かる。これは、周期振動する壁と古典軌道間のエネルギーのやり取りが外力の位相に依存するためである。また、実解のビートに重なるように一連の複素ブランチ $\{b_n\}$ がある。対応する M -Set をみるとほぼ外力の周期ごとに複素ブランチが現れ、実解に接しているものと接していないものがある。初期時刻 t_1 を負に遡ると軌道の走る時間 $s = t_2 - t_1$ が長くなり軌道は遠くの反射波領域まで到達する。遠くの反射波領域では、 L -Set 上の実マニホールドの折れ畳みが大きくなり逆S字型の構造を持つようになる。これに対応し複素ブランチは深い複素領域から実面に近づき逆S字構造ができると2つに分裂し実解に接する。複素ブランチ $\{b_n\}$ は、 M -Set 上では有限の長さであるが、 L -Set 上では $(-\infty < Re(Q_2) < +\infty)$ をスキャンする。左側の端点が $Re(Q_2) \rightarrow -\infty$ に、右側の端点が $Re(Q_2) \rightarrow +\infty$ に対応する。

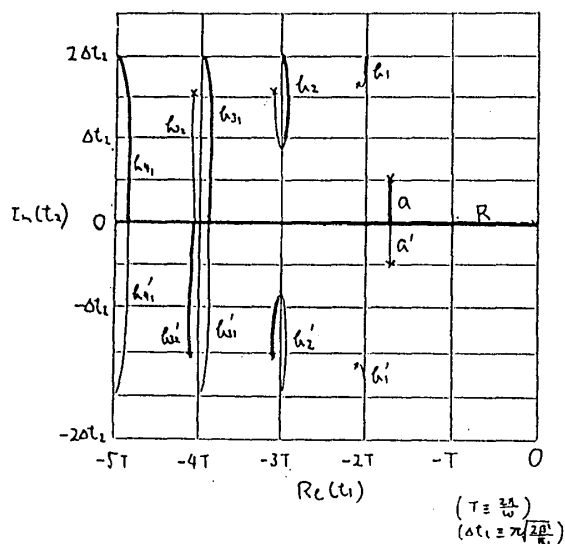


図1

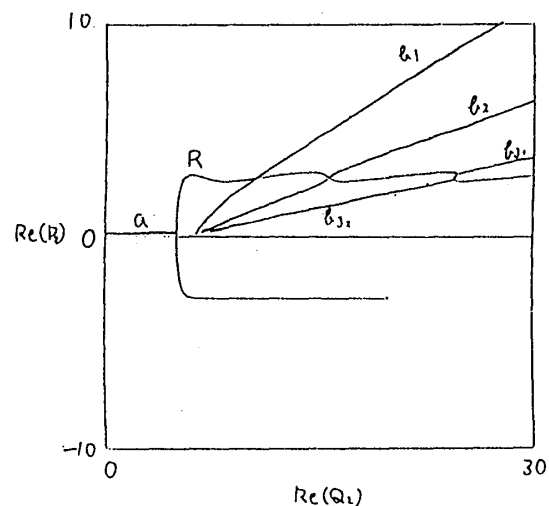


図2

このような、複素ブランチの全てが半古典近似に寄与する分ではない。複素ブランチの多くは発散解を与え物理的に許されない解である。また、1つのブランチの中でも収束解と発散解を与える部分に分れる。これは、Stokes問題と呼ばれ、鞍点近似を行う場合には避けて通れない問題である。2つのブランチの間にある Caustics から延びる Stokes 曲線で囲まれた発散解を与える領域をカットすることにより、収束解のみを取り出す事ができる。図1の各複素ブランチで、太く強調された部分が収束解を与える部分である。

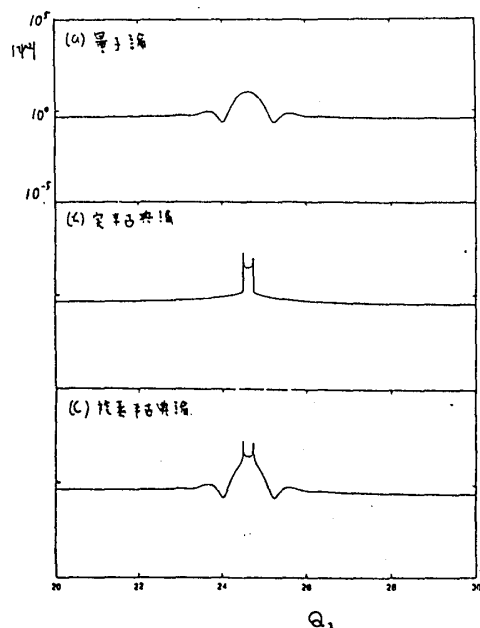


図 3

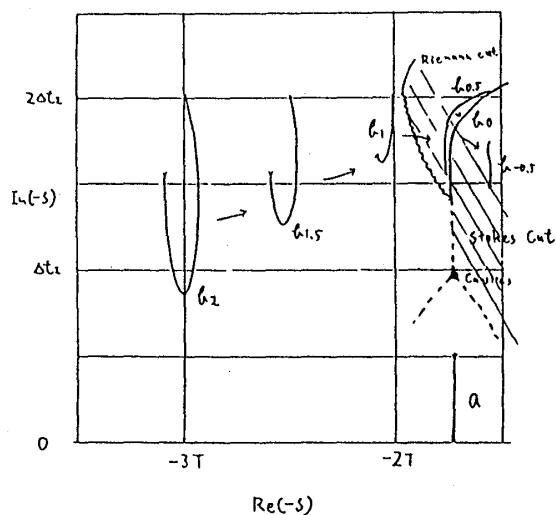


図 4

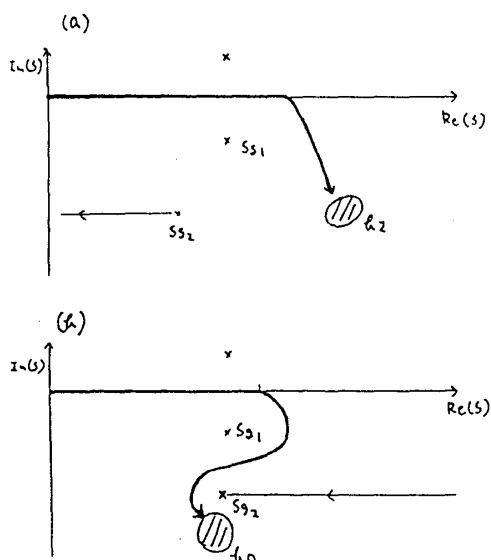


図 5

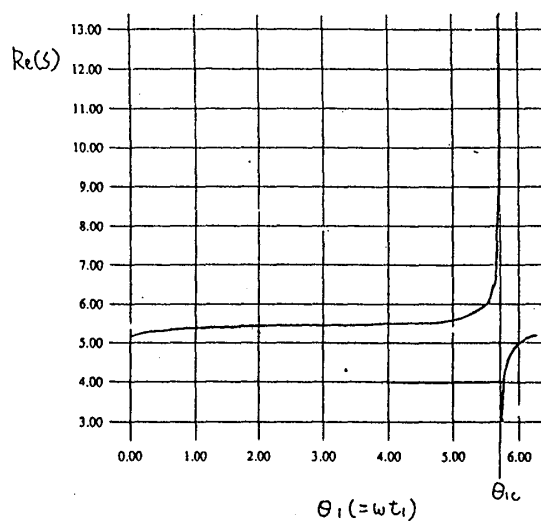


図 6

半古典論で計算された確率振幅を量子論の計算と比較してみよう。紙面の都合もあるので最も重要な反射波領域のビート解にのみ注目する。図3に複素ブランチ b_s が寄与するビート解の確率振幅を示す。図3(a)は、量子力学の計算から求めた入射波成分を取り去った反射波のみの確率振幅である。図3(b)は、実解のみから構成された半古典解で、図3(c)は、複素ブランチも含めた半古典解である。実解のみでは中央の山の部分しか再現できないが、複素解も含めるとテール部分の振動まで良く再現されている。半古典解に現れる2つの“つ”は Caustics による発散である。

複素ブランチ b_n について解析を進めよう。複素ブランチ b_n は、 M -Set 上で右にあるものほど、実解から離れた深い複素領域にある。 b_1 の右側には、複素ブランチは存在しないのであろうか？実は、 b_1 の右側にも複素ブランチは存在するが、以下に述べる様なメカニズムにより2重の意味で隠されている。

到達時刻 t_2 過去の方に半周期づつ進ませながら、 $-s = t_1 - t_2$ 上で複素ブランチ b_n を描いたものを図4に示す。わざわざ $-s$ 空間上で複素ブランチを描いたのはブランチの正味の時間発展が捉え易いからである。 $t_2 = 0$ の場合、 $-s$ 表示は M -Set と一致する。さて、実解から延びる複素ブランチ a は、ほとんど変化しないのに対し、複素ブランチ b_n は時間を遡るにしたがって右側に移動し、ついには複素ブランチ a を追い越してしまう。ところが、複素ブランチ a のほぼ真上にある Caustics から延びる Stokes 曲線により、Caustics の右側の解は全て抹殺されてしまう。このことから、 b_1 より右側の解は確かに存在するがそれらは、Stokes カットにより殺されてしまう半古典論に寄与しない解であることが分る。

さて、上で議論した Caustics の右と左にある解は、複素古典力学の解としてみたときにも全く異なるものである。図5に、図4に示した2つのブランチ b_2, b_0 に到達するのに必要な積分路と特異点の関係が示してある。 $s (= t - t_1)$ 空間上でみた特異点は虚軸方向にほぼ等間隔に並んでいる。 b_2 に到達する軌道は、 $Re(s)$ 軸を挟む2つの特異点の間を一回通過するだけなのに対し、 b_0 に到達する為には、さらに下側にある特異点 $Sg2$ を半時計回りに半周しなければならない。これは、2つのブランチが異なったリーマン面上にあることを意味している。上で述べたように、到達時刻 t_2 を動かすことにより b_2 は b_0 へ連続的に変形される。なぜこのような事が可能なのであろうか？外力がゼロの極限では、 S 空間上の特異点の位置は固定されている。しかし、外力がある場合には、特異点の位置は初期位相 $\theta_1 = \omega t_1$ の関数として大きく変動する。 $Re(s)$ に近い特異点 $Sg1$ はほとんど変化しないが、それよりも遠い特異点の多くは $Re(s)$ に沿って大きくその位置をかえる。図6に外力の初期位相と特異点 $Sg2$ の位置の実部 ($Re(s)$) の関係が示してある。ある特定の位相 θ_{1c} で特異点の位置が $Re(s) \rightarrow \infty$ から $Re(s) \rightarrow -\infty$ に不連続にジャンプしているのが分る。これが、2つのブランチの間のパススイッチを起こすメカニズムになっている。 b_2 に到達するためには初期位相を $\theta_1 > \theta_{1c}$ に取る必要がある。この時、図5(a)に示す様に特異点 $Sg2$ は積分路の左側にある。到達時刻 t_2 を負の方へ動かすと、同じブランチに到達する初期位相も負の方向へ移動し、 $Sg2$ は $\rightarrow -\infty$ へ向かう。そして、 $\theta_1 < \theta_{1c}$ となると、特異点 $Sg2$ は突如 $+\infty$ からやって来るために、注目している積分路は特異点を反時計回りに半周する積分路へとスイッチする。これが、パススイッチが起こるメカニズムである。パススイッチが起きるタイミングは、 b_n が a を追い越すタイミングとほぼ一致する。また、図1の M -Set 上でみた複素ブランチ $\{b_n\}$ の左側端点は特異点 $Sg2$ に対応するが、特異点 $Sg2$ がほぼ周期的な間隔で M -Set 上に現れるのも、複素 s 面上での特異点の不連続ジャンプのためである。

このように、複素半古典論では、たとえ現在寄与しない複素ブランチであっても時間発展により、寄与するブランチへと変化する事がある。ここで見た例題では、そのような $unvisible \rightarrow visible$ transition には、量子系の鞍点近似に関係する特異点である Caustics 近傍の Stokes 問題だけでなく古典力学そのものの特異点とそれが作り出すリーマン面の間のスイッチが深く関わっていた。すなわち、これは2種類の特異点の共同作業である。我々の例題は、特殊なものではなく散乱問題のトンネル効果を扱う場合に広く一般的に起きる現象であると考えられる。