

平成 30 年 6 月 14 日現在

機関番号：34315

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K17563

研究課題名(和文) エネルギー交差に付随するスペクトル・散乱の準古典解析

研究課題名(英文) Semiclassical analysis of spectral and scattering problems associated with energy crossings

研究代表者

渡部 拓也 (WATANABE, Takuya)

立命館大学・理工学部・准教授

研究者番号：80458009

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、「エネルギーが交差する連立シュレディンガー作用素のレゾナンスの虚部」と「エネルギー擬交差間の遷移確率とストークス幾何」に取り組んだ。

前者では、エネルギー交差による摂動が、埋め込まれた固有値(実数値)からレゾナンス(複素数値)を生成することを確かめ、準古典極限におけるその虚部の漸近挙動について精緻な結果を得ることに成功した。

一方、後者では、ストークス幾何を特徴付ける変わり点が合流する場合を考察し、複素WKB解析だけでは立ち行かない部分に対し、準古典超局所解析を援用した。合流パラメータと準古典パラメータの双方を同時に操作する点に多くの時間を費やしたが、最終年度に成功を収めた。

研究成果の概要(英文)：In this project, we have studied the two topics: "Width of resonances for 2x2 Schrodinger operator with energy-level crossings" and "Transition probability for avoided crossings and Stokes geometry".

In the former project, we confirmed that energy-level crossing generates (complex-valued) resonances from (real-valued) embedded eigenvalues and moreover we obtained the precise semi-classical asymptotic expansion of the imaginary part of the resonances.

In the latter, we considered the confluence of turning points, which characterize Stokes geometries. We applied a semi-classical microlocal analysis to this problem, where a complex WKB analysis does not work well. We had spent much time to the control problem of two parameters (confluence and semi-classical), but we succeeded it in the final year.

研究分野：解析学基礎

キーワード：レゾナンス エネルギー交差 準古典解析 シュレディンガー方程式 WKB解 Effective Hamiltonian
複素WKB解析

1. 研究開始当初の背景

本研究課題の背景にあるのは、量子力学の基礎方程式であるシュレディンガー方程式である。シュレディンガー方程式には、プランク定数とよばれる物理定数 \hbar が含まれるが、本研究課題名にある準古典解析では、この \hbar を小さなパラメータ h としてみなし、シュレディンガー方程式の解やシュレディンガー作用素のスペクトルなどの $h \rightarrow 0$ における漸近挙動を調べる。このような解析を準古典解析と呼ぶのは、 $h \rightarrow 0$ において、シュレディンガー方程式の記述する量子力学的描像が対応する古典力学的描像へ回帰するというボーアの対応原理に由来する。したがって、準古典解析において、解やスペクトルの h に関する漸近展開の初項や第二項に、対応する古典力学の量を見出すことが、ボーアの対応原理の数学的解釈であり、本研究課題の背景である。

本研究課題で取り組んだ対象は、(1) レゾナンスと(2) 断熱遷移確率である。以下それぞれの背景を述べる。

(1) レゾナンス(共鳴)とは、シュレディンガー作用素のレゾルベントの極である。遠方で減衰する実数値ポテンシャルを考察する場合、正の実軸は本質的スペクトルであるが、適当な定義域の下、レゾルベントは上半平面から下半平面に有型に接続され、その際に現れる極をレゾナンスと呼ぶ。この複素平面上の点スペクトルであるレゾナンスは、散乱行列の極、あるいは複素領域に傾けた実軸上の固有値として得られる。物理学的に、レゾナンスの虚部は量子的粒子の生存時間の逆数に比例すると考えられており、そのため実軸に近いレゾナンスほど重要となる。一方、ある正のスペクトルパラメータをひとつ固定する際、その複素近傍にレゾナンスが存在するならば、対応する相空間上に捕捉された軌道が存在することが知られている。したがって数学的には、レゾナンスの h に関する漸近挙動を考察する際、虚部の h に関する減衰オーダーと相空間上の捕捉された軌道がどのように関係しているのか、またそれが作用積分など相空間上の幾何学的量でどのように書けるかが、非常に興味深い問題となる。

(2) 一方、本研究課題で考察する遷移確率とは、正規化された Jost 解の基底変換行列(散乱行列)の成分の絶対値の二乗である。Jost 解とは、散乱問題で扱われる遠方で適当な漸近条件をみたす解であり、時間 t において、それぞれが対応するエネルギーの固有状態を表す。2つのエネルギーの時間発展がギャップをもっている場合において、一方のエネルギーに対応する固有状態が時間発展する際、他方のエネルギーに対応する固有状態へ移り変わることは古典力学的にあり得な

い。しかしながら、量子力学的には、そのような移り変わり(遷移)が量子効果として起こり得る。時間依存シュレディンガー方程式の場合、ボーアの対応原理は断熱定理と読み換えられ、準古典パラメータ h は断熱パラメータと呼ばれ、その解析は準古典解析が適用できるものである。一般に、量子的粒子のエネルギーの時間発展が互いに交差するとき、その交差の相互作用から2粒子系全体のエネルギーは互いに交差を回避する状況が生じる。これは擬交差と呼ばれ、エネルギーがギャップをもつ典型的な例であり、その遷移確率は Landau-Zener の公式として知られている。これに端を発して、エネルギーの交差はもちろんハミルトニアンを一般化した際の遷移確率の断熱極限は、物理学的にも数学的にも興味深い対象である。

2. 研究の目的

(1) 2元連立の1次元シュレディンガー方程式系を考察する。ここで相互作用は1階の微分作用素とする。ポテンシャルエネルギーの一方は井戸型であり、他方は減衰するものとする。2つのエネルギーは交差する。相空間において、このエネルギー交差点は、井戸型が生成する周期軌道と他方が生成する散逸軌道が接する点であり、不動点のような弱い捕捉が存在する。本研究の目的は、この弱い捕捉の程度を、レゾナンスの虚部に現れる h に関する多項式オーダーとして取り出すことである。

2つのポテンシャルエネルギーの交差点は、相空間上で古典軌道が接する点であるが、退化した交差点での特異性の伝播は、超局所解析の未解決問題の一つであり、既存の一般論が使えない。さらに完全 WKB 解析の観点では、青木-河合-竹井で議論されているような高階特有の仮想変わり点から出るストークス曲線の問題が背景にあり、本研究課題はこれらに新たな知見を与えることが期待される。

(2) 時間依存シュレディンガー方程式をモデルとした2元連立1階常微分方程式系を考察する。2x2行列値で与えられたハミルトニアンは、対角成分に交差する2つの時間発展エネルギー、非対角成分に断熱パラメータとは別の小さなパラメータで与えられた相互作用をもつ。完全 WKB 法を適用する際、変わり点と呼ばれる WKB 解の特異点における解析が問題となる。変わり点は、エネルギーの複素平面上の交差点でもあり、相互作用パラメータに依存して合流する。自身の先行研究により、変わり点を通る複素平面上のストークス曲線(アイコナル方程式の解の実部の等高線)の幾何学的構造が遷移確率の漸近挙動を特徴づけることが明ら

かになった。この課題では、ストークス曲線の幾何学的構造が同じであっても、相互作用パラメータによる変わり点の挙動(合流の仕方)が異なるとき、その差異が断熱遷移確率にどのように現れるかを明らかにする。

Landau-Zener の公式の一般化を目的として、作用素値ハミルトニアンに対する断熱遷移確率の指数減衰評価を得る研究は歴史的にも多く、近年では、Martinez による準古典超局所解析を用いた評価などが挙げられる。その一方で、本研究のように小さなエネルギーギャップ(相互作用)に着目した研究は稀である。事実、 \hbar とは異なるパラメータにより変わり点が合流し高位の変わり点となる場合の詳細な解析は、WKB 解析においても未解決な問題の一つである。

3. 研究の方法

- (1) この研究は、André Martinez 氏(ポロニア大学) と藤家雪朗氏(立命館大学) との共同研究である。この研究は大きく分けて「解の構成」と「量子化条件の導出」の2つが問題となる。

まず初めに、前者である解の大域的な構成とエネルギー交差点での局所解の構成に取り組む。成分ごとに単独方程式の WKB 法に帰着させ、基本解を用いた逐次近似を行う。エネルギー交差点において、 \hbar に関してオーダー $\hbar^{2/3}$ の近傍にスケール変換を施し、方程式を $\hbar^{1/3}$ に関して展開すると、Yafaev の結果のように主要部はエアリーの微分方程式に帰着され局所解の構成が可能となる。

解の構成の後に、量子化条件の導出に取り組む。構成した解の $\hbar^{1/3}$ に関する漸近挙動を調べることで解を大域的に接続し、ポーア-ゾンマーフェルト型の量子化条件を導出する。井戸型から得られる作用積分項だけでなく、相互作用の影響を注意深く拾い、レゾナンスの虚部の漸近挙動を計算する。

- (2) この研究は Maher Zerzeri 氏(パリ 13 大学) との共同研究である。我々の先行研究において、断熱パラメータ \hbar が相互作用パラメータに対して十分速く 0 に近づくとき、断熱遷移確率は指数的に小さく、逆に相互作用パラメータが十分速く 0 に近づくとき、多項式オーダーで小さいことが明らかになった。前者の場合は、完全 WKB 法で詳しく解析できるが、後者は、相互作用パラメータによる変わり点の合流が起こるため、完全 WKB 法は適用できず、準古典超局所解析を援用した擬交差近くの局所解の仲介が必要である。まずこの局所解の構成方法と超局所台に着目した接続公式を整理し直す。

4. 研究成果

- (1) この課題については、当初の計画以上に進展したと認められる。実際、Yafaev の先行研究に基づいた局所解を構成することに成功し、さらに基本解による逐次近似解が $\hbar^{1/3}$ に関する漸近展開をもつことを明らかにした。これにより、量子化条件を詳細に調べ、レゾナンスの虚部の漸近展開について詳細な結果、すなわち虚部の主要部が $\hbar^{5/3}$ のオーダーでかつ、その係数がエアリー関数の積分で具体的に表示されるという結果を得た。この結果は、雑誌論文 という形で掲載されるに至った。

またこの問題の物理モデルは、分子ダイナミクスを記述する多体シュレディンガー方程式について、ポルン-オープンハイマー近似とグルーシン問題に基づく簡約化によって得られる行列値のシュレディンガー作用素の固有値問題である。この簡約化の下では、非対角成分の相互作用項は、ベクトル場で記述されるものが自然な形である。我々は、雑誌論文の結果に基づき、ベクトル場を相互作用にもつ場合についても、レゾナンスの虚部について、より詳細な結果を得ることに成功し、雑誌論文 として、掲載されるに至った。さらには、両結果を量子化条件の立場から整理した結果を、雑誌論文 として発表した。

- (2) この課題については、当初の計画に関して概ね順調に進展したと言えるが、非常に多くの時間を費やした。事実、この課題について困難だった点は、「2 パラメータの問題であり、この場合の「超局所的な標準形は何か?」どのようなスケールで超局所解を構成し、完全 WKB 解と接続するのか?」という点であった。最終年度において、超局所的な標準形は小さなパラメータとして $\sqrt{2}/\hbar$ をもつ 1 パラメータの方程式系に帰着され、超局所解と完全 WKB 解を $\hbar^{1/2}$ のオーダーの複素円環領域の上で接続することで、この問題を解決することができた。これにより、遷移確率が、 $\sqrt{2}/\hbar \rightarrow 0$ の枠組みの下では、擬交差の回数に依って、主要項が異なり、その主要項が消える状況は、エネルギー交差が生成する相空間上の領域(作用積分)によって記述されることを明示した。本研究期間中の雑誌論文への投稿には至らなかったが、研究当初に目的とした結果が得られたことは十分な大きな成果であると言える。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 3 件)

Setsuro FUJIE, André MARTINEZ and

Takuya WATANABE. Molecular predissociation resonances near an energy-level crossing II: Vector field interaction. *Journal of Differential Equations*. 査読有, Vol. 262, No.12, 2017, pp. 5880-5895

DOI: 10.1016/j.jde.2017.02.017

Setsuro FUJIE, André MARTINEZ and Takuya WATANABE. Quantization condition of resonances at energy-level crossing, *RIMS Kōkyūroku Bessatsu*. 査読有, B61, 2017, pp. 9-21 <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kenkyubu/bessatsu-j.html>

Setsuro FUJIE, André MARTINEZ and Takuya WATANABE. Molecular predissociation resonances near an energy-level crossing I: Elliptic interaction. *Journal of Differential Equations*. 査読有, Vol. 260, No. 5, 2016, pp. 4051-4085

DOI: 10.1016/j.jde.2015.11.015

[学会発表](計7件)

Takuya WATANABE and Maher Zerzeri. Two-level transition probability for several avoided crossings in the non-adiabatic limit. *Workshop on Spectral and Scattering Theory*, 2018.

Setsuro FUJIE, André MARTINEZ and Takuya WATANABE. Molecular predissociation resonances near an energy-level crossing, *Séminaire Equations aux Dérivées Partielles non-linéaires à Paris Nord*, 2017.

Setsuro FUJIE, André MARTINEZ and Takuya WATANABE. Molecular predissociation resonances near an energy-level crossing, *Séminaire de Physique Mathématique à Bordeaux*, 2017.

渡部 拓也, 浦部 治一郎. 空間依存する特性指数をもつフックス型特異初期値問題について. 「第23回超局所解析と古典解析」研究集会, 2016.

藤家 雪朗, André MARTINEZ, 渡部 拓也. Quantization Condition of Resonances at Energy-Level Crossing. 2016年夏の作用素論シンポジウム, 2016.

藤家 雪朗, André MARTINEZ, 渡部 拓也. エネルギー交差が生成するレゾナンスの準古典分布. 「第22回超局所解析と古典解析」研究集会, 2015

藤家 雪朗, André MARTINEZ, 渡部 拓也. Molecular predissociation resonances at an energy-level crossing. 広島複素解析セミナー, 2015.

[その他]

ホームページ等

立命館大学研究者データベース
<http://research-db.ritsumei.ac.jp/Profiles/56/0005547/profile.html>

Himeji Conference on Partial Differential Equations(偏微分方程式姫路研究集会)

<http://www.math.ritsumei.ac.jp/takuwatanabe/CHPDE/CPDEen.html>

Lectures on Semi-Classical Analysis(準古典解析入門講義)

<http://www.math.ritsumei.ac.jp/takuwatanabe/LSCA/LSCA2016.html>

6. 研究組織

(1)研究代表者

渡部 拓也 (WATANABE, Takuya)

立命館大学・理工学部・准教授

研究者番号: 80458009