

令和 2 年 6 月 7 日現在

機関番号：37102

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K17767

研究課題名(和文) 多次元トンネル効果異常増大に関する研究

研究課題名(英文) On the enhancement of tunneling probabilities in multi-dimensional systems

研究代表者

花田 康高 (HANADA, Yasutaka)

九州産業大学・理工学部・助手

研究者番号：50773561

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：多次元系固有のトンネル効果として知られる動的トンネル効果の異常な増大現象に関する研究を行い、以下のことを示した。(1) 時間発展にともない、系の定常状態を近似する特別な初期条件を構築し、その初期条件ならびに時間発展について半古典論の観点から考察した。(2) トンネル確率のパラメーター依存性について多倍長評価を行い、摂動パラメーターおよびプランク定数に対して特異な依存性を示すことを示した。(3) 定常状態に対するトンネル効果について先行研究を再考し、我々の結果が先行研究の想定から逸脱した現象であることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

トンネル効果は物理学のみならず、化学反応、電子工学、量子性が問題となる生命現象などの多岐にわたる分野で生じる。しかしながら、トンネル効果の基礎理論は1次元系のエネルギー障壁トンネル効果のみ想定されている。我々が多次元固有現象である動的トンネル現象の基本的理解を進めたことは、基礎科学においてトンネル効果が顕在化する現象への解明に貢献できるとともに、持続可能な開発を支える、超電導工学や半導体工学などの分野でトンネル効果の制御法といった新しい指導原理の基礎をなすと考えている。

研究成果の概要(英文)：We studied the enhancement of tunneling probability with dynamical tunneling in multi-dimensional systems and obtained the following results: (1) we constructed an initial wave-packet which approximates the eigenstates of the system by the time-evolution and analyzed the initial condition and the time-evolution based on semiclassical methods. (2) We evaluated the tunneling probabilities by using multi-precision arithmetics and found that tunneling probabilities show a singular dependence on the perturbation strength and Planck constant. (3) We revisited the previous studies on dynamical tunneling and found that our results are out of their assumptions.

研究分野：非線形物理

キーワード：量子カオス トンネル効果 半古典論(WKB法) 量子化 ハミルトン力学系 非可積分系 レベルダイナミクス 幾何学的数値積分法

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

1. 研究開始当初の背景

ポテンシャル障壁を有限の確率で透過するトンネル効果は、非古典力学的現象の典型例として前期量子力学の時代から認識されており、原子核の崩壊過程、半導体素子の工学的機能、あるいは、トンネル電子顕微鏡などの多岐に渡る分野で礎となる基本現象である。アンモニアメーザーの発信特性は、典型的な対称二重井戸ポテンシャル間のトンネル振動として言及される。しかしながら、自由度の縮約等によって帰着される次元が1かそれ以上かでは、トンネル効果の舞台が本質的に拡張される事実は認識されていない。対称二重井戸ポテンシャルを例に挙げると、1次元系で、左右の井戸間のトンネル効果が問題となる状況はポテンシャル鞍点以下のエネルギーを持つ量子状態のみである。一方、2次元以上の系では、ポテンシャル鞍点以下のエネルギーを持つ量子状態のみならず、鞍点より高いエネルギーをもつ量子状態あってもトンネル効果の舞台となる。一般に多次元(自由度)系では、エネルギー的に古典運動が制限されていない状況であったとしても、相空間にはKAM(不変)トーラスが有限測度で存在することが一般的で、等エネルギー超曲面をエルゴード的に遷移できる状況は稀である。不変トーラスが規定する古典運動の束縛を、エネルギー障壁による束縛と区別して動的障壁(dynamical barrier)による束縛と呼ばれている。量子波束はエネルギー障壁のみならず、動的障壁をトンネル効果によって透過することが知られている。エネルギー障壁トンネル効果と区別して、動的障壁を透過するトンネル効果は動的トンネル効果(dynamical tunneling)と呼ばれている。

トンネル効果の研究は、量子波束の時間発展に伴うトンネル過程 時間領域のトンネル効果 と、定常状態に対するトンネル過程 エネルギー領域のトンネル効果 に大別される。計算機の性能が発達した1990年代以降、エネルギー障壁トンネル効果と動的トンネル効果との比較が盛んに行われ、動的トンネル効果はエネルギー障壁トンネル効果と比較して異常に大きなトンネル確率を示すことが、数値計算ならびに冷却原子などを用いた実験によって報告されるようになった。時間領域の動的トンネル効果については、WKB解析(半古典論)に基づく量子古典対応が極めて精密な解析が行われ、Julia集合(複素領域におけるカオス運動)がトンネル確率を誘導する現象:カオス的トンネル効果(chaotic tunneling)の機構が見出されている。一方、エネルギー領域のトンネル効果は、量子状態への半古典論に基づく量子化が実現していないため、いくつかの現象論的なシナリオが提案されている状況にとどまっている。

動的トンネル効果による定常状態トンネル確率増大は、chaos-assisted tunneling (CAT) と resonance-assisted tunneling (RAT) の2過程が主要なシナリオとして知られている。両者とも、対称井戸に相当する対称KAMトーラス間の動的トンネル効果を想定している。CATでは、対称KAMトーラス間のトンネル効果を;(I)対称KAM領域をダイレクトに接続するインスタントン経路、(II)KAM領域からカオス領域を接続する別のインスタントン経路、の2経路が存在する事を仮定している。(II)の経路において、カオス運動による波動関数の輸送過程はトンネル効果のように減衰しないため、(I)の経路によるトンネル遷移よりも(II)の経路のトンネル遷移が優位となり、トンネル確率が増大する;という定性的描像を提案した。さらに、多次元系のトンネル確率には特徴的なスパイク(あるいは激しい変動)を典型的に示すが、CATではランダム行列理論に基づく統計的(現象論的)解釈として、カオスが準位共鳴を誘導するという描像を与えた。RATでは、CATで提案された(II)の経路について、KAM領域からカオス運動領域へ至る経路がインスタントンで直接接続されているのではなく、非線形共鳴の仲介によって、インスタントン経路が多段式となり、KAM領域からカオス領域へ至るトンネル確率がさらに増大する;というシナリオを提示した。特にRATは定性的な描像にとどまらず、自由度間の古典運動の振動数比が有理数のトーラスに対する断熱近似を介した永年摂動法と、量子力学的摂動論のハイブリッドアプローチによるトンネル確率の定量的評価法を提示した。

2. 研究の目的

本研究の大目的は多次元(自由度)系の定常状態に対する量子・古典対応を与えることである。1次元自励ハミルトン系は全エネルギーが保存する完全可積分系であり、ポテンシャルに束縛された古典運動は周期関数で記述される。WKBの処方箋に従えば波動関数の大域的構成が可能であり、Bohr-Sommerfeldの量子化条件が周期解と量子状態の対応を与える。トンネル効果は運動量の虚数成分(あるいは虚時間発展) インスタントンとも呼ばれる によって記述される。多次元自励ハミルトン系のうち、完全可積分系の不変トーラスはEinstein-Brillouin-Kellerらによって量子化可能(EBK量子化)であることが示されているが、任意に選んだ多次元ハミルトン系は、保存量欠損のため非可積分系に属する。一般に非可積分系の相空間はカオス運動と準周期運動が混在した混合相空間を形成する。多次元系において、定常状態(大域的波動関数)をWKB法に従って構成するためには、準周期運動とカオス運動をトンネル効果によって接続する複素経路を構成する必要があるものの、方法論を含め成功した事例は報告者の知る限り存在しない。

本研究の小目的は動的トンネル確率の劇的増大に対する半古典的理解が進んでいる時間領域半古典論の観点から、定常状態に対する動的トンネル確率増大の機構を考察し、これまでに提

案されている現象論的理論を再考することである。

3. 研究の方法

動的トンネル効果の研究に利用される面積保存写像系のうち、標準写像、Hénon 写像を主な研究対象として採用した。標準写像は 1 次元対称井戸ポテンシャル系と同質の相空間構造（対称性）を有する為、定常状態トンネル確率は 1 次元対称井戸ポテンシャルと同様に、トンネル効果によって縮退が解けた大きさ、いわゆるトンネル分裂の大きさ評価する。Hénon 写像では、非有界となる古典運動が存在するため、定常状態の減衰率を規定する固有エネルギーの虚部を評価する。以下において、トンネル分裂と減衰率を区別する必要が無い場合はトンネル確率と言及する。

一般にトンネル効果はプランク定数 \hbar に対して指数関数的に小さくなる量であり、また、WKB 解には指数関数的に小さな量と、大きな量が現れる。本研究では多倍長演算ライブラリーが利用可能な、Mathematica (Wolfram 言語)、mpmath (python)、Julia などを使用した、多倍長数値計算、幾何学的数値積分法に基づく常(偏)微分方程式の数値計算、WKB 法や鞍点法による半古典的(漸近)解析を数値計算の方法とした。

1. 無摂動 (BCH) 基底の構成：標準写像や Hénon 写像はシンプレクティック形式を保存する力学系であり、Liouville 演算子 (Poisson 括弧) を用いて系の時間発展は指数演算子の積で与えられる。対応する量子状態の時間発展演算子も古典写像と同様に指数演算子の積で表現される。本研究では量子系の時間発展演算子を有限項の Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) 展開によって得られる有効 (BCH) ハミルトニアン 古典的な意味で BCH 展開は高々漸近展開であり、一般に収束しない を構成し、その固有状態を無摂動 (BCH) 基底として構成する。
2. 時間領域とエネルギー領域の接続：有限項で打ち切った BCH ハミルトニアン（以下、M-次 BCH ハミルトニアンと呼ぶ）は古典的な意味で完全可積分系であり、その固有状態のトンネル過程はインスタントを用いて半古典的に記述される。M-次 BCH ハミルトニアンを無摂動項として扱い、BCH 展開の残差を摂動項として量子力学的摂動論を評価する。摂動項の行列要素が BCH 基底間の量子写像による 1 ステップ時間発展で与えられるため、摂動論を通じて時間領域の問題からエネルギー領域への問題へと接続する。また、BCH 基底を量子写像で多ステップ時間発展を量子論の範疇で考察した。BCH 基底の半古典的サポートを与える複素多様体と、その多ステップ時間発展を古典力学の範疇で考察した。また、量子写像の固有状態の半古典的サポートであると考えられている、KAM トーラスとの対応を解析した。
3. 半古典論の破れと回折効果：BCH 展開の残差項による遷移行列要素は量子写像の 1 ステップ時間発展で与えられ、初期条件を定めれば具体的に三重振動積分の表式で書き下すことができる。近可積分系において、遷移行列要素はトンネル遷移であるため、鞍点法 ここでは定常 Schrödinger 方程式に対する WKB 法と区別しない の主要部（半古典論）に基づけば、遷移行列要素はプランク定数 \hbar に対して指数関数的な減衰を示すことが期待される。しかしながら、標準写像や Hénon 写像の数値計算では非指数関数的依存性を示すことが確認されていた。トンネル確率の非指数関数的依存性の起源を調査する為、鞍点法の主要部のみならず、高次項の影響としての回折効果が主要な寄与を与える状況について整理し、トンネル効果の非指数関数的依存性について考察を行った。
4. M-次 BCH ハミルトニアンの量子・古典対応：量子写像の BCH 展開によって得られる BCH ハミルトニアンは一般にプランク定数 \hbar の形式的べき級数展開となる。古典極限 $\hbar \rightarrow 0$ によって得られる古典 BCH ハミルトニアンは、幾何学的数値積分法の分野で言及される修正（あるいは影の）ハミルトニアンに一致する。修正ハミルトニアンに Weyl 量子化を施しても、元の BCH ハミルトニアンには戻らないため、両者の残差項の影響を評価した。物理的に自然な設定において、波束の伝搬関数における位相関数はプランク定数 \hbar に依存しないが、BCH ハミルトニアンは \hbar のべき級数を有するため、BCH 基底を初期条件とした場合、そのプロパゲーターの初期条件は \hbar に依存する。位相関数が \hbar を内包した場合、遷移行列振幅の \hbar -依存性に与える影響を鞍点法の観点から考察を行った。
5. トンネル確率の特徴づけとパラメーター依存性：BCH 基底を用いてトンネル確率への寄与分解を提案し、その主要寄与を用いてトンネル確率に典型的に生じる階段構造の特徴づけを行った。また、トンネル確率の多倍長評価を行い、超高精度で摂動パラメーター及び \hbar -依存性について調査した。
6. 先行研究に対する再考察：先行研究である、CAT 機構、RAT 機構について検証した。BCH 基底を用いて特定準位との準位共鳴を抑制可能な局所吸収摂動法を開発し、トンネル確率増大現象に対する準位共鳴の影響を調べた。吸収摂動法は摂動基底の構成に任意性があり、かつ非エルミート摂動という問題があった。吸収基底の構成に依存せず、かつエルミートなレベルの準位共鳴抑制法を Pechukas, 湯川らによって導入されたレベルダイナミクスを用いて実現した。Suris によって導入された標準写像型の可積分写像を用いて、RAT が理

想的に成立状況でトンネル効果を調査した．RAT 理論の追試験を行い，RAT 理論で説明可能な現象と不可能な現象について整理した．

4. 研究成果

1. 時間領域とエネルギー領域の接続：BCH ハミルトニアン固有状態を，初期波束として時間発展を考える．低次の BCH 基底を用いた場合，波束の時間発展は量子写像の定常状態をまったく近似することができないものの，高次 BCH 基底 Hénon 写像は 9 次以上，標準写像は 5 次以上を用いることで，数から十数ステップの時間発展によって，定常状態の波動関数を極めてよく近似することを示した．
2. 半古典論の破れと回折効果：BCH 展開の残差項による遷移行列要素の \hbar -依存性について考察した．残差項による遷移行列要素は，量子写像による 1 ステップ時間発展による遷移確率（トンネル確率）で与えられ，初期条件を定めれば具体的に三重振動積分の表式で書き下せるため，積分の主要部（鞍点）は古典軌道であるため半古典近似と呼ばれ，高次項は非古典量であるため回折（量子補正）と呼ばれる．回折現象について現在知られている知見を整理し，残差項による遷移行列要素の \hbar -依存性に現れる非指数関数的依存性について考察した．
3. M-次 BCH ハミルトニアンの量子・古典対応(i)：量子写像の BCH 展開によって得られる有効ハミルトニアンの古典極限を考え，その定常状態のサポートを与える（複素）多様体の構造解析を行った．Hénon 写像，標準写像とともに，再低次の BCH ハミルトニアンが規定する多様体は楕円関数（二重周期関数）で表現されるため，その基本領域内に孤立した特異点しか存在しない．BCH 展開の次数増大とともにともない，実多様体が KAM トーラスを近似するものの，基本領域における特異点と分岐点の個数が，BCH 展開次数 M に対して増大し，また実面に接近する様子が観測された．それに応じて，時間領域半古典論を評価するために必要な初期多様体も多価性を示し，初期条件を半古典的に構成する際の処方箋が自明でない事が分かった．
4. M-次 BCH ハミルトニアンの量子・古典対応(ii)：通常の量子・古典対応を考察する際には古典ハミルトニアンを正準量子化によって対応する量子力学を考えるものの，M-次 BCH ハミルトニアンは \hbar に対する形式的べき級数で与えられる．M-次 BCH ハミルトニアンの古典極限 $\hbar \rightarrow 0$ によって得られる古典ハミルトニアンに対して Weyl 量子化を適用し，再度量子力学を構成した．M-次 BCH ハミルトニアンと，Weyl 量子化によって得られるハミルトニアンの残差を評価し，量子写像による 1 ステップ時間発展に伴う遷移確率（遷移行列要素）の \hbar -依存性に現れる非指数関数的依存性は，M-次 BCH ハミルトニアンの固有状態を初期条件とした場合に現れ，後者のハミルトニアンの場合には半古典論が予言する指数関数的依存性を示すことが分かった．
5. トンネル確率の特徴づけとパラメーター依存性：BCH 基底を用いてトンネル確率への寄与分解を提案し，その主要寄与を用いてトンネル確率に典型的に生じる階段構造の特徴づけを行った．その結果，標準写像，Hénon 写像とともに BCH 展開の残差による遷移行列要素のうち， $\pm m\hbar\omega$ ($m=1,2,\dots$) への遷移によって特徴づけられることが分かった； ω は量子写像の周期に応じた振動数である．さらに，トンネル確率の多倍長評価を行いトンネル確率の摂動パラメーター依存性には Melnikov 積分に相当する特異な依存性を示すことを明らかにした．標準写像において，トンネル分裂の \hbar -依存性には指数関数より遅い依存性を示すことを多倍長数値計算によって明らかにした．
6. 先行研究に対する再考察(i)：BCH 展開の残差による遷移行列には，トンネル効果によってセパラトリックスを横断して遷移する振幅が優位に含まれていることを示した．RAT 理論は作用-角変数を用いた局所理論であることを指摘するとともに，RAT の追試験をおこなった．その結果，RAT ではセパラトリックスを横断する遷移が扱えない為，トンネル確率増大現象を部分的にしか示せないことを明示した．特定準位との結合を抑制可能な局所吸収摂動を構築し，準位共鳴の集積とトンネル確率の増大現象は独立な現象であることを示した．また，吸収摂動法は摂動基底の構成に依存し，非エルミート摂動であるため，Pechukas，湯川らによって導入されたレベルダイナミクスを用いて，エルミートなレベルでの準位共鳴抑制法を構築した．その結果，レベルダイナミクスを用いた準位共鳴抑制法と吸収摂動による準位抑制は定性的に等価な結果を得た．
7. 先行研究に対する再考察(ii)：Suris によって導入された，1:2 の非線形共鳴を有する可積分写像を用いて，RAT 理論が理想的に成立状況で非線形共鳴がトンネル過程に与える影響について考察した．可積分写像系のトンネル効果は本質的にインスタントンによる寄与で説明が可能であり，標準写像，Hénon 写像でみられるようなトンネル確率の異常増大を示さない事を明らかにした．

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yasutaka Hanada, Akira Shudo, Teruaki Okushima, Kensuke S. Ikeda	4. 巻 99
2. 論文標題 Renormalized perturbation approach to instanton-noninstanton transition in nearly integrable tunneling processes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 052201 (p1-p18)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.99.052201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Akira Shudo, Yasutaka Hanada and Kensuke S. Ikeda,	4. 巻 B57
2. 論文標題 Quantum tunneling in nonintegrable systems: beyond the leading order semiclassical description	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 RIMS Kokyuroku Bessatsu	6. 最初と最後の頁 27-38
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 花田康高, 菅野皇太, Sudheesh Srivastava, 首藤啓, 池田研介
2. 発表標題 level dynamics を用いたトンネル分裂の解析 II
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 花田康高
2. 発表標題 非可積分系におけるトンネル効果
3. 学会等名 第六回 非線形現象の捉え方
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 花田康高, 菅野皇太, Sudheesh Srivastava, 首藤啓, 池田研介
2. 発表標題 level dynamics を用いたトンネル分裂の解析 II
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 花田康高, 首藤啓, 池田研介
2. 発表標題 波動関数に基づくトンネル分裂増大現象の解析について
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 花田康高, 首藤啓, 池田研介
2. 発表標題 量子写像のBaker-Campbell-Hausdorff展開について
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 花田康高, 首藤啓, 池田研介
2. 発表標題 可積分写像におけるトンネル異常
3. 学会等名 日本物理学会第72回年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yasutaka Hanada, Normann Mertig, Akira Shudo and Kensuke S. Ikeda
2. 発表標題 Quantum tunneling in the classically chaotic systems
3. 学会等名 Workshop on Chaos and Diffusion in Leaky Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 花田康高, 首藤啓, 池田研介
2. 発表標題 非可積分系のトンネル効果と古典共鳴の役割について
3. 学会等名 日本物理学会 2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Yasutaka Hanada, Akira Shudo and Kensuke S. Ikeda
2. 発表標題 Tunneling in nearly integrable systems with a non-hermitian perturbation
3. 学会等名 PHHQP16: Progress in Quantum Physics with Non-Hermitian Operators (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

1. オープンソース: https://github.com/hanada_yasutaka 2. ホームページ: http://yasutaka_hanada.appspot.com/ 3. research map: https://researchmap.jp/hanada_yasutaka

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----