

2 準位擬交差間の非断熱遷移問題に対する準古典解析

渡部 拓也 (立命館大学)

本講演では、量子系のダイナミクスに現れるエネルギー準位の擬交差における遷移確率の断熱極限について考察する。考えるのは、次の2元連立1階常微分方程式系

$$ih\frac{d}{dt}\psi(t) = H(t;\varepsilon)\psi(t) \quad (t \in \mathbb{R}), \quad (1)$$

$$H(t;\varepsilon) := \begin{pmatrix} V(t) & \varepsilon \\ \varepsilon & -V(t) \end{pmatrix} \quad (2)$$

である。方程式(1)は、滑らかな実数値関数 $V(t)$, $-V(t)$ をエネルギーとする時間依存シュレディンガー方程式のモデル方程式である。この2準位のエネルギーは、 $V(t)$ の零点で交差し、その交差の相互作用を正の小さなパラメータ ε として非対角成分に組み込んだものが、ハミルトニアンを表す行列 $H(t;\varepsilon)$ である。この2準位系全体のエネルギーは、 $H(t;\varepsilon)$ の固有値 $E_{\pm}(t;\varepsilon) := \pm\sqrt{V(t)^2 + \varepsilon^2}$ で与えられ、

$$E_+(t) - E_-(t) = 2\sqrt{V(t)^2 + \varepsilon^2} \geq 2\varepsilon > 0$$

から明らかなように、相互作用により、系全体のエネルギー $E_{\pm}(t)$ は、交差を回避する。これは擬交差と呼ばれ、このようなエネルギーのギャップがあるにもかかわらず、2準位間に生じる固有状態の遷移が、物理的にも興味深い本研究の対象である。方程式(1)における $\hbar$ は、正の小さなパラメータで、時間依存シュレディンガー方程式に由来して、断熱パラメータと呼ばれる。 $\hbar \rightarrow 0$ とする断熱極限下では、状態遷移（トンネル効果に相当）といった量子効果は指数的に小さいということが断熱定理（Bohr の対応原理に相当）として知られており、固有状態間の遷移を表す遷移確率の断熱極限を調べる問題は、非断熱問題と呼ばれる。

最も簡単なものとして、ハミルトニアン $H(t;\varepsilon)$ の $V(t)$ が1次関数 $V(t) = at$ ($a > 0$) である場合（線型交差の場合）は、L.D. Landau や C. Zener により調べられ、その遷移確率 $P(\varepsilon, \hbar)$ は次の Landau-Zener の公式 (1932) で与えられる。

$$P(\varepsilon, \hbar) = e^{-\pi\varepsilon^2/\hbar} \quad (\varepsilon, \hbar > 0)$$

本講演では、擬交差に着目してより一般的な $V(t)$ に対し、Landau-Zener の公式の一般化を試み、断熱極限 ($\hbar \rightarrow 0$) のみならず、相互作用も小さくする ($\varepsilon \rightarrow 0$) 際の遷移確率の漸近挙動を調べる。数学的には、断熱パラメータが準古典パラメータに相当することから、この問題に対する準古典解析的なアプローチを紹介したい。特に2パラメータを扱う際に、WKB 解析で重要な役割を果たす変わり点が合流するという問題について述べたい。さらには、現在取り組んでいる $V(t)$ の零点が退化した（接触交差の）問題についても触れたい。

なお、本講演は、M. Zerzeri 氏 (Paris Nord) との共同研究に基づく。