

# 複素古典軌道と非可積分系のトンネル現象

関西学院大学理学部物理学科 首藤 啓

## ■多自由度系のトンネル現象

万物流転の源ともいえる原子分子の化学反応は言うに及ばず、固体中の電気抵抗などマクロな意味での輸送現象から、量子核形成、初期宇宙の生成過程に至るまで、量子力学の波動性のもっとも顕著な現れであるトンネル現象は、きわめて一般的でありさまざまな場面に顔を出す。量子トンネリング、とりわけ多自由度系のトンネル現象は、高分解能レーザー、微細加工等々の近年の実験手法の進展によって、興味深い側面を直接観測することが可能になったことから、理論・実験双方に多くの話題を提供しつつある。

ここで、多自由度系のトンネリングと言ったときには、大きく分けて2つの意味がある。まず、トンネルに関与する自由度は一次元で、熱浴などの多自由度系と結合している、という場合である。このような問題に対しては、理論的にはインスタントを用いたアイデアが有効性を発揮する。最近の実験を交えたトンネル現象の新しい展開が話題に上がる際にも、このような意味での多自由度トンネリングが対象とされていることが多い[1]。

いまひとつのケースとして、トンネリングする自由度自体が、多自由度である場合がある。トンネルに関係する自由度が本質的に多自由度であるような問題は、複数自由度が関与する化学反応系のように自然界に数多く存在する。しかし、この意味でのトンネル現象の研究はこれまでのところ不思議な程少ない。

ところで、よく知られるように、原子・分子など少数多体系は、対称性の高いごく限られた場合を除いて、ほとんどの場合、古典力学的に分類すれば非可積分系に属し、大なり小なり必ずカオスを内在する。そう考えると、後者の意味での多自由度系のトンネリングは、多くの場合カオスが存在する状況下で起こっていることになる。

例えば、化学反応は反応物と反応生成物を結ぶ遷移状態を通過して起こり、しばしばトンネルに因る遷移を伴う。力学系の言葉でいうと、遷移状態には一般に不安定な周期軌道が存在し、その周りには、特殊な対称性でもない限り必ずカオスが発生する。RRKM理論に代表される化学反応の統計理論がその成立要件を系のカオス性に置いていることからわかるように、多くの化学反応はカオスの海を通過して起こる。従って、化学反応を量子力学として捉える際、トンネル効果とカオスとの関りは避けて通ることのできない非常に重要な問題となってくる。

このように、カオス系でのトンネル現象は、多自由度系のトンネリングの中でもごくありふれた現象と考えることができ、トンネリングが関与する状態変化においてきわめて基本的な現象のはずである。にもかかわらず、これまで積極的に調べられたことはほとんどない。

ここでは、対応する古典力学が非可積分でカオスを発生している場合、量子論のトンネル現象がカオスが存在しない場合と比較してどのような特徴をもつか、それが古典論のいかなる性質を反映しているか?といった問題を考える[2]。

## ■モデル及び量子論

通常、量子論のトンネリングは、古典粒子がエネルギー的に運動が禁止されている領域への波動効果による遷移のことを指すことが多いが、ここでは、動力学的に形成された障壁(KAMトーラス)から波動が滲み出る“動的トンネリング(Dynamical Tunneling)”を考える。もう少し詳しく言うと、次

のようなものである。一般に、自由度が2以上の力学系では圧倒的に多くの場合、規則的運動を示す軌道が不規則運動を示すカオス軌道と共存する状況が実現されている。しかし当然のことながらカオス軌道は規則的軌道と棲み分けており、規則運動がカオス運動に遷移することはない。位相空間は規則的軌道のトーラスによって仕切られ、カオス運動は位相空間全域には広がれないし、逆にカオスに隔てられたトーラスは孤立したグループに分かたれている。しかし量子力学の世界ではトンネル効果によってこれら孤立した領域が結ばれる可能性がある。そのような、動力的に形成された孤立グループ間の遷移をここでは、“動的トンネリング”と呼ぶ。エネルギーも動力的な保存量であるから、通常のエネルギ障壁を越えるトンネリングも、広い意味では、“動的トンネリング”と見做すことができる。

さて、この動的トンネリングに対するカオスの影響を純粋な形で取り出すために、以下のようなモデルを考える。

$$H = H_0(\hat{p}) + V(\hat{\theta}) \sum_n \delta(t - n). \quad (1)$$

ただし、

$$H_0(p) = \frac{p^2}{2} \frac{(p/p_d)^{2\nu}}{(p/p_d)^{2\nu} + 1} + \omega p \quad (2)$$

$$V(\theta) = K \sin \theta, \quad (3)$$

ここで、 $\nu, K, \omega$ は系のパラメータである。図1に示された古典位相空間を見ればわかるように、この系ではパラメータを適当に調節することにより、規則領域（トーラス）と不規則領域（カオス）とが明確に分離された状況を実現することができる。

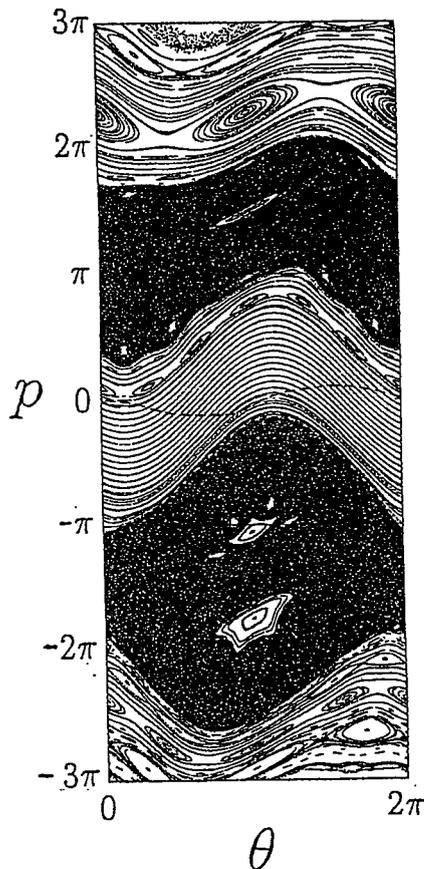


図1 周期的撃力系 (1)-(3) のポアンカレ写像。用いたパラメータは、 $\nu = 3, K = 1.2, \omega = 1$ 。 $\nu$ をある程度大きくとると、中央  $p \sim 0$  付近に KAM の帯ができる。 $p \sim 0$  周辺の破線は、 $t = 0$  で  $p = 0, \theta \in [0, 2\pi]$  にあった古典ラグランジュアン多様体の6ステップ後。

一般に、系を適当に選び、勝手な初期条件から波束を走らせると、その波束による遷移を、古典的運動に乗った遷移とトンネルを含めた純量子論的な遷移とに、明確に分離することは困難である。しかし、上記モデルにおいては、量子論の初期波束を運動量状態の固有関数  $p = p_0$  においてやると、それに対応する古典軌道はすべて中央の KAM 帯のなかにおさまっているのので、時間が経っても決して KAM 帯の外に出ることはできない。一方、量子波束はトンネル効果により KAM 帯から滲みだすことが可能であり、従って、KAM 帯の外側に広がるカオスの領域への遷移はすべてトンネル効果によって起こっていると見做すことができる。

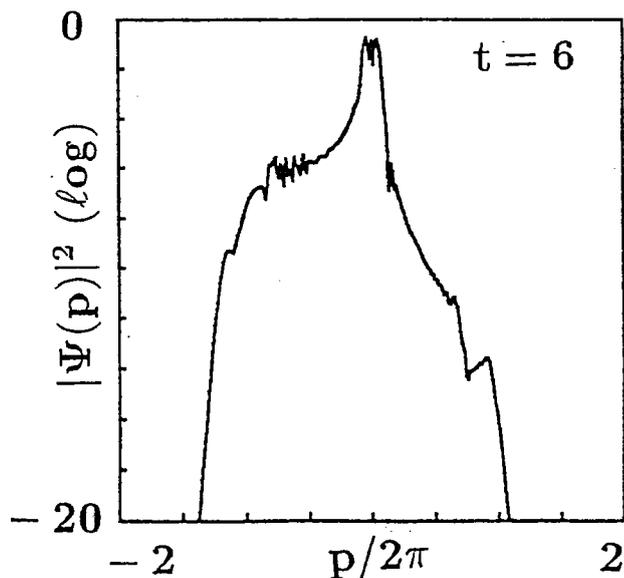


図2 周期的な外力の入った振動子系の波動関数の絶対値二乗（純量子論に基づく計算）。古典的には、 $-0.5 \leq p/\pi \leq 0.5$  の領域では規則領域（トーラス）が占め、その外側にはカオスの海が広がっている。初期時刻に  $p = 0$  の規則領域に波束を置き時間発展させ、6ステップ後の波動関数を見たもの。縦軸は、トンネルによる波動関数の裾を強調するため対数スケールを用いた。

図2にトーラス領域からカオス領域に滲み出していく波束 ( $p = p_0$  からスタートし、6ステップ後) のトンネルテイルの典型例を図示した。外側にカオス領域が存在していない場合のトンネルの裾を比較して、以下のような際立った特徴がある。

1. KAM 帯の中では、急速かつ単調に減少する。その減少率は、ちょうど KAM 帯が  $p$  方向にどこまでも広がった可積分振動子のそれに等しい。
2. KAM 帯内での減衰は、カオスの海に近づくにしたがって次第に緩やかになり、cliff-崖-と呼ばれる急峻な落ち込み、あるいは平坦な棚-plateau-などの構造を作る。
3. 棚の上に不規則な振動をつくる。
4. 棚は崖をつくって急速に減少するが、しばらく減少した後再び棚をつくる。全体として振幅を減少させながら、棚→崖→棚→崖→…の構造を繰り返す。
5. 棚構造をつくるため、可積分振動子すなわちこれまで知られているトンネル過程に比べると、古典的運動不可能領域へのトンネルによる遷移確率は圧倒的に大きい。

## ■複素半古典論

さて、ここでの目的は、以上の非可積分系でのトンネル現象が、どのような機構を背景に発生しているか、ということを明かにすることである。カオスが軌道の示す性質であることを考えると、それは粒子像に基づく古典力学の概念である。一方、トンネル効果は量子力学においてはじめて現れる波動現象であるから、そのままではカオスと結び付けることはできない。ここで量子論と古典論の間をつなぐ翻訳言語が理論的道具として必要になってくる。そのためには半古典論が現在考えられ得る唯一で最も有効な方法である。量子論によると波束の運動はファインマンの経路積分で表すことができる[3]。半古典論とはさまざまな経路のうち、古典運動方程式を満たす経路がもっとも経路積分に有効であるとして、古典経路とその近傍の量子揺らぎで経路積分を近似する理論である[4]。

いま考えている系は時間に対して離散的ある。ここでは時間領域で波束の時間発展を追っているから、以下の  $t$  ステップの量子力学の時間推進のプロパゲータを考える：

$$\begin{aligned} & \langle p_t | \overbrace{\hat{U}\hat{U}\cdots\hat{U}}^t | p_0 \rangle \\ &= \sum_{p_{t-1}, p_{t-2}, \dots, p_1} \langle p_t | \hat{U} | p_{t-1} \rangle \langle p_{t-1} | \hat{U} | p_{t-2} \rangle \cdots \langle p_1 | \hat{U} | p_0 \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

この量子論のプロパゲータに対する半古典近似は、多重積分の定常位相近似を実行することによって、

$$U^{sc}(p_t, p_0) = \sum_k A_k(p_t, p_0) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} S_k(p_t, p_0) - i\mu_k \frac{\pi}{2}\right\}. \quad (5)$$

と与えられる。但し、 $A_k(p_t, p_0)$  は各古典軌道の近傍での量子揺らぎを表わす振幅因子、 $S_k(p_t, p_0)$  は古典作用、 $\mu_k$  はマスロフ因子で、右辺の和は、初期状態に  $p_0$ 、終状態に  $p_t$  にあるようなすべての古典軌道に対する和を表わす。

さて、上述したようにいま考えている系では、カオスとトーラス内部を結ぶ実古典軌道は存在しない。このような場合に、経路積分の積分経路を本来の実軸に沿った経路から複素空間に曲げることによって、実数解から複素解に広げた古典方程式の解を使うことが許されるなら、それらによって経路積分を半古典近似できる可能性がある。実数解によって結ばれない領域も、実は複素解で結ばれており、したがって複素経路はトンネル効果を表現できる可能性がある。実際このアイデアは、場の理論におけるトンネル効果を取り扱う、インスタントン理論でも使われてきた[5]（しかし、インスタントン理論は本質的に1自由度トンネル理論である。）。

ここでは  $p$  表示のプロパゲータを考えているので、初期状態  $p_0$  及び終状態  $p_t$  はともに実数でなければならない。従って、(5) 式に寄与する古典軌道を複素軌道まで含めるためには、初期値の  $\theta_1$  を複素領域に解析接続、すなわち、

$$\theta_1 = \xi + i\eta$$

としなければならない。

いま、 $t = 6$  の場合に、半古典的なプロパゲータに寄与する複素古典軌道を図3に示した。つまり、図3は、

$$\mathcal{M}_t = \{(\xi, \eta) \mid \text{Im}\{p(t, \xi + i\eta, p_0)\} = 0\} \quad (6)$$

なる初期条件の集合をを描いたものである。実軸  $\eta = 0$  は、実古典軌道に対する初期値を表わし、その実軸に接着する2つのブランチは、実古典多様体が折れ曲がった場所から伸びるトンネルブランチ

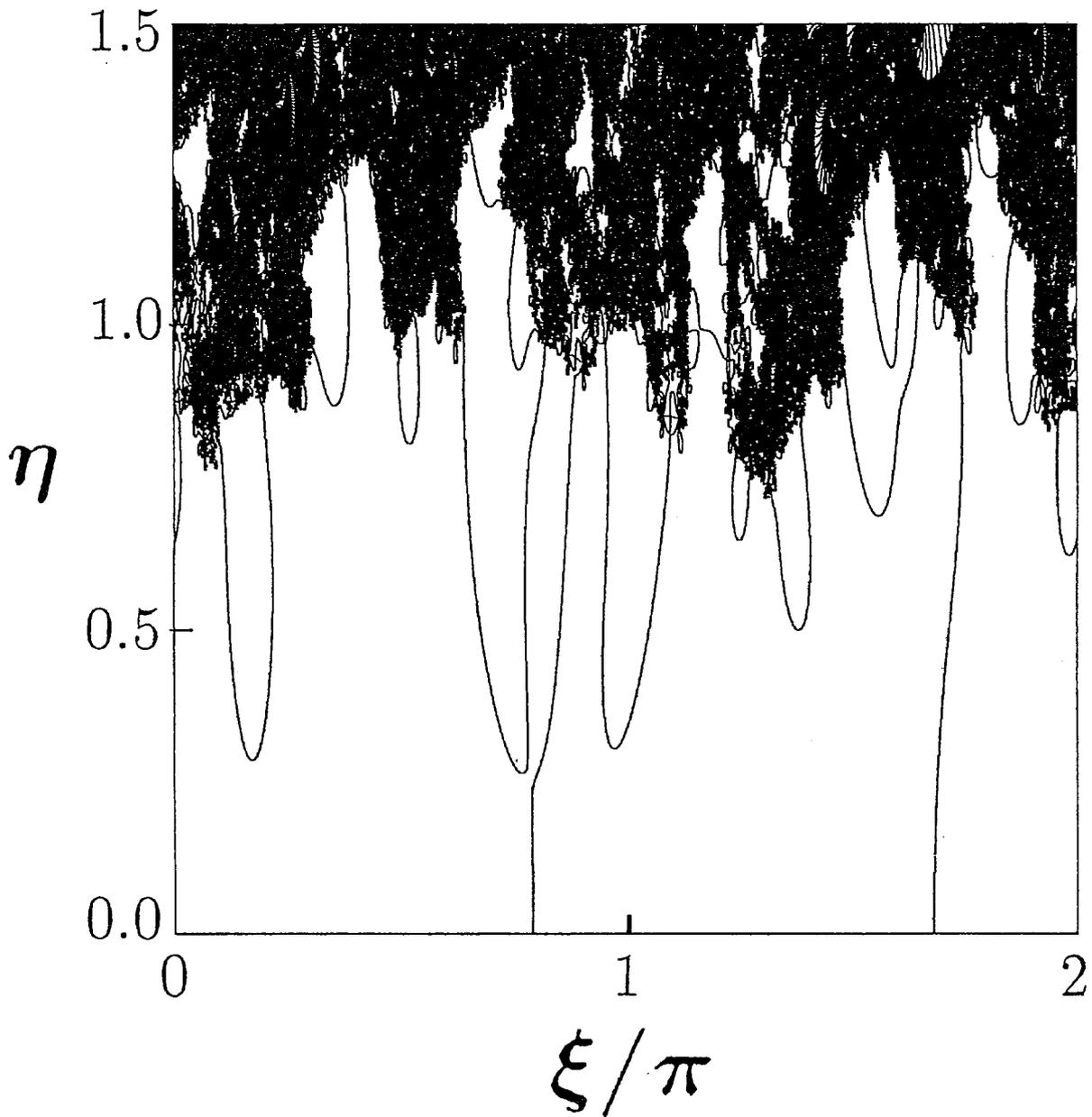


図3 半古典的な波動関数に寄与する複素経路の初期条件の集合  $\mathcal{M}_t$  (但し  $t=6$ )。ここでは、経路積分に寄与する軌道を実軌道から複素軌道に拡張するため、初期座標  $\theta_1$  を複素領域に解析接続した。 $\text{Im}\theta_1 = 0$  軸は実軌道の初期値の集合を表し、それ以外の複素領域に存在する夥しい数の紐状の構造は、一本一本がすべて半古典論的に寄与し得る複素経路の初期値集合である。 $\text{Im}\theta_1 = 0$  の実軌道に接着し上に伸びる分枝が通常の古典的展開点から発する複素経路に対応する、

を表わしている。 $\eta$ の値が大きくなるにつれて、深いトンネル領域に入り込むことを意味する。この2本のブランチは、通常の1次元系のポテンシャルトンネリングの場合にも現れる、古典的展開点から伸びるトンネル軌道に相当するものである。あるいは、インスタントン解と言っても良い。ここでは、これら実古典多様体と直接接続しているトンネル解のことを、Natural Branch と呼ぶことにする。容易に想像されるように、この Natural Branch のみでは、図2で見たような複雑なトンネリングテイルを再現することはできない(図5参照)。

### ■ Laputa Branch とカオス的トンネリング

カオスが存在する場合の著しい特徴は、Natural Branch の以外に  $(\xi, \eta)$  面の深い領域にきわめて多くの寄与する可能性のあるトンネル解が存在していることである(これらを Laputa Branch と呼ぶ)。これらのトンネルブランチ一本一本の上では(図を拡大すると密集した塊りはすべて紐状になっていることがわかる)、終状態  $p_t$  が  $-\infty$  から  $+\infty$  まで動く。従ってそれぞれが、(5)式の半古典和の候補ということになる。但し問題は、複素半古典論を考える場合、すべての候補解が最終的に半古典的に寄与するわけではなく、指数関数的に増大してしまうような非物理的な解が存在することである。これらは、ストークス現象によって除去されなければならない。ここに示したような複雑な複素ブランチの中で、いかにストークス現象を処理すべきか? という問題は、それ自身興味深い、ここではその問題には深入りしない[6]。

しかし、もしたとえ図3に示した候補複素ブランチのうち、およそ半数がストークス現象で寄与しないとしても、依然として膨大な数のトンネル解が依然として残ることになる。では残った多くのトンネルブランチは、同等に半古典和に寄与するのであろうか?

半古典和の表式(5)を見ると、寄与する軌道が実古典軌道であれば、古典作用が実数であるから、それぞれの軌道の重みは各項の係数  $A_k(p_t, p_0)$  の大小で決まる。しかし、いま考えている複素軌道の場合、古典作用が複素値を取るため、その虚部の大きさも寄与の大小に関係してくる。実際いろいろな軌道を調べて見ると、トンネル軌道の場合は、各軌道の重みを決めているのは係数  $A_k(p_t, p_0)$  ではなく、古典作用の虚部である事がわかる。従って問題は、どのような軌道の虚部が大きく半古典和としてはほとんど効かず、どのような軌道の虚部が小さく寄与として重要か? ということになる。

古典作用は複素軌道の各時間での値を累積したようなものだから、実面近くを運動しているような軌道であれば、作用の虚部が小さくなる。最も素朴に、そのような性質を持っていると考えられる軌道は、最初  $t=0$  から常時実面近くに居る軌道である。そのような複素解は、図3の上では、密集したブランチの塊りから、実軸  $\eta=0$  に近くまで降りてきている長い紐状のブランチである。実際、これらの虚部を計算すると、初期の虚部が大きい、つまり  $\eta$  の大きい領域に密集して存在するブランチに比べると、古典作用の虚部は小さくなっている。それらのブランチ(Lower Branch と呼ぶ)を半古典和に加えると、Natural Branch では再現できなかった深いトンネル領域の波動関数の裾をつくる(図5参照)。

しかし依然として、さらに深いトンネル領域あるいは棚(plateau)と呼んだトンネル領域の平坦部分の上のランダムな振動は、これら Natural Branch+Lower Branch をもってしても再現することができない。もし、複素半古典論がこれらの構造を再現することができるとするならば、その源となるブランチは、 $\eta$  の大きい、非常に密集した塊りの中に埋もれていることになる。

ブランチが激しく密集したこの領域では、複素領域に深く入るに従って、ブランチの数が猛烈な勢い ( $\exp\{\exp\{\exp\{\dots\}\}\}$  の割合で) で増えていくため、たとえ数値的とはいえ、その探索に大きな困難を伴う。幸い、発見的探索の結果、図4に示すような鎖状の構造(図でハッチを入れた構造

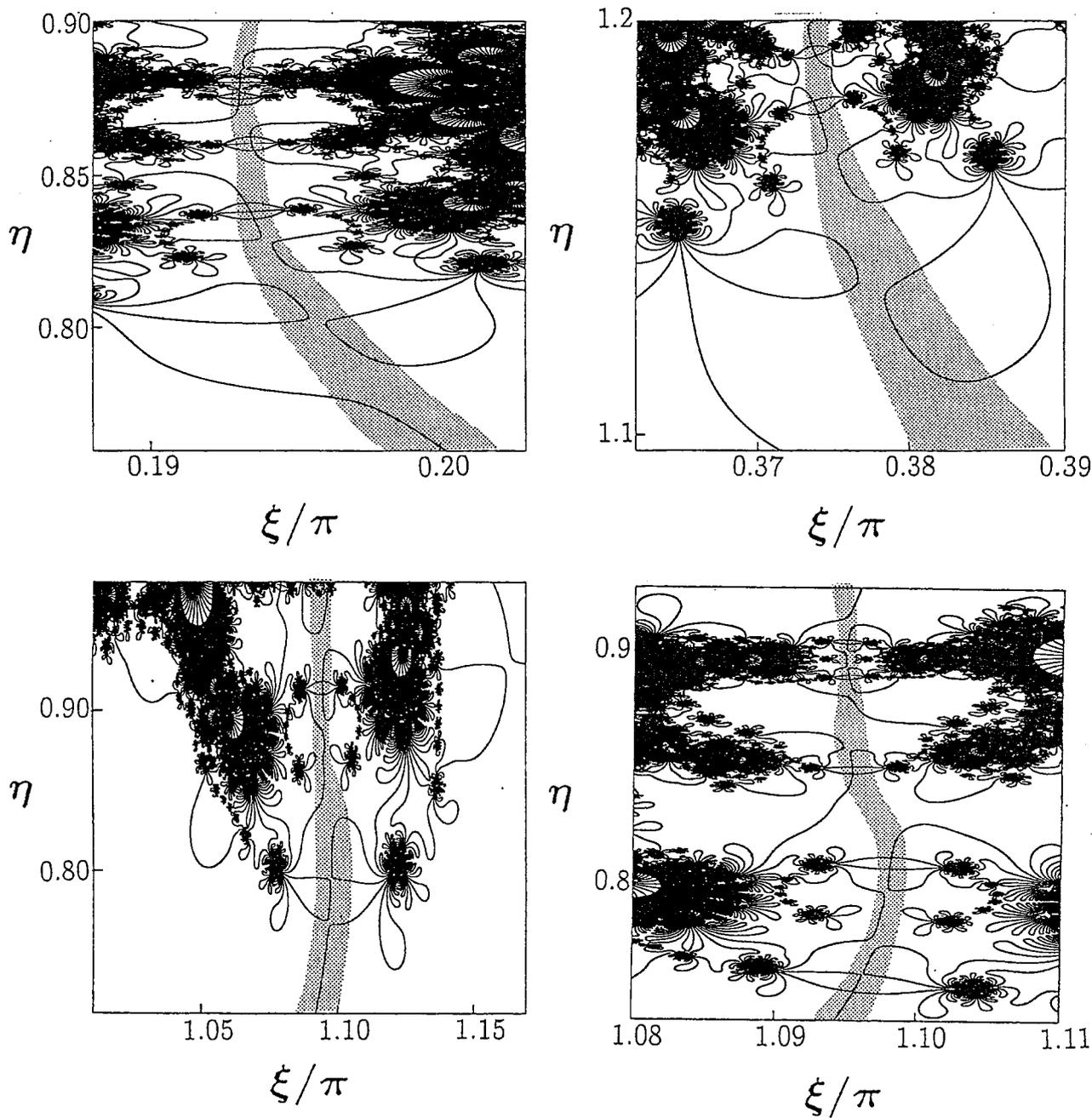


図4 半古典的な波動関数に寄与する複素経路の初期条件の集合  $\mathcal{M}_t$  (但し  $t=7$ ) の密集部分の拡大図。図中ハッチを施した部分が文中 Laputa chain と呼んだ複素トンネル解の連鎖構造。この連鎖構造が複素空間で引き延ばしと折れ畳みを行う。ハッチをした以外の紐状の構造も、一方の端からもう一方の端に初期条件  $\theta_1$  を動かすと、終状態の  $p_t$  は、 $-\infty$  から  $+\infty$  まですべての値をとる。従って、紐状の構造すべてが、(5) の半古典和に寄与するトンネリング解になっている。しかし、鎖状の構造をもつ Laputa chain 以外のブランチは、古典作用の虚部が大きいため、実質的な寄与はほとんど無視できる。