非断熱遷移と多次元トンネルの複素WKB理論

中村宏樹

分子科学研究所

1　トンネル現象と非断熱遷移——その学際性と重要性

量子力学誕生以来、トンネル現象が大変重要な量子効果として認識されているのは言うに及ばない。素粒子・原子核物理学、物性物理学、原子・分子物理学と物理のあらゆる分野に現われる。化学や生物学においても同じである。最も典型的な例の１つは低温における化学反応過程である。反応速度定数の対数を絶対温度の逆数の関数として描くアーレニウスのプロットは有名である。通常はほぼ直線に近い形で反応速度定数が減少するが、低温ではトンネル現象の為に折れ曲がる[1]。α-崩壊をトンネル現象で説明したGamovの理論以来トンネル現象に対する理論的研究は数えきれない程ある。しかし１次元理論はよく整備されているが、多次元理論はまだまだ不十分な状況にある。一方、非断熱遷移とは断熱パラメータの関数として定義される断熱状態ポテンシャルの間を断熱パラメータが変化する為に乗り移る状態遷移のことを総称して言う。これも重要な量子効果の１つであり、物理学・化学・生物学の様々な分野において状態変化あるいは相変化の基本メカニズムをなしている[2, 3]。原子間距離の関数としての分子系の電子状態のポテンシャルエネルギーの交差による状態間遷移は原子・分子衝突過程や分光過程あるいは化学反応過程によって代表されるように最も典型的な非断熱遷移である。同じ様な現象は凝縮系におけるエネルギー緩和、固体表面での動的過程、原子核衝突や反応、あるいは生物系における電子移動やプロトン移動等に見られる。更に、縦軸と横軸は必ずしもエネルギーと空間座標である必要はない。時間的に変化する物理量の間の遷移も様々な分野で顔を出すが、これも非断熱遷移である。最も変わった例の１つにニュートリノの変換がある。これは電子ニュートリノと中間子ニュートリノの間の変換を論ずるもので、縦軸がそれぞれのニュートリノの質量で、横軸が電子密度である。この様に非断熱遷移を基本メカニズムとする現象は枚挙にいとまがない。この非断熱遷移は空間座標の関数としてのポテンシャルエネルギー曲線の傾きの符号によって次の２つの場合に分類される。それは２つの曲線が同符号の傾きで交差する場合(Landau - Zener 型と呼ぶ)と異符号で交差する場合(非断熱トンネル型と呼ぶ)である。２つの交差した状態(透熱状態という)の間には一般に相互作用(透熱結合という)があるので(相互作用がなければ遷移は起こらない)、これを対角化すると断熱状態が得られる。断熱状態間の非断熱遷移は最初に述べた通り横軸の空間座標(断熱パラメータ)が有限の速さで変化する為に生じる。ところで、非断熱トンネル型の場合には下の断熱状態に障壁が上の断熱状態に井戸が生じ Landau - Zener 型とは大変異なった現象が起こる。また、下の断熱ポテンシャルだけを考えた通常のトンネルとも大変異なった様相を示す。図1 に非断熱トンネル型のあるモデルポテンシャルを用いた時の透過確率のエネルギー依存性を示す(実線)。破線は上の断熱ポテンシャルを無視した時で通常のトンネル理論で予想される通り単調増加している。実線は大変異なる振る舞いをしており、ある離散的なエネルギーで完全反射が起こっている。非断熱トンネル型は現実にしょっちゅう起こっていると考えられるのでその解析には注意を要する。非断熱遷移についてはごく最近迄１次元理論さえ完成していなかった。

さて、トンネル現象や非断熱遷移の解析的理論の構築に当っては半古典力学が用いられるが、その基礎となる数学に漸近解のストークス現象と呼ばれるものがある。本稿においては、先ずその説明を行い、その後筆者の研究グループによる最近の成果の要点を紹介する。

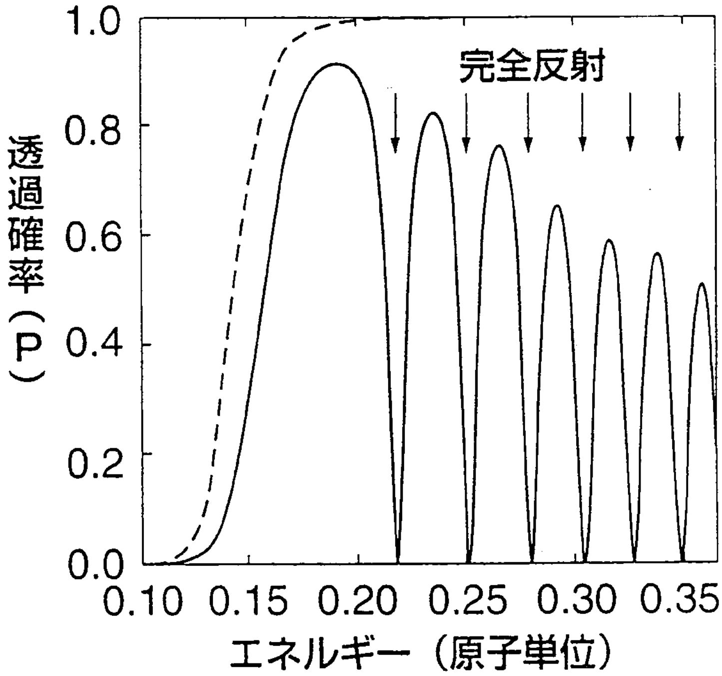

Figure 1: 非断熱トンネル型の場合の透過確率のエネルギー依存性。破線の上の断熱ポテンシャルを無視した場合の単一障壁透過確率。

2　ストークス現象とは—半古典力学の根源

しばらく数学の話になるが、ストークス現象を説明する為に特殊関数の1つとしてよく知られたWeber関数を取り上げる。Weber 関数 $w(Z) = D_\lambda(z)$はλをパラメータとする微分方程式

$$\frac{d^2w}{dz^2} + (\lambda + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4})\ w = 0 \tag{2.1}$$

の解であるが、数学公式集を見るとその漸近形は次の様に複素変数 z の偏角に応じて異なった表式を用いるように指示されている。これは一体何故なのだろうか、また何を表わしているのであろうか。

$$D_\lambda(z) \underset{|z|\to\infty}{\longrightarrow} \begin{cases} e^{-\frac{z^2}{4}} z^\lambda (1 - \frac{\lambda(\lambda-1)}{2z^2} + \cdots) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\lambda)} e^{\lambda\pi i + \frac{z^2}{4}} z^{-\lambda-1} (1 + \frac{(\lambda+1)(\lambda+2)}{2z^2} + \cdots) & \\ \qquad\qquad \frac{\pi}{4} < \arg z < \frac{5}{4}\pi \quad [\mathrm{I}] & (2.2a) \\ e^{-\frac{z^2}{4}} z^\lambda (1 + \cdots) - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-\lambda)} e^{-\lambda\pi i + \frac{z^2}{4}} z^{-\lambda-1} (1 + \cdots) \quad -\frac{5}{4}\pi < \arg z < -\frac{\pi}{4} \quad [\mathrm{II}] & (2.2b) \\ e^{-\frac{z^2}{4}} z^\lambda (1 + \cdots) \qquad |\arg z| < \frac{3}{4}\pi \quad [\mathrm{III}] & (2.2c) \end{cases}$$

簡単の為 $\epsilon^2 = 2(\lambda + \frac{1}{2})$, $z \to \sqrt{2}z$ とすると(2.1)は

$$\frac{d^2w}{dz^2} + (\epsilon^2 - z^2)\ w = 0 \tag{2.3}$$

となる。この方程式の基本漸近解(即ち WKB解)は次式で与えられる：

$$(\bullet, z) = z^{-\frac{1}{2}} \exp[\int^z (z^2 - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}} dz] \tag{2.4a}$$

$$(z, \bullet) = z^{-\frac{1}{2}} \exp[-\int^z (z^2 - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}} dz] \tag{2.4b}$$

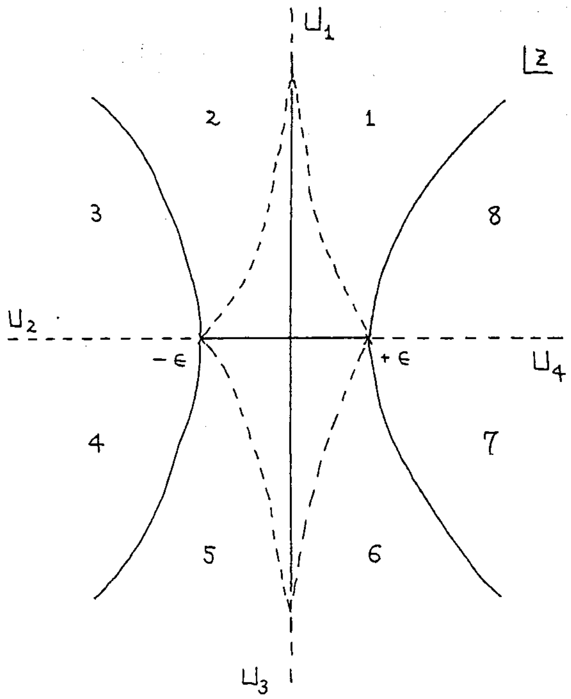

Figure 2: Weber微分方程式の場合のストークス線　- - -：ストークス線、——：反ストークス線

問題は複素変数 z の全偏角に亘って一価な解を求めることである。一般解は当然ながら(2.4)の 2 つの基本解の線形結合で与えられるが、その係数は全偏角に亘って同じにとって良いのであろうか。答は否である。ある偏角を越える毎に線形結合の取方を変えなくてはいけないのである。実は、これが様々な物理現象の基本なのである。即ち、線形結合の取方を変えなくてよければ物理現象は起こらずこの世は死んでいることになる。

漸近解(2.4)は偏角をかえていくと指数関数的に増大する振舞(これをドミナント(d)解という)と減少する振舞(サブドミナント(s)解)を交互に繰り返す。即ち、

$$Re\int_{\epsilon}^{z}(z^2-\epsilon^2)^{\frac{1}{2}}dz=0 \tag{2.5}$$

を満たす線(これを反ストークス線という)を境目にして d-性と s-性が入れ換わる。一方、

$$Im\int_{\epsilon}^{z}(z^2-\epsilon^2)^{\frac{1}{2}}dz=0 \tag{2.6}$$

を満たす線(ストークス線という)上では d-性あるいは s-性が最も強くなる。これらの線を図示すると図2 となる(数学ではストークス線と反ストークス線の呼び方が逆になっているので注意を要する)。$|z|\to\infty$ ではこれらの線は偏角一定の直線になっている。$z=\pm\epsilon$ は特別な点で遷移点という(力学での転回点に相当する)。(2.4)のある線形結合はストークス線から離れたところではある一般解を与え、しかも $|z|\to\infty$ では厳密解になっている。しかし、ストークス線の近傍に来ると、s-解は d-解の誤差の中に埋もれてしまう。即ち、ストークス線を越える時には s-解の係数を変えなくてはならない。この変化分を d-解の係数の定数倍で表わす。この定数はストークス線毎に決まるものでストークス定数と呼ばれる。言い換えれば、ストークス定数はストークス線を境とする 2 つの領域の間の一般解の線形変換の変換行列を与えることになる。図2 に示す様に漸近領域の 4 本のストークス線のストークス定数を $\bigsqcup_j(j=1\ldots4)$ としたとき、領域 7 で s-解 $(z,\bullet)_s$ で与えられる解がどの様に変換されるかを以下に示す。

領域		解
5	:	$(1+\sqcup_1\sqcup_2)(z,\bullet)_d+\sqcup_1(\bullet,z)_s$
4	:	$(1+\sqcup_1\sqcup_2)(z,\bullet)_s+\sqcup_1(\bullet,z)_d$
3	:	$(z,\bullet)_s+\sqcup_1(\bullet,z)_d$
2	:	$(z,\bullet)_d+\sqcup_1(\bullet,z)_s$
1	:	$(z,\bullet)_d$
8	:	$(z,\bullet)_s$
7	:	$(z,\bullet)_s$
6	:	$(z,\bullet)_d$
5	:	$(z,\bullet)_d+\sqcup_3(\bullet,z)_s$
4	:	$(z,\bullet)_s+\sqcup_3(\bullet,z)_d$
3	:	$(1+\sqcup_2\sqcup_3)(z,\bullet)_s+\sqcup_1(\bullet,z)_d$
2	:	$(1+\sqcup_2\sqcup_3)(z,\bullet)_d+\sqcup_3(\bullet,z)_s$

全偏角に亘る解の一価性から4つのストークス定数が満たす3つの関係式が求まるが、これだけでは全てのストークス定数の表式を求めるには不十分である。もう1つの条件は全く別の考察から求める必要がある。ここではその詳細には立ち入らないが、既知の特殊関数ではそのストークス定数が全て求まっているわけである。

さて、(2.7)の領域 [I] では $(z,\bullet)+\sqcup_1(\bullet,z)$ が解であると思って良い。何故ならば、領域1では $(z,\bullet)$ がd-解であるので s-解があろうが無かろうが差し支えない。また、領域4では $(z,\bullet)$ の係数が異なるがこれもs-解なので気にする必要はない。同様な理由から、領域[II]では $(z,\bullet)+\sqcup_3(\bullet,z)$ が、領域[III]では $(z,\bullet)$が漸近解を与える。以上の結果、公式集の(2.2)が得られる訳である。全偏角で一価な解がもとまった訳であるから、後は物理的境界条件を課せば物理の問題の解が得られる。今の(2.3)式は丁度調和振動子の問題であり、$x=Re(z)<0$ 即ち領域 3,4 で s-解だけになるという条件(即ち、$\sqcup_1=\sqcup_3=0$) からエネルギー固有値が求められる。

半古典力学は $\hbar$が小さいことを利用して量子効果を取り入れた解析的理論を作ろうとするものである。即ち、本稿で述べたストークス現象は半古典の基礎を与えているわけである。しかし、残念ながら確立された特殊関数の数はまだ不十分であるし、高次微分方程式や偏微分方程式のストークス現象の数学はまだ十分には確立されていないようである。

3 新しい特殊関数構築の芽

大それた題を付けて恐縮だが、非断熱遷移の研究の途中で以下に示す4つの2階微分方程式の全てのストークス定数の解析的表現を得ることに成功した [4]。解析的表現とは言っても残念ながらかなり複雑な無限級数の形をしているので、関数構築の今後の研究の為の小さい芽位にはなるかなと言う事である。

4つの微分方程式と言うのは以下の通りである。

$$\frac{d^2\phi}{dz^2}+q(z)\phi(z)=0 \tag{3.1}$$

$$q(z)=\begin{cases} a_3z^3+a_1z+a_0 & (3.2a)\\ a_4Z^4+a_2z^2+a_1z+a_0 & (3.2b)\\ a_{2N-1}z^{2N-1}+\sum_{j=-\infty}^{N-2}a_jz^j & (3.2c)\\ a_{2N}z^{2N}+\sum_{j=-\infty}^{N-1}a_jz^j & (3.2d)\end{cases}$$

(3.2a)、(3.2b) はそれぞれ3次及び4次多項式の一般形である。不確定特異点 $z=\infty$ 回りの解を考える訳であるが、$|z|\to\infty$では $(M+2)$ 本のストークス線が放射状に走っている ($M=3,4,2N-1,2N$)。数学的手続きの詳細は省略するが、座標変換

$$\zeta=\frac{4}{M+2}(-a_M)^{\frac{1}{2}}z^{\frac{M+2}{2}} \qquad (3.3a)$$

$$\psi(\zeta)=z^{\frac{M}{4}}\phi(z) \qquad (3.3b)$$

を用い更に ζ-平面での微分方程式の対称性を利用すると全てのストークス定数を1 つのストークス定数で表わすことが出来ることが判る。最後の一つのストークス定数の表式は連立積分方程式と不完全ガンマ関数のストークス現象を利用して導出される。

(3,2a) と (3.2b) の解は 3 次及び 4 次ポテンシャルに関係した諸問題の厳密解が可能であることを示している。

4 非断熱遷移の理論 — **Landau–Zener–Stueckelberg** 理論を超えて

非断熱遷移の理論的研究は 1932 年の Landau 、Zener 、及び Stueckelberg によるそれぞれ独立に行われた先駆的仕事まで遡る。Landau は摂動の行列要素の評価を WKB 波動関数を複素平面での鞍点法を用いて行い、遷移確率の表式の中で最も重要な指数部の表現を得た。Zener は透熱ポテンシャルが時間の 1 次関数で透熱結合が定数である場合に時間依存の 2 元連立シュレディンガー方程式が Weber 関数で厳密に解ける事を示し、現在 Landau–Zener 公式として知られている次の表式を求めた。

$$p_{LZ}=\exp\left[-\frac{2\pi V^2}{\hbar v|\Delta F|}\right] \qquad (4.1)$$

但し、V は透熱結合の強さ、v はポテンシャル交差の所での粒子間相対速度及び ΔF は 2 つの透熱ポテンシャルの交差点での傾き(座標に関する)の差である。そして p_{LZ} は断熱状態間を乗り移る非断熱遷移の確率である。Stueckelberg は位相積分法を用いて、散乱行列に現われる位相の表式を議論した。その後 60 年間実に数多くの研究者によって理論の改良・拡張が試みられた。しかし、数学的困難の為に多くの未解決問題が残されたままであった。たとえば、(i) Landau–Zerner 公式はエネルギーが交差点に一致したところでは $v=0$ 従って $p_{LZ}=0$ になってしまう (図3 参照) 、(ii) 交差点以下のエネルギーでも量子力学的には遷移がかなりの確率で起るがこれに対する公式がない、(iii) 非断熱トンネル型では非断熱結合の影響を受けたトンネル現象が起るがこれに対する理論がない。我々は最近これらの未解決問題を事実上全て解決し、しかも実用上大変便利な諸公式を導出することに成功した[2, 3, 5, 6] 。その理論の概略を以下に述べる。

座標に関して 1 次関数の透熱ポテンシャルとそれらの間の透熱結合が一定という最も基本的なモデルを用いる。2 元連立 2 階のシュレディンガー方程式はフーリエ変換によって 2 元連立 1 階常微分方程式、従って単一の 2 階常微分方程式に帰着される。そのときの係数 $q(z)$ が次のような 4 次多項式となる (式 (3.1) 参照)。

$$q(z)=\begin{cases} \frac{1}{4}-i\alpha z+\frac{1}{4}(\alpha z^2-\beta)^2 & (\text{Landau}-\text{Zener型}) \\ -\frac{1}{4}+i\alpha z+\frac{1}{4}(\alpha z^2-\beta)^2 & (\text{非断熱トンネル型}) \end{cases} \qquad (4.2)$$

ここで α と β は次式で定義されるパラメータである :

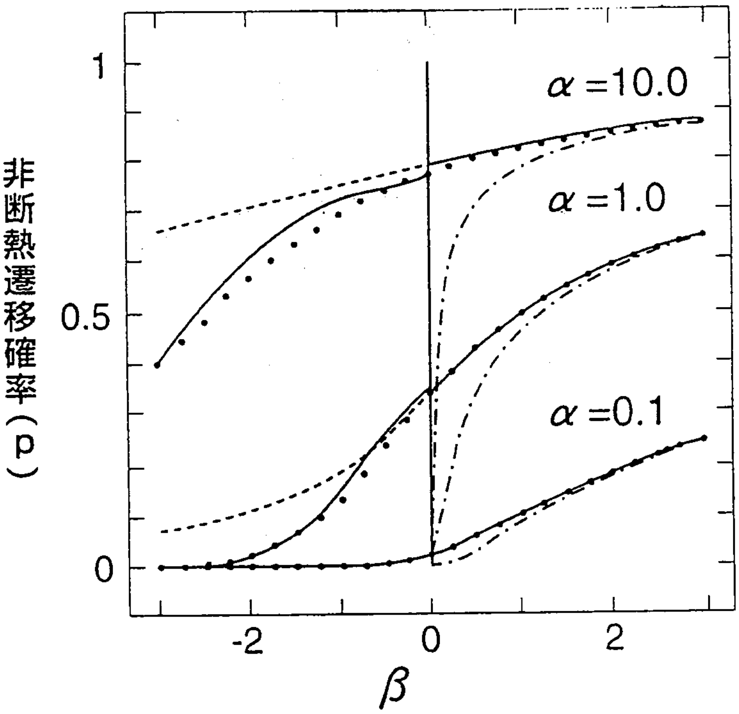

Figure 3: 非断熱遷移確率pの振る舞い。$\beta = 0$が交差点$(E = E_x)$に対応。・・・：量子力学的厳密数値解、—・—：Landau-Zener公式（(4.1)式）、———：筆者等の新公式（(4.4)式及び低エネルギー公式）、- - - -：(4.4)式の延長線

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{F|\Delta F|}{8V^3} \quad (\alpha > 0) \tag{4.3a}$$

$$\beta = (E - E_X)\frac{|\Delta F|}{2FV} \quad (-\infty < -\beta < \infty) \tag{4.3b}$$

但し、mは換算質量、E はエネルギー、E_X は透熱ポテンシャルが交差する所のエネルギーで、F は F_1、F_2 を2つの透熱ポテンシャルとしたとき $F = \sqrt{|F_1 \cdot F_2|}$ である。したがって、この 4 次多項式の場合のストークス現象を解析し、$\mathrm{Re}(z) = \pm\infty$ での漸近解をつなげれば散乱行列の表式が正しく求められることになる。前節で述べた通り、我々は一般の4次方程式の場合の漸近領域でのストークス現象を厳密に解くことに成功しているので非断熱遷移はその1 つの応用問題となる。Landau–Zener 型と非断熱トンネル型の両者について散乱行列が 1 つのストークス定数 U_1 で簡単に表現されることが判り、しかもU_1 の厳密な解析的表現が得られる。これによって、未解決問題を含む全ての場合に対する厳密解が求められたと同時に、非断熱トンネル型において完全反射現象 (図1で透過確率がゼロになる現象) が起る事が厳密に証明されたことになる。U_1 の表式が複雑であるので我々はその簡便な表式を得る為に 4 遷移点問題を 2 つの 2 遷移点問題と近似する半古典論的解析を実行した。$E \geq E_X$ の場合には、2 遷移点の 2 対が虚軸に対して鏡像の形で存在し実軸(ストークス線)上に沿って接続問題を解けばよいが、$E \leq E_X$ の場合には虚軸に沿っての接続問題を解きそれを実軸上の接続問題に関係付けることが必要となる。いずれにしろ、これによって未解決問題を含む全ての場合に対する簡便公式を得ることに成功した。Landau、Zener、Stueckelberg 以来60有余年にして初めて完全解が得られた訳である。理論の全貌をここで紹介することはしないが、Landau–Zener 型の場合の (4.1) 式に代わる表式を書くと次のようになる：

$$p = \exp\left[-\frac{\pi}{4\sqrt{\alpha|\beta|}}\left(\frac{2}{1+\sqrt{1+\beta^{-2}}}\right)^{\frac{1}{2}}\right] \tag{4.4}$$

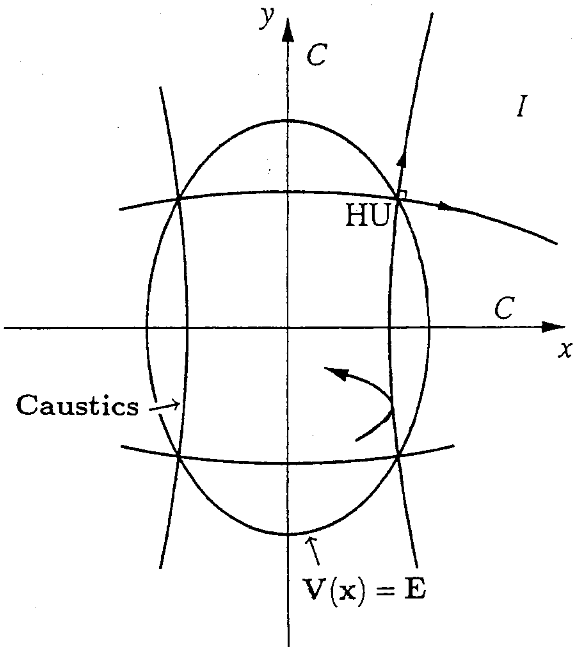

Figure 4: 井戸型ポテンシャルの場合の火線(caustics)とI-及びC-領域。

(4.1) 式を α 、β で表わすと (4.4) 式の指数部の $(\cdot\cdot)^{\frac{1}{2}}$ がない式になる。(4.4) は $\beta \to 0$ でも 0 になる事はなく、有限値を与える。$E \leq E_X$ での表式も求められており、両者を合わせると全エネルギー領域及び全結合強度領域を実に簡便な理論でカバーする事が出来る。図3 がその 1 例である。

以上の理論は1次元2準位問題に対するもので大変限定されたものだと思われるかもしれない。しかし、実は相当に適用範囲が広いのである。先ず、非断熱遷移の局在性が良いために多準位問題に適用できる。どんな場合にも適用できる訳ではないが、交差点がお互いにある程度以上離れていれば各々に2準位理論を使うことが出来る。また、多次元問題では古典軌道を利用しその上で我々の1次元理論を適用すればよい。古典的に許されない遷移を扱うことも出来るし、全ての位相の情報も取り込むことが出来る。今後、様々な問題への応用が開けていくものと期待される。また、非断熱トンネル型における完全反射という現象は大変興味の持たれるものであり、これを利用して周期ポテンシャル系での透過を完全スイッチする事が理論的に可能になる。即ち、新しいメカニズムの分子スイッチを考えることが出来る。

5　多次元トンネルの理論 — インスタントン理論を超えて

多次元トンネルを扱うときには (i) 古典的に許された領域から禁止された領域へどのように波を接続するか、及び (ii) 後者の領域でどう波を伝播させるかという2つの問題がある。ポテンシャルの上下を逆さにして作用積分が極値を与える古典軌道を (ii) の解としてよく利用するが、それで十分なのだろうか。この答えは残念ながら否である。

WKB 型の波動関数表示を用いてこの問題を調べて見よう。例として対称二重井戸を考える。古典的に許された領域で EBK 量子化条件を満す波動関数は Maslov の理論に従って構築することが出来る。この際、この量子化状態を形成する周期古典軌道が越える事の出来ない境目が $E = \mathcal{U}$ (ポテンシャル) の等ポテンシャル面の中に存在する。これを火線 (caustics) と言う (図4 参照)。実はこの火線は図4 に示す様に古典的に許されない領域の中へも延びており、その領域を区分けしている (I と C)。

作用積分を W として Hamilton-Jacobi の方程式を立てると、領域 I では W が純虚数となり

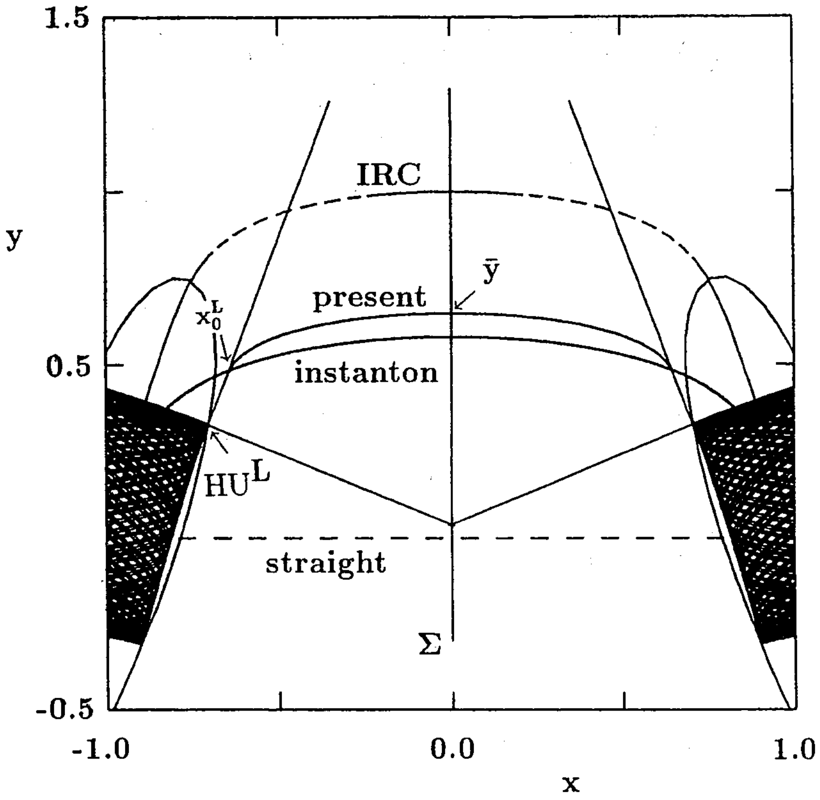

Figure 5: 対称二重井戸ポテンシャルの場合の代表的軌道。

正にポテンシャルを逆さにして古典軌道を走らせればよい事が判る：

$$\left.\begin{array}{l} W = iW_I \\ (\nabla W_I)^2 = 2[\sqcup(\mathcal{R}) - E] \end{array}\right\} \quad (5.1)$$

しかし、もう1つの領域 C では W が複素量 $(W = W_R + iW_I)$ となり次の連立方程式を満す：

$$\left.\begin{array}{l} (\nabla W_R)^2 - (\nabla W_I)^2 = 2[E - \sqcup(\mathcal{R})] \\ \nabla W_R \cdot \nabla W_I = 0 \end{array}\right\} \quad (5.2)$$

C-領域ではある方向にはまだ古典的運動が許されることを意味している。この C-領域が後で述べる様に物理的に興味ある現象を引き起こす。

我々は上述の接続問題 (i) を局所的分離性を仮定して1次元での接続公式を用いて近似的に解いた [7] 。伝播問題 (ii) は (5.1) 式及び (5.2) 式を解いて解決される。とはいえ、実は (5.2) 式を有効に解く手法がまだ確立されていない。I-領域が主に寄与する場合に対しては例えば二重井戸におけるエネルギー分裂の表式を陽に書下すことが出来る。図5に軌道の例を示す。 IRC(Intrinsic Reaction Coordinate) や直線では結果が大変悪い。インスタントンは $E = 0$ のポテンシャルの底から出発する軌道で評価するもので悪くない結果を与える。

C-領域が主に寄与してくる場合には上述の問題(局所分離性近似と(5.2)の解)の為に解表式は限られていて、Birkhoff–Gustavson の正準変換を逐次利用する方法 [8] 等が提唱されてはいるが、筆者の考えでは全域的な解を論理的にきれいに求める手法はまだ確立されているとは言えない。ところで、多次元になったことで、一次元では見られなかった現象があるのであろうか。C-領域が関与するとそれが起りうる。トンネル方向と垂直方向の振動自由度を励起すると、I-領域が主な役割をしている場合にはトンネル確率が急増するが、C-領域が主な場合にはトンネル確率が減少したり振動したりする [9] 。反対称モード結合型ポテンシャル

$$\sqcup(x, y) = \frac{1}{8}(x-1)^2(x+1)^2 + \frac{{\omega_y}^2}{2}(y - \beta x)^2 \quad (5.3)$$

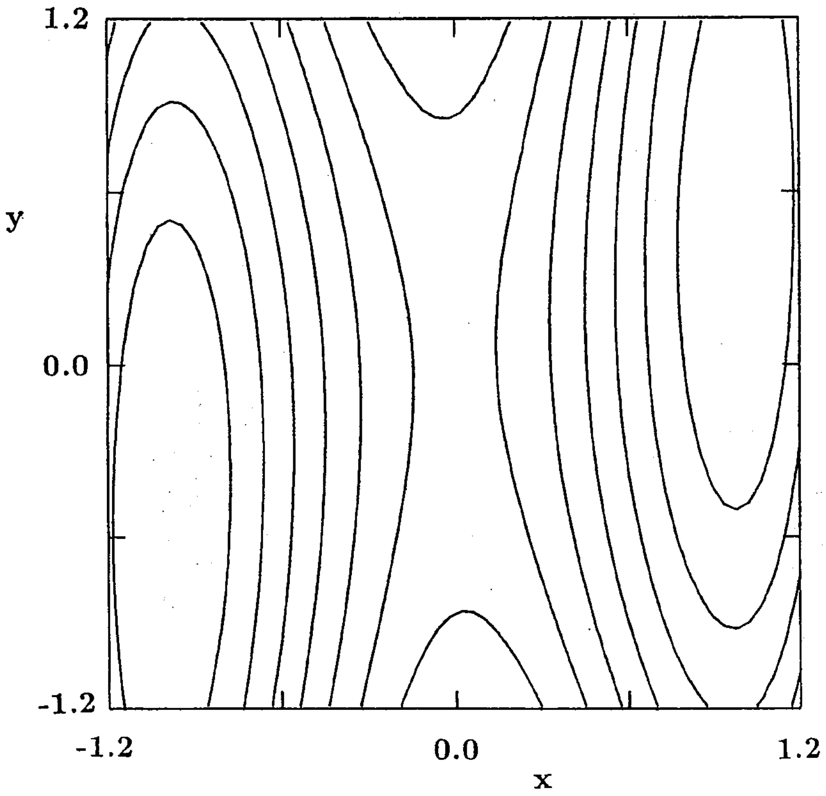

Figure 6: 反対称モード結合型ポテンシャル例の等高線図。

表1		
(ω_y , β)	(0.5,1.5)	(0.2,1.3)
$\Delta E_{0,0}$	1.4×10^{-10}	182.1×10^{-10}
$\Delta E_{0,1}$	60.5×10^{-10}	5.7×10^{-10}
$\Delta E_{0,2}$	1316.5×10^{-10}	85.0×10^{-10}
$\Delta E_{0,3}$	18920.0×10^{-10}	117.9×10^{-10}
$\Delta E_{0,4}$	—	113.9×10^{-10}
$\Delta E_{0,5}$	—	88.7×10^{-10}
トンネル領域	I-I	C-C

Table 1: $\Delta E_{n,m}$: m はトンネルに垂直方向の振動の量子数, $g = 0.04$

を含むハミルトニアン $H = -\frac{g^2}{2}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}) + \mathcal{U}(x,y)$ の場合 (図6 参照) の数値例を表1に示す。β が小さい場合 C-領域の寄与が大きくなる (ポテンシャルはスケールされていて全て無次元量で表わされている)。

6 結び

半古典力学の基本となるストークス現象の概略を説明し、非断熱遷移と多次元トンネルの理論の最近の発展を我々の成果を中心に紹介した。特に、非断熱遷移の理論については60有余年にして初めて実用上も便利な完全解が得られており、今後幅広い分野で有効に利用されることを期待している。とは言え、まだまだ多くの課題が残されている。多次元問題はトンネル現象と共に更なる研究が必要である。また、新分子スイッチの実現性についても追求していかなくてはならない。

References

[1] 中村宏樹、「分子の衝突と化学反応」、数理科学 No.360, p.19 (1993)

[2] 中村宏樹、「化学現象を支配する非断熱遷移の理論 – 60年ぶりの完全解」、現代化学 No.305, p.36 (1996)

[3] 中村宏樹、「非断熱遷移理論の新展開」、日本物理学会誌 Vol.51, p.829 (1996)

[4] C. Zhu and H. Nakamura, J. Math. Phys. *33*, 2697 (1992)

[5] H. Nakamura and C. Zhu, "Landau, Zener, Stueckelberg, and All That Now Completely Solved", Comm. on Atomic and Molec. Phys. *32*, p.249 (1996)

[6] H. Nakamura, "Nonadiabatic Transitions: Beyond Born-Oppenheimer", in "Dynamics of Molecules and Chemical Reactions", eds R. E. Wyatt and J. Z. H. Zhang (Marcel Dekker Inc., 1996), p.473

[7] S. Takada and H. Nakamura, J. Chem. Phys. *100*, 98 (1994)

[8] S. Takada, J. Chem. Phys. *104*, 3742 (1996)

[9] S. Takada and H. Nakamura, J. Chem. Phys. *102*, 3997 (1995)