

非弾性散乱をする波束のダイナミクスと decoherence

日立基礎研 村山良昌 (Yoshimasa Murayama)

1. はじめに

量子力学の基礎は、つきつめて考えれば、状態の重ね合わせの原理に尽きる。よく教科書に記載されるように、それは

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \tag{1}$$

のように表現される。ここで、記号+の意味を考えてみよう。+は、数学的には、表現する内容を問わずにあらゆるものを加えてしまう。もし、ここで内容を問うならば、それは物理の世界に入ることになる。物理的には加えることが許されないものも存在する。

古典的には、例えば、次元の異なる物理量を加えることはできない。量子論では、たとえ次元の同じ物理量でも、相互に incoherent な状態は加え合わせることができない。量子力学における重ね合わせを意味する+の内容はこのようなものである。

状態が相互に coherent である限り、ある仕掛けをすればそれら2つの状態を重ね合わせることが可能となる。

そのような仕掛けを第2章で論じる。

重ね合わせの可能な状態が、何らかの理由で、重ね合わせのできない状態に変わるとする。その過程は何であろうか? まさに、それこそが観測問題の本質

であろう。量子状態が古典状態に変質する。その過程を decoherence とか dephasing とかいう。

われわれは、時間依存 Schrödinger 方程式の数値解に興味がある。この方程式が記述する内容は状態のダイナミクスである。空間のある領域でのみ特定の (散乱) ポテンシャルが働くとすれば、通常、状態の解は、そのポテンシャルが存在しない系の解である初期状態から出発するのが普通であろう。そのためには、空間に無限に広がった状態 (平面波) に依存した議論には困難が付きまとう。状態を適当なサイズに局在させなければならない。その状態が波束であり、波束が時間とともにどのように形を変えるかが興味の対象となる。

ポテンシャル散乱の場合の波束のダイナミクスは、すでに、かなりよく論じられている [1]。ここでは、これまでにほとんど論じられることのなかった dissipative な媒質の中の波束、あるいは、非弾性散乱を受ける波束のダイナミクスに興味がある。第3章では最初に弾性散乱の場合を、次いで非弾性散乱の場合を論じる。

2. 重ね合わせの原理

第1図は、中性子の干渉計としてよく知られたものを概念的に示したもので、Si の単結晶から、マクロな格子の平行度をそのまま残して、切り出している。すなわち、結晶格子が中性子の波長に対するブラッグの条件を満たす場合、第1の S で記した部分で波の分割が、A で記した部分で波の重畳が行われる。M は、単に鏡の作用をする。ここで重要なことは、ブラッグの条件が満たされる

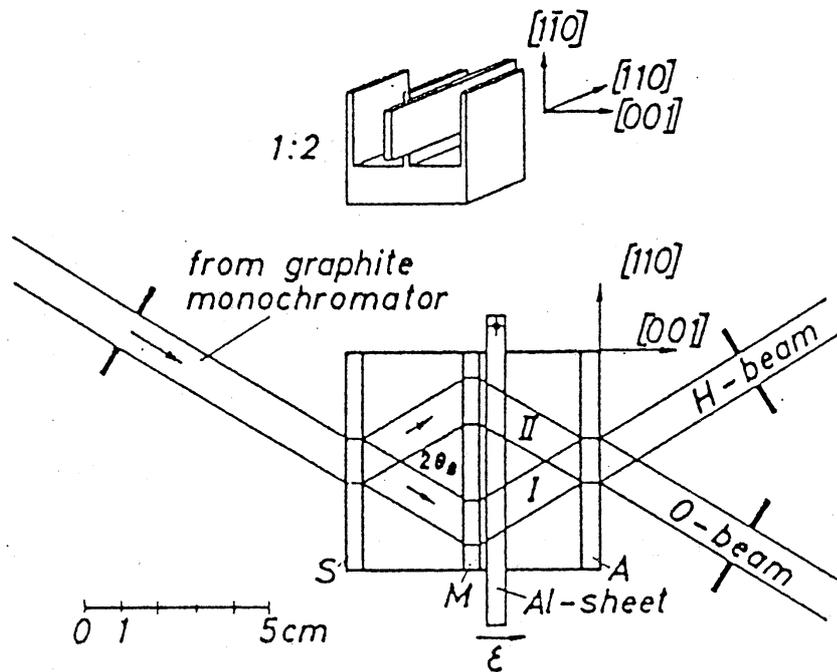


Figure 1: 単結晶 Si から切り出した中性子干渉計。After H. Rauch, et al., Phys. Lett. 47A (1974) 369.

ことである。さもないと、分割・重畳ともに起こらないことはシミュレーションで容易に示せる。第2(a)図は、波束が Si の周期ポテンシャルで分割される様子を、また第2(b)図は、分割された中性子がブラッグの条件が満たされる場合に限り、再び重ね合わされる様子を示している。第2(b)図の重ね合わせは明瞭でないが、実際に、その強度を移相器の位相差に対してプロットしてみるとにより、H-beam と O-beam とが相補的に振舞う (和が一定に保たれる) ことは容易に確認できる。

このように、Si 干渉計は、上述した重ね合わせの + の機能を物理的に実現した仕掛けである。

よく知られた電子線の分割は、Aharonov-Bohm 配置での solenoid であり、蛍光板の上でのエネルギー変換を通じて、重ね合わせと検出とが同時に行われ

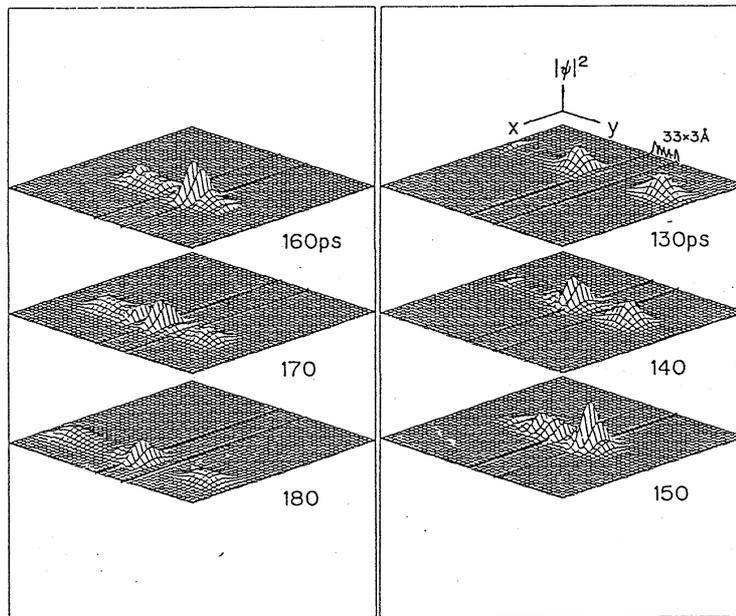
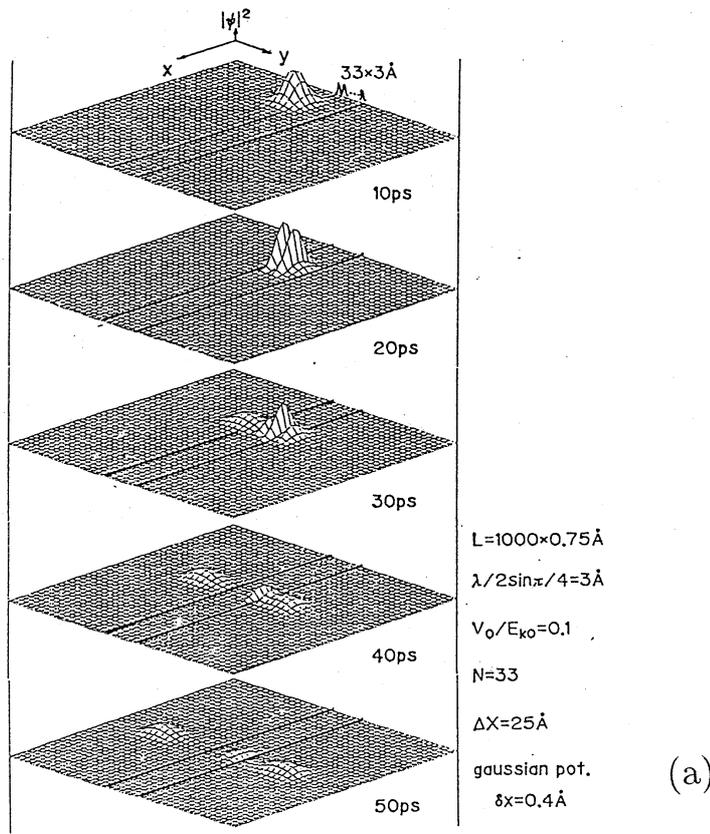


Figure 2: (a) 波束が干渉計で分割される様子、(b) 同じく重ね合わせが生じる様子を示すダイナミックスの解。ともに、ブラッグ条件が満たされる場合。

る。光子の場合には、分割および重ね合わせは半透鏡上で達成される。電磁波では、空洞の中の金属表面で反射とともに重ね合わせが可能となる。

空間の中に、物理的仕掛けが何もなければ、2つの中性子線は、仮に同一空間領域を同時に通過しても、ほとんど何も起こらないであろう。

もちろん、incoherentな2つのbeamがSi干渉計を通過したとしても、重ね合わせが起こり得ないことは言うをまたない。

このように、状態の重ね合わせを論じるには、その状態が相互に重ね合わせ可能であるかどうか、もし重ね合わせ可能であるとしてもどのような仕掛けでそれを実現させるかを考察することが重要となる。

3. 波束の散乱

3.1 ポテンシャル散乱

ポテンシャルの存在しない自由空間の波束が

$$\psi_p(x, t) = \sum_k A_p(k) e^{-itE_k} \phi_k(x) \quad (2)$$

と書かれることは、今さら詳述するまでもない。通常、 $\phi_k(x)$ としては平面波を取る。 $A_p(k)$ は包絡関数(通常 p に中心を持つ Gaussian)である。もし、ある空間領域にポテンシャルが存在し、そのポテンシャル問題(ハミルトニアン:H)の固有解 E_j : $[X^{-1}HX = EI]$ が知られているとする。そのときの Schrödinger 方程式の解は、

$$\psi_p(x, t) = \sum_{ijk} \phi_i X_{ij} \exp(-itE_j) (X^{-1})_{jk} A_p(k) \quad (3)$$

である。実際、第2図は、 S_i の周期的ポテンシャルを仮定し、空間を差分法で離散化して解いた結果である。 ϕ_k を平面波にとる場合でも、ポテンシャル問題の固有解は一般には平面波ではない。従って、上の表式は、Hilbert空間の次元を限っても、その系に属するすべての固有エネルギーと固有状態の上で和を取らなければならない、かなり大変な計算である。

第2(a,b)図にみられる特徴について少々触れる。周期ポテンシャルによって中性子波がトラップされている状態に注目されたい。この状態はFabry-Perot空洞で多重反射を受ながら進行する波である。粒子線の散乱問題でよく知られた結晶とのdynamic interactionによる散乱過程に相当する。この状態は、長時間トラップされながら徐々に空洞から洩れだして消えていく。

観測問題での検出器との相互作用モデルとして、もっとも簡単には、弾性散乱を取ることができる。[弾性散乱とポテンシャル散乱の違いは、後者ではポテンシャル側に何の痕跡も残らないのに比べて、前者では散乱体に痕跡が残ることである。]弾性散乱では、相互作用をしたことを情報として残すものは位相の変化でしかない。対象に危害を加えないように位相変化を検出するには、原理的には干渉を用いればよいが、かなり難しい作業のように見える [2]。

もっとわかり易い過程は非弾性散乱体を検出器に持たせることであろう。次ぎにそれを議論する。

3.2 非弾性散乱

第3図は非弾性散乱の素過程を示している。簡単のために系は1次元とし、

分散のない光学フォノン散乱 (ω) を仮定した。フォノンの放出・吸収のそれぞれにエネルギー・運動量を保存する過程が2つずつあり、それらが図中に示されている。それらは $\nu = \text{abs.}_{\pm}/\text{em.}_{\pm}$ で区別される。非弾性散乱では散乱ポテンシャルが本質的に時間依存であり、 $\psi(x, t)$ を解析的に表現することは困難であるので、ここでは散乱ポテンシャルの最低次の摂動の形で議論する。

散乱時間 τ に比べて十分に短い時間の中に、初期波束が非弾性散乱により減衰する程度は、

$$\Delta\psi = \psi(t + \Delta t) - \psi(t) \approx - \sum_k A_p(k) e^{-itE_k} \phi_k(\Delta t/\tau_k) \quad (4)$$

と書け、一方、 Δt の間に k' の周りに発生する波束は、過程 ν に対して

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_\nu(t) &\approx \Delta t \sum_k \tilde{A}_p(k) e^{-\frac{t}{\tau_k}} \sum_{k'} \phi_{k'} e^{-itE_{k'}} \frac{1}{\tau_{kk'\nu}} \\ &= \Delta t \sum_{kk' \pm} \tilde{A}_{p\nu}(k) e^{-\frac{t}{\tau_k}} \phi_{k'} e^{-itE_{k'}} \pi |V_{kk'}|^2 \delta(E_k - E_{k'} \pm \omega) \end{aligned} \quad (5)$$

のように書けるはずである。ここで、次ぎの4項目を注意する。

(1) k および k' はそれぞれ初期波束および散乱によって発生した波束を記述する波数である。ただし、 $\frac{1}{\tau_k} = \sum_{k'\nu} \frac{1}{\tau_{kk'\nu}}$ 。

(2) $\tilde{A}_p(k)$ はあらたに発生した波束の包絡関数であり、初期波束を記述する $A_p(k)$ とは異なる。

(3) 簡単のために、位相シフトは無視している。

(4) 因果律の要請から、初期および散乱波束は同一の空間的拡がりを持つ。

以上のことより、

$$-\Delta\psi(t) = \sum_\nu \tilde{\psi}_\nu(t) \quad (6)$$

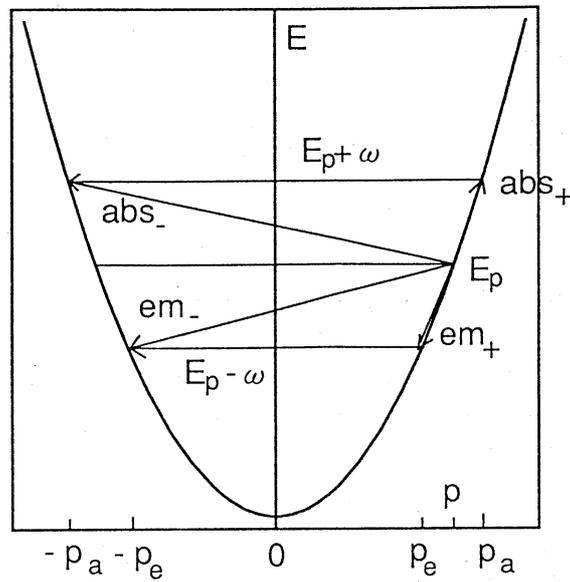


Figure 3: 光学フォノンによる非弾性散乱の素過程。

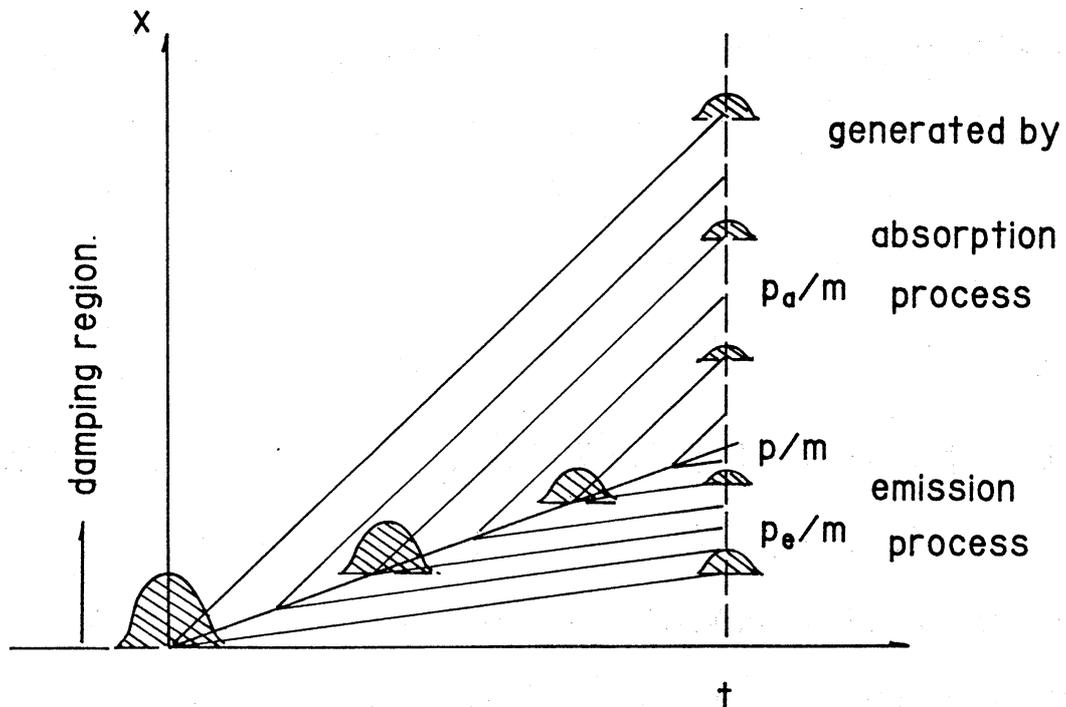


Figure 4: 初期波束が非弾性散乱によって小さな波束を連続して発生する様を概念的に示す図。

の仮定と簡単な計算から、発生する波束の形が求められる。

詳しい計算は [3] を参照されたい。

第4図に波束の概念的な形を示す。横軸は時間 t 、縦軸は空間座標 x で、初期波束は p/m の速度で進むが、散乱を受けることにより、その一部がそれぞれの散乱過程に応じて p_{em}/m および p_{abs}/m の速度で進行する小さな波束を時間の経過とともに連続して発生する。ここに、 $p_{em} = \sqrt{p^2 - 2m\omega}$ および $p_{abs} = \sqrt{p^2 + 2m\omega}$ である。最終的な答えは

$$\tilde{\psi}_\nu(x, t) \sim \sum_{k\nu} \tilde{A}_{p\nu}(k) \int_0^t dt'_\nu e^{-\frac{t'_\nu}{\tau_k}} \sum_{k'} \phi_{k'}(x - x'_\nu) e^{-i(t-t'_\nu)E_{k'}} \frac{1}{\tau_{kk'\nu}} \quad (7)$$

となり、 $x'_\nu = t'_\nu p_\nu/m$ である。

図が示唆するように、時間 t で見る波束は、初期波束の位置にピークを持ち、その両側に裾を上げた形を持つ。それは、波束の重ね合わせであるが、はたして、初期波束と発生した波束とは coherent であろうか? 次章でその内容を議論する。

4. 議論

以上、われわれは非弾性散乱過程を議論した。非弾性散乱によって発生した波束はもとの初期波束とは異なった中心速度を持っているので、通常の仕掛けによっては重ね合わせが出来ない。すなわち、相互に coherent でない。それは、例えば、第1図の Si 干渉計で、この2種類の波束が同時にブラッグ条件を満たすことがあり得ないことから自明であろう。

観測問題として上記の過程をみることにしよう。フォノンの検出は可能であ

る。従って、この相互作用を通じて、もとの波束の存在を観測出来ることになる。また、発生した波束を何らかの方法で観測しても、もとの波束には何の影響をも及ぼさない。

このように、非弾性散乱を利用することにより観測が容易となることは、弾性散乱による位相差を測定することによって初めて観測が可能となる場合と対照的である。上の議論では述べなかったが、フォノンの放出と吸収を繰り返すことにより初期波束と同一の速度を持つに至る高次の過程を考慮すれば、事情はもう少し複雑である。波束の中心速度を見る限り、この種の高次過程によって発生した波束は初期波束と coherent に見えるはずである。このように、一度失った coherence が回復する場合のある得ることはきわめて興味深い事実である。実験的にも、中性子干渉を用いて最近観測されている [4]。

References

- [1] Y. Murayama, *Physica* **A140** (1989) 469; **A147** (1990) 329, 334; 村山良昌, *数理科学*, No.334 (1991) 54.
- [2] Y. Aharonov, et al., *Phys. Rev.* **A47** (1993) 4616.
- [3] Y. Murayama, "Quantum Control and Measurement", Eds. H. Ezawa and Y. Murayama, (North-Holland, 1993) pp.93.
- [4] *ibid.* pp.223.