Osaka University Knowledge Archive

Title	Theory of Nonadiabatic Transitions at Level-Crossing in Condensed Matter
Author(s)	中山, 博幸
Citation	大阪大学, 1999, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3155506
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

Osaka University

【88】

氏　　名	中山博幸（なかやま ひろゆき）
博士の専攻分野の名称	博　士（理　学）
学位記番号	第　14754　号
学位授与年月日	平成11年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学位論文名	Theory of Nonadiabatic Transitions at Level-Crossing in Condensed Matter （凝縮相中における準位交差系の非断熱遷移の理論的研究）
論文審査委員	（主査） 教　授　吉田　博 （副査） 教　授　張紀　久夫　　教　授　伊藤　正　　教　授　萱沼　洋輔

論文内容の要旨

エネルギー準位の交差に伴う非断熱遷移の問題は古くから原子・分子の散乱問題において Landau-Zener 過程として研究されてきた。本研究では凝縮相中における準位交差問題を，2準位が多モードのフォノンからなる媒質自由度と相互作用しているモデルから出発し，形式的摂動展開法による解析計算及び減衰演算子を用いた数値計算によってしらべ，系の遷移過程を明らかにした。

1つの素過程として交差点近傍の動力学に着目すると，交差後の遷移確率はエネルギーの揺らぎ（位相緩和）と散逸が介在する結果，Landau-Zener 公式から大きくずれる。特に位相緩和時間の短い状況で，エネルギーの散逸の効果が重要な低温強結合極限とエネルギーの揺らぎのみが存在している高温強結合極限の間をつなぐ遷移確率の式を導いた。逆に位相緩和が不十分な状況で遷移確率は Landau-Zener 公式で与えられることを示した。

一般的な状況に対しては数値計算によって遷移確率を求めた。解析計算の結果が確かめられた。エネルギーの揺らぎは非断熱性を高め，遷移過程を拡散的にする一方，エネルギーの散逸はエネルギー的に下の状態への遷移確率を増大させる。強結合かつ断熱通過の極限では遷移確率は交差前の初期状態に依らず，交差後の状態のエネルギーの大小関係で決まることを示した。

更に，電子励起状態からの緩和の途中で準位交差に伴う非断熱遷移が自律的に誘起されるポテンシャル交差系の解析を同様の方向で行ない，系の遷移過程は波束がポテンシャルの交差点を通過することによって起こる動的な遷移と，緩和後のトンネル過程による静的な遷移に分離されることを数値計算により示し，系の動力学を統一的に明らかにした。動的な遷移過程での遷移確率を定量的に評価し，現実の系である半導体中の DX センターとアルカリハライド結晶中の F センターへの動的遷移過程への応用を行なった。

論文審査の結果の要旨

本論文では，凝縮相中における準位交差問題について，2準位が多モードのフォノンからなる媒質自由度と相互作用しているモデルから出発し，解析的計算手法及び数値計算手法の両面から詳細に調べ，系の遷移過程を解明することに成功した。

1つの素過程として交差点近傍の動力学に着目すると，交差後の遷移確率はエネルギーの揺らぎ（位相緩和）と散逸が介在する結果，Landau-Zener 公式から大きくずれる。論文では，位相緩和時間の短い状況で，エネルギーの散逸の効果が重要な低温強結合極限とエネルギーの揺らぎのみが存在している高温強結合極限の間をつなぐ遷移確率の式を導き，逆に位相緩和が不十分な極限で遷移確率は Landau-Zener 公式で与えられることを示した。つぎに，一般的な状況に対しては数値計算によって遷移確率を求め，解析計算の結果が正しいことを確かめた。エネルギーの揺らぎは非断熱性を高め，遷移過程を拡散的にする一方，エネルギーの散逸はエネルギー的に下の状態への遷移確率を増大させる。強結合かつ断熱通過の極限では遷移確率は交差前の初期状態に依らず，交差後の状態のエネルギーの大小関係で決まることを示した。

さらに，電子励起状態からの緩和の途中で準位交差に伴う非断熱遷移が自律的に誘起されるポテンシャル交差系の解析を同様の方法で行ない，系の遷移過程は波束がポテンシャルの交差点を通過することによって起こる動的な遷移と，緩和後のトンネル過程による静的な遷移に分離されることを数値計算により示し，系の動力学を統一的に明らかにした。動的な遷移過程での遷移確率を定量的に評価し，現実の系である半導体中の DX センターとアルカリハライド結晶中の F センターへの動的遷移過程への応用を行ない，これらの遷移過程を明らかにした。

このように，本論文は，凝縮相中における準位交差問題を，2準位が多モードのフォノンからなる媒質自由度と相互作用しているモデルから出発し，形式的摂動展開法による解析計算及び減衰演算子を用いた数値計算によって詳細に調べ，系の遷移過程を統一的に解明することに成功している。

よって博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。