

称号及び氏名 博士(理学) 福田 拓

学位授与の日付 平成 30 年 3 月 31 日

論文名 Theory of core-level photon-absorption spectrum in terms of  
complex spectral analysis  
(複素スペクトル解析による内殻光吸収スペクトルの理論)

論文審査委員 主査 田中 智  
副査 会沢 成彦  
副査 溝口 幸司  
副査 神吉 一樹

# 論文要旨

学位論文題目：

Theory of core-level photon-absorption spectrum in terms of complex spectral analysis

(複素スペクトル解析による内殻光吸収スペクトルの理論)

理学系研究科 物理科学専攻

物性理論研究室

福田 拓

近年、物理学における重要な問題である時間対称性の破れに関する研究に対して、多くの進歩がもたらされている。そこでの重要な概念は共鳴特異性である。これにより時間の対称性が破れるのである。現実の物理系の性質はエルミート・ハミルトニアンにより表される。エルミート演算子の固有値はヒルベルト空間の中で全て実数であることにより、得られる固有関数は時間周期的であり時間対称性を持つ。しかし、共鳴特異性を持つ物理系の時間発展は指数減衰を示す。この事実は、エルミート・ハミルトニアンの固有値が全て実数であるという事実と、一見矛盾しているように思われる。

この矛盾は発展の演算子の固有状態が属する関数空間の拡張を行うことによって解消されることが Tomio Petrosky, Ilya Prigogine らにより示された。指数減衰過程が見出だされる系では、発展の演算子に対する固有値問題において、共鳴特異性が存在する。このとき、指数崩壊状態と関連付けられる複素固有値を持つ固有状態は、それぞれ左右の固有状態という二重構造を持つ、拡張されたヒルベルト空間上の固有基底に対する完全系の一部を成す。この複素固有値を持つ固有状態は“共鳴状態”として呼ばれる。この共鳴状態に対する物理的な理解は基礎的な段階に止まっており、さらなる研究が求められている。

本研究では、拡張ヒルベルト空間における複素スペクトル解析を用いて、1次元超格子に不純物原子が結合した幾つかのハミルトニアン系の不安定性を調べ、共鳴状態の特徴を研究した。特に、1粒子系での不純物原子の内殻光吸収過程において、そのスペクトル構造中に表れる共鳴状態の性質について論じる。一般的にスペクトル構造と共鳴状態とは、スペクトル関数に対してマルコフ近似を行うことにより、共鳴状態の固有値の実部とピーク中心、そして固有値の虚部と振幅とが対応づけられてきた。ただし、この近似によりスペクトル構造における非対称

性を論じることはできない．ところが，この非対称性にこそ共鳴状態の特徴が表れているのである．

光吸収スペクトルと共鳴状態の対応は，指数減衰を示す共鳴状態を基底に含めた拡張ヒルベルト空間中での完全系を用いた複素スペクトル解析を行うことにより明らかにされる．この解析によって，近似を用いることなく，スペクトル構造と共鳴状態とを対応させることができる．本研究の結果を通して，光吸収スペクトルの解析が共鳴状態の研究にとっていかに強力な実験手段であり，また共鳴状態の特徴がどれほど明白に光吸収スペクトル中に反映されているかを示す．

本論文は序章および全5章からなる第I部，第II部により構成されている．第I部は4章からなり，1次元超格子中の不純物原子の内殻光吸収スペクトルに現れる非対称構造に関して，拡張ヒルベルト空間における複素固有値問題の観点から論じる．第II部は1章からなり，同モデルにおいて半無限系での不純物原子を片端より無限遠方に離れた場合と両無限系との対応に関して，両光吸収スペクトル関数の比較を通して論じる．

第1章では本論に入る前に，時間依存摂動法により得られる光吸収スペクトル関数に関して複素固有値問題の観点から論じ，光子と電子の複合状態の崩壊係数として得られることを示す．

第2章では，両無限の1次元超格子中の不純物原子における内殻光吸収スペクトルのそのスペクトル構造に関して複素固有値問題の観点から論じる．このとき，この光吸収スペクトルに現れる非対称構造と共鳴状態との対応を詳しく示す．また，複数遷移間の干渉によってもたらされ，**Fano profile**として知られる非対称なスペクトル構造についても複素固有値問題の観点から同様に論じ，この非対称構造と共鳴状態そのものが持つ非対称性とは異なることを明らかにする．そして光吸収スペクトルに非対称構造をもたらすメカニズムには2通りあることを示す．

第3章では，前章で得られた共鳴状態と非対称構造との対応に関する知見を用いて，半無限1次元超格子中の不純物原子における内殻光吸収スペクトルのそのスペクトル構造に関して論じる．本モデルでは不純物原子の1次元超格子の片端からの距離を離していくことに応じてスペクトル中のピーク数，そして非対称性が増大する．注目すべき点は，本モデルでは前章で論じた光吸収過程における複数遷移間の干渉が存在しない状況においても**Fano profile**が見られることである．このことは，本モデルにおいて，不純物準位と1次元超格子との間の相互作用が波数  $k$  空間の中で大きな  $k$  依存性を有することに由来する．この  $k$  依存性により，不純物準位を注目系として作られる有効ハミルトニアン<sup>1</sup>の非線形性が増大され，その結果，大きな非対称性を持った複数の共鳴状態が現れる．有効ハミルトニアンは自身の固有値に依存した形になっており，その固有値問題は非線形となっている．得られる共鳴状態の内，不純物準位に対してフェルミの黄金律の意味で摂動論的な通常の共鳴状態とは別に，非摂動論的な共鳴状態（超崩壊状態）が現れる．この状態は通常の共鳴状態に比べ大きな崩壊係数を有し，また大きな非対

称性を有する。本章ではさらにこの半無限系において現れる非対称性と Fano profile との関係についても詳しく議論する。Fano profile は q-factor と呼ばれる因子を用いてそのスペクトル構造の非対称性が論じられている。ここでは、本モデルにおける q-factor を定義し、その対応を示す。

第4章では第I部の結論として全体の総括を行う。

第5章では第I部で扱った光吸収による単一遷移過程での半無限系モデルにおいて、不純物原子が片端より無限遠方に離れている状況で、両無限系とどのように対応するのかの議論を行う。このとき第I部で示したように、両スペクトル関数は異なっており、そして実際のスペクトル形状も半無限系では片端から離すことにピーク数は増大するので、単一のピーク構造を持つ両無限系とは一致しない。さらにピーク強度においても増大するのでそのスペクトル形状は大きく異なる。本章ではこの2つの吸収スペクトル関数が超関数の意味で一致することを示す。

## List of publications

### Journal

- [1] Taku Fukuta, Savannah Garmon, Kazuki Kanki, Ken-ichi Noba, Satoshi Tanaka, Phys. Rev. A **96**, 052511 (2017).
- [2] Roberta Incardone, Taku Fukuta, Satoshi Tanaka, Tomio Petrosky, Lucia Rizzuto, and Roberto Passante, Phys. Rev. A **89**, 062117 (2014).
- [3] Satoshi Tanaka, Roberto Passante, Taku Fukuta, and Tomio Petrosky, Phys. Rev. A **88**, 022518 (2013).

### Refereed International Conference Proceedings

- [1] Taku Fukuta, Tomio Petrosky, Satoshi Tanaka, “Study of Fano Resonance in the Core-Level Absorption Spectrum in terms of Complex Spectral Analysis”, META2017, the 8th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics, July, 2017, Seoul, South Korea.

## 学位論文審査結果の要旨

学位論文提出者氏名： 福田 拓

学位論文題目：

Theory of core-level photon-absorption spectrum in terms of complex spectral analysis

(複素スペクトル解析による内殻光吸収スペクトルの理論)

本研究は、不可逆散逸過程を微視的原理から基礎づける新しい複素スペクトル理論を分光学理論へ適用した先駆的な研究である。不可逆散逸過程は、時間の向きに関して対称な微視的力学原理と本質的に異なり、物理系の時間発展が未来に向かって一方向的に進展する。微視的力学原理に基づきながら、無限自由度を有する物理系の不可逆過程がどのように導かれるかを示すことは、物理学における未解決の根本問題である。これに関して、近年、これまでの量子力学の基本的枠組みを拡張し、散逸過程を力学原理に基づいて統一的に含める定式化として関数空間を拡張ヒルベルト空間にまで広げ、固有値として複素数を取ることを可能とする複素スペクトル理論が提案されている。福田拓君は、この複素スペクトル理論を半導体超格子中に置かれた不純物原子の内殻吸収スペクトルの解析に適用し、系を制御するパラメータに対して系統的に変化する吸収スペクトル形状の由来に対して、複素共鳴状態への直接遷移として解釈できることを初めて理論的に明らかにした。さらに量子遷移干渉の結果生じると考えられてきたファノ型の吸収スペクトル形状の起源について、共鳴状態への遷移の単純な和として解釈できる新しい見方を提示している。

本研究の第1部では、1次元半導体超格子中に置かれた不純物原子の内殻吸収スペクトルの形状に関して、複素スペクトル理論を用いた新しい解釈を提案している。まず最初に、無限に長い半導体超格子中の不純物原子の内殻吸収スペクトルに対する複素スペクトル解析の結果を示した。共鳴状態への直接遷移の吸収ピークの形状が、共鳴状態の規格化定数が複素数になるという特徴を反映し、非対称な形状をとることを明らかにした。さらに、1次元超格子の端点に無限に高いポテンシャル障壁を導入することで、連続状態の固有モードが制限された結果、特異な共鳴状態が出現することを見出した。これまで特異な共鳴状態は非物理的な状態と考えられていたが、福田拓君は、吸収スペクトルの大要は、これらの特異な共鳴状態への直接遷移を含めて初めて説明できることを明らかにし、特異な共鳴状態の存在に関する物理的な意味を与えた。さらに、これらの共鳴状態への遷移に対する非対称型のピークに対して、Fanoプロファイルにおける $q$ -因子を微視的原理から定めることに成功した。

第2部では、さらに、吸収スペクトル構造が原子位置から離れるに従い、共鳴状態の数が増して、最終的に無限系における吸収スペクトルに近づくスペクトル形状の漸近の様相が、超関数として一致することを解析的に明らかにした。これは、1次元系特有の崩壊チャンネルが限定された結果、長距離遠方での環境の変化が必ず他の位置での観測結果に影響をもたらす量子長距離相関の結果であることを示したものであり、興味深い。

以上のように、本研究は、散逸不可逆過程をも含めた新しい量子力学の理論体系の複素スペクトル解析を初めて分光学へ適用し、吸収スペクトルを共鳴状態への直接遷移に分解する新しい見方を提示した意義のある研究である。

本委員会は本論文を学位論文として十分な内容を有しているものとして判断した。

主査 田中 智  
会沢 成彦  
神吉 一樹  
溝口 幸司