

カオスの半古典位相量子化

(東大院・総合文化) 高橋 聡、高塚 和夫

【序】Hamilton カオスは、多原子分子の高励起振動状態や大振幅運動にしばしば現れる、分子ダイナミクスに遍在する現象である。カオスは WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) 近似をはじめとする低次の半古典的手法を破綻させることが知られており、半古典理論におけるこの本質的な欠陥は一般に、振幅因子の発散的性質に由来すると認識されている。このことは、可積分な系に対する EBK (Einstein-Brillouin-Keller) 量子化条件の成功とは明確な対照をなす。図 1 に、カオス領域に適用された、波束に対する半古典自己相関関数の初期値表示の計算例を示すが、相関関数は指数的に発散し、結果得られるスペクトルは量子エネルギーを再現していない。

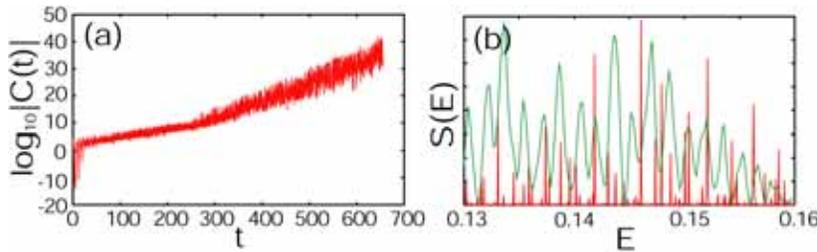


図 1: (a) 初期値表示による半古典相関関数の初期値表示。(b) 相関関数の Fourier 変換から得られたエネルギースペクトル (緑)。量子波束計算の結果 (赤) を再現しない。

本研究で我々は、半古典領域におけるカオスのエネルギー量子化が原理的に、位相の建設的干渉と破壊的干渉のみを用いて可能であり、半古典振幅因子の役割は、それが位相因子ほど振動的な振舞いを示さない限り、実際的には無視できるほど小さいことを示す。

【位相の建設的・破壊的干渉】Ushiyama and Takatsuka[1]の 1次元半古典スペクトル解析を、周期軌道の場合に拡張する。 (q_0, p_0) を出発しエネルギー $E_{cl}(q_0, p_0)$ を持つ軌道のスペクトルは次式で表される。

$$P_{tr}(E_{cl}(q_0, p_0); E) = \int dt R(q_t, q_0, t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(q_t, q_0, t) - i\frac{\pi}{2} M(q_0, q_t)\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} Et\right]$$

$R(q_t, q_0, t)$ は振幅因子である。上式における位相は、標準的な作用積分 S と、関連する Maslov 指数 M から作られる。多数の周期軌道にわたる和 (積分) は、半古典スペクトルの一般形をもたらす。

$$P(E) = \int_{p_0} dq_0 dp_0 P_{tr}(E_{cl}(q_0, p_0); E)$$

$P_{tr}(E_{cl}(q_0, p_0); E)$ の被積分関数の振動特性を調べることで量子化 (共鳴) 条件が導かれるが、 $P_{tr}(E_{cl}(q_0, p_0); E)$ において偽ピークを与える共鳴軌道が多く存在するため、 $P(E)$ よりも多くのピークを持つことは自明である。それらのピークは、他の多くの軌道との破壊的干渉によって打消されなければならない。その結果正しい量子スペクトル線がもたらされる。ここで注意すべきことは、この共鳴条件が、 $R(q_t, q_0, t)$ が軌道に沿って時間の関数として常に有限かつ滑らかに変化し (位相因子に比べて振動的でない) 位相に関する Fourier 展開から分解されると仮定することによって引き出される、ということである。

【振幅因子の無い半古典量子化手法】振幅因子の無い2種類の半古典手法を用いて、古典カオスに対するエネルギーの半古典位相量子化を実行した。我々が用いた手法は、Takatsukaらによって開発された擬相関関数アプローチ AFC-III[2,3]と、半古典エネルギー量子化に対する先駆的な仕事の1つである Heller's frozen Gaussian 手法[4]である。両者は位相因子において大きく異なる。

1. **Amplitude-free quasicorrelation function type III (AFC-III)** : 半古典波動関数 Action Decomposed Function (ADF) [5]を用いて相互相関関数を構築すると、振幅因子を除去することができ、半古典擬相関関数AFC-IIIを得る。位相因子は、古典軌道に沿って計算される作用積分 (Goldsteinの F_2 型) とMaslov指数から作られる。

2. **Heller's frozen Gaussian** : 初期波動関数をGauss波束として準備し、それを幅 ω のGauss波束の重ね合わせで表現して、時間発展した波動関数に対してfrozen Gaussian (FG) 近似を適用した。FG手法を用いて構築された半古典相関関数はMaslov指数を含まないため、多次元カオス系への適用に対して好都合であるが、位相因子は軌道発展の間凍結される波束の幅 ω に依存する。

【数値計算の結果】AFC-III と FG を用いて、同じ初期条件を持つ古典軌道集合から半古典擬相関関数を計算し、エネルギースペクトルを求めた。対象とした系は2次元修正 Hénon-Heiles Hamiltonian であり、この系の混合的な領域に両手法を適用した。

図2に、波束幅 ω を変えて計算したエネルギースペクトルを示す。但しFGの結果に対しては、全ての ω に対して、半古典スペクトルが全体的に一定量シフトされている。図から明らかなように、AFC-IIIの適用においては ω に依存せず量子スペクトルが再現される。またFGの適用においても、適切な ω の選択が量子スペクトルの再現を可能にすることが示唆される。

この結果から、半古典領域におけるエネルギー量子化が実際に、位相の情報のみを用いて実行されることが示された。つまり半古典振幅因子の役割は、厳密な振幅因子が利用可能であるとしても、この振幅が極めて振動的な性質を持たないならばその寄与は無視できるほど小さい。理論の詳細ならびに他の数値計算結果については、当日報告する。

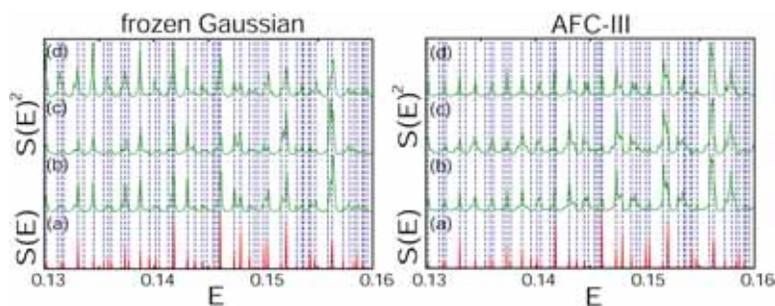


図2: ω の値を変化させたときの半古典スペクトルの比較。(a)は量子波束計算から得られたスペクトル。 ω の値は(b)(c)(d)に対しそれぞれ、1.0、2.0、0.5である。FGスペクトルは全体的に一定量シフトされている。

参考文献

- [1] H. Ushiyama and K. Takatsuka, *J. Chem. Phys.* **122**, 224112 (2005).
- [2] K. Takatsuka, S. Takahashi, Y. W. Koh, and T. Yamashita, *J. Chem. Phys.* **126**, 021104 (2007).
- [3] S. Takahashi and K. Takatsuka, *J. Chem. Phys.*, accepted for publication.
- [4] E. J. Heller, *J. Chem. Phys.* **75**, 2923 (1981).
- [5] A. Inoue-Ushiyama and K. Takatsuka, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1404 (1997); *Phys. Rev. A* **59**, 3256 (1999).