4P100

波束のダイナミクスと南部力学

（東京都市大 知識工）　堀越篤史

Wave packet dynamics and Nambu mechanics

(Tokyo City University)　Atsushi Horikoshi

多自由度量子系の動的な性質を数値的に調べる場合，波動関数 $\psi(t)$ や演算子 $\hat{A}(t)$ の時間発展をダイレクトに追うことは一般に困難であるため，何らかの近似が必要になる。演算子の期待値 $\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \psi | \hat{A}(t) | \psi \rangle$ の時間発展を追う量子ハミルトン力学 [1] はそうした近似的ダイナミクスの一つであり，その基礎方程式はハイゼンベルク方程式の期待値

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \left[\hat{A}(t), \hat{H} \right] \rangle$$

から順次得られる無限個の方程式の系列を，適当なところでトランケートすることにより得られる。例えば非調和振動子 $\hat{H} = (1/2m)\hat{p}^2 + (m\omega^2/2)\hat{q}^2 + (g/3)\hat{q}^3$ の場合，方程式は

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle \hat{q}(t) \rangle &= \frac{1}{m}\langle \hat{p}(t) \rangle \\
\frac{d}{dt}\langle \hat{p}(t) \rangle &= -m\omega^2 \langle \hat{q}(t) \rangle - g\langle \hat{q}^2(t) \rangle \\
\frac{d}{dt}\langle \hat{q}^2(t) \rangle &= \frac{1}{m}\langle \hat{q}(t)\hat{p}(t) + \hat{p}(t)\hat{q}(t) \rangle \\
&\vdots
\end{aligned}$$

と続くが，2 番目の式で $\langle \hat{q}^2 \rangle \simeq \langle \hat{q} \rangle^2$ とすれば 2 変数 $(\langle \hat{q} \rangle, \langle \hat{p} \rangle)$ の力学が得られる。これは量子ハミルトン力学の最低次の近似であり，古典ハミルトン力学そのものである。また，3 番目の式で $\langle \hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q} \rangle \simeq 2\langle \hat{q} \rangle \langle \hat{p} \rangle$ とすれば量子ハミルトン力学の二次の近似である 3 変数 $(\langle \hat{q} \rangle, \langle \hat{p} \rangle, \langle \hat{q}^2 \rangle)$ の力学が得られ，これは frozen gaussian 近似 [2] と呼ばれる波束の半古典ダイナミクスに対応する。量子ハミルトン力学は古典ハミルトン力学の相空間を拡張する形で量子効果を取り入れていくものであり，二次の近似の段階で零点振動やトンネル効果といった重要な量子効果を含んでいることが分かっている [1]。

一方，古典ハミルトン力学には様々な拡張が存在する。1973 年，南部陽一郎はリウヴィルの定理を指導原理として古典ハミルトン力学を一般化し，正準 N 重項 x_i を変数とする南部力学を提案した [3]。南部力学系は $N-1$ 個の「ハミルトニアン」を持ち，その基礎方程式は

$$\frac{d}{dt}f = \frac{\partial(f, H_1, H_2, \cdots, H_{N-1})}{\partial(x_1, x_2, \cdots, x_N)}$$

で与えられる。例えば正準 3 重項 (x, y, z) の場合，方程式は

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}x &= \frac{\partial(H, G)}{\partial(y, z)} \\
\frac{d}{dt}y &= \frac{\partial(H, G)}{\partial(z, x)} \\
\frac{d}{dt}z &= \frac{\partial(H, G)}{\partial(x, y)}
\end{aligned}
$$

となる。ここで H，G は「ハミルトニアン」である。南部力学は複数の「ハミルトニアン」を持つユニークな力学であるが，具体例はオイラーのコマなど少数にとどまり，その応用は限られたものであった。

我々は最近，古典的な複合変数（q^2 など）の時間発展が南部力学により記述されることを示し [4]，また二次の量子ハミルトン力学が南部力学により記述されることを示した [5]。図 1，図 2 に，非調和振動子の例を示す。初期状態としてガウス波束を用意して時間発展させると，波束はポテンシャル障壁をトンネルして崩壊していくが，南部力学のダイナミクスはその様子を定性的に正しく再現していることが分かる。今回はその他の例も含め，南部力学と波束のダイナミクスの関係について議論する。

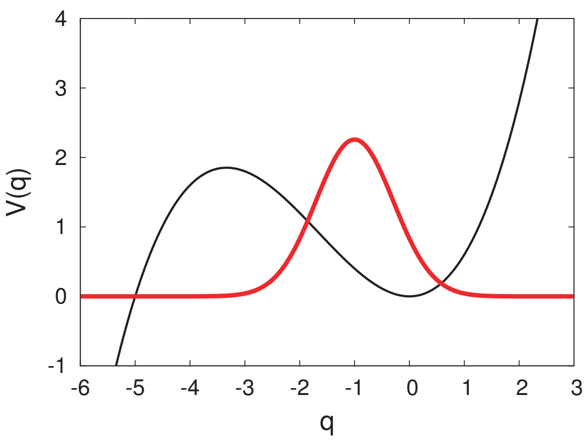

図 1　ポテンシャルと初期ガウス波束

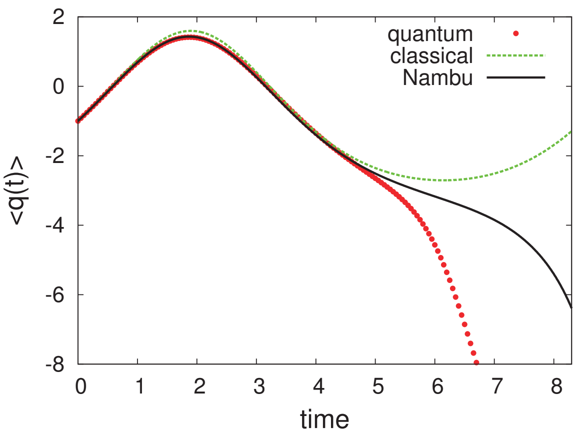

図 2　座標の期待値 $\langle \hat{q} \rangle$ の時間発展

[1] O. V. Prezhdo, Theor. Chem. Acc. **116** (2006) 206.
[2] E. J. Heller, J. Chem. Phys. **75** (1981) 2923.
[3] Y. Nambu, Phys. Rev. D**7** (1973) 2405.
[4] A. Horikoshi and Y. Kawamura, Prog. Theor. Exp. Phys. (2013) 073A01.
[5] A. Horikoshi, in preparation.