

3P125 半古典スペクトルの新しい計算法と古典軌道によるスペクトルの起源の解明

(東大院総合) 牛山 浩, 高塚 和夫

【はじめに】 半古典量子化のメカニズムを詳細に調べ、それに基づいた多自由度系の半古典スペクトルの計算方法を提案する。また、本方法の利点を生かして、半古典固有状態の起源を古典軌道の言葉で明らかにする。

【半古典量子化のメカニズム】 最初に、1次元モーセ系を取り上げ、その半古典スペクトルを自己相関関数のフーリエ変換として求める。半古典自己相関関数の計算方法としては、Amplitude-Free quasi-correlation function type II (AFC-II) [1]を採用する。個々の軌道からの寄与を詳細に調べるため、フーリエ変換と初期値 $q_0(E)$ での和の順番を入れ替えたもの

$$P(E) = \int dt C(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right) = \sum_{q_0} P_{\text{single}}(E)_{q_0(E)}$$

を考える。ここで、 $P_{\text{single}}(E)$ は、一本の古典軌道から計算された自己相関関数 (Single correlation function, SCF) である。図1に、エネルギー E_{cl} を持つ古典軌道が、(a)量子化されるエネルギー ($E=5.528$)、(b)量子化されないエネルギー ($E=7.210$) におよぼす寄与の様子を示した。図1(a)から、量子化されるエネルギーに関しては、そのエネルギーを持つ軌道からの寄与が大きく、それ以外のエネルギーを持つ軌道からの寄与は、他のエネルギーを持つ軌道と互いに打ち消し合うことが分かる。また、図1(b)から、量子化されないエネルギー領域では、そのエネルギーを持つ軌道自身からの寄与も小さいことも分かる。このことは、相関関数のフーリエ変換の定常位相条件からも得られる[2]。

また、図2(a)に、量子化される一本の軌道だけから計算されるパワースペクトルを、図2(b)に、AFC-IIのフーリエ変換から得られるパワースペクトルを示した。図2(a)から、量子化される軌道は、自分自身との干渉の結果、正しいスペクトルだけでなく、その倍音として間違っ場所にもスペクトルを立てることが分かる。また、図2(b)では、図2(a)の間違ったスペクトルは、他の軌道との相互作用で消えている。すなわち、量子化されない軌道は、自分自身との干渉で間違っスペクトルも与えるが、他の軌道との干渉で、正しくないスペクトルを消す役割もあることが明らかになった。

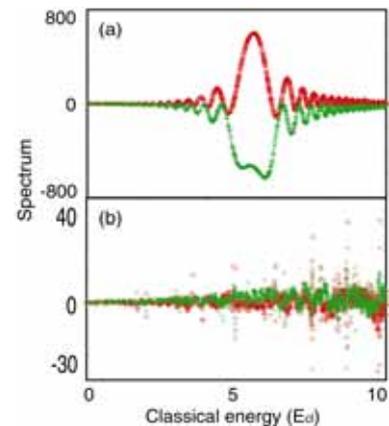


図1 SCFの実部(赤)と虚部(緑)、(a) $E=5.528$ 、(b) $E=7.210$ に対応するスペクトルへの寄与を、古典軌道の持つエネルギーの関数として示した。

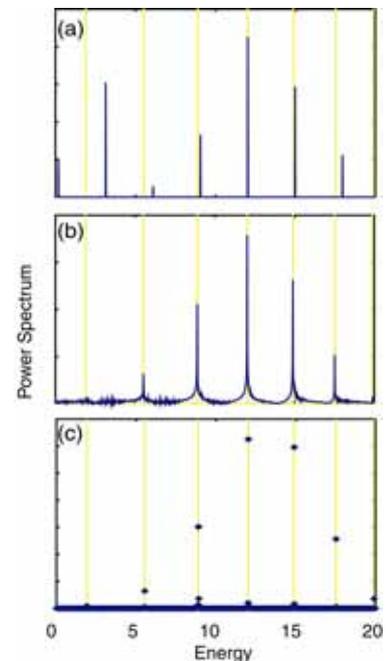


図2 (a) $E=5.528$ の古典軌道のみから計算されるスペクトル、(b) AFC-IIによるスペクトル、(c) 本方法によるスペクトルを解析解(黄色)と一緒に示した。

【新しい計算方法の提案】 こうした事実に基づき、間違っただスペクトルを現れにくくし、正しいスペクトルを強調する半古典スペクトルの計算方法を提案する。エネルギー E でのスペクトルへは、エネルギー $E = E_{cl}$ を持つ古典軌道からの寄与が大きいので、以下のような計算方法が有効だと考えられる。

$$\tilde{P}(E) = \int dt C(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} Et\right) = \sum_{q_0} P_{\text{single}}(E)_{q_0(E)} f(E, E_{cl})$$

ここで、 $f(E, E_{cl})$ はウインドウ関数である。こうすることで、量子化に寄与する軌道だけが強調され、自分自身との干渉の結果生まれるその倍音や間違っただスペクトルは強制的に消される。ウインドウ関数としてガウス関数などが考えられるが、ここでは、その極限として関数 $f(E, E_{cl}) = \delta(E - E_{cl})$ を取った場合を考える。この場合、スペクトルを構成する古典軌道を 1 本だけ抜き出すことができる。この方法で計算した 1 次元モース系のスペクトルを図 2(c) に示す。量子固有値を再現しているのが分かる。

【次元問題への適応】 次に、この方法をジクロロトロポロンの 2・4・6 次元モデルに適応した。図 3 に 2 次元モデルでの本方法によるスペクトル、量子計算によるスペクトルを示した。本方法では、トンネル軌道を考慮していない為、スペクトルの分裂を再現できない。そのため、分裂した 2 つの量子スペクトルの間に 1 本だけ半古典スペクトルが立つ。本方法は、量子計算をきちんと再現していることが分かる。また、上述のように本方法では真の固有値に最も寄与する 1 本の古典軌道を抜き出すことができる。図 4 に、 $n=3$ のスペクトルに最も寄与する古典軌道と、対応する固有関数を示した。この軌道は、トーラスの周りをめぐる軌道で、EBK では量子化されないタイプの軌道である。この領域では、弱いカオス軌道が量子化に寄与していることが明らかになった。

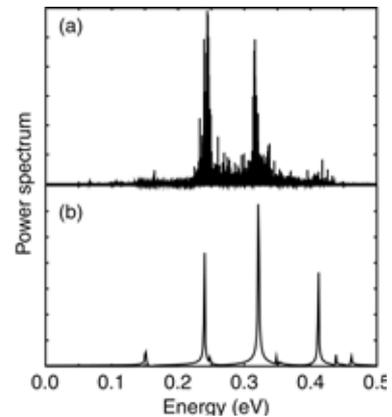


図 3 (a) 本方法、(b) 量子計算によるスペクトル。

【終わりに】 半古典スペクトルができる仕組みを詳細に調べ、それに基づいた新しい半古典スペクトルの計算方法を提案し、数値計算により、その有効性を示した。特に、対応する固有関数を古典軌道の言葉で表現し、その軌道の性質と固有関数の性質の関係を探った。こうした研究は、化学反応はもとより、量子カオスやスカーなどの研究にも役立つ。

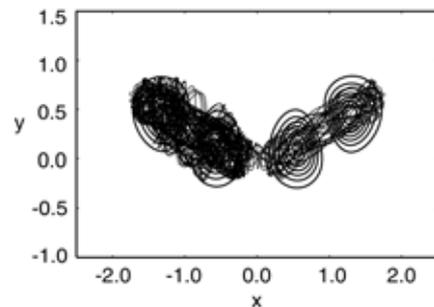


図 4 固有関数と対応する古典軌道。

【参考文献】

- [1] K. Hotta and K. Takatsuka, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 4785 (2003).
- [2] A. Inoue-Ushiyama and K. Takatsuka, Phys. Rev. A **60**, 112 (1999).