

3D12

クーロン 3 体系の全粒子半古典量子化と Born-Oppenheimer 近似の妥当性

(東大院総合文化) 高橋 聡、高塚 和夫

【序】Born-Oppenheimer (BO) 近似は、現代分子科学の基礎の 1 つをなす重要な近似である。Born and Oppenheimer [1]によると、電子の質量と原子核の平均質量を m_0 および M としたとき、BO 近似からのずれが m_0/M の 4 乗根に比例すると見積もられ、BO 近似は非常に良い近似であることが知られている。本研究では、2 核 1 電子系である水素分子イオンをはじめとするクーロン 3 体系を対象として、負電荷粒子の質量を変化させた場合の、BO 近似から見積もられるエネルギーからのずれを、理論ならびに数値計算を用いて半古典的に解析し、BO 近似の妥当性について検討した。

【対象とする系】本研究では 3 体の運動を、負電荷をもつ質点が、2 つの核 (陽子) を結ぶ軸の垂直二等分線上を振動する、特殊な振動運動に限定した。運動の様子を図 1 に模式的に示す。核が運動することを許せば、負電荷粒子の振動と核間振動の両方が観察されることになり、振動の時間スケールの差は負電荷質量 m と核質量 M の比 m/M に依存して変化する。

負電荷の質量を、電子 e^- 、ミューオン μ^- 、反陽子 \bar{p} など現実の粒子の質量を含むさまざまな値に変化させる。核を固定した場合、各負電荷質量に対する 1 自由度振動運動から BO 曲線が得られ、BO 曲線上の振動準位エネルギー (BO 振動エネルギー) を計算することができる。核を動かした場合の 2 自由度振動運動の振電エネルギーを計算し、BO 振動エネルギーからのずれを計算する。

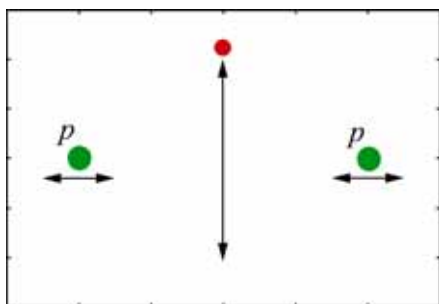


図 1: 3 体の振動運動の模式図。赤で表される負電荷粒子の質量を、電子から反陽子まで変化させる。緑は核 (陽子) を表す。

【理論と数値計算】本研究で用いた理論と数値計算について概略する。

[BO 振動エネルギーの計算] 核を固定した場合の BO 曲線、ならびに BO 振動エネルギーの計算には、Bohr-Sommerfeld 量子化を適用した。

[振電エネルギーの計算] 振電エネルギーの量子化には、古典力学的スケール変換不変性を取り込んだ半古典擬相関関数である、renormalized AFC [4]を用いた。以下 renormalized AFC について簡単に説明する。

クーロン相互作用系のような、古典力学的スケール変換不変性をもつ系において、半古典波動関数を構成する古典軌道集合に対して適切なスケール変換を施し、変換パラメータで積分することを考える。その結果得られる半古典波動関数と、それから計算される自己相関関数はスケール不変となる。この操作は既存の半古典波動関数への適用が可能であり、これによって 1 本の軌道と、大きさの階層が異なるそれ自身の無限個のコピーとの間に生じる干渉が効果的に取り込まれることになる。

この操作を、半古典波動関数 Action Decomposed Function(ADF) [2]を出発点として導出される、振幅項の無い半古典擬相関関数 amplitude-free quasicorrelation function type II (AFC-II) [3]に対して行い、renormalized AFC を得る。本研究ではトーラス上の3体運動に対してこの手法を適用したが、AFC-II は可積分系・カオス系の区別なく適用できることが確かめられているため、将来的にはクーロン3体カオスへも適用可能である。

【結果】例として、負電荷粒子の質量を電子の50倍、206倍としたときの、BO振動エネルギーと振電エネルギーを図2に示す。予想されるように、負電荷質量の増加に伴ってBO振動エネルギーからのずれは顕著になっていく。

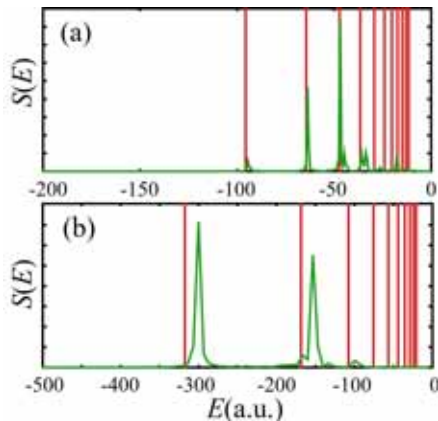


図2：負電荷粒子の質量を電子の(a)50倍(b)206倍にしたときの、BO振動エネルギーならびに振電エネルギー。
【赤】Bohr-Sommerfeld量子化により求めたBO振動エネルギー。【緑】renormalized AFCを適用して求めた振電エネルギー。

図3に、振電エネルギーのBO振動からのずれ D を、質量比 m/M に対して両対数プロットしたものを示す。図中プロットを直線でフィットしているが(緑線)、 m/M と D の間には関係式

$$D \propto (m/M)^{3/2}$$

が成り立っていることがわかる。これはBorn and Oppenheimerの評価から得られる結果 $((m/M)^{1/4}$ で摂動展開)とは大きく異なっている。クーロン系のもつ古典力学的スケール変換不変性と半古典理論を用いた、この結果に対する解析の詳細については、当日報告する。

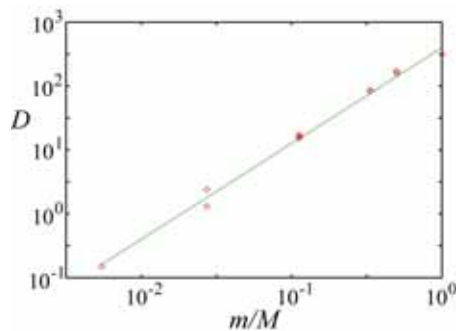


図3：質量比 m/M とBO振動エネルギーからのずれ D の関係。同じ質量比に対して複数のプロットが存在するのは、振電エネルギーの算出がFFTの解像度に依存するためである。緑は直線によるフィットであり、傾きは $3/2$ である。

参考文献

- [1] M. Born and R. Oppenheimer, Ann. Phys. **84**, 457 (1927).
- [2] K. Takatsuka and A. Inoue, Phys. Rev. Lett. **78**, 1404 (1997); A. Inoue-Ushiyama and K. Takatsuka, Phys. Rev. A **59**, 3256 (1999).
- [3] K. Hotta and K. Takatsuka, J. Phys. A **36**, 4785 (2003).
- [4] S. Takahashi and K. Takatsuka, Phys. Rev. A **70**, 052103 (2004).