論文の内容の要旨

論文題目　多自由度カオスの半古典量子化

氏名　堀田　浩司

カオス領域の半古典エネルギー量子化は、量子-古典対応を考える上での基礎科学的な意味合いにおいて重要であるとともに、多自由度系の量子化の有効理論として実用的にも非常に重要である。例えば、分子の高励起振動状態は多自由度カオスだが、量子力学で純粋に計算することは現在のところ不可能であり、半古典的に計算が可能であるならばその理解に多大な寄与が出来る。カオスの半古典量子化は Einstein がトーラスの量子化（後に EBK 量子条件として整備される）を提案したときよりその困難さが指摘されていた。1970 年頃に登場した Gutzwiller の Periodic orbit theory はカオス領域に無限個ある周期軌道の情報を足し合わせることにより、状態密度の半古典表現が得られることを示し、カオス領域の半古典量子化に新しい世界を開いた。この Periodic orbit theory が世に出て以来、様々な研究が行われてきたが、理論が持つ二つの大きな問題は解決されていない。一つは量子化すべき状態密度を表す級数が一般に絶対収束せず発散してしまうということ。もう一つが一般の系では周期軌道を全て見つけるのが難しいという点である。その困難にも関わらず現在までに二自由度系（主にビリアード系で代表される、境界条件がカオス性を引き起こす弾道（バリスティック）系）において部分的な成功を収めた。しかし、それ以外の多自由度系ではこの理論は絶望的である。他の半古典量子化の方法として、周期軌道のような特定の軌道に注目するのではなく、半古典 Feynman kernel を用いた自己相関関数を使い、それを Fourier 変換することでエネルギースペクトルを求めるという方法が知られている。これには root search と caustic 点で発散するという問題があったが、Miller が提案した Initial Value Representation (IVR) という形式を取ることで回避された。しかし、この IVR も振幅項がカオス領域では指数関数的に増大するという致命的な困難を持つ。90 年代には IVR の形式を特定の系などに特化した様々な派生形式及びその理論的拡張が研究されたが、この振幅項の問題は解決されてはいない。このような状況

を踏まえて、カオス領域のエネルギー量子化を考えるには、発散しない理論形式が希求されている。そのために第一章では、以下のような研究を行った。

（1）IVR で問題となっていた振幅項の問題を回避するべく Takatsuka によって導入された振幅項のない相関関数（Amplitude-Free quasi-Correlation Function type I : AFC-I）を数値計算してその有効性を検証した。AFC-I は折り返し軌道（turn-back orbit）という特殊な軌道のみを使うため振幅項が 1 のまま保持され、カオス領域にも適応できることが期待される。turn-back 性は、初期運動量をゼロにすれば座標の時間反転対称性より保証されるので、周期軌道と違い簡単に生成できる。具体例として二自由度系の修正 Hénon-Heiles ポテンシャルに適用して、量子波束によって求めたエネルギースペクトルと比較した。修正 Hénon-Heiles は古典系において無限に逃げていく trajectory が存在せず、また低エネルギーでは近可積分、高エネルギーでは強カオスを示す系である。その結果、(i) 正しいスペクトルが高い精度で得られる、(ii) ただし、ノイズが現れ偽スペクトルが現れる場合があり、強カオスにおいてはそれが顕著となる、ということが分かった。

（2）AFC-I においてノイズが出てくる原因を探るために、積分変数の停留位相条件をさらに考えると、折り返し軌道の中でもある特定の周期を持つ軌道がもっとも寄与することが分かった。振動積分において停留値を取る軌道以外の打消し合いが収束がうまくいくほど処理されていないために、このノイズがでてくると考えられる。このため周期軌道の情報のみを効率よくサンプリングするようにすればこのノイズが消えると期待できる。しかし、厳密な周期軌道を取ることを課すならば、Periodic orbit theory と同様の問題が起こってしまう。そこで、厳密な周期軌道ではなく、その周期において元の点の近傍に戻ってくるという条件（弱い周期条件）を課す。停留位相条件は Planck 定数がゼロの時には厳密な周期軌道を要求するが、実際には有限値を取っているため必ずしも厳密な周期軌道ではなくてもよい。AFC-I にこの条件を課した相関関数を Amplitude-Free quasi-Correlation Function type II (AFC-II) と名付ける事とする 。AFC-II を用いて、AFC-I と同様の系に適用した結果、可積分系、近可積分系、強カオス系の区別無く高精度でエネルギースペクトルを求めることが出来た。図 1 に強カオスの時の結果として、(a) 適用した系の Poincaré 面、(b) AFC-II によるエネルギースペクトル (赤線が AFC-II によるスペクトルで、緑線が量子波束によるスペクトルである) を示した。以上のように、AFC により可積分系、強カオス系の区別無く半古典量子化が可能となり、多自由度カオスの量子化への新しい道が開けた。

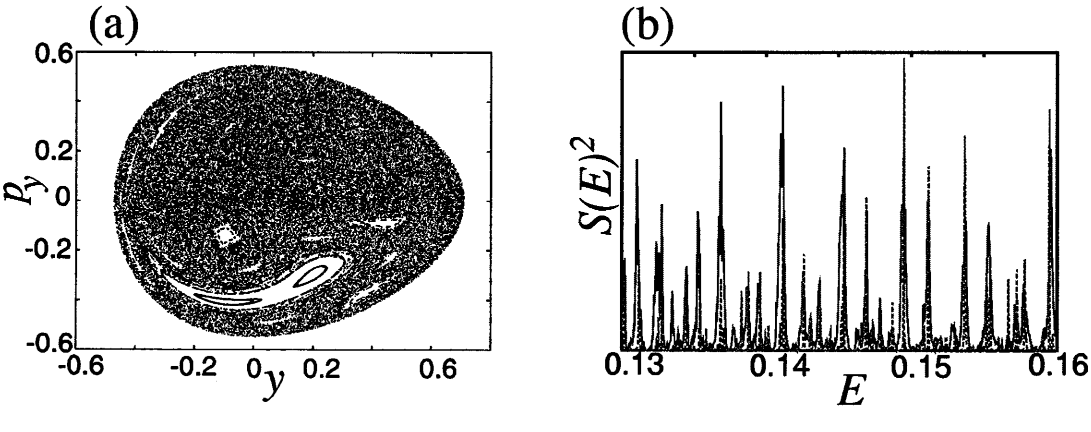

図 1: (a) AFC-II を適用した強カオスでの Poincaré 面。(b) AFC-II によるエネルギースペクトル。（赤線： AFC-II、緑線：量子波束）

第二章では、AFC-II に非常に単純な手順で量子論的離散対称性を入れることを行った。量子力学における対称性の議論は、非常に明快であるが、対する半古典論では決して明快ではない。そのため、EBK 量子化 、Gutzwiller の periodic orbits に対称性を組み込む研究がなされている。最近では、Bose-Einstein 凝縮などを計算するために経路積分を扱い MD シミュレーションの応用例（セントロイド経路積分など）として Bose/Fermi 系の粒子置換を表わす離散対称性を盛り込むものが研究されている。これらの研究に共通していることは、どれもダイナミクスのレベルで対称性をいれているということである。我々はそれらより非常に単純な手順で、AFC-II に離散対称性を導入する。この手順の特徴は、ダイナミクス自体は通常のまま計算し、自己相関関数を取る時の計算に対称性の効果を盛り込んだことである。量子力学の波動関数に対称性を入れるときの操作を考えるならば、寧ろこちらの方法が自然である。AFC-II に組み込んだのは、発散する振幅項がない（カオス系でも相関関数が発散しない）ことにより、数値計算での検証がしやすいためである。同様の操作は、他の半古典論（例えば IVR ）でも行える。この操作の有効性を調べるために、置換対称性のある系にこの対称性を組み込んだ AFC-II を適用して 、エネルギースペクトルを検証した。その結果、置換対称性が上手く反映されていることを示した。図 2 にその結果を示した (赤線が AFC-II によるスペクトルで、緑線が量子波束によるスペクトルである)。Boson （置換対称）と Fermion（反対称）ではっきりと違いが出ている。これはダイナミクスにおける処理ではなく、相関関数のレベルで、対称性の効果を入れればよいという意味で画期的な結果である。

本研究により、半古典理論に新しい路が開けた。

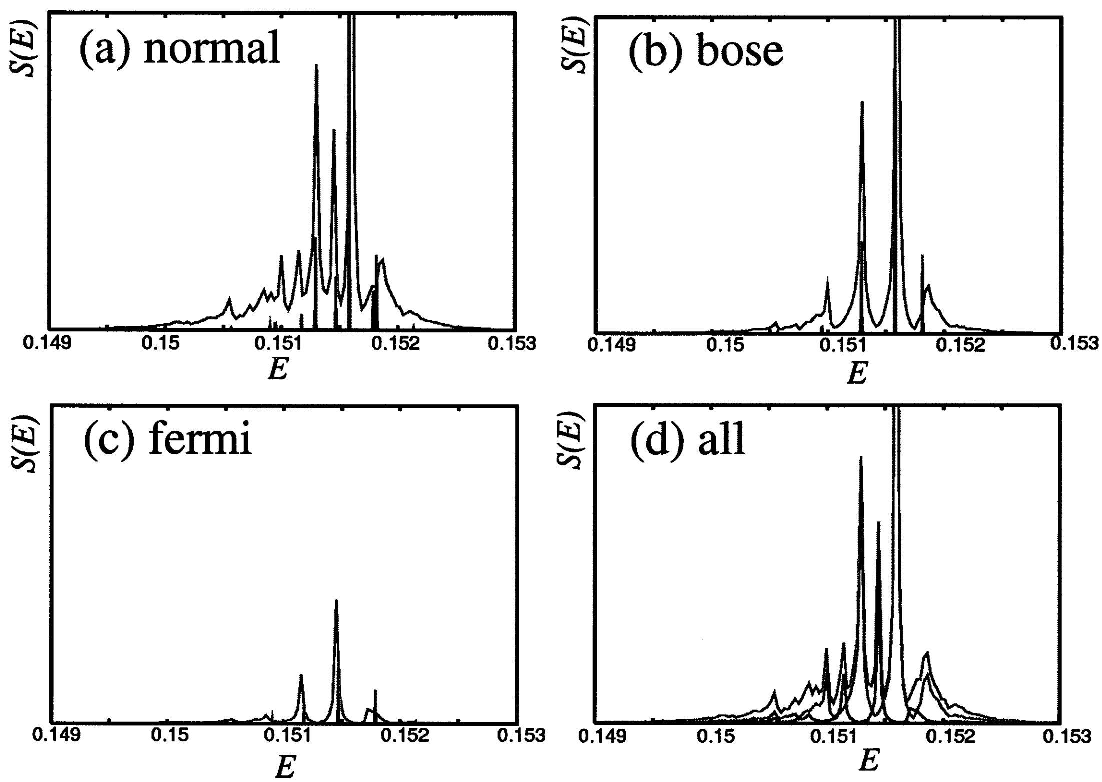

図 2: (a) 対称性を組み込んでいない場合。(a) Boson のエネルギースペクトル。(b) Fermion のエネルギースペクトル。（赤線： AFC-II、緑線：量子波束）(d) (a)-(c) の AFC-II のスペクトルを重ねたもの。