

## 序

本論文は多次元カオスの半古典量子化の理論構築とその数値的検証を扱ったものであり、内容は、2章に分かれている。第1章では、カオスにおける量子化の困難が歴史的および数学的な背景とともに解説された後、振幅項の無い半古典的擬相関関数が提案されており、その強いカオス系に適用されて数値的検証がなされている。この理論は、万能とはいえないものの、従来不可能であったカオスの量子化に成功しており、その単純な理論的構成により、分子振動のように多次元の問題に適用が可能であることが示されている。第2章では、従来半古典力学が不得手としていた量子力学的対称性の単純ではあるが新しい試みが提案され、数値的検証がなされている。対称性を持つ分子の振動スペクトルや置換対称性を持つ同種粒子系の量子スペクトルは、対称性を考慮した理論でなければ正しい値を予言することができないし、スペクトルの帰属もできない。本論文は、この問題に一定の解決策を示しそれが成功していることを明らかにしている。

## 研究の背景と目的

カオス領域での半古典的なエネルギー量子化は、Einstein がトーラスでの量子化（後に EBK 量子条件として整備される）を提案した 1917 年よりその困難さが指摘されていた。1970 年頃に登場した M. 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で、状態密度の半古典表現を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。一つは状態密度を表す級数が一般に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。現在までに 2 自由度系（主に弾道系）において、さまざまな研究が行われているが、それ以上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 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。これは、W. H. Miller が提案した Initial Value Representation (IVR) という形式に基づいている。しかし、この IVR も振幅項がカオス領域では指数関数的に発散するという問題は残ったままである。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、発散しない半古典力学の新しい理論形式が望まれていた。

また、半古典力学は、通常、骨格となるダイナミクスとして古典力学を用い、その上に量子位相の情報を乗せていくという理論構造をとっているため、どのようにして量子力学対称性を取り込むのが長年の課題であった。従来のほとんど全ての研究は、量子対称性が古典運動に如何に影響を与えてそれを変形させるか、という観点からなされている。これ

らは理論的に興味深いものの実用的ではなく、新しい方法論の提案が望まれていた。

#### 論文の内容と意義

第1章、第1節では、上に述べた I V R で問題となっている指数関数的に増大する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) の検討がなされている。AFC-I は折り返し軌道 (Turn-back orbit) という特殊な軌道に注目することにより振幅項が1のままになるので、カオス領域にも適応できることが期待された。折り返し軌道は、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障されるので、周期軌道と違い簡単に生成できる。検討の結果、(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、ということを明らかにしている。第2節では、これを受けて、AFC-I においてノイズが出る原因が解析され、折り返し軌道の中でも周期性を持つ軌道の寄与を正しく考慮する必要性が明らかにされた。しかしながら厳密な周期軌道を取ることを課すならば、Gutzwiller の Periodic orbit theory と同様の陥穽に落ち込んでしまうことは明らかである。そこで、堀田氏は、必ずしも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) を課すことを提案し、こうして構成された擬相関関数を Amplitude-Free quasi-Correlation Function type II (AFC-II) 呼んだ。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明らかにされている。このようにして、強カオス系での半古典量子化に成功しており、量子カオスの研究史上画期的な成果であるといえる。第3節では、さらに数値的検証を進め、理論的の適用限界を明らかにしている。

第2章では、半古典力学によるエネルギー量子化の理論の枠組みの中に、如何に量子力学的対称性を考慮するかという方法論が提案されている。古典力学と量子力学では対称性の理論構造が異なる上、同種粒子 (フェルミ粒子やボース粒子) に適用されるべき置換対称性のように古典論には全く存在しないものもある。しかし、一方で量子エネルギーを計算して実験値を解釈したり予測する研究領域では、対称性を考慮していない理論には意味が無い。こうして、対称性の問題は、半古典力学の中で大きな問題であり続けた。堀田氏は、本学位論文において、簡便に対称性を取り扱う方法論を提案している。実際この方法は、明晰かつ簡単で、数値的検証に良く耐え、量子論で計算した値を見事に再現している。この方法により、半古典論における対称性の研究は飛躍的に進み、この理論がその基準的な役割を占めることになるであろう。

以上の二点の理論は、簡便性という点で共通しており、分子のダイナミクスのように多次元で複雑な問題にでも適用できるという特徴を持つ。半古典力学、量子カオスのみならず、分子科学に対しても大きな寄与を為すものである。

なお本論文は、高塚和夫教授との共同研究であるが、論文の提出者が主体となって理論解析を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

以上、本審査委員会は博士 (学術) の学位を授与するにふさわしいと認定する。