双曲型ビリアード系における
周期軌道と半古典量子化

東工大理　清水　寧　早大理工　原山卓久

概要
束縛系（２次元カオティックビリアード系）を用いて、周期軌道の情報から量子準位を半古典的に計算した結果を報告する。その際 Gutzwiller 公式から得られるゼータ関数に対して、近似公式（Riemann-Siegel 類似公式）を採用し、その有効性を確かめた。目的は諸公式が半古典的に量子準位をどの程度よく再現するかという技術的な問題の背後にある物理的根拠の詳細について理解することである。

１．モデルの紹介

１－１．古典力学的性質

ここで諸公式の有効性を確認するためのモデル系として、図１のような３つの円弧 AB BC CA から構成される強い混合性を有する (Kolmogorov 系) ２次元のビリアード系を取りあげる。この系では $\{0,1,2\}$ からなる周期的シンボル列に対して、対応する素周期軌道が１個以下存在するので、数え落しなく周期軌道を探索するのが容易である。（但し、連続する同じシンボルを含む周期列は除く）さらにシステムパラメータα_1とα_2を固定しながら、$\alpha_0(=\frac{\pi}{\alpha})$ を変化させると、系のトポロジカルエントロピー h がα_0によって図２のように変化するので、不安定性をかえながらの数値実験が可能である。周期軌道の探索には Newton 法を用いた。

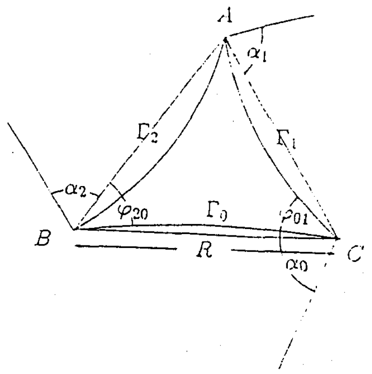


図1

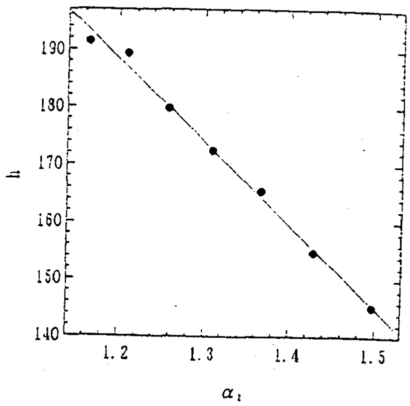


図2

１－２．量子力学的性質

この系について境界要素法により Schrödinger 方程式を解いて１０００個のエネルギー固有値を得た。エネルギー固有値の最近接準位間隔分布 $P(S)$ を計算すると、（図 3a）の実線で示す Wigner

分布にフィットし、スペクトル硬度$\Delta_3(L)$を求めると（図 3b）相関レンジLに対して、対数的な依存性をもつ。つまり典型的な「量子カオス」系と同様な性質があると予想される。

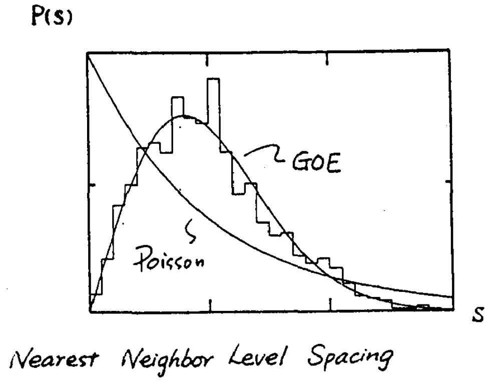


図 3(a)

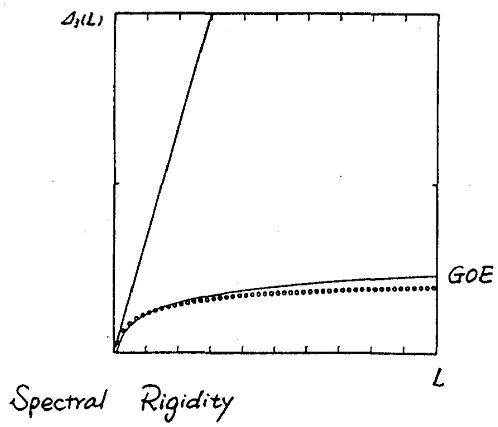


図 3(b)

2 半古典的解析

2－1.Gutzwiller 公式

Gutzwiller 公式は状態密度

$$d(E) = \sum_n \delta(E - E_n) = -\frac{1}{\pi} Im Tr \frac{1}{E - \hat{H}} = \bar{d}(E) + \tilde{d}(E)$$

の半古典表現を古典周期軌道γの安定性 A_γと作用 S_γ によって

$$\tilde{d}(E) \simeq Re \sum_\gamma \frac{T_\gamma}{\pi\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{in(\frac{S_\gamma}{\hbar} - \frac{\nu_\gamma}{2}\pi)}}{\sqrt{|2 - Tr M_\gamma^k|}}$$

のように与える。具体的には、2次元ビリアード系における状態密度 d(E) の半古典表式は

$$\tilde{d}(E) \simeq \frac{1}{\pi\hbar} Re \sum_\gamma \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m l_\gamma}{p} \frac{e^{ik(\frac{p l_\gamma}{\hbar} - \frac{\nu_\gamma}{2}\pi)}}{\sqrt{|2 - Tr M_\gamma^k|}}$$

となる。

ここで$\bar{d}(E)$は平均状態密度、γ:素周期軌道の index、ν_γ:Maslov index、m:質点の質量、$p(=\sqrt{2mE})$:質点の momentum、k:素周期軌道の繰り返し数 l_γ:周期軌道γの長さ、M_γ:周期軌道のモノドロミー行列である。長さ零の軌道の寄与による平均状態密度の項は拡張された Weyl の規則より与えられる。

2－2.Gutzwiller 公式の適用

古典カオスの直接の結果として現れる現象についての因果関係を解析する上で半古典論は避けて通れないポイントである。Gutzwiller による跡公式は状態密度の振動部分についての半古典公

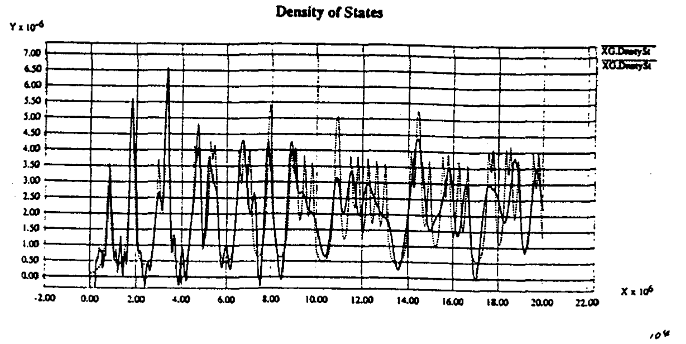
式として、その有効性が、様々なカオス系で検証されている。[Gutzwiller1982,Wintgen 1988] その一方、周期軌道の数が指数関数的に増大するために無限和と振幅因子の競合の結果、Gutzwiller 公式は絶対収束しないという難点があることも指摘されている。(Eckhardt and Aurell 1989) このことは、図 4(a)(b) に示されるように高励起状態に関して、個々のエネルギー準位を解像しないという現象として現れ、これを回避するためには、適当な収束因子をかけることとなる。(ここでは Lorenzian smoothing とする。)

$$\tilde{d}_\epsilon(E) = \sum_n \frac{\epsilon}{(E-E_n)^2+\epsilon^2}\frac{1}{\pi} \simeq \frac{1}{\pi\hbar} Re \sum_\gamma \sum_{k=1}^{\infty} \frac{m l_\gamma}{p} \frac{e^{ik(\frac{p l_\gamma}{\hbar} - \frac{\nu_\gamma}{2}\pi)}}{\sqrt{|2-TrM_\gamma^k|}} e^{-k\frac{\epsilon m}{\hbar p} l_\gamma}$$

この収束因子の大きさは系固有の性質である力学的エントロピーによって決まる。つまり力学的エントロピーによって決まる収束因子が、状態密度の解像度を決めている。(a)(b) はそれぞれϵが (a)10^4(b)10^5 の場合である。実線が Gutzwiller 公式の結果で、破線が境界要素法で求めた量子準位に Lorenzian をかけたものである。実線と破線のピークの対応をみると、(a) の場合は、低いエネルギーが見えなくなってしまっている。(b) の場合はある程度のエネルギーまでは対応がつくが、すぐに個別の準位との対応が崩れてしまう。

$$\epsilon > \frac{\hbar p}{m}(h - \frac{\bar{u}}{2})$$

h はトポロジカルエントロピー、$\bar{u}$は M_γ^kの固有値 $e^{\bar{u}}$ (>1) である。以下では、Riemann のゼータ関数とのアナロジーに基づく、量子準位の効率的な計算の処方について簡単に紹介する。



(a)

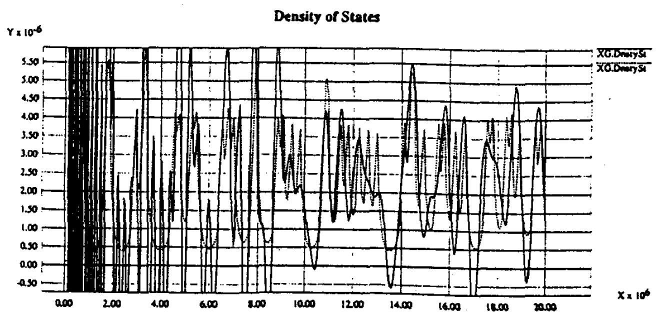


図4 (b)

2 − 3 .Riemann のゼータ関数と Gutzwiller のゼータ関数のパラレルな関係

Riemann のゼータ関数は、

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s} = \prod_p \frac{1}{1-p^{-s}} \quad (Res > 1, p: \text{素数})$$

を全複素平面に解析接続したものを指し、この非自明な零点が $Res = \frac{1}{2}$上の存在するであろうということは Riemann 予想として知られている。それに対して、Gutzwiller のゼータ関数は対数微分すると $ImTr\frac{1}{E-\hat{H}}$になるものとして定義する。

Riemann 予想のもとで $s = 1/2 + iE_n$をその零点とするとき、実数値をとるであろう $\{E_n\}$ をエネルギー準位とみなすと Riemann のゼータ関数の $Res = \frac{1}{2}$上の零点の状態密度を表すと次のようにかける。(Berry1985)

$$d(E) = \bar{d}(E) - \frac{1}{\pi}\sum_p \sum_{k=1}^{\infty} \frac{logp}{p^{k/2}} cos(Eklogp)$$

但し、$\bar{d}(E) \sim logE/2\pi(E \to \infty)$ である。これは

$$\hbar = 1 \qquad S_{p,k}(E) = Eklogp \qquad A_{p,k} = \frac{logp}{p^{k/2}} \qquad T_{p,k}(E) = \frac{\partial S}{\partial E} = klogp$$

と翻訳すれば、前述の Gutzwiller 公式と同様の形になっている。このことから Riemann のゼータ関数の非自明な零点とカオス系のエネルギー準位の対応関係が予想できる。この対応についてのゼータ関数を位相因子をかけて実数化した spectral determinant$\Delta(E) = \prod_n f(E)(E - E_n)$ を考える。これに関して、Riemann のゼータ関数と Gutzwiller のゼータ関数を比べると、互いに次のようなパラレルな関係がまとめられる。(Berry 1986,Berry and Keating 1990)

Riemann のゼータ関数	Gutzwiller のゼータ関数
Non-trvial zeros of $\zeta(\frac{1}{2}+iE)$	Quantum energy levels
$\zeta(s)$ の実数化 $\Delta_R(E) = e^{-i\Theta(E)}\zeta(\frac{1}{2}+iE)$ $\Theta(E) = ImlogГ(\frac{1}{4}-iE) + \frac{1}{2}Elog\pi$ $= \pi[\bar{N}(E) - 1]$	$\Delta_G(E) = B(E)e^{-i\pi\bar{N}(E)+\int_0^E dE'\bar{d}(E')}$ $= B(E)e^{-i\pi\bar{N}(E)}\prod_p\prod_{k=0}^{\infty}(1 - e^{(-k+\frac{1}{2})\lambda_p T_p}e^{\frac{i}{\hbar}S_p})$ $\downarrow$ Euler identity で和になおす
$\Delta_R(E) = e^{-i\pi\bar{N}(E)}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{iElogn}}{\sqrt{n}}$ $\downarrow$ resurgence(*) $\Delta_R(E) \simeq -2\sum_{n=1}^{Int\sqrt{\frac{E}{2\pi}}}\frac{cos\{\pi\bar{N}(E)-Elogn\}}{\sqrt{n}}$ (Riemann-Siegel 公式)	$\Delta_G(E) = B(E)e^{-i\pi\bar{N}(E)}\sum_n^{\infty}C_n(E)e^{iS_n(E)/\hbar}$ $\downarrow$*と同じ手続き $\Delta_G(E) = 2B(E)\sum_n^{T_n<T^*(E)}C_n(E)cos\{S_n(E)/\hbar - \pi\bar{N}(E)$ (Riemann-Siegel lookalike)

近年、個々のエネルギー準位に対する解像度を向上させる方策として、Gutzwiller 公式の中の無限和の並び替えを行ない、主要な寄与を取り出す試みがなされてきた。[Berry,Keating 1990 Aurich,Steiner1992,Bogomolny1992] 基本的方針は上表の下段にあるように Riemann のゼータ関数の

ゼロ点を効率よく計算するために使われる Riemann-Siegel 公式を導出する手続き、即ち Riemann のゼータ関数を実数化した後、発散 tail の resummation を行なうという操作を、Gutzwiller のゼータ関数についても同じように実行する。その結果として得られる Riemann-Siegel 類似公式は、次式のように素周期軌道をつなぎ合わせることによって構成される"pseudo orbit" についての周期と安定性の情報で表現される。

$$\Delta_G(E) = 2B(E) \sum_{n}^{T_n < T^*(E)} C_n(E) cos\{S_n(E)/\hbar - \pi \bar{N}(E)\}$$

ここで $n = \{m_p\}$ は pseudo orbit をラベルし、素周期軌道 p がそれぞれ m 個含まれることを示す。また $S_n = \sum_p m_p S_p$で pseudo orbit の作用であり、N(E) は平均累積状態密度である。さらに

$$C_n(E) = \prod_p (-1)^{m_p} e^{-\frac{1}{4}m_p(m_p-1)\lambda_p T_p} \frac{1}{\sqrt{|\prod_{j=1}^{m_p} det(M_p^j - 1)|}}$$

$$T^*(E) = h\bar{d}(E)/2$$

である。

2 − 4 .Riemann-Siegel 類似公式の適用結果とまとめ

図 4 に示したように、Gutzwiller 公式を使っても基底状態から１０数番目までのエネルギー準位を解像する程度であった。[Harayama and Shudo 1992] これに比して、Riemann-Siegel 類似公式どの程度のものかについての計算結果を断片的ではあるが紹介する。各パラメータαに対して、最短周期軌道から総数約２００００個の周期軌道を求め、このデータをもとにΔ_Gを計算した。(計算時間の関係で、実際に使用したのは数１０００個程度である。) まず、(１) 採用する周期軌道の数を増やしていくと、どのように量子準位に近づくかをみた。(２) αを変えながら公式の精度を比較した。(３) pseudo orbit の最大値を固定し、素周期軌道の数を本来取り込むべき数よりも減らしてみることによって、実際的にはどれだけの数の素周期軌道を用いて pseudo orbit を構成すれば、量子エネルギーを計算できるかを確かめた。どれだけ pseudo orbit で素周期軌道の代用が可能であるかをチェックした。(図８) それぞれの結果を予想とともに状況描写する。
(1) 軌道数を増やしていくと、次第に零点が量子準位に近付いていくのがわかる。(図 6(a)(b) 特に◯で囲んだ部分) (横軸はエネルギー、縦軸は$\Delta_G(E)$であり、エネルギー軸の上の短い縦線が実際のエネルギーである。このとき pseudo orbit の最長のものは、取り込んだ最長の素周期軌道とした。図 6(b) では３０００番目の長さの周期軌道に相当) Gutzwiller 公式の場合と比較すると、図 6(b) のようにかなり高い準位に至るまで良い一致がみられる。その一因は Gutzwiller 公式では、$\tilde{d}(E)$ の半古典表現の極の位置によって量子準位との一致を見ていたのに対して、ここではそれを E について積分した量である平均累積状態密度$\bar{N}(E)$ を見ている点にあると思われる。$\bar{N}(E)$ が階段関数 N(E) の良い近似になっていれば、高励起状態まである程度良くあうように見えるため、単純に Gutzwiller 公式と比較することはできない。周期軌道の効果を入れずに平均累積状態密度だけから$\Delta_G(E)$ を計算しても図 5 のように、およその量子エネルギーの値が伺うことができる。図 6 と比べてもわかるように、周期軌道からの寄与をより加えると、それぞれより厳密なエネルギーに近付いていく。

考慮する pseudo orbit の長さに応じて決まるエネルギー領域までこの公式の結果は収束しており、その収束先は量子準位の良い近似になっているようである。しかしつぶさに見ると、収束していても、良く合う準位といくら長い周期軌道を入れても解像しない準位がある。

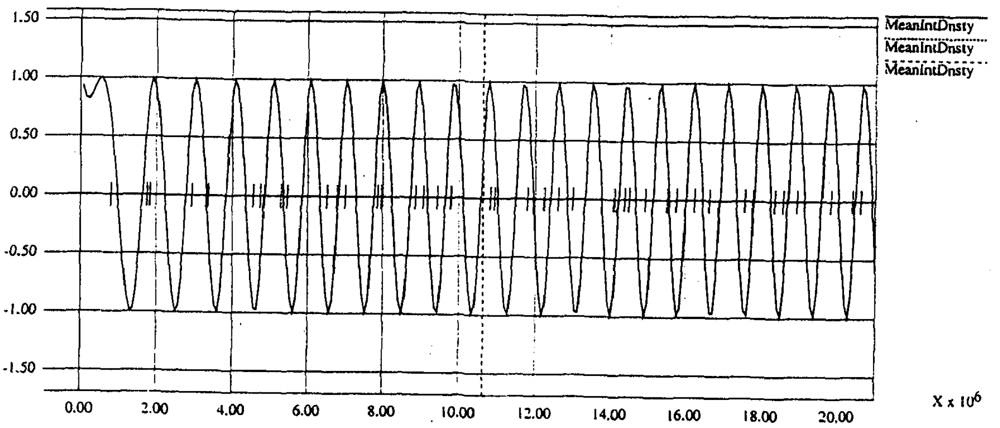


図5

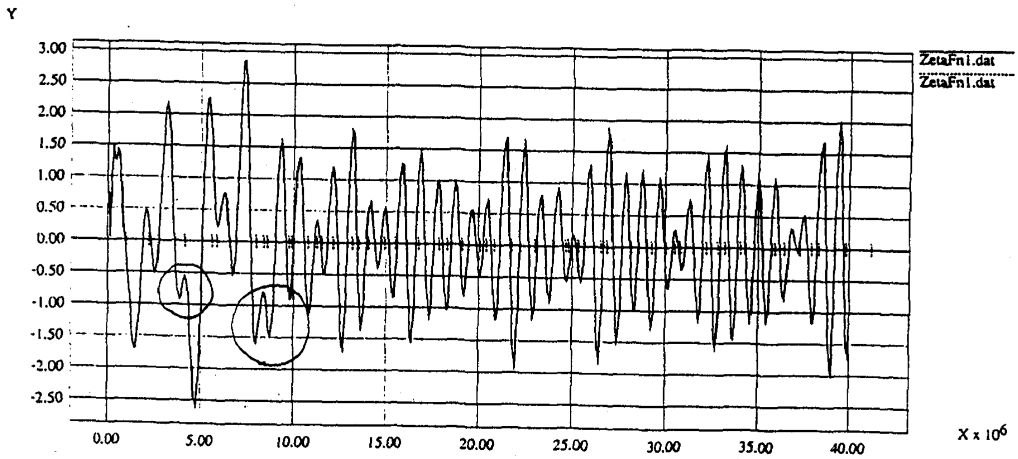


図6(a)

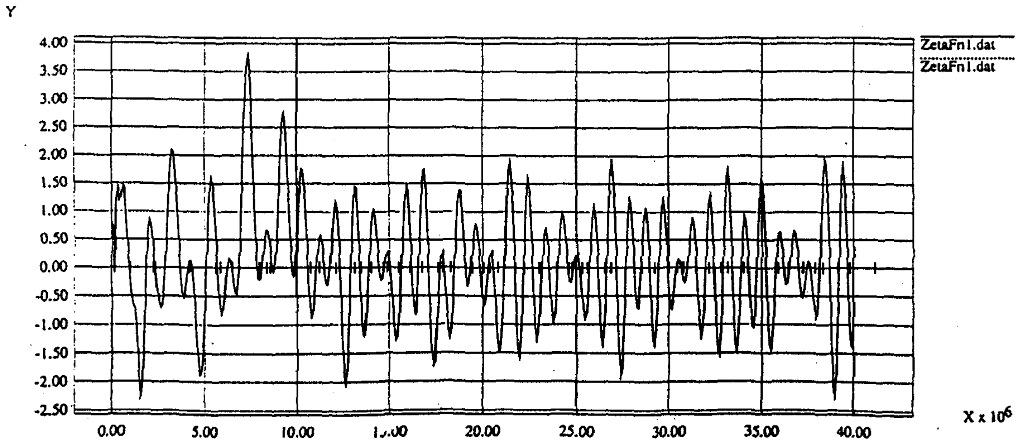
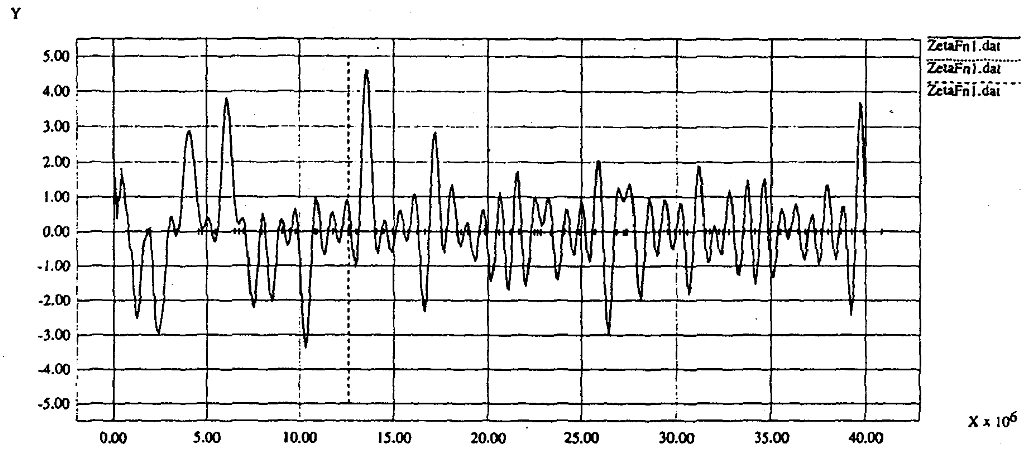
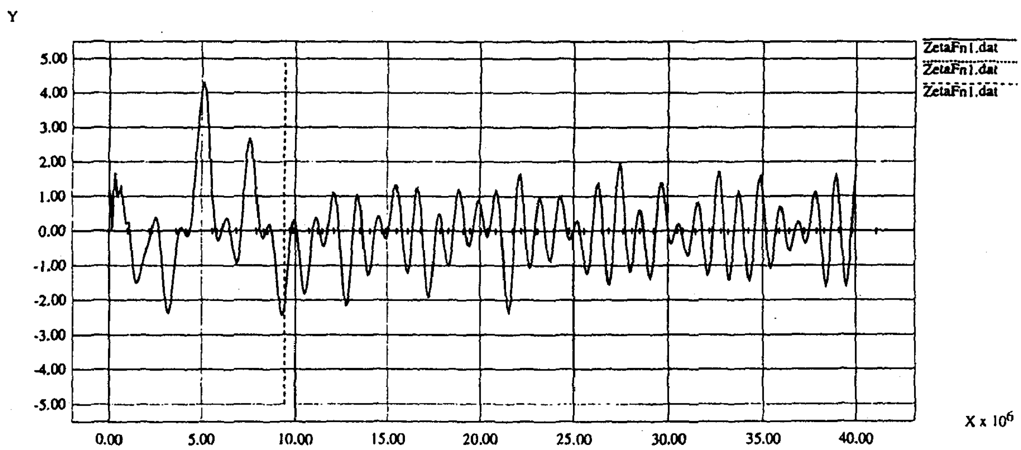


図6(b)

(2) 図 7(a)(b) は$\alpha = 2.1$ $\alpha = 2.7$ のときに、素周期軌道１０００個で Riemann-Siegel 公式を実

行した結果である。αを変えていくと、図 2 に示した通り、系のトポロジカルエントロピー h が変化し、周期軌道数の増大率が変わる。周期軌道の長さを固定すれば、それより短い周期軌道の総数はαが小さいほど少ない。よって一定準位数まで良い近似で計算するために必要となる周期軌道の数は h が大きいほど多くなる。したがって収束が保証されるエネルギーを同じにするには、$\alpha = 2.7$ の方が余計に周期軌道を要する。収束した範囲で見る限り、αによらず精度が得られるようである。





(3) 図 8(a)(b) は pseudo orbit の最大値を 3000 番目の素周期軌道の長さに設定し、psedo orbit を構成する素周期軌道の数を (a)3000(b)100 個（短いものから）にした場合である。図からわかるように、公式に取り込むべき素周期軌道の数を減らして pseudo orbit で代用しても数値結果に顕著な違いは今までのところみられなかった。もしこれが一般的なことであれば長い周期軌道は、量子準位を決める上ではさほど重要ではないことを意味する。発表の際のコメントにもあったように、エネルギー準位を決めるのに必要な周期軌道数がプランクセルに 1 つでありそれ以上は過剰であるとすれば、不確定性原理と照らしても自然ではある。が、このことが成り立っているかは現段階では明確でない。

素周期軌道をどこまで減らすことができるかは、量子準位を決めるのに最低限必要な古典的情報は何かを知る手がかりとなると思われる。

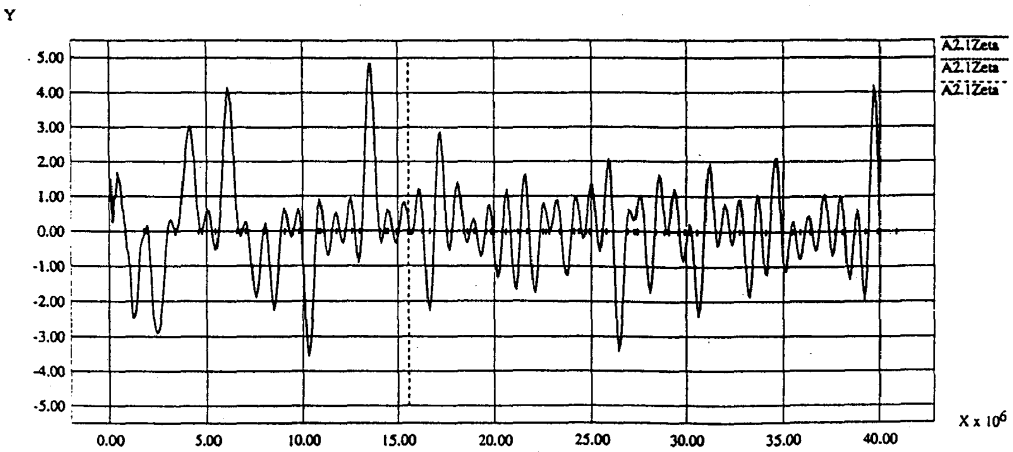
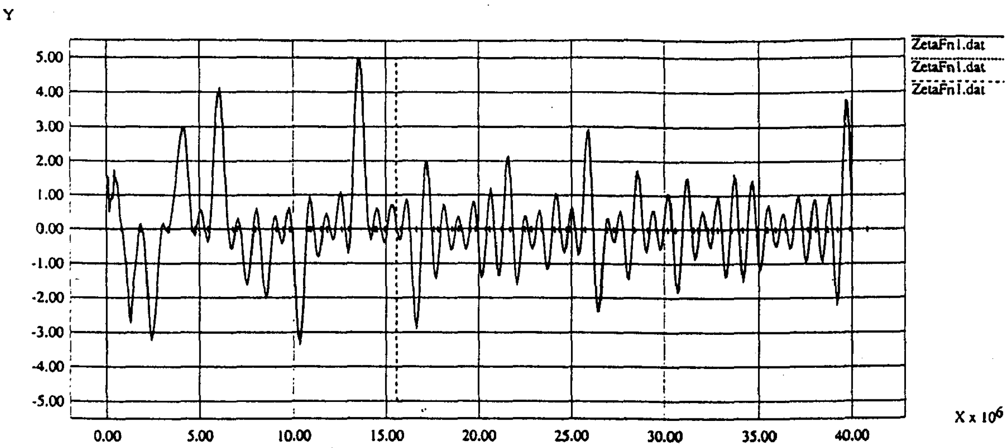


図7(a)



(b)

謝辞

研究の過程で絶えず議論し、貴重なアドバイスをして頂いた岡崎分子研助手の首藤啓氏に感謝します。

参考文献

Aurich and Steiner 1992 Proc.R.Soc.Lond.A437 693-714 and references therein
Berry 1985 Proc.R.Soc.Lond.A400 229-251
Berry 1986 "Riemann's zeta function:a model of quantum chaos?" in Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics edited by T.H.Seligman and H.Nishioka(Springer Lecture Notes in Physics No.263)
Berry and Keating 1990J.Phys.A23 4389-4849
Bogomolny 1992 Chaos 2(1)5-13
Eckhardt and Aurell 1989 Europhys.Lett 9 509
Gutzwiller Physica5D 1982 183-207
Harayama and Shudo 1992 J.Phys.A25 4611
Keating 1992 Proc.R.Soc.Lond.A436 99-108
Keating 1991 "The semiclassical sum rule and Riemann's zeta function" In Quantum Chaos edited by H.A.Cardeira,R.Ramaswamy
Wintgen 1988 Phys.Rev.Lett 61 1803
戸田・足立・長谷川 日本物理学会誌 1989 vol.44 no.8 229-251