

4 hard-disk ビリヤード： カオス散乱の半古典論と量子論

大阪市立大学大学院工学研究科
前期博士課程 (修士課程) 応用物理学専攻

奥田 敏弘

(1994年3月25日受理)

目次

1 序論	83
1.1 モデル	83
1.2 4 disk 系の古典的カオスの性質	84
2 半古典理論	86
2.1 Gutzwiller のトレース公式を用いた共鳴点の導出	86
2.2 Ruelle ゼータ関数による記述	89
3 量子論	92
3.1 S 行列の定義	92
3.2 S 行列の導出	93
3.3 対称性の考慮	95
4 結果および考察	96
4.1 量子論と半古典論による計算結果の比較	96
4.2 散乱共鳴点 k_{res} の累積分布関数を用いた解析	96
4.3 4 disk 系と 3 disk 系との半古典論における散乱共鳴点の比較	103
5 結論および今後の課題	105
謝辞	105
Appendix	106
A 局所的 Lyapunov 数の計算	106
B 量子論での計算の詳細	111
B.1 点 r が disk 境界上にある場合	111
B.2 点 r が領域 D の中の disk から十分離れたところにある場合	113
C 散乱共鳴を与える点の分布関数	115

1 序論

4つの hard disk からなる二次元開放系ビリヤードに4つの細線を接続した系は、いわゆる十字路の問題 [図 1.1(a)] として、その電気伝導度や Hall 抵抗等が理論と実験の両面からよく研究されている。最近、この系に Gutzwiller の半古典トレース公式を用いた理論的試みが始まっている。

ここでは細線を取り外し、4つの hard disk からなる、磁場の作用していない開放系ビリヤード (C_{4v} 群¹) の半古典論を展開し、厳密な量子論との比較を行う。量子論においてはプランク定数 \hbar は有限であり、粒子は波動描像によって記述される。これに対して、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限でよい近似となる半古典論では古典的粒子描像が成り立つ。この二つの枠組みから得られる結果を比較検討することは、量子力学の基本的問題として興味深い。

半古典論においてグリーン関数に対する Gutzwiller のトレース公式は開放系に対しても有効²で、グリーン関数の極を求める問題は Ruelle ゼータ関数の零点を求める問題に帰着する。このゼータ関数は簡単な因数の積和で表され、その因数はカオスの海の中の孤立した不安定周期軌道の作用と不安定性指標を用いて表される。

1.1 モデル

図 1.1(b) の様な平面に固定されてある4つの hard disk によって自由粒子が弾性散乱される二次元系を考える。

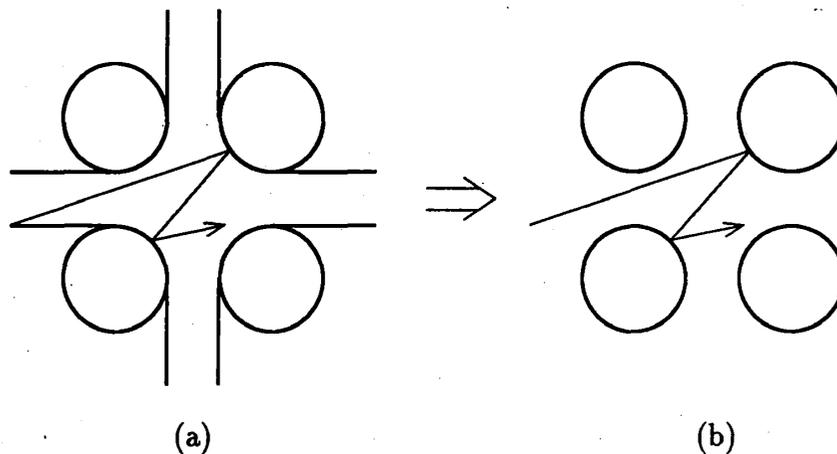


図 1.1: 十字路モデルと 4 disk 系モデル との関係

この時、粒子と disk の衝突は弾性的なので速度つまりエネルギーは保存される。このような系では、粒子の流れに対する位相空間は二つの位置座標 x, y と x 軸と速度ベクトルのなす角 θ で表される。disk が完全に閉じたビリヤードを構成している時は、その内部で散

¹本研究では完全な二次元系を考えているので、4 hard disk 系は D_{4h} 群ではなく C_{4v} 群に属する。

²多くは束縛系に対して用いられてきた [1]。

乱共鳴が起こる。disk が閉じたビリヤードを作らない時は、ほとんどの粒子は disk 間で有限回の衝突を行なった後、散乱されて遠方に逃げていく。しかしながら、disk 間に長時間捕まる軌道も存在する。開放系ビリヤードでは、このような比較的長時間 disk 間に閉じこめられる軌道を散乱共鳴軌道と定義する。hard disk 系は双曲線型 (“defocusing”) であるため、捕まった軌道は不安定であり、3 次元位相空間で Lebesgue 測度 0 の集合を作っている。

disk が二つの場合は disk の中心を結ぶ線分上を往復する軌道のみが束縛された周期軌道となる [2]。しかし disk が 3 つ以上の場合、束縛された軌道は repeller と呼ばれる鞍点型のフラクタル集合を作る [3]。3 disk 系の粒子の散乱共鳴は、Gaspard と Rice によって議論されている [3, 4, 5]。このフラクタル repeller は可算有限個の不安定軌道を含む。

今回考える 4 disk 系は C_{4v} 群に属するものに限定する。この系と 3 disk 系とを比較すると、

- (i) 3 disk 系は C_{3v} の群に属するが、4 disk 系では C_{4v} 群に属し、
- (ii) 3 disk 系では disk 間の距離が R ただ一つで表されるが、4 disk 系では R と $\sqrt{2}R$ の 2 種類が現れる、

という点において幾何学的に異なっている。

1.2 4 disk 系の古典的カオスの性質

4 disk 系での粒子の散乱過程の古典論はよく研究されており、この過程がカオス的な振る舞いを示すことはよく知られている [3, 4, 6]。

“カオスの振る舞いの度合い” は、disk の半径 a と disk の中心間の距離 R のアスペクト比 R/a に依存する。今、その度合いを測る一つの量として、軌道の単位長さに対する Lyapunov 指数 $\tilde{\lambda}_{l_p}$ を取り上げ、その R/a 依存性を調べてみる。この量はモノドロミー列を使って表される局所的 Lyapunov 数 Λ_p (Appendix A 参照) を使って

$$\tilde{\lambda}_{l_p} = \frac{1}{l_p} \log \Lambda_p \quad (1.1)$$

の様に表される。ここで、 l_p は周期軌道の長さである。 $a = 1$ に固定して³横軸を R/a 、縦軸を $\tilde{\lambda}_{l_p}$ として代表的な古典軌道に対して計算したものが図 1.2 である。図中のそれぞれの線は “0” 軌道 (実線), “2” 軌道 (点線), “01” 軌道 (破線), “12” 軌道 (鎖線) に対しての結果を示している (軌道の表式については Appendix A の図参照)。この図より、アスペクト比が小さい (“閉じた” ビリヤードに近い) ところでは Lyapunov 指数は十分大きく、アスペクト比が大きく (“フィラメンタリー” なビリヤード) なるにつれて Lyapunov 指数は 0 に近づいていくことが分かる。閉じたビリヤードとフィラメンタリーなビリヤードの概形については図 1.3 参照。

³ Λ_p は、アスペクト比 R/a のみを通して R 及び a に依存しているが、 l_p は、 R 及び a のそれぞれに独立に依存する量である。よって、以下、 $a = 1$ に固定した場合の議論を行う。第 2 章以降も $a = 1$ の場合に限定するが、 $a \neq 1$ の場合とは系のスケールが異なるのみで定性的差異はない。

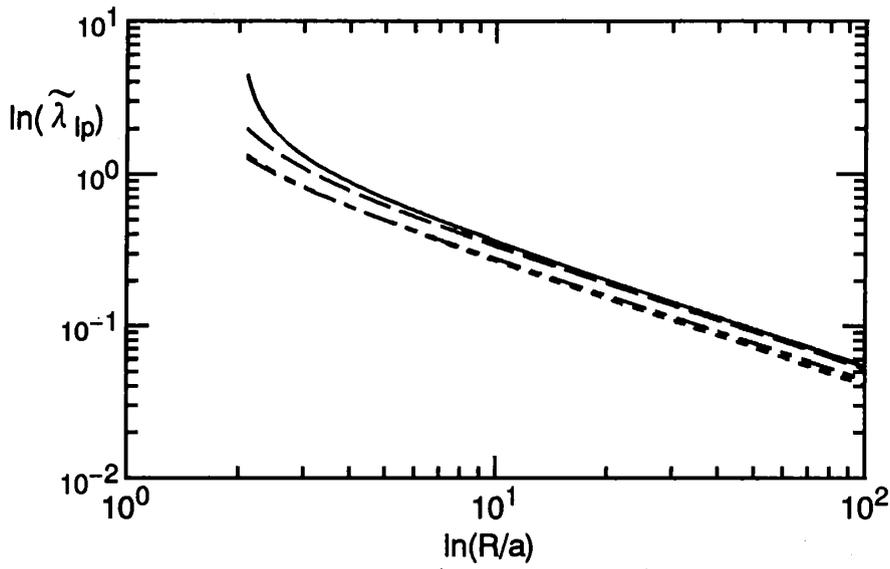
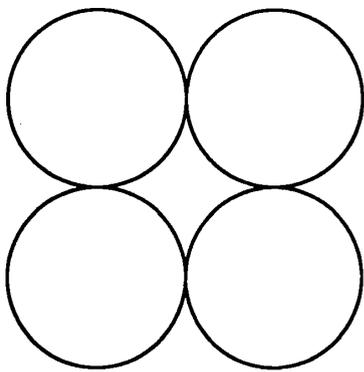
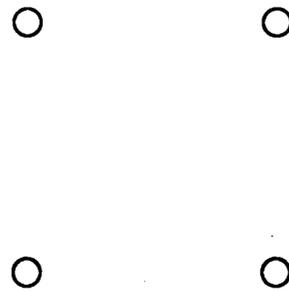


図 1.2: アスペクト比 ($a = 1$ に固定) と Lyapunov 指数の関係



(a) “閉じた” ビリヤード
($R/a = 1$)



(b) “フィラメンタリー” なビリヤード
($R/a \gg 1$)

図 1.3: 4 hard disk の配置

これは、より“フィラメンタリー”になると disk の相対的な曲率が大きくなり、軌道の単位長さあたりの不安定性が、より大きくなることを示している。つまり、“閉じた”ビリヤードに近いほどカオスの挙動が顕著になるのである。

以上の議論は古典論で得られる 4 hard disk 系の定性的な特徴である。これらのことは、後の量子論と半古典論における数値計算結果の解釈にも有効である。

2 半古典理論

Gutzwiller の半古典トレース公式は、系の古典周期軌道にわたっての和によって、状態密度、つまり伝播関数の対角和の計算をするものである。この方法は主に離散的なエネルギースペクトルを持つ束縛された量子系に適用されるが、最近の研究では散乱問題にも応用されている。本章では 4 hard disk 系の散乱問題にこの公式を適用する。

2.1 Gutzwiller のトレース公式を用いた共鳴点の導出

まず、十分大きい半径 b ($b \gg R > a$) の円 B で囲まれている 4 hard disk を考える。この円の外側では波動関数は 0 であるとする。Schrödinger 方程式のエネルギースペクトル $\{E_i(b)\}$ はそのとき離散的であり、状態密度は

$$d(E; b) = \sum_i \delta[E - E_i(b)] \quad (2.1)$$

となる。この状態密度は $b \rightarrow \infty$ になるにつれて、上限なしに増加する。 b に依存しない関数を作るために、(2.1) 式から円 B の中に 4 disk のない系の状態密度

$$d_0(E; b) = \sum_i \delta[E - E_{0i}(b)] \quad (2.2)$$

を引き去る。 $\{E_{0i}(b)\}$ は、円 B の中に 4 disk のない系での束縛エネルギーである。 $b \rightarrow \infty$ の極限で、

$$D(E) \equiv \lim_{b \rightarrow \infty} [d(E; b) - d_0(E; b)] \quad (2.3)$$

を状態密度と定義する。これは E のなめらかな関数である。

Balian と Bloch は $D(E)$ と S 行列 ($S(E)$) とが

$$D(E) = \frac{1}{2\pi i} \text{Tr} S^\dagger(E) \frac{dS(E)}{dE} \quad (2.4)$$

のように関係していることを証明した [7, 8]。結果として、関数 $D(E)$ の極は S 行列の極と一致することが分かる。

ところで、任意の束縛系の状態密度は伝播関数と深く関係している。すなわち、

$$\sum_i \delta(E - E_i) = \int dq \sum_i \Psi_i^*(q) \delta(E - H) \Psi_i(q)$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d^2 \mathbf{q} \sum_i \Psi_i^*(\mathbf{q}) \frac{1}{E - H + i0} \Psi_i(\mathbf{q}) \\
&= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \frac{1}{E - H + i0} \\
&= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d^2 \mathbf{q} \langle \mathbf{q} | \frac{1}{E - H + i0} | \mathbf{q} \rangle \\
&= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int d^2 \mathbf{q} G(\mathbf{q}, \mathbf{q}; E)
\end{aligned} \tag{2.5}$$

である。ここで

$$G(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; E) = \langle \mathbf{q}'' | \frac{1}{E - H + i0} | \mathbf{q}' \rangle \tag{2.6}$$

は系の伝播関数で、 $\mathbf{q} = (x, y)$ である。

今、Gutzwiller のトレース公式 [9]

$$g(E) \equiv \int d^2 \mathbf{q} [G(\mathbf{q}, \mathbf{q}; E) - G_0(\mathbf{q}, \mathbf{q}; E)] \tag{2.7}$$

を導入する。ここで、 G と G_0 は各々 4 disk がある時とない時の伝播関数である。すると、 $D(E)$ は (2.3), (2.5), (2.7) 式より、

$$D(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} g(E). \tag{2.8}$$

と書き換えられる。ゆえに $D(E)$ と $g(E)$ の極は一致し、散乱共鳴をみるためにトレース公式 $g(E)$ を使うことができる。

ここで Gutzwiller のトレース公式を導出し、4 hard disk による自由粒子の散乱問題に対してトレース公式を使用する妥当性について検討する。二次元の伝播関数は、Gutzwiller によって半古典近似 (鞍点近似) で

$$G_{sc}(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; E) = \frac{1}{i\hbar(2\pi i\hbar)^{1/2}} \sum_{\text{classical trajectories}} |\Delta|^{1/2} e^{i\left[\frac{S(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; E)}{\hbar} + \pi L - \frac{\pi M}{2}\right]} \tag{2.9}$$

のように計算された [9, 10]。ここで、

$$S(\mathbf{q}'', \mathbf{q}'; E) = \int_{\mathbf{q}'}^{\mathbf{q}''} \mathbf{p} d\mathbf{q} \tag{2.10}$$

は古典軌道 \mathbf{q}' から \mathbf{q}'' に沿ったの“作用”であり、また、

$$\Delta = - \left[\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \right]^{-1} \det \left[\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{q}' \partial \mathbf{q}''} - \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{q}' \partial E} \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{q}'' \partial E} \right] \tag{2.11}$$

である。ここではディリクレ境界条件のために負の符号が必要である。 M は軌道に沿っての共役点⁴の数であり、今の場合 $M = 0$ となる。 L は古典軌道が disk と衝突する回数である。

⁴火線 (caustic) との交点

$g(E)$ は二次元平面にわたる伝播関数の積分によって計算される。4 hard disk がある時の伝播関数である G に対する積分は、全ての古典軌道にわたって行われる。 q'' が q' の付近に留まっている軌道 (動かない) の寄与は G と G_0 に対して以下に示す方法によって計算される。

半径 $b \gg R$ の円 B の外では 0 となる波動関数を仮定しているので、Thomas-Fermi の状態密度は、

$$n(E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^2q \quad (2.12)$$

となる。ここで積分は波動関数が 0 でない平面の部分にわたって行われる。disk がある時とない時の差は、

$$\begin{aligned} n(E) - n_0(E) &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \left[\int_s d^2q - \int_{s_0} d^2q \right] \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{\text{four disks}} d^2q \\ &= -\frac{4a^2m}{2\hbar^2} \\ &\equiv g_0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

で与えられ、円 B の大きさ b に依存しない。これはエネルギーにも依存しない定数である。最終的には二次元のトレース関数は

$$g(E) = g_0 + \sum_p g_p(E) \quad (2.14)$$

となる [9]。ここで、

$$g_p(E) = -i \frac{T_p(E)}{\hbar} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\exp \{irS_p(E)/\hbar + i\pi r L_p\}}{2 \sinh (ru_p/2)} \quad (2.15)$$

である。 $S_p(E)$ は

$$S_p(E) = \oint_p p dq = mvl_p = (2mE)^{1/2} l_p = \hbar k l_p \quad (2.16)$$

で表される作用であり、 v 、 E はそれぞれ粒子の速さとエネルギー、 l_p は周期軌道 p の長さ、 L_p は hard disk と周期軌道の衝突回数である。また、

$$T_p(E) = \frac{\partial S_p(E)}{\partial E} = (m/2E)^{1/2} l_p = l_p/v \quad (2.17)$$

は軌道 p の周期であり、 u_p は後で定義される Lyapunov 指数である。このトレース公式は、repellor の全ての周期軌道が不安定かつ孤立している時に成り立つが、これらの条件は両方とも 4 hard disk 系において満たされている。なぜなら、その力学はあらゆるところで双曲線型だからである。結果として、全ての周期軌道は密集しているが、しかし、非周期軌道に沿って孤立している [3]。 p についての和は全ての周期軌道に対して行われ、 r についての和は周期軌道 p に沿った全ての可能な行程に対して足しあわされる。

さて、ここで u_p を定義する。位相空間において周期軌道 p が横切るポアンカレ平面を考え、その座標を (ξ, η) とする。流れによって引き起こされる写像は周期軌道の付近で

$$\begin{aligned}\delta\xi'' &= C_{11}\delta\xi' + C_{12}\delta\eta', \\ \delta\eta'' &= C_{21}\delta\xi' + C_{22}\delta\eta',\end{aligned}\tag{2.18}$$

のように線形化される。ここで、 C は実数の係数である。周期軌道 p の安定性は

$$\det \begin{bmatrix} C_{11} - \Lambda & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} - \Lambda \end{bmatrix} = 0\tag{2.19}$$

の根である線形写像の固有値によって決定される。周期軌道 p は不安定であり、また写像は面積を保存をしているので、固有値 Λ_1, Λ_2 は両方とも実数で与えられ、

$$\Lambda_1\Lambda_2 = 1\tag{2.20}$$

の関係を満たす。実際の計算では Λ はモノドロミー行列 [11] を使って計算される。Lyapunov 指数 u_p はその時、

$$u_p \equiv \ln \Lambda_1 = -\ln \Lambda_2\tag{2.21}$$

のように定義される。 u_p は無次元量で、単位時間に対する Lyapunov 指数 λ_{l_p} 、または単位長さに対する Lyapunov 指数 $\tilde{\lambda}_{l_p}$ と

$$u_p = vT_p\lambda_{l_p} = l_p\tilde{\lambda}_{l_p}\tag{2.22}$$

の関係がある。Lyapunov 指数 u_p は 4 hard disk 系においてエネルギーに依存しない。これは、粒子の速度の大きさは散乱軌道に沿って一定だからである。

最後に (2.14) 式 [(2.15) 式] の別の表式を示す。(2.15) 式における双曲正弦関数は

$$\frac{1}{2\sinh(x/2)} = \sum_{j=0}^{\infty} e^{-(1/2+j)x}\tag{2.23}$$

のように級数に展開できる。そして整数 r にわたっての和は、添字 j の各々の項においてなされる。よってトレース関数は

$$g(E) = g_0 + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial E} \ln \prod_p \left[1 - \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_p(E) - (1/2 + j) u_p + i\pi L_p \right\} \right]\tag{2.24}$$

のように書きかえられる。

2.2 Ruelle ゼータ関数による記述

トレース関数 $g(E)$ は Ruelle ゼータ関数で表すことができ、また、その Ruelle ゼータ関数は対称性によって分解できる。よって $g(E)$ の極を求める問題は、各々の対称性において Ruelle ゼータ関数の極を求める問題に帰着する。以下に $g(E)$ と Ruelle ゼータ関数の関係を示し、 A_1 対称性を持つ散乱共鳴点を導出する。

まず, (2.24) 式を

$$\zeta_{1/2+j}(z) \equiv \prod_p \left[1 - \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_p(E) - (1/2+j)u_p + i\pi L_p \right\} \right]^{-1} \quad (2.25)$$

で定義される Ruelle ゼータ関数を用いて書き換える。(2.16), (2.21) 式を使うと, 上式は

$$\zeta_{1/2+j}(-ik) = \prod_p \left[1 - \frac{(-1)^{L_p} \exp(ikl_p)}{|\Lambda_p|^{1/2+j}} \right]^{-1} \quad (2.26)$$

となる。ここで $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ である。よって, (2.24) 式は,

$$g(E) = g_0 - \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial E} \ln \zeta_{1/2+j}(-ik) \quad (2.27)$$

となり, 状態密度 $g(E)$ は Ruelle ゼータ関数を使って表せた。(2.27) 式における $j = 1, 2, \dots$ の項では, ゼータ関数が急激に減衰するので, 主に寄与する $j = 0$ だけを考慮する。

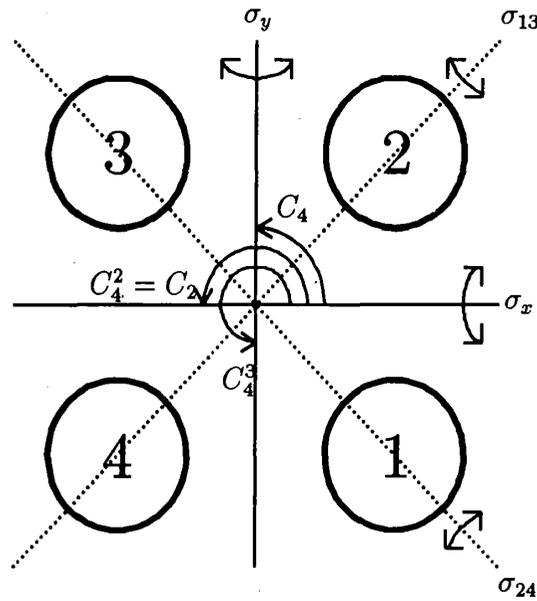
次に, ゼータ関数と対称群の関係を示す。考えている 4 disk 系は C_{4v} 群に属している。この群は, 4つの一次元既約表現 A_1, A_2, B_1, B_2 と, 二つの二次元既約表現 E を持っている。すると, ζ 関数は次のように因数分解される:

$$\zeta = \zeta_{A_1} \zeta_{A_2} \zeta_{B_1} \zeta_{B_2} \zeta_E^2. \quad (2.28)$$

これらの既約表現は図 2.1 の対称操作に対して表 2.1 のような表現の指標を持つことが知られている [6]。

表 2.1: C_{4v} 群の既約表現と指標の表 (Mulliken の記法)

C_{4v}	A_1	A_2	B_1	B_2	E
e	1	1	1	1	2
C_2	1	1	1	1	-2
C_4, C_4^3	1	1	-1	-1	0
σ_{axes}	1	-1	1	-1	0
σ_{diag}	1	-1	-1	1	0


 図 2.1: C_{4v} 群の対称操作

また、ゼータ関数

$$\zeta_\beta(z)^{-1} = \prod_p (1 - t_p) \quad (2.29)$$

における t_p は、それぞれの周期軌道 p によって決定される。Cvitanović と Eckhardt は記号力学を使って C_{4v} 群に属する 4 hard disk における周期軌道を表 2.2 の様に分類した [6]。この表において、 p は粒子が disk に衝突する順番を disk の番号で表している。同じかたちの軌道は他にもあるが、対称性を考慮することによって表にある記号で代表させている。 \tilde{p} はそれぞれの周期軌道 p を三進数で記号化したものである。またそれぞれの軌道に対して不変な対称操作も示してある。

以上の対称性の性質を使って、ゼータ関数は次のように展開できる (cycle expansion [6])。

$$\zeta_{A_1}^{-1} = 1 - t_0 - t_1 - t_2 - (t_{01} - t_0 t_1 + t_{02} - t_0 t_2 + t_{12} - t_1 t_2) - \dots, \quad (2.30)$$

$$\zeta_{A_2}^{-1} = 1 + t_0 - t_1 + (t_{01} - t_0 t_1 + t_{02} - t_{12}) + \dots, \quad (2.31)$$

$$\zeta_{B_1}^{-1} = 1 - t_0 + t_1 + (t_{01} - t_0 t_1 - t_{02} + t_{12}) + \dots, \quad (2.32)$$

$$\zeta_{B_2}^{-1} = 1 + t_0 + t_1 - t_2 + (t_{02} - t_0 t_2 + t_{12} - t_1 t_2 - t_{01} + t_0 t_1) + \dots, \quad (2.33)$$

$$\zeta_E^{-1} = 1 + t_2 - t_0^2 + t_1^2 + (2t_{002} - 2t_{112} - t_0^2 t_2 + t_1^2 t_2) + \dots. \quad (2.34)$$

ここで

$$t_p = (-1)^{L_p} e^{ikl_p} |\Lambda_p|^{-1/2} \quad (2.35)$$

である。実際の計算では (2.31) ~ (2.34) 式の中の括弧の項はそれ以外の項に対して十分小さいので無視できる。

表 2.2: C_{4v} 群における古典軌道の記号化

\tilde{p}	p	対称操作
0	12	σ_x
1	1234	C_4
2	13	C_2, σ_{13}
01	1214	σ_{24}
02	1243	σ_y
12	1241 3423	C_4^3
001	121 232 343 414	C_4
002	121 343	C_2
011	121 434	σ_y
012	121 323	σ_{13}
021	124 324	σ_{13}
022	124 213	σ_x
112	123	e
122	124 231 342 413	C_4

以上の議論により, A_1 対称性では,

$$\zeta_{A_1}^{-1}(-ik) = 0 \tag{2.36}$$

を満たす $k = k_{res}$ が散乱共鳴を与える。

3 量子論

この章では, 系に厳密な量子論を適用する。Green の定理を使って S 行列を導き, この S 行列から散乱共鳴を考察する。

3.1 S 行列の定義

hard disk の外側の平面における粒子の波動関数は,

$$(\Delta + k^2)\Psi = 0 \tag{3.1}$$

の解である。散乱中心から散乱された粒子の波動関数の漸近形を使うと, S 行列は

$$\Psi_{kl}(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{(2\pi kr)^{1/2}} \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} \left[e^{-i(kr-l'\pi/2-\pi/4)} \delta_{ll'} + S_{ll'} e^{i(kr-l'\pi/2-\pi/4)} \right] e^{il'\phi} \tag{3.2}$$

のように定義される。散乱体がない時 $S_{ll'} = \delta_{ll'}$ となり、また、自由粒子の波動関数の漸近形は

$$J_l(kr)e^{il\phi} \quad (3.3)$$

となる。ここで $J_l(kr)$ は整数次 l の Bessel 関数であり、 l は入射波の角運動量である。(3.2) 式に出てきた $S_{ll'}$ が散乱行列であり、行列要素 $S_{ll'}$ は角運動量 l の初期状態と角運動量 l' の終状態との間の散乱過程を表現している。

3.2 S 行列の導出

Green の定理を用いて S 行列の具体的な形を導出する。まず、Green の定理より、

$$\begin{aligned} \int_D d^2r' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}')(\Delta' + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')(\Delta' + k^2)\Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \\ = \oint_{\partial D} dS' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}')\nabla'G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\nabla'\Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \end{aligned} \quad (3.4)$$

ここで、 D は粒子が自由に動き回れる領域である (図 3.1 参照)。

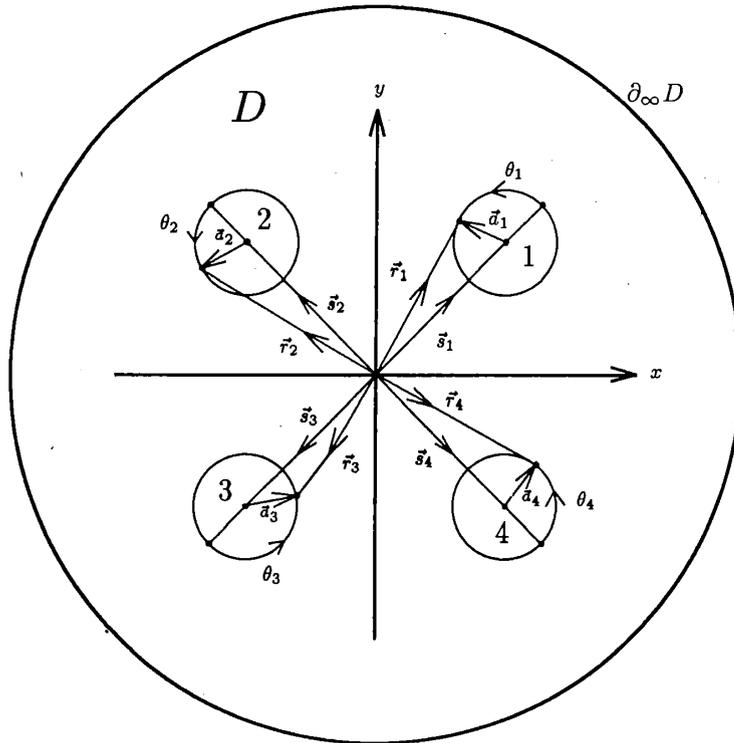


図 3.1: 4 disk 系の座標配置

よって、この領域における伝播関数は自由粒子の型、

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{i}{4}H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (3.5)$$

に選ばれる。ここで $H_n^{(1)}(x)$ は第一種の Hankel 関数である。 ∂D は、領域 D の境界であり、積分 dS' は ∂D に垂直外向きになされる。 Ψ_{kl} は (3.1) 式の解で次の散乱波の境界条件を満たす。

(i) 無限遠での漸近形は、(3.2) 式と同様に振る舞う。

(ii) 4 disk の境界で、波動関数は 0 になる：

$$\Psi_{kl}(\mathbf{r}_j) = 0 \quad (3.6)$$

ここで、波動関数の法線微分を未定係数 A_{ljm} を用いて、

$$\mathbf{n}_j \cdot \nabla \Psi_{kl}(\mathbf{r}_j) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_{ljm} e^{im\theta_j} \quad (3.7)$$

のように展開しておく。添字 j は disk の番号で、 \mathbf{r}_j は disk 境界上の点の座標である。 \mathbf{n}_j は点 \mathbf{r}_j 上における disk j の内向き法線単位ベクトルであり、 θ_j は \mathbf{r}_j の角座標である。

点 \mathbf{r} が disk 円周上の点 \mathbf{r}_j に選ばれた時、

$$\sum_{j=1}^4 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} A_{ljm} M_{jmj'm'} = C_{lj'm'} \quad (3.8)$$

を得る (Appendix B.1 参照)。ここで、 $m' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 、 $j' = 1, 2, 3, 4$ であり、行列 M 、 C は

$$M_{jmj'm'} = \frac{\pi a}{2i} \left[\delta_{mm'} \delta_{jj'} + \frac{H_{m-m'}^{(1)}(kR)}{H_{m'}^{(1)}(ka)} J_m(ka) \zeta_{jj'}(m, m') + \frac{H_{m-m'}^{(1)}(\sqrt{2}kR)}{H_{m'}^{(1)}(ka)} J_m(ka) \eta_{jj'}(m) \right], \quad (3.9)$$

$$C_{ljm} = e^{ils_j} \frac{J_{l-m}(ks)}{H_m^{(1)}(ka)} \quad (3.10)$$

である。ただし $J_n(x)$ は第一種の Bessel 関数であり、また、

$$\zeta_{12} = \zeta_{23} = \zeta_{34} = \zeta_{41} = e^{i\epsilon_{jj'} \frac{\pi}{4} (3m-m')}, \quad \zeta_{|j-j'| \bmod 2, 0} = 0, \quad \zeta_{jj'} = \zeta_{j'j}^* \quad (3.11)$$

$$\eta_{13} = \eta_{24} = e^{i\epsilon_{jj'} \pi m}, \quad \eta_{jj} = \eta_{|j-j'| \bmod 2, 0} = 0, \quad \eta_{jj'} = \eta_{j'j}^* \quad (3.12)$$

$$\epsilon_{jj'} = 0, \quad \epsilon_{jj'} = -\epsilon_{j'j} \\ \epsilon_{12} = \epsilon_{23} = \epsilon_{34} = \epsilon_{41} = \epsilon_{13} = \epsilon_{24} = 1 \quad (3.13)$$

である。(3.8) 式より、disk 円周上でのグリーンの定理は行列 M の逆行列を使って、

$$A = CM^{-1} \quad (3.14)$$

のように書ける。

次に、波動関数の漸近形によって散乱体から遠く離れたところで S 行列を計算する。この時、S 行列の漸近形は (3.2) 式と同様に振る舞う。Green の定理を使って S 行列を計算すると (Appendix B.2 参照),

$$S_{ll'} = \delta_{ll'} + i\pi a \sum_{j=1}^4 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} A_{ljm} \exp(-il'\phi_{s_j}) J_{l'-m}(ks) J_m(ka) \quad (3.15)$$

となり、上式を行列の形で書くと、

$$S = I - iAD \quad (3.16)$$

となる。ここで、

$$D_{ljm} = -\pi a \exp(-il\phi_{s_j}) J_{l-m}(ks) J_m(ka) \quad (3.17)$$

である。(3.14) 式を使うと S 行列は

$$S = I - iCM^{-1}D \quad (3.18)$$

と表される。結局、散乱共鳴は複素 k 平面で、

$$\det M(k) = 0 \quad (3.19)$$

を満たす点によって与えられる。

3.3 対称性の考慮

disk の配置は、 C_{4v} 群のもとで不変である (半古典論：2.2 参照)。この群は、5つの既約表現 (Mulliken の記法を用いる) を持つ。ここでは、半古典論での議論と同様に A_1 対称性を持つもののみを議論する。既約表現 A_1 では、波動関数の法線微分を表す行列 A に対して、

$$\begin{aligned} A_{l1m} &= A_{l2m} = A_{l3m} = A_{l4m}, \\ A_{im} &= A_{j-m} \end{aligned} \quad (3.20)$$

の条件が成り立つ。すると (3.8), (3.9), (3.20) 式より、

$$M_{00}^{(A_1)} = \frac{\pi a}{2i} \left[1 + 2 \frac{J_0(ka)}{H_0(ka)} H_0(kR) + \frac{J_0(ka)}{H_0(ka)} H_0(\sqrt{2}kR) \right], \quad (3.21)$$

$$M_{0m'}^{(A_1)} = \frac{\pi a}{2i} \left[4 \frac{J_0(ka)}{H_{m'}(ka)} H_{-m'}(kR) \cos\left(\frac{\pi m'}{4}\right) + \frac{J_0(ka)}{H_{m'}(ka)} H_{-m'}(\sqrt{2}kR) \right], \quad (3.22)$$

$$M_{m0}^{(A_1)} = \frac{\pi a}{2i} \left[4 \frac{J_m(ka)}{H_0(ka)} H_m(kR) \cos\left(\frac{3m\pi}{4}\right) + 2 \frac{J_m(ka)}{H_0(ka)} H_m(\sqrt{2}kR) \cos(m\pi) \right], \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} M_{mm'}^{(A_1)} &= \frac{\pi a}{2i} \left[2\delta_{mm'} \right. \\ &+ 4 \frac{J_m(ka)}{H_{m'}(ka)} \left\{ H_{m-m'}(kR) \cos\left(\frac{(3m-m')\pi}{4}\right) + (-1)^{m'} H_{m+m'}(kR) \cos\left(\frac{(3m+m')\pi}{4}\right) \right\} \\ &\left. + 2 \frac{J_m(ka)}{H_{m'}(ka)} \left\{ H_{m-m'}(\sqrt{2}kR) \cos(m\pi) + (-1)^{m'} H_{m+m'}(\sqrt{2}kR) \cos(m\pi) \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

となる。よって, A_1 対称性では,

$$\det M^{(A_1)}(k) = 0 \quad (3.25)$$

を満たす $k = k_{res}$ が散乱共鳴を与える。

4 結果および考察

4.1 量子論と半古典論による計算結果の比較

4 disk 系における A_1 対称性をもつ散乱共鳴を与える波数 k_{res} は, 半古典論では (2.36) 式, 量子論では (3.25) 式を解くことによって得られる。これらの数値計算の結果を図 4.1 ~ 4.5 に示す。ただし 1 章で述べた通り, $a = 1$ に固定している。

図 4.1 では $R = 6$ の場合について, 周期 1 のみを考慮した半古典論の結果と量子論の結果を比較している。同様に図 4.2, 4.3 ではそれぞれ周期 2 まで, 周期 3 までの結果と量子論の結果を比較している。これらの図より, 半古典論で考慮する周期をあげていくと量子論との一致はよくなっていき, $|\text{Im}(k)|$ の小さいところでは, 周期 3 まで取り込んだ半古典論は量子論の結果を十分再現できることが分かる。しかし, より詳細に見ると (i) $|\text{Im}(k)|$ が大きい場合 (実軸から離れた領域), 及び (ii) $\text{Re}(k)$ が小さい場合 (虚軸に近い領域) では一致が悪い。その理由を次に考察する。

(i) $\text{Re}(k)$ が小さい (エネルギーが小さい) 領域: 半古典論は \hbar が十分小さいと仮定した時に成り立つので, 波数が小さい, つまり低エネルギーのところでは量子論との一致が悪くなる。

(ii) $|\text{Im}(k)|$ が大きい (滞在時間が短い) 領域: トレース公式 [(2.7) 式] の計算では $q'' = q'$ の全ての古典軌道からの寄与を足しあげなければならない。しかし, 実際の計算では disk 間における周期軌道のみを採用しているため, 滞在時間の短いところで主に効いてくる図 4.6 のような非周期的古典軌道は考慮されていない。そのため粒子の滞在している時間が短い領域での量子論と半古典論の一致は悪くなるものと考えられる。

図 4.4 は $R = 12$ にして, 周期 3 までを考慮した半古典論と量子論の k_{res} の比較である。 $R = 12$ では $R = 6$ に比べて disk の配置がより “フィラメンタリー” になっており, 滞在時間の短い領域 ($|\text{Im}(k)|$ が大きい領域) における一致の悪さが顕著になる。

図 4.5 は, 図 4.4 と同じ $R = 12$ での半古典論による k_{res} を, より広い複素 k 平面にわたって示したものである。 $R = 6$ では見えにくかった k_{res} の分布の様子が程度明瞭になっている。 k_{res} は複素平面上でいくつかの周期構造が重って帯構造を作っていることが分かる。この図は 4.3 節で, 3 disk 系での半古典論による k_{res} との比較にも用いる。

4.2 散乱共鳴点 k_{res} の累積分布関数を用いた解析

半古典論による k_{res} の複素平面上の周期構造を, 累積分布関数を使って解析してみる。

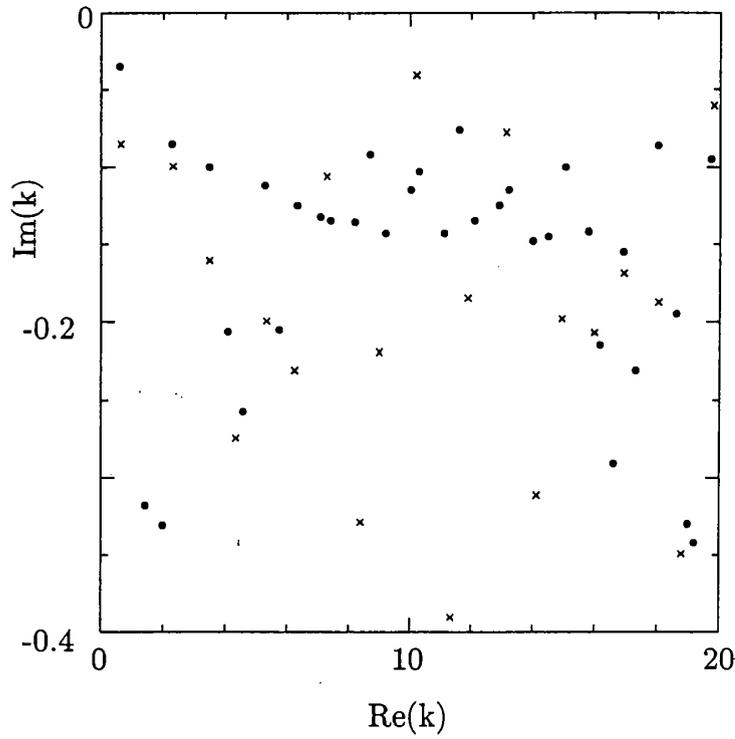


図 4.1: A_1 対称性, $a = 1, R = 6$ での散乱共鳴を与える k_{res} 。量子論による結果 (●) と半古典論 (周期 1 のみ) (×) による結果の比較を示す。

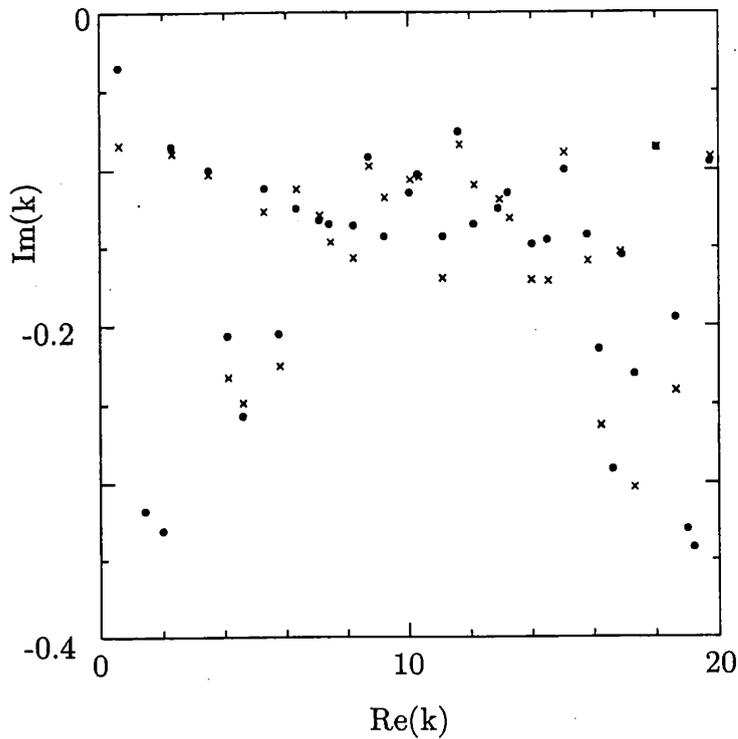


図 4.2: A_1 対称性, $a = 1, R = 6$ での散乱共鳴を与える k_{res} 。量子論による結果 (●) と半古典論 (周期 1+2 まで) (×) による結果の比較を示す。

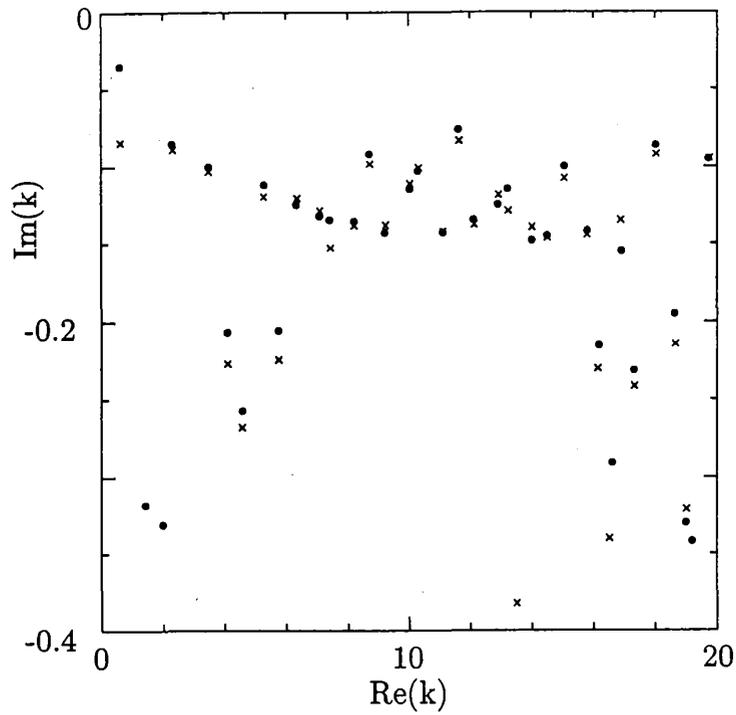


図 4.3: A_1 対称性, $a = 1, R = 6$ での散乱共鳴を与える k_{res} 。量子論による結果 (●) と半古典論 (周期 $1+2+3$ まで) (×) による結果の比較を示す。

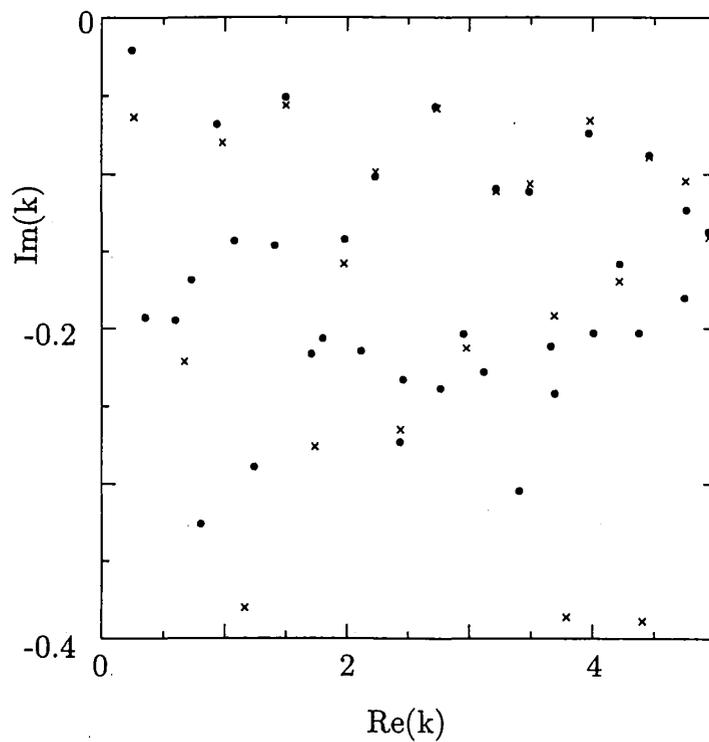


図 4.4: A_1 対称性, $a = 1, R = 12$ での散乱共鳴を与える k_{res} 。量子論による結果 (●) と半古典論 (周期 $1+2+3$ まで) (×) による結果の比較を示す。

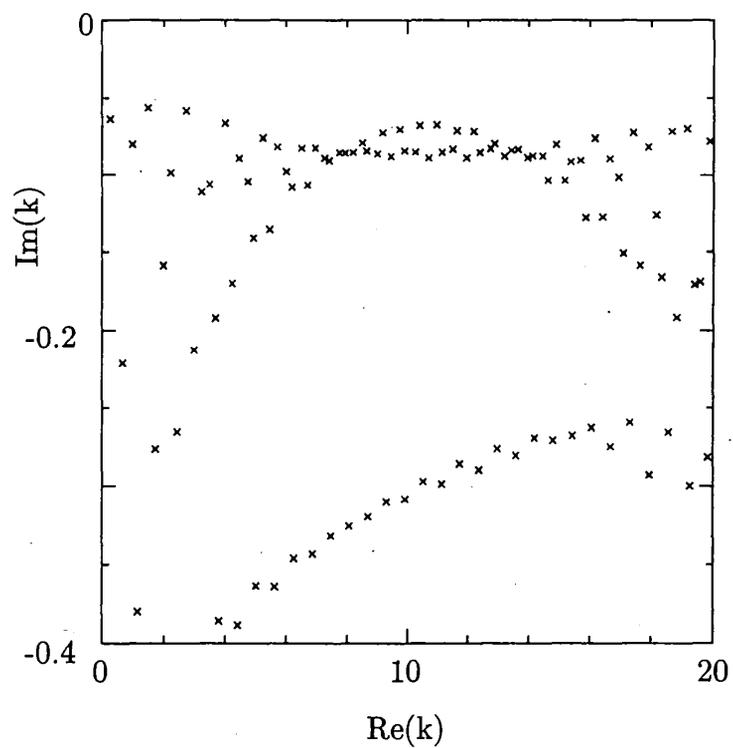


図 4.5: A_1 対称性, $a = 1, R = 12$ での半古典論 (周期 $1+2+3$ まで) による k_{res}

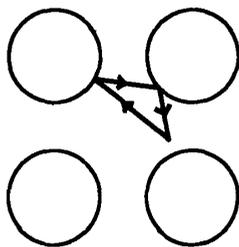


図 4.6: 非周期的古典軌道の例

単位 $\text{Re}(k)$ 当たりの $x = |\text{Im}(k_{res})|$ の累積分布関数 $h(x)$ は,

$$h(x) = \lim_{(y_2 - y_1) \rightarrow \infty} \frac{\arg f(x + iy_2) - \arg f(x + iy_1)}{2\pi(y_2 - y_1)} \quad (4.1)$$

で定義される (Appendix C 参照)。ここで $y = \text{Re}(k)$, $x = |\text{Im}(k)|$ である。 $R = 12$ での $h(x)$ を y_2 を変えて (サンプル領域を広げて) グラフにしたものが図 4.7 であり, また $R = 6$ と $R = 12$ との結果を比較したものが図 4.8 である。また, 分布関数 $dh(x)/dx$ を $y_2 = 20, 30, 40, 50$ に対して描いたものを図 4.9 (a) ~ (d) に示した。

図 4.7 において, $y_2 = 30$ 以上では $x = 0.05$ 付近から $h(x)$ が立ち上がっている。このことは disk 間に滞在する時間に上限 (“ギャップ”) が存在し (すなわち, $\min |\text{Im}(k_{res})| = \chi_{gap} > 0$ となる正定数 χ_{gap} が存在する), また, このギャップを与える k_{res} は $20 < y < 30$ の間に少なくとも一つは存在することを示している。

図 4.8 では $R = 12$ におけるギャップの方が $R = 6$ の場合に比べて小さくなっている。これは, 古典論 (1章) から類推される結果と一致する。すなわち, 系がより “フィラメンタリー” になると軌道不安定性が小さくなり, 滞在時間の上限が長くなるのである。

また, 図 4.9 をみると y_2 の変化に対して $0.07 < x < 0.095$ の範囲では, 大きな 2 本のピーク (帯に対応する) が徐々にならされていくが, そのピークの裾 ($0.05 < x < 0.07$, $0.095 < x < 0.1$) では, 分布関数 $dh(x)/dx$ の値が y_2 と共に振動している。このことから, 複素平面上の k_{res} はいくつかの周期構造が $0.07 < x < 0.095$ で重なり合って帯構造を作っているように思われる。

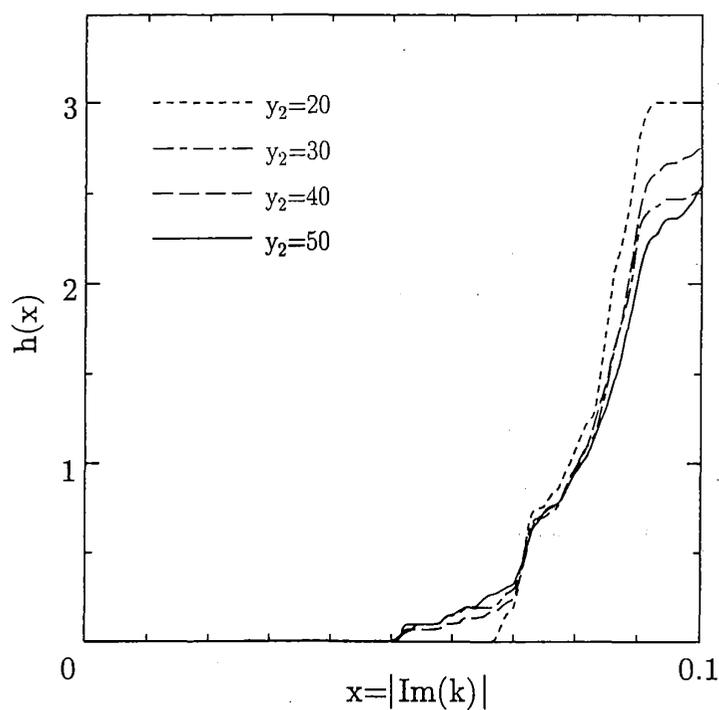


図 4.7: $a = 1, R = 12$ での半古典論による k_{res} に対する単位 $\text{Re}(k)$ 当たりの $|\text{Im}(k_{res})|$ の累積分布。サンプル領域依存性を示す。

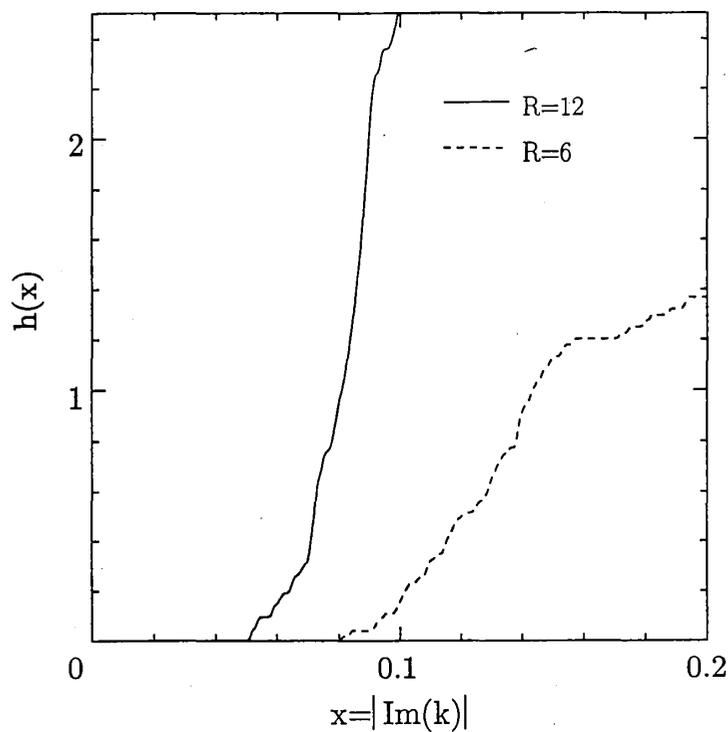


図 4.8: 半古典論による k_{res} に対する単位 $\text{Re}(k)$ 当たりの $|\text{Im}(k_{res})|$ の累積分布 ($a = 1$ での $R = 6$ と $R = 12$ との比較)。 $y_2 = 50$ の場合を示す。

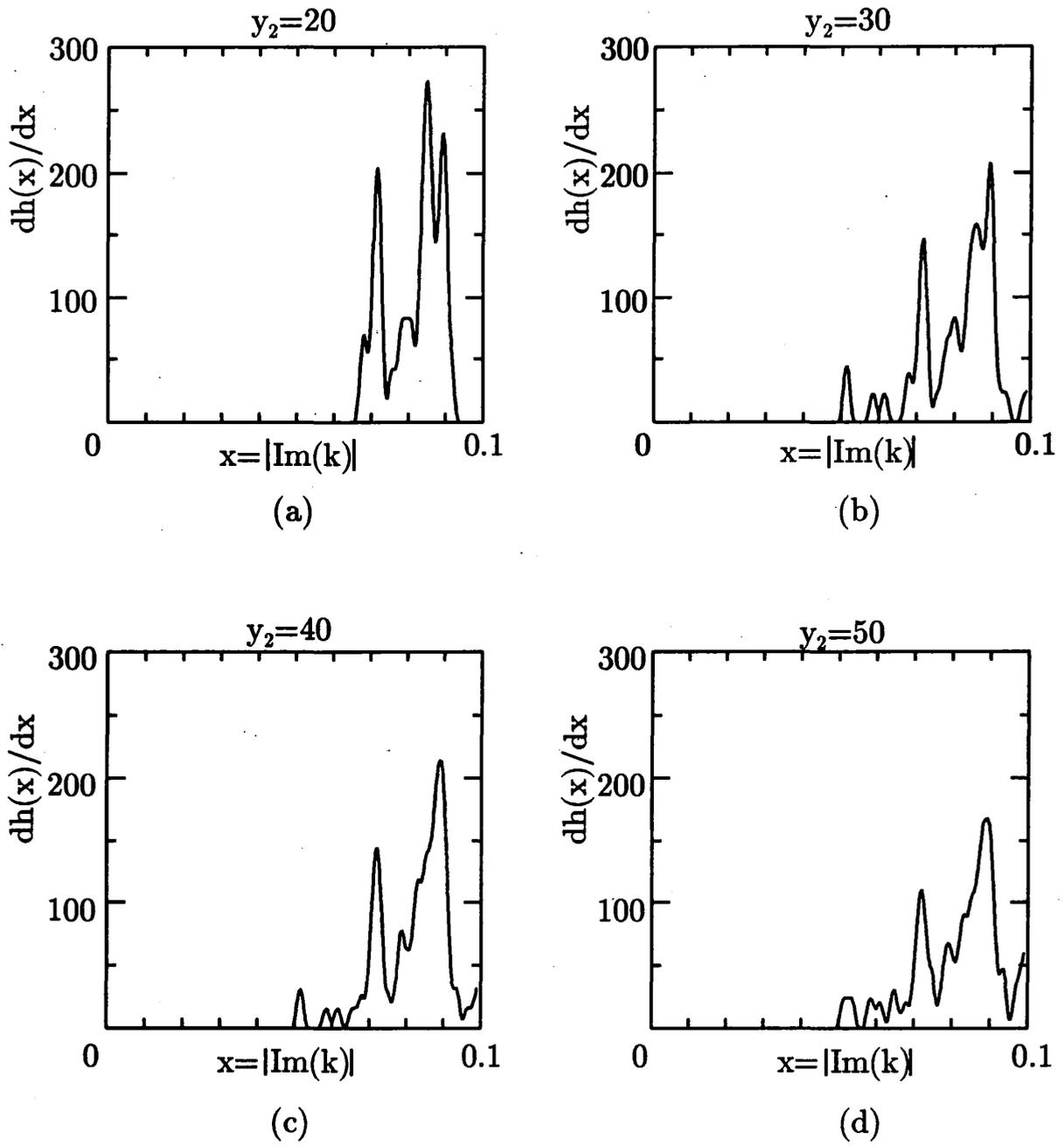


図 4.9: $a = 1, R = 12$ で y_2 を変えた時の分布関数 $dh(x)/dx$

4.3 4 disk 系と 3 disk 系との半古典論における散乱共鳴点の比較

最後に、4 disk 系において得られた半古典論による散乱共鳴点 k_{res} を、3 disk 系の k_{res} と比較検討する。ただし、ここでも A_1 対称性を持つ k_{res} についてのみ議論する。3 disk 系での k_{res} は、Gaspard, Rice らによって研究されている [4, 5, 12]。図 4.10 は彼らによって得られた 3 disk 系 ($a = 1, R = 6$) での k_{res} を示し [12]、図 4.11 はその累積分布関数を示している [5]。

まず、複素平面上での k_{res} の分布を比較する ($a = 1, R = 6$)。

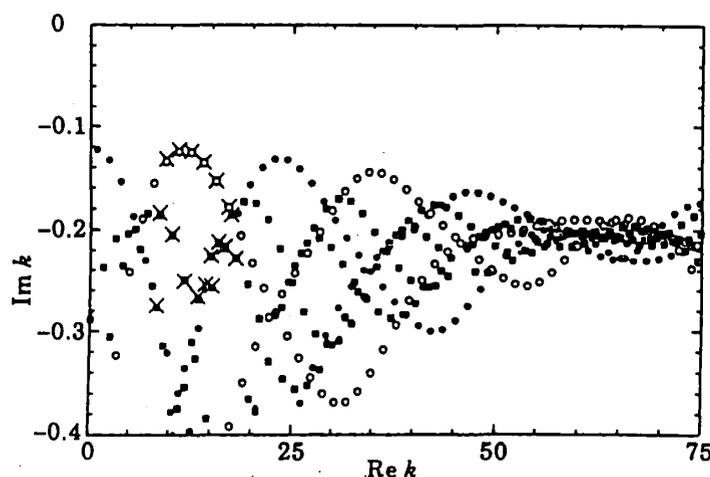


図 4.10: Gaspard と Rice [11] によって得られた、3 hard disk 系 ($a = 1, R = 6$) での散乱共鳴を与える k_{res} 。黒丸 (●) が半古典論による、 A_1 対称性を持つ k_{res} を示している。

本研究により得られた結果 (図 4.5) と図 4.10 とを比較すると、4 disk 系は 3 disk 系より複雑な周期構造を持っていることが分かる。⁵

また 4 disk 系では 3 disk と異なり、大きく分けて 2 本の帯構造が現れることも指摘される。これは 3 disk 系における粒子の disk 間行程距離は大まかに R のみに依存するが、4 disk 系では R と $\sqrt{2}R$ の二つの長さによって特徴づけられことによると考えられる。

次に、図 4.11 と図 4.8 を比較すると、 $a = 1, R = 6$ における 3 disk 系でのギャップは約 0.14 であるのに対して、4 disk 系では約 0.08 となっている。ギャップの値が小さいということは粒子の disk による閉じ込めが大きいことを示しているので、3 disk 系より 4 disk 系の方が閉じ込めが大きいことが分かる。これは disk の幾何学的配置からも直観的に理解できる。

⁵ここでは 3 disk 系と 4 disk 系の、複素平面上における k_{res} の分布構造だけを議論するため、その構造がより明らかであると思われる図 4.5 ($a = 1, R = 12$) を図 4.10 ($a = 1, R = 6$) との比較に用いた。この議論において、 R の違いによる定性的差異はない。

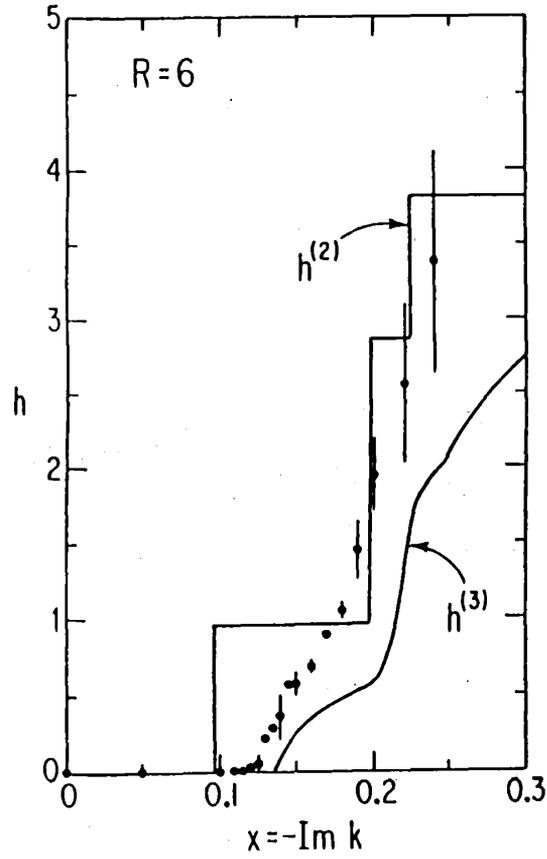


図 4.11: Gaspard と Rice [5] によって得られた, 半古典論による 3 hard disk 系 ($a = 1, R = 6$) での k_{res} の累積分布関数。 $h^{(3)}$ の曲線が周期 2 までの半古典論による k_{res} の累積分布関数に対応する。

5 結論および今後の課題

本研究により、得られた結論を以下に示す。

- (i) C_{4v} 群に属する 4 hard disk 系では、半古典論において周期 3 まで考慮すれば、滞在時間の比較的長いところ ($|\text{Im}(k_{res})|$ が小さいところ) では量子論の散乱共鳴点 k_{res} を十分に再現できる。
- (ii) 系のアスペクト比が小さくなると、古典論からも類推されるように軌道の不安定性が増し、disk 間に長時間閉じこめられる状態の数は減少する。
- (iii) 累積分布関数を用いて散乱共鳴点を考察することにより、3 disk 系と同様に 4 disk 系でも滞在時間に上限 (ギャップ) が存在し、無限に disk 間に束縛される粒子は存在しないことが分かった。また、その値を 3 disk 系のギャップの値と比較することにより、4 disk 系の方が粒子の閉じ込めが大きくなることを定量的に示した。
- (iv) 3 disk 系と異なり、4 disk 系では disk 間行程距離が R と $\sqrt{2}R$ の二つの長さによって特徴づけられるため、 $|\text{Im}(k_{res})|^{-1}$ つまり粒子の滞在時間がいくつかの帯構造を持つ。

半古典論の実際の計算では完全な周期軌道しか考慮に入れられないため、本来の目的である量子論との一致は、粒子の系の中での滞在時間の長いところ ($|\text{Im}(k_{res})|$ が小さいところ) でしか合わない。また、本研究では取り扱わなかったが 3 disk 系での散乱共鳴点 k_{res} の分布は、 $\text{Re}(k) \simeq 75$ で実軸に沿ってかなり収束していることが分かっている [12]。よって今後の課題としては、次のような事柄が挙げられる。

- (i) disk 間周期軌道以外の軌道も取り込める理論の構築。
- (ii) $\text{Re}(k)$ のもっと大きいところ ($\text{Re}(k) > 20$) における散乱共鳴点の複素 k 平面での分布を考察することによる、散乱共鳴の大局的性質の解明。
- (iii) 十字路問題での細線における粒子の半古典量子化。
- (iv) 同じ 4 disk 系でも、3 disk の中に 1 つの disk を配置したような C_{3v} 群に属する 4 hard disk 系での粒子の散乱問題。

本研究は、上記の課題に着手する上で基礎的知見を与えるものである。数理科学及びメゾスコピック系の物性の問題の接点にあるこの系の研究が、本研究を基にさらに発展することを期待する。

謝辞

本研究にあたり常に熱心に御指導、御鞭撻下さいました中村勝弘教授、並びに小川哲生助教授、高根美武助手、そして数値計算の方面において御指導下さいました串部宏之先生

をはじめ応用物理学科の先生方に厚く御礼申し上げます。さらに、本論文の基礎となった 3 disk 系の散乱問題について研究し、当研究にも多大な助言をしていただいたブリュッセル大学の P. Gaspard 氏にも深く感謝いたします。また、研究の場を明るくものにする共に、様々な御協力、御指摘をいただきました数理工学研究室の同輩である伊藤健氏、山岸大治氏、四回生の諸君（大谷博司君、芳賀哲也君、濱田正人君、山根秀之君）、並びに他研究室の諸氏に深く感謝致します。最後に、学部生時より何かとお世話になりました勝俣五男教授、また、よき先輩として様々な相談に乗っていただいた村上和嗣氏（現 大阪市立大学大学院工学研究科後期博士課程）、並びに上岡功氏（同大学大学院工学研究科前期博士課程修了生）をはじめプラズマ工学研究室の方々に感謝申し上げます。

A 局所的 Lyapunov 数の計算

古典軌道の例として、周期 3 の“022”軌道の概形を示す。図 A.1 より、

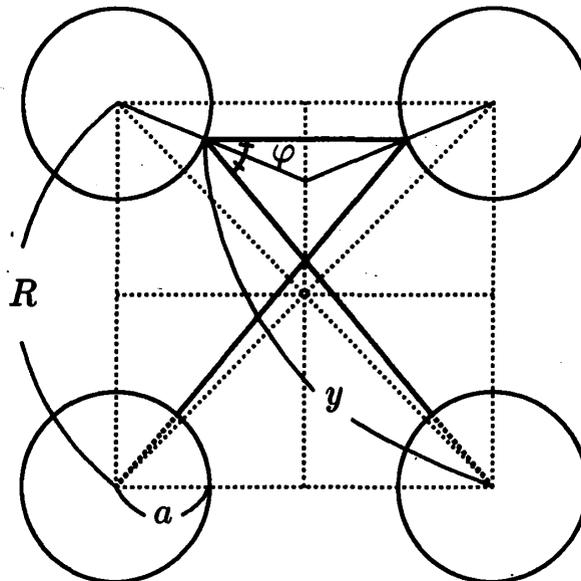


図 A.1: 古典周期軌道の例 (“022”)

$$\begin{aligned}
 y &= \sqrt{\left\{ \sqrt{2}R - a \cos\left(\frac{\pi}{4} - \varphi\right) \right\}^2 + \left\{ a \sin\left(\frac{\pi}{4} - \varphi\right) \right\}^2} \\
 &= \sqrt{2R^2 - 2aR \left(\cos\varphi + \sqrt{1 - \cos^2\varphi} \right) + a^2}
 \end{aligned}$$

である。また、正弦定理より、 y と φ の間には

$$\frac{y}{\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)} = \frac{R - a \sin\varphi}{\sin(2\varphi)}$$

の関係がある。ここで、 $\cos \varphi = x$ とおくと、

$$2yx\sqrt{1-x^2} - R + a\sqrt{1-x^2} = 0$$

となる。上記の方程式を解くと、 $x = \cos \varphi$ の値が得られる。それにより、

$$\cos(\varphi_1) = 1$$

$$\cos(\varphi_2) = x$$

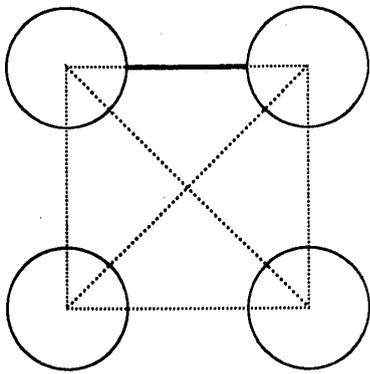
$$\cos(\varphi_3) = x$$

$$l_{022}(12) = y - a$$

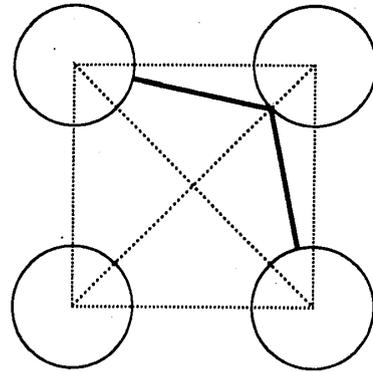
$$l_{022}(23) = R - 2ax$$

$$l_{022}(31) = y - a$$

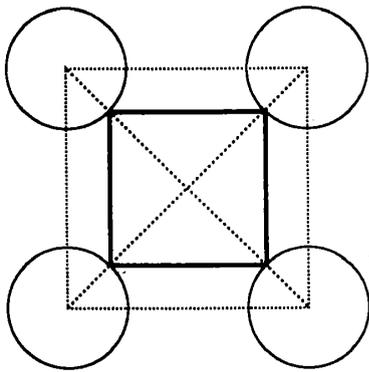
の値が得られる。対称性を考慮することによって周期 3 まででは、14 個の周期軌道がある。これを、図 A.2 ~ A.5 に示す。



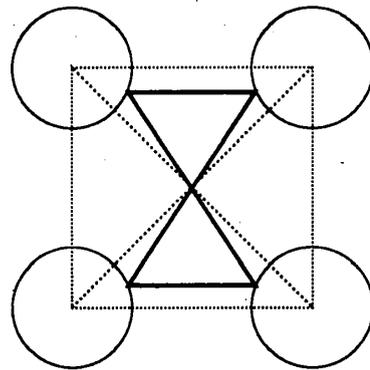
“0” 軌道



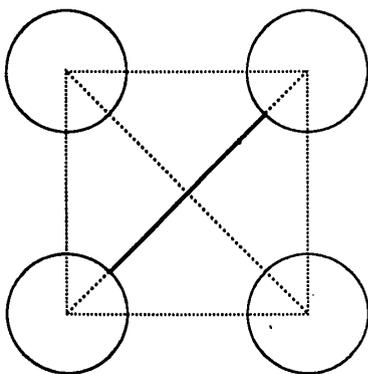
“01” 軌道



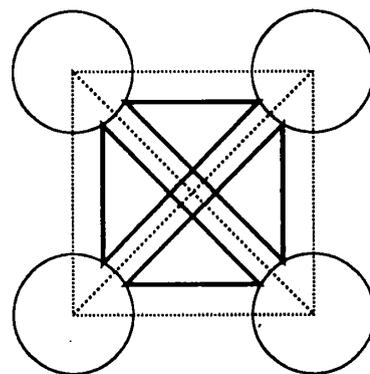
“1” 軌道



“02” 軌道



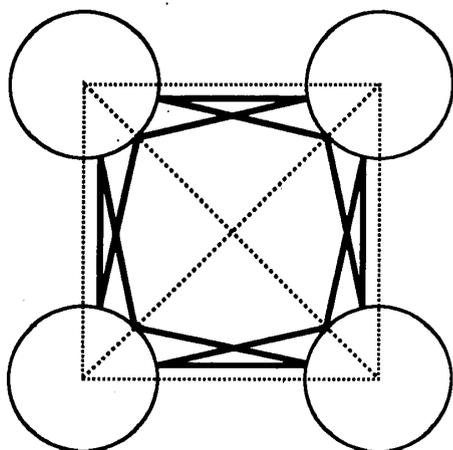
“2” 軌道



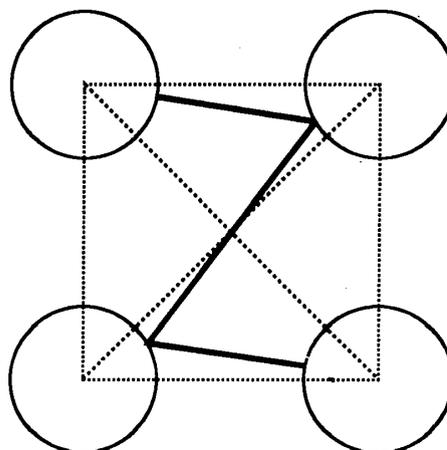
“12” 軌道

図 A.2: 周期 1 の古典周期軌道

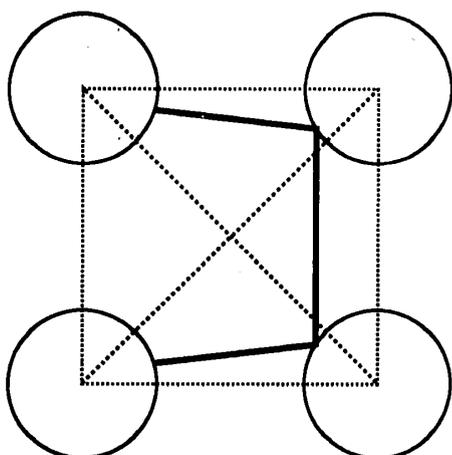
図 A.3: 周期 2 の古典周期軌道



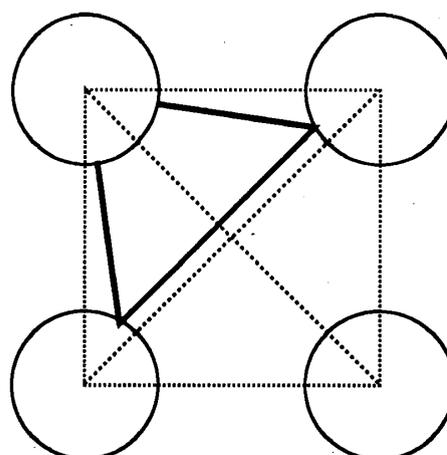
“001” 軌道



“002” 軌道

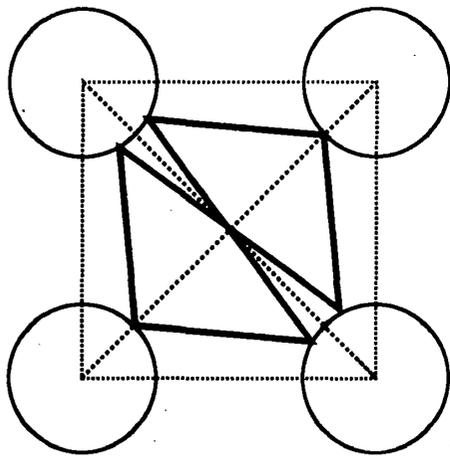


“011” 軌道

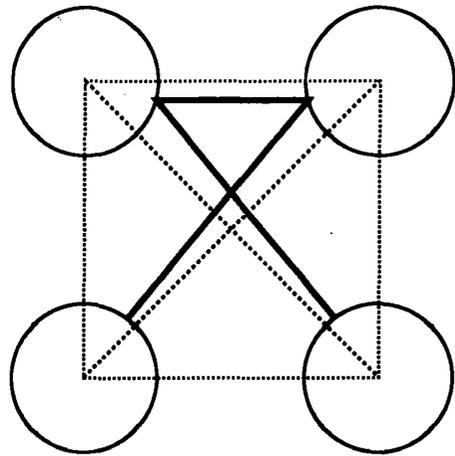


“012” 軌道

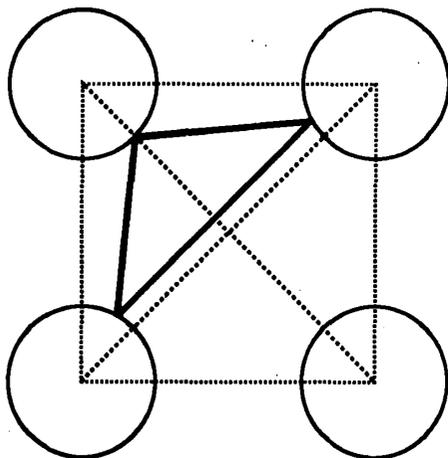
図 A.4: 周期 3 の古典周期軌道 (a)



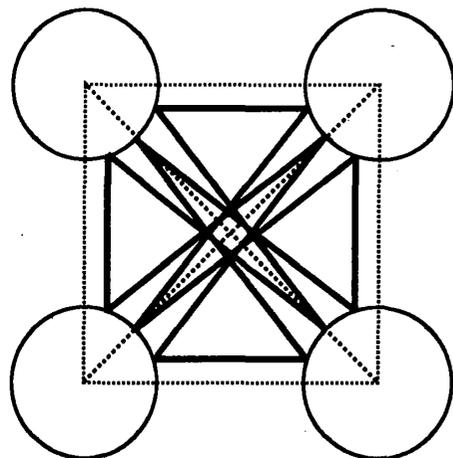
“021” 軌道



“022” 軌道



“112” 軌道



“122” 軌道

図 A.5: 周期 3 の古典周期軌道 (b)

B 量子論での計算の詳細

量子論 (3章) での S 行列の導出における計算の詳細をここに示す。以下の議論のために、グリーン関数の定理を適用する領域 D とその境界を図 B.1 に示す。

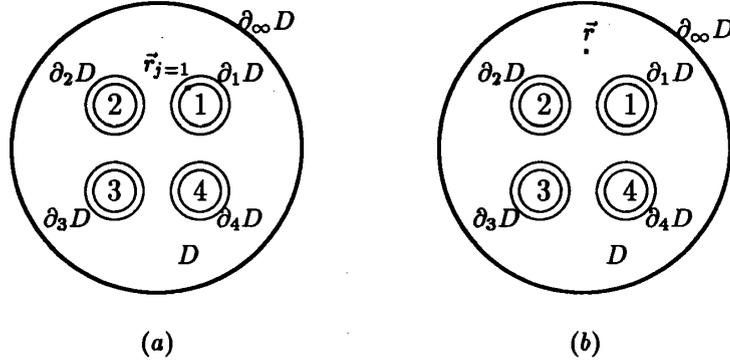


図 B.1: グリーン関数の定理を適用する領域 D とその境界

B.1 点 r が disk 境界上にある場合

この場合の点 r は図 B.1(a) に示してある。 $r = r_j$, つまり領域 D 上にはない時, (3.4) 式の左辺は恒等的に 0 である。

$$\oint_{\partial D} dS' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}')] = 0 \quad (\text{B.1})$$

よって,

$$\begin{aligned} & \oint_{\partial_\infty D} dS' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \\ &= \sum_{j=1}^4 \oint_{\partial_{j'} D} dS'_{j'} [G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}'_{j'}) \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

となる。周積分は 5 つの部分に分けられる。1 つは $\partial_\infty D$ 上で後の 4 つは disk の境界の近傍である。計算の最後で, $\partial_{j'} D$ は境界上の点への極限をとる。ここで, $\Psi_{kl}(\mathbf{r}) = 0$ となる。

まず, 遠方における周積分, $I_\infty(\mathbf{r}_j)$ を評価する。Bessel 関数の加法定理

$$J_\nu(w) e^{i\nu x} = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} J_{\nu+k}(u) J_k(v) e^{ik\alpha} \quad (\text{B.3})$$

を使うと, 伝播関数 (3.5) 式は

$$G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') = \frac{1}{4i} \sum_{m=-\infty}^{\infty} H_m^{(1)}(kr') J_m(kr_j) \exp [im(\phi_{r_j} - \phi_{r'})] \quad (\text{B.4})$$

のようになる。ここで、 $\phi_{r'}$, ϕ_{r_j} は \mathbf{r}' , \mathbf{r}_j の極角である。十分大きい r' での伝播関数の漸近形は、

$$G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') \simeq \frac{1}{4i} \left(\frac{2}{\pi k r'} \right)^{1/2} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{i(kr' - m\pi/2 - \pi/4)} J_m(kr_j) e^{im(\phi_{r_j} - \phi_{r'})} \quad (\text{B.5})$$

その勾配は、

$$\partial_{r'} G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') \simeq ikG(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') \quad (\text{B.6})$$

となる。(3.2) 式より、 $\Psi_{kl}(\mathbf{r}')$ の漸近形は、

$$\begin{aligned} \Psi_{kl}(\mathbf{r}') &\simeq \frac{1}{(2\pi k r')^{1/2}} \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} \left[e^{-i(kr - l'\pi/2 - \pi/4)} \delta_{ll'} + S_{ll'} e^{i(kr - l'\pi/2 - \pi/4)} \right] e^{il'\phi} \\ &= \Psi_{kl}^{(1)}(\mathbf{r}') + \Psi_{kl}^{(2)}(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

ただし、

$$\begin{aligned} \Psi_{kl}^{(1)}(\mathbf{r}') &= \frac{1}{(2\pi k r')^{1/2}} \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} e^{-i(kr - l'\pi/2 - \pi/4)} \delta_{ll'} e^{il'\phi} \\ \Psi_{kl}^{(2)}(\mathbf{r}') &= \frac{1}{(2\pi k r')^{1/2}} \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} S_{ll'} e^{i(kr - l'\pi/2 - \pi/4)} e^{il'\phi} \end{aligned}$$

である。また、 $r' \rightarrow \infty$ の漸近形で、 $\Psi_{kl}(\mathbf{r}')$ の勾配は (B.6) 式と同様にして、

$$\partial_{r'} \Psi_{kl}(\mathbf{r}') \simeq -ik\Psi_{kl}^{(1)}(\mathbf{r}') + ik\Psi_{kl}^{(2)}(\mathbf{r}') \quad (\text{B.8})$$

となるから、 $I_\infty(\mathbf{r}_j)$ は、

$$\begin{aligned} &I_\infty(\mathbf{r}_j) \\ &= \oint_{\partial_\infty D} dS' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \\ &= \oint_{\partial_\infty D} dS' \{ [\Psi_{kl}^{(1)}(\mathbf{r}') + \Psi_{kl}^{(2)}(\mathbf{r}')] ikG(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') \\ &\quad - G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') \{-ik\Psi_{kl}^{(1)}(\mathbf{r}') + ik\Psi_{kl}^{(2)}(\mathbf{r}')\} \} \\ &= \oint_{\partial_\infty D} dS' 2ikG(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}') \Psi_{kl}^{(2)}(\mathbf{r}') \\ &= \int_0^{2\pi} r' d\phi_{r'} \left[\frac{2ik}{4i} \sqrt{\frac{2}{\pi k r'}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{i(kr' - m\pi/2 - \pi/4)} J_m(kr_j) e^{im(\phi_{r_j} - \phi_{r'})} \right. \\ &\quad \left. \times \sqrt{\frac{1}{2\pi k r'}} \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} e^{-i(kr' - l'\pi/2 - \pi/4)} \delta_{ll'} e^{il'\phi_{r'}} \right] \\ &= 2\pi \times \frac{1}{2\pi} e^{i\phi_{r_j}} J_1(kr_j) \\ &= J_1(kr_j) e^{i\phi_{r_j}} \\ &= e^{i\phi_{r_j}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_{l-m}(ks) J_m(ka) e^{im\theta_j} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

となる。ここで最後の等号では、Bessel 関数の加法定理 (B.3) 式を使った。

次に disk の境界上の Ψ_{kl} の勾配に対する (3.7) 式を使って、disk の近くの周積分を評価する。Bessel 関数の加法定理 [(B.3) 式] を二回使って、

$j = j'$ の時、

$$\oint_{\partial_j D} dS'_j [G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}'_j) \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}'_j)] = \frac{\pi a}{2i} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} A_{ljm} H_m^{(1)}(ka) J_m(ka) e^{im\theta_j} \quad (\text{B.10})$$

$j \neq j'$ の時、

$$\begin{aligned} & \oint_{\partial_{j'} D} dS'_{j'} [G(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}'_{j'}) \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}'_{j'})] \\ &= \frac{\pi a}{2i} \sum_{m, m'=-\infty}^{+\infty} H_{m-m'}(kR) J_m(ka) J_{m'}(ka) A_{lj'm} e^{im'\theta_j} e^{-\epsilon_{jj'} i \frac{\pi}{4} (3m-m')} \delta_{|j-j'| \bmod 2, 1} \\ &+ \frac{\pi a}{2i} \sum_{m, m'=-\infty}^{+\infty} H_{m-m'}(\sqrt{2}kR) J_m(ka) J_{m'}(ka) A_{lj'm} e^{im'\theta_j} e^{-\epsilon_{jj'} im\pi} \delta_{|j-j'| \bmod 2, 0} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

ただし、

$$\begin{aligned} \epsilon_{jj'} &= 0, \quad \epsilon_{jj'} = -\epsilon_{j'j} \\ \epsilon_{12} &= \epsilon_{23} = \epsilon_{34} = \epsilon_{41} = \epsilon_{13} = \epsilon_{24} = 1 \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

である。(B.9), (B.10), (B.11) 式を (B.2) 式に代入すると、

$$\sum_{j'm'} \sum_m A_{lj'm} M_{j'mjm'} e^{im'\theta_j} = \sum_{m'} C_{ljm'} e^{im'\theta_j} \quad (\text{B.13})$$

を得る。

B.2 点 r が領域 D の中の disk から十分離れたところにある場合

この場合の点 r は図 B.1(b) に示してある。この時、(3.4) 式の Green の定理は

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \int_D d^2 r' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}') (\Delta' + k^2) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\Delta' + k^2) \Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \\ &= \int_D \Psi_{kl}(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \\ &= \Psi_{kl}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned} \text{右辺} &= \oint_{\partial D} dS' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \\ &= \oint_{\partial_{\infty} D} dS' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \\ &+ \sum_{j=1}^4 \oint_{\partial_j D} dS'_j [\Psi_{kl}(\mathbf{r}'_j) \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'_j) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'_j) \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}'_j)] \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

であるから,

$$\begin{aligned} \Psi_{kl}(\mathbf{r}) = & \oint_{\partial_{\infty}D} dS' [\Psi_{kl}(\mathbf{r}') \nabla' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}')] \\ & - \sum_{j=1}^4 \oint_{\partial_j D} dS'_j [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'_j) \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}'_j)] \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

となる。 $\partial_{\infty}D$ にわたる積分は, (B.9) 式と同様にして,

$$I_{\infty}(\mathbf{r}) = \exp(il\phi_r) J_l(kl) \quad (\text{B.17})$$

となる。 $\partial_j D$ にわたる積分は, (B.11) 式と同様に行い,

$$\begin{aligned} & \oint_{\partial_j D} dS'_j [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'_j) \nabla' \Psi_{kl}(\mathbf{r}'_j)] \\ = & \oint a d\theta_{j'} \left[\frac{1}{4i} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} H_m^{(1)}(kr) J_m(kr_{j'}) \exp\{im(\phi_{r_{j'}} - \phi_r)\} \sum_{m'=-\infty}^{+\infty} A_{lj'm'} e^{im'\theta_{j'}} \right] \\ = & \oint a d\theta_{j'} \left[\frac{1}{4i} \sum_{m,m'=-\infty}^{+\infty} H_m^{(1)}(kr) \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} J_{m+l'}(ks) J_{l'}(ka) e^{i(m'-l')\theta_{j'}} e^{im(\phi_{s_{j'}} - \phi_r)} \right] \\ = & \frac{2\pi a}{4i} \sum_{m,m'=-\infty}^{+\infty} H_m^{(1)}(kr) J_{m+m'}(ks) J_{m'}(ka) e^{im(\phi_{s_{j'}} - \phi_r)} A_{lj'm'} \\ = & \frac{\pi a}{2i} \sum_{m,l'=-\infty}^{+\infty} H_{l'}^{(1)}(kr) J_{l'-m}(ks) J_m(ka) e^{il'(\phi_r - \phi_{s_{j'}})} A_{lj'm} \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

のようになる。ただし, Bessel の加法定理

$$J_m(kr_{j'}) e^{-im(\phi_{s_{j'}} - \phi_{r_{j'}})} = e^{im\phi_{s_{j'}}} \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} J_{m+l'}(ks) J_{l'}(ka) e^{-il'\theta_{j'}} e^{il'\pi}$$

を使った。(B.17), (B.18) 式を (B.16) 式に代入すると,

$$\begin{aligned} \Psi_{kl}(\mathbf{r}) = & e^{il\phi_r} J_l(kr) - \frac{\pi a}{2i} \sum_{j=1}^4 \sum_{m,l'=-\infty}^{+\infty} A_{ljm} H_{l'}^{(1)}(kr) e^{il'(\phi_r - \phi_{s_{j'}})} J_{l'-m}(ks) J_m(ka) \\ = & \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} \left[J_{l'}(kr) \delta_{ll'} + \frac{i\pi a}{2} \sum_{j=1}^4 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} A_{ljm} H_{l'}^{(1)}(kr) e^{-il'\phi_{s_{j'}}} J_{l'-m}(ks) J_m(ka) \right] \\ & \times e^{il'\phi_r} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

を得る。ここで, $J_{l'}(kr)$, $H_{l'}^{(1)}(kr)$ の漸近形は,

$$\begin{aligned} J_{l'}(kr) & \simeq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \left[e^{-i(kr - l'\pi/2 - \pi/4)} + e^{i(kr - l'\pi/2 - \pi/4)} \right], \\ H_{l'}^{(1)}(kr) & \simeq 2 \sqrt{\frac{1}{2\pi kr}} e^{i(kr - l'\pi/2 - \pi/4)}, \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

であるから、 $\Psi_{kl}(\mathbf{r})$ の漸近形は、

$$\begin{aligned} \Psi_{kl}(\mathbf{r}) &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi kr}} e^{i\phi_r} \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} \left[\delta_{ll'} e^{-i(kr-l'\pi/2-\pi/4)} \right. \\ &\quad \left. + e^{i(kr-l'\pi/2-\pi/4)} \left\{ \delta_{ll'} + i\pi a \sum_{j=1}^4 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} A_{ljm} J_{l'-m}(ks) J_m(ka) e^{-il'\phi_{s,j'}} \right\} \right] \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi kr}} e^{i\phi_r} \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} \left[\delta_{ll'} e^{-i(kr-l'\pi/2-\pi/4)} + S_{ll'} e^{i(kr-l'\pi/2-\pi/4)} \right] e^{i\phi_r} \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

となる。ただし [(3.2) 式との比較より],

$$S_{ll'} = \delta_{ll'} + i\pi a \sum_{j=1}^4 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} A_{ljm} J_{l'-m}(ks) J_m(ka) e^{-il'\phi_{s,j'}} \quad (\text{B.22})$$

である。

C 散乱共鳴を与える点の分布関数

散乱共鳴を与える波数 k の単位 $\text{Re}(k)$ 当たりの $|\text{Im}(k)|$ の分布関数を求める。散乱共鳴は Ruelle ゼータ関数の零点で起こる。このゼータ関数を

$$\zeta^{-1}(-ik) = f(x+iy) = \sum_{n=1}^N b_n \exp\{\lambda_n(x+iy)\} \quad (\text{C.1})$$

のように書き換える。ここで、 $y = \text{Re}(k)$, $x = -\text{Im}(k)$ である。一般に (C.1) 式は y の周期関数であるから、

$$f(x+iy) = \sum_{n=1}^N B_n(x) \exp(i\lambda_n y) \quad (\text{C.2})$$

と書き換えられる。ここで、

$$B_n(x) = b_n \exp(\lambda_n x) \quad (\text{C.3})$$

である。

ところで、図 C.1 のように複素平面上の長方形 C に含まれる $f(x+iy)$ の 0 点の数は、

$$\begin{aligned} N(x_1, x_2; y_1, y_2) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C d \log f(x+iy) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C d [\log |f(x+iy)| + i \arg f(x+iy)] \\ &= \frac{1}{2\pi} \oint_C d \arg f(x+iy) \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

で計算できる [13]。単位 $\text{Re}(k)$ 当たりの $x_1 < -\text{Im}(k) < x_2$ に含まれる $f(x+iy)$ の数を

$$H(x_1, x_2) \equiv \lim_{(y_2-y_1) \rightarrow \infty} \frac{N(x_1, x_2; y_1, y_2)}{y_2 - y_1} \quad (\text{C.5})$$

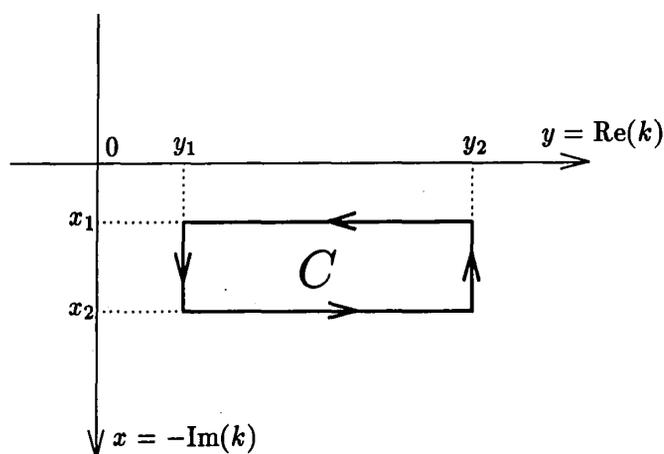


図 C.1: (C.4) 式で使われる複素平面での周積分

のように定義する。十分大きい $(y_2 - y_1)$ に対しては長方形 C の虚軸に沿った部分からの寄与は消え,

$$H(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} [M(x_2) - M(x_1)] \quad (\text{C.6})$$

となる。ここで $M(x)$ は複素ベクトル $f(x + iy)$ の平均運動で,

$$M(x) \equiv \lim_{y \rightarrow \infty} \frac{1}{y} \arg [f(x + iy)] \quad (\text{C.7})$$

である。 $x_1 = 0$ とすると, 求めるべき分布関数

$$\begin{aligned} h(x) &\equiv H(0, x) \\ &= \lim_{(y_2 - y_1) \rightarrow \infty} \frac{\arg f(x + iy_2) - \arg f(x + iy_1)}{2\pi (y_2 - y_1)} \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

を得る。

参考文献

- [1] M. C. Gutzwiller, "Chaos in Classical and Quantum Mechanics" (Springer, Berlin, 1990).
- [2] A. Wirzba, *CHAOS* **2**, 77 (1992).
- [3] P. Gaspard and S. A. Rice, *J. Chem. Phys.* **90**, 2225 (1989).
- [4] P. Gaspard and S. A. Rice, *J. Chem. Phys.* **90**, 2242 (1989).
- [5] P. Gaspard and S. A. Rice, *J. Chem. Phys.* **90**, 2255 (1989).

- [6] P. Cvitanovic and B. Eckhardt, *Nonlinearity* **6**, 277 (1993).
- [7] R. Balian and C. Bloch, *Ann. Phys.* **85**, 514 (1974).
- [8] W. Thirring, "Quantum Mechanics of Atoms and Molecules" (Springer, Berlin, 1981) pp.165-186.
- [9] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **8**, 1979 (1967); **10**, 1004 (1969); **11**, 1791 (1970); **12**, 343 (1971); *Phys. Rev. Lett.* **45**, 150 (1980); *Physica D* **5**, 183 (1982); *J. Phys. Chem.* **92**, 3154 (1988).
- [10] W. H. Miller, *J. Chem. Phys.* **56**, 38 (1972).
- [11] 原山 卓久・首藤 啓, 物性研究 **61**, 222 (1993).
- [12] P. Gaspard, "Scattering and Resonances: Classical and Quantum Dynamics" (Soc. Italiana di Fisica, Bologna, 1993)
- [13] B. Jessen and H. Tornehave, *Acta Math.* **77**, 137 (1945).