

スピン・軌道結合を有する平均場における量子・古典対応

在田 謙一郎 (京大・基研) *

原子核、マイクロクラスターをはじめとする有限量子系の興味深い特徴の一つとして、その形態が構成粒子数によって多様に変化する点が挙げられる。この多様性を生み出す要因が、一粒子スペクトルに見られる殻構造である。量子スペクトルを古典周期軌道と対応づける Gutzwiller トレース公式は、殻構造の形成メカニズムとその性質を解析する手段として非常に有用である。この報告では、周期軌道理論をスピン・軌道結合系に適用するための方法として、チャンネル結合 WKB 理論と $SO(3)$ 近似の二つについて考察を行なう。原子核の平均場は強いスピン・軌道結合を有することが知られているが、こうした系でも量子古典対応が議論できれば、原子核のダイナミクスに対する理解を一層深めることができる。

スピン自由度を考慮する時の問題は、スピンの純粋に量子論的な物理量であるため、その古典的対応物が自明でない点にある。ここで扱う方法のうち、 $SO(3)$ 近似は、 $SU(2)$ スピンを長さの決まったベクトルで置き換える。この「古典的スピン」により、新たに一組の正準変数 $(q_s, p_s) = (\varphi, s \cos \vartheta)$ が内部自由度として導入される。ここで、 (s, ϑ, φ) はスピンベクトルの球座標表示で、大きさは一定値 $s = \hbar/2$ をとる。こうして作られたハミルトニアンから得られる古典運動方程式は、量子論的な演算子の期待値が従う方程式と（少なくとも調和振動子の場合は厳密に）一致することが知られている [1]。しかしながら、この方法では自由度の数が増えるため、軸対称性を仮定してもポアンカレ断面が 4 次元となり古典位相空間の構造を調べることが実際上きわめて困難である。

これに代わる方法として着目しているのが、チャンネル結合 WKB 法 [2-5] である。ハミルトニアンはスピンの足をもつ行列で表されるが、この行列をスピン「チャンネル」について (adiabatic に) 対角化することにより、独立な複数のスカラーハミルトニアンの問題に帰着させようというのがこの方法の考え方である。この場合、一粒子準位密度は

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \text{Tr} \delta(E - \hat{H}) \\ &= \text{Tr} \delta(E - \hat{D}), \quad \hat{D} = \hat{U} \hat{H} \hat{U}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{\lambda}_1 & 0 \\ 0 & \hat{\lambda}_2 \end{pmatrix} \\ &= \text{tr} \delta(E - \hat{\lambda}_1) + \text{tr} \delta(E - \hat{\lambda}_2) \end{aligned}$$

となり、最後の表式に対しては通常の半古典近似を適用することができる。しかもこの方法では、スピンに対応する自由度があらわに出てこないで自由度が少なく済み、周

*現所属: 名古屋工大物理学教室

期軌道の計算や位相空間構造の解析を容易に行なうことができる。但し、上の対角化は演算子の対角化であって、決して自明な問題ではない点には注意を要する。ハミルトニアン行列の各要素の期待値は時間的に変化するので、 U は時間に陰に依存している。従って、 H の代わりに D を解くことは、各瞬間で U の時間変化を無視する adiabatic 近似をしたことに相当している。

具体的な手続きを、調和振動子模型を例にとって述べよう。ハミルトニアンとして、

$$H = \frac{p^2}{2} + \sum_i \frac{\omega_i^2 x_i^2}{2} - 2\kappa L' \cdot S \quad (1)$$

を考える。ここで、スピンは $S_i = \sigma_i/2$ 、軌道角運動量 L' はストレッチ座標

$$x'_i = \sqrt{(\omega_i/\omega_0)} x_i, \quad p'_i = \frac{p_i}{\sqrt{\omega_i/\omega_0}} \quad (2)$$

で定義されている。Wigner 変換を用いてスピンの足についての対角化（詳しくは文献 [3] 参照）を行なうと、 \hbar の最低次で二つのスカラーハミルトニアン

$$\lambda_{\pm} = \frac{p^2}{2} + \sum_i \frac{\omega_i^2 x_i^2}{2} \pm \kappa L' \quad (3)$$

が得られる。次のオーダーの項 $\hbar\lambda^{(1)}$ は、adiabatic 近似に関連して現れる Berry's phase と、チャンネル結合系特有の additional phase から成るが、これらは運動方程式では考慮せず、トレース公式に適用する際に作用積分に対する補正項として取り扱う近似を行なう：

$$S = \oint (\mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} + \hbar\lambda^{(1)} dt). \quad (4)$$

球対称のときは $L' = L$ は保存するが、変形を加えると L' が時間的に変化し、ある時刻で 0 になる状況が起こり得る。これはモード交差 [6] と呼ばれ、この点では adiabatic 近似が成り立つための条件が破綻している。ところが、Frisk 等の楕円キャビティの解析では、下述するようにモード交差点において古典軌道を diabatic に補正することにより精度の良い量子古典対応が得られることが数値的に例示された。軸対称性から、角運動量の z 成分は保存するので、モード交差を生じる軌道は $L_z = 0$ 、すなわち対称軸を含む面内の軌道に限られる。一般性を失うことなく、この面を (y, z) 平面に選ぶことができる。平面上の運動は二自由度ハミルトニアン

$$\lambda_{\pm}^{\text{ad}} = \frac{1}{2}(p_y^2 + p_z^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \pm \kappa |L'_x| \quad (5)$$

によって記述される。この運動を "adiabatic motion" と呼ぶことにする。これに対してモード交差点、すなわち $L'_x = 0$ となる点を境に λ_+ に従う運動から λ_- に従う運動へ移行するものを考え、"diabatic motion" と呼ぶ。これは、(5) 式で絶対値をはずした

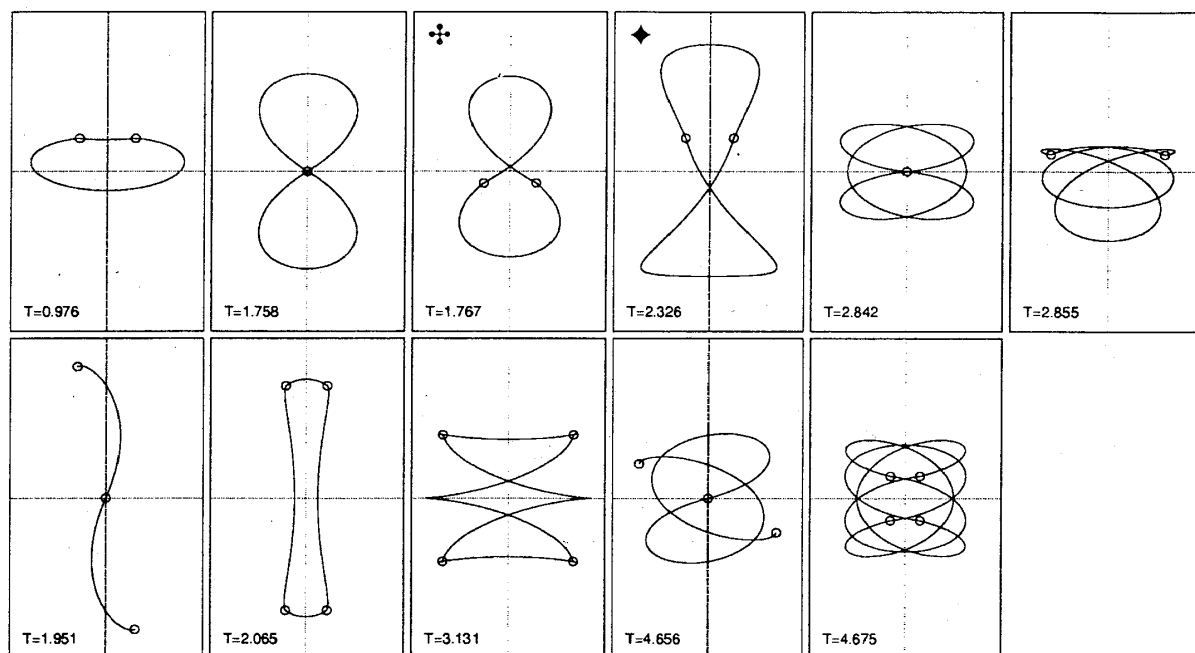
$\delta=0.6$ $\kappa=0.2$ favored

図 1. adiabatic ハミルトニアン (5) の周期軌道。○印はモード交差点を表す。変形度と LS 結合定数は、それぞれ $\omega_{\perp}/\omega_z = 2, \kappa = 0.2$ 。

$$\lambda_{\pm}^{\text{dia}} = \frac{1}{2}(p_y^2 + p_z^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \pm \kappa L'_x \quad (6)$$

で記述される運動であることが分かる。ハミルトニアン (6) は、適当な正準変換により角周波数 $\omega_{\pm} = (\omega_y + \omega_z)/2 \pm [(\omega_y - \omega_z)^2/4 - \kappa^2]^{1/2}$ の二次元調和振動子になるので、その周期軌道は容易に知ることができる。adiabatic 軌道の計算は解析的には困難なので、Monodromy 法という数値解法を用いた。こうして得られた周期軌道 (図 1) を量子スペクトルのフーリエ変換と比較したのが図 2 である。キャビティでは adiabatic 軌道に対応するピークはなく、diabatic 軌道の寄与が見られたのに対して、調和振動子の場合は (diabatic 補正をしない) adiabatic 軌道がスペクトルに重要な寄与をしていることが分かる。図 2 から分かるもう一つの特徴は、モード交差を多く経た軌道ほど、その寄与は小さくなっていることである。軌道の準位密度に対する寄与の大きさは、軌道に沿って運動する波束の自己相関関数 $\langle \psi(0) | \exp[-iHt] | \psi(0) \rangle$ に関係しているが、上の性質は波束の強度がモード交差点において adiabatic path と diabatic path とに分離していくと考えたと説明がつく。数値計算により、上の説明を裏付けられるかどうかについては現在検討中である。

次に、同じ模型を $SO(3)$ 近似で取り扱い、結果を比較してみよう。自由度が大きいため位相空間の大局的構造を調べることは困難であるが、特殊な初期条件の軌道から WKB 法との関連について情報を得ることができる。初期条件として、軌道角運動量とスピン角運動量とが平行で、共に主軸方向を向いている場合を考える。このとき、スピンは時間的

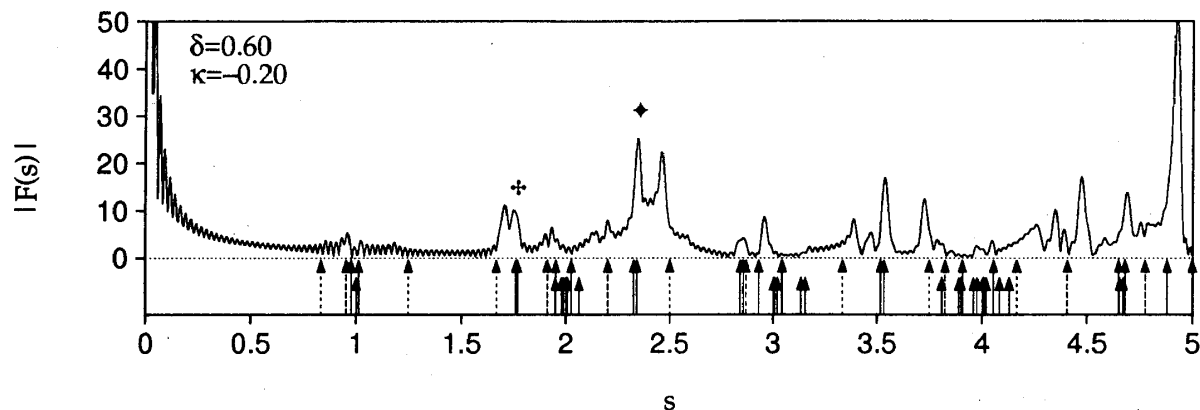


図2. ハミルトニアン(1)の量子スペクトルのフーリエ変換。運動方程式のスケール不変性から、準位密度のフーリエ変換は軌道の周期の位置にピークを持つ関数になることが分かる。ピークの高さが、対応する軌道の準位密度に対する寄与の大きさを表す。図の下にある矢印は、古典周期軌道の周期を示す。点線の矢印は diabatic 軌道で、実線が adiabatic 軌道を表す。adiabatic 軌道のうち、モード交差点を4回以上通るものは、短い矢印で区別した。

に一定で、軌道運動は同一平面上に留まることが分かる。この運動は WKB での diabatic 運動に厳密に対応している。次に、初期のスピンの向きを軌道角運動量の向きに対してわずかにずらした軌道を調べると、スピンと軌道運動との結合によりスピン反転が起こっていることが分かった。実際に周期軌道を解いてみないと正確なことは言えないが、トーラスの形との対応からは WKB の adiabatic 軌道に対応した運動であることが予想される。

結論としては、チャンネル結合 WKB 理論を用いて量子古典対応を議論するとき、対応する古典系としてはモード交差点で diabatic に補正された軌道とともに adiabatic 軌道の寄与も考慮する必要がある。どちらの寄与が重要であるかは、系の性質によって、さらには軌道自身の性質によっても異なるであろう。フーリエ解析の結果から、スピン軌道結合がある場合のスペクトルは、チャンネル結合 WKB 法によって定義される古典系の周期軌道とかなりよい対応を示しており、この理論の有効性を示唆していると言える。今後は、adiabatic path と diabatic path への強度の分布が系や軌道の如何なる性質と関係しているのかを考察し、原子核のより現実的なモデルにおける殻構造形成のメカニズムを調べていくことが重要な課題である。

参考文献

- [1] P. Rozmej and R. Arvieu, Nucl. Phys. **A545** (1992), 497c.
- [2] K. Yabana and H. Horiuchi, Prog. Theor. Phys. **75** (1986), 592; **77** (1987), 517.
- [3] R. G. Littlejohn and W. G. Flynn, Phys. Rev. **A44** (1991), 5239.
- [4] R. G. Littlejohn and W. G. Flynn, Phys. Rev. **A45** (1992), 7697.
- [5] H. Frisk and T. Guhr, Ann. Phys. (N.Y.) **221** (1993), 229.
- [6] M. Berry, Proc. R. Soc. Lond. **A392** (1984), 45.