

有限量子系のシェル構造と周期軌道分岐

名古屋工大・工 在田 謙一郎

1 有限量子系のシェル構造

原子核、マイクロクラスターをはじめとする有限量子系は、液滴模型の様な巨視的描像でとらえられる側面を有する一方で、構成粒子数による多様な形態の変化（変形、構造）を特徴とする。このことは、量子揺らぎ（シェル構造）が系の性質を決める上で重要な役割を果たしていることを意味する。シェル構造とは、一粒子準位密度に見られる疎密の大局的パターンのことである。原子核やアルカリ金属クラスターでは、独立粒子描像がよい近似で成立することが知られており、各々の構成粒子の運動は他の構成粒子によって形成される平均場ポテンシャル

$$V_i(\mathbf{r}_i) = \left\langle \sum_{j(\neq i)} v_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right\rangle \quad (1)$$

の中の独立粒子運動として扱える。この平均場ポテンシャルは、原子核や金属クラスターでは Woods-Saxon 型ポテンシャルでよく近似される。これは粒子数の少ないときには調和振動子に近い動径依存性をもつので、そのシェル構造は調和振動子の量子数によって分類できる。また、粒子数が多くなると井戸型に近い動径依存性をもつようになる。

一粒子スペクトルに現れる強いシェル効果は、系の安定性に重要な影響を及ぼす。ある近似的に縮退した一粒子準位群がちょうど満たされた系は「閉殻」と呼ばれ特に強い安定性を示す。一般にこのような閉殻配位は規則的に現れ、対応する粒子数を「魔法数」と呼ぶ。等方調和振動子の魔法数は 2, 8, 20, 40, 70, … となる。実験的に知られている Na クラスターの魔法数は 2, 8, 20, 40, 58, … (図 1), また原子核の魔法数は 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, … (図 2) などとなっている。

2 シェル構造と周期軌道

前節の様な規則的なシェル構造の出現は、量子・古典対応を考えることによって明確に理解することができる。ここでは周期軌道理論によるシェル構造の記述について述べる。[1]

2.1 可積分系

まず、自由度 f と同数の運動の定数をもつ可積分系を考える。ここでは作用 I を運動の定数にとり、ハミルトニアンを $H = H(I)$ と表す。 I に共役な角度変数を θ と表すと、ハミルトンの運動方程式は

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial I} = \omega(I) \quad (2)$$

となり、 f 個の独立な周期運動が結合した多重周期運動を行うことが分かる。こうして $2f$ 次元位相空間中の相軌道は f 次元トーラス上に拘束される (図 3)。

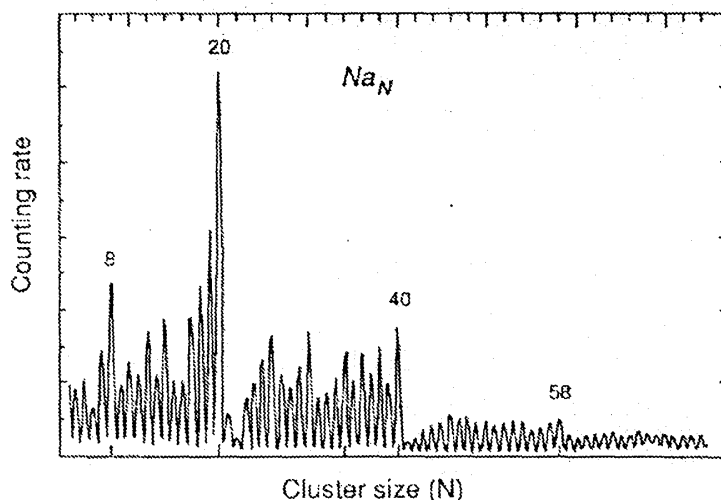


図 1: ナトリウムクラスターの生成数スペクトル。高温の Na 原子ガスを真空中に噴出し、冷却過程で生成されるクラスターの生成量を構成粒子数 N に対してプロットしたもの (Knight et al., 1987)。

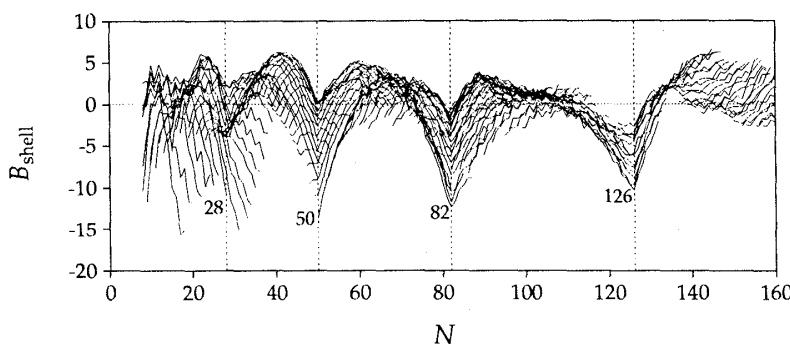


図 2: 原子核束縛エネルギーの液滴模型からのずれ。鋭い谷が閉殻配位を表す。

このような系の半古典量子化は、Bohr-Sommerfeld 量子条件を多重周期系に拡張した EBK (Einstein-Brillouin-Keller) 量子化則によって行われる。

$$E_n = H(I = \hbar(n + \frac{1}{4}\alpha)), \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

α_i は軌道の幾何学的性質に関する整数で Maslov 指数を表す。ここで、異なる量子数を持つ準位が縮退する条件を考える。量子数が Δn 違う二つの準位のエネルギー差は

$$E_{n+\Delta n} - E_n \simeq \frac{\partial H}{\partial I} \hbar \Delta n = \hbar \omega \cdot \Delta n \quad (4)$$

となり、これがゼロとなるには振動数 ω_i が整数比となる必要であることが分かる。これは、軌道が有限の周期で閉じること、すなわち軌道が周期的になることに対応している。この様に周期軌道条件がシェル構造の形成に関係していることが簡単に理解できる。

例として、調和振動子模型の一粒子スペクトルをみてみよう。図 4 に軸対称調和振動子模型のスペクトルを変形度の関数として示す。球形で見られる強い準位の縮退は変形とともに弱まるが、 ω_{\perp} と ω_z の比が簡単な整数比となる変形度 ($\delta = 0.6, -0.75$ など) において強い変形シェル構造が形成されるのが分かる。特に $\delta = 0.6$ は長軸と短軸の比が 2:1 の「超変形」とよばれる状態に対応し、この超変形シェル構造には

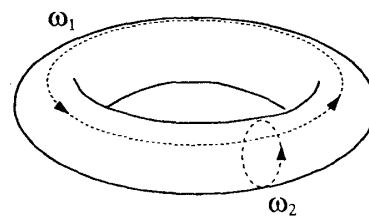


図 3: 可積分系の位相空間構造。相軌道は自由度 f と同数の周期運動が結合したトーラス上に拘束される。図は 2 自由度の場合。

8字型の3次元周期軌道が重要な役割を果たしている。

2.2 非可積分系

系が可積分になると、前節で述べたようなトーラス構造はくずれてカオス軌道が現れるようになる。しかし、このような系においても量子準位密度と古典周期軌道の間に興味深い対応関係が成立する。Gutzwiller は Feynmann 経路積分を半古典近似を用いて評価することにより、準位密度 $g(E)$ を古典周期軌道によって表すトレース公式と呼ばれる重要な関係を導いた [2]。量子準位密度は

$$g(E) = \sum_n \delta(E - E_n) = \text{Tr} \delta(E - \hat{H})$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt e^{iEt/\hbar} \int dr K(r, t; r, 0), \quad (5)$$

$$K(r'', t''; r', t') = \langle r'' | e^{-i\hat{H}(t''-t')/\hbar} | r' \rangle \quad (6)$$

と表される。ここで遷移振幅 K を経路積分表示し、積分を停留位相近似により評価する。停留位相条件は古典運動方程式に一致するので、この近似によって始点 r' と終点 r'' を時間 $t = t'' - t'$ で結ぶ古典軌道の寄与が取り出される。さらに (5) 式のトレース積分を停留位相近似を用いて評価することにより、始点と終点の運動量が一致する周期軌道の寄与だけが取り出され、トレース公式

$$g(E) \simeq \bar{g}(E) + \sum_{\beta} A_{\beta} \cos \left(\frac{1}{\hbar} S_{\beta}(E) - \frac{\pi}{2} \mu_{\beta} \right), \quad \beta: \text{周期軌道} \quad (7)$$

が得られる。これは、準位密度の揺らぎを周期軌道の寄与の和として表すものであり、さまざまな現象の量子・古典対応を議論する上で最も重要な関係式である。

2.3 トレース公式とシエル構造

では、トレース公式を用いてシエル構造、すなわち準位密度の大局的揺らぎ構造の性質がどの様に理解できるかをみてみよう。いま、エネルギースケール δE の揺らぎ構造に着目する。この構造に寄与する軌道は、エネルギーを δE すらしたときの位相のずれが 2π 程度より小さいもの、すなわち

$$\delta S_{\beta}(E) \simeq T_{\beta} \delta E \lesssim 2\pi\hbar \quad \therefore T_{\beta} \lesssim \frac{2\pi\hbar}{\delta E} \quad (8)$$

を満たすものである。従って、短い周期 T をもつ軌道が準位スペクトルの大局的構造に関与していることが分かる。

また、次節で述べる様にトレース公式における振幅因子 A_{β} は周期軌道の安定性に強く依存している。有限量子系が構成粒子数の変化によって多様な形態をみせるのは、シエル構造の性質が変形に対して敏感であることによるが、このことは他ならぬ周期軌道の安定性が変形に強く依存していることの反映である。

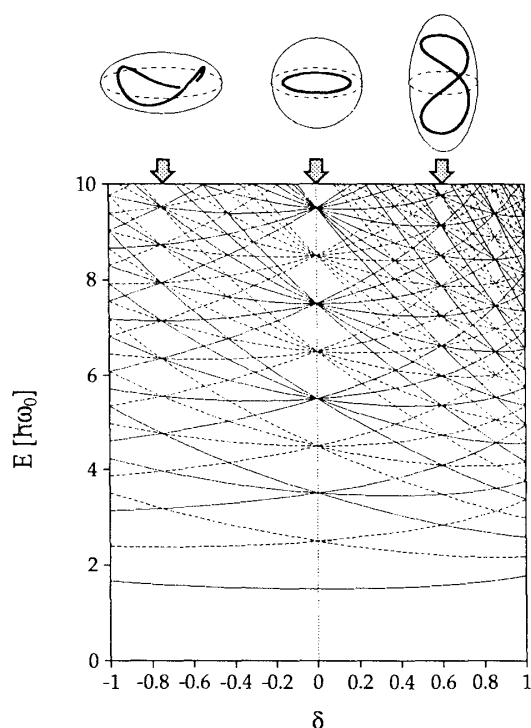


図 4: 軸対称調和振動子模型 ($\omega_x = \omega_y = \omega_{\perp}$) の量子スペクトル。変形度は $\delta = (\omega_{\perp} - \omega_z)/\bar{\omega}$, $\bar{\omega} = (2\omega_{\perp} + \omega_z)/3$ 。

3 周期軌道分岐とシェル構造

ここでは、周期軌道の安定性の変化がトレース公式の振幅因子に及ぼす影響について、特に周期軌道の分岐現象に着目して説明を行う。トレース公式を導く際、トレース積分

$$g = \int F(x) e^{iS(x)} dx \quad (9)$$

を停留位相近似

$$g \simeq F(x^*) e^{iS(x^*)} \int e^{i\frac{C}{2}(x-x^*)^2} dx = A e^{iS^*}, \quad (10)$$

$$A = F(x^*) \sqrt{\frac{2\pi i}{C}}, \quad C = \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}$$

によって評価した。ここで作用積分 $S(x)$ の停留点 x^* が周期軌道に対応し、停留点での曲率 C が周期軌道の安定性を表している。いま、変形度を連続的に変化させたとき、ある変形度を境にして曲率 C が符号を変えたとしよう。すると、一般にその前後で作用積分の停留点、すなわち周期軌道の数が変化する (図5参照)。これを周期軌道の分岐現象という。

振幅因子 A は $1/\sqrt{C}$ に比例するので、分岐点 ($C = 0$) 近傍において顕著な増大を示すことが期待される。これは、 $C = 0$ において周期軌道近傍の軌道が等しい作用を持ち、経路積分においてコヒーレントな寄与を及ぼすためである。この様に、周期軌道分岐はシェル構造の発達に重要な役割を演じることが期待できる。

4 超変形シェル構造の解析

それでは、周期軌道理論を回転楕円体キャビティ模型 (プロレート変形) に適用し、超変形シェル構造の成り立ちについて調べてみよう。キャビティ模型は、ある与えられた形の壁の内部を粒子が自由運動する模型であり、壁との衝突は弾性的であるとする。ここでは、壁の形を回転楕円体

$$R(\theta) = R_0 \frac{\eta^{1/6}}{\sqrt{\eta \sin^2 \theta + \frac{1}{\eta} \cos^2 \theta}} \quad (11)$$

にとり、変形度を長軸と短軸の比 $\eta = R_z/R_\perp$ で表す。この系は任意の変形度 η に対して可積分であることが知られている。変形度を連続的に変化させると赤道面内の平面軌道が次々に分岐を起こし、新しい3次元軌道が形成される。図6に、典型的な周期軌道を示す。

準位密度の量子・古典対応を解析する上で非常に有用な手法として Fourier 変換がある。キャビティ模型ではスケール則により位相空間の構造はエネルギーに依存しない。周期軌道 β に沿った作用積分 S_β は軌道の長さ L_β と運動量の大きさ $p = \hbar k$ の積で表されるため、トレース公式 (7) は

$$g(k) = \bar{g}(k) + \sum_{\beta} A_{\beta} \cos(kL_{\beta} - \pi\mu_{\beta}/2) \quad (12)$$

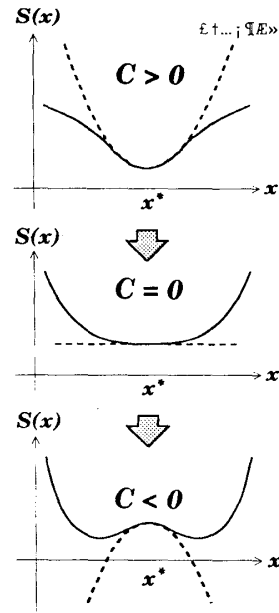


図5: 周期軌道分岐の概念図。作用 $S(x)$ の停留点 $x = x^*$ における曲率 C が符号を変えると、その前後で停留点 (周期軌道) の数が変化する。

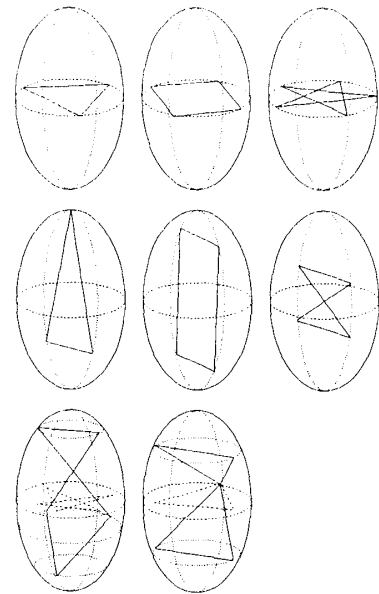


図6: 回転楕円体キャビティの周期軌道の例。変形によって平面軌道は上段の赤道面軌道と中段の対称軸を含む平面内の軌道に分岐する。中断右の蝶ネクタイ型軌道は短軸軌道の分岐によって生まれる。下段の3次元軌道は赤道面軌道の分岐によって生まれる。

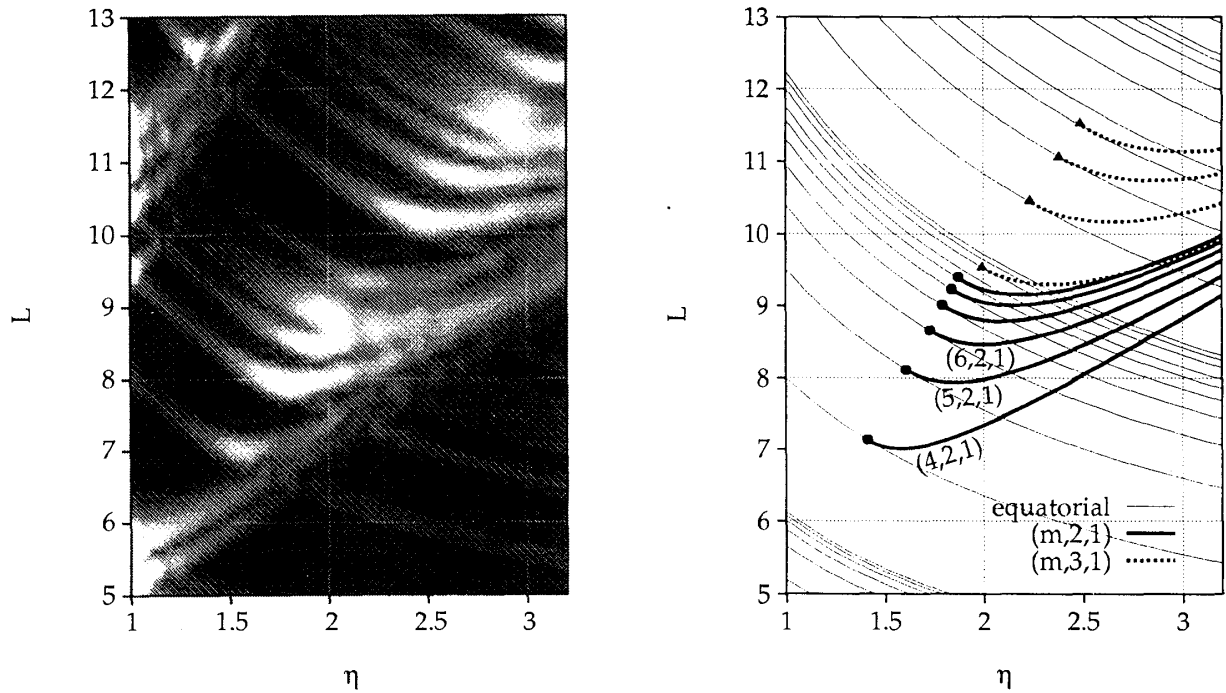


図 7: 左図は量子単位密度のフーリエ変換 $F(L)$ を変形度 η と L の関数としてプロットしたもので、色の白い部分で大きな値をもつ。右図は赤道面軌道とその分岐によって生成される 3 次元軌道の長さ L を変形度の関数としてプロットしたもので、軌道 $(5,2,1)$, $(6,2,1)$ の分岐が超変形領域のシェル構造に重要な寄与をもつことが分かる。

の様に書ける。ここで、波数 k について Fourier 変換をとると

$$F(L) = \int dk e^{ikL} g(k) \sim \sum_{\beta} A_{\beta} e^{i\pi\mu_{\beta}/2} \delta(L - L_{\beta}) \quad (13)$$

となり、 $F(L)$ は周期軌道の長さ $L = L_{\beta}$ に振幅因子 A_{β} に比例する高さのピーク列をもつ関数となることが分かる。従って、量子論的に計算した単位密度の Fourier 変換から古典軌道についての情報を引き出すことが可能である。図 7 に、回転楕円体キャビティ模型の単位密度の Fourier 変換を示す。古典周期軌道の長さに沿ってピークが現れ、分岐点近傍で顕著な増大を示すことが分かる。特に超変形シェル構造には対称軸のまわりを 2 周する様な赤道面軌道の分岐 $(m, 2, 1)$ が重要な寄与をなすことが分かる。この様に、周期軌道分岐はシェル構造の発達に本質的な役割を演じている。

5 スピン・軌道結合系のシェル構造と周期軌道

原子核の平均場には強いスピン・軌道結合があることが知られており、原子核の魔法数を理解する上で重要な意味をもつ。この様なスピンの自由度を陽に含む系においても、周期軌道理論を適用することが可能である [3]。ここではスピニコヒーレント状態経路積分によって古典スピン正準変数を導き、4 自由度のハミルトン系を構成する。スピニコヒーレント状態は

$$|\zeta\rangle = \exp(\zeta\sigma^+) |-\rangle, \quad \sigma^{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y), \quad \sigma^- |-\rangle = 0 \quad (14)$$

によって定義される。これはスピン空間での波束を表し、スピンの平均の向き (ϑ, φ) は複素パラメータ ζ と

$$\zeta = e^{i\varphi} \tan \frac{\vartheta}{2} \quad (15)$$

で関係づけられる。このとき古典ハミルトニアンは

$$H_{cl} = \langle \zeta | \hat{H} | \zeta \rangle \quad (16)$$

によって得られ、スピン正準変数は

$$q_s = \varphi, \quad p_s = s \cos \vartheta \quad (17)$$

により与えられる [4]。すると、スピン変数間のポアソン括弧式は

$$\{s_i, s_j\} = \varepsilon_{ijk} s_k \quad (18)$$

を満たしており、量子論的なスピン演算子の交換関係と厳密に対応していることが分かる。

いま、非等方調和振動子に LS 力を加えた模型

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + \sum_i \frac{\omega_i^2 x_i^2}{2} - 2\kappa \mathbf{L}' \cdot \mathbf{s} \quad (19)$$

を考える。\$L'\$ は stretched 座標 \$x'_i = \sqrt{\omega_i/\omega_0} x_i\$ で定義された軌道角運動量演算子である。この系には、スピンの \$i\$ 軸方向で一定で、軌道運動が \$(j, k)\$

平面内 (\$ijk\$ は \$xyz\$ の巡回置換) の楕円運動となる簡単な周期軌道が存在する。この軌道のスピンを \$i\$ 軸から少しだけ傾けてやるとスピンベクトル \$s\$ は \$i\$ 軸のまわりを回転運動し始めるが、この振動数 \$\omega_s\$ は運動方程式を周期軌道のまわりに展開することにより得られ、球対称系では

$$\omega_s = \kappa \left(\frac{2E}{\omega_{\pm}} + 1 \right), \quad \omega_{\pm} = \omega_0 \mp \kappa \quad (20)$$

で与えられる。複号はそれぞれ、スピンと軌道角運動量が平行なものと反平行なものに対応する。エネルギーを上げていくと、\$\omega_s\$ と軌道運動の振動数との比がちょうど整数比となるところで周期軌道分岐が起こり、スピン運動と軌道運動が結合した 4 次元軌道 4T が生成される。エネルギーをさらに上げていくとスピンの \$i\$ 軸からの傾斜角が増大していき、ついには反転して別の平面軌道に吸収され消滅する (図 8)。また、この生成から消滅の過程で 2 次的な分岐が起きて、スピンの \$(j, k)\$ 平面付近を回転し続ける様な軌道 4D が生じる。前者 (4T) は限られたエネルギー領域にしか存在しないが、後者 (4D) はエネルギーを上げても存在し続けるので、シェル構造への寄与が期待できる。

図 9 は、\$\kappa = 0.2\$ に対する準位密度 \$g(E)\$ のフーリエ変換 \$F(T)\$ を変形度 \$\delta\$ と \$T\$ の関数としてプロットしたものである。古典周期軌道の周期と比較すると、上の平面軌道と 4 次元軌道の寄与が顕著に現れているのが分かる。特に超変形領域 (\$\delta \sim 0.6\$) では 4 次元軌道が重要な役割を果たしていることが分かる。これは、4 次元軌道 4D(\$y, z\$) の \$\delta \simeq 0.4\$ における分岐と密接な関係を有している。

6 Summary

本講演では、有限量子系のシェル構造の性質を理解する上での半古典論の有用性について述べた。ここでは量子準位密度の大局的揺らぎの性質に関して、対応する古典系の周期軌道の性質を通して明解な理解が可能となる。これまで様々な変形自由度に対するシェル構造を調べてきたが、変形シェル構造の発達には例外無く古典周期軌道の分岐が本質的な役割を果たしていた。

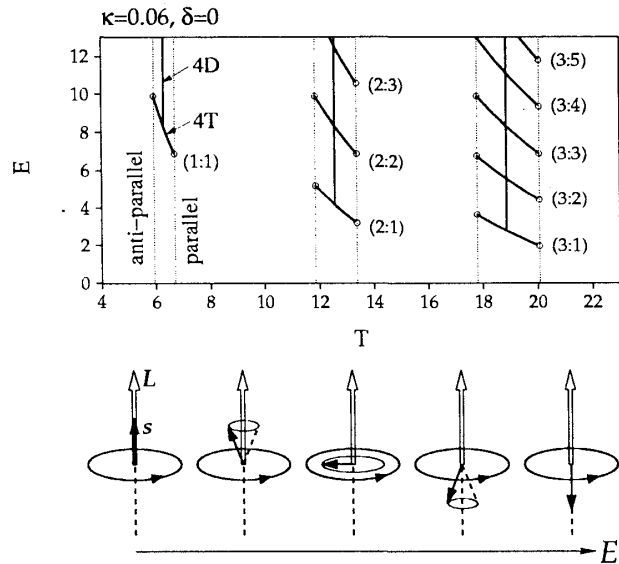


図 8: スピン・軌道結合系の平面周期軌道の分岐。上図は軌道の周期 \$T\$ をエネルギー \$E\$ の関数としてプロットしたもので、縦軸に平行な線は平面軌道を表す。下図はエネルギーを上げていくとき、4 次元軌道 4T が生成されてから消滅するまでの様子を表す。

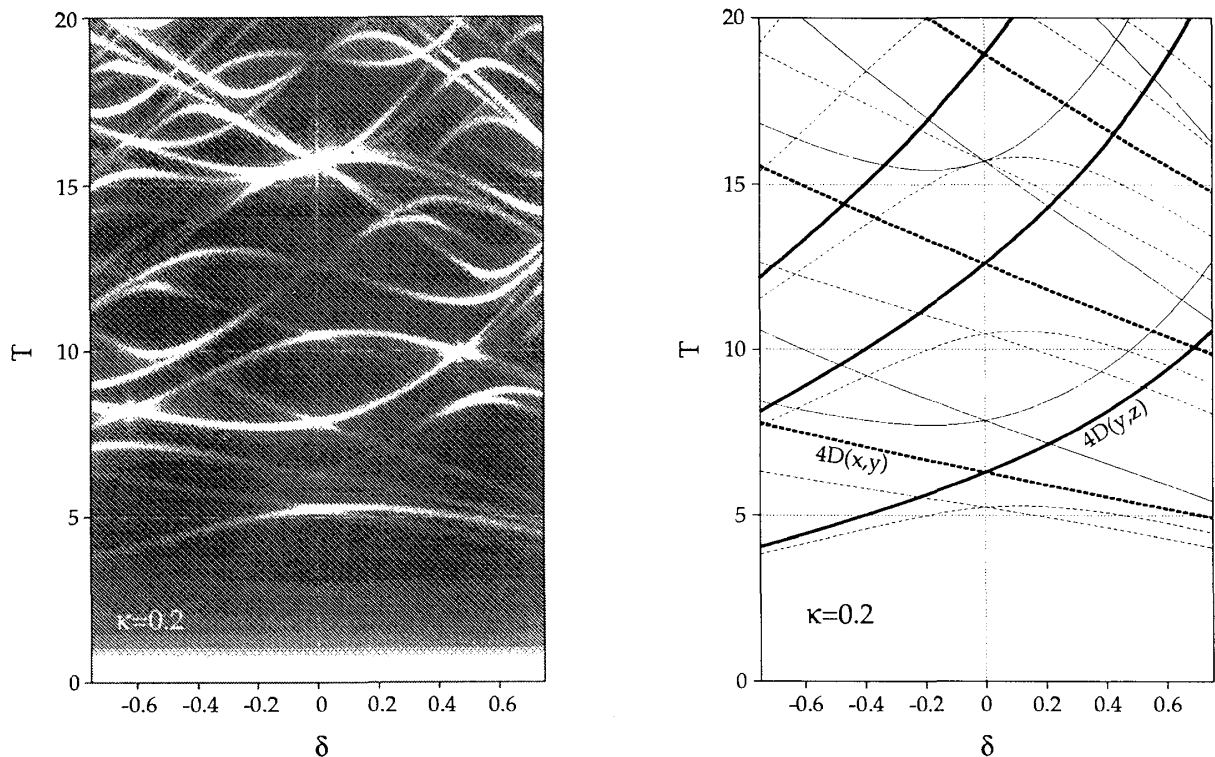


図 9: 左図は量子準位密度 $g(E)$ のフーリエ変換 $F(T)$ を変形度 δ と T の関数としてプロットしたもの。右図は古典周期軌道の周期 T を変形度の関数としてプロットしたものである。細線は平面周期軌道で、実線が赤道面軌道、破線が対称軸を含む平面内の軌道を表す。それらの分岐によって生成される 4 次元軌道を太い実線および破線で表す。4 次元軌道の奇与を見やすくするため、スピン・軌道結合定数には大きめの値 $\kappa = 0.2$ を用いている。

量子・古典対応を議論する際、可積分系では EBK 量子化則、強いカオス系では Gutzwiller トレース公式がよく成り立っている。しかし、現実の物理系のほとんどは、規則運動とカオス運動の混在した "mixed system" となっている。その様な系では周期軌道分岐が至る所で起こっており、トレース公式で用いられた停留位相近似が破綻している。この欠点を克服し、より一般的な系で軌道分岐の影響を定量的に評価することのできる様な周期軌道理論の拡張が今後の重要な課題である。

参考文献

- [1] 在田謙一郎, 松柳研一, 日本物理学会誌 Vol.57, No.1 (2002 年 1 月号・解説), p.37. and references therein.
- [2] M. C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **8** (1967), 1979; **12** (1971), 343.; "Chaos in Quantum and Classical Mechanics", (Springer Verlag, 1990).
- [3] スピン正準変数を用いた解析の例は
P. Rozmaj and R. Arview, Nucl. Phys. **A545** (1992), 497c.
チャンネル結合 WKB 法に基づくアプローチについては
K. Yabana and H. Horiuchi, Prog. Theor. Phys. **75** (1986), 592.
R. G. Littlejohn and W. G. Flynn, Phys. Rev. **A44** (1991), 5239; **A45** (1992), 7697.
H. Frisk and T. Guhr, Ann. Phys. (N.Y.) **221** (1993), 229.
- [4] H. Kuratsuji and T. Suzuki, J. Math. Phys. **21** (1980), 472.