

Title	円ピリアード内の2個の剛体ディスクの量子力学((2)メソスコピック系における量子カオスと量子輸送,京大基研短期研究会「量子カオス:理論と実験の現状」,研究会報告)
Author(s)	中園, 直史; 中村, 勝弘
Citation	物性研究 (2003), 80(1): 95-99
Issue Date	2003-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/97526
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

円ビリヤード内の2個の剛体ディスクの量子力学

大阪市立大学 工学研究科 中園 直史¹, 中村 勝弘

ビリヤード内の1粒子系の量子力学の研究は今まで盛んに行われてきた。しかし、相互作用をする少数粒子系の量子力学の考察はまだ少ない。そこで、円ビリヤード内に2個の同種剛体ディスクを入れたモデルの考察を行った。この系では、円対称性があるにもかかわらず、ディスク間相互作用のために古典カオスが期待できる。ここでは、排除体積効果を表すファクターを波動関数に導入して、量子論による計算を行い、この系の準位統計、圧力、波動関数の考察を行った。結果として、エネルギー非交差に由来する圧力の異常揺らぎなど興味深い振舞いを見ることができた。

1 動機

円ビリヤード内に閉じ込められた2個の同種剛体ディスク系を考察する。この系は、円対称性があるにもかかわらず、ディスク間の相互作用のために古典カオスが期待できる。今回の考察は主として量子論で行う。この系で、エネルギー非交差の存在、量子剛体系の圧力の振舞い、また波動関数の分布などがどのようになっているのかを知りたい。以下では、モデル、計算方法、そして結果について順に述べていく。

2 モデル

円ビリヤード内に2個の同種剛体ディスクがあると仮定する。ここで、スピンおよび自転運動は無視する。2剛体の合成関数を次のように定義する。

$$\Phi_{\alpha}(1,2) = J_{k_1}(\lambda_{k_1 n_1} \frac{r_1}{R-a}) J_{k_2}(\lambda_{k_2 n_2} \frac{r_2}{R-a}) e^{ik_1 \theta_1} e^{ik_2 \theta_2} (1 - e^{-\beta X}) \quad (1)$$

但し、 $J_k(\lambda_{kn})$ は λ_{kn} をゼロ点とする整数次ベッセル関数であり、個々の独立した剛体ディスクがビリヤード内に閉じ込められている時の波動関数の動径部分である。ファクター $(1 - e^{-\beta X})$ は剛体同士の排除体積効果を表す（剛体同士が接触した時、 Φ_{α} がゼロとなる境界条件を与える）。また、 $X = (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta' - l_0^2)/(R-a)^2$ であり、 $\theta' = \theta_2 - \theta_1$ である。 $l_0 (= 2a)$ は、剛体が接触した時の中心間距離である。更に、この合成関数 (1) を座標の入れ換えに関して対称化したもの $\Psi_{\alpha} = (\Phi_{\alpha}(1,2) + \Phi_{\alpha}(2,1))/\sqrt{2}$ を基底関数として採用する。（つまり剛体をボーズ粒子とみなす）。

¹E-mail: nakazono@a-phys.eng.osaka-cu.ac.jp

3 計算方法

長さエネルギーをそれぞれ次のように無次元化しておこう。

$$\frac{\vec{r}}{R-a} \rightarrow \vec{r}, \quad \frac{E}{\frac{\hbar^2}{2m(R-a)^2}} \rightarrow E \quad (2)$$

すると、この系のハミルトニアンは

$$H = - \sum_{i=1,2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \frac{1}{r_i} \frac{\partial}{\partial r_i} + \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i^2} \right) \quad (3)$$

となる。基底関数 Ψ_α にハミルトニアンを作用させると

$$\begin{aligned} H\Psi_\alpha = & [(\lambda_{k_1 n_1}^2 + \lambda_{k_2 n_2}^2)\Psi_\alpha + \{-8\beta J_{k_1} J_{k_2} e^{ik_1\theta_1} e^{ik_2\theta_2} e^{-\beta X} \\ & \times (1 - \beta(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta')) \\ & - 4\beta e^{ik_1\theta_1} e^{ik_2\theta_2} e^{-\beta X} (J_{k_2} \frac{\partial J_{k_1}}{\partial r_1} (r_1 - r_2 \cos \theta') + J_{k_1} \frac{\partial J_{k_2}}{\partial r_2} (r_2 - r_1 \cos \theta')) \\ & + 4i\beta J_{k_1} J_{k_2} e^{ik_1\theta_1} e^{ik_2\theta_2} e^{-\beta X} \sin \theta' (\frac{r_2}{r_1} k_1 - \frac{r_1}{r_2} k_2)\} + \{1 \leftrightarrow 2\}]/\sqrt{2} \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、 $J_k = J_k(\lambda_{kn}r)$ である。

この系は回転対称性があるので全角運動量 $(k_1 + k_2)$ が良い量子数である。ここでは、偶然縮退を極力回避するために全角運動量が 1 ($k_1 + k_2 = k'_1 + k'_2 = 1$) のマニフォールドで計算する。

式(4)の結果に左から、複素共役な基底 $\Psi_{\alpha'}^*$ をかけて積分を行い行列要素を得る。角度については解析的に積分し、続いて動径については数値積分を行った。

ところで、基底関数 $\{\Psi_\alpha\}$ は非直交基底なのでエネルギー行列の固有値問題は標準形になっていない。実際、固有値問題 $H\Phi = E\Phi$ において非直交基底 $\{\Phi_\alpha\}$ による展開 $\Phi = \sum_\alpha C_\alpha \Phi_\alpha$ を採用すると、

$$\sum_\alpha H_{\alpha'\alpha} C_\alpha = \sum_\alpha E N_{\alpha'\alpha} C_\alpha$$

但し、 $H_{\alpha'\alpha} = \langle \Phi_{\alpha'}^* | H | \Phi_\alpha \rangle$ および $\langle \Phi_{\alpha'} | \Phi_\alpha \rangle = N_{\alpha'\alpha} \neq \delta_{\alpha'\alpha}$

ここでノルム・カーネル行列 N の対角化

$$U^{-1} N U \rightarrow N_d$$

を行い、正則化されたエネルギー行列 $\tilde{H} = N_d^{-1/2} U^{-1} H U N_d^{-1/2}$ を導入すると

$$\tilde{H} \vec{g} = E \vec{g}$$

となり通常の固有値問題になる。以下では、この \tilde{H} の固有値問題を解く。

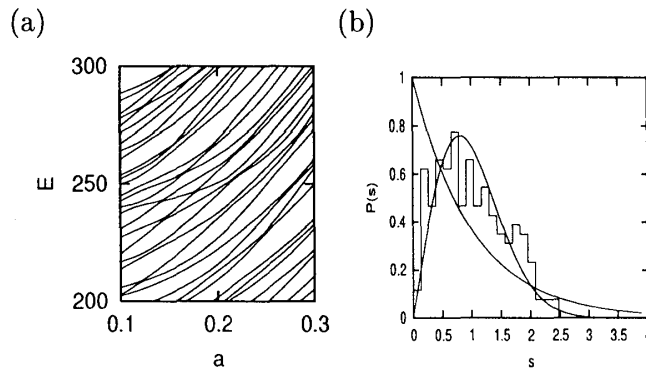


図 1: (a) エネルギースペクトル; (b) レベル間隔 (s) 分布のヒストグラム

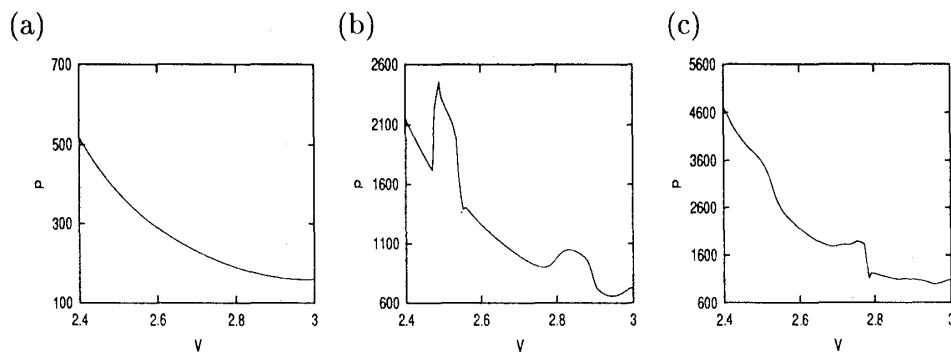


図 2: 圧力の体積依存性 (a)Level=1; (b)Level=25; (c)Level=50

4 結果

エネルギー準位図とヒストグラム

図 1 (a) はディスク半径 a を変化させたときのエネルギー準位の変化である。非可積分系に特有のエネルギー反発が多数見られる。図 1 (b) はレベル間隔の分布であり、カオス系に特有の Wigner 分布になっていることが確認できた。なお、この Wigner 分布は、 $0 < a < \frac{R}{2}$ のほぼ全域で見られる。点極限の $a \rightarrow +0$ でも Wigner 分布となるが、その理由は、排除体積効果（短距離斥力）のためである。

圧力

ディスクが剛体壁にあたると運動量変化が生じ、力積が生まれる。これは、壁が受ける圧力の原因である。古典理想気体論では圧力 p は体積 V に反比例する。また、有限サイズの分子からなる非理想気体では、 $p-V$ 特性において、ファンデルワールス・ピークというショルダーが存在する。今の量子 2 ディスク系の場合 $p-V$ 特性はどのようなだろうか？ 圧力は、次のような各レベルのエネルギーの傾きにより求めることができる。

$$p = -\frac{\partial E_l}{\partial V} \quad (5)$$

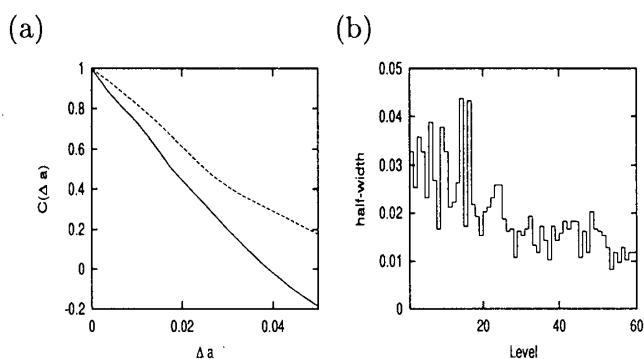


図 3: (a) 圧力の自己相関関数 (点線 : Level=1; 実線 : Level=50); (b) レベルに対する半値幅の変化

ここで、 E_l はレベル l でのエネルギーで、 V は体積で $V = \pi(R^2 - 2a^2)$ である。

図 2 より、圧力が基底状態のときは、古典理想気体と同様に、 p は V の増加につれて単調減少するが、励起状態のときは異常な揺らぎ (複数のファンデルワールス・ピーク) が現れることがわかる。更にエネルギーの高いレベルでは数多くのピークが出現する。これは量子カオス系に特有なエネルギー反発の影響を受けていると考えられる。

圧力の自己相関関数

圧力の揺らぎを定量的に評価するために自己相関関数

$$C(\Delta a) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-l} (p(a_i) - \mu_i)(p(a_{i+l}) - \mu_{i+l}) \quad (6)$$

を計算した。ここで、 $\Delta a = a_{i+l} - a_i$ であり、 μ_i は圧力関数 $P(a_i)$ を 2 次式でスムージングしたものである。レベルが高くなるにつれてファンデルワールス・ピークの頻度が高くなるので、半値幅が小さくなり、相関が短くなっていく傾向を見ることができた。

波動関数

最後に、波動関数の考察をしよう。2 粒子系なので 1 粒子の位置を決めてからもう一方の粒子との相関を見ることになる。その粒子 (r_1) の位置は 1 粒子密度関数 (円対称なので $\theta_1 = 0$ にとる)

$$\rho(r_1) = \int dr_2 \int d\theta_2 r_2 |\Phi(r_1, r_2, \theta_2)|^2 \quad (7)$$

が最大となるところ (r_1^c) を採用する。 r_1 を $r_1 = r_1^c$ に固定して、 r_2 の振舞いを見る。これが 2 粒子相関関数

$$\rho(r_2, \theta_2) = \frac{|\Phi(r_1^c, r_2, \theta_2)|^2}{\rho(r_1^c)} \quad (8)$$

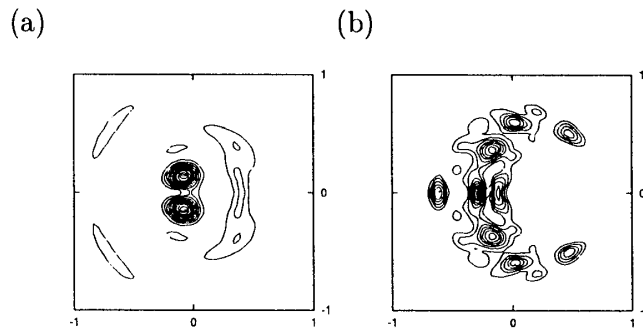


図 4: 波動関数 (Level=106)。 (a) $a=0.0, r_1=0.18$; (b) $a=0.2, r_1=0.4$

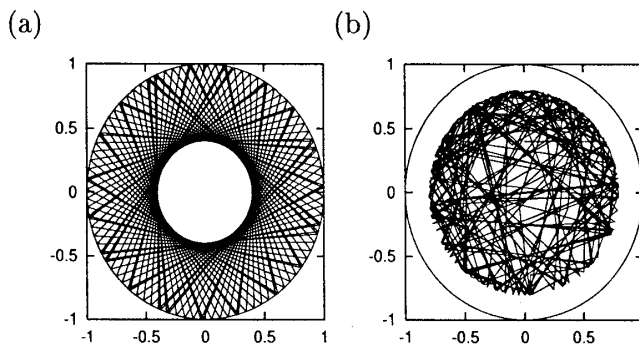


図 5: (一つの粒子に注目した) 古典軌道。(a) 相互作用無し; (b) 相互作用あり (ディスクサイズが有限)

である。1 粒子密度関数 $\rho(r_1)$ の典型的特徴はディスク半径が $a=0.0$ では、系の回転対称性のため、密度が局在する傾向にある。しかし、 a が有限の時は一様分布に不規則揺らぎが重なっている傾向がある。2 粒子相関関数は、図 4 (a) よりディスクサイズが $a=0.0$ のとき r_1 を固定する位置に依存せず分布し、図 4 (b) よりディスクサイズが有限のときは r_1 を固定する位置に依存して分布していることがわかる。

5 古典ダイナミクスの考察

ところで、対応する古典ダイナミクスはカオス的だろうか？古典運動方程式を解き（今の場合は幾何学的に解く）、円ビリヤードに 1 剛体がある（2 剛体間に衝突がない）場合と 2 剛体間に相互作用がある場合の軌道を計算した。図 5 (a) はディスクの大きさが無い場合（1 粒子と同様）、図 5 (b) はディスクの大きさがある場合（ディスク同士が衝突する）の 1 剛体ディスクに注目したときの中心の軌道である。軌道だけではこの系がカオスかどうかは判断できないが、図 5 の (a) と (b) の図ではっきりとした違いが見えた。パワースペクトルやリアプノフ指数の考察は今後の課題である。