

量子力学的拡散をとり込んだ半古典論

東京大学 総合文化研究科 八木 直治

1 序

半古典論は、多次元系の波束動力学計算における計算コストの負担を補う近似理論としてばかりでなく、量子-古典対応を研究する上でも重要である。そのような理由から、現在までに多くの半古典論が開発・研究されてきたが、causticsで古典軌道からの相関関数への寄与が発散してしまうなど、様々な数値計算上の困難があり、依然として多次元・カオス系への適用は難しい状況にある。

その中、当研究室で開発された半古典論であるADF(Action Decomposed Function)[1]は多次元系へ適用可能な理論として有望である。実際、ADFを用いて擬相関関数を計算するAFC(Amplitude-Free quasi-Correlation function)[2]は、強カオス系においてもスペクトル位置の同定が可能で、カオス系の量子化に画期的な進展をもたらした。これらの手法は、WKBレベルの半古典近似の理論であり、以上の研究をもとに本研究ではWKBの階層よりも更に高次の半古典論を構築することを試みた。

2 理論と数値計算

マスロフ型の波動関数 $\Psi(q, t) = F(q, t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_2(q, p_0, t) \right]$ から出発する。 S_2 はHamilton-Jacobi方程式の解である。複素数関数 F の方程式は、古典力学の速度場を $v = \partial S_2 / \partial q$ として、

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \left(-v \cdot \nabla - \frac{1}{2} (\nabla \cdot v) \right) F + \frac{i\hbar}{2} \nabla^2 F \equiv \hat{A}_{p_0} F + \hat{D} F, \quad (1)$$

である。 \hat{A}_{p_0} は古典軌道に沿った F の時間発展を表す。 \hat{D} は拡散定数が純虚数の拡散項とみなすことができ、古典軌道間の相互作用を表している。 $\hbar \rightarrow 0$ と近似し、拡散項を考慮しなくとも、圧倒的に少数の古典軌道をサンプリングするだけで、十分な精度の相関関数が求められることが確かめられている [1]。初期運動量の値で分割された作用面上で F の時間発展を考えていることから、ADF(Action Decomposed Function)と呼ばれる。

ADFに量子力学的拡散の効果を取り込み、WKBレベルより高次の半古典論を構築することを考える。式(1)の形式解にTrotter公式を用いると、 $\Delta t = t/n$ のステップごとに、

F が古典軌道に沿った時間発展と軌道間の量子拡散を繰り返すという描像が得られる。
量子拡散による時間発展は、

$$\exp[\hat{D}\Delta t] F(q, t) = \left(\frac{1}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{N/2} \int \exp\left(\frac{i}{2\hbar\Delta t}(q - q_t)^2\right) F(q_t, t) dq_t, \quad (2)$$

と表される。ここで現れる無限遠方で激しく振動する関数を含んだ積分を数値計算で扱うために、波動関数の大域解に現れる δ 関数を、Gauss 関数を用いて smoothing し、近傍の軌道からの拡散の効果のみを考えることとした。

3 結果と考察

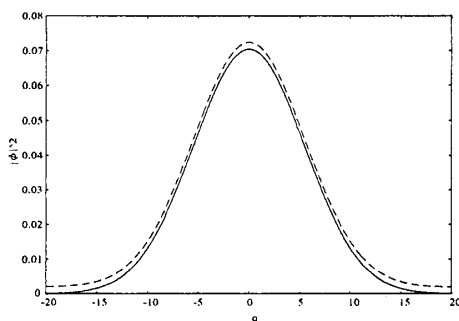


図 1: $V = 0$

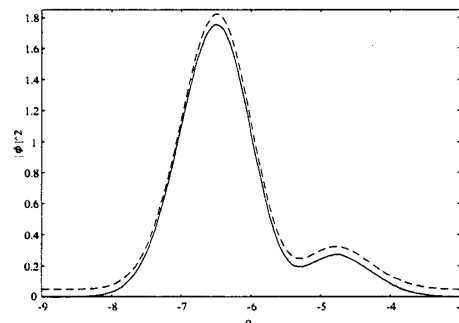


図 2: モース

同一の作用面間での量子拡散をとりいれ、3枚の作用面を重ね合わせた数値計算の結果を示す。図1は $V = 0$ で300ステップ後、図2はモースポテンシャルで25ステップ後の波動関数の状態を示した。実線が本研究で得られた半古典波束、破線は、同じ初期状態から量子波束計算で時間発展させて得られる波動関数である。どちらの場合も量子波束計算の波動関数とよい一致を見せているので、 y 軸の原点をずらしてプロットしてある。実際には、 $V = 0$ のときは 10^{-5} 程度で、モースポテンシャルの時は 10^{-2} 程度で一致している。

波動関数を表現するのに十分な幅を持ってトラジェクトリーが分布している間は、上で示した半古典波束と量子波束計算の波束は良い一致を見せている。しかし、トラジェクトリーの分布が十分でなくなると、上記の半古典波束は崩壊してしまう。今後、作用面間の拡散を含め、研究を進めていくことが必要である。

参考文献

- [1] A. Inoue-Ushiyama and K. Takatsuka, Phys. Rev. A, **59** 3256 (1999).
- [2] K. Hotta and K. Takatsuka, J. Phys. A; Math. Gen. **36**, 4785 (2003).