

Berry の 'false' 量子化について

福井大学工学部電子工学科

長谷川 洋

吉原 伸治

Abstract

Gutzwiller トレース和公式の右辺における周期軌道和において、primitive periodic orbit(番号 j で区別) の作用量子化条件

$$S_j(E_m) = (2\pi m - \alpha_j)\hbar \quad m = 1, 2, \dots \quad (1)$$

が場合によって根拠のない半古典的量子準位を与えることを Berry が指摘し、例えば長方形ビリャードの場合 $S_j = \hbar k L_j$ (L_j : j th ppo のビリャード 1 周の長さ) から定まる‘量子準位’が如何に根拠のないものであるかをトレース和の数値計算結果によって具体的に示した。一般に非可積分系の分離的周期軌道が安定な場合 (リアプノフ数=0)、(1) が量子化条件になり得るものであるかどうか、多くの人が肯定的に論じていることもあり、この問題はすっきり解決されていない。

磁場中水素原子においては、イオン化端付近に現れる準ランダウ共鳴が頂度この場合に相当している。もし (1) が一般的に根拠のないものであれば、これまで実験・理論両面から間違いのない結果とされてきた準ランダウ共鳴の解釈にも影響を与えかねない。このことに関する考察および数値計算によるテストの試みについて報告する。

1 Berry の議論¹⁾ および Keating-Berry の数値実験²⁾ の要約

Berry の与えた実例を辺の長さ a, b の矩形周期ビリャードについて説明する (図 1)。

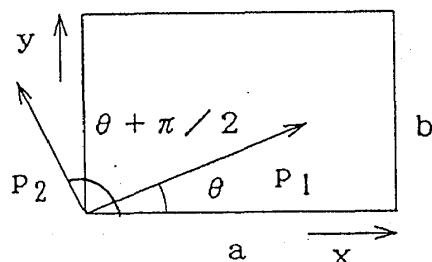


図 1

周期ビリャードは壁での断性衝突を繰り返すビリャードと異なり、周期条件

$$x \equiv x_0 \bmod a \quad 0 \leq x_0 < a$$

$$y \equiv y_0 \bmod b \quad 0 \leq y_0 < b$$

によって平面全体で定義されていて古典軌道はすべて直線である。

対応する定常量子状態:

$$E(m_a, m_b) = 2\pi^2 \hbar^2 \left(\frac{m_a^2}{a^2} + \frac{m_b^2}{b^2} \right) \quad (2)$$

$$m_a, m_b \in \mathbb{Z}^{(2)} \quad (\pm \text{すべての整数の組}) \quad (3)$$

いま、原点を通る傾き角 θ の直線軌道 $x(t) = p_x t$, $y(t) = p_y t$; $\frac{p_y}{p_x} = \tan \theta$ を考えると、これが周期軌道となるのは

$$\tan \theta = \frac{\nu b}{\mu a} \quad \mu, \nu: \text{互いに素な整数} \quad (4)$$

の場合に限り、この周期軌道の作用積分は $S_{(\mu\nu)} = p_x x + p_y y$,
したがって作用変数

$$I = \frac{1}{2\pi} (p_x \mu a + p_y \nu b) \quad (5)$$

$$= \mu I_a + \nu I_b, \quad (6)$$

ただし、 $I_a (= \frac{1}{2\pi} p_x a)$, $I_b (= \frac{1}{2\pi} p_y b)$ はそれぞれ x , y 軸にとられた (基本) 周期軌道に関する独立な作用積分であって、(2) は量子条件 (半古典と同時に厳密な意味での)

$$I_a = \hbar m_a, \quad I_b = \hbar m_b \quad (7)$$

の帰結である。

Berry のパズルは、(5) で定義される素周期軌道 (primitive periodic orbit: ppo と略記) の 1 周期にわたる 作用積分/ 2π すなわち作用変数が (7) と同様な量子化条件

$$I = \hbar m \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8)$$

によって正しい量子準位のエネルギー (すなわち (2) の右辺の値のどれか) に一致するか、という問いに対する明確な否定論といえる。

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} p_1^2 \\ &\quad (p_1 = p_x \cos \theta + p_y \sin \theta) \\ &= \frac{2\pi^2 I^2}{(\mu a)^2 + (\nu b)^2} \\ &\quad \left(\because I = \frac{1}{2\pi} p_1 \cdot \sqrt{(\mu a)^2 + (\nu b)^2}, \tan \theta = \frac{\nu b}{\mu a} \right) \\ &= \frac{2\pi^2 \hbar^2 m^2}{(\mu a)^2 + (\nu b)^2} \quad (9) \end{aligned}$$

これは、 $\mu > 1$, $\nu > 1$ になるとき一般にこの量子力学系の固有値のいずれとも一致しない。それでは (9) によって '量子化' されたエネルギーとは、この量子系の如何なるエネルギーに対応するものなのか。Keating-Berry の数値実験はこの疑問に対する解答を与えている。

トレース和公式とは、量子準位密度を古典周期軌道の群に分類してそれぞれの ppo の繰り返しを先に総和し、その部分和を ppo のすべてに関して和をとった表示である。上例のような簡単な (可積分) 系ではトレース和を厳密に表示することができて、例えば (2) のスペクト

ルに対し

$$\rho(E) = \sum_{m_a, m_b} \delta(E - E(m_a, m_b)) \quad \bar{\rho} = \frac{2\pi ab}{h^2}$$

$$= \bar{\rho} + \sum_{\mathbf{R}_p \neq (0,0)} \left(-\frac{\bar{\rho}}{2} + \frac{ab h^{-2}}{2R_p \sqrt{E}} + \sum_{m=1}^{[R_p \sqrt{E}]} \frac{ab h^{-2}}{\sqrt{R_p^2 E - m^2}} \right) \quad (10)$$

$$\text{ただし } R_p = \frac{1}{(2\pi^2 \hbar^2)^{1/2}} (\pm a\mu, \pm b\nu) \quad (\text{複号同順}) \quad (11)$$

のように与えられ、括弧内の有限和は $\text{ppo}(\mu, \nu)$ について、また括弧外の無限和はすべての可能な $\text{ppo}((\mu, \nu)$ と $(-\mu, -\nu)$ とを区別) に関する和である。この1つの ppo の部分和における項の平方根型特異点が、(9) 式の右辺によって特徴付けられるエネルギー値となっていることは明らかであろう。

$N(E)$

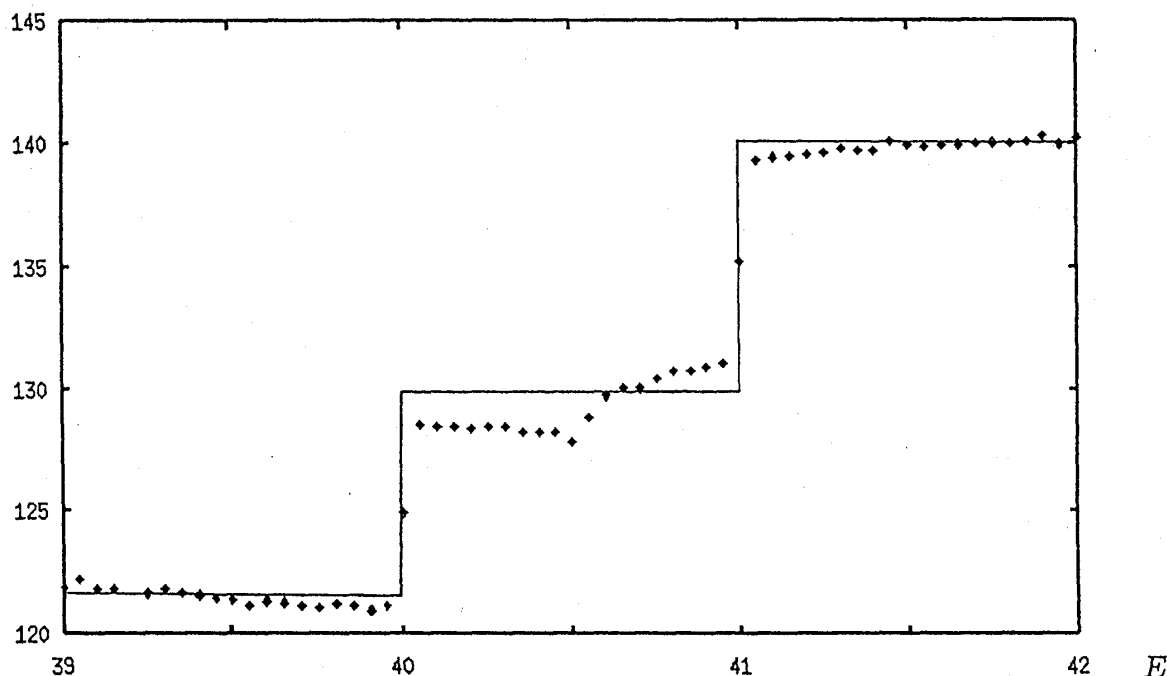


図2 false singularities in partial sum (ppo の数=19025)

(10) 式導出のアウトライン

(9) 式によって運動量 p_x, p_y を次のように線形変換する: $p_1 = p_x \cos \theta + p_y \sin \theta$, $p_2 = -p_x \sin \theta + p_y \cos \theta$ (図1 参照)。その結果

$$E = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) = \frac{2\pi^2 \hbar^2 m^2}{(\mu a)^2 + (\nu b)^2} + \frac{1}{2} p_2^2 \quad (12)$$

運動量 p_2 をもつ直線運動は、 (μ, ν) 型 ppo に対し直角方向に進む運動であり、これは一般的

にいて周期性を持たない(したがって作用変数では表されない)がトレース和とポアソン公式によって計算するときの一つの連続変数となり得る。すなわち

$$dm_a dm_b = \frac{ab}{h^2} dp_x dp_y = \frac{ab}{h^2} dp_1 dp_2 = \frac{ab}{h \sqrt{(\mu a)^2 + (\nu b)^2}} dm dp_2,$$

$$\frac{1}{\sqrt{(\mu a)^2 + (\nu b)^2}} \int \delta(E - E_m(p_2)) dp_2 = \frac{1}{\sqrt{R_p^2 E - m^2}}$$

が(10)の平方根特異性が現れる理由であって、三次元自由荷電粒子のランダウ準位の準位密度と同じである。もし、 $E = m^2/R_p^2$ が正しい量子準位を与えないのならば、(10)式の右辺の総和を実行すれば見掛け上の特異性として消え去るべきでなければならない。Keating-Berryはこれを数値計算によって示し、このような見掛け上の特異性に対し“false singularities in partial sum”と名付けた。第2図はその状況(ppoの数を増やしたとき真の特異性のみが現れてくる)をわれわれの計算結果を含めて示すものである。

2 二自由度可積分系に対するトレース和公式

矩形ビリヤードに対する式(10)は一般の二自由度可積分系(エネルギーEが二つの作用変数で表される古典系)に対し次のように書かれる。

$$\rho(E) = \sum_{n_1, n_2} \delta(E - E(n_1, n_2)) \quad \bar{\rho} = \int dn_1 dn_2 \delta(E - E(n_1, n_2))$$

$$= \bar{\rho} + \sum_{ppo(\nu_1 \nu_2)} \left\{ -\frac{\bar{\rho}}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{|\partial(E, n)/\partial(n_1, n_2)|_{n_i=n_i(E, n)}} \right\}$$

ここに $\partial(E, n)/\partial(n_1, n_2)$ は $(n_1, n_2) \rightarrow (E = E(n_1, n_2), n = \nu_1 n_1 + \nu_2 n_2)$ すなわち変数をエネルギーEと全作用nとに変えるヤコビアンを表す。

(13)

公式(13)の導出

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1, n_2} \delta(E - E(n_1, n_2)) \\ &= \sum_{N_1, N_2} \iint dn_1 dn_2 \delta(E - E(n_1, n_2)) e^{i2\pi(N_1 n_1 + N_2 n_2)} \quad (\text{Poisson 和公式}) \\ &= \bar{\rho} + \sum_{N_1, N_2 \neq (0,0)} \iint dn_1 dn_2 \delta(E - E(n_1, n_2)) \underbrace{e^{i2\pi(N_1 n_1 + N_2 n_2)}}_{\cos + i \sin} \end{aligned}$$

cos + i sin とするとき sin 項は寄与しない
 $(N_1, N_2) = P(\nu_1, \nu_2), \quad P = 1, 2, \dots$
 互いに素な整数の組

$$\sum_{P=1}^{\infty} \cos(2\pi P(\nu_1 n_1 + \nu_2 n_2)) = -\frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \delta(n - (\nu_1 n_1 + \nu_2 n_2))$$

(Poisson 和公式の変形)

を用いることにより

$$\begin{aligned} & \iint dn_1 dn_2 \delta(E - E(n_1, n_2)) \sum_{P=1}^{\infty} \cos(2\pi P(\nu_1 n_1 + \nu_2 n_2)) \\ &= -\frac{1}{2} \bar{\rho} + \sum_{n=1}^{\infty} \iint dn_1 dn_2 \delta(E - \hat{E}(n_1, n_2)) \delta(n - \underbrace{(\nu_1 n_1 + \nu_2 n_2)}_{\hat{n}(n_1, n_2)}) \\ &= -\frac{1}{2} \bar{\rho} + \sum_{n=1}^{\infty} \iint d\hat{E} d\hat{n} \left| \frac{\partial(\hat{E}, \hat{n})}{\partial(n_1, n_2)} \right|^{-1} \delta(E - \hat{E}) \delta(n - \hat{n}) \\ &= -\frac{1}{2} \bar{\rho} + \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{\partial(E, n)}{\partial(n_1, n_2)} \right|^{-1} \left(\because \int \delta(E - \hat{E}) d\hat{E} = \int \delta(n - \hat{n}) d\hat{n} = 1 \right). \end{aligned}$$

これを代入するならば $\rho(E) = \bar{\rho} + \sum_{ppo(\nu_1, \nu_2)} \left\{ -\frac{1}{2} \bar{\rho} + \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{\partial(E, n)}{\partial(n_1, n_2)} \right|^{-1}_{E, n \text{ の関数}} \right\}$ を得る。

以上

上記の導出にみられるように、公式(13)は stationary-phase の近似を含まない厳密式である。右辺の特異点は次のように特徴付けられる。

定理 特異点 $\partial(E, n)/\partial(n_1, n_2) = 0$ において E は n の従属変数となり

$$\frac{dE}{dn} = \nu_2 \frac{\partial E}{\partial n_1} = \nu_1 \frac{\partial E}{\partial n_2} \quad \text{すなわち} \quad \nu_1 T_1 = \nu_2 T_2 (= T : \text{周期軌道の周期}).$$

3 磁場中水素原子の共鳴問題³⁾

二自由度(非可積分)系の周期軌道が分光実験の対象として系統的に調べられたのがこの例である。イオン化端を含む $\pm 100 \text{ cm}^{-1}$ の範囲にみられたランダム・スペクトルの中の規則的な共鳴線群—準ランダウ共鳴—を近似的に可積分系として扱うモデルは次の通りである。

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}(P_\rho^2 + P_z^2) - \frac{1}{\sqrt{z^2 + \rho^2}} + \frac{\gamma^2}{8} \rho^2 \quad \left(\gamma = \frac{B}{B_0} \text{ 磁場パラメタ} \quad p_\varphi = 0 \right) \\ &= \frac{1}{2} P_\rho^2 + \left(\frac{\gamma^2}{8} + \frac{1}{2|z|^3} \right) \rho^2 \quad (|z| > \rho) \quad (\text{振動を受けた}) \text{ 調和振動子} \\ &\quad + \frac{1}{2} P_z^2 - \frac{1}{|z|} \quad \text{1次元ケプラー運動} \\ H(I_z, I_\rho) &= -\frac{1}{2I_z^2} + \gamma I_\rho \\ &(\gamma \text{ は摂動効果の補正により始めの } \gamma \text{ と異なる}^3) \end{aligned}$$

プランク定数 $\hbar=1$ とし作用量子化は $I_z = m(1, 2, \dots)$, $I_\rho = n(1, 2, \dots)$ とする。文字通り

の積分を行なうと $\bar{p} = \infty$ となるので当面一定の定数と考え、公式(13)を適用する。

$$\begin{aligned}\rho(E) &= \bar{p} + \sum_{ppo(\mu\nu)} \rho^{(\mu\nu)}(E) \\ j &= \mu m + \nu n \\ E &= \frac{\gamma}{\nu} j - \frac{\mu\gamma}{\nu} m - \frac{1}{2m^2} \quad \text{or} \quad m^3 - \left(j - \frac{\nu}{\gamma} E\right) \frac{m^2}{\mu} + \frac{\nu}{2\mu\gamma} = 0 \\ \rho^{(\mu\nu)}(E) &= -\frac{\bar{p}}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} \left| \frac{\frac{\nu}{\mu\gamma} m^3}{m^3 - \frac{\nu}{\mu\gamma} E} \right|_{m=m(E,\gamma)}\end{aligned}\quad (14)$$

特異点 $m^3 = \frac{\nu}{\mu\gamma}$ は §2 の最後に述べた定理にいうところの周期軌道の条件であり、これを用いると

$$E_{ppo(\mu\nu)} = \frac{\gamma}{\nu} j - \frac{3}{2} \left(\frac{\mu\gamma}{\nu} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad T = \frac{2\pi\nu}{\gamma} \quad (15)$$

$\rho^{(11)}(E)$ の各 j に対する振動の様子を図3に示す。以上は Bielefeld グループのモデル⁴⁾と一致する。MIT の実験データ⁵⁾はこのモデルによって説明されるものと考えている。図4は(14)に基づくスペクトル分解度のテストである。

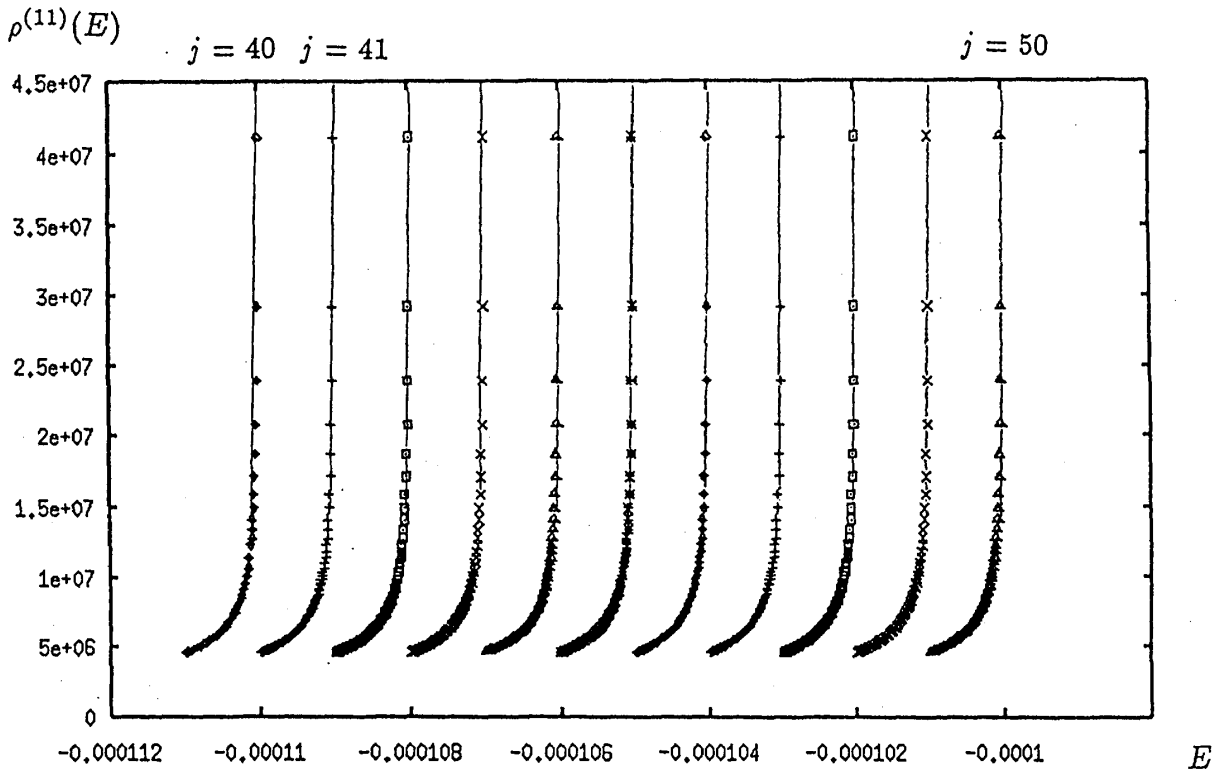
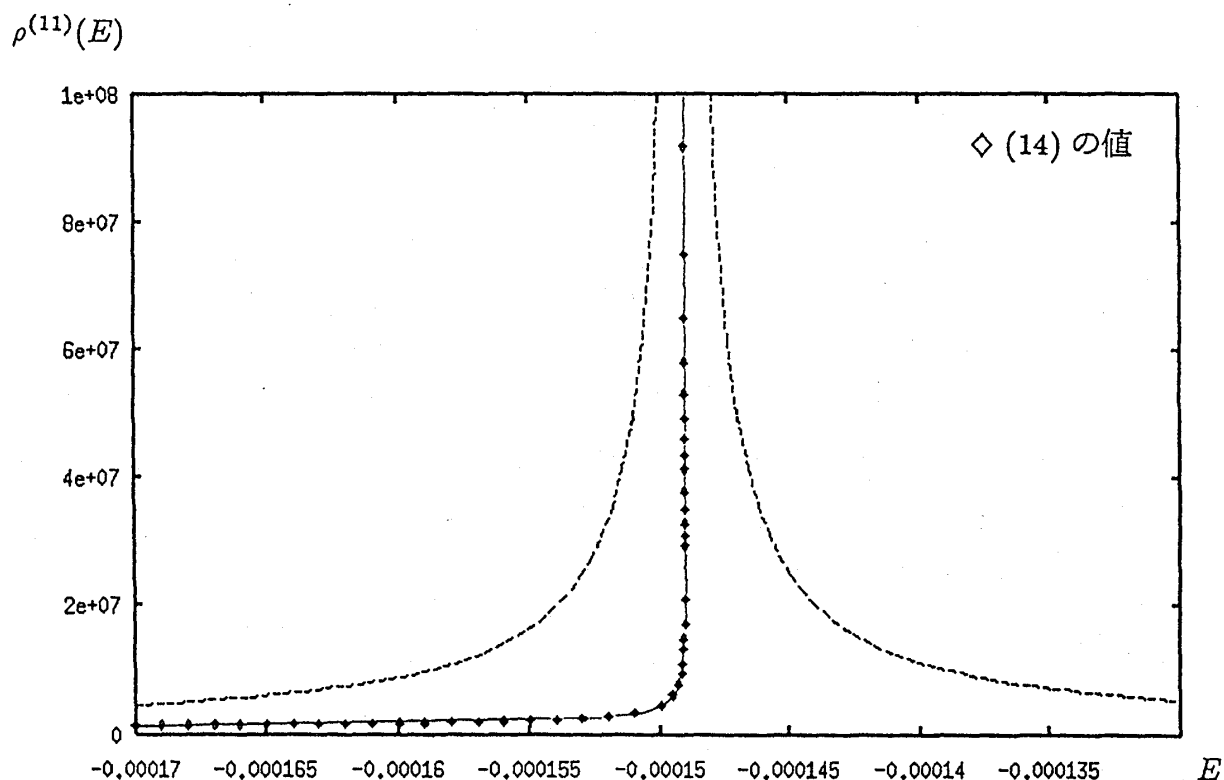


図3 $\rho^{(11)}(E)$ の各 j に対する振動の様子 ($j = 41 \sim 50, \gamma = 10^{-6}$)

図4 スペクトル分解度のテスト ($j = 1, \gamma = 10^{-6}$)

4 考察

素周期軌道に対する量子化条件 (1) が正しくない量子準位を与える可能性は否定すべくもない事実である。では一般的に如何なる条件のもとで (1) が正しい準位を与えるのか、このことについて明確な解答をわれわれは知らない。そもそも、トレース和公式を実行した場合に得られる図形については解釈は別れているように思われる。現段階では観測されたデータのある実例すなわち磁場中の水素原子スペクトルにおいて共鳴線が Berry の fallacy に矛盾するものでないかどうか確認を急ぎたいと思っている。

参考文献

- [1] M.V.Berry, Les Houches Lecture Notes(1983)p.241~246
- [2] J.P.Keating and M.V.Berry, J.Phys. A20(1987)L1139
- [3] H.Hasegawa, M.Robnik and G.Wunner, Prog.Theor.Phys.Supp.98(1989)198(p270~274)
- [4] J.Main, A.Holle, G.Wiebusch and K.H.Welge, Z.Phys.D6(1987)295,
D.Wintgen, Phys.Rev.Lett.58(1987)1589,
A.Holle, G.Wiebusch, H.Rottke and K.H.Welge, Phys.Rev.Lett.61(1988), 161.
- [5] C.Itu, G.R.Welch, M.M.Kash, L.Hsu and D.Klepper, Phys.Rev.Lett, 63(1991), 1133