

セパトリクス波動関数の量子 局在とダイナミカルトンネル

科学技術振興事業団・橋本直行、東大院総合・高塚和夫

1 はじめに

我々は、分子レベルにおいて古典カオスがどのような特徴を持って現れるか、ということに興味がある。分子、特に分子振動において、エネルギーが低い場合、位相空間はトーラスが占め、運動は単純なものになる。エネルギーが高くなるにつれ、位相空間に占めるカオス領域は大きくなり、運動はより複雑なものになっていく。分子は通常、これらのエネルギーの中間領域にあり、従って、分子レベルにおけるダイナミクスを調べるには、トーラスとカオス領域が共存する”弱カオス系”[1]を考える必要がある。以下では、我々が開発したエネルギースクリーニング法 [2] を用いて得られた弱カオス系における固有関数の特徴について述べる。

2 モデルハミルトニアンと古典ダイナミクス

分子振動のモデルとして、以下のハミルトニアン [3] を用いた。

$$H = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2(ay^2 + y) + \frac{1}{3}y^3(by - 1) \quad (1)$$

定数は、

$$a = 0.6, b = 0.2, m_x = 1.0087, m_y = 1.0, \hbar = 0.005 \quad (2)$$

とした。この系のエネルギー $E = 0.15$ におけるポアンカレ断面は、図 1(a) のようになる。lib

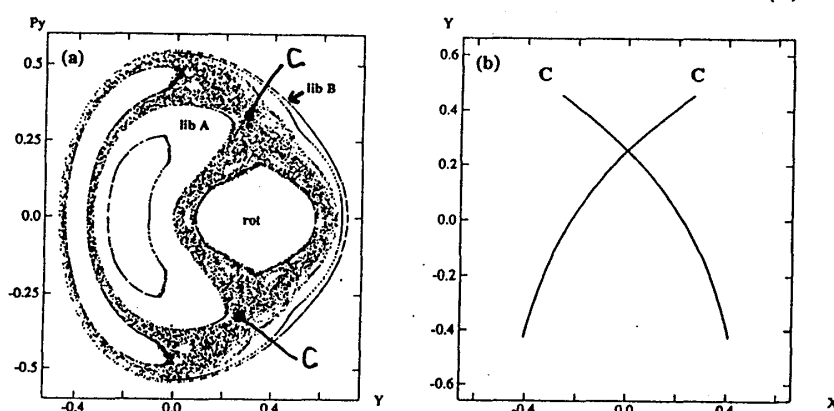


図 1: Poincaré 断面 ($E = 0.15, x = 0, p_x \geq 0$) と不安定周期軌道: lib A と lib B はそれぞれ異なる libration を表し、rot は rotation モードを表す。また、C は lib A と lib B を分ける不安定周期軌道である。

A と lib B のモードを分けるところに不安定周期軌道 C (図 1(b)) がある。このような位相空間構造が固有関数にどのように反映されるのかを以下で見てみる。

3 セパトラクス固有関数と量子局在

上述のように、エネルギースクリーニング法を用いて $E = 0.15$ 近傍の固有関数を求めた。得られた固有関数は、トーラスに origin を持つグループ、または、セパトラクス (カオス領域) に origin を持つグループの大きく 2 つに分かれる [4]。このうち、セパトラクスグループの特徴的な固有関数を図 2 に示す。これらは、不安定周期軌道 C に密度が局在しているものに

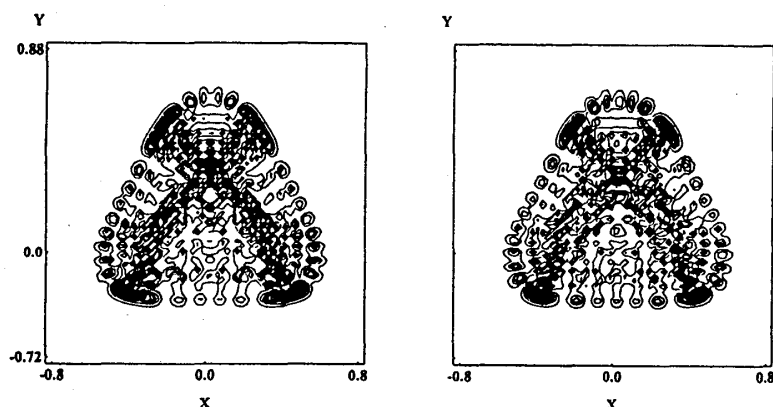


図 2: セパトラクス固有関数の例。

なっている。スタジアムビリヤードなど強カオス系においてこのような不安定周期軌道に局在する固有関数はスカー [5] として知られているが、トーラスとカオス領域が共存する弱カオス系ではこれが初めての例である。この局在化のメカニズムを調べるためにこれらの固有関数の重ね合わせを作ってみる (図 3)。そうすると、図 1(a) の fixed point C に対応する領域に波束

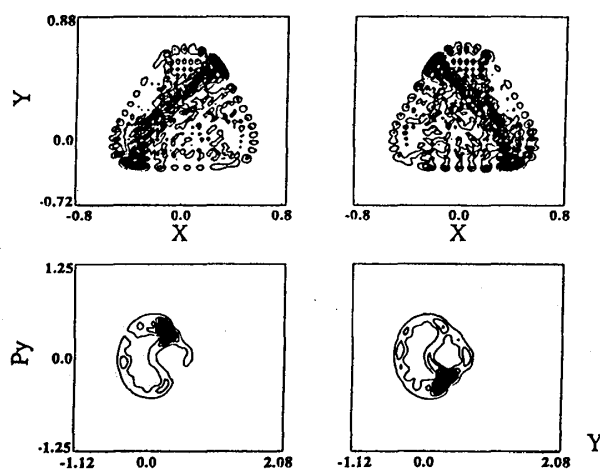


図 3: 図 2 の固有関数の重ね合わせ。

が局在している様子がわかる。これは以下のような解釈で説明できる。弱カオス系において、トーラスがまだ十分に大きい構造を残している場合には、位相空間において擬セパトラクスの厚い部分と薄い部分ができる。古典軌道は、この擬セパトラクス内を自由に動きまわることができ、その密度は擬セパトラクス領域にほぼ一様に分布する。しかし、セパトラクス

波動関数は、その狭い位相空間を通りにくくなるので、速い拡散が量子力学的に抑制され擬セパトラリクス領域のある部分に局在するようになる。最終的には、これらの局在した状態はダイナミカルトンネルによって結び付き、それに対応した2つの固有関数が見られる。ここで注意すべきことは、このダイナミカルトンネルは通常のトンネルの概念 [6] とは異なることである。つまり、通常トンネルとは、古典力学的に禁制な遷移が量子力学的に可能になることであるが、我々のトンネル現象は古典的にも許容されているものである。

4 まとめ

我々は、弱カオス系を量子論的に取り扱い、量子局在したセパトラリクス固有関数を見い出した。また、この局在のメカニズムは新しいタイプのダイナミカルトンネルに基づくものであることを示した。なお、本稿の文責は橋本にある。

参考文献

- [1] 弱カオス系の量子論の文献は以下を参照。R. B. Shirts and W. P. Reinhardt, J. Chem. Phys. **77**, 5204(1982); B. Ramachandran and K. G. Kay, J. Chem. Phys. **83**, 6316(1985); **86**, 4628(1987); K. G. Kay and B. Ramachandran, *ibid.* **88**, 5688(1988); T. Terasaka and T. Matsushita, Phys. Rev. **A32**, 538(1985).
- [2] K. Takatsuka and N. Hashimoto, J. Chem. Phys. **103**, 6057(1995).
- [3] N. Hashimoto and K. Takatsuka, J. Chem. Phys. **103**, 6914(1995).
- [4] N. Hashimoto and K. Takatsuka, J. Chem. Phys. in press(1998); 数理科学 9月号, pp.51(1997).
- [5] E. J. Heller, Phys. Rev. Lett. **53**, 1515(1984).
- [6] M. J. Davis and E. J. Heller, J. Chem. Phys. **75**, 246(1981).