

有限量子系のシェル構造と古典周期軌道

在田謙一郎

名古屋工業大学工学部 466-8555 名古屋市昭和区御器所町 e-mail: arita@npl.kyy.nitech.ac.jp

松柳研一

京都大学大学院理学研究科 606-8502 京都市左京区北白川追分町 e-mail: ken@ruby.scphys.kyoto-u.ac.jp

原子核、マイクロクラスター、量子ドットなどの有限系における構成粒子の運動は良い近似で平均場中の独立粒子運動とみなすことができ、この運動を量子化して得られる一粒子準位の構造は系のダイナミクスに重要な影響を及ぼす。これらのスペクトルにはシェル構造という周期的な疎密パターンが存在するが、このパターンの性質は対応する古典系における周期軌道と密接な関係を有している。本稿では量子・古典対応の観点から、平均場の変形による周期軌道の性質の変化が量子準位構造におよぼす影響について、周期軌道の分岐現象に焦点を合わせて解説する。

1. はじめに

シェル構造というときまず思い浮かぶのは原子における電子準位であろう。原子核のまわりをまわる電子の一つに着目すると、それは原子核と他の電子がつくる平均場の中を独立粒子運動しているという描像でよく記述できる。この平均場を量子化して得られる準位にフェルミ統計に従って下から順に粒子を配置していくことにより周期律表を説明することが出来る。周期律表の右端にあたる不活性ガスは、ある近似縮退した準位群がちょうどいっぱいにつまった状態（閉殻）に相当する。この配位はエネルギーの高いシェルに詰まりはじめる直前であるので一電子あたりの束縛エネルギー（あるいはイオン化エネルギー）が極大となり、他の配位に比べて特に強い安定性を示す。

同様の現象が原子核やマイクロクラスターにおいても現れる。金属クラスターにおいては、金属イオン結晶内を電子が自由に往来している。この電子の運動はイオンと他の電子とが作る平均場中の独立粒子運動として近似的に記述でき、この運動を量子化することによりシェル構造が形成される。このシェル構造の影響が現れる現象として、ナイト (W.D. Knight) や交久瀬の実験が知られている。¹⁾ ナイト達は真空容器中に噴射された高温の Na 原子ガスの冷却過程で生成される Na クラスターの質量分布に、出来やすい粒子数（魔法数）と出来にくい粒子数が系統的に現れることを見出した。この系統的な揺らぎは、Na クラスターの平均場をよく記述するウッズ-サクソン (Woods-Saxon) 型ポテンシャルのシェル構造の結果として説明できることが知られている。

原子核は 1 - 300 個の核子（陽子および中性子）が核力という強い相互作用で半径 1 - 10 fm の小さな領域に束縛された集合体である。こうした系において独立粒子描像が成り立つことは直感に反すると思われるかも知れない。しかし（基底状態近傍などの）極低温状態ではパウリ原理により核子衝突が抑制される結果、核内核子の平均自由行程は原子核のサイズと比べて十分長くなっており、独立粒子描

像が成り立つ条件を具えているのである。原子核の平均場も Woods-Saxon 型ポテンシャルでよく記述されるが、それを更に簡単化した近似として、軽い核では調和振動子型、重い核ではキャピティ（無限井戸）型ポテンシャルも用いられる。

原子核に対する古典的な液滴モデルのイメージでは、強い表面張力のため球形が好まれるだろう。しかし、変形した原子核は質量数の全領域にわたって随所に見られ、その形状は質量数の関数として多様な変化を見せる。多くは四重極変形と呼ばれるレモン型（プロレート）やみかん型（オブレート）変形であるが、空間反転対称性を破る西洋梨型の八重極変形も系統的に観測されている。こうした変形自由度は、静的な変形を起こすに至らない場合でも、低エネルギー集団励起モードとして核の性質に重要な影響をおよぼしている。

原子核の変形に関して本質的な役割を演じているのが、一粒子準位のシェル構造である。このことを理解するには、球対称ポテンシャルのシェル構造により閉殻系が強い安定性を得る反面、閉殻と閉殻の中間領域にある系はエネルギー的に不安定となる点に注意すればよい。こうした不安定な系は自分にとってエネルギー的に最も有利なシェル構造を形成する様に平均場を変えようとするだろう。核物質は非圧縮性で、密度を一定に保とうとする性質があるので、平均場を変えようと思うと形を変えるしか手立てがなく、変形が生じる。これが核変形の微視的起源なのである。^{*1}

シェル効果が特に顕著に現れる現象として近年注目されているのは超変形状態の形成である。これは、長軸と短軸の比がおよそ 2:1 の回転楕円体状に巨大変形した状態のことで、高速で回転する原子核や超ウラン核の核分裂過程に現れる準安定状態（アイソマー）などで観測されている。特に高スピン超変形状態はガンマ線測定技術の急速な進展により様々な質量数領域で発見されており、核構造物理にお

^{*1} 同様に対称性をこわすことによりエネルギーをかせぐメカニズムとして、多原子分子のヤーン-テラー (Jahn-Teller) 効果が知られている。

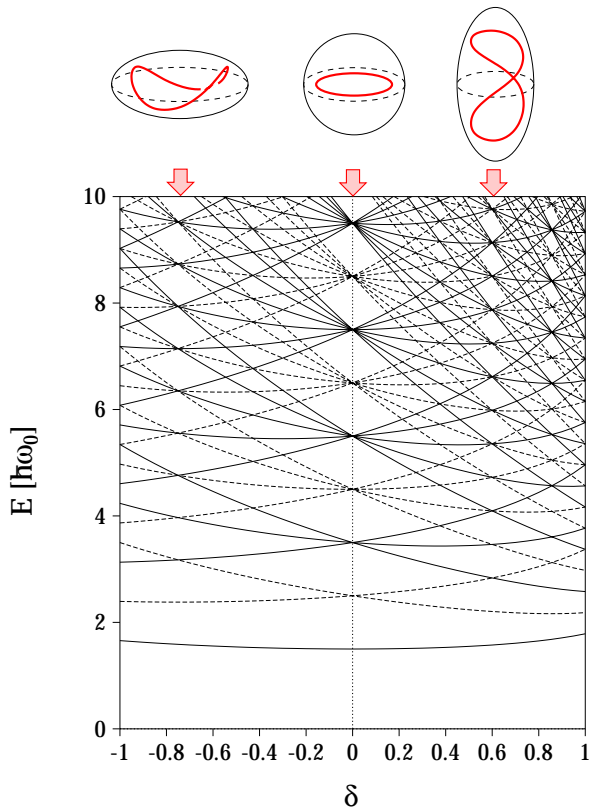


図 1: 軸対称調和振動子のエネルギー準位スペクトルの四重極変形依存性。変形度 δ (本文参照) を変化させることによりシェル構造が変化し、軌道が周期軌道となる整数比変形において準位の強い縮退が見られる。上段図は球形 ($\delta = 0$)、プロレート超変形 ($\delta = 0.6$) およびオブレート超変形 ($\delta = -0.75$) における等ポテンシャル面の形と典型的な周期軌道を表す。

ける最も重要な課題の一つとなっている。²⁾ この様な巨大変形状態を可能にするのは 2:1 変形した平均場のスペクトルに現れる強いシェル効果であり、巨視的な効果 (高スピン核では遠心力, 超ウラン核では陽子間のクーロン斥力) がそれを助ける役割を果たしている。

よく知られた 3 次元軸対称調和振動子のシェル構造を見てみよう。図 1 は、四重極変形度 $\delta \equiv (\omega_{\perp} - \omega_z)/\bar{\omega}$ [角振動数 $\omega_x = \omega_y \equiv \omega_{\perp}$, $\bar{\omega} \equiv (2\omega_{\perp} + \omega_z)/3$] の関数として一粒子スペクトルを描いたものである。球形 ($\delta = 0$) における顕著なシェル構造は変形とともに弱まるが、ある変形度になると異なるシェルからの準位同士が新たな縮退を起こして「変形シェル構造」が形成される。とりわけ 2:1 変形 ($\delta = 0.6, -0.75$) には極めて顕著なシェル構造が現れる。より現実的な原子核の平均ポテンシャルにおいても、一粒子スペクトルは 2:1 変形近傍で近似的な縮退を起こし「超変形シェル構造」を示すことが知られている。³⁾ それでは、一般の平均ポテンシャルにおけるシェル構造の起源は何であろうか。また、なぜ特定の変形度において系統的な

近似縮退が起こるのだろうか。これらの問いに対する一般性のある答を得られないだろうか。

シェル構造を考える上で最も重要なのは有限系のもつ対称性である。球形状態において顕著なシェル構造が見られるのは、回転対称性により異なる磁気量子数をもつ準位が縮退することによる。調和振動子および逆二乗力ポテンシャル系では、それぞれ $SU(3)$ および $O(4)$ というさらに高い対称性がある、異なる角運動量をもつ状態が偶然縮退を起こしている。変形を加えるとこれらの対称性は破れるが、非等方調和振動子では軸比が整数比となる変形度において新たな動力的対称性⁴⁾ が現れて準位の縮退を引き起こしている。本稿で議論する様に、準位の強い近似的縮退 — 顕著なシェル構造の出現 — には系の対称性の回復²⁾ が重要な役割を果たしており、この対称性の回復は古典系における周期軌道の分岐現象に対応している。そこで、量子・古典対応の観点からシェル構造の成り立ちについて考えてみることにしよう。

2. 準位密度と周期軌道

量子力学と古典力学の間には重要な対応関係が存在する。この対応関係は $\hbar \rightarrow 0$ の極限で量子力学は漸近的に古典力学に近づくというもので、量子力学の諸量を \hbar で展開して主要項をとる近似を半古典近似という。⁵⁾ 半古典近似を用いると、量子論的なダイナミクスを古典論的なダイナミクスを用いて再構築することができるが、これは量子準位の大局的構造を理解するうえできわめて有効な手法を与えてくれる。本節では半古典論により量子準位密度が古典軌道とどのように結び付けられるかについて述べる。

いま、ある平均場中に束縛された一粒子の運動を考えよう。一粒子準位密度とは単位エネルギー間隔あたりに存在する準位数であり、エネルギー E 以下の準位の総数を $N(E)$ と表すとき

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \sum_n \delta(E - E_n) \quad (1)$$

により定義される。ここで E_n は平均場ハミルトニアン \hat{H} の固有エネルギーである。

まず可積分系 (多重周期系) を考えてみよう。可積分系には自由度の数 f と同数の保存量 I_i ($i = 1, \dots, f$) が存在し、それに共役な角変数 θ_i は一定の角速度 $\omega_i = \partial H(I)/\partial I_i$ で周期変動する。従って、 $2f$ 次元位相空間中の相軌道は f 個の周期運動が結合したトーラスと呼ばれる f 次元多様体上に拘束される。図 2 に 2 自由度系のトーラスの概念図を示す。この様な系における半古典量子化則はポーア-ゾン

*2 多くは位相空間のある点の近傍のみに生じる局所的な動力的対称性である。位相空間全体にわたる大局的対称性が現れる特殊な場合には準位の厳密な縮退が起きるが、局所的対称性では近似的縮退となる。

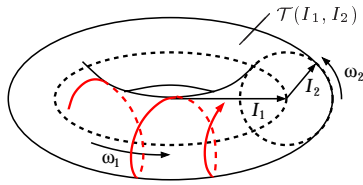


図 2: 多重周期系の位相空間構造．自由度の数と同じ f 個の保存量 I_i の存在により $2f$ 次元位相空間内の相軌道は f 次元部分空間 $\mathcal{T}(I)$ 内に拘束される．これは f 個の周期運動が結合したトーラスとよばれる多様体となる（図は 2 自由度の場合）．

マーフェルド (Bohr-Sommerfeld) 量子条件を多次元に拡張した EBK (Einstein-Brillouin-Keller) 量子条件

$$I_i \equiv \oint_{\gamma_i} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \hbar (n_i + \alpha_i/4), \quad (n_i = 0, 1, 2, \dots) \quad (2)$$

与えられる．ここで， I_i はトーラス上の独立な i 番目の閉じた経路 γ_i に沿った作用積分であり，右辺の α_i はマスロフ (Maslov) 指数と呼ばれる整数である．この量子条件を用いて準位の縮退が起こる条件を考察しよう．異なる量子数の組 $\mathbf{n} \equiv \{n_i\}$ をもつ準位のエネルギー差は，

$$\Delta E \simeq \frac{\partial H(\mathbf{I})}{\partial \mathbf{I}} \cdot \Delta \mathbf{I} = \hbar \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I}) \cdot \Delta \mathbf{n} \quad (3)$$

となるので，これらの準位が縮退する ($\Delta E = 0$) には振動数の各成分 $\omega_i(\mathbf{I})$ が整数比であることが必要である．このとき，トーラス $\mathcal{T}(\mathbf{I})$ 上の軌道は周期軌道となる．すなわち，準位の縮退条件は古典軌道の周期軌道条件と一致する．⁶⁾ 調和振動子では ω が \mathbf{I} によらない定数であり，振動数が整数比になると全ての古典軌道が周期軌道となる．そして (3) の条件が厳密かつ全エネルギー領域で同時に満足されるため，準位の厳密な縮退が全エネルギー領域で実現される．特に単純な整数比となる変形度において顕著なシェル構造が現れる．

非可積分系になると，位相空間全体を覆うトーラス構造はもはや存在しておらず，(2) 式のように量子条件をあらわに書き表すことはできない．しかしこの場合でもエネルギー固有値と古典軌道との間に興味深い対応関係が成立する．(1) 式の最後の表式は演算子 $\delta(E - \hat{H})$ のトレースであり，これはデルタ関数の積分表示を用いると遷移行列 $\hat{T} = \exp(-it\hat{H}/\hbar)$ を時間 t についてフーリエ変換したものになる．ここで遷移行列に対するファインマンの経路積分表示を用いる．経路積分は始点と終点を結ぶあらゆる経路の重ね合わせで表されるが， $\hbar \rightarrow 0$ の極限によりその主要項である停留位相解として古典軌道が抽出される．こうして，グッツヴィラー (M.C. Gutzwiller) のトレース公式

$$g(E) = \bar{g}(E) + \sum_{\alpha} A_{\alpha}(E) \cos\left(\frac{1}{\hbar} S_{\alpha}(E) - \frac{\pi}{2} \mu_{\alpha}\right) \quad (4)$$

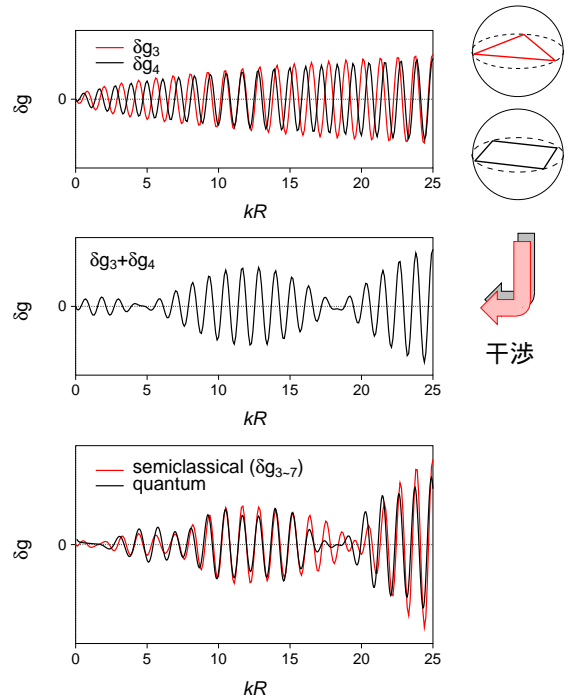


図 3: 球形キャビティのスーパーシェル構造．準位密度の振動部分 $\delta g \equiv g - \bar{g}$ に対する三角形軌道と四角形軌道の寄与 $\delta g_3, \delta g_4$ (上段図) の干渉効果により，準位密度にうなり構造 (中段図) が現れる．下段図はトレース公式を用いた半古典近似により量子力学計算の (平滑化された) 準位密度がみごとに再現されることを示している．

が導かれる．⁷⁾ 右辺の $\bar{g}(E)$ は平均準位密度，第 2 項の和は対応する古典系の周期軌道 α についてとられ， $S_{\alpha} = \oint_{\alpha} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}$ は軌道 α に沿った作用積分を表す．また A_{α} は軌道の縮退度や安定性 (後述) によって定まる振幅因子， μ_{α} は軌道の幾何学的性質に関係するマスロフ位相とよばれる定数である．この様に，量子準位密度を古典的な量のみによって表すトレース公式は半古典論の中核とも言える重要な関係式である．

トレース公式において各周期軌道が準位密度におよぼす影響を調べてみよう．一般に作用積分 $S_{\alpha}(E)$ はエネルギーの単調増加関数であるから，(4) の各項はエネルギーの振動関数である．この振動のエネルギースケール δE は

$$\delta E = \frac{2\pi\hbar}{\partial S_{\alpha}(E)/\partial E} = \frac{2\pi\hbar}{T_{\alpha}} \quad (5)$$

となり，周期 T_{α} の短い軌道ほど大きな δE ，すなわち大局的構造に寄与することが分かる．こうして，シェル構造を周期の短い軌道に起因する「エネルギー粗視化された準位密度における規則的な振動構造」として一般的に定義できる．

異なる周期をもつ周期軌道の干渉効果により準位密度にうなり構造が現れることがある．これをスーパーシェル構

造と呼ぶ。スーパーシェルが最初に議論されたのは、グッツヴィラーにより周期軌道理論が定式化されて間もない1971年にさかのぼる。グッツヴィラーとは独立に、任意の形をした境界内の粒子運動に対して周期軌道理論を構築したバリアン (R. Balian) とブロッホ (C. Bloch) は、球形キャビティの準位密度に見られる揺らぎのうなり構造が三角形軌道と四角形軌道の干渉効果として現れることを示した。⁸⁾ 図3は三角形軌道の寄与と四角形軌道の寄与の和を量子力学の準位密度と比較したものである。実験的には、Na クラスターの質量スペクトルにおいてスーパーシェル構造が観測されている。この構造は、西岡らにより、井戸型ポテンシャルの表面をなめらかにしたウッズ-サクソン型ポテンシャルにおける三角形と四角形軌道の干渉効果として説明され、バリアンとブロッホの示したスーパーシェル構造が現実の物理系で意味のある現象であることが示された。⁹⁾ この仕事は準位密度の規則的振動構造の起源に対して明解な物理的描像を与えたものであり、量子系の性質に対する簡明な理解を得る上での半古典論の有用性を示した興味深い例といえよう。この他にも、磁場中の水素原子や量子ドット等において周期軌道理論を用いた興味深い研究が数多くなされている。⁵⁾

3. シェル構造形成における周期軌道分岐の役割

次に、変形パラメータの連続的変化に対応するシェル構造の変化について考えよう。純粋に量子論的な概念だけでは、変形状態における顕著なシェル効果の起源を説明できない。^{*3} しかしながら、半古典近似を媒介として古典位相空間の構造との対応を考察すれば、この起源を明解に理解できることを以下に述べたい。まず古典位相空間の構造を決定する上で重要な、周期軌道の線形安定性について説明し、その後に変化とシェル構造の関係を議論する。

3.1 周期軌道の安定性とモノドロミー行列

軌道の安定性とは、その近傍の軌道が時間とともに元の軌道からどの様に乖離していくかを表す性質である。いま、位相空間内に、すべての軌道と横断的に交差する断面 (ポアンカレ断面) Σ を考える。 Σ 上の点 Z を発した軌道が再び Σ を横切る点を Z' とするとき、写像 $Z \mapsto Z'$ をポアンカレ写像という。周期軌道はポアンカレ写像の不動点に対応し、ポアンカレ写像を周期軌道を中心として展開したときの線形部分をモノドロミー行列とよぶ (図4)。ある

^{*3} 解析的に解ける調和振動子やクーロンポテンシャルは、半古典論の観点からいえば、楕円型の周期軌道しか存在しない極めて例外的なケースである。一般の平均ポテンシャルの場合、シュレーディンガー方程式の固有値をすべて数値的に求めたとしても、それだけでは準位密度の規則的構造を理解したことにはならないことを強調しておきたい。

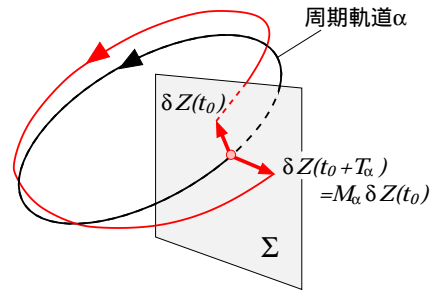


図4: ポアンカレ断面 Σ とモノドロミー行列の概念図。周期軌道はポアンカレ写像 $\Sigma \mapsto \Sigma$ の不動点に対応する。モノドロミー行列 M_α はポアンカレ写像を不動点 (周期軌道 α) のまわりで展開した線形部分を表す。

周期軌道 α からポアンカレ断面上で δZ だけずれた点を考えると、モノドロミー行列 M_α は

$$\delta Z(t_0 + T_\alpha) = M_\alpha \delta Z(t_0) \quad (6)$$

により定義される。ここで T_α は軌道 α の周期である。この行列要素は一般に用いる座標系の選び方や周期軌道上のどの点で定義するかによって異なるが、その固有値は軌道固有の量であり、座標系の取り方や軌道上の位置に依存しない。

ハミルトン系のもつ対称性によりモノドロミー行列は実シンプレクティック行列であり、固有値の一つが λ であるとする、その逆数 $1/\lambda$ およびそれらの複素共役 λ^* , $1/\lambda^*$ もまた固有値である。このことから、固有値を次の3種類に分類できる:

1. 楕円型 (ペア): $(e^{i\alpha}, e^{-i\alpha})$, α は実数
2. 双曲型 (ペア): $(e^\beta, e^{-\beta})$ または $(-e^\beta, -e^{-\beta})$, β は実数
3. 斜航型 (4つ組): $(e^\zeta, e^{\zeta^*}, e^{-\zeta}, e^{-\zeta^*})$, ζ は複素数

楕円型固有値のみを有する周期軌道は、初期値をずらしてもその周期軌道の近傍に留まり続ける安定軌道であり、ポアンカレ断面上に周期軌道を中心とする同心円状の軌跡を描く。一方、双曲型または斜航型固有値を1組でも有する軌道は初期値のずれが時間とともに指数関数的に増大する不安定軌道となる。

ところで、系が回転対称性などの連続対称性をもつとき、周期軌道はこの対称変換に対応して連続な族を形成する。このことを周期軌道の縮退と呼び、縮退の次元を縮退度という。^{*4} 回転対称性の場合には軌道の形は変化しないが、一般の動力学的対称性に対しては軌道の変形をとともなう縮退が起きる。例えば、一般に球対称系の軌道はオイラー回転

^{*4} トレース公式を初めて縮退のある場合に拡張したのはストラティンスキー (V.M. Strutinsky) とマグナー (A.G. Magner) であった。¹⁰⁾ 一方、ベリー (M.V. Berry) とテイバー (M. Tabor) は EBK 量子条件 (2) から出発して可積分系に対するトレース公式を導いた。¹¹⁾

の自由度に対応して縮退度 3 を有するが、逆二乗力ポテンシャル中の周期軌道は、回転についての縮退に加えて、円から楕円、直線軌道へと連続的な変形をとこなう縮退があり、縮退度 4 をもつ。また逆に、軌道自体が対称性をもつ場合には縮退度は小さくなる。例えば球形キャビティにおける中心を通る直線軌道は、それ自身を軸とする回転に対しては縮退が起こらないため縮退度は他の軌道より 1 小さい。縮退した軌道のモノドロミー行列は対称変換の方向に対応して固有値対 $(1, 1)$ を持つ。軌道の安定性を議論するときには、この縮退に対応する自由度を除いた縮小モノドロミー行列 \tilde{M}

$$M \sim \begin{pmatrix} 1 & * & & & \\ 0 & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & * \\ & & & 0 & 1 \\ & & & & & \tilde{M} \end{pmatrix}$$

を考えればよい。2次元系や軸対称 3次元系における縮小モノドロミー行列は (2×2) 行列であり、固有値は上の 1 または 2 のケースに限られる。このとき、

1. $\text{Tr } \tilde{M} = 2 \cos \alpha, \quad -2 \leq \text{Tr } \tilde{M} \leq 2$
2. $\text{Tr } \tilde{M} = \pm 2 \cosh \beta, \quad 2 < |\text{Tr } \tilde{M}|$

となり、トレースの値によって軌道の安定性を知ることができる。

3.2 局所対称性と周期軌道分岐

次に、周期軌道の分岐について述べる。系を規定する外部パラメータ（エネルギー、変形度など）を変化させると、それに応じて周期軌道は連続的な変形を受けるとともに、縮小モノドロミー行列の固有値も連続的に変化する。いま、固有値対の一つが $(1, 1)$ に一致したとすると、この固有値に属する固有ベクトルの方向にずらした軌道も線形近似の範囲で周期軌道であり、周期軌道の縮退が起きる。この縮退した軌道族をたねとして、元の周期軌道から新しい周期軌道が派生する現象を周期軌道分岐と呼ぶ。また、上でパラメータの変化を逆行させれば、異なる周期軌道が無限に接近し、分岐点を境として融合する現象が見られる。一般に分岐点は縮小モノドロミー行列のある固有値対が $(1, 1)$ に一致する点により特定することができる。

周期軌道分岐のメカニズムは、周期軌道が「作用積分の停留点」に対応することを用いてより明確に理解することができる。いま、ある与えられたエネルギー E で座標 r を出発した軌道のうち、ある有限時間後に r' に到達するものを考え、この軌道に沿った作用積分を $S(r', r; E)$ と表す。ここで $r' = r$ と置いた閉軌道に対する作用積分 $S_E(r) \equiv S(r, r; E)$ の r による微分は

$$\left(\frac{\partial S(r', r; E)}{\partial r'} + \frac{\partial S(r', r; E)}{\partial r} \right)_{r' \rightarrow r} = p' - p$$

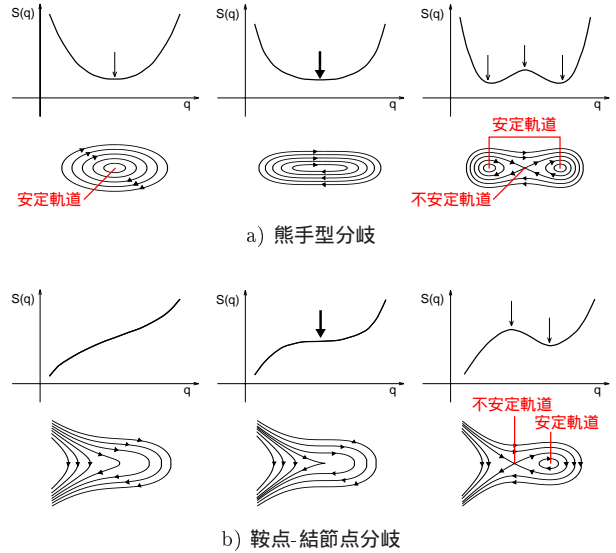


図 5: 代表的な周期軌道分岐の概念図。左から、分岐前、分岐点、分岐後における作用積分とポアンカレ断面を表す。作用積分の停留点（矢印）における作用の曲率が符号を変える点を境に、停留点の数が変化する。熊手型分岐では安定軌道が不安定化して新たな安定軌道を生じ、鞍点-結節点分岐では安定軌道と不安定軌道の対が生成する。

より、始点と終点における運動量の差である。従って $S_E(r)$ の停留点は始点と終点の運動量が一致する閉軌道、すなわち周期軌道を表す。この作用積分 $S_E(r)$ の停留点における曲率テンソル C は縮小モノドロミー行列 \tilde{M} と

$$\det C \equiv \left| \frac{\partial^2 S_E(r)}{\partial r_\perp \partial r_\perp^T} \right| \propto \det(I - \tilde{M}) \quad (7)$$

(r_\perp は軌道に垂直な成分) の関係で結ばれることが簡単な計算から分かる。縮小モノドロミー行列が固有値 1 をもつ点で (7) 式の右辺はゼロとなるので、この点を境として曲率テンソルの固有値の一つが符号を変える。図 5 は、この固有値に属する固有ベクトルの向き q について作用積分 $S_E(r)$ を 1 次元的に描いたものであり、停留点（傾きがゼロの点）が周期軌道に対応する。この図から明らかな様に、停留点における曲率の符号が変化すると、それに伴って停留点の数、すなわち周期軌道の数も変化する。これが周期軌道の分岐現象である。a 図の熊手型分岐では安定軌道が不安定化するとともに新しい安定軌道が生まれている。また、b 図の鞍点-結節点分岐では安定軌道と不安定軌道の対が生成している。

3.3 分岐に伴う振幅の増大

シェル効果の強さは、比較的短い周期軌道の振幅因子 A_α の大きさで決まる。この振幅因子と軌道の性質との関連について考えてみよう。対称性の高い系ほど顕著なシェル構造が見られるが、これは前節で述べた古典軌道の縮退と関

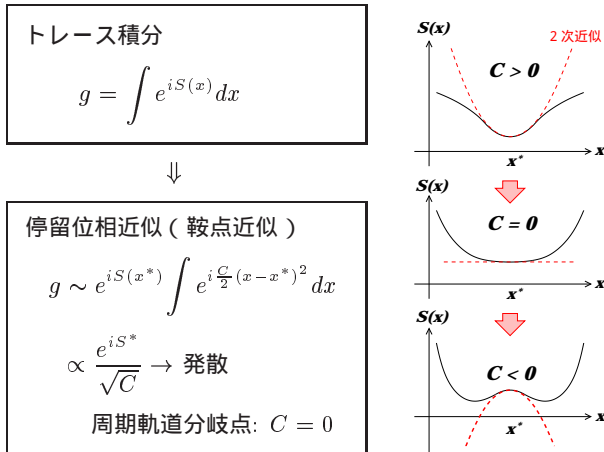


図 6: トレース積分の停留位相近似とその分岐点における破綻。停留位相近似では作用 $S(x)$ を停留点 x^* のまわりで 2 次まで展開してガウス積分に置き換えるが、分岐点ではこの 2 次の係数 C (曲率) がゼロになるため積分は発散する。

係する。縮退した軌道群は等しい作用積分をもち、経路積分に対してコヒーレントに寄与するため、その準位密度に対する寄与は縮退度が高いほど大きくなる。プランク定数による展開のことばで言えば縮退度が一つ下がると $\hbar^{1/2}$ だけ高次の寄与となる。前節の球形キャビティの例で、直線軌道ではなく三角形や四角形軌道が準位密度の構造を決めているのは縮退度の違いによっている。

特定の変形度でシェル構造が成長するメカニズムは、周期軌道の安定性と密接な関係を有する。¹²⁾ トレース公式 (4) 中の振幅 A_α は、トレース積分を停留位相法で評価したときに現れる $1/\sqrt{\det C}$ という因子を含んでいる (図 6 参照)。前節で見た様に、分岐点に近づくとき $\det C$ がゼロに近づくため振幅因子は増大する。このことは、図 6 右の中段に示す様に、停留点近傍の軌道が等しい作用積分値を持つ (すなわち局所的な動力学的対称性が発生する) ため積分にコヒーレントな寄与を与えることに起因している。

図 6 に示した通り、停留位相近似に基づくトレース公式は分岐点で破綻するが、近年、分岐点近傍でも振幅因子を計算できるようにトレース公式を拡張する試みがなされている。例えば、作用積分の展開の高次項を考慮するユニフォーム近似。¹³⁾ 位相空間トレース公式を用いる方法¹⁴⁾ が挙げられる。これらによると、実際に軌道の分岐点近傍で振幅因子が著しい増大を示すことが分かる (図 7)。このような機構により、準位密度に強い振動構造が与えられるのである。古典力学系において短い周期軌道の分岐は位相空間に大局的構造変化をもたらす正則な運動形態をカオス的運動形態に転じる役割をもつが、これによる量子論的な性質の変遷は単調ではなく、軌道分岐に対応して顕著な規則構造が発達することは大変興味深い。

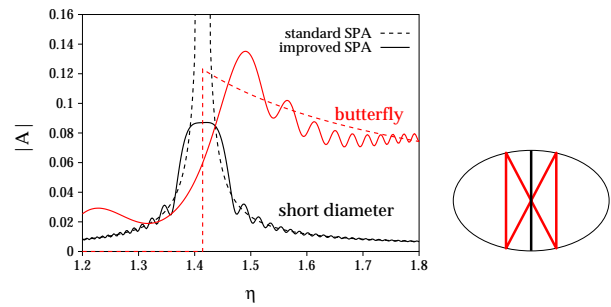


図 7: 楕円ビリヤードの短軸に沿った直線軌道の分岐点における振幅因子の増大。¹⁴⁾ $\eta = \sqrt{2}$ における分岐により右図のような蝶ネクタイ型軌道が短軸に沿った直線軌道 (の 2 周回) から派生する。通常停留位相近似による振幅因子 (破線) は分岐点において発散や不連続性を示すが、改良された停留位相法を用いることにより発散は解消され、振幅因子 (実線) は分岐点前後で外部パラメータに関する連続な関数となる。

4. 分岐による超変形シェル構造の形成

周期軌道分岐が変形シェル構造の形成にどのような役割を果たしているかを、回転楕円体キャビティ模型を用いて具体的に分析してみよう。キャビティ模型では、ある閉じた 3 次元の境界内を自由運動する粒子を考え、境界壁による反射は弾性的であるとみなす。量子論では、境界上で波動関数の値がゼロとなるディリクレ境界条件を課す。回転楕円体の変形パラメータとしては軸比 $\eta = R_z/R_\perp$ を用いる。この系は任意の η に対し、エネルギー E と角運動量の対称軸成分 L_z に加えて、2 つの焦点を基準とする角運動量ベクトルの内積が運動の定数となっており、自由度の数だけ独立な保存量が存在するので可積分である。まず量子準位密度の変形度依存性を図 8 に示す。回転楕円体キャビティ模型は可積分ではあるが対称性が低いため、調和振動子 (図 1) に比べるとシェル効果は全般にかなり弱い (現実の原子核は調和振動子とキャビティの中間的な状況にあるので、もう少し強いシェル効果が期待される) が、 $\eta = 1.5 \sim 2.0$ および $\eta \sim 2.5$ の変形度領域で顕著なシェル構造が現れる。これらは原子核で知られている超変形 (superdeformation) およびハイパー変形 (hyperdeformation) に対応すると考えられる。

次にこの系の周期軌道を見てみよう。キャビティ模型の古典軌道の形はエネルギーに依存しない。このことは、速度の絶対値を大きくしても同じ軌道をより短い時間で通過するだけであるから明らかであろう。従って全てのエネルギー領域に同一の周期軌道が存在し、その作用積分は速度の大きさと軌道の長さに比例するというスケール則を有する。球形では全ての古典軌道は球の中心を通る平面上の軌道となり、周期軌道は正多角形である。これらは前述の通り直線軌道を除いて 3 重に縮退している。軸対称変形を加

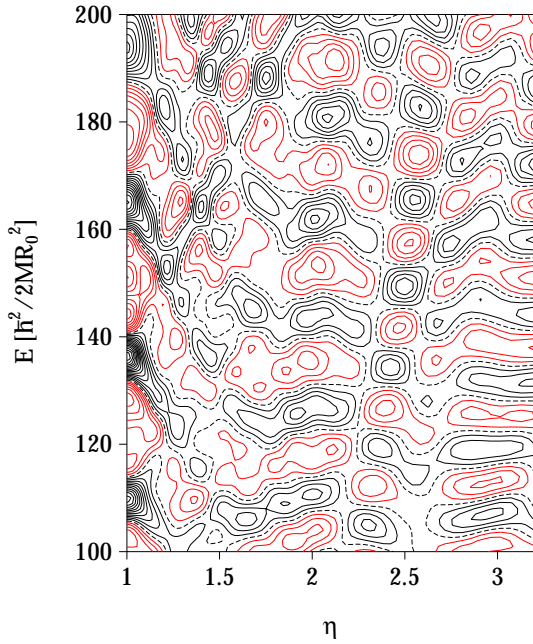


図 8: 回転楕円体キャビティのシェル構造.¹⁵⁾ 平滑化された準位密度の振動部分を変形度 $\eta = R_z/R_\perp$ とエネルギー E に対して等高線図で表したもので、赤線が準位密度の低い部分を表す。

えるとこの軌道族は赤道面軌道と対称軸を含む平面内の軌道とに分岐する。さらに変形を大きくすると、赤道面軌道が分岐を起こし、対称軸方向の振動と結合した 3 次元的な軌道を生じる。¹⁵⁾

上で述べたスケール則を用いると、トレース公式の振動部分 $\delta g \equiv g - \bar{g}$ を下のように書き直せる。

$$\delta g(E = \hbar^2 k^2 / 2m) = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \cos(kL_{\alpha} - \pi\mu_{\alpha}/2), \quad (8)$$

ここで k は波数、 L_{α} は周期軌道 α の長さを表す。この準位密度のフーリエ変換を行なうと、量子・古典対応を非常に明解に議論することができる。これは、キャビティをはじめ運動方程式がスケール変換に対する不変性を持つ場合にきわめて有用な手法である。(8) 式を波数 k についてフーリエ変換すると

$$F(L) = \int e^{ikL} \delta g(k) dk = \sum_{\alpha} A'_{\alpha} \delta(L - L_{\alpha}) \quad (9)$$

となり、 $L = L_{\alpha}$ にピーク列をもつ関数となる。従って、量子力学的に求めた準位密度のフーリエ変換をとることにより、どの軌道が準位密度に重要な寄与をするかを知ることができる。

図 9 は、量子力学計算で求めた準位密度のフーリエ変換と古典力学計算で求めた周期軌道の長さを比較したものである。 $\eta = 1.5 \sim 2.0$ で x, y 方向と z 方向の振動数の比

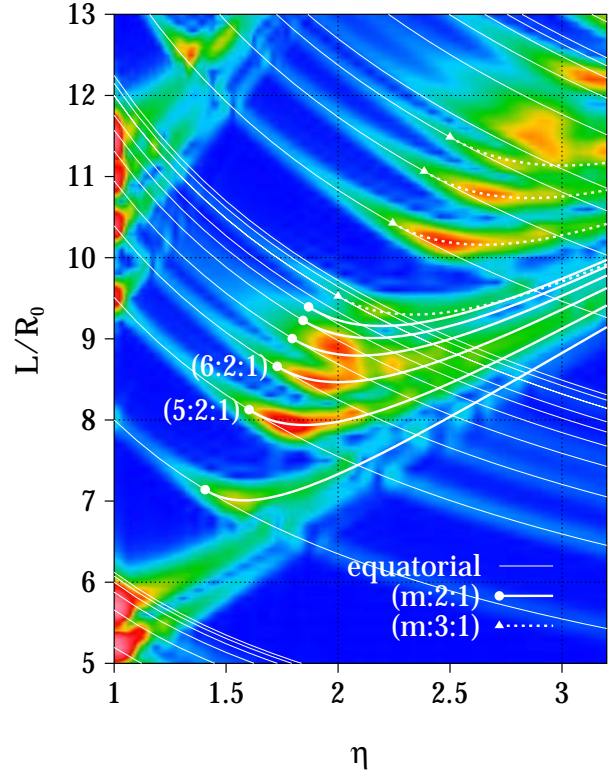


図 9: 回転楕円体キャビティモデルの準位密度のフーリエ変換と周期軌道の長さ。色の赤い部分がフーリエ成分の大きいところを表す。曲線は赤道面軌道とそれから分岐した 3 次元軌道の長さを表す。 $(m:n:k)$ は、 m が境界における反射の回数、 n が対称軸まわりの回転数、 k が対称軸方向の振動数を表す。軌道の分岐点(丸印)においてフーリエ成分が著しい増大を示しており、これらはシェル構造の発達する変形度とよく対応している。 $\eta = 1.5 \sim 2.0$ で軌道 $(m:2:1)$ 、 $\eta \sim 2.5$ で軌道 $(m:3:1)$ が分岐して準位密度に大きな影響を与える結果として、超変形シェル構造やハイパー変形シェル構造が形成されていることが分かる。

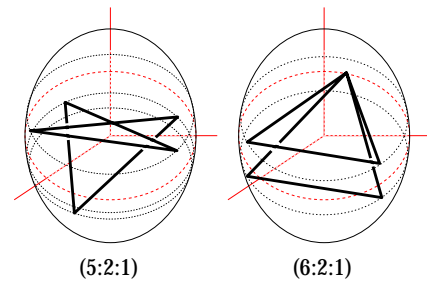


図 10: 回転楕円体キャビティの 3 次元軌道。(5:2:1) は赤道面上の 5 星軌道、(6:2:1) は赤道面上の正三角形軌道(の 2 周回)の分岐によって生成される軌道で、対称軸まわりを 2 回転する間に対称軸方向に 1 回振動する。キャビティモデルでは、調和振動子モデルと異なり、 η の広い領域に亘ってこの様な 3 次元周期軌道が存在する。

が 2:1 の 3 次元軌道 ($m : 2 : 1$) の分岐に対応したフーリエピークの著しい増大が見られる。分岐によって生じる 3 次元軌道の形を図 10 に示す。超変形シェル構造の起源はこれらの周期軌道分岐にあるといえる。

5. 八重極変形キャビティ模型のシェル構造

前節の模型は可積分であったが、これに (空間反転対称性を破る) 八重極変形 $\beta_3 Y_{30}$ を加えたキャビティ模型は非可積分系となる。この様なパリティを破る自由度は、集団運動の性質や電磁遷移の選択則など、原子核の基本的な性質に関わる重要な意味をもつ。八重極変形した平均場におけるシェル構造の性質は、八重極相関の強い原子核がどのような系統性をもって現れるかを理解する上で重要である。本節では、八重極変形度 β_3 を変化させたときのシェル構造について議論しよう (回転楕円体型の) 四重極変形では巨視的な機構と微視的な機構の両者が働くのに対して、八重極変形には巨視的な成因が考えられないので、その起源は純粋に微視的なシェル構造に求められる。量子力学計算によると、四重極変形と八重極変形のある決まった組み合わせで顕著なシェル構造が形成される。¹⁶⁾ 図 11 は軸比を $\eta = 1.4$ に固定して β_3 を変化させたときの準位密度をプロットしたものであり、 $\beta_3 = 0.1 \sim 0.2$ に顕著なシェル構造の発達が見られる。

このシェル構造形成の機構を周期軌道との関連から調べてみよう。軸対称八重極変形キャビティには、対称軸に垂直な平面で半径が極大となる平面 (以下赤道面とよぶ) 内の正多角形軌道と、対称軸を含む平面内の軌道、およびその他の 3 次元軌道がある。赤道面軌道について、その縮小モノドロミー行列のトレースを β_3 の関数としてプロット

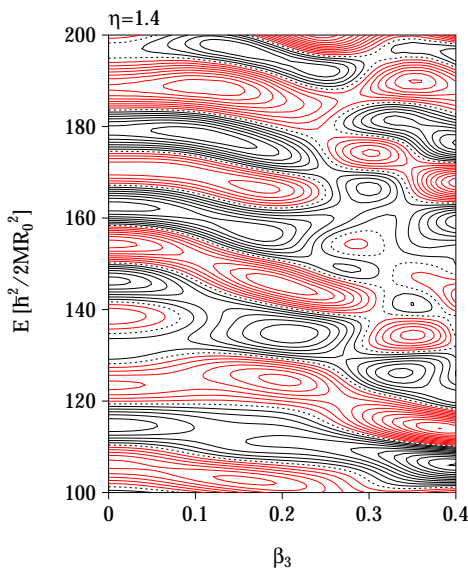


図 11: 八重極変形キャビティの準位密度 (図 8 の注参照)

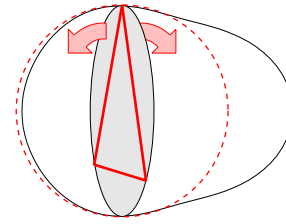


図 12: 八重極変形キャビティにおける赤道面周期軌道の分岐。境界面の (赤道面に垂直方向の) 曲率半径が赤道半径に一致するとき赤道面近傍の境界面は球面 (破線) で近似できるため、赤道面上の軌道はこの対称性による局所的縮退を起こす。

してみると、全ての軌道が等しい変形度 $\beta_3 \sim 0.16$ で同時に分岐を起こすことが分かる。この点は、赤道面近傍で境界面が局所的に球対称性を回復している様な変形度に対応している。図 12 に示したように、赤道面の半径と壁の曲率半径とが一致する変形度の組合せ (η, β_3) が分岐点となり、赤道面から傾いた軌道が生成する。この例では、分岐に関与する対称性が幾何学的対称性となっているのが特徴であり、分岐現象と対称性との関連が明確な形で現れている。

6. おわりに

有限量子系のシェル構造を理解する上で周期軌道理論が非常に有効な枠組みであることを述べてきた。トレース公式の発見後、膨大な量の古典軌道から個々の量子準位を再現することに多くの精力が傾けられた。これに対して、シェル構造を議論するのに必要なのは周期の短い数本の周期軌道のみであり、トレース公式はこうした大局的構造の記述において特に有効性を発揮すると言えよう。本稿では触れなかったが、原子核の平均場には強いスピン・軌道相互作用があることが知られており、シェル構造の性質に重要な影響を及ぼしている。この様なスピン自由度を陽に含む量子系においても、対応する古典系を適当に構成することによって周期軌道理論を用いることができる。この手法としては、チャンネル結合 WKB 近似¹⁷⁾ によりスピン自由度を断熱的に取り扱う手法や、SU(2) コヒーレント状態経路積分の枠組み¹⁸⁾ からスピンに対応する新しい自由度を導入する方法などが知られている。これらの手法を原子核のスピン・軌道結合の問題に適用することも興味深い課題である。¹⁹⁾ また、最近、束縛系の準位構造のみならず、量子アンチドット系における電気伝導率の磁場依存性など輸送現象においても周期軌道分岐の効果が指摘されている。²⁰⁾

停留位近似にもとづくトレース公式は分岐点における発散の問題を抱えている。物理系の大半を占める混合系 (カオス運動と規則的運動が混在する系) では周期軌道分岐が随所に起こっており、こうした系の特徴を理解するには軌

道分岐の影響を評価できる半古典近似法の開発が必要となる。本稿で述べたように、この課題への取り組みは最近活発になってきたが、今後ますます重要になると思われる。

参考文献

- 1) W.A. de Heer: Rev. Mod. Phys. **65** (1993) 611. 交久瀬五雄, 伊藤啓行: 日本物理学会誌 **53** (1998) 499.
- 2) P.J. Nolan and P.J. Twin: Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. **38** (1988) 533. 清水良文, 松柳研一: 日本物理学会誌 **43** (1988) 841. C. Baktash: Prog. Part. Nucl. Phys. **38** (1997) 291.
- 3) M. Brack, J. Damgaard, A.S. Jensen, H.C. Pauli, V. M. Strutinsky and C.Y. Wong: Rev. Mod. Phys. **44** (1972) 320. V.M. Strutinsky, A.G. Magner, S.R. Ofengenden and T. Døssing: Z. Phys. A **283** (1977) 269.
- 4) W. Nazarewicz and J. Dobaczewski: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 154.
- 5) シェル構造との関係も書かれている半古典論のテキストとしては, M. Brack and R.K. Bhaduri: *Semiclassical Physics* (Addison-Wesley, Reading, 1997).
- 6) 具体例での分析は, A. Bohr and B.R. Mottelson: *Nuclear Structure* (Benjamin, 1975), Vol. 2, p. 578.
- 7) M.C. Gutzwiller: J. Math. Phys. **8** (1967) 1979; **12** (1971) 343.
- 8) R. Balian and C. Bloch: Ann. Phys. **69** (1972) 76.
- 9) H. Nishioka, K. Hansen and B.R. Mottelson: Phys. Rev. B **42** (1990) 9377.
- 10) M.V. Strutinsky and A.G. Magner: Sov. Phys. Part. & Nuclei **7** (1977) 138. より一般的な定式化は, S.C. Creagh and R.G. Littlejohn: J. Phys. A **25** (1992) 1643.
- 11) M.V. Berry and M. Tabor, Proc. Roy. Soc. London A **349** (1976) 101; J. Phys. A **10** (1977) 371.
- 12) K. Arita and K. Matsuyanagi: Nucl. Phys. A **592** (1995) 9.
- 13) H. Schomerus and M. Sieber: J. Phys. A **30** (1997), 4537.
- 14) A.G. Magner, S.N. Fedotkin, K. Arita, T. Misu, K. Matsuyanagi, T. Schachner and M. Brack: Prog. Theor. Phys. **102** (1999) 551. A.G. Magner, S.N. Fedotkin, K. Arita, K. Matsuyanagi and M. Brack: Phys. Rev. E **63** (2001) 065201(R).
- 15) K. Arita, A. Sugita and K. Matsuyanagi: Prog. Theor. Phys. **100** (1998) 1223.
- 16) A. Sugita, K. Arita and K. Matsuyanagi: Prog. Theor. Phys. **100** (1998) 597.
- 17) K. Yabana and H. Horiuchi: Prog. Theor. Phys. **75** (1986) 592; **77** (1987) 517. R.G. Littlejohn and W.G. Flynn: Phys. Rev. A **45** (1992) 7697.
- 18) H. Kuratsuji and T. Suzuki: J. Math. Phys. **21** (1980) 472.
- 19) H. Firsk and T. Guhr: Ann. of Phys. **221** (1993) 229.
- 20) 中村勝弘, 馬駿: 日本物理学誌 **56** (2001) 233. J. Ma and K. Nakamura: Phys. Rev. B **62** (2000) 13552. J. Blaschke and M. Brack: Europhys. Lett. **50** (2000) 294.

著者紹介



在田 謙一郎氏: 半古典論による有限量子系ダイナミクスの研究。原子核の集団運動や量子カオスに興味を持つ。



松柳 研一氏: 原子核構造論: 高スピン回転, 超変形, 非調和振動など集団現象に対する微視的モデルに取り組んでいる。