

散逸力学系の量子力学

名大・理 保江邦夫

自由度の非常に大きな力学系と熱的相互作用をしている力学系の量子力学的記述は、主に非平衡量子統計力学としての理論の枠内で議論されているが、¹⁾ ここでは簡単な散逸項を持つ古典運動方程式(ランジュバン方程式)に従う散逸力学系の量子化を試み、それからえられるいくつかの物理的性質を論ずる。

1. Motivations

原子核における核子の集団運動のあるものについては、それが速度に依存する散逸力のために運動エネルギーの大部分を失ってしまうことが知られている。²⁾ 深部非弾性散乱過程と呼ばれるこの現象を記述するために多くの研究がなされているが、その多くは古典的、現象論的理論の域を脱していない。その原因の一つとして Swiatecki らが強調している様に、³⁾ 古典力学においてランジュバン方程式で記述される比較的簡単な散逸力学系の場合にすら、その量子力学的記述が存在しないことが指摘されよう。近年 Kostin⁴⁾ は対応原理に基づき、ランジュバン方程式

$$m\ddot{q}(t) = -\text{grad } V(q(t)) - \gamma \dot{q}(t) + A(t) \quad (1)$$

で記述される散逸力学系の量子力学的記述がシュレディンガー型の波動方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \text{divgrad} + V - q \cdot A(t) + \frac{i\gamma}{2m} \hbar \log \frac{\overline{\psi}}{\psi} \right] \psi \quad (2)$$

で与えられることを示した。^{*)} ここに V は保存力のポテンシャルを表わし、 γ はまさつ係数、 $A(t)$ はガウス型のホワイトノイズ、 ψ は系の確率振巾である。この波動方程式(2)はその後多くの人々により研究され、それが散逸力学系の正しい量子力学的記述を与

*) $\overline{\psi}$ は複素共役を表わす。

保江邦夫

えることが確かめられてはいるが、その導出が対応原理に基づく発見法的手法による段階を出ていない点で理論的には満足すべきものとはいえない。⁵⁾

小論では、一般にはあまり知られていない量子化の手法即ち「確率量子化 (stochastic quantization)」⁶⁾ の手続きを用いて、古典的なランジュバン方程式(1)で記述される散逸力学系の量子化を行い、さらにフォノン場の再度量子化についてエネルギー散逸状態の時間的変化を調べる。

II. 確率量子化

ランジュバン方程式(1)をその Euler 方程式とする様な、物理的に意味のあるラグランジ関数、あるいはそれから導かれるハミルトン関数は対象が非保存系であるため原理的に存在しない。したがって正準量子化あるいは径路積分による量子化は適用できない。それゆえこの場合われわれが用いる唯一の有効な量子化の手法は Nelson による“確率量子化”であるように思われる。⁷⁾

確率量子化については Nelson 自身による講義録⁸⁾ がプリンストン大学から出版されており、また日本語でも豊田氏⁹⁾ や江沢氏¹⁰⁾ による丁寧な解説があるので、ここではあまり原理的な面には立ち入らない。

この新しい量子化では座標変数を自己共役な作用素 $\hat{q}(t)$ としてではなく、伊藤型の確率微分方程式

$$dQ(t) = b(Q(t), t) dt + B(dt) \quad (3)$$

に従う拡散過程 $Q(t)$ とみなす。ここに B は拡散係数 $\hbar/2m$ を持つウィナー過程を表わし、ドリフト項 b はこれから決定されるべき未知ベクトル場である。よく知られている様に拡散過程(3)の確率分布密度 $\rho(Q, t) dQ \equiv \text{Prob.} \{Q(t) \in dQ\}$ はフォッカー・プランク方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \text{div}(b\rho) + \frac{\hbar}{2m} \text{digrad} \rho \quad (4)$$

を満たす。

次に拡散過程 $Q(t)$ の平均速度 v および平均加速度 a を次のように定義する。

$$v(Q(t), t) \equiv \frac{1}{2} (D + D_*) Q(t) \quad (5)$$

$$a(Q(t), t) \equiv \frac{1}{2} (DD_* + D_*D) Q(t) \quad (6)$$

D, D_* はそれぞれ, 過程 $Q(t)$ が生成する平均前方微分, 平均後方微分

$$\begin{aligned} Df(Q(t), t) &\equiv \lim_{h \downarrow 0} \frac{1}{h} E [f(Q(t+h), t+h) - f(Q(t), t) | Q(t)] \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + b \cdot \text{grad} + \frac{\hbar}{2m} \text{divgrad} \right) f(Q(t), t) \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} D_*f(Q(t), t) &\equiv \lim_{h \downarrow 0} \frac{1}{h} E [f(Q(t), t) - f(Q(t-h), t-h) | Q(t)] \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + b_* \cdot \text{grad} - \frac{\hbar}{2m} \text{divgrad} \right) f(Q(t), t) \end{aligned} \quad (8)$$

である。ここで $E[\cdot | Q(t)]$ は $Q(t)$ に関する条件付期待値を表わし, b_* は

$$b_* \equiv b - \frac{\hbar}{m} \text{grad} \log \rho \quad (9)$$

で定義される。

確率量子化の基本仮定に従って, 平均速度および平均加速度についてランジュバン方程式 (1) が成立することを要請する。

$$ma(Q(t), t) = -\text{grad} V(Q(t)) - r v(Q(t), t) + A(t) \quad (10)$$

前に述べた平均速度および平均加速度の定義に従ってこの方程式を変形すれば

$$m \frac{\partial}{\partial t} v + m(v \cdot \text{grad}) v - \frac{\hbar^2}{2m} \text{grad} \frac{\text{divgrad} \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = -\text{grad} V - r v + A \quad (11)$$

をえる。

最後に平均速度 v がなめらかな関数 S のグラディエント

$$m v(Q(t), t) = \hbar \text{grad} S(Q(t), t) \quad (12)$$

で表わされることを仮定し, 確率振巾 ψ を

$$\psi \equiv \sqrt{\rho} \exp iS \quad (i^2 = -1) \quad (13)$$

として導入すれば, 方程式 (4), (9), (11) および (12) により確率振巾のみたす波動方程式

保江邦夫

として

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(Q, t) &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{divgrad} + V(Q, t) - Q \cdot A(t) + \frac{\hbar}{m} r S(Q, t) \right\} \psi(Q, t) \\
 &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{divgrad} + V(Q, t) - Q \cdot A(t) + \frac{i\hbar}{2m} r \log \frac{\psi(Q, t)}{\psi(Q, t)} \right\} \psi(Q, t) \quad (14)
 \end{aligned}$$

をえる。これは Kostin が heuristic に導入したシュレディンガー・ランジュバン方程式(2)と一致している。

ここで注目すべきことは波動方程式 (14) が ψ に関して非線型であるにも拘らず、その確率解釈は定義 (13) により自動的に成り立っている点である。すなわち

$$\begin{aligned}
 |\psi(Q, t)|^2 dQ &= \rho(Q, t) dQ \\
 &= \operatorname{Prob.} \{ Q(t) \in dQ \} \quad (15)
 \end{aligned}$$

こうして、散逸力学系の量子力学的記述はシュレディンガー・ランジュバン方程式 (14) によって与えられることが“確率量子化”の枠組の中で理論的に示された。

方程式 (14) についての詳しい議論、特にそれがエーレンフェストの定理として

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle Q \rangle &= \frac{1}{m} \langle -i\hbar \operatorname{grad} \rangle \\
 &= \frac{1}{m} \langle P \rangle \quad (16)
 \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = -\langle \operatorname{grad} V \rangle - \frac{r}{m} \langle P \rangle + \langle A \rangle \quad (17)$$

を導くことなどについては Kostin の解説をみられたい。

III. 簡単な応用

自由度の大きな力学系と熱的相互作用をしているフォノン場については Ford, Kac, Mazur¹¹⁾により詳しく研究されている。ここでは散逸相互作用項を持つ波動方程式

$$\ddot{\phi}(t, \mathbf{X}) = \nabla^2 \phi(t, \mathbf{X}) - r \dot{\phi}(t, \mathbf{X}) \quad (18)$$

に従うフォノン場 $\phi(t, \cdot) \in L_2(\mathbf{R}^3)$ の再度量子化を前章での確率量子化の手法により行ってみよう。

波動場の確率量子化は場 ϕ_i を、任意の試験関数 $f \in \mathcal{D}(\mathbf{R}^3)$ に対して

$$d \langle \phi_t, f \rangle = \langle T_t \phi_t, f \rangle dt + B_f(dt) \quad (19)$$

なる確率微分方程式に従う超過程と見ることにより与えられる。¹²⁾ここに T_t は $\mathcal{D}(\mathbf{R}^3)$ 上の非線型作用素であり, B_h は

$$\begin{aligned} E [B_f(dt)] &= 0 \\ E [B_f(dt) B_g(dt)] &= \hbar \langle f, g \rangle dt \\ &\text{for } f, g \in \mathcal{D}(\mathbf{R}^3) \end{aligned} \quad (20)$$

で定まる Wiener 過程を表わす。有限自由度の場合と同様にして, フォノン場 (18) の状態汎関数 Ω_t の満たす基礎方程式として

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Omega_t[\phi] &= \frac{1}{2} \int d^3x \left[-\hbar^2 \frac{\delta^2}{\delta \phi(\mathbf{X})^2} + \{ \nabla \phi(\mathbf{X}) \}^2 \right] \Omega_t[\phi] \\ &\quad + \frac{i\gamma\hbar}{2} \log \frac{\overline{\Omega_t[\phi]}}{\Omega_t[\phi]} \Omega_t[\phi] \end{aligned} \quad (21)$$

がえられる。¹²⁾

この量子化されたフォノン場において全エネルギーの散逸が実際に起こっていることを調べてみよう。場の全エネルギー作用素

$$H = \frac{1}{2} \int d^3x \left[-\hbar^2 \frac{\delta^2}{\delta \phi(\mathbf{X})^2} + \{ \nabla \phi(\mathbf{X}) \}^2 \right] \quad (22)$$

の期待値 $E(t)$ は汎関数積分を用いて

$$\begin{aligned} E(t) &= \langle \Omega_t, H\Omega_t \rangle \\ &= \int \overline{\Omega_t[\phi]} H\Omega_t[\phi] \mathcal{D}\phi \end{aligned} \quad (23)$$

と表わされ, その時間変化率は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E(t) &= \left\langle \frac{\partial \Omega_t}{\partial t}, H\Omega_t \right\rangle + \left\langle \Omega_t, H \frac{\partial \Omega_t}{\partial t} \right\rangle \\ &= -\frac{\gamma\hbar^2}{4} \int \overline{\Omega_t[\phi]} \left[\int d^3x \frac{\delta^2}{\delta \phi(\mathbf{X})^2} \left\{ \log \frac{\overline{\Omega_t[\phi]}}{\Omega_t[\phi]} \Omega_t[\phi] \right\} \right] \end{aligned}$$

$$- \log \frac{\overline{\Omega_t[\phi]}}{\Omega_t[\phi]} \int d^3x \frac{\delta^2 \Omega_t[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{X})^2} \Big] \mathcal{D}\phi \quad (24)$$

で与えられる。汎関数積分に対する部分積分の公式¹³⁾を用いて上式を計算すれば、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E(t) &= \frac{r\hbar^2}{4} \int \left[\int d^3x \left\{ \frac{\delta}{\delta \phi(\mathbf{X})} \log \frac{\overline{\Omega_t[\phi]}}{\Omega_t[\phi]} \right\} \left\{ \overline{\Omega_t[\phi]} \frac{\delta \overline{\Omega_t[\phi]}}{\delta \phi(\mathbf{X})} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \overline{\Omega_t[\phi]} \frac{\delta \Omega_t[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{X})} \right\} \right] \mathcal{D}\phi \\ &= - \frac{r\hbar^2}{4} \int |\overline{\Omega_t[\phi]}|^2 \int d^3x \left| \frac{\delta}{\delta \phi(\mathbf{X})} \log \frac{\overline{\Omega_t[\phi]}}{\Omega_t[\phi]} \right|^2 \mathcal{D}\phi \\ &\leq 0 \end{aligned} \quad (25)$$

となり、フォノン場の全エネルギーはたしかに単調に減少することがわかる。

実際に状態方程式 (21) の解を求めるためにフォノン場 (18) をまさつ項を持つ調和振動子

$$\ddot{Q}_{\mathbf{k}}(t) = -\mathbf{k}^2 Q_{\mathbf{k}}(t) - r \dot{Q}_{\mathbf{k}}(t) \quad (26)$$

の集まりとみなすことができる。ここに $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}$ で \mathbf{n} は整数成分のベクトルである。

このときフォノン場 ϕ_t の状態汎関数 $\Omega_t[\phi]$ は各規準座標 $Q_{\mathbf{k}}$ に対する状態関数 $\Psi_{\mathbf{k}}$ のテンソル積

$$\begin{aligned} \Omega_t[\phi_t] &= \Omega_t[\{Q_{\mathbf{k}}\}] \\ &= \bigotimes_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}(Q_{\mathbf{k}}, t) \end{aligned} \quad (27)$$

で表現され、 $\Psi_{\mathbf{k}}$ はシュレディンガー型の方程式

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{k}}(Q_{\mathbf{k}}, t) &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial Q_{\mathbf{k}}^2} + \frac{\mathbf{k}^2}{2} Q_{\mathbf{k}}^2 \Psi_{\mathbf{k}}(Q_{\mathbf{k}}, t) \\ &\quad + \frac{i\gamma}{2} \hbar \log \frac{\overline{\Psi_{\mathbf{k}}(Q_{\mathbf{k}}, t)}}{\Psi_{\mathbf{k}}(Q_{\mathbf{k}}, t)} \Psi_{\mathbf{k}}(Q_{\mathbf{k}}, t) \end{aligned} \quad (28)$$

に従う。

この方程式 (28) に対する一つの特解が最近 Kan, Griffin¹⁴⁾ により、

$$\Psi_{\mathbf{k}}(Q_{\mathbf{k}}, t) = \sqrt[4]{\frac{|\mathbf{k}|}{\pi \hbar}} \exp \left[-\frac{|\mathbf{k}|}{2\hbar} \{ Q_{\mathbf{k}} - Q(t) \}^2 \right] \quad (29)$$

$$\times \exp \left[i \left\{ \frac{P(t) Q_{\mathbf{k}}}{\hbar} - G(t) \right\} \right] \quad (30)$$

$$Q(t) = Q_0 e^{-\frac{r}{2} t} \cos \left(\sqrt{\mathbf{k}^2 - \frac{r^2}{4}} t - \delta \right)$$

$$P(t) = -Q_0 e^{-\frac{r}{2} t} \left\{ |\mathbf{k}| \sin \left(\sqrt{\mathbf{k}^2 - \frac{r^2}{4}} t - \delta \right) + \frac{r}{2} \cos \left(\sqrt{\mathbf{k}^2 - \frac{r^2}{4}} t - \delta \right) \right\} \quad (31)$$

$$G(t) = \frac{1}{2} |\mathbf{k}| t + \int_0^t ds \frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{P^2(s)}{2} - \frac{\hbar^2}{2} Q(s)^2 - r P(s) Q(s) \right\} \quad (32)$$

という形に求められている。ここで時間無限大の極限をとれば、

$$\Omega_t [\{Q_{\mathbf{k}}\}] \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \otimes_{\mathbf{k}} \sqrt[4]{\frac{|\mathbf{k}|}{\pi \hbar}} e^{-\frac{|\mathbf{k}|^2}{2\hbar} Q_{\mathbf{k}}^2 - \frac{i|\mathbf{k}|}{2} t} \times e^{i\alpha} \quad (33)$$

(α ; real constant)

となるが、これは時間が十分経過すると基底状態に落ちていく散逸状態を表わしていると考えることができる。

実際に解が求まっているのはこの場合だけであるが、注意すべきは、方程式(28)が通常の散逸のない場合のエネルギー一定常状態をも解として許すという点である。このことから系が時間の経過とともに熱平衡状態へ移行することに関連して、時間無限大で各励起状態に漸近的に移行する様な解が予想されるが、これは今後に残された課題である。

最後に、終始多くの面で御世話くださった豊田利幸先生に感謝いたします。また、京都大学の中込照明氏には筆者が京都にいた時に色々と教えられる点、大でありました。この場を借りてお礼の意を表わしたいと思います。

参 考 文 献

- 1) D. N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics* (1971, Nauka)
- 2) H. Hofmann, *Phys. Letters* **61B**, 423 (1976)
- 3) W. J. Swiatecki and S. Bjørnholm, *Phys. Rep.* **4**, 325 (1972); also see Ref.14)
- 4) M. D. Kostin, *J. Chem. Phys.* **57**, 3589 (1972); *J. Stat. Phys.* **12**, 145 (1975)
- 5) R. W. Hasse, *J. Math. Phys.* **16**, 2005 (1975)
- 6) E. Nelson, *Phys. Rev.* **150**, 1079 (1966)
- 7) F. Guerra, *J. de Phys. Suppl. Colloque* **34**, C1-95 (1973)
- 8) E. Nelson, *Dynamical Theories of Brownian Motion* (Princeton University Press, Princeton 1967)
- 9) T. Toyoda, 岩波講座 現代物理学の基礎 2 古典物理学 II
- 10) H. Ezawa, 数理科学 No. 141, 1975
- 11) G. W. Ford, M. Kac and P. Mazur, *J. Math. Phys.* **6**, 504 (1965)
- 12) K. Yasue, preprint DPNU-29-76, (1976) and DPNU-38-76, (1976)
- 13) G. Rosen, *Formulations of Classical and Quantum Dynamical Theory* (Academic Press, New York 1969)
- 14) K. K. Kan and J. J. Griffin, *Phys. Letters* **50B**, 241 (1974)