

量子力学系のカオス

早大理工 斎藤信彦 (Nobuhiko Saitô)

§1 はじめに

古典的なハミルトン系において、一自由度系は可積分であつてカオスは現われない。二自由度以上の系ではたゞゞ非可積分であつてカオスが現われる。ここでは最も簡単な二自由度系に限りことにする。この場合カオスの生ずるメカニズムはかなりよくわかつて来た。二自由度系では Poincaré 写像面上に不動点が多数存在する。楕円的不動点は安定であつて、そのまわりには不変曲線がこまれる (KAM の定理)。一方双曲的不動点は不安定であるが、そのまわりの微小領域の近傍は可積分であつて不変曲線群が連続的に分布している (Moser の定理)。しかし双曲的不動点を通る二本の不変曲線は交つてはもつてはなからず、カオスを生ずるために一つの不変曲線から他の不変曲線へ不規則にうつりかわる。このために、双曲的不動点のまわりに小さなカオスの領域ができる。その領域が隣りの双曲的不動点のまわりのカオスの領域と重なりあ

カオスの飽域が広がることとなる。不動点またはパラメータ(エネルギー)を変えることによって分岐を繰り返して、精肉のあふく双曲的不動点の数が逐次増え、その数を増やす。これによってカオスの量なりを容易にし、広い飽域に亘るカオスが見られるようになるのである。¹⁾

これに及し量子力学系でのカオスのあはれは事情はよくわかっていない。しかしあるハミルトニアンに対し、古典的取捨にカオスになることには量子力学でもカオスになることには容易に想像される。古典的な非可積分系では、双曲的不動点のまわりは、大なり小なりカオスの飽域がある。これは量子力学の上ではどのように反映しているのだろうか。

ハミルトニアンが分離でき、独立な一自由度系に帰着できる場合は、小づきの教科書が取捨の例題にある。たとえば矩形や円の中の自由粒子の問題である。この場合は運動方程式の値が0になるところ即ち節線は交叉し、規則的な模様をつくる。境界条件が変わると(矩形から不規則な境界へ)、直接粒子間には相互作用があつたりして、二つの自由度に帰着した系が独立でなくなり、系は分離できなくなり、非可積分系になると、節線は互いに避け合(avoiding)、相互作用が大きくなると、節線、模様は不規則になる。このような節

線の模様のみたれが力オスに相当すると秀えられたのである。

図1はスタジウム(矩形の両側に半円をつ

けたもの、この中の古典的軌道(球内見欠

ちは、Bunimovich²⁾は K -系(お子ニヒ

を証明した)の中の自由粒子の運動軌

道の節線を示したものである。 x, y 軸

に同じに対称であるが、運動軌道のうち反対称のもの(図

面および x, y 軸上を 0) を更にする。図からわかるよう

に節線は交叉しなすが一般に、不規則に分布している。これは

McDonald & Kaufman の結果³⁾ である。

非線形な力のポテンシャルをもつ系については、Strutt の

研究がある⁴⁾。ポテンシャル $V(x, y)$ は後に出る式(5)で

$\epsilon = 1/2$ とおいたものである。図3は規則的なパターンとみられる

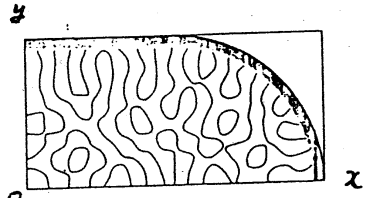


図1. スタジウム中の運動軌道の節線 (1/4 対称がわかる)

子である。エネルギー準位の番号は (a) 98, (b) 104, (c) 125

である。図5は不規則なパターンで (a) 87, (b) 103, (c) 118

に相当する。黒は運動軌道の値が正のところ、白は負のところ

である。図4はどちらともいえない場合である。エネルギー

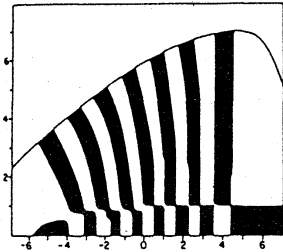
準位の高いときは規則的で、低いときは不規則な^{がある}のは

注目すべきである。この系は、同じエネルギーでも初期条件

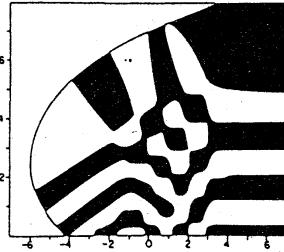
よって KAM トーラスの上にある古典的軌道は規則的であり、

力オス状態の軌道である。このことは量子力学的には、エネルギー

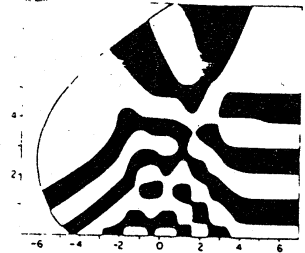
Stratt, Handy, and Miller: Implications of classical ergodicity.



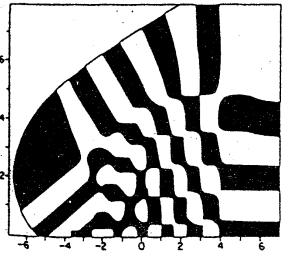
(a) 98th



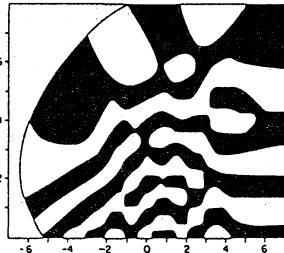
(a) 76th



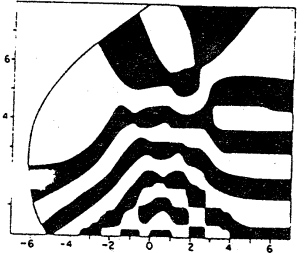
(a) 87th



(b) 104th



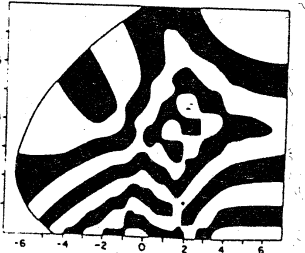
(b) 121th



(b) 103th



(c) 125th



(c) 118th

図 3

規則的なパターン

図 4

どちらともいえない。

図 5

不規則なパターン

キーが重複していて、同じエネルギー、もしくは非常に近いエネルギーでも一方は軌道の規則的なものに、他方は不規則なものに該当してると考えられるからかも知れない(これは推測である)。いずれにしても図4にみられるように、不規則か規則的か判断は迷うことである。

またエネルギー間隔の分布を考えたことも出来る。この間隔 S が S と $S+dS$ の間にある確率を $P(S)dS$ と定義する。

S は実数、エネルギー間隔を平均のエネルギー間隔に割ったものを s とするが通常である。この関数 $P(s)$ は、原子核中の多体問題のエネルギー準位を s とする Wigner s による考えが s であるが、 s は s と s^{-1} の固有値問題として提え⁵⁾ 系が分断系である、多くの縮退がある場合、非可積分系である準位は互いに反撥して避け合う縮退はとけてくる。前者の場合には $S=0$ のところには有限の値を持つが、後者は $P(s)$ は $S=0$ で 0 となり S の増大と共に山を造り、 S が大きくなると減少する⁶⁾。

Wigner は準位内の反撥にある位置を s と $P(s)$ が

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) \quad (1)$$

という式で導いた。これは Wigner 分布といふ。一方、反撥がない場合は

$$P(s) = \exp(-s) \quad (2)$$

である。Stadium の中の自由粒子に対する前述の McDonald & Kaufmann はエネルギー間隔が Wigner 型の山を造る s であることを見つけた。 $s \rightarrow 0$ で $P(s) \rightarrow 0$ になることは Berry & Tabor の研究である⁶⁾。

なお、量子力学の時間発展と同じく、古典力学軌道に対する Wigner 分布関数 (1) とはちがう) をつかって議論

論したり、⁷⁾ 一自由系に週期的な外力を加えると、1.5
自由系とみなされ、周期 T 毎に観測すると、 q と p の
ある時刻 t から $t+T$ への写像を f とすることが出来たことを
利用して示すことができる。⁸⁾

§2. エネルギー-準位の間隔のランダム性

以下の議論ではエネルギー-間隔の分布 $P(s)$ を問題にする
のではなく、間隔自身が準位の番号と共に変動する様子を見
てみることにする。ここに取り上げる系はハミルトン H が

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \alpha V(x, y) \quad (3)$$

$$V(x, y) = \frac{1}{4}(ax^4 + by^4 + 2cx^2y^2) \quad (4)$$

あるいは

$$V(x, y) = x^2y + \frac{1}{3}(1-2\varepsilon)y^3 \quad (5)$$

で与えられるものがある。(5)の式に ε は既にしるべ
たことがあるが⁹⁾ $\varepsilon=1$ はいわゆる Hénon-Heiles 系であ
り、 $\varepsilon=0$ は可積分系である。しかしこの場合は、ポ
テンシャルが三次であるために、 y 方向で $\frac{dy}{dt}$ があつて
それを除くと $-\infty$ に向う。古典系では、エネルギー
の値をその限界値以下にとれば問題は生じないが、量子力
学では、トンネリング効果があつて、定常状態は存在しない。

近似的にエネルギー準位は求められ、エネルギー準位の高いところでは、トンネル効果による誤差が生じられない。従ってここでは(4)で与えられるポテンシャルを4つ場合に分けて取り扱う。この場合は $a=b=c=1$ および $a=b=1, c=3$ の場合は分離可能な積分可能な系である。そこで $a=b=c=1$ と $a=b=1, c=2$ の場合を取り扱うことにする。

Schrödinger 方程式の固有値および固有関数は、調和振動子(上の式(3)で $\alpha=0$ としたものの)の固有関数を直交基底関数として展開し、マトリックス $\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$ を有限次元で対角化する方法である。 $\alpha = 0.088$ ととり、 $\hbar/m = 1$ とした。われわれは 990 の基底関数を用いた場合と 630 個を用いた場合とを比較した。この計算によればエネルギーが $E=30$ 位までは小教皇下層層まで一致した結果を見た。この程度の精度までは正しい結果である。図6は $a=b=c=1$ の可積分系、図7は $a=b=1, c=2$ の非可積分系である。この両者の特徴の差をもう一つ示すのはエネルギー準位の間隔

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$$

をみることである。図8, 9は夫々図6, 図7に対応するものである。図8は比較的規則性があるが、図9には規則性が失われている。

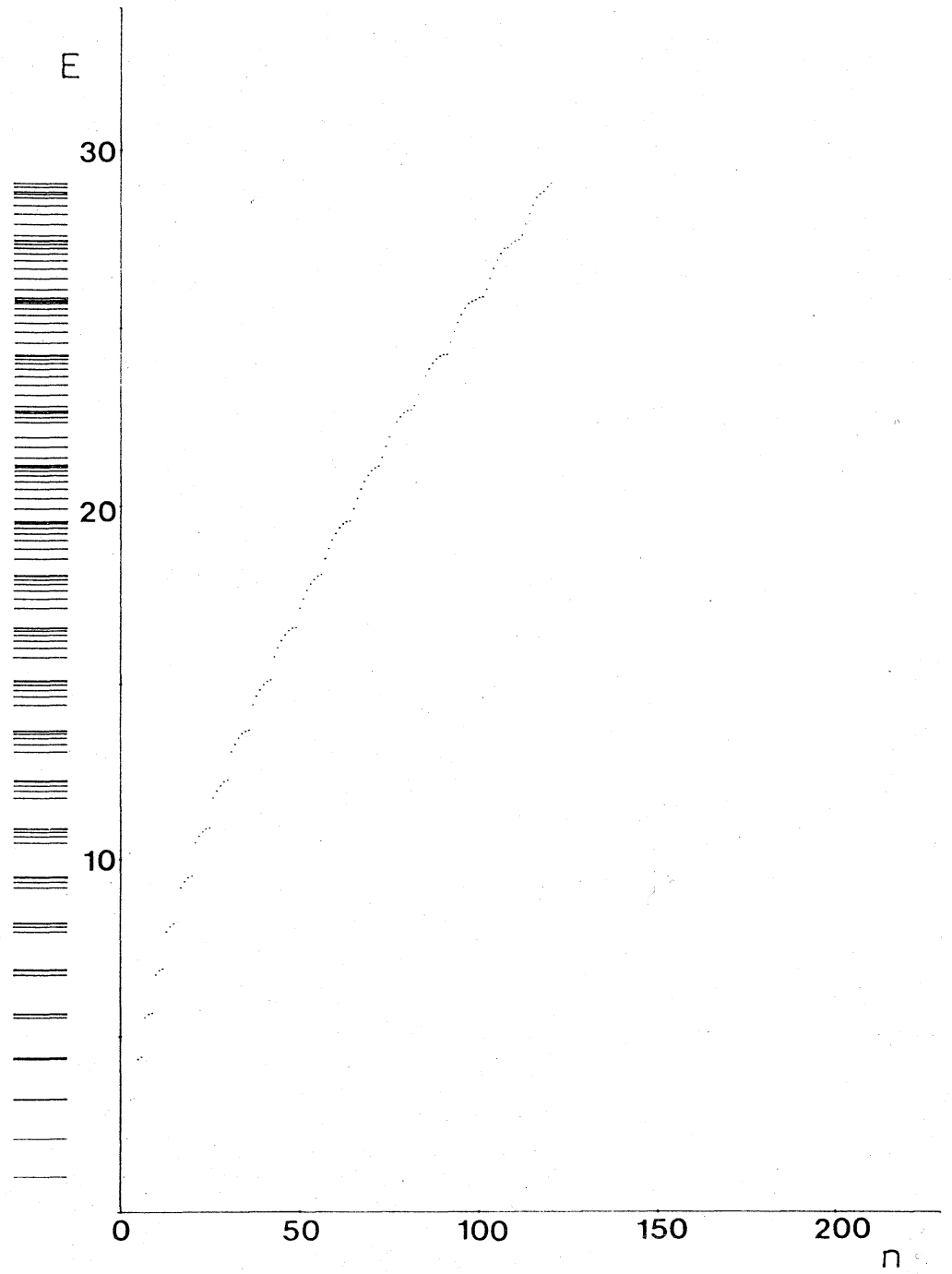


図 6. 可積分の場合、 E と n の関係
 横軸 n は単位番号

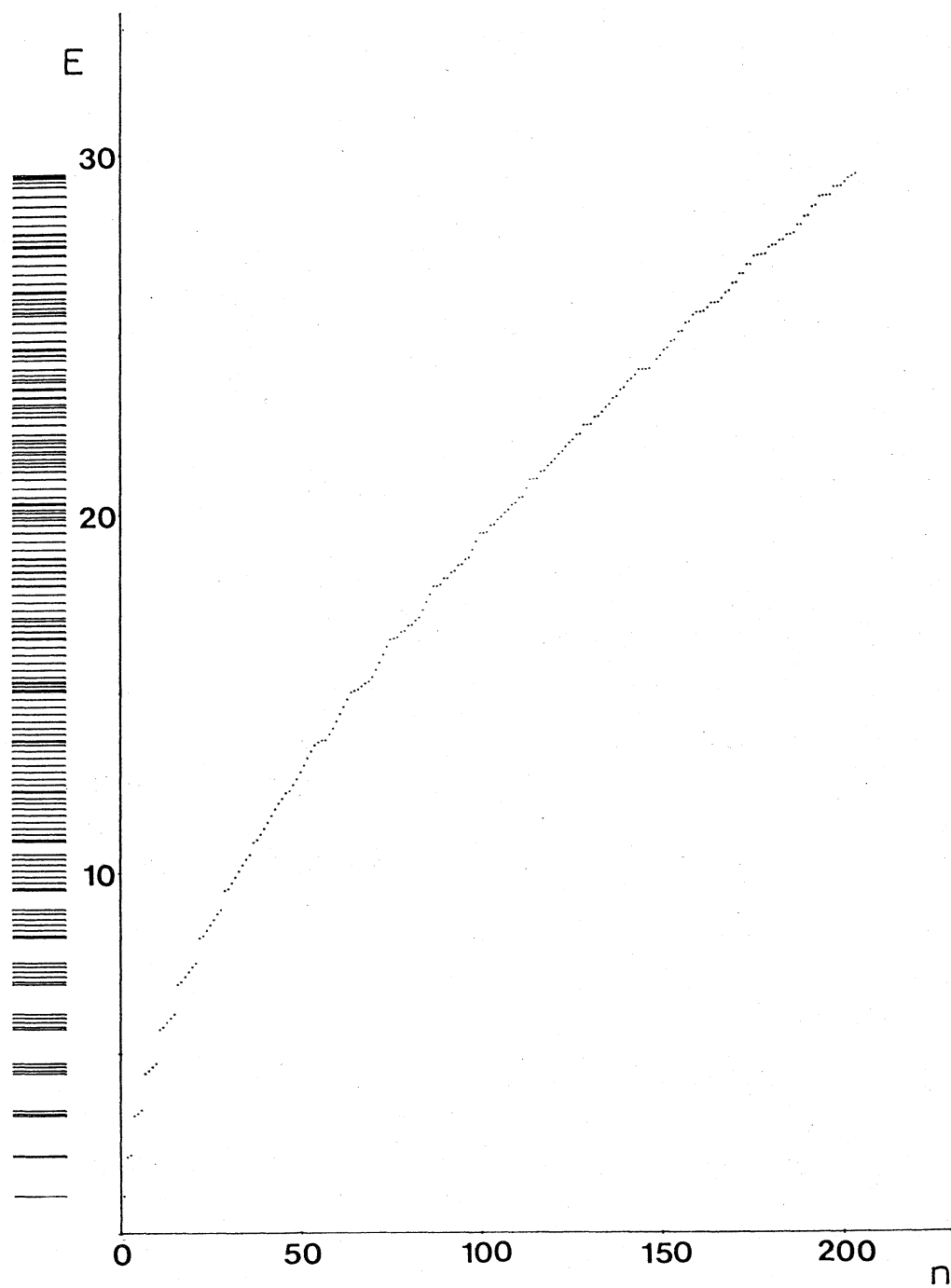


図7 非可積分の場合の工社単一位

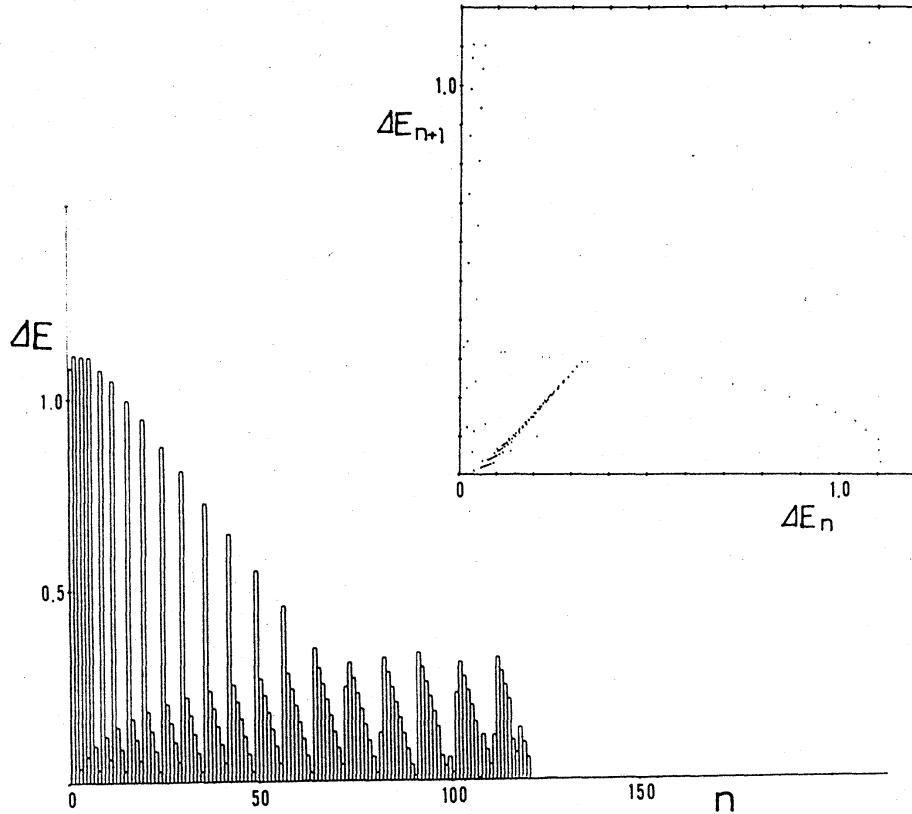


図8 準位の間隔 ΔE と準位の番号 n の関係、可積分系。
 中の図は つづく エネルギー間隔の相関。比較的規則的である。

つづく エネルギー間隔 ΔE_n と ΔE_{n+1} の間の関係をとりなすのが夫々の図の右上に画かれている。図8の可積分の場合にはこの図でも規則的であるが、図9の非可積分の場合には不規則な部分が多い。

可積分の場合に ΔE と n の関係が規則的になる理由を次に考えよう。分離系であれば分離した自由系に夫々の量

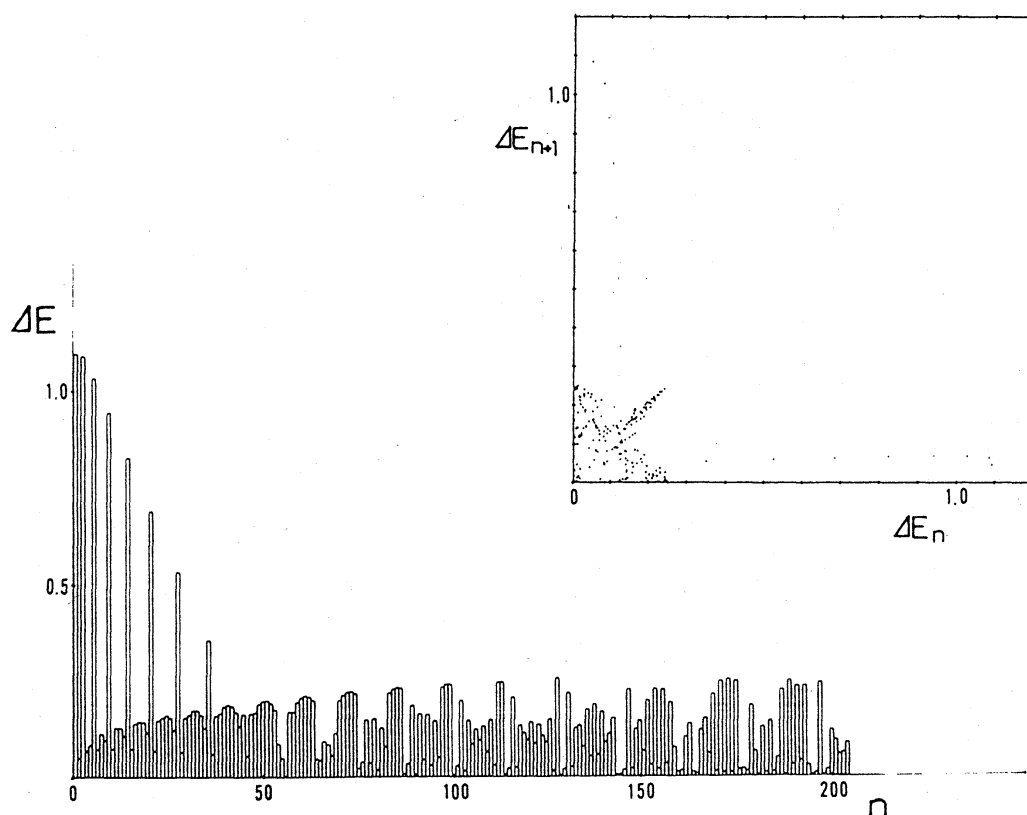


図9. 非可積分の場合、 ΔE と n の図表。中の図は
 ΔE_{n+1} と ΔE_n の相図。 n が大きくなる程、不規則
 になる。

量子数 n, m を与えればエネルギーが求まる。 n, m は 0 または 正の整数と
 する。 したがって n, m を一対として格子点 (n, m) の関数 $E(n, m)$
 とかくことができる。 分離出来る (2) の可積分系であれば
 ある条件下に T - T が存在し (Arnol'd の定理)、 2 種類
 の互いに reduce できない独立な閉曲線 C_1, C_2 を T - T
 の上につくり出すことができる。 Einstein-Brillouin-Keller-

Maslovの半古典的変量子化法を C_1, C_2 に対して適用できるから

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_i} p dq, \quad i=1, 2,$$

によつて

$$I_i = h(n_i + \alpha_i/4), \quad n_i: \text{integer}$$

量子数 n_i ($i=1, 2$) を求めることが出来る。 α_i は Maslovの指数で 0 または 2 の値をとる。何れの値かは位相空間の中のトラスのトポロジーに依存する。これは半古典的取組みによるものであるが、量子力学的にも同様なことが成立するであろう。つまり可積分系のエネルギー固有値は $E(n, m)$ と表わせられ、 n, m に同じくは量子数を増減し数とみなせるであろう。 n, m は格子点の上の点をとるのであるが、 $E(n, m)$ を連続変数 n, m の関数としてみると、 $E(n, m) = \text{一定の値}$ となる n, m 面上に等高線として表わされる。簡単のためこの等高線はすべて平行な直線であるとすると、格子点を通る等高線の図は図13に画いたようになる。原点に近い順に等高線をとると、そのエネルギーの順位に番号がつけられる。格子点の番号は、エネルギーの順にとる格子点である。これからわかることは、例えば 2, 4, 6, 8 の順位は規則的にならび、 2, 3, 4, 5, 6, 7 も同様である。こうして ΔE の規則性が生れんと考へることが出来る。等高線は

平行な直線としてが、
 曲線であつても、平行
 になくともその変化の
 仕方がスムーズであらば
 上の推論はそのまゝ成
 立するであらう。但し
 何れの場合にも等高線
 の形や傾きの僅かな差
 によつてとるべき格子
 点の大きさが変ることか
 あるから、 ΔE と n の形
 に僅かの不規則性が起
 ることがある。図13に
 およむた事情が図8
 に存在することは直ち
 に見られる。

非可積分の不規則に存在することの直接の証明はこれからの問
 題である。

§3 古典的軌道の Poincaré 277°

量子力学的挙動に對して、古典力学的にはどのようにな

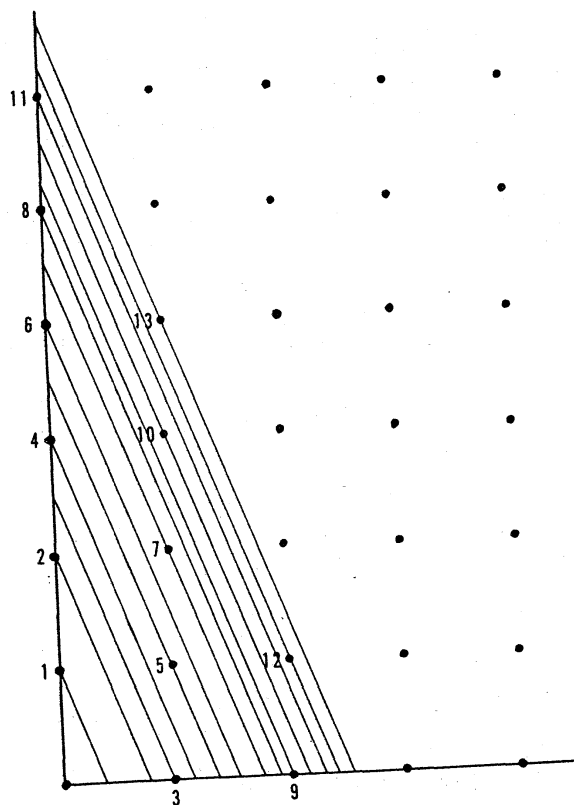


図13. 等高線が平行の
 とき、エネルギー準位に對應
 する格子点のとり順序E
 数字を示してある。

つていふことは興味がある。図14は非可積分系のポアンカレ写像である。ほとんどの軌道は規則的であつて(almost periodic), KAMトーラスに包まれていて, カオスは見られない。しかし

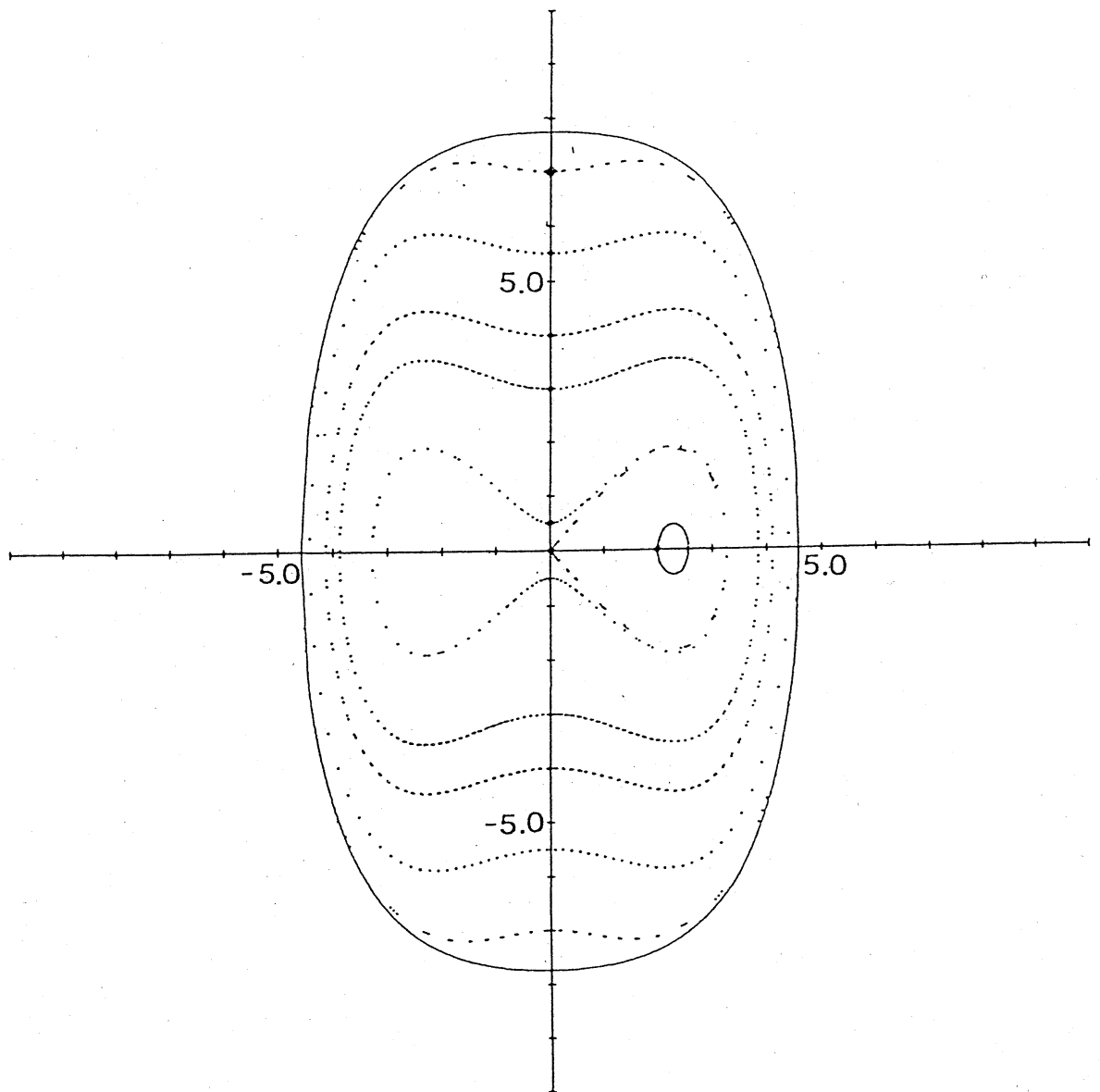


図14. 非可積分系 $a=b=1$, $c=2$ のポアンカレ写像,
縦軸は y , 横軸は x .

原点は双曲的不動点であり、そのまわりにカオスがある
(図14)。このほかにも図にはあらわれていないが、高い周

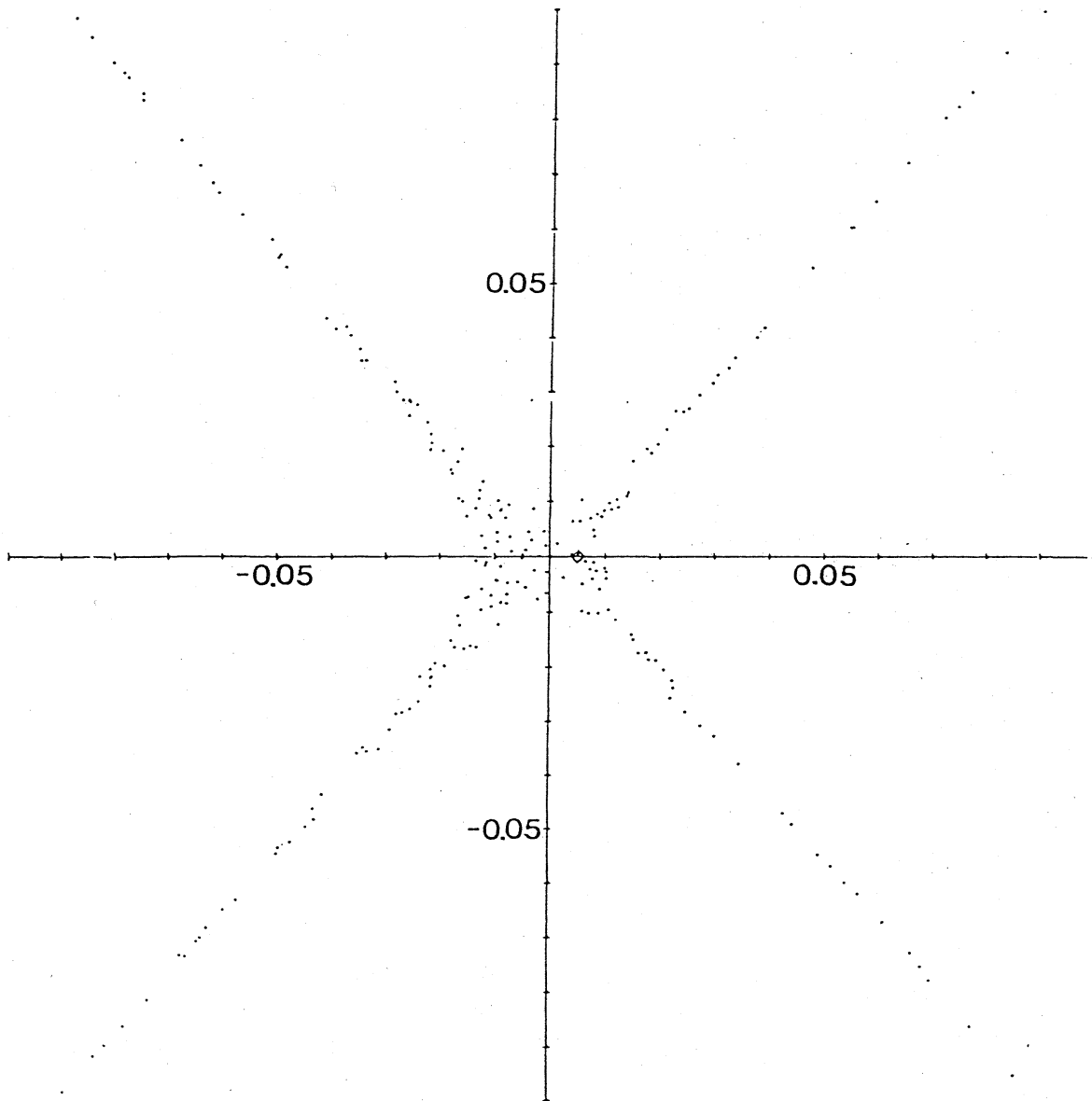


図15, 図14の原点のまわりを拡大したもの、原点は双
曲的不動点とそのまわりにカオスがある。

期の双曲的不動点があつて、そのまわりに軌力があつて、
 図14ではそれがほとんど同じに見える。このよき軌力もまた
 も量子的平均計算には同じに見えるよきに現われることは同
 9にみえ通りであつて、このことは興味のある事実である。
 図3,4,5に値してへた推測はこのことと関連して考へら
 べきことのように思ふ。この研究は石岡、小林、黒川ら
 と行つたものである。

文 献

1. 石岡 - 斎藤信彦: 物性研究 39 (1982), No. 2, B48
2. L. A. Bunimovich; *Funct. Anal. Appl.* 8 (1974), 254;
Commun. Math. Phys. 65 (1979) 295
3. S. W. McDonald and A. N. Kaufman: *Phy. Rev. Lett.* 42 (1979),
 1189
4. R. M. Stratt, N. C. Handy and W. H. Miller: *J. chem. Phys.*
71 (1979) 3311
5. T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey
 and S. S. M. Wong: *Revs. Mod. Phys.* 53 (1981) 385
6. M. V. Berry and M. Tabor: *Proc. Roy. Soc. London* A 356 (1979),
 375
7. A. Voros: *Lecture Note in Physics* 93 (1979) 326. M. V. Berry:
Phil. Trans. Roy. Soc. A 387 (1979) 237.
8. G. Casati, B. V. Chirikov, et al.: *Lecture Note in Phys.* 93 (1979) 334
9. N. Saito et al: *Proc. Nonequil. Stat. Phys. Prob. in Fusion Plasma* (1981), 101