

少数自由度量子カオス系の自発的散逸

池田 研介

〒525 草津市野路町1916
立命館大学理工学部物理教室

世話人に依頼された講演の題目は「自発的な散逸の発生と量子カオス」についてである。講演でも繰り返しお断りしたようにこのテーマは文学でいえば私小説に類するもので、きわめて私個人の嗜好が強く反映されたテーマであり、例えば本研究会での量子カオス関連トピックスに限って言えば首藤氏の講演のように、general audience の関心を引き付けるに足るテーマではない。要するに、人様に聞いていただくような代物ではないのである。本心をいうと自分一人で暖めていたいテーマであって人に聞かせたくない。にもかかわらず、「統計力学の展望」という大上段から振りかぶった本研究会でしゃべったのは、既にこの内容の主なものが数編の論文になっており、論文にした限りは公表されたのも同じだ、どうして喋らないか、お前は論文とは不特定多数にあてたラブレターだといってたじゃないかと世話人の某氏からせまられた時、断る理屈をもちあわせていなかったことがおもな理由である。

この講演で喋った内容の70%は

(1) 物性研究 66-1 (1996) 5

に掲載されている。論文としては

(2) K. Ikeda, *Annals of Physics* **227** (1993) 1-74

(3) K. S. Ikeda, "Self-organized dissipation in classically chaotic quantum systems with a small number of degrees of freedom" in *Computational Physics as a New Frontier in Condensed Matter Research* (The Physical Society of Japan, 1995) pp.277-290

(4) A. Shudo and K. S. Ikeda, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* No.116 (1994) 283-288

をご覧いただくことにして、なぜこういう問題に関心をもたざるをえなかったか、その私的背景を明らかにしておく方がむしろ意味があると思うので、以下それについて多少言及したい。

非可逆性がどうして量子論の枠組みからでてくるのか不思議で仕方がない。任意精度で初期条件を棲みわけさせることができる古典論と違って base-set が高々可算無限個の量子系をどう組み合わせても、コヒーレントな機械的エネルギーの一方向的な熱への転化という過程を実現するのは大変むつかしそうである。そこで、おこなわれるのが、非可算無限個の自由度を系にくっつけてやるか、系を無限大解放系にして境界条件をとりのぞき絶対連続スペクトルをもつようにしてやるようなモデリングである。前者の典型例が連続スペクトルをもつ輻射場あるいは harmonic bath と結合した原子のモデル (Wigner-Weisskopf model, Friedrich model, Caldeira-Leggett model など) であり、後者の代表例は散乱問題の共鳴状態である。両者はほぼ数学的に等価であることが知られている。このタイプのモデルの研究は、複素回転の方法などによって厳密な数学的基礎づけがなされつつあるが、このタイプのモデルが非可逆的な緩和過程を表しているとは主張するのは大変はばかられる。もっと分かりやすいモデルをかんがえてみよう。このモデルは水の表面に〈浮き〉を浮かせたモデルとほとんど等価である。浮きは単振動して表面波を励起して減衰する。浮きの運動の減衰にだけ着目すれば、この過程は確かに緩和過程に見える。しかし、放出されたエネルギーはきれいな 2D ベッセル波になって伝播し、適当な境界条件を設けて反射させれば、時間反転された波が浮きに向かって集中し浮きに振動を再励起できそうである。この様な過程は、スピンエコーの時間反転に類似しており、非可逆過程と呼ぶことはできない。放出されたエネルギーは熱に転化せず、コヒーレントな輻射に転化し、それを回収して機械の仕事に転化できないのは輻射が無限に広がった空間に分布したからにすぎない。

私事で恐縮であるが、このような緩和の状況をシミュレーションしようとして大学院時代にひどい目にあったことがある。たくさんの原子が協同的に光を輻射して超短時間で緩和する問題を考えていて、conventional な Born-Markov 近似による減衰理論がどうしても、信用できなくなって、ともかく Boson-bath と結合した系が本当に減衰をしめすか否かをこの目で確かめたいというやみくもな衝動にかられ、Wigner-Weisskopf model の直接シミュレーションをやってみてひどい目にあった。なにぶん 20 年以上も以前の話なので計算機のパワーも貧弱であったが、ともかく数個の 2 準位原子を 50 個くらいの調和振動子に結合させて、緩和の様子を見たら、あっという間に再帰

現象がおきて、減衰どころではない。仕方がないので Boson-bath を古典 Maxwell 場にもどして hybrid 古典シミュレーション（原子は量子論、輻射場は古典 Maxwell 場で扱う近似。半古典モデルと呼ぶこともあるが hybrid model と呼ぶべきであろう。）したが、結局境界にたまった輻射を手で除去しないと再帰現象が起きてしまい、これでは結局、散逸を手でいれてる反則技をつかったことになってしまう。その後、計算機の性能も上がり調和振動子 1000 個くらいで遊んでみたこともある。勿論、再帰時間は周波数間隔の逆数で長くはなるものの、それではというわけで、通常 bath 振動子の周波数分布は滑らかなにとるが、自然な系が滑らかなはずがないのでそれを崩すと、たちまち、再帰時間が短化してしまう。結局 harmonic bath に対する不信感は解消できなかった。量子系で散逸を反則なしに実現しようとするれば、超大自由度系を想定してハナから絶対連続スペクトルを仮定しない限り、満足のいく減衰さえも観察できないことを思い知らされた。いうまでもなく、このような系では、数学的な厳密証明以外に減衰を証明する方法はない。しかし上でものべたようにこのようなモデルでは bath に逃げたエネルギーは輻射には転化しているものの熱に転化したとは到底言えない。これらの経験から量子系では、古典系のように計算機で反則なしに散逸らしきものを記述するアルゴリズムが存在しないかも知れないと漠然と考えていた。

注：反則技の一例：たとえばある自由度の確率振幅取り除き heat-bath に対応する自由度を基底状態に”手”で戻すのはよく使われるテクニックだがこれは私によれば反則である。

それから 10 年以上たって、量子論でカオスはどう見えるのかという問題を考えはじめると当然のことながら散逸病が再発した。というより散逸の問題が頭にあったので量子カオスにハマったという方が正しい。シナイのビリヤードを例にだすまでもなく、古典カオス系では、ごくわずかな誤差が指数関数的に増幅される。1本の軌道上で相関の喪失もおきる。もしビリヤード的な原子分子が存在すればそいつはそれ自身で heat-bath の役割を果たしても不思議ではない。現実の多原子分子で当たり前観測されている幅をもった高励起下のスペクトルは（auto-ionization のようなイオン化過程や輻射場との結合による自然幅を無視できれば）まさにカオスによって発生した散逸によるのではないか？

しかし、問題は依然としてこのこる。量子論がもちこむ不確定性である。こいつがある限りは、量子系が対応する古典カオスをまねできるタイムスケールは $\log \hbar$ に比例する

極めて短いタイムスケールに限られてしまうといわれている。実際に、非可逆的な現象と思われる、カオスに起因する拡散現象（それは緩やかなタイムスケールのダイナミクスがカオスによる記憶喪失を伴う”ランダム力”によって駆動されるときに起きる。古典カオスに原因があるので時間反転を実現するには、考慮するタイムスケールに比例した桁の精度での制御が必要であり、非可逆過程とってよいだろう）の量子バージョンでは拡散は有限時間で停止する。この現象はアンダーソン局在と関係させて量子力学的には理解されているが、カオスに関係した古典力学の言葉ではいまだに理解はすすんでいない。いずれにせよ、カオスといえども、決して、量子世界では万能ではないのである。しかし足立聡、戸田幹人の両君と量子 kicked-rotor の擬拡散現象で遊んでいて、気がついたことがある。それは古典極限でカオス拡散を示す rotor 同士をくっつけると、結合が古典的に無視できるほど弱い（正確に言えば、 \hbar オーダー）強度で見事な拡散運動を回復するという現象であった。仲間と、冗談で（半ば本気で）「拡散係数の計算には古典系をつかうより量子系を使う方が正確だ。」などといいあっていたほどである。

このことをもう少し一般化して言えば、有限時間しかカオスをまねできない少数自由度量子カオス系（古典対応物がカオスを示す量子系をこう呼ぶ）といえども、他の少数自由度量子系（正確には可算無限個の基底で状態空間が表現されることが必要）と弱く接触するだけで完全なカオスとまではゆかないまでも擬カオス性を回復するのではないか？ それは散逸と言って良いような非可逆現象をもたらすのではないか？ このように量子カオス系にくっついてそれを大変貌させるような系をヘルパーとよんでおこう。結合 rotor 系では 1 つの rotor が他の rotor のヘルパーになっているわけである。拡散を示すとは限らないごく一般の量子カオス系でこの予想を試すために、少し工夫が必要になる。その為につぎのような数値実験のアルゴリズムを試してみることにした。まず、テストしたい量子系の状態空間をほんの少し拡張して仮想的な基底状態を 1 個だけつけくわえ、初期に系をこの基底状態に用意する。次に、エネルギーがたまった”光子源”と接触させてみる。この光子源は散逸的挙動が発生するか否かを検定するプローブであってヘルパーではない。実際接触強度は被テスト系の性質を変化させない程弱い強度で接触させるので、そいつが被テスト系を変質させる心配は全くない。理論的には、もし被テスト系に記憶喪失が起きておれば、光子源から被テスト系に一方的なエネルギーの流れが発生する。これが、〈散逸〉といえるかどうかはさておき、光子源からの一方的なエネルギー輸送が発生したことは確かである。幾つかの小さい量子カオス系（”小さい”とは状態空間の次元が小さい—少なくとも有限—であること

を意味する。)でこのテストを試みたところ一方的な流れは全く発生せず、エネルギーの吸収放出の再帰的挙動が観察されるに留まった。ところが、被テスト系である量子カオス系をヘルパーの自由度と結合させると、その結合強度が古典的に無視できるほど小さい (\hbar のオーダー) にも拘わらず相転移な現象が起きて、疑いなく一方向のエネルギー輸送が観察されたのである。このような現象はヘルパーとの結合強度があるしきい値をこすと相転移的に起こるので散逸転移 **dissipative transition** と呼んだ。ヘルパーは、できるだけ単純にしたいので線形振動子 (高励起された調和振動子と等価) にとられている。(文献 (1) (2))

被テスト系に適切な量子カオス系を採用すると、非常に長時間の数値実験が可能になる。スーパーコンピュータで可能な限り長時間の数値実験を試みたが、観測可能な時間の範囲内でこの輸送過程は定常的であり飽和の兆候は認められなかった。先に述べたように、私は量子系でエネルギーの緩和過程を数値実験で実現するのは殆ど諦めていたが、実に簡単な量子カオス系でこれほどまで完全な定方向のエネルギー移動が実現されたことは全くの驚きであった。当然以下2つの疑問がでてくるであろう。

- (A) どうしてこのような現象がおきるのか?
 (B) この現象は<熱>の発生を伴う散逸現象といえるのか?

(A)(B) はいずれも難問でまだ満足な答えがえられていないのが現状であるが文献 (1) — (4) では半古典論の立場からこのような現象に対する解釈をあたえようと試みている。

まず (A) に関して得られている知見をのべる。(この問題については講演では触れることができなかった。) プローブの光子源から輸送されるエネルギーは被テスト系の propagator の Fourier 積分で表されるので、もし propagator が適当に減衰し時間積分が有限ならば、定常なエネルギー輸送が実現されることが言える。ヘルパーを持たない被テスト系がエネルギーを定常吸収しないことはその propagator の時間発展が再帰的であることを意味する。有限個の base set で張られる状態空間しかもたない通常の量子カオス系では propagator が再帰的であるのは自明のことであるが、そもそも、半古典論の立場からいえば、量子カオス系でなぜ再帰現象がおきるのかというきわめて基本的問題さえまだ解明されていないのが現状である。時間発展を記述する propagator を構成する古典軌道の数は、時間が経過すると指数関数的に増大する。半古典 propagator

は各古典軌道に沿った {作用積分}/ \hbar を位相とする指数因子の和であらわされる。したがって、これらの膨大な数の軌道間になんらかの相関が存在しないかぎり再帰現象が発生できないことは容易に証明できる (文献 (1) (4))。まず、ヘルパーが存在する高次元量子カオス系でも半古典論は有効で、定常エネルギー輸送が、完全に再現できることを示すことができる (文献 (1) (2))。問題は半古典論によってこのような現象が説明できるかどうかである。再帰現象の一つの現れである局在問題に話を限定すれば、半古典解析によって、それが古典軌道に含まれる”局在 defect 構造”に由来するという証拠が見出されている (文献 (4))。ヘルパーが存在しなければ defect を含む軌道は defect の位置交換の組み合わせ分だけ指数関数的に過剰に存在するのでそれらは相関を持たない他の軌道からの寄与を凌駕して局在的相関をつくりだす。ところが、ヘルパーが存在するとそれは defect の位置の情報を読み出し、作用積分に defect 位置のランダムさを反映した付加項をつけ加えて、軌道間相関を消し去り、propagator の減衰=方向性エネルギー伝播の発生をもたらしたと解釈できる。(文献 (1) (3)) この解釈に従えば、ヘルパーは量子カオス系に内在する複雑さを読み出し顕在化する”産婆”の役割を果たしているだけで、それがヘルパーとよばれたゆえんである。

(B) に関して幾つかの知見と推測を述べる。ヘルパーは可算無限個の base set からなるが、これに周期境界条件をつけ有限数 (N と書く) にして閉じさせることができる。このようにすれば、被テスト系全体のエネルギー固有状態を構成できる。ヘルパーの存在不在にかかわらず、プローブからの定常エネルギー輸送がおきていなければ、固有状態は N の増大とともに収束する。ところが定常輸送がおきる場合、被テスト系の固有状態は全く収束しない。このことは散逸状態では固有関数が状態空間に完全に extend し有限次元空間からはみ出してしまったことを意味する。このような場合 $N \rightarrow \infty$ の極限でおそらく固有関数は解析性を失っているのではないか? この様相は古典力学の KAM 面の消滅と大変よく似ているように思われる。古典 KAM 面を複素領域に解析接続すると面には自然境界が存在する。自然境界が実面に到達するとカオスが実面に顕在化する。同様に (ヘルパーの存否にかかわらず) 通常の量子カオス系では波動関数の support を実面に限定すれば解析的であろう。しかし複素面に解析接続すれば、自然境界が存在して、そいつが実面に到達する現象が散逸転移ではないか? もしそうならば、定方向エネルギー伝播が実現した状況は、解析性を喪失し構成不可能な固有状態の励起が起きていることを意味する。系にたいする予備情報をもたずに、このような状態に散らばったエネルギーを回収できる”Maxwell の魔物”的存在は構成不可能であろう。このような時に、初めて、系に吸収されたエネルギーはまさに”熱”に転化した

と言えるのではないか？

注”系にたいする情報をもたず”と言ったのは、もし、被テスト系のハミルトニアンを知っておれば、時間反転することによってこのように複雑な状態に散ったエネルギーといえども回収できるからである。しかしこの場合でもハミルトニアンを構成する際に ϵ 程度のミス（正確に言えば、古典対応物が存在するミス）を犯すと時間反転不能になることが分かっている。

良く似た、エネルギーの定方向伝播現象は量子カオス系以外の量子系でもおこることが確認されている。よく知られているように、散乱体が不規則に分布した1D電子系ではアンダーソン局在が起きる。このような系に不純物を介して数個のヘルパーをつけてやると、局在がこわれて電子は拡散現象を示す（正確には正常拡散ではなく異常拡散が起き、分布関数は著しい時空的スケール特性を示す。ヘルパーの数が増大すると正常拡散に漸近する。（文献（5））同時に、もしヘルパーのどれかが基底状態にあればヘルパーへの方向性をもったエネルギー移動が起きる。この時ヘルパーでは温度が定義されたボルツマン分布（むしろ温度は時間とともに上昇する）が実現されていることが示されている。しかし、このような現象は規則電子系では決しておこらない。（文献（6））

不純物による散乱が起きている量子系では常識に従えば電気抵抗が発生するはずである。ところが

(i) 少なくとも1D量子系を正確にとりあつかうと、不純物によってアンダーソン局在がおき決して電気伝導はおこらない。

(ii) 一方、conventional theoryによると不純物によって散乱された電子は抵抗をうけ、失われた電子のエネルギーは、例えばウムクラップ過程によって”ひそかに”結晶の運動エネルギーに化け、あるいは格子の熱振動としてジュール熱と化しているとされる。

(i)(ii)は矛盾した主張のように見えるが、上に述べた事実は、この2つの主張が、エネルギーをはきだせるヘルパーのような動的自由度を少数個結合させるだけで、自然に解消することを意味している。言い換えれば、局在状態は、ごく少数の単純なダイナミクスに従う、動的自由度との弱い接触によって非可逆性を示すような散逸的散乱状態に転移できる”複雑さ”を潜在させているといってもよい。むしろ、Bloch状態ではこのような転移はおこらない。

(5) H. Yamada and K. S. Ikeda, "Dynamical delocalization in one-dimensional disordered systems with oscillatory perturbations" to be published from Phys. Rev. E.

(6) H. Yamada and K. S. Ikeda, Phys. Lett. **A222**, (1996) 76

ここで強調したかったことは、不確定性原理の存在のために、古典系に比べて一見非可逆性や散逸現象が起きにくいと思われる少数自由度の量子系でも、自由度の数が"ある程度"大きければ(自由度数が3ないし4が下限と推定されている(文献(1)(3))方向性のある定常的エネルギー輸送が実現される状況証拠がみいだされていることである。しかし、この様な輸送過程によって、吸収されたエネルギーが<熱>とみなすことができるほど、複雑な分布相に転化しているか否か、言い換えれば事前情報をもたぬ人がその状態を記述するために必要な情報量が十分大きいか否かに関して、まだ確定的な回答を得ていないのが現状である。いずれにせよ、<熱>とは人工的制御を含まない自然な過程によって仕事に転化できない最終的なエネルギー形態であるとするならば、<熱>概念と熱への転化過程である<散逸>という見方がどこまでミクロな量子的レベルにまでさかのぼれるのか、という問題は私にははっきりさせておきたい問題である。