

Title	3. 非線形力学系における量子古典遷移(第9回『非平衡系の統計物理』シンポジウム,研究会報告)
Author(s)	Habib, S.; Jacobs, K.; Mabuchi, H.; Ryne, R.; 鎮目, 浩輔; Sundaram, B.
Citation	物性研究 (2002), 77(5): 910-913
Issue Date	2002-02-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/97172
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

非線形力学系における量子古典遷移

(Quantum-classical transition in Nonlinear Dynamical system)

S.Habib¹, K.Jacobs¹, H.Mabuchi², R.Ryne¹, 鎮目浩輔³ and B.Sundaram⁴¹ Los Alamos Nat. Lab., ² California Inst. Tech., ³ 図書館情報大学, ⁴ CSI-CUNY

要旨 カオス系には量子古典対応がよい系と対応が破れる系がある。我々はその違いをもたらす原因として、後者では古典的な運動が作り出す確率分布 $f_c(x, p)$ が量子的運動では作れないものになるため、という仮説を立てた。そして Kicked rotor でこの仮説が成立つことを確認した。

1. Introduction とまとめ

量子古典対応は近年カオスおよび開いた量子系の観点から新たな興味を引いている。まずカオス系では Ehrenfest の定理が適用できない [1]。定理の前提である波束が小さいという条件がすぐ破れてしまうためである。そこで古典粒子一つの軌道と波束の運動を比較する代わりに、古典確率分布 $f_c(x, p, t)$ と、量子的な密度行列 ρ に同値な「量子分布」に相当する Wigner 関数

$$f_W(x, p, t) = \int \frac{dz}{2\pi\hbar} e^{ipz} \rho(x - \frac{z}{2}, x + \frac{z}{2}, t), \quad \rho(x, y, t) = \int dp e^{-i(x-y)/\hbar} f_W(\frac{x+y}{2}, p, t) \quad (1)$$

(二つ目の式は逆変換) の運動や、期待値などを比較することが提案された [1]。そして Duffing 振動子などで期待値の対応がよいことが確認されている [1, 2]。一方、期待値でも量子と古典で本質的に異なる系もある。典型は Kicked Rotor [3] で、 $\langle p^2 \rangle$ の運動は古典と量子で大きく異なる。このような違いの原因を調べるのが本研究の目的である。以下では Duffing 振動子のように量子古典対応が良い系を Type I、Kicked Rotor のように悪い系を Type II と呼ぶことにする。

量子古典対応に深く関連するのが、量子系と環境との相互作用が起こすデコヒーレンス [4]。量子古典対応を改善し、いわゆる量子古典遷移を引き起こす。量子古典遷移には 2 つの要素がある。ひとつは量子状態の可干渉性が消される、いわば状態の古典化 (デコヒーレンスの本来の意味)。もう一つはより強い、量子と古典の運動の差 (例えば各時刻での各種物理量の期待値の差) が小さくなる、いわば運動の古典化 [5] である。「状態の古典化」が起きると f_W は干渉に相当する負の部分が消え非負に近くなる。その度合は f_W の「負度」 $\int dx dp (f_W(x, p) - |f_W(x, p)|) / 2$ で定量的に表される。さらに「運動の古典化」が起きれば $f_W(x, p, t) \approx f_c(x, p, t)$ となる。量子と古典の大きな相違が干渉の有無であることを考えると直観的には「状態の古典化」に伴い「運動の古典化」が起きると考えられ、実際 Duffing 振動子ではそうなっている。しかし、我々は前々回のシンポジウムにおいて Kicked Rotor のデコヒーレンスの元での運動をシミュレートし、「状態の古典化」が起きる程度のデコヒーレンスがあっても「運動の古典化」は起きないことを示した。これは上の直観に反する結果であり、何か理由があると予想される。

そこで今回我々は次の仮説を建てた：Type II 系の古典的運動は「量子力学と強く矛盾」する。「量子力学と強く矛盾」とは、古典的な運動の結果系がとる状態 $f_c(x, p)$ は Wigner 関数にはなりえない、つまり $f_c(x, p)$ を Wigner 関数とするような物理的に正しい ($\text{Tr} \rho = 1$ かつ固有値が全て非負の) 密度行列は存在しないということである。これは $f_c(x, p)$ に逆変換 ((1) の第 2 式) を施し、その結果得られる「密度行列」 $\rho_c(x, y)$ が物理的に正しい密度行列になりえないことと同値である。我々はこの仮説の検証のため、Kicked rotor のノイズの元での古典的運動 (ノイズは量子系のデコヒーレンスに相当する) を数値的にシミュレートし、時間発展後の分布関数に逆変換を行って $\rho_c(x, y)$ を計算し、さらに固有値を求めてそれが非負性を強く破っていることを確認した。

以下の章で以上のことを具体的に述べる。第2章では用いた量子および古典力学の運動方程式と Kicked rotor について行った (前々回発表の) 計算結果を復習し、第3章で本研究の主要結果である、上の仮説とその Kicked rotor での検証について述べる。第4章は今後の課題である。

2. 運動方程式と Kicked rotor

量子および古典の運動方程式 (閉じた系の場合および開いた系の場合)

デコヒーレンスを受ける量子系の運動方程式で最も簡単なものは次の Master 方程式:

$$\partial f_W / \partial t = (L_c + L_q + L_d) f_W \quad (2)$$

環境からの影響は形式的にはノイズ (ランダム力) となる。ここで L_c は Liouville 項、 L_q は量子補正項 (Moyal bracket)、 L_d が環境からの影響を表す拡散項で、それぞれ次で与えられる:

$$L_c = -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p}, \quad L_q = \sum_{\lambda: \text{odd}} \frac{1}{\lambda!} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{\lambda-1} \frac{\partial^\lambda V}{\partial x^\lambda} \frac{\partial^\lambda}{\partial p^\lambda}, \quad L_d \equiv D \frac{\partial^2}{\partial p^2} \quad (3)$$

なお摩擦項は量子古典対応に重要でない為落とした。閉じた系での古典的分布関数の運動方程式では (2) の右辺が L_c のみになり、開いた古典系では $L_c + L_d$ 、閉じた量子系では $L_c + L_q$ になる。

Duffing 振動子で量子古典対応を調べた論文 [2] では初期条件を古典も量子も同じ gauss 分布にそろえこれらの方程式を数値的に解き、次の結果を得ている: 閉じた系の古典と量子の運動では x や p の期待値は差が小さく対応がよいが、 f_W は干渉による振動のため f_c と大きく異なる。一方デコヒーレンスを加えると期待値の対応はさらによく、しかも f_W が非負に近くなるとともに $f_W \approx f_c$ となる。つまり Duffing 振動子では「状態の古典化」とともにダイナミクスも古典化する。

Kicked rotor Kicked Rotor の Hamiltonian は次のとおり:

$$H = \frac{p^2}{2} + \kappa \cos x \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n) \quad (4)$$

ただしここでは ($x \in [0, 2\pi)$ ではなく) $x \in (-\infty, \infty)$ 。古典及び量子的運動は次のようになる [3]。古典力学では時刻 t の位置、運動量を x_t, p_t とすると $n < t < n+1$ の自由発展により $x_{n+1} = x_n + p_n$ 、 $t = n$ のキックの作用により $p_{n+0} = p_{n-0} + \kappa \sin(x_n)$ 。運動は $\kappa > 1$ で chaotic。本研究では $\kappa = 10$ とし位相空間の全域が chaos sea の場合を扱う。この時運動量 p の分布 $f(p)$ は近似的に拡散方程式 $\partial f(p)/\partial t = D_\kappa \partial^2 f(p)/\partial p^2$ に従う。但し「拡散定数」 D_κ はキックの強さ κ で決まり環境からのノイズとは無関係。特に運動量の分散はキックの回数に比例する ($\langle p^2 \rangle \approx D_\kappa t$)。

量子力学では $n < t < n+1$ で波動関数 $\psi(x)$ は自由粒子の Schrodinger 方程式に従い、 $t = n$ のキックにより $\psi(t = n+0, x) = \exp(-i\kappa \cos(x))\psi(t = n-0, x)$ 。運動の量子力学的な特徴は $\langle p^2 \rangle$ に現れる。"diffusive time" $\tau \sim D_\kappa/\hbar^2$ までは古典とほとんど同じだが、それ以降は $\langle p^2 \rangle$ の増加が止まり、古典とは完全に異なった振る舞いとなる (Quantum localization)。

開いた系の場合、まず古典力学では $n < t < n+1$ で自由拡散の Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial f_c(t, x, p)}{\partial t} = -p \frac{\partial f_c}{\partial x} + D_b \frac{\partial^2 f_c}{\partial p^2} \quad (5)$$

に従う。ここで D_b はノイズに起因する拡散定数。また $t = n$ でのキックにより

$$f_c(t = n+0, x, p) = f_c(t = n-0, x, p - \kappa \sin(x)) = \exp(-\kappa \sin x \partial/\partial p) f_c(t = n-0, x, p) \quad (6)$$

量子力学では $n < t < n + 1$ では自由な量子 Brown 運動なので古典と同じ (5) に従い、 $t = n$ のキックの作用は線形演算子 $F_z W(x, p) = W(x, p + z) - W(x, p - z)$ を用いて次の形に書ける：

$$f_W(t = n + 0, x, p) = \exp\left(-\frac{\kappa \sin x}{\hbar} F_{\hbar/2}\right) f_W(t = n - 0, x, p) \quad (7)$$

Kicked rotor の量子古典対応と Wigner 関数の負度

図 1 に Kicked rotor での p^2 の古典および量子期待値、および Wigner 関数の負度を示す。パラメータは $\kappa = 10 (D_\kappa = 31.2)$, $\hbar = 5$ 。図 1(a) で一番上のほぼ重なった 2 本が $D_b = 0$ 及び $D_b = 0.1$ における古典的運動での $\langle p^2 \rangle$ 。一番下の線が量子的 (ノイズ無) な場合、両者の中間的なものが量子的で $D_b = 0.1$ のノイズを加えたもの。図 1(b) は (a) の量子的な計算での Wigner 関数の負度。単調に減少するのがノイズ無、最も 0 に近い線がノイズ有 ($D_b = 0.1$) の場合。もう一本の線は見やすさのために $D_b = 0.1$ の線を縦方向に 10 倍にしたもの。図 1(a) から、ノイズ無の場合、前述の通り量子的な期待値と古典的な期待値は全く異なることが分かる。強いノイズを加えれば量子的な運動が古典的な運動に近づくが、ここでのノイズ ($D_b = 0.1$) では両者は異なっただけであり、特に増加率 ($\langle p^2 \rangle_{t=n+1} - \langle p^2 \rangle_{t=n}$) がはっきり違う。ところが図 1(b) から対応する Wigner 関数の負度を見るとほとんど非負になっていく。さらに時間が進めば負度は 0 に漸近するが、期待値の増加率は元のままの予想される。つまり「状態の古典化」が起きても「運動の古典化」は起きない。

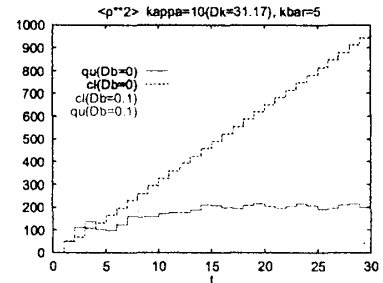


図 1(a) 古典的、量子的、およびノイズを加えた場合の $\langle p^2 \rangle$

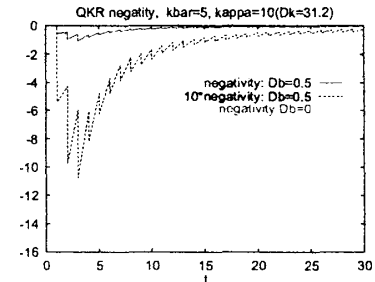


図 1(b) 量子的場合の Wigner 関数の負度 (ノイズ有と無の場合)

3. 古典的な運動の「量子力学との矛盾」

rho-positivity 仮説 前節の通り Type II である Kicked rotor では状態が古典化 (f_W が非負化) してもダイナミクスは古典化しない。一方 Type I の Duffing oscillator では状態の古典化とともにダイナミクスも古典化する。このような違いが生じる原因として、我々は前述のように次の仮説を立てた。それは Type II の古典的な運動は量子力学と「強く矛盾する」、という仮説である。つまり Type II の古典運動は量子的な状態とは「相容れない」状態 (確率分布) をもたらすため、量子的運動では追えないのではないかとすることである。「相容れない」とは：

「量子力学的に正しい密度行列では、 f_c と等しい f_W を作り出せない $\Leftrightarrow f_c$ を Wigner 関数とみなして逆変換で ρ_c を求めると、それは密度行列が物理的に要求される性質を満たさない。」

量子力学的に正しい密度行列 ρ が満たす条件は (1) $\text{Tr } \rho = 1$ と (2) $\rho \geq 0$ (全ての固有値が非負) であるが、(1) は f_c の正規化条件 ($\int f_c dx dp = 1$) から自動的に成立する。一方 (2) は f_c が満たす条件 ($f_c \geq 0$ と $\int f_c dx dp = 1$) だけでは保証されない。従ってこの条件 $\rho \geq 0$ が注目すべきものである。それを rho-positivity と呼ぶことにすると、上の仮説は次のように定式化される。

「rho-positivity 仮説」 Type II では rho-positivity が破れるのではないか？

もし $L_c + L_d$ が生成する古典的運動で $\rho \geq 0$ が強く破られ、 $L_c + L_d + L_q$ が生成する量子的運動では破られないのなら、それは量子補正項 L_q の働きが定量的に大きいことを意味する。即ち量子

補正が大きいということになり、系は Type II になる。従って rho-positivity の破れは少なくとも量子古典対応が破れ Type II になるための十分条件にはなる。しかし必要条件であるという理由はない。しかし Type II の系になるのに何か共通の原因があるとするなら、それはこの rho-positivity の破れではないか、というのが我々の仮説である。

Duffing 振動子と Kicked rotor における rho-positivity この rho-positivity 仮説を検証するため、Kicked rotor でチェックを行った。つまり Kicked rotor にノイズを加えた時の古典運動を数値的に解いて $t = 3$ での $f_c(x, p)$ を求め、それから対応する「密度行列」 ρ_c を計算し、その固有値を求めた。また比較のため Type I の Duffing Oscillator でも同様のことを行った (パラメータは $\hbar = 0.1, D = 0.025, t = 10$)。それらの結果が次の図 2。

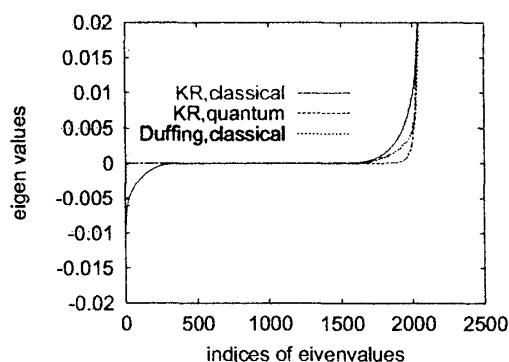


図 2 Duffing oscillator と Kicked rotor の古典分布から逆変換 (1) で求めた「密度行列」 ρ_c の固有値。固有値は小さい順から大きい順に並べている。縦軸が固有値の値。負の値を取っている実線が Kicked rotor での結果。残りの 2 本のうち右端で一番下にある点線は同じ Kicked rotor で量子的な運動の場合。もう一本の点線が Duffing oscillator の運動で作られた f_c から求めた ρ_c の固有値。

Kicked Rotor (Type II) では rho-positivity が大きく破れることがわかる。一方 Duffing Oscillator (Type I) では rho-positivity の破れは小さい。この結果は rho-positivity 仮説を支持するものである。

今後の課題 今回の計算により Kicked rotor では rho-positivity を破ることがわかった。さらに一般性を見るため他の Type II の系でも検証を行う必要がある。さらに大きな課題として、Hamiltonian の形から rho-positivity を破るかどうかを調べるための判定法を求めることがある。

謝辞 本研究の計算は Los Alamos National Laboratory ACL と NERSC の並列計算機で行われた。

参考文献

- [1] “Quantum Mechanics”, L.E.Ballentine, World Scientific (1998) L.E.Ballentine *et al.* Phys.Rev.A50, p.2854(1994)
- [2] S.Habib, K.Shizume and W.H.Zurek, Phys.Rev.Lett. 80, p.4361 (1998)
- [3] G.Casati, Chaos 6, 3(1996) pp.391-398, “Quantum Chaos”, H-J Stockmann, Cambridge 1999 “Chaos in Atomic Physics”, R.Blumel and W.P.Reinhardt, Cambridge 1997
- [4] 例えば”Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum theory”, D.Giulini *et al.*, Springer 1996, およびその文献リスト
- [5] W.H.Zurek and J.P.Paz, Phys. Rev. Lett. 72, p.2508 (1994)