Title	開いた系のquantum state diffusion法による量子化((1)量子カオスの基本概念と基礎理論,京大基研短期研究会「量子カオス：理論と実験の現状」,研究会報告)
Author(s)	大場, 一郎
Citation	物性研究 (2003), 80(1): 40-45
Issue Date	2003-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/97537
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

開いた系の quantum state diffusion 法による量子化

早稲田大学 理工学部　　大場 一郎 [1]

開いた系を量子化する一つの方法、quantum state diffusion 法を紹介し、その応用例を示す。

1 はじめに

開いた系を扱う方法の一つとして Lindblad 型のマスター方程式がよく知られている。これは演算子の期待値、分散等を記述する。しかし、問題にしている系の量子 - 古典対応を論じる際、古典的には配位空間内で時々刻々に変化していく事象が見て取れるのに対し、この方法でその量子対応を記述しようとするとそれは難い。ここでは、状態ベクトルをハミルトニアンによるだけでなく、確率過程的にヒルベルト空間内を時間発展させる quantum state diffusion 法、確率的シュレーディンガー方程式を紹介し、その応用例を示す。

2 quantum state diffusion 法

簡単のため 1 次元 Brown 運動を考えると、そのノイズ分布についての平均 M は $M\,x(t) = 0,\quad M\,x^2(t) = a^2 t$ であらわせるため、分散は $\Delta x(t) = a\sqrt{t}$ となることはよく知られている。これを数学的に記述する一つの方法に規格化された標準確率微分 $M\,dw = 0,\quad M\,(dw)^2 = dt$ を導入した Langevin-Ito 微分方程式

$$dx(t) = a\,dw(t)$$

によるものがある。ここで確率変数 x の任意関数 $f(x)$ の微分は dt の最低次で 'Leibniz' 公式

$$df = f'dx + \frac{1}{2}f''(dx)^2, \quad d(fg) = fdg + gdf + df\cdot dg$$

が成り立つことに注意しなければならない。この枠組と等価な Fokker-Planck 方程式は $\rho(x,t)$ を粒子のアンサンブルの確率分布関数とすると、ある特定なノイズを dw と決めたときにそれは $\rho(x,t+dt)_w = \rho(x-dx,t)_w = \rho(x,t)_w - a\rho'_w dw + \frac{1}{2}a^2\rho''_w(dw)^2$ となる。可能なノイズ全てについて平均 $\rho(x,t+dt) = M\,\rho(x-dx,t)_w = \rho(x,t) + \frac{1}{2}a^2\rho''dt$ を取ると、

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{1}{2}a^2\rho''$$

が得られる。ドリフト v が存在するときは、これらの方程式はそれぞれ

$$dx = vdt + a\,dw$$

[1] E-mail: ohba@waseda.jp

$$\frac{d\rho}{dt} = -v\rho' + \frac{1}{2}a^2\rho''$$

となることはよく知られている。

ここで、あとのためにこの枠組を複素な拡散過程に拡張しよう。独立な2つの標準確率微分, $M\,d\xi_{\mathrm{R}} = M\,d\xi_{\mathrm{I}} = 0, \quad M\,d\xi_{\mathrm{R}}d\xi_{\mathrm{I}} = 0$、$M\,(d\xi_{\mathrm{R}})^2 = M\,(d\xi_{\mathrm{I}})^2 = \frac{1}{2}dt$ から、複素ノイズ

$$d\xi = d\xi_{\mathrm{R}} + id\xi_{\mathrm{I}}$$

を導入すると

$$M\,d\xi = M\,(d\xi\,d\xi) = 0, \quad M\,(d\xi^* d\xi) = dt.$$

これらを用いれば複素ウィナー過程を記述する Langevin-Ito 確率微分方程式は

$$dz(t) = vdt + a\,d\xi$$

のように与えられる。この枠組を用いて Quantum State Diffusion、確率的シュレーディンガー方程式が記述される。これは環境と本質的な相互作用をしている量子系、つまり開いた系の量子化の一つの方法として 1984 年 N. Gisin によって導入された [1]。

状態 $|j(t)>$ の時間発展がシュレーディンガー方程式

$$|\dot{j}(t)> = -\frac{i}{\hbar}H|j(t)>$$

によって与えられているとき、密度演算子

$$\rho(t) = \sum_{i,j} c_{ij}|i(t)><j(t)|$$

はマスター方程式

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)]$$

を満たしている。1976 年、Lindblad[2] は開いた系の密度演算子が、物理的に許容される条件下で最も一般的には

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho(t)] + \sum (L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2}L_j^\dagger L_j \rho - \frac{1}{2}\rho L_j^\dagger L_j)$$

のような方程式を満たさなければならないことを示した。ここで L_j は Lindblad 演算子と呼ばれ、環境との相互作用を表わす。それがエルミート的なら測定過程、非エルミート的なら散逸過程に対応している。以下ではこの Lindblad 型マスター方程式に対応するシュレーディンガー方程式を求めるが、それが QSD である。

まず状態ベクトルが Ito 型の微分方程式

$$|d\psi> = |v> dt + |f> d\xi$$

を満たすとしよう。このベクトルによって定義される密度演算子は複素ノイズ ξ の汎関数なので、ノイズ分布について平均した演算子

$$\rho(t) = M\,(|\psi(t)><\psi(t)|)$$

を定義し、これが Lindblad マスター方程式を満たすことを要請すると、ドリフト項 $|v>$ と揺らぎの項 $|f>$ を一意的に決められる。揺らぎの項は $O(\sqrt{dt})$ なので 規格化 $\mathrm{Tr}\rho(t)=1$ を要請すると、$<\psi|f>=0$ でなければならない。さらに $|d\psi>$ と $|d\psi><d\psi|$ について平均をとると

$$M\,|d\psi>=|v>dt$$

$$M\left(|d\psi><d\psi|\right)=|f><f|dt$$

となることに注意して ρ の変化を評価すると、

$$d\rho=M\left(<|\psi><d\psi|+|d\psi><\psi|+|d\psi><d\psi|\right)$$

$$\dot{\rho}=|\psi><v|+|v><\psi|+|f><f|.$$

を得る。したがって $|f>$ の射影演算子は

$$\begin{aligned}
|f><f| &= \dot{\rho}-|\psi><v|-|v><\psi| \\
&= (1-|\psi><\psi|)\dot{\rho}(1-|\psi><\psi|)=(1-|\psi><\psi|)L\rho L^{\dagger}(1-|\psi><\psi|) \\
&= \{|(L-<L>)\psi>\}\{<(L-<L>)\psi|\}
\end{aligned}$$

と書けるので、

$$|f>=\exp(i\alpha)|(L-<L>)\psi>$$

を得るが、位相因子は $d\xi$ の再定義に繰り込めるので、$\alpha=0$ と選べる。ドリフト項は $\dot{\rho}|\psi>=|\psi><v|\psi>+|v>$ と $\mathrm{Re}<\psi|v>=\frac{1}{2}<\psi|\dot{\rho}|\psi>$ から

$$\begin{aligned}
|v> &= \dot{\rho}|\psi>-\frac{1}{2}<\psi|\dot{\rho}|\psi>|\psi>+i\eta(t)|\psi> \\
&= \left(-\frac{i}{\hbar}(H-<H>)+<L^{\dagger}>L-\frac{1}{2}L^{\dagger}L-\frac{1}{2}<L>^{\dagger}<L>+i\eta(t)\right)|\psi>
\end{aligned}$$

となるが、$i\eta(t)$ は $|\psi(t)>$ の位相を変えるだけなので 0 と置ける。この結果から、複数の Lindblad 演算子がある場合は複数のウィナー過程 $d\xi_j$ を導入して、QSD は

$$\begin{aligned}
|d\psi> &= -\frac{i}{\hbar}H|\psi>dt+\sum\left(<L_j^{\dagger}>L_j-\frac{1}{2}L_j^{\dagger}L_j-\frac{1}{2}<L_j>^{\dagger}<L_j>\right)|\psi>dt \\
&\quad +\sum\left(L_j-<L_j>\right)|\psi>d\xi_j
\end{aligned}$$

となる。

以下で、$H=0$ という簡単な開いた系での 1 個の Lindblad 演算子の作用を見てみよう。マスター方程式は

$$\dot{\rho}(t)=L\rho(t)L^{\dagger}-\frac{1}{2}L^{\dagger}L\rho(t)-\frac{1}{2}\rho(t)L^{\dagger}L$$

となる。簡単のため 2 準位系、演算子はエルミートな $L=c\sigma_z$ とすると、この解は

$$\rho(t)=\begin{pmatrix}\rho_{++}(0) & \rho_{+-}(0)\exp(-2c^2t) \\ \rho_{-+}(0)\exp(-2c^2t) & \rho_{--}(0)\end{pmatrix}$$

と、$t \to \infty$ で対角成分のみとなり、測定過程に対応していることが分かる。非エルミート演算子として $L = \sqrt{\Gamma}\sigma_-$ とすると、解は

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{++}(0)\exp(-\Gamma t) & \rho_{+-}(0)\exp(-\Gamma t/2) \\ \rho_{-+}(0)\exp(-\Gamma t/2) & 1+(\rho_{--}(0)-1)\exp(-\Gamma t) \end{pmatrix}$$

となり、$t \to \infty$ で下の状態 $\rho_{--} \to 1$ だけに散逸する。

QSD の枠組の特徴的なことの一つに、その時間発展が系の局在を記述していることである。例えば測定過程、$L^\dagger = L$ の場合、任意の物理量 $G^\dagger = G$ の期待値の変分は

$$\begin{aligned} d<G> &= 2\mathrm{Re}<\psi|G|d\psi> + <d\psi|G|d\psi> \\ &= 2\mathrm{Re}(\sigma(G,L)d\xi) \\ &= 2\sigma(G,L)d\xi_{\mathrm{R}} \\ \text{ただし、} \quad & \sigma(A,B) =<A^\dagger B> - <A^\dagger><B> \end{aligned}$$

で与えられる。特に $L = cG$ の場合、$d<G>= 2c\sigma^2(G)d\xi_{\mathrm{R}}$ だから、分散の変分は

$$\begin{aligned} \mathrm{M}d\sigma^2(G) &= \mathrm{M}(d<G^2> -2<G>d<G> -(d<G>)^2) \\ &= -2c^2(\sigma(G))^2 dt \\ \mathrm{M}\frac{d\sigma^2(G)}{dt} &= -2c^2(\sigma(G))^2 \end{aligned}$$

となる。この式から、分散の上限が評価でき、

$$\mathrm{M}\sigma^2(G)(t) \le 1/\left(\frac{1}{\mathrm{M}\sigma^2(G)(0)} + 2c^2 t\right)$$

という結果を得る。つまり分散は $1/\sqrt{t}$ に比例して小さくなっている。散逸過程の場合も同様に計算できるが、特に a を消滅演算子、$L = \sqrt{2\Gamma}a$、$G = a$ とすると、

$$\mathrm{M}\sigma^2(a)(t) = \mathrm{M}\sigma^2(a)(0)\exp(-4\Gamma t)$$

という結果を得て、いずれの場合にも QSD が局在化を記述していることが分かる。

3 Duffing 振動子—散逸系でのカオス[2]

ここでは QSD を用い、散逸的で古典的にカオスが現れる系として Duffing 振動子を取りあげ、適切な Lindblad 演算子を選び、その量子化、そして古典量子対応を論じてみよう。古典的運動方程式は

$$m\ddot{x} + 2\gamma m\dot{x} + \frac{m\omega_0^2}{l^2}x^3 - m\omega_0^2 x = gm\omega_0^2 l^2 \cos\omega t$$

であるが、これに対応するハミルトニアンは、勿論存在しない。そこで Lindblad 演算子として消滅演算子 $L = \sqrt{2\gamma}a$ を選び、QSD で現れる高次モーメントは量子効果だから、それらを無視する

[2] この仕事は太田幸宏 (早大) との共同研究である。

ことによって得られた方程式が上記運動方程式と一致するようなハミルトニアンを設定する。さらにプランク定数とこの系の典型的な作用量 $S = ml^2\omega_0$ との比 $\beta^2 = \hbar/S$ を導入、無次元化すると"ハミルトニアン"と Lindblad 演算子は

$$\begin{aligned} H_\beta &= \frac{1}{2}\hat{P}^2 + \frac{\beta^2}{4}\hat{Q}^4 - \frac{1}{2}\hat{Q}^2 + \frac{\Gamma}{2}(\hat{Q}\hat{P} + \hat{P}\hat{Q}) - \frac{g}{\beta}\cos(\Omega t)\hat{Q} \\ K &= \sqrt{\frac{\Gamma}{2}}(\hat{Q} + i\hat{P}) \end{aligned}$$

となる。これらを QSD 方程式に代入して得られた状態ベクトル $|\psi(t)>$ から物理量 $\hat{F}$ の時間発展が $<\hat{F}>(t) \equiv <\psi(t)|\hat{F}|\psi(t)>$ によって与えられる。ここで、β はその定義から小さい値なら古典領域、$\beta \sim O(1)$ なら量子領域に相当していることに注意しよう。

Duffing 振動子は古典的に $(\Gamma, g, \Omega) = (0.125, 0.3, 1.00)$ のパラメータに対して、$Q-P$ の Poincaré map 上に strange attractor が存在し、カオスが現れていることが知られている。QSD での対応する $<\hat{Q}> - <\hat{P}>$ の Poincaré map をとると、$\beta = 0.01$ では明確な strange attractor が存在するのに対し、$\beta = 1.0$ では全く消滅し、カオス的振る舞いが見えないことが知られている [3]。

QSD による詳細な分析を進める前に、状態ベクトルを変化させる 2 つの要因の性質に触れておく。充分に小さな時間間隔 $d\tau$ では $(d\tau)^{\frac{1}{2}}$ に比例する拡散項が $d\tau$ に比例するドリフト項より大きく貢献するが、それが逆転する限界の時間 τ_b を評価してみる。$t = 0$ での初期条件を $\mathrm{M}<Q> = \mathrm{M}<P> = \mathrm{M}<Q^3> = 0, \quad \mathrm{M}<\sigma^2(Q)> = \mathrm{M}<\sigma^2(P)> = \frac{1}{2}$ とし、$\Omega\tau \ll 1$ とすると、QSD は

$$\begin{aligned} d\mathrm{M}<Q> &\sim 0 \qquad \text{及び} \qquad d\mathrm{M}<Q^2> \sim \Gamma d\tau \\ d\mathrm{M}<P> &\sim \frac{g}{\beta} \qquad \text{及び} \qquad d\mathrm{M}<P^2> \sim \Gamma d\tau \end{aligned}$$

を与える。したがって拡散による増分は $\sqrt{\Gamma d\tau}$、ドリフトによる増分は $\frac{g}{\beta}d\tau$ となるため、求める限界時間は $\tau_b = \frac{\Gamma}{g^2}\beta^2$ で与えられるが、このモデルのパラメータでは $\tau_b = 1.39\beta^2$ となる。古典領域 $\beta \ll 1$ ではこの値は極めて小さくなり、ほとんどの時間スケールで量子効果がもたらす拡散項よりも、ハミルトニアンからのドリフト項が主要な寄与となっていることが分かる。

以下では先程の古典対応の破れが如何なる β の値で起こっているのかを判定するために、互いに接近した初期値から出発した 2 つの'軌跡'の時間発展を求め、'擬似 Lyapunov 数'を評価する。そのためには、それら 2 つの初期値間の位相空間内での'距離'は小さいけれども区別可能でなければならない。有効プランク cell のサイズはスケールした位相空間では交換関係 $[\hat{Q}, \hat{P}] = [\hat{x}, \hat{p}]/\beta^2 S = 1$ から $\Delta Q \cdot \Delta P = \frac{1}{2}$ となるが、元の空間では $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{1}{2}\hbar = \frac{1}{2}\beta^2 S$ となり、S を固定したとき、β^2 が有効プランク定数となり有効プランク cell の大きさを決めていることが分かる。互いに区別できる位相空間の 2 点は少なくとも有効プランク cell 外になければならない。

ここである時系列のノイズを選んだとき、初期状態 $|\psi_i(0)>$ に対する QSD 方程式の解を $|\psi_i(t)>$ と書く。$\bar{q}_i(\tau) = M(<\psi_i|\hat{Q}|\psi_i>)$、$\bar{p}_i(\tau) = M(<\psi_i|\hat{P}|\psi_i>)$ で'位相空間内の点'を定義すると、'軌跡'間の距離

$$\Delta(\tau) = \frac{1}{N}\sum\sqrt{(\bar{q}_1(\tau) - \bar{q}_2(\tau))^2 + (\bar{p}_1(\tau) - \bar{p}_2(\tau))^2}$$

が評価できる。和は時系列の組についてとり、その数が N である。初期値を $\epsilon \equiv \Delta(0)$ として $\epsilon = 0.01$, $\beta = 0.01$, 0.10, 0.4, 1.00 の組、$\beta = \epsilon = 0.10$, 0.40, 0.60, 1.00, 1.50 の組についてシミュレーションを行った。まず最初の組の結果から、$\beta = 0.01$ では $\Delta(\tau)$ が指数関数的に増加していることから古典領域の正の最大 Lyapunov 数が存在していることに対応していることが分かる。あとの3つは有効プランク cell 内から出発しているが、$\beta = 0.40$, 1.00 の場合は、それから出ることはなく、カオス的振る舞いは明らかに消滅している。$\beta = 0.10$ の場合は有効プランク cell の大きさに比べはるかに小さな距離から出発しても、その距離は cell の外へと次第に拡大し、古典的な振る舞いの名残りが見られる。2番目の組は $\beta \geq 0.10$ で，初期値は有効プランク cell 程度離した場合である。$\beta = \epsilon = 0.10$ 以外はすべて、初めは増大するものの、直ぐに減少に転じ、ある特定の時間 τ_{asympt} 以降は一定の値をとるようになる。この値 Δ_{asympt} は一つの軌道に関わっている波束の広がり D 程度であろう。D^2 は $M(\sigma(\hat{a}^\dagger, \hat{a})) \equiv M(<\hat{a}^\dagger\hat{a}> - <\hat{a}^\dagger><\hat{a}>)$ で表せる。ハミルトニアン $\hat{H} = 0$ として、QSD でその時間発展を評価すると、

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}M(\sigma(\hat{a}^\dagger, \hat{a})) &= -2\Gamma[M(\sigma(\hat{a}^\dagger, \hat{a})) + M(\sigma(\hat{a}^\dagger, \hat{a}))^2 + M(\sigma(\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger)\sigma(\hat{a}, \hat{a}))] \\ &\leq -2\Gamma M(\sigma(\hat{a}^\dagger, \hat{a})) - 2\Gamma(M(\sigma(\hat{a}^\dagger, \hat{a})))^2\end{aligned}$$

となる。τ_0 を $\Delta(\tau)$ が有効プランク cell 程度の大きさになる時間とし、右辺は常に負であることに注意して τ_0 から τ まで積分して、その値を $\Delta(\tau, \tau_0)$ とおくと上限値

$$\Delta(\tau, \tau_0) \leq 1/\sqrt{(1 + \frac{1}{\Delta^2(\tau_0, \tau_0)})e^{2\Gamma(\tau - \tau_0)} - 1}$$

を得る。各 β での漸近値 Δ_{asympt} から、$\Delta(\tau_{asympt}, \tau_0) = \Delta_{asympt}$ によって τ_{asympt} を求めると、深量子領域 ($\beta \sim O(1)$) では β の値によらず、ほぼ一定値を取ることがわかる。この評価は正にカオス現象における量子効果に対応しており、古典-量子の cross over が $\beta \sim 0.4$ 付近で生じていることを示している。

4 最後に

最近の実験的、理論的研究によって量子論の新たな世界が開かれつつある。いずれも環境と無視できない相互作用をしている系で、従来までの通常の量子力学の枠組みでは扱えない。QSD は観測過程や散逸過程を記述できるひとつの枠組みで、数値計算にも、数学的基礎づけにも適した形式となっており、量子カオスはその良い実験の場を提供している。

参考文献

[1] N. Gisin, Phys. Rev. Letters **52** (1984), 1652.

[2] G. Lindblad, Comm. Math. Phys. **48** (1976), 119.

[3] T. A. Brun, I. C. Percival and R. Schack, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 2077(1996).