量子多成分系における時間領域の半古典論[1]

東京都立大学 大学院理学研究科 物理学専攻　田中篤司

量子論では, 一般に, 複合的な系の時間発展によって, 全系を構成する部分同志が (量子的に) 絡み合っていきます. 本講演は, この絡み合いの過程の半古典論を通じた解析の報告です. 特に, 複合系として, 内部自由度と "外部" 自由度から成る量子多成分系 (例えば, spin を担う粒子や, 電子状態の励起を伴なう核の運動の模型です) を考察します. ここでは, 内部自由度の coherent な量子振動が外部自由度の伏見関数の干渉を誘発する一因であることを報告します. 講演では, この量子干渉の破壊と古典的な chaos 動力学の関係に言及しましたが, 紙幅の都合によりこの点は割愛します.

1　動機付け

いわゆる Copenhagen 解釈の枠内においては, 量子系の, 意味のある, 一貫した考察のためには, 問題の量子系を測定する古典系が必要です. このことは, 古典論が量子論の特別な極限として位置付けられていることと矛盾を孕みます. この矛盾を (何らかの意味で) 解決することが, いわゆる (量子系の) 観測の問題です. この問題に対して, その測定系をもまた量子系として記述する approach があります (例えば, 町田 - 並木理論, 環境理論 [1]). そこでは, 量子 -"古典" 結合系の unitary 時間発展を解析することになります. これのみの考察だけでは, 観測問題の最終的な解を直接提供しませんが, 重要な洞察を与えることは確かです. それは, 測定系 (その "環境" を含めて) の (何らかの意味での)"複雑さ" が, 被測定系の "波束の収縮" をもたらすために重要である. ということです. ここで言及される複雑さとは, 例えば, 町田 - 並木理論における系の熱力学的な素性であったり, 環境理論における系の自由度の高さ ($\simeq$ 動力学に関与する Hilbert 空間の "次元" の大きさ (の対数)) です. 特に, これらの議論で着目されているのは, 測定系の構成の複雑さでした. これに対して, 測定系の動力学の複雑さに焦点を当てた議論を展開することは可能でしょうか? これが, 本研究のひとつの動機付けです[2].

1.1　量子 -"古典" 結合系としての量子多成分系

量子多成分系は, 二つの部分系からなります. 便宜上, これらを *Internal Degrees of Freedom* (IDF: 内部自由度) と *External Degrees of Freedom* (EDF: 外部自由度)[3] と呼ぶことにします. 例えば, spin を持つ電子や, 断熱 (透熱) 基底で記述される分子がその代表例です. 後者は, IDF と EDF の時

[1]京大基研短期研究会「量子力学とカオス: 基礎的問題からナノサイエンスまで」(2003 年 11 月 12 日 –14 日), 2003 年 11 月 13 日の口頭発表 *A semiclassical approach to time evolutions of multicomponent systems* より.

[2]もちろん, 系が熱力学的な素性を獲得するために, 系の動力学の複雑さを利用している場合もあります. ただし, 町田 - 並木理論は, 動力学の複雑さを直接問う議論にはなっていません.

[3]本来は外部ではないので紛らわしい名前かもしれません. 相対的に見て外部. と理解してください.

間 scale の分離をしばしば伴なう意味で, 量子 -“古典” 結合系の原型とみなせます. 実際, 量子多成分系の解析では, 擬似的な “波束の収縮” が議論されたり, 仮定されています. 例として, 水和電子の緩和 [2] を挙げます. 水と電子の特徴的な時間 scale が分離することから, 断熱的な記述が正当化されます. すなわち, “水分子” の配置は断熱 potential 面を定め, 第零近似として, “電子” は特定の断熱状態に留まります[4]. 配位空間中に疎に存在する avoided crossings の近辺では非断熱遷移が盛んになるため, 動力学は水分子と電子の量子的な絡み合いを誘発します. これの数値計算の労力の軽減のため, surface hopping と呼ばれる, 現象論的な波束の収束がしばしば使われます. これは非断熱遷移を古典的な確率過程で近似する手法であり, “古典系” の量子干渉性が問題にならない物理量の計算では, 良い結果を出すことが知られています [4].

1.2　量子多成分系の “量子古典対応” と “複雑な” 動力学

ここでは, 量子多成分系の複雑な動力学と干渉破壊, つまり, (擬似的な) 波束の収縮, の関係を議論の射程内に置くことを試みます. このため, まず, “複雑な量子動力学” とは何かを考える必要があります. これは量子 chaos の基本問題ですが, 議論の詳細は他に委ね [5], ここでは, 単に古典対応物がカオスを持つ系が半古典的な領域で複雑な量子動力学を持つとする立場を取ります[5]. そこで, 量子多成分系の古典対応物とは何かを考察する必要があります. この問題は非自明であり, 幾つかの可能性があります.

1. 断熱 (または透熱) 面での古典動力学
2. 断熱 (または透熱) 面での古典動力学に surface hopping を加味する [7].
3. Pechukas による, EDF の有効作用の変分原理の誘導する軌道理論 [8].

可能性 1 は矛盾を起こし得るので (例えば, 透熱面が近可積分で, かつ, 断熱面が chaotic な例は容易に構成できます), 考察の出発点としては曖昧です. 可能性 2 は, 発見論的な解析では有用ですが, hopping の導入方法に曖昧さがあります. 一方, EDF と IDF の分割 [3] を一旦設定してしまえば, 可能性 3 は, 議論の明確な出発点になります. 以下, これを考察します.

2　二準位線形透熱面を持つ重い粒子 — IDF の量子振動の誘発する EDF の量子干渉

Pechukas の有効作用を用いた半古典論は, 形式的には明快です. 出発点は, Feynman 核 K です. これを経路積分表示し, IDF の経路積分のみを遂行したものを考えます:

$$K = \int \mathcal{D}[q(\cdot)] \exp(iS_0[q(\cdot)]/\hbar) Z[q(\cdot)] \tag{1}$$

ここで, q は EDF を記述する力学変数, $S_0[\cdot]$ は IDF との結合が無い場合の EDF の古典作用, $Z[\cdot]$ は “影響汎関数” [9] [6]で, IDF の情報が integrate out されているものです. (1) から, EDF の有効作

[4]断熱的な記述においては, “水分子” や “電子” が指し示す対象は, 通例素朴に想定されるものと異なる場合があります [3].

[5]これは高塚氏の講演 [6] とは異なる立場です

[6]$Z[\cdot]$ は Feynman-Vernon のものと異なり, “片道のみ” の時間発展に対するものです.

用を定義します:

$$S[q(\cdot)] \equiv S_0[q(\cdot)] + (\hbar/i)\ln Z[q(\cdot)] \tag{2}$$

これが Pechukas の導入した有効作用です. 経路積分の定常位相評価から, 対応する古典論が自動的に誘導されます. しかしながら, Pechukas の方法には難点があります. それは, 有効作用 (2) の極値条件が誘導する古典論は, 時間について非局所的な微積分方程式であることです. 非局所性の起因は IDF を "integrate out" したことにあります. このため, この微積分方程式のもたらす物理的描像はほとんど理解されていません.

そこで, 以下では, 単純な場合に関して, Pechukas の運動方程式の物理的描像を確立することの一つの試みについて報告します [10]. これを遂行するにあたって, 最初から水和電子の緩和のような, 複雑な構成を取る系を解析することは, 何が近似の artifact であるかが不明確であるため, 避けるべきです. むしろ, ここでは, 量子古典系の問題の核心を保持する, 最も簡素な系を解析することにします: これは, IDF として二準位系を持つ (無限に) 重い粒子です. これを記述する Hamiltonian は

$$\hat{H} = \hbar \begin{bmatrix} -F\hat{q} & J \\ J & +F\hat{q} \end{bmatrix} \tag{3}$$

ここで, $\hat{q}$ は EDF の位置作用素, F は線形な "透熱 potential 面" の傾き, J は透熱状態間の遷移行列要素. IDF の持つ時間 scale を $\hbar$ の値と独立にするため, $\hat{H}$ に因子 $\hbar$ が付いてます. この Hamiltonian は, 量子写像系の "kick part" と読むことができます. このため, Pechukas の有効作用は汎関数ではなく, むしろ, 保存量 q の関数 $S(q)$ と読めます. これは, 有効 potential $-S(q)$ と読んで差し支えありません. これは一般に振動関数の対数となります.

始状態において IDF が透熱状態の一方にあり, かつ, J が充分小さい場合, EDF の運動は透熱面 $\pm Jq$ に従います. しかし, IDF が片方の透熱状態に局在しなくなると, EDF の運動は, 透熱面を利用した単純な量子古典対応を失ないます. いわば, EDF は透熱面の "線形重ねあわせを感じている" ためです.

この状況に対する, Pechukas の半古典解析を遂行しました. 特に, EDF の相空間上の動力学を明確に観察するため, Feynman 核の EDF の境界条件として coherent 状態を採用しました. このため, Klauder の半古典 coherent 状態経路積分法と, ここで現われてくる Stokes 現象の処理のため, Adachi の処方箋を用いました [11].

まず, IDF の始状態と終状態が同一の透熱状態である場合について述べます. このとき期待されることは, 基本的に, EDF は透熱面からの影響で運動することです. 確かに, coherent state の確率振幅の peak 近傍では, この様子が現れます. さらに, ここでは, 古典解が唯一なので, 有効的に Gauss 波束動力学 [12] が成立していると言えます. このとき, 透熱面からの補正を持つ有効 potentail $-S(q)$ の下での EDF の運動という描像は自然で単純です. 一方, 確率振幅の裾では, (伏見表示における) 量子干渉現象が発現します. すなわち, 半古典核に寄与する軌道が複数存在して, Gauss 波束動力学が破綻します. 原因は, Pechukas の有効作用の対数的発散です. この作用の発散は, 影響汎関数に立ち戻って考えれば IDF の量子振動に由来するものと理解できます: (EDF の配位空間中の) 対数発散点において, IDF の "条件付き" 確率振幅である影響汎関数の値は零です. これは次のことを意味しま

す: EDF の実古典軌道近辺では透熱遷移が弱く破壊的干渉を引き起こすまでに至りませんでしたが, 一方, 複素領域の深部では, 透熱遷移が頻繁に起きます. 有効作用の対数発散が起きるものの, Stokes 現象を正しく処理することで, 定性的に正しい Feynman 核の半古典論評価を得ることはできます. 対数発散点の周囲に一対の焦点が現われ, Stokes 線は焦点と対数発散点を結びます. この模型のように写像 1step の時間発展の下で, 量子多成分系の半古典論に顕著なことは, これら対数発散点, 焦点および Stokes 線の配置です.

つぎに, IDF の始状態と終状態が異なる透熱状態である場合について述べます. このとき, 透熱遷移によって確率振幅は終状態へと漏れていき, 完全に非古典的な過程のはずです. 数値実験では, 短時間ではこの漏れた波束は干渉を起こさず, Feynman 核へ寄与する古典軌道は唯一であり, Gauss 波束動力学的な挙動を示しました.

最後に, IDE の始状態と終状態が一般の場合について述べます. 以上の場合とは対照的に, 短時間領域ですら, Gauss 波束動力学的とは掛け離れた挙動が見いだしました. このとき, Gauss 波束の peak に相当するものが無いため, 通例の半古典 coherent state 経路積分法では比較的容易であった, Stokes 現象の処理が著しく困難となります. この過程の解析は将来の課題とします.

参考文献

[1] B. d'Espagnat, Reality and the Physicist (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1989) とその引用文献参照.

[2] F. Webster and P.J. Rossky and R.A. Friesner, Com. Phys. Com. **63** (1991), 494.

[3] A. Tanaka, Suppl. C to J. Phys. Soc. Japan **72** (2003), 54.

[4] J.C. Tully and R.K. Preston, J. Chem. Phys. **55** (1971), 562.

[5] 本研究会 (量子カオス: 基礎的問題からナノサイエンスまで) の報告集, およびその引用文献参照.

[6] H. Higuchi and K. Takatsuka, Phys. Rev. E. **66** (2002), 035203(R).

[7] H. Frisk and T. Ghur, Ann. Phys. (N.Y.) **221** (1993), 229.

[8] P. Pechukas, Phys. Rev. **181** (1969), 174.

[9] R.P. Feynman and F.L. Vernon, Ann. Phys. **24** (1963), 118.

[10] A. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **80** (1998), 1414.

[11] S. Adachi, Ann. Phys. **195** (1989), 45 およびその引用文献参照.

[12] A. Tanaka, Prog. Theor. Phys. **110** (2003), 407 およびその引用文献参照.