

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必ずしも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ゝにする。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わつて本モリリ二つを生成す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れば

カオスの飽域が広がることになる。不動点もパラメーター(エネルギー)を変えるときによって分岐を繰り返し、精肉のあふれ双曲的不動点が逐次あり、その数を増す。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りかゝる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、古典的取扱いでカオスになるといへば量子力学でもカオスになるといえるであろうこと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て、独立な一自由度系に帰着できる場合は、小つきの教科書が取扱う例題である。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。境界条件が変わったり(矩形から不規則な境界へ)、直接粒子間に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ると、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い(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、みだれがカオスに相当すると考えた人もある。

図1はスタジアム(矩形の両側に半円をつけたもの、この中の古典的な軌道内を見

ては、Bunimovich²⁾は K-系(あること

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ので、運動軌道のうち反対称のもの(図

面および x, y 軸上で 0) を更にとある。図からわかるように節線は交叉しないが一様に、不規則に分布している。これは McDonald & Kaufman の結果³⁾である。

非球形な力のポテンシャルをもつ系について、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えたりもするので、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にも規則的で、低いときにも不規則な^{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によって KAM トーラスの上にも古典的軌道は規則的であり、

カオス状態の軌道もある。このことは量子力学的には、エネルギー

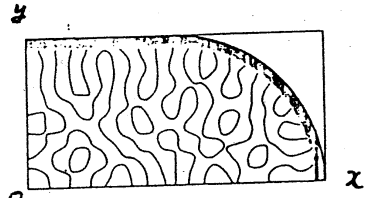
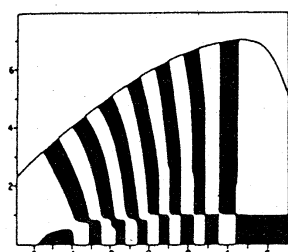
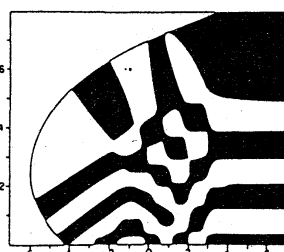


図1. スタジアム中の運動軌道の節線 (1/4 対称がわかる)

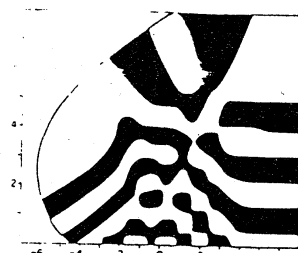
Stratt, Handy, and Miller: Implications of classical ergodicity



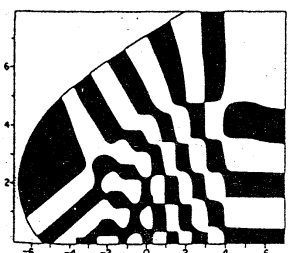
(a) 98th



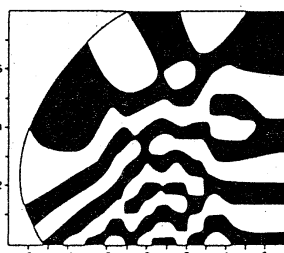
(a) 76th



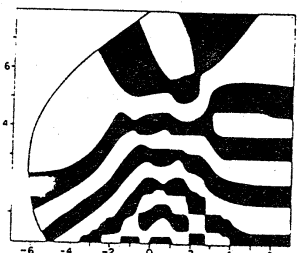
(a) 87th



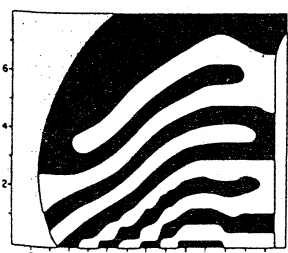
(b) 104th



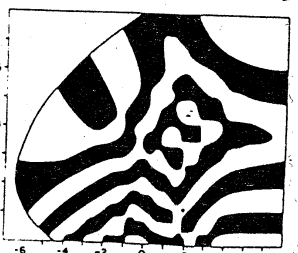
(b) 121th



(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

キーが縮重していて、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対応していると考えられるからかも知れない(これは推測であるが)。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しにくいことがある。

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

S は実時間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とるのが通常である。この図表 $P(S)$ は、原子核の中の多体内問題のエネルギー準位をしらべると Wigner よりよく考えられるため、紙には 3×4 の 1×1 の固有値問題として提えた。⁵⁾ 系が分離系であれば、多くの縮退がありけりとも、非可積分系であれば準位は互いに反発して避ける場合、縮退はとけてゐる。前者の場合には $S=0$ のところに有限の値をもつが、後者では $P(S)$ は $S=0$ で 0 となり S の増大と共に山を造り、 S が大きくなると消失するだろう。

Wigner は準位内の反発にある位置をあらわす $P(S)$ が

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

という式を導いた。これを Wigner 分布という。一方、反発がなければ

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

である。Stadium の中の自由粒子に対して前述の McDonald & Kaufmann はエネルギー準位の間隔が Wigner 型の山を造るためであることを示した。 $S \rightarrow 0$ で $P(S) \rightarrow 0$ になることは Berry & Tabor の研究もある。⁶⁾

なお、量子力学の時間発展と同じく、古典力学軌道に対して Wigner 分布図表 (1) とはちがう) をつかって議

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 $t+T$ への写像をつくることの結果として利用した結果もある.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ることが出来る。ここに取り上げる系は ハミルトン = p 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, ある方向で $\frac{1}{2}k$ においてそれを越えたと $-\infty$ 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無いが, 量子力学では, トンネリング効果があり, 定常状態は存在しない。

近似的にエネルギー単位は決められ、エネルギー
 単位の高いところでは、トンネル効果による誤差が
 さげられない。従ってここでは(4)で与えられるポ
 テンシャルを用いる場合にはのみ限りにとにする。この場
 合は $a=b=c=1$ あるいは $a=b=1, c=3$ 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 $a=b=1, c=2$ の場合をとりしることにする。

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 $\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$ を有限次元で切って
 対角化する方法である。 $\alpha = 0.088$ ととり、 $\hbar/m=1$ とし
 てある。われわれは 990 の基底関数をとった場合と 630
 個をとった場合とを比較した。そ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えた。この結果の
 精確さ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ものはエネルギー単位の間
 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。

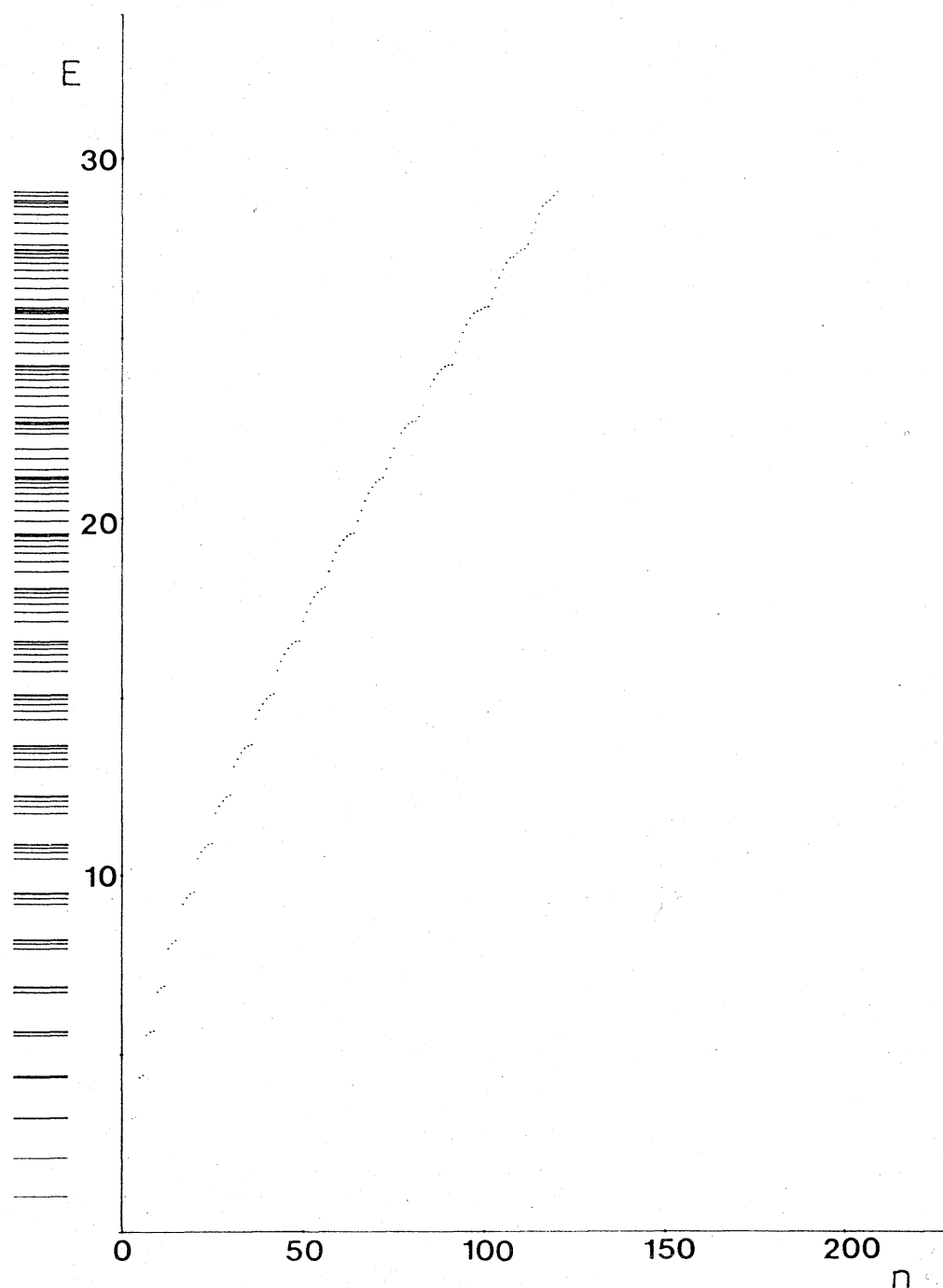


図 6. 可積分の場合, E と n の関係
横軸 n は準位の番号

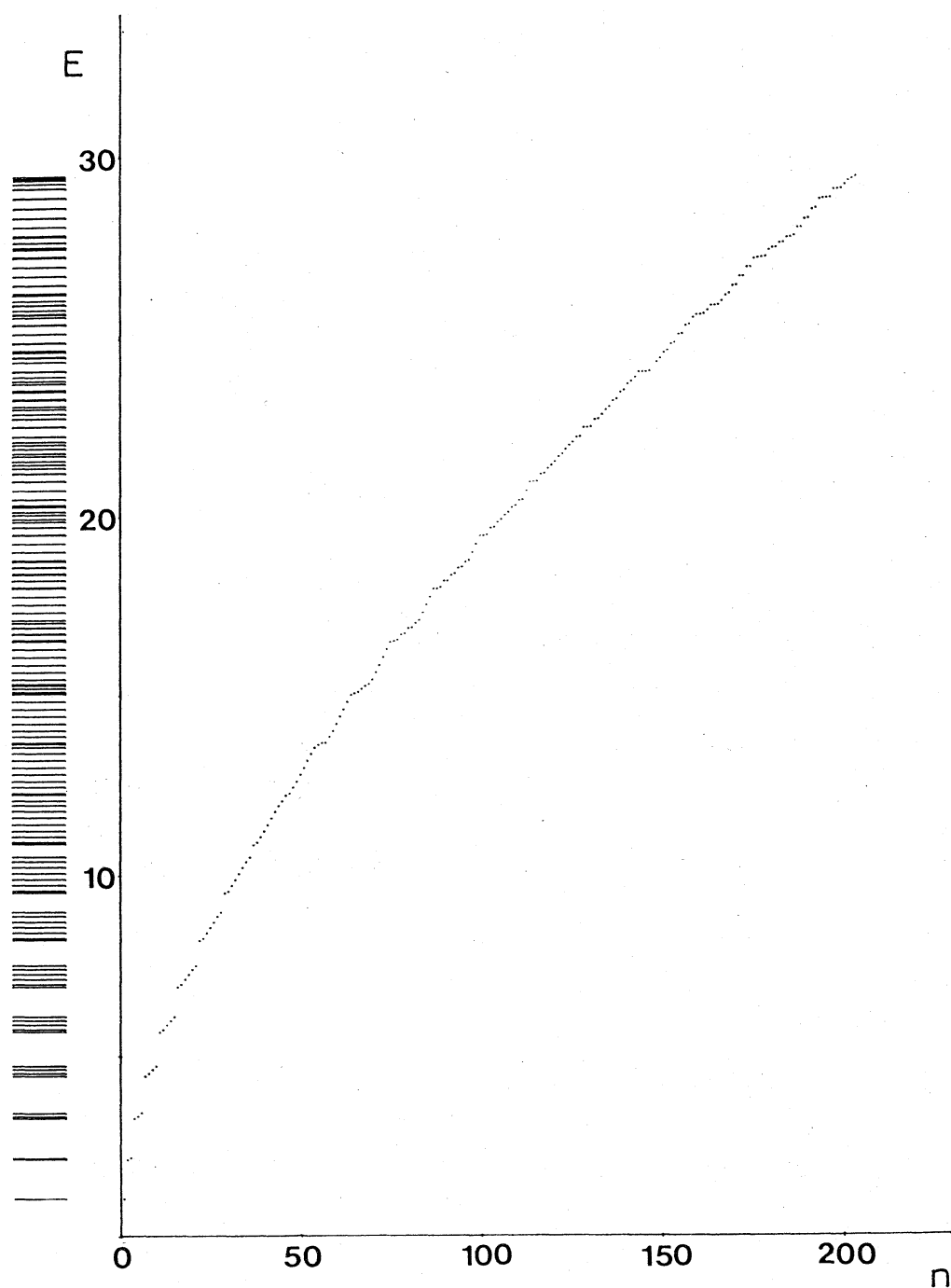


図 7 非可積分の場合の E と n の関係

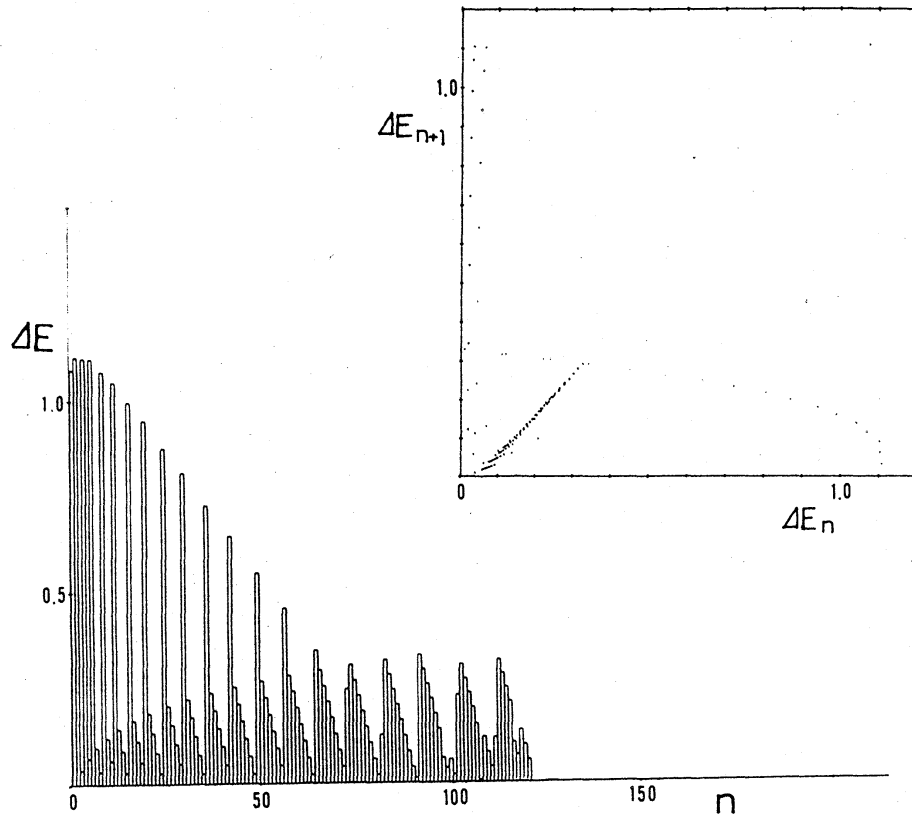


図8 準位の間隔 ΔE と準位の番号 n の関係、可積分系。
 中の図は つづく エネルギー間隔の相対値。比較的規則
 的である。

つづく エネルギー間隔 ΔE_n と ΔE_{n+1} の間の関係を とったこ
 のが 上の図の 右上に 描かれている。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
 考えてみよう。分離系であれば分離した自由系に夫々量

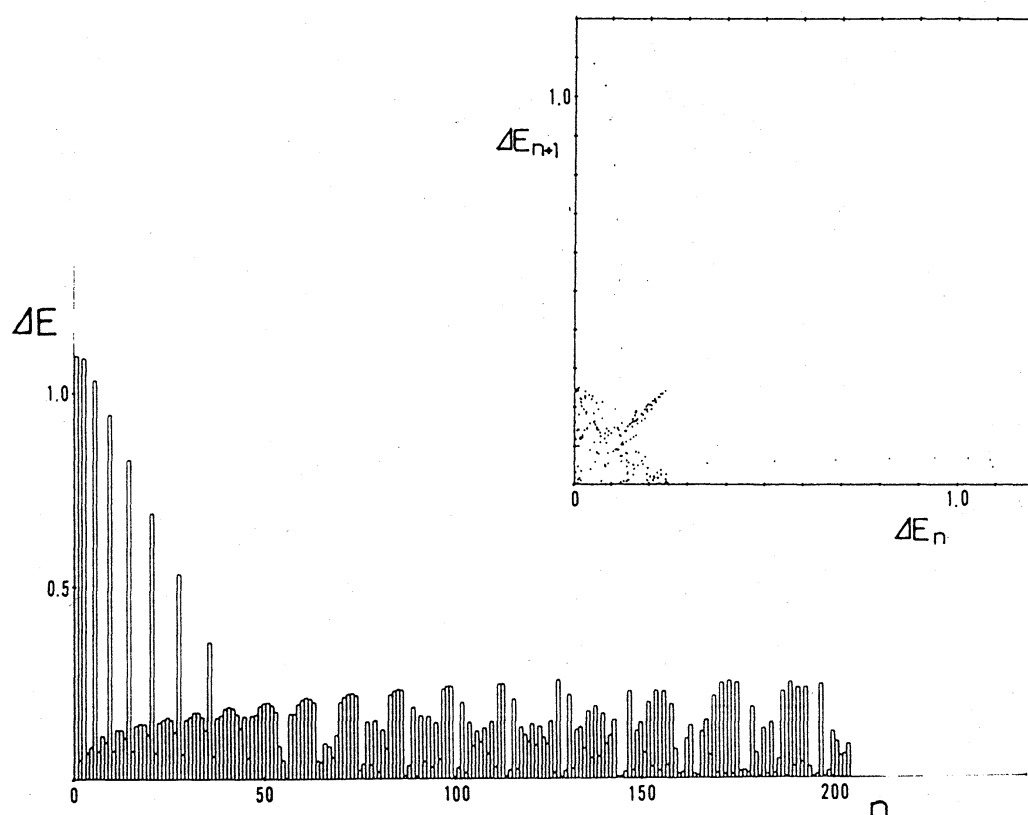


図 9. 非可積分の場合、 ΔE と n の関係。中の図は ΔE_{n+1} と ΔE_n の相関。 n が大きくなると、不規則になる。

量子数 n, m を与えればエネルギーが定まる。 n, m は 0 または正の整数とする。 それ故エネルギー準位は格子点 n, m の集合で $E(n, m)$ とかくことができる。 分離出来なくとも可積分系であればある条件下にトーラスが存在し (Arnold 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 をトーラスの上に作ることも出来る。 Einstein-Brillouin-Keller-

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

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

によって

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

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。これは半古典的取扱い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とあろう。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 に同じくはスピンを増減数とみなせるであらう。 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、 $E(n, m) = \text{一定}$ のときは 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り、2, 3, 4, 5, 6, 7 も同様である。こうして ΔE の規則性が生れりと考えることが出来る。等高線は

平行な直線としてが、
 曲線であつても、平行
 で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
 点が大きく変ふことが
 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
 およわせた事情が図8
 に存在することは通す
 り見られる。

非可積分の不規則に在ることの直接の証明はこれから問題である。

§3 古典的軌道の Poincaré マップ

量子力学的挙動に對して、古典力学的にはどのようにな

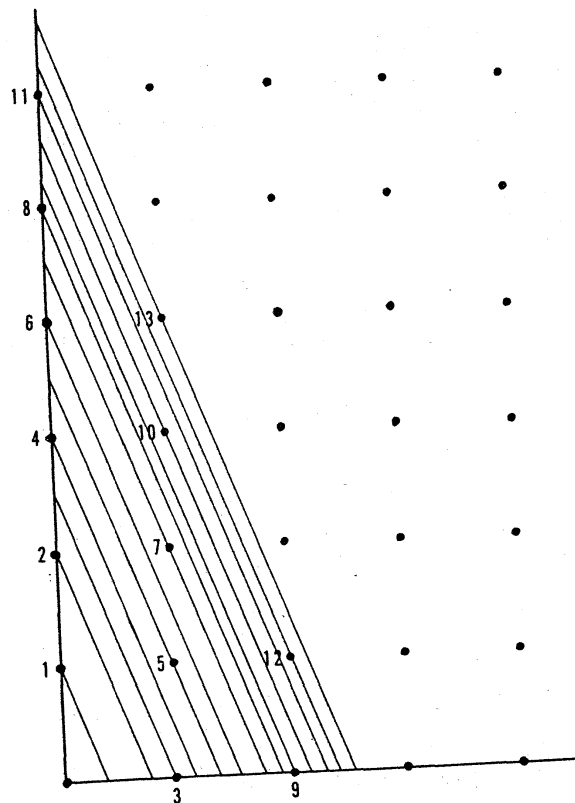


図13. 等高線が平行の

とき、エネルギー準位に對応
 する格子点のとり順序を
 数字で示してある。

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って(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

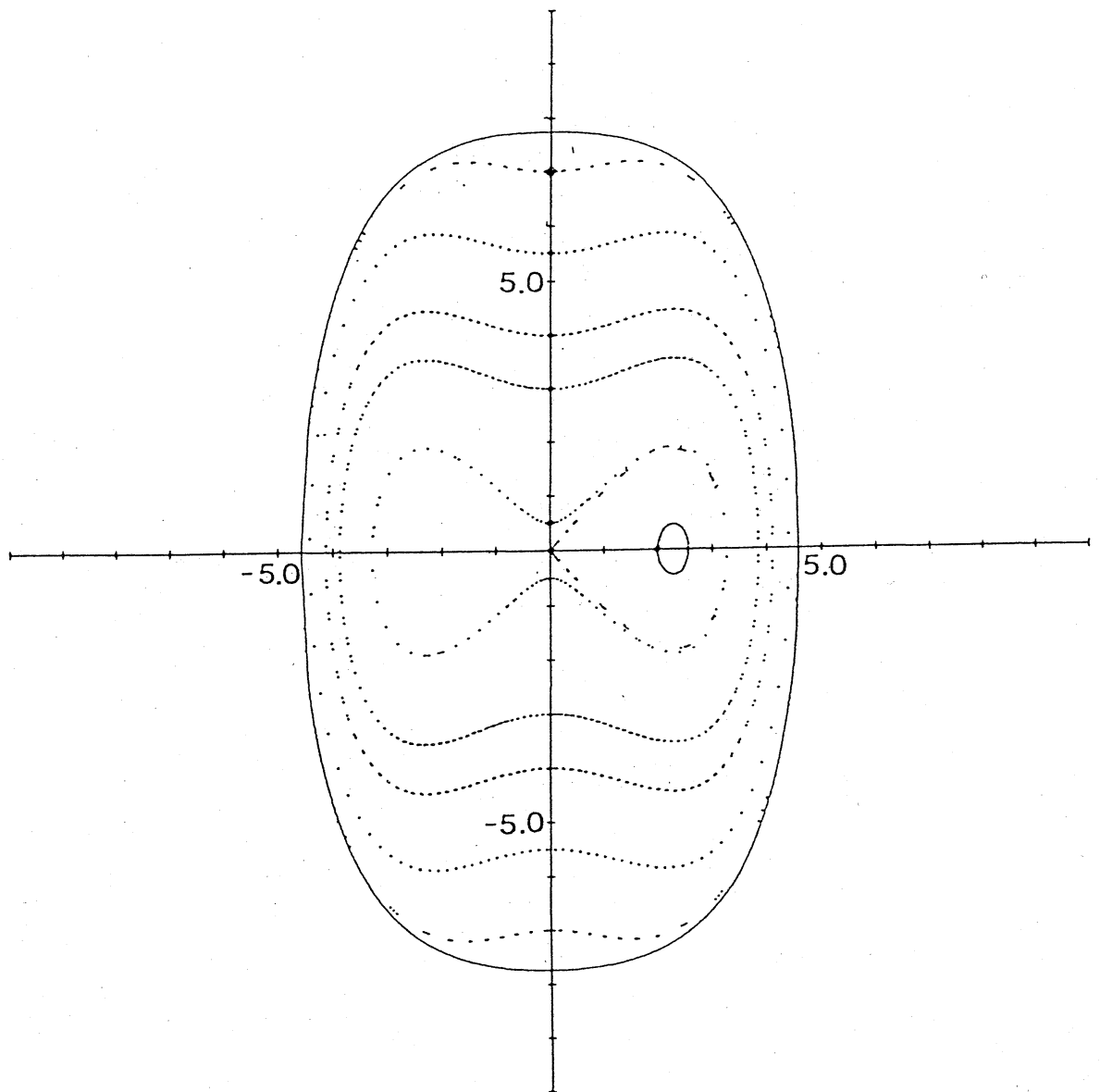


図14. 非可積分系 $a=b=1$, $c=2$ のポアンカレ写像,
縦軸は y , 横軸は x .

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

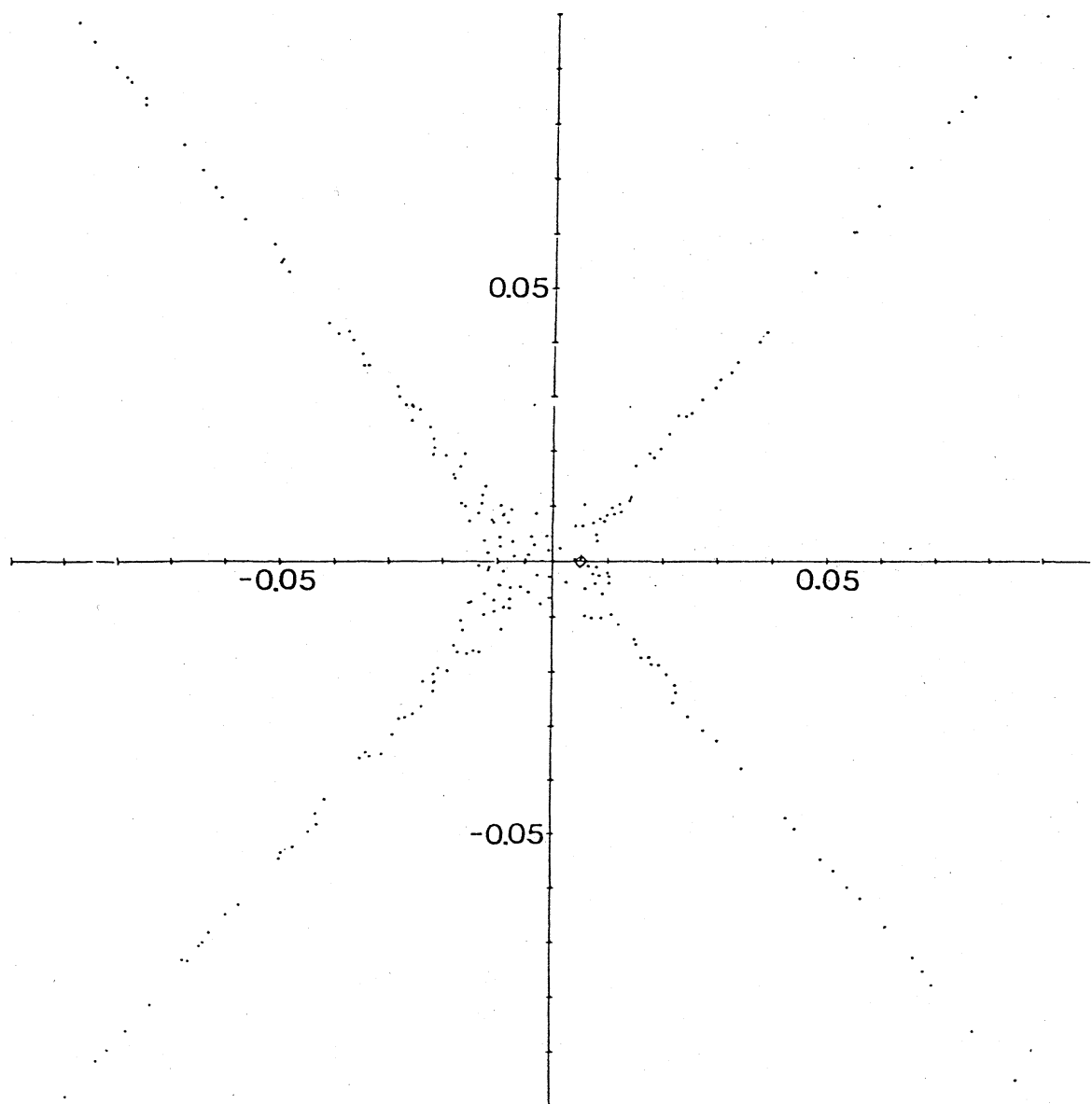


図15, 図14の原点のまわりを拡大したもの、原点は双
曲的不動点とそのまわりにホカオスがある。

期の双曲的不動点があつて、そのまわりにセカオスがある。図14ではそれがほとんど同じに見える。このよきなカオスとも量子平均計算には同じに見えるように現われることは図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に同じくへた推測はこのことと関連して考えべきことのように思ふ。この研究は広田、小林、黒川らが行つたものである。

文 献

1. 広田 - 斎藤信孝: 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. Saitô et al: Proc. Nonequil. Stat. Phys. Prob. in Fusion Plasma (1981), 101