

量子カオスによる散逸の自己組織
—模擬光吸収実験と散逸相転移—

京大基研 池田 研介

この研究は、量子カオスと非可逆性および散逸の起源との関係を解明したいという動機に端を発している。古典力学系のカオスから考えてみよう。非可逆性とは過去を取り戻す手続きの複雑さを表す概念である事を考えるならば、観測精度の有限性、あるいは系のアンサンブル（＝軌道の束）の存在がカオス特有の指数関数的増幅によって非可逆性をもたらすことは想像にかたくない。実際、熱平衡への接近あるいは時間の矢の発生の原因をカオスに帰する論者たちは、斎藤信彦やプリゴジンらのように、観測精度の有限性、あるいはアンサンブルの存在、を仮定している。しかし、量子論になると状況は一変する。純粋状態から全てを導き出すという立場（アンサンブルは、手に入れるものではなく力学系の発展によって不可避免的に純粋状態から形成されるものであるという立場を意味する。）を一貫するならば、アンサンブルに対応するものを量子論に求めれば波動関数になる。しかし、量子論の波動関数は強い相関を内包しており、相関を持たない古典論のアンサンブルと質を著しく異にする。この様な量子系特有の事情はまさに不確定性原理の帰結である。不確定性、あるいは相関は果てしなく微細な構造を要求するカオスの発現を抑止するように作用しカオス特有の指数関数的な記憶喪失（あるいは情報の生成）を決してもたらさない（もっとも散乱問題では指数関数的記憶喪失が存在するがそれはカオスのためではなく、無限に広がった境界条件のためである。）しかし一方、量子論がカオスの存在を根絶的に否定するわけではない。＜カオス＞概念を少し拡張して、指数関数的でなくとも記憶喪失が存在しさえ良いとするならば、量子系においてもカオスが存在する事が分かってきた。しかも以下に示すように、そのような状態の発生は対象とする量子系の古典極限における非可積分性に密接に関係している。

非可逆性が物理現象として現れると、エネルギーの一方方向への散逸になる。本研究は少数自由度の量子系で果たして散逸が発生しうるのはか？という問題を量子カオスとの関連で論じることを主旨とする。さらに問題にしたいのは、もし“散逸”が“カオス”のために実現したとすれば、それはこれまでの理論が記述してきた散逸過程とどのように本質的差異を有するだろうかという点である。さて散逸理論は従来、線形応答理論という形で定式化されてきた。線形応答理論の枠組みは一見して系の動力学のみから散逸係数を導き出す首尾一貫した方法を提供している。しかし問題は、散逸に関与する自由度をどの範囲まで想定するべきかということに関する情報を理論自身が決して提供してくれないことである。しかし、condensed matter physics が従来問題にしてきたような無限自由度の系を考えるかぎり、多くの場合、この問題は次のように便宜的に回避できる：系は（従来の減衰理論が想定しているように）タイムスケールの長いrelevantな自由度とそれに熱だめとして作用する短いタイムスケールの無限自由度系に分離されてしまう。そして、適当な無限自由度の熱だめさえ発見できれば散逸係数は割合簡単に計算できてしまう。その理由は、連続スペクトルを持った熱だめとの相互作用過程に対する摂動展開が一般に収束するためである。この様なモデルで見られる散逸過程は、良く言って普遍的、悪く言ってワンパターンの過程しか現れない。^{■1)} 散逸は最低次の摂動過程で律速され、熱だめがカオスによって十分に掻き混ぜられているかいないかというような事情には余り左右されない。^{■2)} 私見によれば、線形応答理論によって感受率を計算してきた物性理論家たちが熱だめのエルゴード性の問題などにわずらわされることなく実験事実を説明できたのは以上のような理由によっている。^{■3)}

しかし少数自由度の量子系——たとえば、多原子分子やマイクロクラスター、微粒子などの少数多体系——で散逸が問題になることがあるならば事情が一変することが期待できる。なぜならば、もはや<速い熱だめ>と<遅い主自由

度となる色分けは意味を失い、系全体が散逸に関与するような、したがって、極めて系の個性の詳細を色濃く反映した散逸過程が実現されざるを得ないからである。^{註4)} このような系で見られる散逸過程は決して単一ではなく様々な度合いの散逸があらわれるのではないのだろうか？ 例えば、散逸スレスレの＜準散逸＞とでもよぶのが相応しいような現象が存在して良いだろう。この研究の目的は、カオスの存在が散逸に関与するような量子系を舞台にして、伝統的ではあるが、若干カビ臭い感のある散逸の理論に新しい観点をもたらす事にもある。

我々は、3自由度以上の量子カオス系が非可逆性を示唆する挙動を示すことを実証してきた（たとえばカオス拡散の回復）。しかしながら、この現象がはたして＜エネルギーの定常吸収＞に代表される伝統的な散逸現象とどの様に具体的に関係しているのか、きちんとした舞台を設定した議論はいまだ行ってこなかった。ここで扱う系は3自由度以上の量子カオス系である。それを基にして適当な被テスト系を設計し、それをエネルギー源とをきわめて弱く接触させる。もしエネルギー源から被テスト系に定常的なエネルギーの流れが実現したならば素朴な意味で散逸が発生したと判定できる。以下に行うように、エネルギー源をレーザーのような光子源に想定すると、この問題は量子カオスによる光吸収の問題となり、より現実的な意味づけが可能になる。実際、以下で設定するような状況は多原子分子のSEP (stimulated emission pumping) 分光などで実現されている実験的状況に対応させることができる。同時に、chaotic quantum matterと光との相互作用の研究という新しい分野を拓く事を期待したい。

註1) より正確にいうと、「摂動級数が収束する状況で散逸が議論できる。」

註2) 減衰理論が用いるモデルの典型的な＜熱だめ＞が無限自由度の線形振動子系であるが、この系はいうまでもなく完全可積分系である。このモデルが古典カオスの理想的な例としてしられるK-システムとある意味で等価になるというのは皮肉な事である。したがって、古典K系による散逸過程は減衰理論の結果と酷似するはずである。しかしここで問題にしたいのはむしろ量子K系でそれは、古典K系とまったくにいていない。

註3) この問題に最初に注意を促したのが斎藤信彦である。

註4) ＜熱だめ＞のエルゴード性が問題になる一つの例；多原子分子の反応確率が、関与する自由度にたいするエルゴード仮説にしたがって計算されるもので説明できるか否かという問いは実験レベルで重要な問題である。

1 模擬的光吸収実験 (SIMULATED LIGHT ABSORPTION: SLA)

とはいっても、上述のテストを実行することはそれほど容易ではない。最大の理由は後に述べるように散逸の発生がエネルギーレベルを原理的に計算不可能にしてしまう可能性があり、そうなると吸収の時間発展そのものを計算せざるを得ないことである。現実性や実験との対応を重視するならば、被テスト系として多原子分子の振動運動を取るのが望ましいが、残念ながら現在の計算機的能力をもってしても、フルにカオチックな領域で、このモデルによる光吸収の時間発展をシミュレートすることは不可能である。そこで多少インチキくさいが、比較的もつともらしい、数値計算可能なモデルによって被テスト系を構成せざるを得ない。そのかわり光吸収実験系全体 (= 光源 + 被テスト系) を再現するようなアルゴリズムを構成して、摂動論など間接的手法を使うことなしに、実際の光吸収過程そのものを直接シミュレートする方法を採用する。このやり方を模擬的光吸収実験 (SLA) と称する。

ここでは量子写像系を用いて被テスト系を構成する。SLAが可能な系は今の所これぐらいしか考えられない。(symplectic integrator-FFT法を使うともう少し現実的な系でも可能らしい。検討中) 量子写像系は周期外力を受ける系であり、さだまったエネルギーを持っていない。このような系が光源と接触して吸収したエネルギーなど一見定義不可能に見える。しかしこの困難は量子写像系を2自由度の自励系 (I + J) に変換することによって回避できる。そ

うすると今度はこの系は真の基底状態を持たなくなってしまう事が分かる。光吸収の実験を想起して容易に分るように、基底状態のない系からの吸収の実験は不可能に見える。しかしこの困難は、系の外に極めて低いエネルギーの状態 $|g\rangle$ を基底状態として新たにつけくわえることによって回避できる。この状況は実際のSEP分光において、いったん別の振動マニフォールドへ励起する——この場合には基底状態のかわりに励起状態をつけくわえることになる——ことと本質的に同じであり、不自然なことではない。被テスト系の自由度数を増大させる為には $I+J$ を $N\alpha$ 個の他の線形振動子 J_k ($1 \leq k \leq N\alpha$) と結合させるとよい。さて自由度 $N\alpha+2$ の被テスト系 $I+J+J_k$ をその基底状態 $|g\rangle$ に用意しておき一定周波数 Ω の光を導入する。そうしておいて、吸収されたエネルギー $I(\Omega, t)$ を時間の関数として実際に計算する。これが模擬的光吸収実験の概要である。

被テスト系のモード I はいわゆる〈明るいモード〉に対応し、線形モード J, J_k は、〈くらいモード〉に対応する。 I と J は結合定数 K のフェルミ様相互作用で結合し、 K が増大すると $I+J$ は古典的にカオスになる。 $I+J$ を〈ホスト(host)系〉と呼ぶ。 J_k は I を揺さぶる J 以外の“環境の自由度” (多原子分子では他のモード) を表し、 I との結合定数 ϵ はきわめて弱くとる。 J_k を〈助っ人(helper)モード〉と呼ぶ。なぜ〈助っ人〉と呼ばれるかは後程判明する。因みにモデルハミルトニアンは外から付け足す基底状態を除いて

$$H_0 = H_0(I) + \nu J + \sum_{\alpha} \nu_{\alpha} J_{\alpha} + V(\theta, \phi, \{\phi_{\alpha}\})$$

光の場による基底状態との結合を考慮した全ハミルトニアンは

$$H_{tot} = H_0 - E |g\rangle\langle g| + \sum_i C(I) (|I\rangle\langle g| + h.c.) f(t)$$

ここに I, J, J_{α} は作用変数 (演算子)、 $\theta, \phi, \{\phi_{\alpha}\}$ は共役な角度変数 (演算子)、 $|I\rangle$ は I の固有状態、 $E |g\rangle\langle g|$ は基底状態エネルギー、 $f(t)$ は周波数 Ω の光の場を表す。

このモデルの記述力をテストするために、まずわれわれは助っ人なしにホストのみで実験を試みた。ホストにはスタンダード・マップ系を用いた。典型的な吸収スペクトルをみると、吸収線の対が近接するとブロードニングが起こることが見て取れる。これは、いわゆる共鳴ブロードニングで、実験的にも振動準位のスペクトルによく見られる構造である。もちろんこの広がりは時間と共に吸収線の針の山の集合に分解されて終わる。この様に我々のモデルは少なくとも実際の振動スペクトルのある側面を模写できる。

2 数値実験結果

以下の結果はホスト系がどんな量子写像の場合でも当てはまるが、〈アーノルド猫〉の場合に特にはっきりとしたステートメントが得られる。

(1) ホスト系が助っ人と結合していない、つまり $\epsilon=0$ の時には吸収エネルギー $I(\Omega, t)$ は再帰的な時間発展を示すにすぎない。しかし結合が入るとホストが古典極限で可積分かカオスかによってまったく異なった挙動が現れる。(a) ホストが可積分の場合、 ϵ が大きくなっても再帰的な時間発展を示すに過ぎないが、(b) カオスの場合には古典的に無視し得るほど小さい臨界値 ϵ_c で劇的な変化が起こり、吸収エネルギーは時間に比例した増大を

しめすようになる。

(2) (a) の場合および (b) の $\varepsilon < \varepsilon_c$ の場合、スペクトル $I(\Omega, t)$ は時間と共に線スペクトルに分解される。しかし (b) で $\varepsilon > \varepsilon_c$ の場合には $I(\Omega, t)$ は t に比例する連続成分をもつ。

以下は最も興味ある (b) の $\varepsilon > \varepsilon_c$ の場合に関するものである。 $\varepsilon > \varepsilon_c$ で現れる状態を＜散逸相＞、 ε_c で起きる散逸相への相転移を＜散逸相転移＞と呼ぶ。 ε_c はプランク定数に比例することが実験的に分かっている。

(3) $I(\Omega, t)$ の時間変化には t に比例する部分に加えて、極めて非定常な揺らぎが伴う。スペクトルとして見るとこの揺らぎは、連続成分の上に立つピーク構造に起因する。ピーク構造は時間と共にさらに微細構造に分裂してゆき、入れ子構造を作る。この分裂過程は際限なく起こり、入れ子構造の発達が時間的な非定常揺らぎとして観測される。

(4) 自己相似なピーク構造成分はプランク定数に比例する。連続成分は $O(1)$ である。それゆえ自己相似ピーク成分は＜量子成分＞と呼ばれる。スペクトルの Ω に関するフーリエ成分 $C(\tau)$ は波数 τ (時間の次元をもつ) と共に代数的に $|C(\tau)|^2 = \tau^{-\eta}$ の様に減衰する。指数 η は $\varepsilon > \varepsilon_c$ で正になり散逸相転移のオーダーパラメータと見なすことができる。実際 η は $\varepsilon \sim \varepsilon_c$ で臨界揺らぎを伴う。さらに $\varepsilon \gg \varepsilon_c$ で η は $N\alpha/2$ ($N\alpha$ は＜助っ人＞の数) に漸近する。(注 線形応答理論—3参照—によると $C(\tau)$ は＜ホスト+助っ人＞系のグリーン関数に関係する)

(5) さらに散逸相では、奇妙な性質が存在することが分かってきた。例えばスケールの存在しない普遍的な強反発再近接エネルギー準位分布(ウイグナー分布に似ているがより強い反発を示唆する)、パラメータ変化に関する量子状態の断熱不変性の喪失、エネルギーの計算不能性を示唆する数値実験事実など。

上の実験ではホスト系をトーラスの上で定義している。これはホスト系がカオスになってもそれを張る量子状態数を有限にしておきたいからである。連続成分の出現は＜助っ人＞モードの可算無限個の量子状態が全てホスト系の“古典カオス”によってむすびついた(あるいは＜助っ人＞の全量子状態がホストに取り込まれた—involved—)ことを示唆している。実際、＜助っ人＞モードの量子状態数を有限($=M\alpha$)にしておいて全系のエネルギー固有値を計算すると $\varepsilon > \varepsilon_c$ の場合に限って、 $M\alpha \rightarrow \infty$ で固有値は収束しないことが示され、上の仮説の強い証拠を提供している。逆にこの事実は仮に＜助っ人＞に対応する自由度の量子状態数が有限であっても、 $\varepsilon > \varepsilon_c$ では全系のエネルギー吸収への関与の仕方が質的に変化していることを示唆する。この場合 $t \rightarrow \infty$ まで定常吸収が持続することは有り得ないが、定常散逸がみられるタイムスケールは $\varepsilon < \varepsilon_c$ の場合に比べて質的に長くなり＜準散逸＞とよんで良いような状況が実現している。

かくして極くわずかな＜助っ人＞の助けでホストは相転移的にカオスを顕在化させたのである。吸収されたエネルギーはまったく＜助っ人＞にはたまらず全てホストにたまる。この意味で helper はホストを助けた後に黙って去ってゆく＜助っ人＞なのだ。(もうすこし上品に言えば触媒なのだ。野村証券の営業マンなどと、どだいデキが違うのである。) さて散逸相の出現は正に系全体が散逸に関与するような自己組織化が起きていることを意味する。この状況の下では熱だめと主自由度(relevant degree of freedom)という分離はもはや不可能であり、 ε に関する摂動展開と

いう減衰理論でおなじみの手法はもはや意味を持たない。

3 半古典理論

2の著しい結果を説明するためには例えばカオスという古典的概念と量子現象を結び付ける理論でなければならない。今の所この要求を満たすのは半古典理論のみである。しかし半古典理論はカオス系への適用に際して様々の障害をもたらすことが予想されている。もっとも本質的な問題は、適用できるタイムスケールが極めて短い事であろう。さらに、技術的困難としては、我々の系は本質的に3自由度以上の系であり、自由度の増大は半古典論の実際的な計算を著しく困難にする。

我々は以下のような手順で半古典論をこの問題に適用した。まず光源との結合が弱い極限を想定する。すると線形応答理論的取扱いができて、時間分解吸収スペクトルを、孤立した<ホスト+助っ人系>のグリーン関数の有限時間フーリエ変換として表す公式を導くことができる。これは<久保公式>或いは<揺動散逸定理>の量子マップ版に他ならない。つぎの仕事はグリーン関数を半古典的に評価することである。半古典グリーン関数は経路積分によって評価できる。我々の系がトーラス上で定義されているためにおきる多少面倒な問題を除いて、通常どうりの半古典定式化ができる。グリーン関数は<ホスト+助っ人>の初状態(i)と終状態(f)を結ぶすべての古典軌道に沿った[古典ラグランジアン]/h を位相とする指数因子に振幅因子をかけて合算したものになる。

上に記した大自由度なるが故の困難を除くために次のような方法が考案された。まずホストと助っ人を切り離しそれぞれの古典軌道(裸の軌道)をもとめる。両者を結合させた結果生じる軌道のずれをキモノと呼ぶ。散逸相のすべてはキモノのなかに含まれている。一般にキモノは裸の軌道の非局所的な全情報から決定されるが、カオスの場合に限って軌道不安定性のために裸の軌道の局所的情報で決定されるという特徴がある。これは接線場の時間発展演算子のプロパゲータがカオス軌道の乱雑さのためにアンダーソン局在(これは純古典的現象で量子カオスのアンダーソン局在とはなんの関係もない)を引き起こすためである。局在長がまさにリアプノフ数の逆数で決まる事を利用すると、キモノを裸の軌道の局所情報から $\exp\{-\text{(リアプノフ数)}\}$ のべき展開で計算でき(記憶展開)、実際の計算が非常に簡単になる。一般に最低次の記憶展開による半古典グリーン関数は形式的に

$$G(t) = \sum_m A^{(m)}(t) g^{(m)}(t) \exp\{-i S^{(m)}(i, f, t)/h\}$$

と書ける。 $A^{(m)}(t)$ 、 $S^{(m)}(i, f, t)$ は裸の軌道の振幅因子と古典action、 $g^{(m)}(t)$ は混合因子と呼ばれる部分で結合量子写像固有の因子である。振幅因子は古典的意味を持つが、混合因子は異なる位相で出発した軌道のキモノ間量子的干渉が生み出した古典的意味づけ不能の因子である。

<アーノルド猫>を例にとって $G(t)$ を数値的に評価することが試みられた。<猫>では、半古典論は量子論に厳密に一致する。試したいことは散逸が発生しているような<助っ人>との強結合領域での半古典論がworkするかどうかという点である。良く知られているようにカオス系では軌道数の指数関数的爆発のために、時間の経過と共に半古典グリーン関数の数値的評価は困難になる。(それと同時に古典軌道展開の収束性にも問題が出てくる。)我々は計算可能なタイムスケール(軌道数最大1000万個)までグリーン関数を計算した。少なくともそのタイムスケールで半古典論は強結合領域においてもほぼ完璧に量子論の結果を再現する。しかし散逸の有無を厳密に証明する

には数値計算がもはや不可能な極めて長いタイムスケールでの $G(t)$ が必要になる。強結合領域では混合因子がもたらす付加的actionによって裸のaction間の相関が打ち消されると仮定すると、 $|g^{(n)}(t)|$ が $|G(t)|$ を支配すると考えることができる。一般の量子写像に対して混合因子の漸近的挙動はほぼ厳密に予想できて、ホストがカオスの場合には代数的に減衰し、カオスでない場合には再帰的に振る舞う。減衰はカオスの場合に限ってキモノ間の干渉が破壊的に起こるためである。 $G(t)$ が減衰すれば吸収率はノンゼロの有限値になり、定常吸収が起こる。かくして、少なくともうえの仮定を認めるかぎり、なぜホストがカオスの場合に限って定常な吸収が起こるのか半古典論から説明出来たことになる。一方、上の仮説が正しいとすれば純量子論的に計算された吸収スペクトルのフーリエ変換 $C(\omega)$ は、混合因子に一致せねばならない。実際に両者の振幅は強結合領域で見事に一致し、スペクトルの自己相似性を定量的に説明すると同時に、上記の仮説の妥当性にたいする強い証拠を提出している。

しかし、混合因子の挙動のみでは散逸相転移を説明することは出来ない。ホストが古典的にカオスならば混合因子は必ず減衰する。相転移は、混合因子がもたらす付加的actionによる裸のaction間の相関の打ち消し過程として記述されるはずだがまだ成功していない。今後解決したい重要な問題である。これに絡むさらに重要な問題を指摘しておく。以上の議論では長時間にわたって半古典理論が成り立つことを仮定し、その仮説を支持する証拠が存在することを示唆した。しかし、古典極限でカオスを示す二次元量子写像系では、このようなタイムスケールで軌道のaction ($S^{(n)}$) 間に強い相関が発生し、このためにユニタリ性が指数関数的に破れ半古典論が破綻する強い証拠が存在する(首藤・池田 発表予定)。とすれば、高次元系では散逸自己組織によって半古典論がながいタイムスケールにわたって——少なくとも振幅に関しては——成り立つ(量子論と一致するという意味で)ようになったのかもしれない。かなり大胆な仮説であるが今後検証に値する未解決の課題としてあげておく。

4 実験との関係

さいごに実験との関係について一言触れておく。以上の結果は3自由度以上結合振動子系について当てはまるはずであり、アセチレンのような多原子分子系でも観測されるべき現象である。実際、アセチレンの高励起スペクトルでは準連続スペクトル領域で何段階かの高次(入れ子)構造が存在することが報告されているが、連続成分が高解像度極限でも存在するかどうかは今の所ははっきりしない。解像度と連動させた再近接レベル間隔統計やスペクトルのフーリエ変換の相似則などから、有限の解像度で散逸相のスペクトルか否かを判定できるような方法を提案する必要がある。山内らはアセチレンにおいて低い解像度でアサイン可能、高解像度でアサイン不能かつ多段の高次構造をもったスペクトルを観測している。これが、散逸相のスペクトルである可能性は低い、同様の性質をもったスペクトルが1で導入したモデルでも再現でき、かつその近傍に散逸相が存在することから類推すると、アセチレンでももう少し高励起側に散逸相が存在する可能性はある。

我々がここで提案したモデルが現実の多原子分子振動状態と差を持つことは否定できない。すこし人工的ではあるが我々のモデルを完全に模擬する実験可能な系は簡単に作り出せる。それには、原子のリードベリ状態あるいは単分子の高励起振動状態への励起による吸収(放出)を近多重共鳴環境下で観測すれば良い。近共鳴光子(複数個)は線形モード J , J_0 の役割を果たしドアウエイ状態様の散逸相スペクトルが観測できる(発表予定)。

●K. Ikeda: Self-organized dissipation due to quantum chaos : simulated light absorpton with many-dimensional quantum chaos systems 準備中