

多自由度系の量子動力学：古典動力学との比較

都立大・物理

奥島輝昭*

1 はじめに

古典動力学では、系の自由度に定性的に依存する現象（例えば、自由度が3以上の系でのアーノルド拡散）が知られている。量子動力学においても、自由度に依存した「量子性によるカオスの抑圧」とトンネルで拡散しようとする効果の競合で引き起こされる量子現象が期待されている[1]。このような非平衡緩和過程における多自由度系の量子動力学は統計力学の基礎として重要なだけでなく、現実の物理系の振る舞いを理解するのにも重要である[2]：例えば、統計的化学反応論の基礎である分子内振動エネルギー再分配[2, 3]や、メゾスコピック系の輸送の問題[4, 5]と関係してくる。先駆的研究のおかげでいくつかの重要な洞察が得られ[6, 7, 8]、現在も活発に研究されている[9, 10, 11, 12]。しかしながら、（特に多自由度系の場合には）基礎的な性質に限っても十分な理解には到達していない。量子系の自由度に依存した非平衡過程を動力的に理解することを目的とし、量子古典対応を調べた。

2 モデル

低エネルギー励起状態の動力学を記述するモデルとして、4次の多項式相互作用項をもつ振動子系を考察する。このハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_k \hbar \omega_k a_k^\dagger a_k \\
 & + \lambda \sum_{k_1+k_2+k_3+k_4=0} \left[W_{k_1,k_2,k_3,k_4}^{(1)} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_3}^\dagger a_{k_4}^\dagger + W_{k_1,k_2,k_3,k_4}^{(2)} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_3}^\dagger a_{-k_4} \right. \\
 & \left. + W_{k_1,k_2,k_3,k_4}^{(3)} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{-k_3} a_{-k_4} + \text{h.c.} \right]
 \end{aligned} \quad (1)$$

である。 λ は非可積分性のパラメタで λ が小さいとき近可積分系になる。

具体的な $W_{k_1,k_2,k_3,k_4}^{(i)}$ の値は以下の手続きで与えられるものを採用する。

1. ϕ^4 on site 相互作用をもつ一次元格子振動モデルを連続体近似する。その結果、この系は

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\dot{\phi}^2 - \phi'^2 - m^2 \phi^2) - \frac{\lambda}{4!} \phi^4$$

なるラグランジアン密度で記述される。ここで $\phi = \phi(x, t)$ 。

2. 長さ L の周期的境界条件を課す。
3. 運動量空間で、低エネルギーモード（波数 $k = -\Lambda, \dots, 0, 1, \dots, \Lambda$ ）のみ残し、それ以外のモードは無視する。この結果、許される全自由度 N は $2\Lambda + 1 (= 1, 3, 5, 7, \dots)$ となる。

umklapp 過程を含む FPU- β 、 ϕ^4 などの空間格子モデルと異なり、連続体近似を採用したことから、 $W_{k_1,k_2,k_3,k_4}^{(i)} \propto \delta_{k_1+k_2+k_3+k_4,0}$ が成立する。これより全運動量 $P = \sum \hbar k n_k$ は保存量であることが分かる。波数空間での相互作用項が簡単な形をもつハミルトニアン(1)は、多自由度系のダイナミクスの理解に有効であろうと考えられる。

*email: okushima@comp.metro-u.ac.jp

このモデルに対して有効な数値スキームの開発を行った [13]。このスキームは、FPU- β 、戸田格子などにも適用可能である。以下で、我々の開発した数値スキームの概要を報告する。興味のあるのは低エネルギー励起状態の動力学なので、 E_{cut} 以下のエネルギーをもつ粒子数状態 $|\mathbf{n}\rangle$ ($H_0[\mathbf{n}] = \sum_k \hbar \omega_k n_k < E_{cut}$) に制限し、これらで張られる空間を近似的状態空間とする。この状態空間の次元を L とする。

まず、SI 法は 2 次の SI(SI₂) の評価法が与えられれば時間依存ハミルトニアンにも適用可能な高次スキームが構成できることに注意する [14, 15, 16]。ハミルトニアン (1) を $\mathbf{n}$ 表示での対角項 $A_0[\mathbf{n}]$ とそれ以外の a_i , $a_i^\dagger$ について 4 次の項 $\sum_{i \geq 1} A_i$ に分解する。ただし a_i , $a_i^\dagger$ の 4 次の単項式とそのエルミート共役の和を A_i とした。我々が評価すべき SI₂ は、 $x = -i\hbar \times dt$ として、

$$\text{SI}_2(x) = e^{\frac{x A_0}{2}} \cdots e^{\frac{x A_{M-1}}{2}} e^{x A_M} e^{\frac{x A_{M-1}}{2}} \cdots e^{\frac{x A_0}{2}}$$

である（ここで A_i の個数 M を導入した）。 $\exp(x A_0/2)$ は $\mathbf{n}$ 表示で対角的だから容易に評価される。残る $i = 1, 2, \dots$ に対する $\exp(x A_i/2) |\Phi\rangle$ の評価には、「基底の並び替えにより、 A_i はブロック対角行列となり、各ブロックは、対角成分が零の 3 重対角行列となる」ことを利用する。あらかじめブロック行列 B^r ($r = 1, \dots, N_b$) の固有値 D_r を求めて記憶すると、 B^r の対角化行列 S^r を用いて、

$$\Phi^r := S_r \Phi^r, \quad \Phi^r := \exp(x D_r) \Phi^r, \quad \Phi^r := S_r^T \Phi^r, \quad (2)$$

と評価できる。ここで Φ^r は、 $|\Phi\rangle$ をブロック行列 B^r の基底へ射影して得られる成分からなる列ベクトル。(2) に必要な対角化行列 S^r は、 B^r は 3 重対角行列（この次元を L_r とする）であるから、 $\sim L_r^2$ の乗算回数で求められる。また、(2) の行列演算に要する乗算回数は $\sim L_r^2$ の程度の量である。結局、(2) の評価に要する計算量は合計 L_r^2 程度の乗算回数である。この評価より、SI の one step に要する計算コスト（乗算回数）は、ブロックの大きさ L_b の平均値 $\langle L_b \rangle$ を用いて、 $(L/\langle L_b \rangle) \times \langle L_b \rangle^2 \sim L/L^{1/D} (L^{1/D})^2 = L^{1+1/D}$ (D は系の自由度) 程度と評価される。このことから、全ハミルトニアンを対角化して時間発展を計算するなどの素朴なスキーム（この場合は $\sim L^3$ の計算コスト）よりも、このスキームは効率が良いことが分かる。要する記憶容量、スキームの収束性などの詳細は [13] を参考にして頂きたい。

3 数値実験結果

3, 5, 7 自由度系に対して、摂動パラメタ λ を様々に変化させて数値実験を行い、生存確率の時間発展を求めた。対応する古典系についても数値実験を行い [17]、量子動力学と比較した。確率的に変動する外場の影響下での量子動力学の数値実験を行い、系の外場への応答を調べた。

3.1 古典動力学と量子動力学との比較

量子系の生存確率 $P(t)$ は $P(t) = |\langle \Phi_{t=0} | \Phi_t \rangle|^2$ で定義される。初期状態を粒子数状態に設定した $|\Phi_{t=0}\rangle = |\mathbf{n}\rangle$ 。この粒子数状態に対応する古典系の初期分布 $\rho_{t=0}^{cl}(\mathbf{I}, \phi)$ ($\mathbf{I}$ と ϕ とは作用と角変数) として、 $\rho_{t=0}^{cl}(\mathbf{I}, \phi) = C \times \Theta_{\mathbf{n}}(\mathbf{I})$ を採用した。ここで、 $\Theta_{\mathbf{n}}(\mathbf{I})$ は $\mathbf{I}$ の量子化 ($\mathbf{I}_{\mathbf{n}} = \hbar(\mathbf{n} + \hbar/2)$) に対応し、 $\mathbf{I}_{\mathbf{n}} - \hbar/2 < \mathbf{I} < \mathbf{I}_{\mathbf{n}} + \hbar/2$ を満たす領域で 1、それ以外では 0 で定義される関数であり、 C は $\int \rho_{t=0}^{cl}(\mathbf{I}, \phi) d\mathbf{I} d\phi = 1$ となるように決められる規格化定数である。すると、生存確率の古典対応物は $P^{cl}(t) = \int d\mathbf{I} d\phi \Theta_{\mathbf{n}}(\mathbf{I}, \phi) \times e^{-i\mathcal{L}_H t} P_{t=0}^{cl}$ となる。この $\mathcal{L}_H$ は $-i\mathcal{L}_H P^{cl} = \{H, P^{cl}\}_{P.B.}$ である。

図 1-4 に数値実験の結果を示した。これらから分かることは、

(1) (短時間領域のスケーリング) 短時間領域では、量子、古典ともに $\tau = \lambda t$ でスケールされる。この領域では、図 1, 2, 3 の P vs τ のグラフは一つの曲線で表される。とくに、短時間

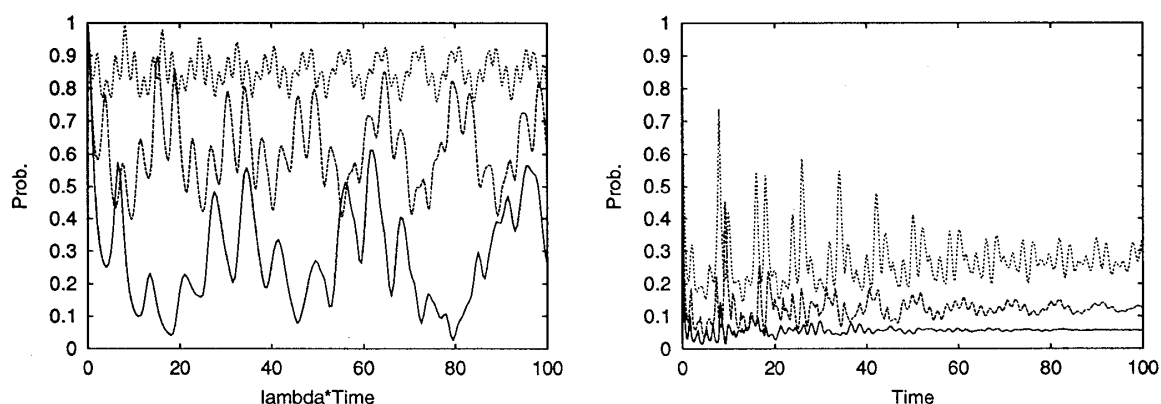


図 1: 3 自由度系の生存確率 $P(t)$ の時間変化。上から $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。量子力学による計算結果 (左) と、古典力学による計算結果 (右)。

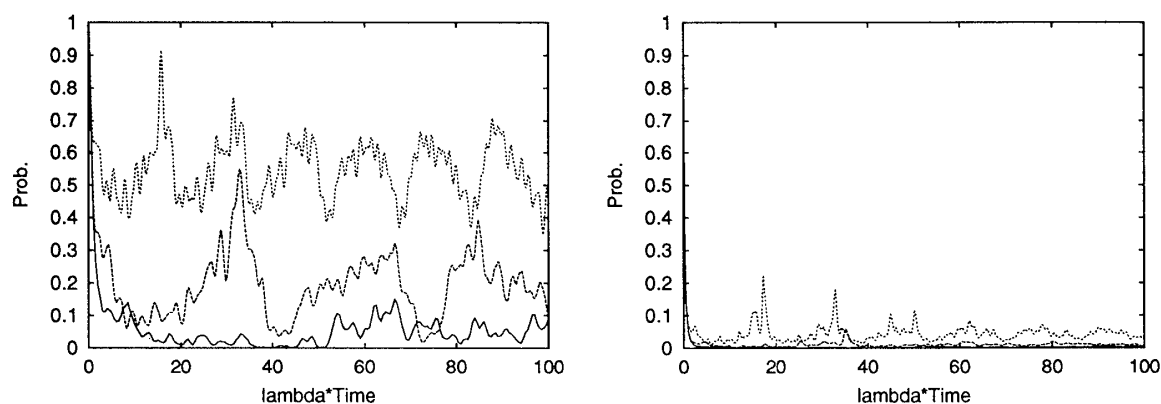


図 2: 5 自由度系における $P(t)$ の時間変化。上から $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。量子力学による計算結果 (左) と、古典力学による計算結果 (右)。

領域で $\exp$ 減少を示す 5, 7 自由度系の寿命は $\propto \lambda$ であるがわかる。(cf. golden rule だと寿命 $\propto \lambda^2$ となる。)

(2) (低自由度系の量子振動状態) 図 1 から、3 自由度系での古典力学の生存確率 $P(t)$ は時間の経過と共に減少し、一定値に収束する (図 1 右) ことが分かる。一方、量子 3 自由度系では、 $P(t)$ は大きな λ でも量子振動を示し、まったく緩和しない (図 1 左)。この結果は、2 自由度孤立系や、周期外場中の 1 自由度系で発見された「量子性によるカオスの抑圧 (または dynamical localization)」[18, 19] と整合する。つまり、ハミルトニアン (1) では全運動量が保存するので正味の自由度は $3 - 1 = 2$ の孤立系と同じになる。このことから、「量子性によるカオスの抑圧」が原因で局在し、その結果、量子振動を示すと推察される。

(3) (多自由度系での量子振動状態の存在) 図 2, 3 の左図が示すように、古典系は、摂動 λ が小さくても ($\lambda = 1$)、十分に混合的である。一方、対応する量子系は量子振動状態であることが分かった。これより、多自由度系でもカオスが弱い系では量子的に局在することが分かる。

(4) (多自由度系の量子生存確率の緩和) 自由度が大きく (≥ 5)、 λ が比較的大きな ($\lambda = 4$) 系では量子力学での生存確率が時間とともに減少する。量子力学 5 自由度系の生存確率 $P(t)$ は、図 2 に示したように、 λ を大きくすると量子振動から、ほぼ単調な減少を示すようになる。特に、 λ の大きな領域ではべき的な緩和がみられた (図 4 参照)。我々のモデルと異なるモデルでも、古典極限でカオスを示す 1 自由度量子開放系や [5, 20]、ランダムな振動数をもつ非線形振動子結合系で [9] 量子系のべき的な緩和が数値実験で発見されている。残念ながら、これらとの関

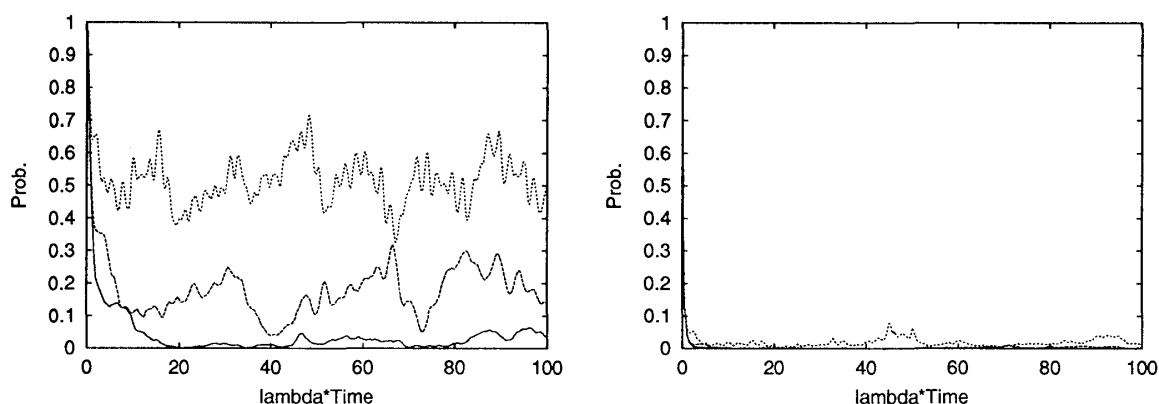


図 3: 7 自由度系における $P(t)$ の時間変化。上から $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。量子力学による計算結果（左）と、古典力学による計算結果（右）。

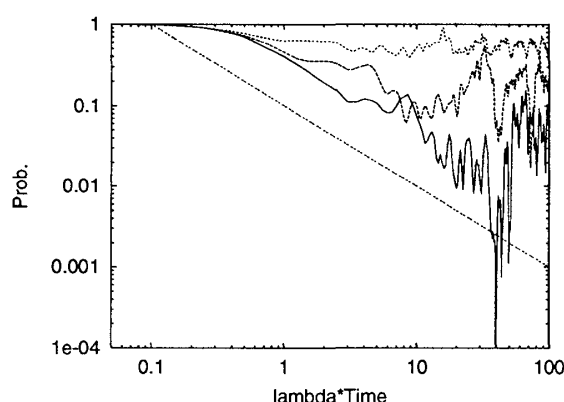


図 4: 5 自由度量子系における $P(t)$ の時間変化の両対数プロット。上から $\lambda = 1, 2, 4$ 。直線は $0.1/t$ 。

係はまだ分からない。図 3 からは、量子力学 7 自由度系の $P(t)$ は急激に減少し、5 自由度系と比較して量子振動の振幅が小さくなることが分かる。

以上から、量子効果により $P(t)$ の振る舞いが大きく変更されることが分かった。次に、量子と古典の比較をより詳細に観察するために log スケールでプロットしたのが図 5 である。これから、

(5) (量子局在) 古典系は摂動 λ の小さな系でも急激に減少し、ほぼ一定の値に落ち着き、混合性を示す。それに対して、量子系の $P(t)$ は一定値に緩和することなく、揺らいでいる。その長時間経過した時間領域での量子系の平均値と、古典系の平衡値とを比較すると、局在傾向を示している (量子の平均値/古典の平衡値 > 1)。さらにグラフから、この相対的な局在傾向 (量子の平均値/古典の平衡値) は λ の値に関係することなく、系の自由度だけに関係し、

3 自由度系のとき $\Rightarrow$ 量子の平均値/古典の平衡値 ~ 1

5 自由度系のとき $\Rightarrow$ 量子の平均値/古典の平衡値 ~ 10

7 自由度系のとき $\Rightarrow$ 量子の平均値/古典の平衡値 ~ 100

程度であることが分かる。

(6) 平衡状態に達するまでの過渡的な時間領域において、古典系の変動の様子と量子系の変動の傾向が類似している。古典の微少な変動は相空間の局所的な非一様性に原因があると考えられる。一方、量子系ではこの局所構造が量子性によるカオスの抑圧の効果で強調されより大きなスケールで同様の変動をしているものと考えられる。

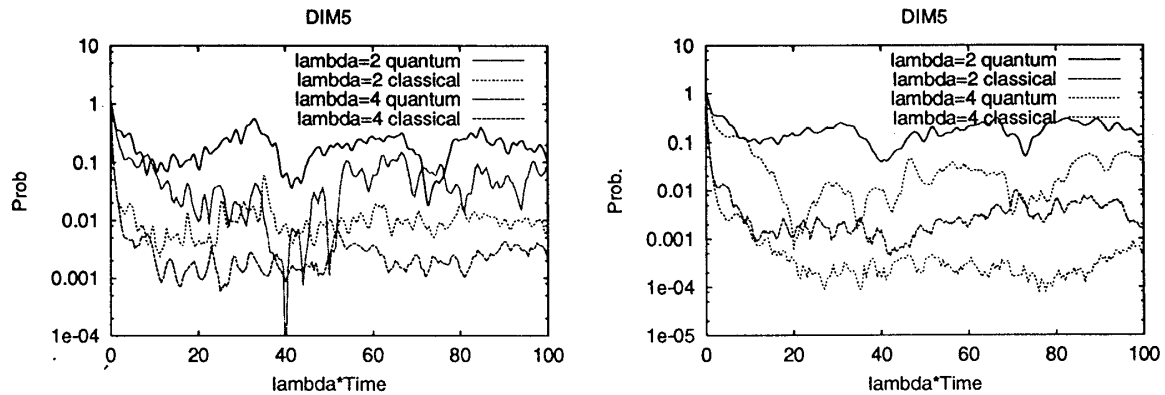


図 5: 生存確率 $P(t)$ の時間変化の log プロット。5 自由度系の量子と古典の比較 (左) と 7 自由度系の量子古典の比較 (右)。

3.2 多自由度量子系のノイズ外場への応答

確率的に変動する外場の影響下でのハミルトニアン (1) の動力学を調べる。外部のノイズをモデル化するため相互作用項を確率的に変動させた: $W_{k_1, k_2, k_3, k_4}^{(i)}$ を確率変数 $\widetilde{W}_{k_1, k_2, k_3, k_4}^{(i)}(t)$ に置き換えたモデルを考察した。具体的には, $W(= W_{k_1, k_2, k_3, k_4}^{(i)})$ を異なる i , (k_1, k_2, k_3, k_4) の間で独立な, $\widetilde{W}(t) = W$ と $(\widetilde{W}(t) - W)(\widetilde{W}(t') - W) = \delta W^2 \times \delta(t - t')$ とをみたす確率変数 $\widetilde{W}(= \widetilde{W}_{k_1, k_2, k_3, k_4}^{(i)}(t))$ に置き換え, $\delta W/W \simeq$ 数% の範囲で変動させた。

このモデルの生存確率 $|\langle \Phi_{t=0} | U(t) | \Phi_{t=0} \rangle|^2$ を数値実験した。3, 5, 7 自由度系すべてが図 6 と同様のノイズへの応答を示した。つまり, $P(t)$ へのノイズの影響は少なく、定性的に変化しなかった。この結果はノイズの強さが量子干渉を壊すのに十分な強さでないことを示している。と同時に、孤立系で見られた緩和 (図 2, 3) が数値誤差などの原因による物ではない、ノイズに強い量子動力学特有の現象であることを示している。

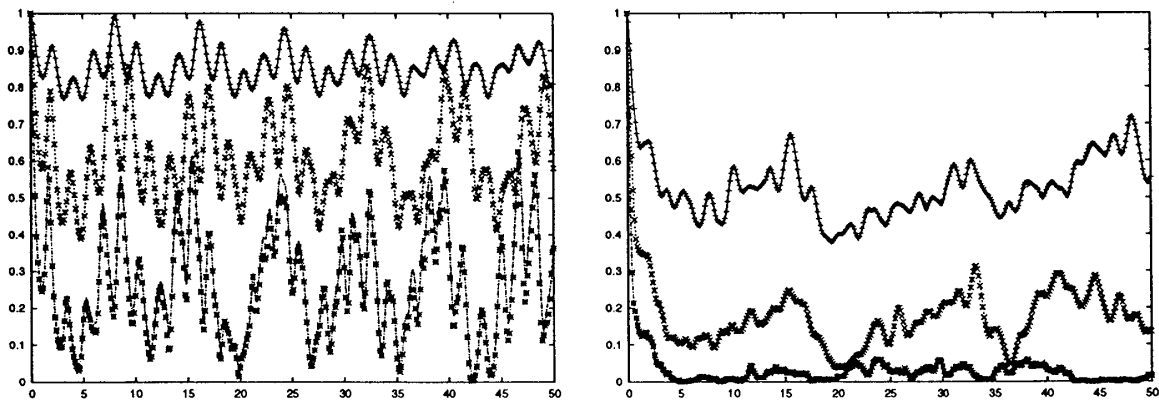


図 6: ノイズ外場中の 3 (左図)、7 (右図) 自由度量子系の $P(t)$ の時間変化: +, x, * は $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。曲線は孤立系の時間変化: 上から $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。

4 まとめ、課題

多自由度系の低エネルギー励起状態の動力学を記述するモデルとして多項式相互作用をもつハミルトニアンを採用した。このハミルトニアンに適用可能な数値スキームの概要を報告した。

3, 5, 7 自由度系に対して、摂動パラメタ λ を様々に変化させて数値実験を行い、生存確率 $|\langle \Phi_t | \Phi_{t=0} \rangle|^2$ を観測した。その結果、(1) 摂動 λ の小さな系では、すべての自由度の系で量子振動状態が観測された。(2) 3 自由度系では常に量子振動が、自由度が大きく (≥ 5) λ が比較的大きな系では量子力学での生存確率が時間とともに減少することが観測された。特に、5 自由度系ではべき的な減少を示す λ が存在した。対応する古典力学の数値実験を行い量子古典対応を調べた。これから以下が明らかになった。(1) 古典系は摂動 λ の小さな系でもすべての自由度の系で急激に減少し平衡状態に到達する混合的である。量子系は、対応する古典系の平衡値を基準として局在傾向を示し (量子/古典 > 1)、平衡値における量子/古典の値が自由度の増加とともに増大する、つまり、局在傾向が強くなる。(2) 平衡状態に達するまでの過渡的な時間領域において、古典系の変動の様子と量子系の変動の様子が (それらの値が大きく異なる場合においても) 類似している。これらは、量子性によるカオスの抑圧により相空間の局所的な構造が強調されたことによるものと推察される。さらに、ノイズの加えられた量子力学とノイズなしの孤立系の量子力学の比較実験を行った。両者の間には定性的な変化が観測されなかった。これらはノイズに強い安定な構造が非平衡緩和過程に存在する場合があることを示している。

今後の課題として、本研究を通してその存在が示唆された、非平衡緩和過程の安定な構造を理解する必要がある。そのためには、多自由度古典力学における緩和とその周りの微妙な揺らぎのメカニズムを理解する必要がある。このメカニズムに基づいて相空間内の古典力学を理解し、さらに、どの古典的不安定性が「量子性によるカオスの抑圧」により安定化させるのか? を調べることで、多自由度における量子効果をより良く理解できるようになると考えている。これには、考察しているハミルトニアンが $\lambda = 0$ の可積分ハミルトニアンに摂動を加えた近可積分的な形式であることから、共鳴解析 [2, 6] や、Laskar の周波数解析 [21] などの手法が、有用であろうと考えている。

最後に、有益な助言を与えてくださる東京都立大非線形物理研究室首藤啓、田中篤司の両氏に深く謝意を表したい。また、下らない疑問や、長時間の議論につき合ってくれる研究室のメンバーにも感謝したい。

参考文献

- [1] E. J. Heller and M. J. Davis, J. Phys. Chem. **85**, 307-309(1981); E. J. Heller, J. Phys. Chem. **99**, 2625-2634 (1995).
- [2] 戸田幹人, 物性研究 9 月号, 597-643 (2000).
- [3] T. Uzer, Phys. Rep. **199**, 73-146 (1991).
- [4] R. Ketzmerik, Phys. Rev. B **54**, 10841-10844(1996).
- [5] B. Huckestein, R. Ketzmerik, and C. Lewenkopf, Phys. Rev. Lett. **24**, 5504-5507 (2000); erratum:**87**, 11990-11991 (2001).
- [6] E. V. Shuryak, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **71** 2039-2056 (1976) [JETP **44**, 1070-1080 (1976)].
- [7] E. Dromn and S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 867-870 (1988).
- [8] S. Adachi, M. Toda, and K. Ikeda, Phys. Rev. Lett. **61**, 655-658 (1988); Phys. Rev. Lett. **61**, 659-661 (1988).
- [9] S. A. Schofield, P. G. Wolynes, and R. E. Wyatt, Phys. Rev. Lett. **74**, 3720-3723(1995); J. Phys. Chem. **105**, 940-952 (1996).
- [10] D. M. Leitner and P. G. Wolynes, Phys. Rev. Lett. **76**, 216-219 (1996).
- [11] D. M. Leitner and P. G. Wolynes, Phys. Rev. Lett. **79**, 55-58 (1997).
- [12] G. T. Tsaur and J. Wang, Phys. Rev. Lett. **80**, 3682-3685 (1998).
- [13] 奥島輝昭, 「多項式摂動のある多自由度系の量子力学」, 数理解析研究所講究録『力学系理論と複雑系の数理』

- [14] H. Yoshida, Phys. Lett. A **150**, 262-268 (1990)
- [15] M. Suzuki, Proc. Japan Acad. B **69** 161-166 (1993)
- [16] K. Takahashi and K. Ikeda, J. Chem. Phys. **99**, 8680-8694 (1993).
- [17] 古典系の時間発展は4次のSI法 [14] を用いて求めた。
- [18] L. E. Reichl, *The Transition to Chaos in Conservative Classical Systems: Quantum Manifestations* (Springer-Verlag, New York, 1992).
- [19] G. Casati, B. V. Chirikov, J. Ford, and F. M. Izrailev, in *Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems*, edited by G. Casati and J. Ford (Springer-Verlag, Berlin, 1979).
- [20] G. Benenti, G. Casati, I. Guarneri, and M. Terraneo Phys. Rev. Lett. **87**, 14101-14104 (2001); G. Casati, I. Guarneri, and G. Maspero Phys. Rev. Lett. **84**, 63-66 (2000); G. Benenti, G. Casati, G. Maspero, and D. L. Shepelyansky Phys. Rev. Lett. **84**, 4088-4091 (2000); G. Casati, G. Maspero, and D. L. Shepelyansky Phys. Rev. Lett. **82**, 524-527 (2000).
- [21] J. Laskar, Physica D, **56** 253-269 (1992); **67** 257-281 (1993)