

多項式摂動のある多自由度系の量子動力学

都立大・物理 奥島輝昭 (Teruaki Okushima) *

Department of Physics, Tokyo Metropolitan University

[概要]

Symplectic Integrator (SI) を応用し、多自由度系の量子動力学系に対して有効な数値スキームを開発した。既存のスキーム (チェビシェフ法、RRGM など) と異なり、時間依存ハミルトニアンにも適用可能である。これを用いて量子動力学を数値実験し、生存確率の時間変化を求めた。対応する古典動力学の数値実験も行い、量子古典対応を考察した。ノイズが加えられた量子系の動力的な応答を調べた。これらの実験結果は多自由度系に特有の量子効果を示唆している。

1 はじめに

非平衡緩和過程における量子動力学は、不可逆性の起源や統計的記述の出現などの統計力学の基礎と深く関係する重要な問題である [1]。量子動力学は現実の物理系の振る舞いを理解するのにも重要であり、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] と関係がある。

変動する外場から力を受ける 1 自由度系の動力学に関して数多くの研究がなされた [4, 5, 6, 7]。これらの研究を通して、古典対応物で存在する拡散が量子効果により抑圧される現象が明らかにされ、*dynamical localization* と呼ばれている [8]。一方、より多自由度の系に対する先駆的研究 [9, 10, 11] により、自由度の数が動力学の性質を決定する重要なパラメタであることが明らかにされた。Shofield と Wolynes のスケーリング理論 [12]、Leitner と Wolynes の Feenberg 摂動理論 [13]、Wang らの非線形振動子モデルの共鳴解析 [14] など非平衡緩和過程における統計的性質が研究された。古典動力学において不安定性を生み出す普遍的な機構である “Arnold 拡散” (を近似する *stochastic pump* モデル) に対する量子化の効果が研究されている [15]。これらの研究から幾つかの重要な洞察が得られたが、(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。特に、自由度に依存して「量子性によるカオスの抑圧」とトンネル過程による拡散の効果との競合関係が変化すると推察されているが [16]、詳しいことは分かっていない。

多自由度系の研究のボトルネックの 1 つは、数値実験の困難にある。現在までのところ利用可能な数値スキームは大別して *recursive residue generation method* (RRGM) [17, 18]、Chebychev 法 [18, 19, 20]、SI スキーム [21] の 3 種に分類できる。RRGM と Chebychev 法は多自由度系に適用可能なスキームで、RRGM は相関関数を効果的に求めることができるが、*monochromatic field* 以外の時間依存ハミルトニアンには適用できない。Chebyshev 法は波動関数を効果的に求めることができ、例えば 21 mode ベンゼンに適用された [20]。しかし、時間依存するハミルトニアンに適用しようとするとな煩雑な手続きが必要となる [22]。二次の SI 法は *split operator method* [23] として知られていたが、高橋、池田 [21] により初めて高次のスキームが調べられた。任意の時間依

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

存性をもつハミルトニアンにも適用可能で、高次のスキームも容易に構成できるなどの扱いやすい性質を持つ [24, 25]。高速 Fourier 変換を用いることで波動関数の p -表示と q -表示の変更が高速に評価できることを利用することで、 $H = T(p) + V(q)$ の形式のハミルトニアンでは非常に効率的に求めることができる [21] しかし、この方法では 2～3 自由度系が限界で、多自由度系に適用されることはなかった。

我々は、SI 法をベースに時間依存性を持つ非線形振動子ハミルトニアンに適用可能な、新たな量子力学の数値スキームを開発した。さらに、この動力学スキームを非線形格子振動モデルに適用し、その有効性を示した。物理的に興味のある多自由度系の低エネルギー励起状態を初期状態にとり、その動力学実験を行い生存確率 $|\langle \Phi_{t=0} | \Phi_t \rangle|^2$ の時間変化を求めた。対応する古典力学の数値実験をおこない量子古典対応を調べた。さらに、ノイズが加えられた量子系の動力学的な応答を調べた。これらの実験結果は多自由度系に特有の量子効果を示唆している。

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、

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

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 Lagrangian 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。

3 数値計算法

波動関数の状態空間は無限次元のヒルベルト空間である。数値実験を行うためには状態空間を有限次元で近似しなければならない。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 $|\mathbf{n}\rangle$ ($H_0|\mathbf{n}\rangle = \sum_k \hbar\omega_k n_k < E_{cut}$) 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。以後、この状態空間の次元を L とする。

多自由度系における量子力学の数値実験では、素朴なスキームは実用にならない。なぜなら、全ハミルトニアンを対角化して、その固有値 D 、対角化行列 S を求めて、時刻 t の波動関数 $|\Phi(t)\rangle$ を $|\Phi(t)\rangle = S^T \exp(-i\hbar t D) S |\Phi\rangle$ と、素朴に評価すると仮定する。すると、固有値、固有ベクトルを計算するのに L^3 だけ乗算回数が必要となる。これらを格納するのに、 L^2 個の c 数の記憶容量を必要とする。さらに、各時間 t 毎に L^2 だけの乗算回数が必要となる。多自由度系の状態空間の次元 L が $10^4 \sim 10^6$ 程度と仮定すると、対角化だけで $L^3 = 10^{12} \sim 10^{18}$ の乗算回数を必要とし、 L^2 つまり $10^8 \sim 10^{12}$ 個の c 数の記憶容量を必要とする。このような素朴なスキームでは実用にならない。多自由度系に適当なスキームが必要であることが分かる。

本章では、我々の開発した数値スキームを報告する。

3.1 SI 法

SI 法を応用して、数値スキームを開発する。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 [25]。実際のプログラミングでは SI₂ のサブルーチンを数回 Call するだけで 4 次、6 次の SI を作成できる [24]。このような理由で SI₂ の評価法のみ考察すればよいことが分かる。

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； $H = \sum_{i=0}^M A_i$ 。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 とする。例えば、 $A_1 = (W_{0,0,-1,1}^{(1)} a_0 a_0 a_{-1} a_1 + \text{h.c.})$ 。 M は、展開項数 -1 である。我々が評価すべき SI₂ は、 $x = -i\hbar \times dt$ として、 $e^{x \sum_i A_i} = e^{\frac{x A_0}{2}} \dots e^{\frac{x A_{M-1}}{2}} e^{x A_M} e^{\frac{x A_{M-1}}{2}} \dots e^{\frac{x A_0}{2}} + O(x^3) \equiv \text{SI}_2(x) + O(x^3)$ である。これには、 $|\Phi\rangle$ を任意の波動関数として、 $i = 0, 1, 2, \dots, M$ 対する $\exp(x A_i/2) |\Phi\rangle$ が評価法が与えられれば十分である。 $\exp(x A_0/2)$ は $\mathbf{n}$ 表示で対角的だから、 $\exp(x A_0/2) |\Phi\rangle$ は $\exp(x A_0/2) |\Phi\rangle = \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \exp(x A_0[\mathbf{n}]/2) \langle \mathbf{n} | \Phi \rangle$ と容易に評価される。残る $i = 1, 2, \dots, M$ 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。以下にこれを示そう。記号の簡便のため $i = 1, 2, \dots, M$ の A_i を A と表記する。まず、ブロック行列を指定する変数 r を $r = 1$ とする。任意の粒子数状態 $|\mathbf{n}^r\rangle$ に A を作用させると、

$$A|\mathbf{n}^r\rangle = c^+[\mathbf{n}^r] |\mathbf{n}^r + \delta\mathbf{n}\rangle + c^-[\mathbf{n}^r] |\mathbf{n}^r - \delta\mathbf{n}\rangle \quad (2)$$

が成立する。ここで $c^\pm[\mathbf{n}^r]$ は c 数係数、 $\delta\mathbf{n}$ は A に対応した零でないベクトル。 A を繰り返し作用させることで、粒子数状態の系列 $\{|\mathbf{n}^r - s_{\min}\delta\mathbf{n}\rangle, \dots, |\mathbf{n}^r - \delta\mathbf{n}\rangle, |\mathbf{n}^r\rangle, |\mathbf{n}^r + \delta\mathbf{n}\rangle, \dots, |\mathbf{n}^r + s_{\max}\delta\mathbf{n}\rangle\}$ が生成される。ここで $s_{\max}$ と $s_{\min}$ は、それぞれ、 $|\mathbf{n}^r \pm s\delta\mathbf{n}\rangle$ が粒子数状態であるための条件 ($\mathbf{n}^r \pm s\delta\mathbf{n}$ の各成分が零以上) と $|\mathbf{n} \pm s\delta\mathbf{n}\rangle$ が状態空間内にある条件 ($H_0|\mathbf{n} \pm s\delta\mathbf{n}\rangle < E_{cut}$) とを共に満たす、最大の非負の整数 s である。こうして決まる部分空間の次元は $L_r \equiv s_{\max} + s_{\min} + 1$ である。 $|\mathbf{n}^r(s)\rangle \equiv |\mathbf{n}^r - (s - s_{\min} + 1)\delta\mathbf{n}\rangle$ を導入する。この粒子数状態の集合で張られる部分空間への射影演算子 P_r は、 $P_r = \sum_{s=1}^{L_r} |\mathbf{n}^r(s)\rangle \langle \mathbf{n}^r(s)|$ である。すると $(1 - P_r)A P_r = 0$ が成立する。 $L_r \times L_r$ 行列 B^r を導入する： $(B^r)_{s,s'} \equiv \langle \mathbf{n}^r(s) | A | \mathbf{n}^r(s') \rangle$ 。(2) から、 $s = 1, \dots, L_r - 1$ の $(B^r)_{s,s+1}$ と $(B^r)_{s+1,s}$ とだけが非零の行列要素であること、つまり、行列 B^r が対角要素が零の 3 重対角行列であることが分かる。 $r = 1$ の部分空間以外から、新たに粒子数状態を選び、これを $r = 2$ の $|\mathbf{n}^r\rangle$ と置いて、上の作業をすると (P_2, B^2) が求められる。この操作は得られた

部分空間の次元の和が状態空間の次元と等しくなるまで行うことができる。その結果 (P_r, B^r) ($r = 1, 2, \dots, N_b$) が求まる。ここでブロックの総数を N_b とした。以上から、対角成分が零の 3 重対角行列 B^r ($r = 1, 2, \dots, N_b$) が存在し $A|\Phi\rangle = \sum_{r=1}^{N_b} \sum_{s=1}^{L_r} |\mathbf{n}^r(s)\rangle (B^r \Phi^r)_s$ であることが示された。ここで列ベクトル $\Phi^r = \{ \langle \mathbf{n}^r(s) | \Phi \rangle, s = 1, \dots, L_r \}$ を用いた。

$\exp(xA)|\Phi\rangle$ の評価に戻ろう。上の議論から $\exp(xA)|\Phi\rangle = \sum_{r=1}^{N_b} \sum_{s=1}^{L_r} |\mathbf{n}^r(s)\rangle (\exp(B^r) \Phi^r)_s$ が成立する。よって各 r の行列演算 $\exp(B^r) \Phi^r$ ($r = 1, \dots, N_b$) に帰着する。これを以下のスキームで評価する：(0) あらかじめ B^r ($r = 1, \dots, N_b$) の固有値を求めて記憶する。固有値を対角要素とする対角行列を D_r とする。そして $r = 1, \dots, N_b$ に対する $\exp(B^r) \Phi^r$ は次のように評価する：(1) B^r 対角化行列 S^r を計算する。(2) D_r と B^r とを用いて $\Phi^r := S_r^T \Phi^r$ 、 $\Phi^r := \exp(xD_r) \Phi^r$ 、 $\Phi^r := S_r^T \Phi^r$ と評価する。 B^r は 3 重対角行列だから、(1) の対角化行列 S^r の評価は、 $\sim L_r^2$ の乗算回数で求められる。(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。よって (1) と (2) に要する計算量は合計 L_r^2 程度の乗算回数である。

以上でスキームが構成できた。各ブロックの評価を別々のプロセッサで独立に処理することが可能だから、ここで述べたスキームは並列化可能である。次に我々のスキームの効率を計算コストと要する記憶容量の観点から調べる。

3.2 計算コスト

ここでは、前小節で述べた数値スキームの計算コスト（要する乗算回数）を調べる。

A_i のブロック行列で大きさ L_b のブロックの個数を $N_i(L_b)$ とおくと、 $\text{SI}_2(x)|\Phi\rangle$ の評価に要する計算コストは、 $\sim \sum_{i=1}^M \sum_{L_b=2} L_b^2 N_i(L_b) \equiv \sum_{L_b=2} L_b^2 N(L_b)$ である。ここで $N(L_b) = \sum_{i=1}^M N_i(L_b)$ とおいた。図 1 に $N(L_b)$ の L_b 依存性を示した。小さなブロックが多数で大きなブロックは小数

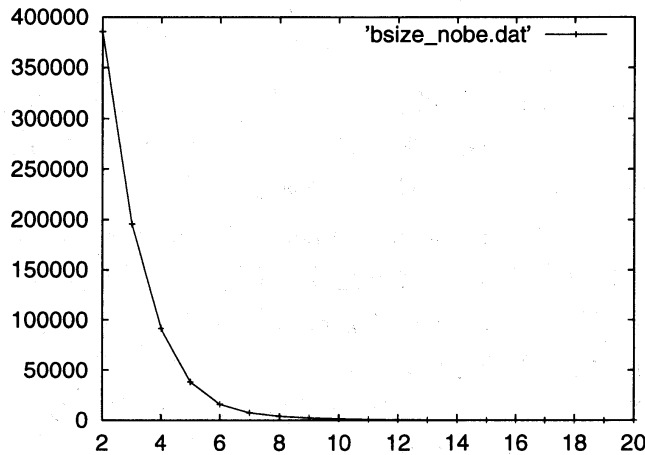


図 1: $N(L_b)$ の L_b 依存性

であることが分かる。これより、計算コストが低く抑えられていることが分かる。

計算コスト（乗算回数）を粗く評価してみよう。ブロックの大きさ L_b の平均値 $\langle L_b \rangle$ を用いて、計算コストは $(L/\langle L_b \rangle) \times \langle L_b \rangle^2$ と評価される。部分空間は $\mathbf{n}^r$ をとおる $\delta \mathbf{n}$ の方向の直線と同一視できるのであったから（前小節参照）、 $\langle L_b \rangle \sim L^{1/D}$ (D は系の自由度) である。よって、計算コストは $\sim L/\langle L_b \rangle (L^{1/D})^2 = L^{1+1/D}$ (D は系の自由度) 程度と評価される。

この評価から分かるように、本章の最初で説明した素朴なスキームよりも、このスキームは効

3.3 要する記憶容量

我々のスキームは、波動関数 $|\Phi\rangle$ とブロック行列の固有値とを記憶するのに記憶容量を必要とする。ここでは、固有値の記憶に必要な記憶容量を考察する。

比例関係にないブロックの固有値だけを記憶すれば十分である。具体的には、2つのブロックの間に (ブロック 1) = 定数 $\times$ (ブロック 2) の関係が成立するとき、同じ同値類に属するとして分類する。各同値類を代表する1つのブロックの固有値を (計算し、) 記憶する。これに要する記憶容量は $\sum N'(L_b) \times L_b$ である。ここで、 L_b 次元のブロック行列の種類の個数を $N'(L_b)$ と置いた。状態空間の大きさ L と固有値の記憶に要する容量 (これは L 依存する) は以下の表にまとめられる。

	$E_{cut}=10$	20	30	40
3 自由度系 L	26	86	181	312
記憶容量	16	165	438	826
5 自由度系 L	55	449	1785	4971
記憶容量	16	415	2592	8832
7 自由度系 L	78	1229	8101	33876
記憶容量	16	483	3643	14699

ただし、記憶容量は (ブロックの次元) ≥ 4 について記憶するとして計算した。(2, 3次元の3重対角行列の対角化は容易だから記憶しなくて良いから。) 膨大な数のブロック行列が少数の同値類に分類できるおかげで、要する記憶容量が小さく抑えられていることが分かる。

3.4 収束性

我々のスキームが、ユニタリ性 ($\langle \Phi_t | \Phi_t \rangle = 1$) を保つこと、十分に大きな状態空間で十分に小さな時間刻みで評価することで、厳密な値に収束することを示す。まず、SIに基づくからユニタリ性を保存するスキームであることは明らかである。

E_{cut} を固定した場合に、 n 次スキームの dt 収束性 $|\Phi_T, SI_n(dt)\rangle = |\Phi_T, Exact\rangle + O[dt^n]$ を満たすことを数値的に確かめた。具体的には、比較的小規模の状態空間のハミルトニアンを対角化することで時間発展を計算し、これを $|\Phi_T, Exact\rangle$ と定めた。これと2, 4, 6次SIの数値計算結果を比較することで n 次収束性を確かめた。

さらに dt を十分に小さくとしたときの値 $|\Phi_T, SI_n(dt \rightarrow 0)\rangle$ が E_{cut} の増大とともに $\exp(-\text{const} \times E_{cut})$ で正確な値に近づくことを確かめた。

4 数値実験

低エネルギー励起状態を記述するハミルトニアン (1) に前章の数値スキームを適用した。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、生存確率の時間発展を求めた。対応する古典系について数値実験を行い、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。

4.1 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 $|\Phi_{t=0}\rangle = |n\rangle$ 。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、 $\rho_{t=0}^{cl}(\mathbf{I}, \phi) = C \times \Theta_n(\mathbf{I})$ を採用した。ここで、 $\Theta_n(\mathbf{I})$ は $\mathbf{I}$ の量子化 ($\mathbf{I}_n = \hbar(n + \hbar/2)$) に対応し、 $\mathbf{I}_n - \hbar/2 < \mathbf{I} < \mathbf{I}_n + \hbar/2$ 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 $P^{cl}(t) = \int d\mathbf{I} d\phi \Theta_n(\mathbf{I}, \phi) \times e^{-i\mathcal{L}_H t} P_{t=0}^{cl}$ となる。この $\mathcal{L}_H$ は $-i\mathcal{L}_H P^{cl} = \{H, P^{cl}\}_{P.B.}$ である。

量子古典対応の考察を容易にするためには、古典対応物が、なるべく単純な振る舞いを示すことが望ましい。そこで、古典動力学が混合的であるような状態を考察することにした。具体的には、 n を十分に大きくとり、古典の生存確率 $P^{cl}(t)$ が、図 2 にみられるように、指数的に減少して平衡状態に緩和するのを確認し、このような初期状態に対する量子古典対応を考察した。

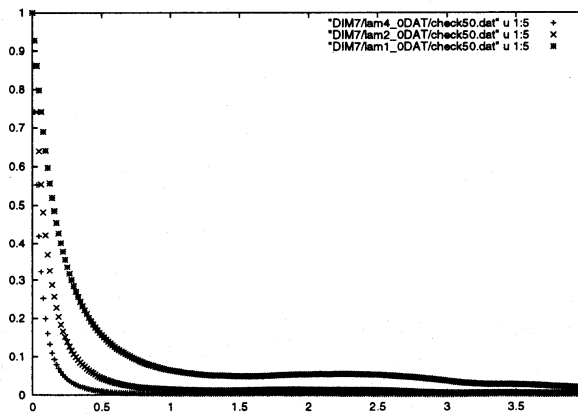


図 2: 7 自由度系における P^{cl} の時間変化。上から $\lambda = 1, 2, 4$ の数値結果。 P^{cl} は、すべての λ で急激に減少している。3, 5 自由度系についても、数値実験し、 P^{cl} が定性的に同じ変化を示すことを確かめた。

量子 3 自由度系の生存確率 $P(t)$ は、大きな λ でも量子振動を示し、緩和しない。(図 3)。この

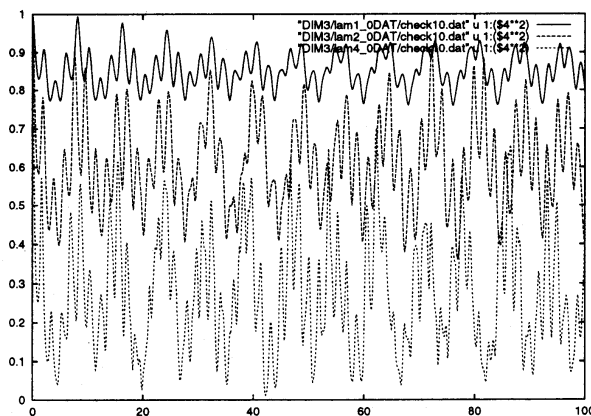


図 3: 3 自由度量子系における $P(t)$ の時間変化。上から $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。

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 dynamical localization [6, 8] と整合する。ハミルトニアン (1) は全運動量を保存するので、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 dynamical localization、そして、量子振動を示すことが定性的に理解できる。

量子力学5自由度系の生存確率 $P(t)$ は、図4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。我々のモデルと異なったモデルでも、古典極限でカオスを示す1自由度量子開放系や [5, 7]、ランダムな振動数をもつ非線形振動子結合系で [12] 量子系のべき的な緩和が数値実験で発見されている ([12] ではスケーリング理論と数値実験との比較もある)。残念ながら、これらの他のモデルとの関係はまだよく分かっていない。

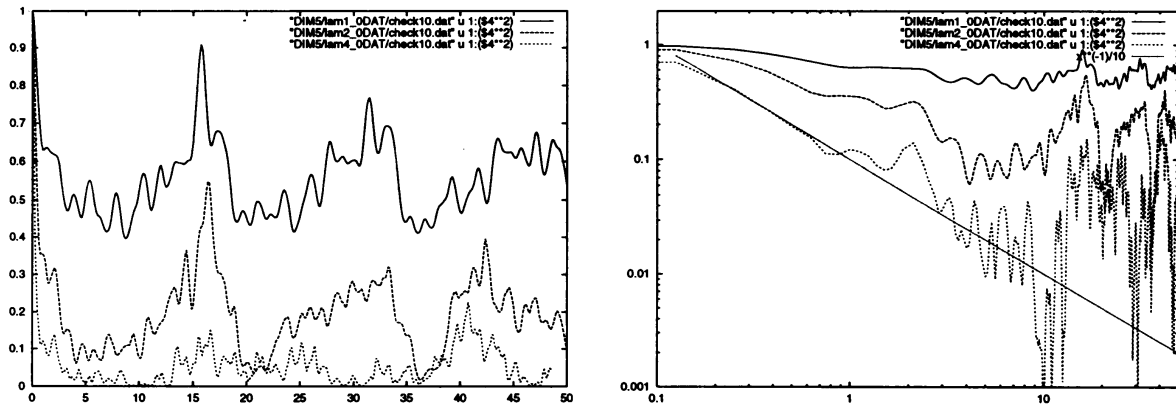


図 4: 5 自由度量子系における $P(t)$ の時間変化。上から $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。(左) ノーマルスケールでプロット。(右) 両対数プロット。直線の傾きは -1 。

量子力学7自由度系の数値実験結果は図5に示した。5自由度系と比較して、より急激な減少がみられた。(量子揺らぎがあるため、一定値に緩和することはないが長時間の平均値で定義される) 平衡値が5自由度系よりも小さいことも読みとれる。

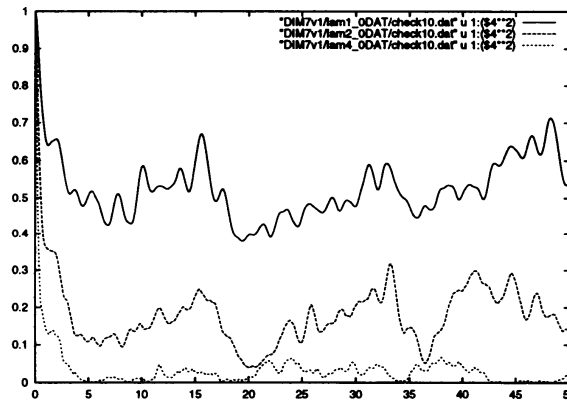


図 5: 7 自由度量子系における $P(t)$ の時間変化。上から $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。

4.2 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、 $\overline{W(t)} = W$ と $\overline{(\widetilde{W}(t) - W)(\widetilde{W}(t') - W)} = \delta W^2 \times \delta(t - t')$ 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。

3 自由度系の $P(t)$ が量子振動を示したのは、ノイズの強さが量子干渉を壊すのに十分な強さでなかったからだと考えられる。一方、5, 7 自由度系の $P(t)$ がほとんど同じ緩和を示し、定性的に変化しなかったことは、孤立系で見られた緩和（図 4, 5）がノイズにも強い、数値誤差などの原因による物ではない、量子性故の構造であることを示している。

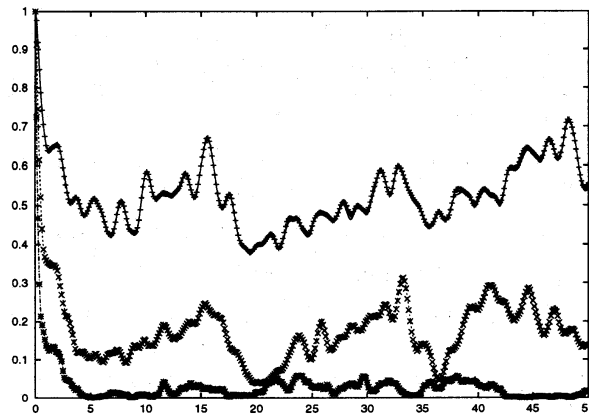


図 6: ノイズ外場中の 7 自由度量子系の $P(t)$ の時間変化: +, x, * は $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。曲線は孤立系の時間変化: 上から $\lambda = 1, 2, 4$ の結果。

5 まとめ

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。SI を用いて、このハミルトニアンに適用可能な数値スキームを開発した [26]。高次の SI 構成法、時間依存ハミルトニアンの SI 構成法の概略も説明した。得られたスキームの収束性を数値実験で調べた結果、理論から予想される収束性と一致した。

生存確率の量子古典対応を調べた。対応する古典動力学で混合的な振る舞いをする初期状態のみを考察した。量子動力学は局在する傾向があり、非線形性のパラメタ λ の大きさに定性的な変化を示した [27]: 3 自由度系の場合 λ の値にかかわらず、量子振動を示した。自由度が 5 以上の系では λ が大きくなると生存確率は減少することが観測された。特に、5 自由度系では λ の大きな系では、べき的に減少することが分かった [28]。

ノイズの加えられた量子動力学と孤立系の量子動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。これはノイズに強い構造が非平衡緩和過程に存在することを示唆している [27]。

今後の課題として、状態空間内で生存確率が分配されていく様子を追跡することで、より大域的な観点から生存確率の時間依存性を考察することが必要になる。さらに、確率分布の時間変化を定性的に記述するであろう（量子）共鳴 [2] が、どの程度の精度の記述を与えるかを調べ、動

力学の詳細を調べていくことが必要となると思われる。

参考文献

- [1] E. M. Zaslavsky, カオス-古典および量子力学系-, (現代工学社, 1989).
- [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] L. E. Reichl, *The Transition to Chaos in Conservative Classical Systems: Quantum Manifestations* (Springer-Verlag, New York, 1992).
- [7] 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).
- [8] 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).
- [9] E. V. Shuryak, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **71** 2039-2056 (1976) [JETP **44**,1070-1080 (1976)].
- [10] E. Dromn and S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 867-870 (1988).
- [11] S. Adachi, M. Toda, and K. Ikeda, Phys. Rev. Lett. **61**, 655-658 (1988); Phys. Rev. Lett. **61**, 659-661 (1988).
- [12] S. A. Schofield, P. G. Wolynes, and R. E. Wyatt, Phys. Rev. Lett. **74**, 3720-3723(1995); J. Phys. Chem. **105**, 940-952 (1996).
- [13] D. M. Leitner and P. G. Wolynes, Phys. Rev. Lett. **76**, 216-219 (1996).
- [14] G. T. Tsaur and J. Wang, Phys. Rev. Lett. **80**, 3682-3685 (1998).
- [15] D. M. Leitner and P. G. Wolynes, Phys. Rev. Lett. **79**, 55-58 (1997).
- [16] E. J. Heller and M. J. Davis, J. Phys. Chem. **85**, 307-309(1981); E. J. Heller, J. Phys. Chem. **99**, 2625-2634 (1995).
- [17] A. Nauts and R. W. Wyatt Phys. Rev. Lett. **51**, 2238-2241 (1983).
- [18] R. Kosloff, J. Phys. Chem. **92**, 2087-2100 (1988) 参照.
- [19] H. Tal-Ezer and R. Kosloff, J. Phys. Chem. **81**, 3967-3971 (1984).
- [20] C. Iung and R. E. Wyatt, J. Chem. Phys. **99**, 2261-2264 (1993).
- [21] K. Takahashi and K. Ikeda, J. Chem. Phys. **99**, 8680-8694 (1993).
- [22] H. Tal-Ezer, R. Kosloff, and C. Cerjan, J. Comp. Phys. **100**, 179 (1992)
- [23] M. D. Feit, J. A. Fleck, Jr., and A. Steiger, J. Comp. Phys. **47**, 412 (1982).
- [24] H. Yoshida, Phys. Lett. A **150**, 262-268 (1990)
- [25] M. Suzuki, Proc. Japan Acad. B **69** 161-166 (1993)
- [26] 準備中；最近の研究で、FPU- β や Toda lattice の量子動力学の研究にも適用できることが分かった。
- [27] 最近の研究で 5, 7 自由度系の実験結果を log プロットで比較してみると、量子的変化 $\simeq$ 古典的变化となる時間領域があることが分かった (いずれ古典動力学は古典の生存確率を一定にする)。つまり、両者の数値的なオーダーは大きく異なるにもかかわらず共通の変動傾向を持つ。このことから変動の原因は共通だろうと推察される：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り、量子性によるカオスの抑圧で、その構造が強調されることで共通の変動傾向を持つと考えられる。ノイズの加えられた系がノイズ耐性を持っていたのは、この構造が微少な外場に対しては壊れないことを意味している。
- [28] 我々のモデルでも短時間領域では $\tau = \lambda t$ でスケールされることが分かった [12]。これは exp 減少を示す 5, 7 自由度系では寿命 $\propto \lambda$ となることを示している。(cf. golden rule だと寿命 $\propto \lambda^2$ となる。)