

量子chaosと散逸の起源

京大基礎研 池田研介、足立聡

京大理 戸田幹人

本講演は、研究会では口頭で発表されなかった。余りに、講演数が多く時間の関係上、発表者（池田）が世話人であったこともあって遠慮した方が良いと判断したためである（発表者はすでに前日にも登壇している）。しかし、その後、いったん研究会に発表を予告しながらそれを勝手に取り下げるのも、世話人にあるまじき無責任極まる態度であるとの批判も受けた。そこで、小生としては、口頭発表されるはずであった内容のさわりを記すことで上の批判に答えることにした次第である。（文責 池田）

量子力学がchaos運動の記述に馴染みにくいであろう事は、束縛状態を問題にするかぎり、容易に予想できる。なぜなら、量子波動関数にかんする任意の観測量の期待値は、不連続なエネルギー固有値の差に対応した周波数で振動し、準周期的な運動しか示さないからである。このような性質は量子系において、chaosに対応する現象がないのではないかと言う憶測を生みだした。実際 Planck 定数 $\hbar$ が有限である可ぎり、相空間の容量は $1/h^f$ (f = 自由度) 程度であり、topological entropy を h とすると $e^{ht} = 1/h^f$ より長い周期 t の古典周期解は量子系ではもはや存在（表現）できないと予想される（我々の言う $\log(\hbar)$ 病。Ford等も同様の論拠から量子系における complexity の不在→量子力学の不完全性を主張しているが）。量子chaos系（古典的にchaosをしめす系の量子的対応物をこのように呼ぶことにする）を構成する自由度数が最小の2の場合の研究は広くなされており、その結果は、確かに上の予測をうらずけている。しかし、最近の systematic な研究の結果、自由度数が3以上の量子chaos系では様相が著しく異なっていることが分かってきた⁽¹⁾。すなわち、古典的な意味で chaotic な系が存在するとき、その量子版を2つ以上接触させると、その coupling strength が極めて小さい（古典スケールで見たとき）にもかかわらずほとんど古典系と区別できない、chaos的不安定性あるいはmixing性を、きわめてながいタイムスケールで回復してしまうのである。この事は、一見極めて安定に見える2自由度量子chaos系さえも実は、潜在的に不安定で、他の自由度（量子的）とのごくわずかな（ $O(\hbar^*)$ の）結合で古典カオス的な不安定性

を顕在化させる能力をそなえている事を示唆している（潜在的混合性=' potential for mixing in quantum chaos '）。もし、この事が正しいならば、我々は少数自由度の量子系において、量子chaos が散逸あるいは摩擦の発生の起源になりうることを期待できるのではなかろうか？ 古典カオス（少数自由度）の範疇に於いてすら、この種の問題は、斉藤による線形応答理論の考察をのぞいて、まだ十分に検討されてはいないように思われる（カオスが非可逆性の起源である、とは誰でも言うのに摩擦＝熱の発生という、最も物理的な過程に結びつけた議論はあまりなされていないようだ。こういう地味な問題と結び付けるとカオスのファッショナブルでトレンドイ（！？）な価値が損なわれるためでしょうか？）。

さて、思い切って量子系固有の散逸過程の可能性を検討してみたい。最も基本的な量子散逸過程として、光吸収過程を題材に選んで考察しよう。問題の設定は、簡単である。量子系を用意する。この系の励起状態は制御パラメータ K によって、（古典論の意味で）カオス状態に遷移できるものとする。さて、光があてられ基底状態から励起状態への遷移がおきたとき、物質＝量子系に吸収されるエネルギーの時間変化の様子とスペクトルは K および自由度数の変化と共にどの様に変わるだろうか？ とくに、古典的にカオスになったとき、あるいは、自由度数が増えたときなにが起こるだろうか？ と簡単には言うものの実際の計算は、computer に頼らざるを得ない。CPU time c を評価してみよう。多原子分子の振動modes を想定して、自由度数 f の coupled oscillator を考えよう。自由度当たり level 数 N_L として CPU time = $N_L \cdot f / (\text{時間刻み})$ 。FACOM vp-400 換算で評価すると、 $f=3$ で 100 日、 $f=4$ で 1000 年（！）...。なにか、もっと短い CPU time で計算できる、本質をとらえた簡単な model を導入しないかぎり、解決の道はない。そこで思い浮かぶのが、kicked rotor 系である。しかし kicked rotor 系は光吸収のモデルとして次の致命的欠陥を持っている

- (1) non-autonomous → 保存される energy の不在。
- (2) true ground state の不在 → 吸収－放出 mixture が発生し純粋な dissipation の発生をテストする上で障害
- (3) 自由度数制御の問題。

しかし幸いなことにこれらの欠点は model をうまく設計することによって practical に克服することができる (1) に対しては、自由度が 1 多い autonomous 系に埋め込むことによって、(2) にたいしては真の ground state ではないが optical な ground state を導入することによって、(3) にたいしては、他の自由度を linear oscillators で模擬することによって。提案された model は、1 個の integrable anharmonic oscillator 'A' (phase space は bound されているように設計。bound させるのは、diffus

ion や ionization など無限の彼方にフツ飛ばされることによって生じる非本質的散逸の出現を封じるため。) が $(N+1)$ 個の linear oscillators 'L', 'L_α' ($1 \leq \alpha \leq N$) と couple した系である。A と L の結合 (結合定数 K) によって、K が大きくなると resonance overlapping の結果 chaos が発生する。A のみが optical active で optical field と couple する。A+L は、host system と呼ばれる。他の modes L_α は「お手伝いさん mode (helper modes)」と呼ばれ、A と弱い結合定数 ϵ で couple している。この model を用いるとわずか 20 分程度の cpu time で十分に満足のゆく吸収 spectrum が計算できる (最近 1 分程度で計算できる model が開発された)。

この model は多原子分子の振動運動を比較的よく模写するように設計できるので、まず check をかねて、CCl₄ 分子等の overtone spectrum で観測されている共鳴 broadening が再現できるか否かを調べてみた。A+H が integrable の場合たしかにそれに対応する、現象が起きていることが確かめられた。このことに力をえて simulation を実行した。

さて、以下にこの model の計算機 simulation で得た結果をまとめよう。まず、simulation せずともわかること：

(1) A+H は孤立 helper modes なし ————— spectrum は pure point set. 吸収の時間変化は再帰的。定常散逸発生せず。これは、A+H が古典力学の意味でカオスか否かをとらない。

(2) A+H は古典のいみで integrable, helper modes と couple しかし、カオスをひきおこすほどは ϵ は大きくない。 ————— spectrum は pure point set。しかし helper mode による side peak が一挙に増えるので spectrum は (1) にくらべて、一段と複雑。吸収の時間変化は再帰的。定常散逸発生せず。

(1) (2) は、simulation でも確かめられた。

さて、問題は、

(3) A+H は古典の意味で chaotic. かつ helper modes と couple したときである。このときなにが起きるかは、ほとんど、予測できない。simulation の結果は 次の通り ————— ϵ が 極めて小さいならば、吸収の時間変化は再帰的。定常散逸発生せず。ところが、 ϵ が 0 (右) に達すると、helper mode 数がたった 1 個か 2 個であるにも拘らず、劇的な変化が起こり吸収されたエネルギーは時間と共に見事な比例増加をしめすようになる。比例増加は round-off error が致命的でないことが時間反転テストで保証される time scale を通じて見出だされた。このとき、spectrum は絶対連続、したがってほぼ scale invariant にみえる (厳密には、時間がたつほど peak に self-similar structure が現れる fractal 構造をもった continuous spectrum らしい。)。

この様に、少数自由度の量子系で chaos がからむと、定常な散逸が発生することが確かめ

られた。2自由度chaosのみではなにも起こらない。ところが、それにちよつとした 'helper mode' の介添えがつくと、途端に chaotic mixing が顕在化し定常散逸が現れるのである。A+H系はわざと有限個の level しか持たないように作っているのに、helper mode が無限個の level を持つことが、無限のタイムスケールでつづく定常散逸が発生するためには必要である。可算無限個の level で絶対連続 spectrum が出来ないわけではないが、我々が容易に想像できる例では定常な挙動をつくれそうもない（例： 共鳴する振動外場で変調された linear oscillator. ballistic な変化しか示さない）

有限数のレベルからしかならない量子系で無限の長タイムスケールに渡ってカオスの混合性が持続しないのは、あたりまえのことである。問題は、順位の数が増えていったときに、そのタイムスケールがどの様にレベル数に依存して長くなるかである。我々の系の host system のレベル数は有限しかない。それが、可算無限数のレベルを持つ 'helper' と極くわずかに接触した途端、無限の長タイムスケールに渡ってカオスの混合性が持続される。この事は、接触によって、helper mode の全レベルが混合性を維持するように host system に「組み込まれる（サイドバンドの形成）」事を示唆している。したがって、混合性が維持されるタイムスケールは helper のレベル数と共に正常な増大を示すだろう（もっか研究中。もし helper と接触させないなら $\log(h)$ 病のために、異常が発生）。また、この事は、散逸が発生するとき、系の spectrum がレベル数を幾らふやしても収束しない（spectrum の計算不可能性）性質を持つことを示唆している（もっか研究中）。

定常な散逸が発生する時、コヒーレントな筈の波動関数が腐食しボロボロと砂粒のように崩壊する現象が起きているらしい。この現象は、spectrum の 計算不可能性、adiabatic invariant の消滅、少数自由度量子系での entropy の発生等等、従来の量子力学では考えられなかった種類の問題—量子力学と熱力学のはざまにからむ問題を提出しているように見える。この現象の「中身」の解明は今後の研究の展開に待たねばならない。

＜参考文献＞

- 1) M.Toda, S.Adachi, and K.Ikeda; Suppl Prog Theor Phys N098 (1989)
- 2) 速報は K.Ikeda, M.Toda, and S.Adachi; 'Absorption of Light by Quantum Chaos: Can Quantum Chaos be an Origin of Dissipation?