カオス的動力学の量子相関における役割*

田中篤司†
東京工業大学　理工学研究科 応用物理学専攻

要旨

量子相関の消滅・生成と 系の動力学の定性的な性質との関係を調べる. 具体的な状況として分子の非断熱遷移を念頭におき, model 系として spin-kicked rotor を用いる. rotor (の対応する古典系) が regular な領域では量子相関の強い状態は二つの非摂動準位の偶然的な近縮退により生じるが, これは系の非線形 parameter の増大により破壊される. 一方, rotor が chaos 的な領域では, 非線形 parameter の増大により量子相関が強まることが数値的に示された. これは, chaos 的な場合と regular な場合で量子相関を生成する機構が異なることを示唆する.

1　はじめに

自由度が 2 以上の有限自由度の量子系を考える. 量子相関とは (1) 系の記述として全系を複数の部分系に分割したときに; (2) 部分系の間に現れる非古典的な相関のことである. 量子相関を持つ状態は古典的に理解しがたい状態である. すなわち, 部分系はそれぞれ定まった状態をもたず, 系の全体としてのみ定まった状態にある (d'Espagnat 1976).

ところで, そもそも量子論では自由度という概念は内在的にはなくて, 状態 vector の表現の選択の際に初めて現われるものである. 同様に, 量子系における部分系という概念は量子論に内在するものではなく系を記述する際の我々の恣意的な選択である. 量子系の分割は 部分系に属する作用素の集合の組, あるいは同等なことだが部分系の Hilbert 空間達から全系の Hilbert 空間への unitary 写像で定まる (Tanaka 1996a)[1]. 古典的に部分系を定めた場合でも, 対応する量子系での部分系の設定にはまだ任意性が存在して, "系の分割" を定めたときに初めてその任意性が消える. このため部分系の間に量子相関が ある・ない という命題の回答は系の分割に依存する. 量子論における 部分系の設定 = 系の分割 は恣意的ではあるが我々が物理を語るときには避けることができないという立場で以下の議論を進めていく.

量子相関の説明として具体例をあげてみる. とりあえず上で述べた系の分割の恣意性を無視した通常の叙述をする. 部分系 X,Y を持つ二自由度系 S を考える. 部分系に対応する Hilbert 空間を それぞれ $\mathcal{H}_X, \mathcal{H}_Y$ と記す. このとき, 全系の Hilbert 空間は $\mathcal{H}_{\rm S} = \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$ と書ける. 全系 S の状態のなかには部分系 X,Y のあいだに量子相関を持つ状態と持たない状態がある. まず, 量子相関を持たない状態の方が簡単なので先に示す. これはいわゆる product state と呼ばれているもので全系の 状態 vector $|\Psi\rangle$ が部分系の Hilbert 空間の vector $|\phi_X\rangle, |\phi_Y\rangle$ の積

*1995 年 3 月 7 日　第 3 回『非平衡系の統計物理』シンポジウムポスター発表より.

†e-mail: atanaka@aa.ap.titech.ac.jp

[1] 系の分割についてのより詳しいことは Appendix を 参照のこと.

で書ける場合である．つまり，$|\Psi\rangle = |\phi_X\rangle \otimes |\phi_Y\rangle$ が成り立つときである．このとき，部分系の状態はそれぞれ独立に定まる．しかしながら一般に $|\Psi\rangle$ は product state にならない．この場合，各々の部分系には状態を与えることはできない．この事態のことを，部分系 X, Y の間に量子相関があるという．

上の叙述について，分割の恣意性を意識した補足をする．まず $\mathcal{H}_X, \mathcal{H}_Y$ であるが，これらは 系 X, Y が通常の意味で全く相互作用しないときの 独立した系でのそれぞれの Hilbert 空間である．tensor 積による関係式 $\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$ は $\mathcal{H}_X \times \mathcal{H}_Y$ から $\mathcal{H}_S$ へのひとつの unitary 写像を指定している．この場合には構成的な分割，すなわち相互作用の無かった系 X, Y の全系への単純な埋め込み，を暗に仮定していることになる．"$|\Psi\rangle$ が product state で書ける" というときの product state も，ここでは構成的な分割での product state の意味に制限している (Tanaka 1996a).

本論では量子系の動力学の性質と量子相関の発現の間の関係を探ることにする． 具体的な議論のために非断熱遷移の問題を考える (review として Nakamura 1992). 分子の世界では，電子と核の運動の time scale がかけ離れているため energy の低い場合は断熱近似 (Born and Oppenheimer 1927) が通例よく成り立っていて，このとき 電子の状態は時間発展の間特定の一つの断熱準位に留まっているとみなせる．しかしながら，断熱状態間の energy の差が比較的小さくなるところ（疑似交差点）では，特定の断熱準位にあった電子の他の断熱準位への遷移が顕著になる．これが 非断熱遷移である．核と電子の間に量子相関を持たない状態から出発しても，非断熱遷移が起こるにつれて核と電子の間に量子相関が生まれてくる[2]. このため 非断熱遷移の系の動力学からの影響を調べることは，量子相関の生成の系の動力学からの影響を調べることと同等である．非断熱遷移の原因は，素過程を考えると，核の有限速度での運動である．核の運動の大域的な性質は非断熱遷移の生成にどう関係するかを以下では調べる．

量子系の動力学の定性的な性質としてここでは量子 chaos に着目する．量子系における chaos は古典系と異なり well-defined な定義は無い．しかしながら，少なくとも量子古典対応のある系では量子 chaos とよばれる class の現象があると考えられている (例えば 足立 1994 とその参考文献). すなわち系の根底にある "古典力学" の定性的な性質，regular(可積分的) あるいは chaotic，が対応する量子系の定性的な性質に遺伝すると考えられる．この遺伝の形態は 古典系で見られる動力学と量子系での動力学を対照したとき至極当然にみつけることができる (例えば Toda and Ikeda 1987).

非断熱遷移はそれ自体古典対応物が存在しない純量子的な過程である．しかしながら，非断熱遷移を起こす系の "要素" を考えてみると電子は量子化された対象ではあるが，核はある程度古典的な描像が残っていることがわかる．実際 Pechukas は Feynman 核の経路積分表式の半古典的評価を目的として核に関する運動方程式を導いた (Pechukas 1969). このとき，電子の自由度を形式的に消去して，核に対する 軌道描像 = 運動方程式 を得た代償として，その運動方程式は 時間について非局所的である．すなわち，Pechukas の運動方程式は核の軌道に対する汎関数方程式である．とにかく，変則的な形ながらも非断熱遷移の核の自由度には量子古典対応が存在する．この意味で非断熱遷移の動力学にも量子 chaos があると考える．

2 量子相関の尺度としての偏極率

系の規格化された密度行列 $\hat{\rho}$ について，純粋状態からの距離を測る偏極率 $\hat{P}$ を次のように定義する:

$$\hat{P} = |2(\hat{\rho} - \frac{1}{2}\hat{1})|. \tag{1}$$

[2]この議論では断熱的な系の分割を採用している．

ここで $|\cdot|$ は絶対値をあらわす. $\hat{P}$ の固有値は $[0,1]$ に値を持つ. 特に 1 に等しい固有値を持つときのみ, 系の状態は純粋である. 偏極率は 密度行列 $\hat{\rho}$ が純粋状態であるときゼロである量 $\hat{\rho}^2-\hat{\rho}$ を適当に規格化したものである.

二準位系については $\hat{P}$ は実数と同一視できる (Landau and Lifshitz 1977, §59):

$$P = |\langle\hat{\sigma}\rangle|. \tag{2}$$

ここで $\hat{\sigma}$ は二準位系の Pauli 作用素. 期待値 $\langle\hat{\sigma}\rangle$ は Bloch vector と呼ばれる量で (Feynman et al. 1957), P は Bloch vector の大きさである.

以下の議論では全系が純粋状態である場合の部分系の偏極率を考える. このとき偏極率は着目する系と外界の量子相関をあらわす. 偏極率が 1 である (固有値 1 を持つ) 場合, 着目する部分系と外の系との間の量子相関は存在しない. また, 偏極率が小さければ小さいほど量子相関の程度は強いと解釈できる. 改めて注意するが, このような定義で得られた部分系の偏極率は系の分割に依存する量である.

3 spin-kicked rotor model

3.1 model の定義

分子での非断熱遷移の問題を考えるのだが. ここでは, 次の特徴を持つ仮想的な model 分子を考える.

- "電子" と "核" を備え持つ.
- "電子" は "核" に対して大変短い time scale を持つ. 言い換えれば, "電子" を 量子論的に 励起するための energy scale は ("核" に比べて) 大変大きい. このため 電子の自由度は Hilbert 空間のなかの energy の低い二状態のみを考慮すれば十分である.

ここでは, そのような model 分子として spin-kicked rotor (Scharf 1989) を採用する. はやい "電子" を二準位系 $(\hat{1}_e, \hat{\sigma})$, おそい "核" を kicked rotor (P, Q) と model 化する. ここで $\hat{1}_e$ は "電子" の恒等作用素, $\hat{\sigma}$ は pauli 行列である. 電子と核の Hilbert 空間をそれぞれ $\mathcal{H}_e, \mathcal{H}_n$ と記す[3].

系の Hamiltonian はつぎのとおりである:

$$\begin{aligned}\hat{H}(t) &= T(\hat{P})\otimes\hat{1}_e \\ &\quad +\sum_{n\epsilon\mathbf{Z}}\delta(t-n)\ \hat{H}_{\mathrm{BO}}(\hat{Q}).\end{aligned} \tag{3}$$

ここで, 核の kinetic term $T(P) = \frac{1}{2}P^2$, Born-Oppenheimer type の電子と核の相互作用項 $\hat{H}_{\mathrm{BO}}(Q) = \phi(Q)\hat{1}_e + \mathbf{B}(Q)\cdot\hat{\sigma}$ を導入した. $\mathbf{B}(Q)$ の中に電子と核の相互作用がこめられている. $\phi(Q)$ を適当に選択することで, 電子と核の間の相互作用を変化させずに核の動力学の性質を変化させることができる[4]. 核の座標 Q には $[0, 2\pi)$ で周期境界条件を課す. 非断熱遷移の問題でよく考えられるような散乱問題ではなくて, 束縛状態の問題を考える.

spin-kicked rotor の核の相空間にみられる動力学は核の非線形力学系としての運動を抽象化しているととらえることができる. この model は写像系であるため, 系の動力学の定性的な性質, 大雑把にいえば系が regular か chaotic か, を parameter にして系の性質を調べることが容易である. 本論では余談になるのだが, もうすこしこの model の特徴を述べる. spin-kicked rotor model は spin-boson model (Legget *et al.* 1987) を構成する boson 浴 (通例は無限自由度) の部分を kicked rotor で置き換えたものとみなせる (とりあえず spin-kicked rotor とゆう名前の由来はここにある). spin-kicked rotor で 核 (rotor) が regular である場合はともかく, chaotic である場合 rotor の自由度は電子 (spin) に対して noise の役割を果たす. 実際, 後に示す数

[3] 系の分割のことを念頭においてより厳密な言葉使いをすると, 電子と核に通常の意味で全く相互作用のないときそれぞれの状態を表す Hilbert 空間は独立に書けて それを $\mathcal{H}_e, \mathcal{H}_n$ と記す, となる.

[4] これは構成的な分割・断熱的な分割のどちらでも正しい

値計算の結果は rotor が chaotic である場合 spin が緩和することを含意する。そのため noise (もしくは環境) と結合した二準位系の問題の多くと関与することができる. boson 浴との 大きな違いは "温度" が定義されないことである. 一方, spin-kicked rotor は系が単純なため, 固有状態など系の詳細な情報を実際に "見る" ことが数値的に可能である. これは無限系もしくは多自由度系の熱浴をもつ系に無い利点である.

spin-kicked rotor が通常の分子と比べて大きく異なるのは, Hamiltonian でみたときに, 電子と核の相互作用が時間に対して周期的かつ δ- 関数的に入ってくることである. 系は unitary な時間発展を行なうが, energy は保存しない.

以下の計算例では特に,

$$\phi(Q) = K\cos Q \tag{4}$$
$$\mathbf{B}(Q) = (J, 0, (\cos Q - \cos Q_c)\delta K) \tag{5}$$

を用いる. K は potential の振幅だが, ここでは 系の 非線形 parameter として 用いる. δK は 以下で定義する二枚の透熱 potential 面の形状の違いである. J は透熱的な結合項である. Q_c は avoided crossing の位置である.

$\mathcal{H}_e$ の基底として 透熱基底と 断熱基底の 二種類を導入する. 透熱基底 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ は $\hat{\sigma}_z$ を対角化する基底を選ぶ. 透熱基底の選択は ここでは model の構成に由来するが散乱問題と異なり客観的な基準は無い. $\hat{\sigma}_z$ を対角化する基底を選ぶ根拠は強いていえば, 透熱極限 ($J \to 0$) の場合, この表示での Hamiltonian の非対角項を摂動とみなせるということである. 断熱基底 $\{|\mathrm{g}(Q)\rangle, |\mathrm{e}(Q)\rangle\}$ の定義は核の座標 Q を parameter としたときの相互作用 Hamiltonian $\hat{H}_{\mathrm{BO}}(Q)$ を対角化するものである. 添字 g は 断熱的な ground state を, 添字 e は断熱的な excited state を表す. 断熱基底の 物理的な由来は その名の通り 断熱近似にある (Born and Oppenheimer 1927). つまり, 核の運動が電子に比べて遅い極限では, 電子は断熱状態間の量子遷移を行なわなくなる.

以上で述べた電子の基底の選択に伴い幾つかの potential 面が導入される (図 1). 透熱 potential 面 $V_{\uparrow\uparrow}(Q), V_{\downarrow\downarrow}(Q)$ は 次のように 定義される:

$$V_{\uparrow\uparrow}(Q) = \left\langle \uparrow \left| \hat{H}_{\mathrm{BO}}(Q) \right| \uparrow \right\rangle, \tag{6}$$
$$V_{\downarrow\downarrow}(Q) = \left\langle \downarrow \left| \hat{H}_{\mathrm{BO}}(Q) \right| \downarrow \right\rangle, \tag{7}$$

一方, 断熱基底の vector $(|\mathrm{g}(Q)\rangle, |\mathrm{e}(Q)\rangle)$ に対して 断熱 potential 面 $\Lambda_{\mathrm{g}}(Q), \Lambda_{\mathrm{e}}(Q)$ が次のように定まる:

$$\hat{H}_{\mathrm{BO}}(Q)\,|\mathrm{g}(Q)\rangle = \Lambda_{\mathrm{g}}(Q)\,|\mathrm{g}(Q)\rangle, \tag{8}$$
$$\hat{H}_{\mathrm{BO}}(Q)\,|\mathrm{e}(Q)\rangle = \Lambda_{\mathrm{e}}(Q)\,|\mathrm{e}(Q)\rangle, \tag{9}$$

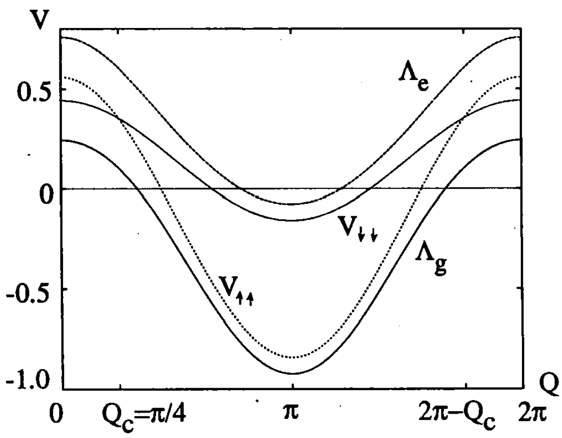


図 1 : 4 つの potential 面
$K = 0.5, \delta K = 0.2, J = 0.25$

$\hat{H}_{\mathrm{BO}}(Q)$ は 2×2 の行列なので, これらの potential 関数を陽に書き下せて,

$$V_{\uparrow\uparrow}(Q) = \phi(Q) + B_z(Q), \tag{10}$$
$$V_{\downarrow\downarrow}(Q) = \phi(Q) - B_z(Q), \tag{11}$$
$$\Lambda_{\mathrm{g}}(Q) = \phi(Q) - |\mathbf{B}(Q)|, \tag{12}$$
$$\Lambda_{\mathrm{e}}(Q) = \phi(Q) + |\mathbf{B}(Q)|, \tag{13}$$

である. これらの potential 面の物理的意味は後述する.

spin-kicked rotor は周期外力系なので, その周期に対する定常問題を考えることができる. ここで

一周期の時間発展演算子である Floquet 演算子 $\hat{U}$ を導入する. 後で検討する周期外力系での定常問題は Floquet 演算子の固有値・固有 vector の問題である. $\hat{U}$ の定義は次のとおり:

$$\begin{aligned}\hat{U} &= \overleftarrow{\exp}[\frac{1}{i\hbar}\int_{n-0}^{n+1-0} dt\hat{H}(t)], \\ &= \hat{U}_{\mathrm{F}} \cdot \hat{U}_{\mathrm{K}}. \qquad (14)\end{aligned}$$

$\overleftarrow{\exp}$ は 時間順序積をあらわす. ここで一周期の始めを kick の寸前 $(n-0)$, 終わりを次の kick の寸前 $(n+1-0)$ と約束した. $\hat{U}$ を構成する $\hat{U}_{\mathrm{F}}$ と $\hat{U}_{\mathrm{K}}$ の定義は

$$\hat{U}_{\mathrm{F}} = \exp[\frac{1}{i\hbar}T(\hat{P})] \otimes \hat{1}_{\mathrm{e}}, \qquad (15)$$

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\mathrm{K}} &= \exp[\frac{1}{i\hbar}\hat{H}_{\mathrm{BO}}(\hat{Q})], \qquad (16)\\ &= \int dQ \sum_{\alpha=g,e} |Q,\alpha\rangle\langle Q,\alpha| \\ &\quad \times \exp[\frac{1}{i\hbar}\Lambda_\alpha(Q)], \qquad (17)\end{aligned}$$

である. $|Q,\alpha\rangle$ は ket の tensor 積 $|Q\rangle\otimes|\alpha(Q)\rangle$ を意味する. ここで, 二つの時間発展演算子 $\hat{U}_{\mathrm{F}}, \hat{U}_{\mathrm{K}}$ の解釈を記す. $\hat{U}_{\mathrm{K}}$ は透熱基底からみると電子と核の相互作用の項 (kick part) で, 電子状態の遷移と核の時間発展の両方が起きる. 断熱基底でみると断熱的な時間発展であり, 電子状態は断熱状態間の遷移が無い. 核は各断熱状態ごとに 断熱 potential 面にしたがって運動する. 一方, $\hat{U}_{\mathrm{F}}$ は透熱基底からみると核の kinetic part のみ (free part) で, 断熱基底でみると非断熱的な時間発展で電子と核のの相互作用項である.

3.2 spin-kicked rotor model の parameter

spin-kicked rotor model は沢山の parameter をもつが, 以下の力学系や関数の定性的な振るまいから spin-kicked rotor model の定性的な振舞の多くは容易に理解できる.

(1) 遷移を考慮しないときの "核" の 4 つの古典力学: これらは以前に述べた断熱 potential 面 $\Lambda_{\mathrm{g}}(\cdot), \Lambda_{\mathrm{e}}(\cdot)$, 透熱 potential 面 $V_{\uparrow\uparrow}(\cdot), V_{\downarrow\downarrow}(\cdot)$ のそれぞれに対応する古典力学である. 量子古典対応を持つ系では半古典論を通じて古典力学から量子論が定性的に理解できる (Berry and Mount 1972). spin-kicked rotor model は量子古典対応が通常の意味ではないため, Pechukas の半古典論での運動方程式から出発するのが正統的である. しかしながら Pechukas の半古典論の実行は困難があるため, ここでは, より単純な見方, すなわち, 量子遷移を無視した古典論, を採用する. この場合, 核は一自由度の写像系となり相空間の解析は容易である. 代償としては 統一的な古典力学 (Pechukas の半古典論での運動方程式) を用いないため, それぞれの古典力学が量子系の解釈にいつでも意義を持つわけではないことがある. 透熱 potential 面は 断熱極限では意味を持たず, 逆に断熱 potential 面は 透熱極限では意味を失う.

potential 面は 図 1 を参照のこと. より動力学的な情報を多く得るには, 相空間上の情報を得る必要がある. "4 つの古典力学" は それぞれ 1 自由度の写像系であるため Poincaré section を得るのは容易である.

(2) 透熱結合: 透熱極限の場合, "非対角的な" 結合項の大きさを透熱的な結合の目安とできる. ただし, 半古典極限 $\hbar \to 0$ では 解釈に注意が必要である. 本稿では断熱極限の計算例のみを示すので詳細は省く.

(3) 非断熱結合 $\Xi_{\alpha\beta}, \Xi^{+}_{\alpha\beta}$. 平均的な非断熱結合 $I_{\alpha\beta}$: 断熱極限のときに有用である.

非断熱結合の定義は次のとおりである:

$$\Xi_{\alpha\beta}(Q'', Q') = \langle \xi_\alpha(Q'')|\xi_\beta(Q')\rangle. \qquad (18)$$

$\hat{U}_{\mathrm{F}}$ による 1 step の時間発展での非断熱遷移を考えるには次の形の非断熱結合が有用である (図 2):

$$\Xi^{+}_{\alpha\beta}(Q, \delta Q) = \Xi_{\alpha\beta}(Q+\delta Q, Q). \qquad (19)$$

$\hat{U}_{\mathrm{F}}$ が 非断熱遷移を 引き起こす. (Q,P) に 中心を持つ断熱状態 β の 最小波束から出発して $\hat{U}_{\mathrm{F}}$ で 系を 時間発展させた後で, 断熱状態 α の 確率振幅はおよそ $\Xi^{+}_{\alpha\beta}(Q,P)$ である.

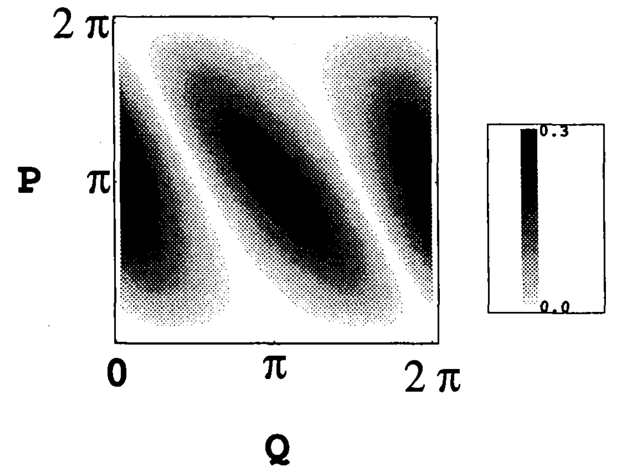


図2: 位相空間上の非断熱結合 $|\Xi^{+}_{\alpha\beta}(Q,P)|^2$
$\delta K = 0.2, J = 0.25, Q_c = \pi/4$

連続時間の系で用いられる (微分的な) 非断熱結合

$$A_{\alpha\beta}(Q) = i \langle \xi_\alpha(Q) | \frac{\partial |\xi_\beta(Q)\rangle}{\partial Q}$$

と非断熱結合 $\Xi^{+}_{\alpha\beta}(Q,\delta Q)$ との関係はつぎのとおり:

$$\begin{aligned}\Xi^{+}_{\alpha\beta}(Q,\delta Q) &= \delta_{\alpha\beta} + iA_{\beta\alpha}(Q)\delta Q \\ &\quad + \mathcal{O}(\delta Q^2). \end{aligned} \tag{20}$$

つぎに, 平均的な非断熱結合 $I_{\alpha\beta}$ を定義する:

$$\begin{aligned} I_{\alpha\beta} &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{2\pi} dP \int_0^{2\pi} dQ \\ &\quad \times |\Xi^{+}_{\beta\alpha}(Q,P)|^2. \end{aligned} \tag{21}$$

これは 非断熱結合を相空間上で平均したもので系が断熱的か透熱的かを判断する目安になる. 透熱極限では相空間上の準位交差線 (非断熱結合によって定まる) の囲む面積と等しく, 透熱的な結合が大きくなるにつれ通常は減少し断熱極限で zero になる.

4 数値実験の結果

ここでは spin-kicked rotor の固有状態に関する数値的な結果を示す. kick 系の固有状態は Floquet 演算子 $\hat{U}$ の固有状態である (擬固有状態ともよばれる):

$$\hat{U}\,|\psi_n\rangle = e^{E_n/i\hbar}\,|\psi_n\rangle. \tag{22}$$

E_n は quasi-enegy とよばれる. これは, 一周期あたりの平均 energy を表す. 連続時間の系の固有状態と同様に, Floquet 演算子の固有状態は系の動力学の古典的な性質を半古典論を通じて反映している.

ここで示す結果の数値計算の parameter は次のとおり. $\delta K = 0.2, J = 0.25, Q_c = \pi/4$ として非断熱結合は一定に保つ (図 2). この状況では非断熱結合は小さいので, 系は断熱的であるとみなせる. この条件下で K を動かして系の性質の応答を見る. Planck 定数は $\hbar/2\pi = 0.007816$ とする. これは, 相空間の中の $[0,2\pi)\times[0,2\pi)$ の領域が約 128 個の量子状態に対応することを意味する. kicked rotor の座標 Q ($[0,2\pi)$の周期境界) は離散化して近似するのだが, そのときの格子点数を $N = 512$ とする.

系は断熱的とみなせるので, 遷移の無い古典力学として断熱 potential 面 $\Lambda_g(\cdot), \Lambda_e(\cdot)$ に対するものが, 系のおよその振る舞いを教える. これら二つの古典系の Poincaré section を 図 3 に示す. いま用いている parameter では Poincaré section の様子は standard map と大体同じである. K を増やすにつれて, 相空間の様子が regular から chaotic に変化していく. $\Lambda_g(\cdot)$ についての 古典力学は standerd map の非線形 parameter で書いてみると, $K_{\mathrm{standard}} \sim K + \delta K$で, $\Lambda_e(\cdot)$ については$K_{\mathrm{standard}} \sim K - \delta K$である. これらの古典力学で大域的な chaos が発生するのは $\Lambda_g(\cdot)$ で $K \sim 0.8$, $\Lambda_e(\cdot)$ で $K \sim 1.2$ である. これらの古典力学で大域的な chaos のある領域を "chaotic", そうでない領域を "regular" と 呼ぶことにする.

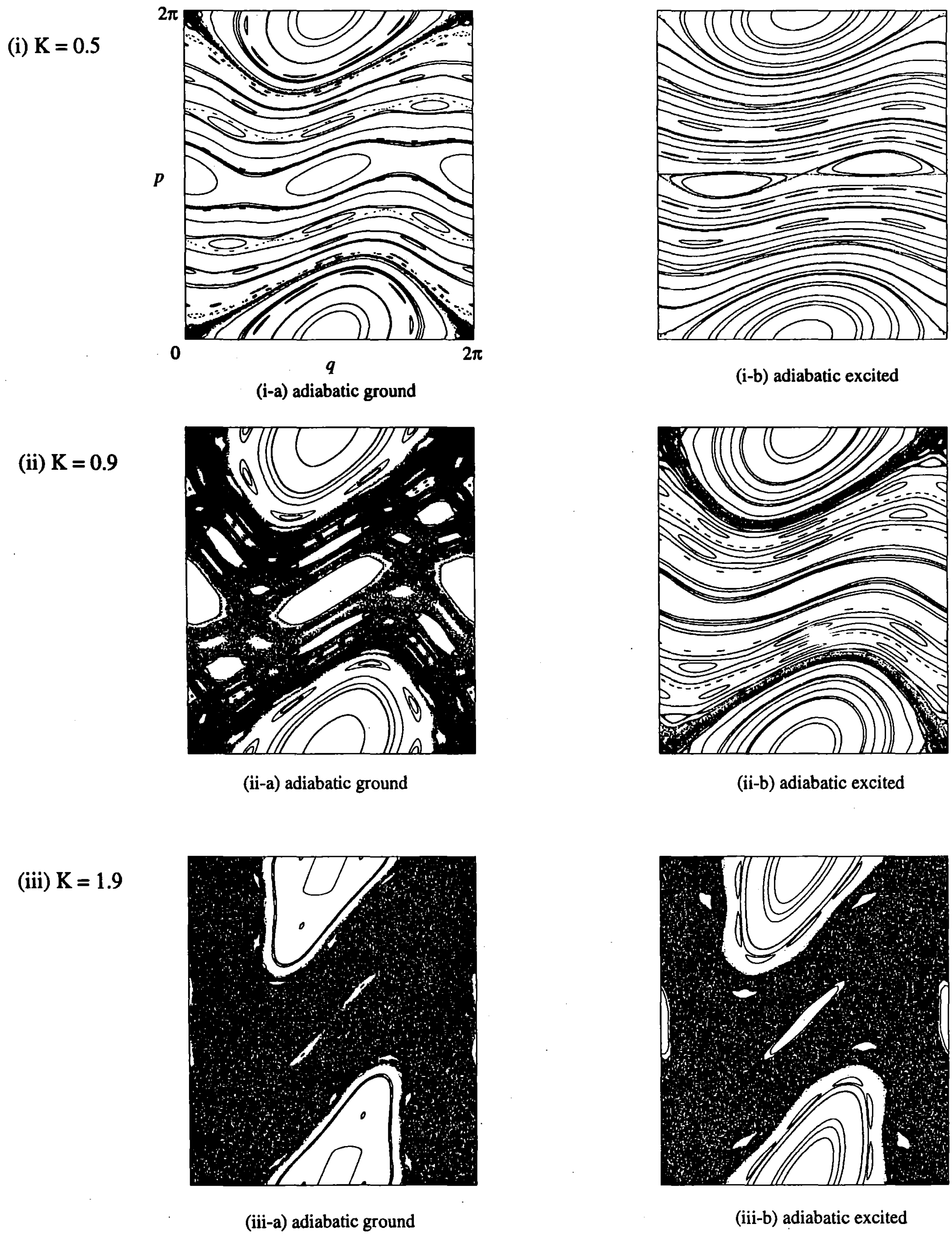


図 3 : 断熱 potential 面に対する 古典力学の Poincaré section

$\delta K = 0.2 \quad J = 0.25 \quad \dot{Q}_c = \pi/4$

4.1 ひとつの Floquet 演算子に関する "ensemble", 統計量

Floquet 演算子に関する "統計量" として．固有関数に関する量を "ensemble" と考えてみる．特に固有状態から得られる部分系の偏極率に注目する．Floquet 演算子 $\hat{U}$ をひとつ考える．$\hat{U}$ の固有関数の組 $\{|\psi_n\rangle\}_n$ が求まったとする．ひとつの固有関数 $|\psi_n\rangle$ に対する電子の偏極率を考える．電子の断熱基底に関する部分密度行列 $\mathrm{Tr}^{\mathrm{an}}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ から得られる偏極率を P_n^{ae} とおく．また，電子の透熱基底に関する部分密度行列 $\mathrm{Tr}^{\mathrm{cn}}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ から得られる偏極率を P_n^{ce} とおく[5].

偏極率の集合 $\{P_n^{\mathrm{ae}}\}_n$ を ensemble とみなして，ensemble についての等重率平均 $P^{\mathrm{ae}} = \langle P_n^{\mathrm{ae}}\rangle_n$ を考える．$P^{\mathrm{ae}}, P^{\mathrm{ce}}$ の parameter 依存性，特に非断熱結合を固定したときの核の dynamics に対する依存性を調べた．

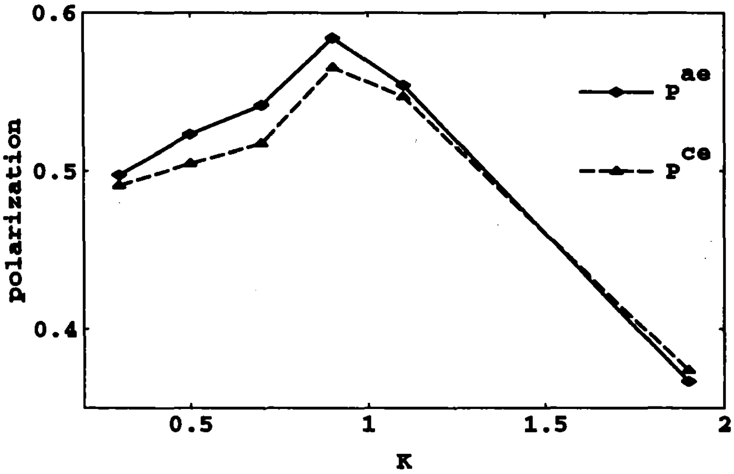


図 4：平均の偏極率 $P^{\mathrm{ae}}, P^{\mathrm{ce}}$ の "核" の 動力学への依存性
K は 核の運動の非線形 parameter

図からもあきらかなように，核の動力学の 非線形 parameter K に対して非単調な振舞が起こる．K に対して $P^{\mathrm{ae}}, P^{\mathrm{ce}}$ が上昇するのは "regular" な領域においてである．逆に K に対して $P^{\mathrm{ae}}, P^{\mathrm{ce}}$ が減少するのは "chaotic" な領域においてである．

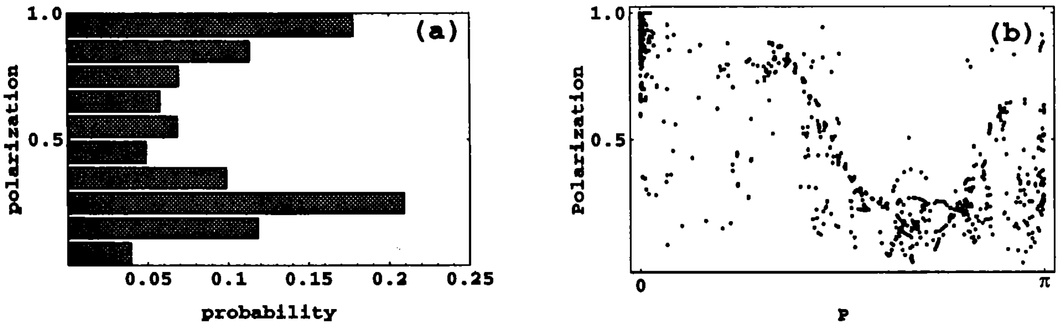
P^{ae} と P^{ce} の間には定性的な差異は無い．但しこれは parameter が特殊な値であることが原因であって一般的ではない．系は断熱的であるといえるのだが，透熱的な結合行列要素 J が大きいため $\hat{\sigma}_x$ を対角化する基底が実は "よい" 透熱基底になっている．このため，ここでは $J \to 0$ の極限での "透熱的" とは別の意味で系が透熱的になっている．但し，Q に対して定数になっているこのときの透熱 potential 面はこの系の理解に全く貢献しない．

4.2 "ensemble" の詳細について

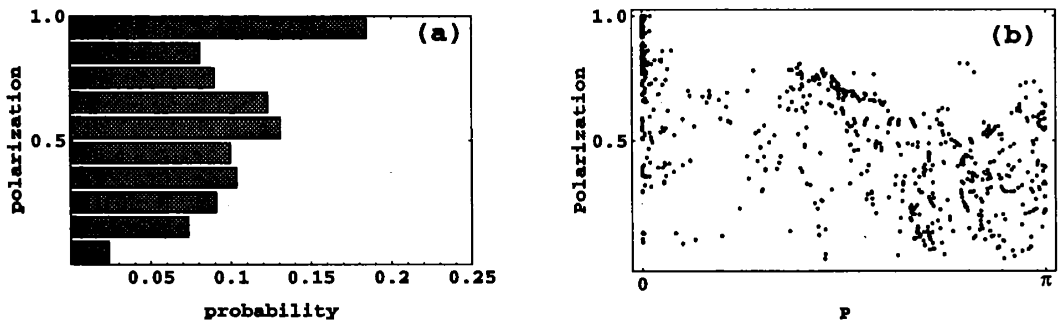
各固有状態 $|\psi_n\rangle$ に対して，核の運動量の期待値 $P_n = \left\langle \psi_n \middle| \hat{P} \middle| \psi_n \right\rangle$ と運動量の標準偏差 $\sigma_{P,n}$ を考える (Toda and Ikeda 1987)．"ensemble" $\{P_n^{\mathrm{ce}}, P_n^{\mathrm{ae}}, P_n, \sigma_{P,n}\}_n$ に関する相関を考える．その一例として 偏極率 P^{ae} の値分布 および運動量と偏極率の相関を図にした (図 5)．これらの図が 図 4 で示した 偏極率の動力学への依存の機構を説明する．系が regular である場合，Einstein-Brillouin-Keller の半古典量子化 (Einstein 1917, Brillouin 1926,

[5] これら二つの "電子" の偏極率の違いは系の分割の違いに由来する (Tanaka 1996a)．すなわち，$\mathrm{Tr}^{\mathrm{an}}$ は断熱的な分割での核の自由度に関する部分 trace で，$\mathrm{Tr}^{\mathrm{cn}}$ は構成的な分割での核の自由度に関する部分 trace である．これらの部分 trace の定義は Appendix を参照のこと

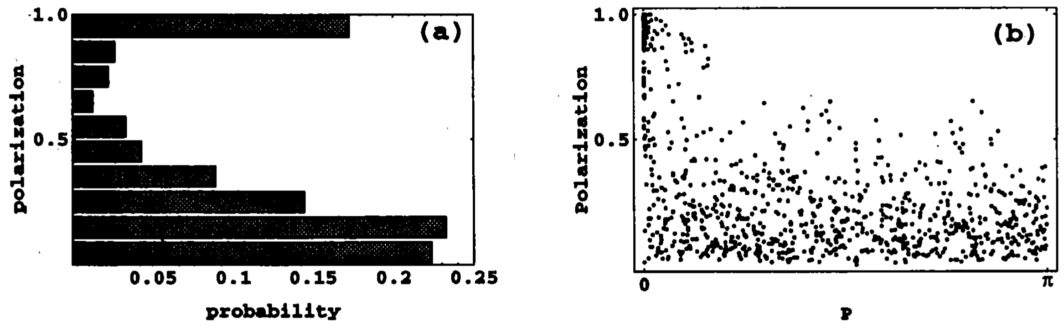
Keller 1958) より簡単に説明できるように，これらの固有関数は相空間表示において古典系の torus に対応する領域に確率振幅を集中させている．このため，運動量の期待値によって固有関数の相空間での居場所が推定できる．系が chaotic な場合には 運動量と偏極率の相関に構造が無くなって運動量の期待値のような単純な量では固有状態の様子はわからない．



(i) $K = 0.5$



(ii) $K = 0.9$



(iii) $K = 1.9$

図 5：偏極率分布と 運動量対偏極率の相関

(i) ($K = 0.5$) 核の運動量 $P \sim 0.7\pi$ に偏極率 $P^{ae} \sim 0.25$ の分布の cluster がある．これは摂動論的に説明できるものである．核の dynamics は “古典論” でも量子論でも “regular” である．

(ii) ($K = 0.9$) 上述の cluster が $P^{ae} \sim 0.6$ に移動する． 核の dynamics は “古典論” では $V_{\uparrow\uparrow}(Q), \Lambda_g(Q)$ に対応するものが大域的な chaos になり，他は大域的には regular のままである．量子論の方では固有関数は運動量空間にはあまり広がらなくて **(i)** と同程度である．

幾つかの固有関数では pattern の乱れが見つかりはじめる. 大域的な波動関数の広がりが無いという点では量子論での核の dynamics は "regular" といえる.

(iii) ($K = 1.9$) 分布の cluster は $P^{ae} \sim 0.2$ に移動する. 核の dynamics は "古典論" では chaotic になり, 量子論の方でも 固有関数の pattern に強い乱れや運動量方向への広がりが現われる. この意味で, 量子論での核の dynamics は "chaotic" といえる.

5　数値実験の解釈

非断熱遷移の問題では, 電子状態の遷移が原因となって核と電子の間の量子相関が生成される. ここでは, 二つの量子相関の生成の要因, ひとつは "核" と "電子" の 結合項を摂動論的に, もうひとつは "核" の動力学を定性的に検討する.

5.1　摂動論的な場合

透熱的な結合が摂動論的に扱える場合を考える. ここでは固有状態についての議論を行なう. 結合の大きさを $J(>0)$ とする. 結合がない場合の二つの固有状態の線形結合で, 結合のある場合の固有状態がよく近似できるとする (図6). 一方の状態は$|\phi_m\rangle \otimes |\uparrow\rangle$, もう一方は$|\psi_n\rangle \otimes |\downarrow\rangle$と書けるとする. また, 結合の無いときの二つの状態の energy を それぞれ f_m, g_n と書く. つまり, 注目している状態に対しては系の Hamiltonian は次のように書けるとする:

$$\hat{H}_{\mathrm{truncate}} = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} \langle\phi_m,\uparrow| & \langle\psi_n,\downarrow| \end{array} \\ \begin{array}{c} |\phi_m,\uparrow\rangle \\ |\psi_n,\downarrow\rangle \end{array} & \begin{pmatrix} f_m & JS \\ JS & g_n \end{pmatrix} \end{array}$$

ここで, 重なり積分 $S = \langle\phi_m|\psi_n\rangle$ は正の実数であるとする. $\hat{H}_{\mathrm{truncate}}$ は二つの状態 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ の間の tunneling が環境 (この場合は核の自由度) と相互作用して, tunnnel matrix element が J から SJ へ effective に減少したことを表しているとも読める.

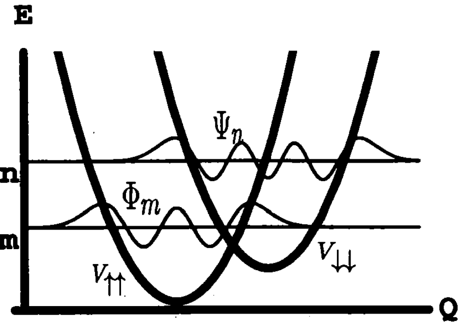


図 6: 二つの透熱的な電子状態 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ に対する透熱 potential 面と 結合の無い場合の固有状態 (模式図)

$\hat{H}_{\mathrm{truncate}}$ は 二つ 固有状態を 持つ. それぞれの固有状態から 密度行列を作り, 核の 自由度の 情報を 部分 trace で 消去する. その結果得られる 電子の 部分密度行列から 偏極率を求める. どちらの固有状態から得られる偏極率も等しくて, その値は次のようにあらわされる (図7):

$$P = \left(\frac{a^2 + S^2(JS)^2}{a^2 + (JS)^2}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{23}$$

ここで $a = (f_m - g_n)/2$ は結合する二状態の無摂動時の energy 差に比例する.

つまり, 結合 J が大きいほど核と電子の間の量子相関が大きいことになる. 但し, 偶然縮退 $f_m = g_n$ の起こるような特別な対称性が存在するときではこの限りではない. そして量子相関の強さは $J \to \infty$ の極限では重なり積分 S で特徴づけられる.

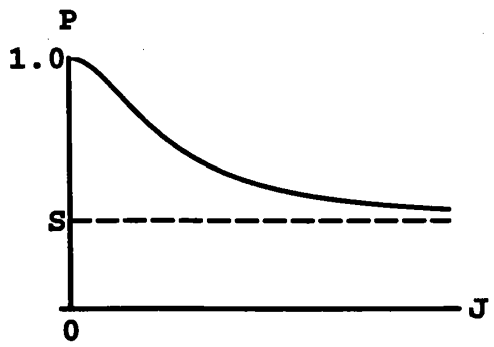


図 7 : 偏極率 P の 結合 J 依存性

但し, 以上の議論は摂動論に基づくものなので, J が小さいとき, つまり diabatic な極限ではこの議論は そのまま適用できる. J が大きいとき, つまり adiabatic な極限では断熱近似 (Born-Oppenheimer 近似) から 摂動論を考えることでこの議論が適用できる. そのときの状態間の結合項は非断熱結合を考えることになる.

図 5(i) にみられる核の運動量 $P \sim 0.7\pi$ での偏極率 $P^{ae} \sim 0.25$ の分布の cluster は, 非断熱結合による摂動論的な非断熱遷移によってできた量子相関を表す.

摂動論的に量子相関を持つ状態を作るには, 二つの無摂動状態 $|\phi_m\rangle$ と $|\psi_n\rangle$ の間で固有 energy の差 a がほぼゼロである, つまり, 偶発的な近縮退が起こる必要がある. 一方, 重なり積分は S は $\mathcal{O}(1)$ である必要がある. 系の動力学が regular な場合は, 特定の無摂動状態の組についてのみこの様な条件が成り立ち, 量子相関が強い状態ができる.

これらの状態に対して系の parameter を変化させたときの様子を考える. 非線形 parameter K の値を増大させると, 図 5(i) にあった 分布の cluster が図 5(ii) のように移動する. このこともまた摂動論的に説明できる: 非線形 parameter K を動かすと, a, S ともに, それに対して値が変動する. a の値は元々小さいため変動は相対的に大きい. つまり, 偶発的な近縮退が破壊される. 一方, S の値の変動は相対的に小さい. この偶発的な近縮退が破壊されることで, 摂動論的に発生していた量子相関が破壊される. (別の parameter 範囲だが, この現象の解析的な扱いが Tanaka 1996b にある).

5.2 古典対応のある自由度 - 核の動力学の効果

ここでは量子相関に関する核の動力学の効果を議論する. 核の動力学の性質として regular と chaos という言葉使いを行なうが, これは対応する古典力学に由来している. § 1 で触れたように 量子遷移の伴う核の運動には通常のものと異なるが形式的な半古典論が存在する. しかしながら, ここでの解析はより間接的な 4 つの古典力学 (2 つの透熱的 + 2 つの断熱的 な古典力学) を適当な parameter 領域で使い分けることにする. そのような古典力学が regular, chaos であるとき対応する量子系を regular, chaos とよぶことにする. このような舞台設定の後で従来から用いられている "量子 chaos" の考えを踏襲する.

rotor が regular な場合, 強い量子相関を持つ状態はある特定の条件を満たした 状態の組から生まれる. それは 透熱的な場合は crossing point, 断熱的な場合は avoided crossing point に "長く" 滞在する二つの状態である. 他の状態は (avoided) crossing point で滞在時間を十分とれないかもしくは potential や phase space の障壁のために access できないかどちらかで量子相関を作ること (透熱 / 非断熱遷移) ができない. しかしながら chaotic な場合, 特に phase space の障壁が崩れる場合 多くの状態で量子相関を作ることができるようになる. つまり, どのような固有関数においても 非断熱遷移の大きいところで amplitude をもってしまうため 片方の断熱状態に閉じ籠ることができなくなる (図 5(iii)).

以上の議論をまとめる. 非線形 parameter が小さい極限では, 量子相関は摂動論的な機構により発生する. 系が規則的な場合においては, 系の非線形

parameter を増加させるにつれこの量子相関は破壊される．これは，非線形 parameter の値の変動により偶発的な近縮退が破壊されるためである．さらに非線形 parameter の値を増やしていくと，系の動力学は "chaos" 的になる．このとき，系の動力学は，量子状態を非断熱結合の強い領域に一般に "送りつける" ので非断熱遷移が盛んになる．このため，量子相関の度合いが強くなる．

6 議論

本論では model 系の根底にある古典論と量子論の関係を大変大雑把に議論してきた．特に，非断熱遷移を伴う核の動力学を議論する際，半古典的な解析では Pechukas の 運動方程式から出発すべきであったところを，遷移の無い古典力学で済ませて来た．ここでは，model の parameter から目見当をつけて適当な古典力学を選んだのだが，そのような選択がいつでもうまくいく保障は無い．これら ad hoc に選んだ古典論達の統一的な古典論である Pechukas の運動方程式の解析から，ある極限でそれぞれの古典力学の選択が生まれてくるべきである．Pechukas の運動方程式の解析はこれからの課題である．

Appendix 分子の分割について

量子系の分割は部分系に属する作用素の集合の組，あるいは同等なことだが部分系の Hilbert 空間達から全系の Hilbert 空間への unitary 写像で定まる．ここでは分子における二つの典型的な分割である構成的な分割と断熱的な分割を作用素の集合の組による定義で紹介する (より詳細な議論は Tanaka 1995a).

分子は核と電子から成り立つものである．この核と電子に通常の意味での相互作用が全く無いときを考えよう．このとき各々の系に対する Hilbert 空間は別個に考えることができる．核に対する Hilbert 空間を $\mathcal{H}_{\rm n}$, 電子に対する Hilbert 空間を $\mathcal{H}_{\rm e}$ とそれぞれ記すことにする．分子全体についての Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\rm S}$ は相互作用のあるなしにかかわらず $\mathcal{H}_{\rm S} = \mathcal{H}_{\rm n} \otimes \mathcal{H}_{\rm e}$ を満たす．

分子の Hamiltonian として

$$\hat{H} = T(\hat{P}) \otimes \hat{1}_{\rm e} + \hat{H}_{\rm BO}(\hat{Q})$$

を考える．(P, Q) は核の相変数で，それらを正準量子化した $\hat{P}, \hat{Q}$ は $\mathcal{H}_{\rm n}$ 上の演算子である．$\hat{H}_{\rm BO}(\hat{Q})$ は，相互作用の無いときの電子の自己 Hamiltonian に核との相互作用項を付け加えたものである．また，$\hat{1}_{\rm e}$ は $\mathcal{H}_{\rm e}$ 上の恒等演算子である．

以上で導入した Hilbert 空間 $\mathcal{H}_{\rm n}$ と $\mathcal{H}_{\rm e}$ の基底を紹介する．まず $\mathcal{H}_{\rm n}$ の基底としては，核の位置演算子 $\hat{Q}$ を対角化する基底である $\{|Q\rangle\}_Q$ を用いる．$\mathcal{H}_{\rm e}$ の基底として透熱基底 $\{|\eta_m\rangle\}_m$ (Lichten 1963, Smith 1969) と断熱基底 $\{|\xi_\alpha(Q)\rangle\}_\alpha$ の二種類を用いる．透熱基底はその基底 vector が核の parameter に依存しないものである．断熱基底は $\hat{H}_{\rm BO}(Q)$ を対角化する基底で parameter Q に依存する．

はじめに，構成的な分割の作用素の集合の組 $(\mathcal{L}_{\rm cn}, \mathcal{L}_{\rm ce})$ を定義する．構成的な分割は 相互作用の無い場合の 作用素の集合の組 $(\mathcal{L}(\mathcal{H}_{\rm n}), \mathcal{L}(\mathcal{H}_{\rm e}))$ の全系への自然な拡張である．すなわち，

$$(\mathcal{L}_{\rm cn}, \mathcal{L}_{\rm ce}) = (\mathcal{L}(\mathcal{H}_{\rm n}) \otimes \hat{1}_n, \hat{1}_e \otimes \mathcal{L}(\mathcal{H}_{\rm e}))$$

である．構成的な分割では $\mathcal{L}_{\rm cn}$ に属する作用素を "核の作用素" と呼び，$\mathcal{L}_{\rm ce}$ に属する作用素を "電子の作用素" と呼ぶ．

つぎに 断熱的な分割の 作用素の 集合の組 $(\mathcal{L}_{\rm an}, \mathcal{L}_{\rm ae})$ を定義する．そのため，はじめに作用素の行列単位を定義する．

$$\hat{u}^{\rm an}_{Q''Q'} = \sum_\alpha |Q'', \xi_\alpha\rangle \langle Q', \xi_\alpha|$$

は "核" の行列単位，

$$\hat{u}^{\rm ae}_{\alpha\beta} = \int dQ\, |Q, \xi_\alpha\rangle \langle Q, \xi_\beta|$$

は "電子" の行列単位と呼ぶ．$\{\hat{u}^{\rm an}_{Q''Q'}\}_{Q''Q'}$ で張られる空間を $\mathcal{L}_{\rm an}$, $\{\hat{u}^{\rm ae}_{\alpha\beta}\}_{\alpha\beta}$ で張られる空間を $\mathcal{L}_{\rm ae}$ と

する．断熱的な分割では $\mathcal{L}_{an}$ に属する作用素を “核の作用素” と呼び，$\mathcal{L}_{ae}$ に属する作用素を “電子の作用素” と呼ぶ．

二つの分割での核の自由度に関する部分 Trace の定義を示す．$\hat{\rho}$ は全系の密度行列（もしくは作用素）とする．以下では $\hat{\rho}$ に部分 trace を施したときの行列要素を示す．まず，構成的な分割のときは：

$$(\mathrm{Tr}^{cn}\,\hat{\rho})_{mn} = \int dQ\,\langle Q, \eta_m|\hat{\rho}|\,Q, \eta_n\rangle\,. \qquad (24)$$

m, n は透熱基底の index． 構成的な分割での部分 trace は通常の部分 trace と一致する．次に，断熱的な分割では：

$$(\mathrm{Tr}^{an}\,\hat{\rho})_{\alpha\beta} = \int dQ\,\langle Q, \xi_\alpha|\hat{\rho}|\,Q, \xi_\beta\rangle\,. \qquad (25)$$

α, β は 断熱基底の index．ちなみに 二つの部分密度行列を結びつける unitary 変換は 存在しない．このことは，等価でない部分 trace 操作の反映である．すなわち，どちらの trace 操作でも “核” の自由度に関する情報を消去したのだが，構成的な分割での “核” と断熱的な分割での “核” は異なるのである．

これら分割を適用した例をあげる． 断熱準位の population に対する Hermite 作用素は構成的な系の分割では電子と核の相関の作用素とみなされるが，断熱的な分割では電子の作用素とみなされる．別の例として，ひとつの断熱準位上にある波束を考える．これは Born-Oppenheimer 近似で普通に用いられる状態である．構成的な分割では この状態において電子と核の間に量子相関があると解釈される．一方，断熱的な分割では この状態では 電子と核の間に量子相関は無い．このように，異なる分割は量子系の異なる解釈をあたえる．

発表内容の訂正 (1996/02/22)

1995 年 3 月 7 日 の poster での発表において，本報告の § 5 に相当する部分の発表に誤りがあったので訂正します． 摂動論的に生まれた量子相関が破壊される機構として，大域化する以前の chaos 的な動力学を原因として挙げましたがこれは誤りであることがわかりました．この機構については本報告 § 5 もしくは Tanaka (1996b) を参照して下さい．

参考文献

足立聡 1994 科学 **64** 74–83

Berry M V and Mount K E 1972 *Rep. Prog. Phys.* **35** 315–397

Born M and Oppenheimer R 1927 *Ann. Phys., Lpz* **84** 457–484

Brillouin L 1926 *J. Phys. Radium.* **7** 353–368

Casati G, Chirikov B V, Izraelev F M and Ford J 1979 *Lecture Notes in Physics* **93** 334-352

Einstein A 1917 *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* **19** 82–92

d'Espagnat B 1976 *Conceptual foundations of quantum mechanics* (Massachusetts: W. A. BENJAMIN, INC.)

Feynman R P, Vernon F L and Hellwarth R W 1957 *J. App. Phys.* **28** 49–52

Keller J B 1958 *Ann. Phys.* **4** 180–188

Landau L D and Lifshitz E M 1977 *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)* (New York: Oxford Univ. Press)

Leggett A J, Chakravatry S, Dorsey A T, Fisher M P A, Garg A and Zwerger W 1987 *Rev. Mod. Phys* **59** 1–85

Lichten 1963 *Phys. Rev.* **131** 229–238

Nakamura H 1992 *Adv. Chem. Phys.* **LXXXII** 243–319

Pechukas P 1969 *Phys. Rev.* **181** 174–185

Scharf R 1989 *J. Phys. A* **22** 4223–4242

Smith 1969 *Phys. Rev.* **179** 111–123

Tanaka A 1996a *Constructive division and adiabatic division of quantum systems*, in *Quantum Coherence and Decoherence*, ed. K. Fujikawa and Y. A. Ono (Elsevier), *to appear*

Tanaka A 1996b *Quantum mechanical entanglement with chaotic dynamics*, *submitted to J. Phys. A*

Toda M and Ikeda K 1987 *J. Phys. A* **20** 3833–3847