研究会報告

量子カオスと量子輸送[1]

— 非線形量子力学の試みについて —

大阪市立大学 工学研究科　中村勝弘[2]

1 はじめに

基研「量子カオス」研究会での私の講演は、「量子輸送」を主題とするものであった。しかし、その内容は、既刊の原山卓久・中村勝弘共著「量子カオス」(培風館,2000年) や出版予定のK. Nakamura and T. Harayama 共著 *Quantum Chaos and Quantum Dots*(Oxford University Press) に詳しく記載されている。そこで、本稿では、研究会での私の講演に対する究極的質問「量子カオスの研究はどこへ向かうべきなのか？」に対する私の現時点での解答を述べることにしたい。

ミクロな量子論の世界では、非線形ダイナミクスは生じないとされている。実際、ミクロな量子論の世界の基礎方程式であるシュレーディンガー方程式を適用して量子ダイナミクスを考察してみよう。すると、電子の波束は、位相速度が波数により異なる（つまり、分散性の）ために孤立波になりえずあっという間に崩壊する。波動関数の初期パターンは初期値に敏感な時空パターンになりえず、周期的あるいは擬似周期的時間発展を示すだけである。適切な表示（コヒーレント表示、伏見表示など）を採用してやると、プランク定数で決まる短い crossover time(t_c) までは、電子の波束のダイナミクスは、確かに古典カオスの振舞いを模倣することができる。しかし、時刻 t_c 以降はやはり周期的あるいは擬似周期的時間発展を示すだけである。これらのがっかりさせる結論はシュレーディンガー方程式の線形性により引き起こされる。ミクロな量子論の世界には本当に、ソリトン、カオス、フラクタルなどの非線形のダイナミクスは期待できないのだろうか？

最近「量子カオス」という研究分野が展開し、ノーベル・シンポジウムまで開催されるようになってきた。しかし、量子カオスの研究は、現在までのところ、古典力学で扱うとカオスを示す系を量子化するとどのような興味深いことが得られるのかという、言わばカオスの量子論的徴候の研究にとどまっている。時間的に定常な状態に関しては、多数のエネルギー非交差に由来するウィグナー型の準位統計や周期軌道の量子版とも言える波動関数のスカー（傷跡）などの興味深い計算結果が報告され、量子ドットを用いてそれらを実験的に検証する仕事も開始されている。しかし、量子ダイナミクスについては、継続的観測操作により外部環境と結合させて量子干渉性を抑制し続けない限り、初期時間の振る舞いを除いては、カオスの徴候を示すものが何もない。

[1] この原稿は、基研「量子カオス」研究会での私の講演に対する究極的質問「量子カオスの研究はどこへ向かうべきなのか？」に対する私の現時点での解答である。

[2] E-mail: nakamura@a-phys.eng.osaka-cu.ac.jp

2　シュレーディンガー方程式はどのように導かれたのか？

ここで、$\frac{3}{4}$世紀前の１９２６年（昭和元年）にタイムスリップし、２０世紀の物理学のパラダイムとなったシュレーディンガー方程式の誕生のロジックを検討してみよう。シュレーディンガーの波動方程式は彼の単名による一連の４つの論文により完成された。第１論文は、Ann. der Phys.79(1926)361頁に掲載された。そこでは、ニュートンに始まりラグランジュ、ハミルトンを経て体系化された古典力学の基礎方程式の究極形式として、ハミルトンの主関数 $S(q,t)\left(\equiv \int_{t_0}^{t}(pdq - H(q,p,t)dt)\right)$ に対するハミルトン-ヤコビ方程式

$$H\left(q, \nabla_q S, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

に着目する。（上式では関係式 $p = \nabla_q S$ を用いている。）シュレーディンガーは、これを変形して、電子に対する波動方程式が導かれないだろうかと考えた。ハミルトニアンが時間に陽によらない系では、$\dfrac{\partial S}{\partial t} = -E$ となるので、ハミルトン-ヤコビ方程式は

$$H\left(q, \nabla_q S\right) = E \tag{1}$$

のように簡単になる。ここで、

$$S = \frac{\hbar}{i}\ln\Psi$$

により波動関数 Ψ を導入し、(1) に代入すると、

$$F(\Psi(q)) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_q\Psi)^2 + (V - E)\Psi^2 = 0 \tag{2}$$

となる。(2) を少し書き換えると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}{\nabla_q}^2\Psi + V\Psi - \frac{\hbar^2}{2m}({\nabla_q}^2(\ln\Psi))\Psi = E\Psi \tag{3}$$

となり、左辺の第３項のために非線形の波動方程式を得る。しかし、彼は、(2) や (3) の非線形方程式に興味を示さず、(3) の非線形項を落とした線形方程式をミクロの世界の基礎方程式とした。彼はこの線形方程式を、変分原理という論理的な装いのもとで改めて導出することを試みた。つまり、変分関数 $G \equiv \int F(\Psi(q))dq$ を定義し、これが最小となるように、Ψ の充たす条件を求めると、今度はめでたく、非線形項のない線形方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}{\nabla_q}^2\Psi + V\Psi = E\Psi \tag{4}$$

が得られた。(4) の偏微分方程式を境界条件を与えて解くと、水素原子の量子準位（実測値）が自然に得られ、ボーア-ゾンマーフェルトやアインシュタイン-ブリルアン-ケラーの（整数値を作為的に導入した）半古典量子化条件と訣別できる。しかし、変分関数 G の物理的意味が全く不明なので、(4) の論理的根拠は無いに等しい。

シュレーディンガーは、第２論文以降からは、第１論文での根拠のない変分原理を自分自身で放棄した。そして、新たに、幾何光学（光路最小のフェルマーの原理）と古典力学（作用最小の

ハミルトンの原理）との類似性に着目し、波動光学（光学の波動版）の基礎方程式との対応を新しい指導原理＝戦略として電子に対する波動方程式を導くことを試みた。電場を波動場 Ψ とみなすと、波動光学の基礎方程式（残念なことに、１９２６年の時点では線形方程式しか研究されていなかった）との対応から

$$\nabla_q{}^2\Psi - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \tag{5}$$

が電子に対する波動方程式の「ひながた」となる。u は位相速度であり、ド-ブロイの仮説 ($E = \hbar\omega, p = \hbar k$) を採用すると

$$u \equiv \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V(q))}} \tag{6}$$

さらに、線形方程式 (5) は時間について周期的な解

$$\Psi = \exp(\pm iEt/\hbar) \tag{7}$$

を持つことに注意して、$\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -\left(\dfrac{E}{\hbar}\right)^2\Psi$ と (6) を (5) に代入すると、確かに (4) を再現する。

彼は、Ann. der Phys.81(1926)109 頁に掲載された最後の第４論文で、ポテンシャル V がそしてエネルギー E が、時間的に変化する場合に、(4) をどのように拡張すれば良いのかを考察した。この場合も、波動光学の基礎方程式との対応を念頭に置き、(7) のように時間について周期的な振舞いに限定すると、

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}\Psi \tag{8}$$

(4) と (8) から E を消去すると、ミクロの世界の基礎方程式、つまり時間依存のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_q{}^2\Psi + V\Psi \tag{9}$$

が得られる。(8) は Ψ の複素性を要求する重要な式であるが、時間について厳密に周期的な振舞いを仮定している。この仮定のために、(9) は線形方程式になっている。しかし、V や E が時間変化する時、時間について周期的な振る舞い (7) に考察を限定する必要はどこにあるのだろう。また、(7) を認めたとしても、E が時間的に変化する場合は、(8) は近似式に過ぎない。１９２６年当時と異なり、現在では (5) を非線形領域に一般化した非線形波動光学の基礎方程式が光学的 Kerr 媒質（光ファイバー）を伝播する非線形波動に関して良く研究されている。ここでは、光の伝播媒質の非線形分極率 $\chi^{(3)} \neq 0$ なので、電場の振幅の３乗に比例する分極が光と相互作用し、電場に対する非線形波動方程式を生成する。（光と光の相互作用により非線形項が生じるのでは無い。）波動光学の基礎方程式との対応を非線形領域にまで拡張し、電子に対する非線形波動方程式を導くことは、少なくとも思考の上では、興味深い試みである。

3　ワインバーグの非線形量子力学

量子力学を非線形化する試みは、古くはウィグナーにさかのぼるが、実験的検証を意識した定式化はワインバーグにより初めて提案された。ワインバーグが着目したのは、アメリカ合衆国標準度量局 (NBS) のグループの実験結果で、ペニング捕獲されたベリリウムイオンの核スピンに一

定の静的磁場を作用させた時の才差運動の振動数を磁気共鳴法を用いて継続的に測定すると、時間的に不規則な変化を示すという事実である（普通の量子力学では、振動数は一定であり、静的磁場の大きさで決まる）。もちろん、振動数変化の振幅は平均値に比べて非常に小さいが、ワインバーグは、これを量子ダイナミクスの線形性の破れと直感した。彼の論文の詳細については、Phys. Rev. Lett. 62(1989) 485　および Ann. of Phys.194 (1989) 336　を参照されたい。ここでは、ワインバーグの非線形量子力学の概要を示すにとどめよう。本節では $\hbar = 1$ とする。

(I) まず、複素状態関数をヒルベルト空間（有限次元でもOK）のベクトル $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2, \cdots, \Psi_N)^T$ で表す。(T は転置操作の意味。) また、通常の線形量子力学と同様に、Ψ のスカラー倍 $(Z\Psi)$ は Ψ と同じ状態を表すと約束する。彼は、これを「均一性」の条件と呼んでいる。

(II) 任意の物理量 A に対して、その期待値を Ψ, Ψ^* について2次よりも大きな次数の非線形実数関数 $a(\Psi, \Psi^*)$ で記述されるとする。これは、通常の量子力学での実数期待値の二次形式 $\Psi_k^* A_{kl} \Psi_l$ (A_{kl} はエルミート行列；また、添字 k や l については和をとる）の自然な拡張である。ただし、「均一性」の要請より、実数関数 a は任意の形をとりえず

$$\Psi_k \frac{\partial a}{\partial \Psi_k} = \Psi_k^* \frac{\partial a}{\partial \Psi_k^*} = a$$

を充たすものに限定される。次に、任意の物理量 A と B に対応して、積の期待値を

$$a * b \equiv \frac{\partial a}{\partial \Psi_k} \frac{\partial b}{\partial \Psi_k^*}$$

で定義する。これも通常の二次形式 $\Psi_n^* A_{nk} B_{km} \Psi_m$ の拡張になっている。ただし、積をこのように定義すると、通常の量子力学と異なり、積に関する結合則が成立しなくなる。

(III) 続いて、無限小変換（例えば、無限小時間推進）に対する無限小増分を定義する。この変換に共役な物理量（例えば、ハミルトニアン）を A とし、波動関数 Ψ の増分を

$$\epsilon \delta_a \Psi_k = -i\epsilon \frac{\partial a}{\partial \Psi_k^*} \tag{10}$$

で定義する。これも、通常の定義 $\epsilon\delta\Psi_k = -i\epsilon A_{kl}\Psi_l$ の自然な拡張になっている。この無限小変換に対して、別の任意の物理量 B の期待値 $b(\Psi, \Psi^*)$ の増分は、

$$\begin{aligned} \epsilon \delta_a b &= \frac{\partial b}{\partial \Psi_k} \epsilon \delta_a \Psi_k + \frac{\partial b}{\partial \Psi_k^*} \epsilon \delta_a \Psi_k^* \\ &= i\epsilon \left(\frac{\partial a}{\partial \Psi_k} \frac{\partial b}{\partial \Psi_k^*} - \frac{\partial a}{\partial \Psi_k^*} \frac{\partial b}{\partial \Psi_k} \right) \\ &\equiv i\epsilon (a * b - b * a) \equiv i\epsilon [a, b] \end{aligned} \tag{11}$$

(11) の最後の等式はワインバーグの非線形量子力学の体系がディラック括弧式ではなくポアソン括弧式に基礎を置く非可換代数で記述されていることを示している。このため、結合則が破れる ($(a * b) * c \neq a * (b * c)$)。

ワインバーグは、上記、(I)〜(III) の公理を適用して、時間依存の基礎方程式を導いた。すなわち、ハミルトニアン H の期待値 h を用いた恒等式 $\Psi_k(t + \epsilon) = \Psi_k(t) + \epsilon\delta_h\Psi_k(t)$ に (10) を代入す

ると、Ψ に対する時間依存の非線形シュレーディンガー方程式

$$\frac{\partial \Psi_k}{\partial t} = -i\frac{\partial h}{\partial \Psi_k^*} \tag{12}$$

を得る。また、任意の物理量 A の期待値 $a(\Psi, \Psi^*)$ の従う方程式は

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -i[a, h] \tag{13}$$

となる。通常の量子力学では $h = \Psi_k^* H_{kl} \Psi_l$ なので、ハミルトニアンのベキ乗の期待値 $a_j = \Psi_k^*(H^j)_{kl}\Psi_l (j = 0, \cdots, N-1)$ が保存量である。このとき、自由度 (N) と保存量の数が一致するので系は完全可積分である。このとき、N 次元ヒルベルト空間で波動関数 Ψ, Ψ^* は周期的あるいは、準周期的運動をする。しかし、(12),(13) で記述される非線形量子力学ではノルム $n(\equiv \Psi_k^* \Psi_k)$ とハミルトニアン h は保存量であるが、$(h*h)*\cdots*h$ などは、(II) で述べたように積に関する結合則の破れのため保存量ではない。したがって、$N(>2)$ 次元ヒルベルト空間を持つ系は非可積分となり、カオスが発生しうる。

$N = 2(\Psi = (\Psi_1, \Psi_2)^T)$ の場合の非線形量子力学の具体例として、本節の最初に紹介した核スピンの才差運動を扱ってみよう。z 方向の一定の静的磁場の強さを ξ としておこう。この時、ノルム $n \equiv \Psi^\dagger \Psi = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$ と $a \equiv \frac{1}{2}\Psi^\dagger(I - \sigma_z)\Psi/n = |\Psi_2|^2/n$ を用いて非線形ハミルトニアン $h = \xi n \bar{h}(a)$ を採用してみよう ($\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ はパウリ行列)。ここで、$\bar{h}(a)$ が a について非線形であるとする。$\bar{h}(a)$ が線形のときは、線形ハミルトニアン（ゼーマンエネルギーの通常の表式＋定数項）$h = \xi|\Psi_2|^2$ に帰着する。(12) より

$$\begin{aligned} i\frac{\partial \Psi_1}{\partial t} &= \frac{\partial h}{\partial \Psi_k^*} = \xi(\bar{h}(a) - a\bar{h}'(a))\Psi_1 \\ i\frac{\partial \Psi_2}{\partial t} &= \xi(\bar{h}(a) + (1-a)\bar{h}'(a))\Psi_2 \end{aligned} \tag{14}$$

ただし、n と h が保存量であることを利用した。(14) は定常解 $\Psi_k = c_k \exp(-i\omega_k(a)t)(k = 1, 2)$ をもち、その固有振動数は $\omega_1(a) = \xi(\bar{h}(a) - a\bar{h}'(a)), \omega_2(a) = \xi(\bar{h}(a) + (1-a)\bar{h}'(a))$ のように準位の占拠数 (a) に依存した振動数を持つ。したがって、才差運動の振動数 $\Omega_0(a) \equiv \omega_2(a) - \omega_1(a) = \xi\bar{h}'(a)$ も占拠数依存性を示す。（ちなみに、通常の量子力学では、$\bar{h}(a) = a$ そして $\bar{h}'(a) = 1$ 　なので、$\Omega_0(a) = \xi$。つまり、才差運動の振動数は占拠数とは独立な静的磁場の強さだけで決まる定数である。）

こういう状況下で横方向にプローブ（検索）としての振動磁場をパルス的にくりかえし作用させると、磁気共鳴吸収の振動数が、先立つプローブ磁場により確定した占拠数 (a) に依存する値を持つ。その結果、測定するたびに磁気共鳴の振動数が変化することになる。この磁気共鳴の振動数の変化は決定論的で、通常の量子力学のフレームのように測定に際して確率的な要素は入り込まない。

4 非線形量子力学のその他の試みと将来への展望

量子動力学の非線形化には他にも様々な試みがある。ここで、２節の最後に触れた非線形 Kerr 媒質（光ファイバー）における非線形波動光学の基礎方程式に着目しよう。電場を確率振幅と読

み替えて電子に対する波動方程式を導くと、

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_q{}^2\Psi+V\Psi+g\mid\Psi\mid^2\Psi \tag{15}$$

(15) は、波動関数のスカラー倍 $\Psi\to Z\Psi$ に対して不変では無く、ワインバーグの「均一性」を破っている。しかし、方程式の形が具体的なので、興味深い結果が得やすい。例として、

(a) まず、自由粒子 ($V(\mathbf{r})=0$) の場合を考えよう。これは、空間一次元の場合、ソリトン物理学でお馴染みの非線形シュレーディンガー方程式であり、安定な基本解としてソリトン解（波束）を持つ。この波束は、自由粒子に対する通常の量子ダイナミクスと異なり、永久に崩壊しない。また、ソリトンの広がりを電子のサイズとみなせば、系の特徴的長さと非線形項の大きさ g が確定する。波束が崩れないので、EPR のパラドクスはもはやパラドクスではなくなり、超光速の情報伝達も実際に可能となる。

(b) 次に、調和ポテンシャル ($V(\mathbf{r})=\frac{1}{2}\Omega^2r^2$) の場合を考える。（以下、$\hbar=m=1$ とする。）これは、空間 2 次元では、磁気トラップされたボーズ・アインシュタイン凝縮相のパターンを記述する式になっている。しかし、本稿では、この式を、巨視的ではなく微視的量子論の基礎方程式とみなす。最近の解析によると、定常解 $\varphi_\mu(\mathbf{r})e^{i\omega_\mu t}$ は各種の静止した波束解であり、これを用いて、運動する波束解

$$\Psi_\mu(\mathbf{r},t)=\varphi_\mu(\mathbf{r}-\mathbf{R}(t))e^{i(\omega_\mu t+\dot{\mathbf{R}}(t)\cdot\mathbf{r}+2S(t))} \tag{16}$$

を得る。$S(t)$ は波束中心 $\mathbf{R}$ の運動に対する作用であり、$S(t)=\int_0^t Ldt\equiv\int_0^t\left(\frac{1}{2}\dot{\mathbf{R}}(t)^2-V(\mathbf{R})\right)dt$ である。$\mathbf{R}$ はラグランジュ方程式 $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{\mathbf{R}}}\right)-\frac{\partial L}{\partial\mathbf{R}}=0$ に従う。(16) は、群速度 $\dot{\mathbf{R}}(t)$ で走る波束がその形状を変化させず、波束中心が古典法則に従っているので、量子古典対応が明白である。

以上の考えを、ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ がヘノン-ハイレスポテンシャルやキックを受ける回転子のポテンシャルの場合に拡張できるだろうか？拡張可能ならば、古典論でカオスを示す系に対応する量子ダイナミクスの正体は波束のカオス的振る舞いということになる。もし、波束が崩れて乱流状態が生成すれば、それはそれで古典ダイナミクスでは想像もできない興味ある非線形非平衡状態が量子の世界に現れることになる。量子力学の非線形化によるユニタリティの破れや場の理論への影響については稿を改めて触れたい。