数理解析研究所講究録
第 506 巻 1983 年 113-128

量子力学系のカオス

早大理工 斎藤信彦 (Nobuhiko Saitô)

§1 はじめに

古典的なハミルトン系において，一自由度系は可積分であってカオスは現われない。二自由度以上の系ではふつう非可積分であってカオスが現われる。ここでは最も簡単な二自由度系に限ることにする。この場合にカオスの生ずるメカニズムはかなりよくわかって来た。二自由度系ではPoincaré写像面上に不動点が多数存在する。楕円的不動点は安定であって，そのまわり は不変曲線でかこまれる（KAMの定理）。一方双曲的不動点は不安定であるが，そのまわりの微小領域の近傍は可積分であって不変曲線群が連続的に分布している（Moserの定理）。しかし双曲的不動点を通る二本の不変曲線は交わっておりこの交点を生ずるために一つの不変曲線から他の不変曲線へ不規則にうつりかわる。このために，双曲的不動点のまわりに小さいカオスの領域ができる。その領域が隣りの双曲的不動点のまわりのカオスの領域と重なれば

カオスの領域が拡がることになる。不動点はパラメター(エネルギー)を変えることによって分岐をおこし，楕円的および双曲的不動点が逐次あらわれ，その数を増す。これによってカオスの重なりを容易にし，広い領域に亘るカオスが見られるようになるのである。[1)]

これに反し量子力学系でのカオスのあらわれる事情はよくわかっていない。しかしあるハミルトニアンに対し，古典的取扱いでカオスになっていれば量子力学でもカオスになっているであろうことは容易に想像される。古典的な非可積分系では，双曲的不動点のまわりは，大なり小なりカオスの領域がある。これは量子力学の上ではどのように反映しているのだろうか。

ハミルトニアンが分離できて，独立な一自由度系に帰着できる場合は，ふつうの教科書が取扱う例題である。たとえば矩形や円の中の自由粒子の問題である。この場合は波動関数の値が0となるところ即ち節線は交叉し，規則的な模様をつくる。境界条件が変ったり(矩形から不規則な境界へ)，直接粒子間に相互作用があったりして，二つの　自由度に帰着した系が独立でなくなると，系は分離できなくなり，非可積分系になって，節線は互いにさけ合い(avoiding)，相互作用が大きくなると，節線の模様は不規則になる。このような節

線の模様のみだれがカオスに相当すると考えた人もある。

図1はスタジアム(矩形の両側に半円をつけたもの, この中の古典的な撞球問題では, Buminovich[2]はK-系であることを証明した)の中の自由粒子の波動関数の節線を示したものである。x, y軸に関して対称であるので, 波動関数のうち反対称のもの(周囲およびx, y軸上で0)を画いてある。図からわかるように節線は交叉しないが一様に, 不規則に分布している。これはMcDonald & Kaufmanの結果[3]である。

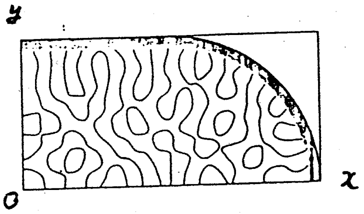

図1. スタジアムの中の波動関数の節線(1/4だけがかかれている)

非線形な力のポテンシャルをもつ系については, Strattらの研究がある[4]。ポテンシャル$V(x, y)$は後に出る式(5)で$\varepsilon = 1/2$とおいたものである。図3は規則的なパターンとみなされるもので, エネルギー準位の番号は(a)98, (b)104, (c)125である。図5は不規則なパターンで(a) 87, (b) 103, (c) 118に相当する。黒は波動関数の値が正のところ, 白は負のところである。図4はどちらともいえない場合である。エネルギー準位の高いときでも規則的で, 低いところでも不規則なのがあるのは注目すべきである。この系は, 同じエネルギーでも初期条件によってKAMトーラスの上にのる古典的軌道は規則的であり, カオス状態の軌道もある。このことは量子力学的には, エネル

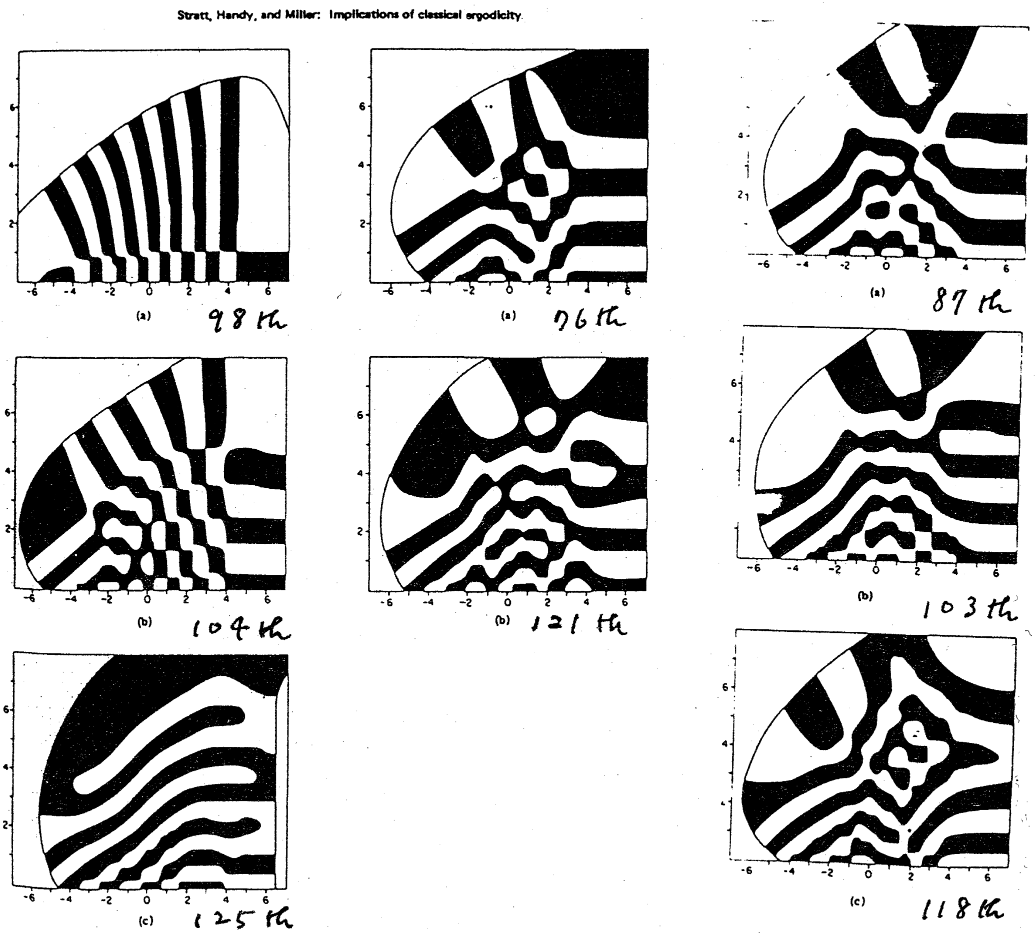

図3 規則的なパターン　　図4 どちらともいえない。　　図5 不規則なパターン

ギーが縮重していて，同じエネルギー，もしくは非常に近いエネルギーでも一方は軌道の規則的なものに，他方は不規則なものに対応していると考えられるからかも知れない（これは推測であるが）。いずれにしても図4にみられるように，不規則か規則的か判断に迷うこともある。

またエネルギー間隔の分布を考えることも出来る。その間隔 s が s と $s+ds$ の間にある確率を $P(s)ds$ と定義する。

sは実際のエネルギー間隔を平均のエネルギー間隔で割ったものをとるのが適當である。この関数 $P(s)$ は，原子核の中の多体問題のエネルギー準位をしらべるため Wigner らによって考えられたもので，彼らはランダムマトリックスの固有値問題として捉えた。[5] 系が分離系であれば，多くの縮退があるけれども，非可積分系であれば準位は互いに反撥して避け合い縮退はとけている。前者の場合には $s=0$ のところに有限の値をもつが，後者では $P(s)$ は $s=0$ で 0 となり s の増大と共に山を通って s が大きくなると減少するだろう。Wignerは準位間の反撥にある仮定をおいて $P(s)$ が

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) \qquad (1)$$

という式を導いた。これを Wigner 分布という。一方，反撥がなければ

$$P(s) = \exp(-s) \qquad (2)$$

である。Stadium の中の自由粒子にたいして前述の McDonald と Kaufmann はエネルギー準位の間隔が Wigner 型の山をもったものであることを示した。$s \to 0$ で $P(s) \to 0$ については Berry と Tabor の研究もある。[6]

なお，量子力学の時間的発展に関しては，古典的な軌道に対応して Wigner 分布関数（(1)とはちがう）をつかって議

論したり,[7] 一自由度系に周期的な外力を加えると, 1.5自由度とみなされ, 周期T毎に観察すると, q と p のある時刻 t から $t+T$ への写像をつくることが出来ることを利用した研究もある.[8]

§2. エネルギー準位の間隔のランダム性

以下の議論ではエネルギー間隔の分布 $P(s)$ を問題にするのでなくて, 間隔自身が準位の番号と共に変動する様子をみることにする。ここで取り上げる系はハミルトニアンが

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2}(x^2+y^2) + \alpha V(x,y) \qquad (3)$$

$$V(x,y) = \frac{1}{4}(ax^4 + by^4 + 2cx^2y^2) \qquad (4)$$

あるいは

$$V(x,y) = x^2y + \frac{1}{3}(1-2\varepsilon)y^3 \qquad (5)$$

で与えられるものである。(5)の式については既にしらべたことがあるが[9] $\varepsilon=1$ はいわゆるHénon-Heiles系であり, $\varepsilon=0$ は可積分系である。しかしこの場合は, ポテンシャルが三次であるために, ある方向で峠があってそれを越えると $-\infty$ に向う。古典系では, エネルギーの値をその限界値以下にとれば問題はないが, 量子力学では, トンネル効果があって, 定常状態は存在しない。

近似的にエネルギー準位はもとめられるけれども、エネルギー準位の高いところでは、トンネル効果による誤差がさけられない。従がってここでは(4)で与えられるポテンシャルをもつ場合にのみ限ることにする。この場合は $a=b=c=1$ および $a=b=1$, $c=3$ の場合は分離可能な積分可能系である。そこで $a=b=c=1$ と $a=b=1$, $c=2$ の場合を例としてしらべることにした。

Schrödinger 方程式の固有値および固有関数は、調和振動子(上の式(3)で $\alpha=0$ としたもの)の固有関数を直交基底関数として展開しマトリックス $\langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$ を有限次でもって対角化する方法でもとめる。$\alpha=0.088$ととり、$\hbar/m=1$としてある。われわれは990の基底関数をとった場合と630個とった場合とを比較した。その計算によればエネルギーが $E=30$ 位までは小数点下3桁までは一致した結果をえた。この程度の精度までは正しい結果である。図6は $a=b=c=1$ の可積分系、図7は $a=b=1$, $c=2$ の非可積分系である。この両者の特徴の差をもっとはっきり示すものはエネルギー準位の間隔

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$$

をみることである。図8, 9は夫々図6, 図7に対応するものである。図8は比較的規則性があるが、図9には規則性が失なわれている。

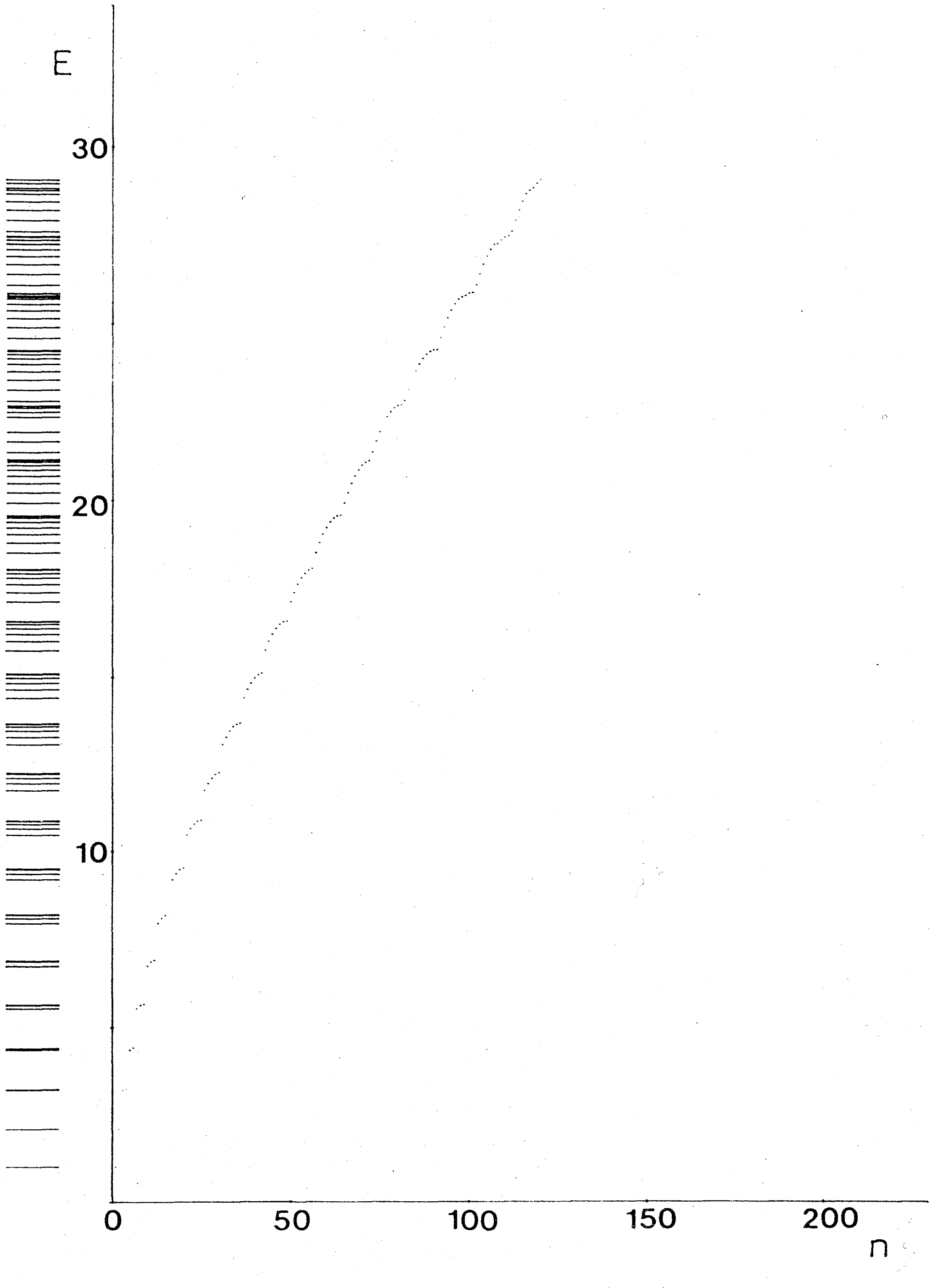

図 6、 可積分の場合の エネルギー準位
横軸 n は 準位の番号

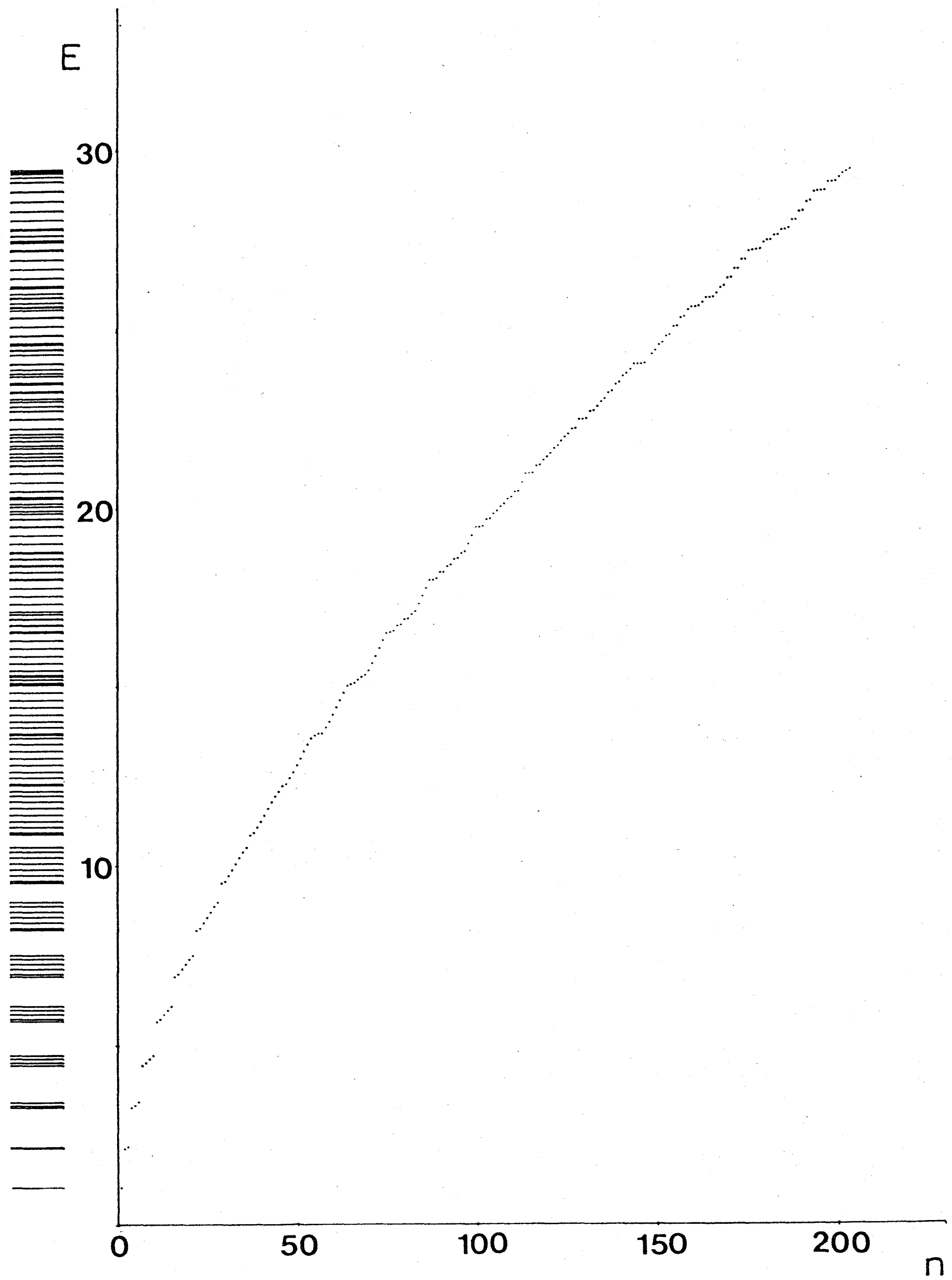

図7　非可積分の場合のエネルギー準位

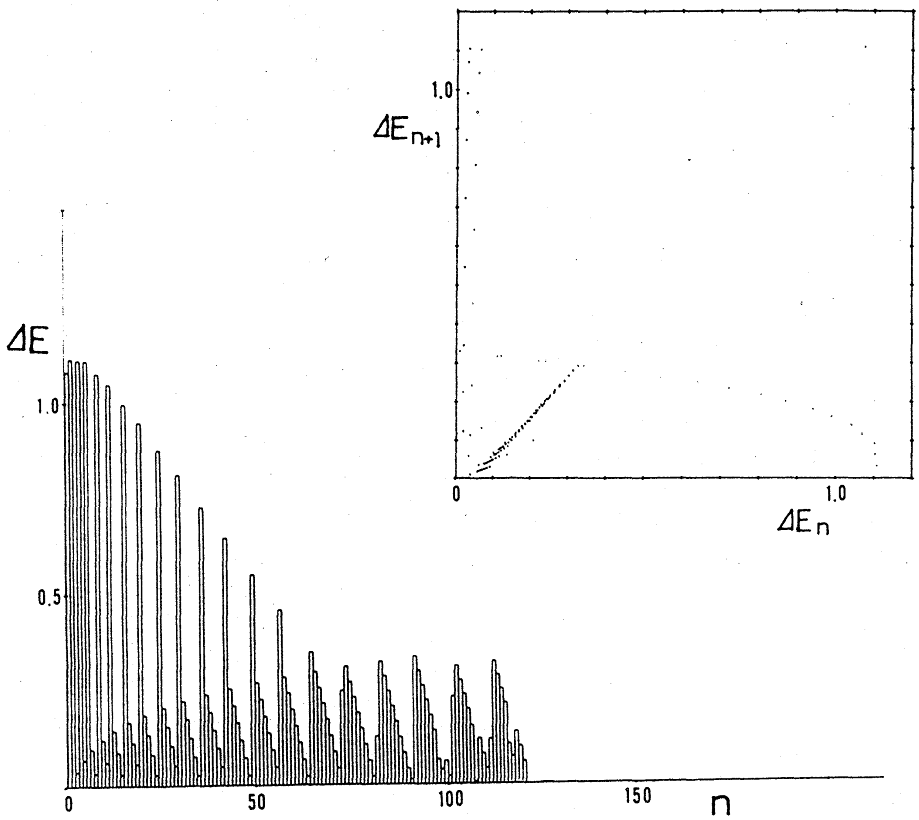

図8　準位の間隔ΔEと準位の番号nの関係、可積分系。
中の図はつづくエネルギー間隔の相関。比較的規則的である。

つづくエネルギー間隔ΔE_nとΔE_{n+1}の間の関係をとったものが夫々の図の右上に画かれている。図8の可積分の場合にはこの図でも規則的であるが、図9の非可積分の場合には不規則な部分が多い。

可積分の場合にΔEとnの関係が規則的になる理由を次に考えてみよう。分離系であれば分離した一自由度系に夫々量

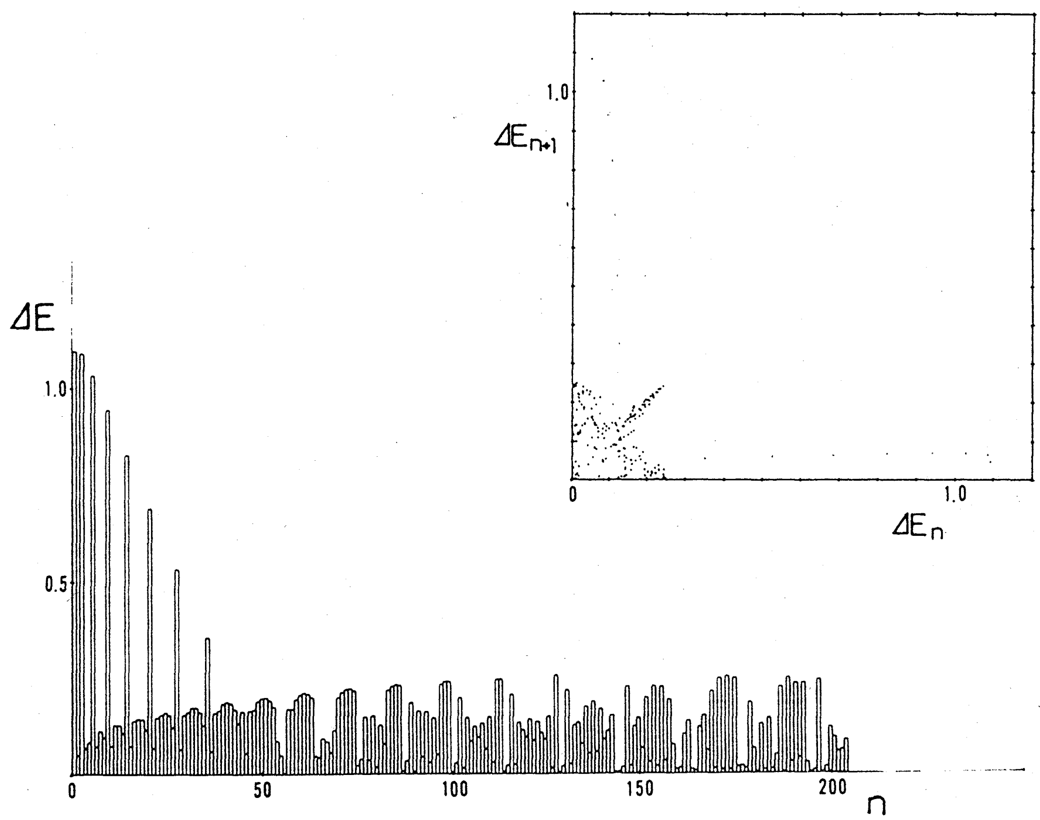

図9. 非可積分の場合のΔEとnの関係。中の図はΔE_{n+1}とΔE_nの相関。nの大きい程、不規則になっている。

子数n, mを与えることが出来る。n, mは0又は正の整数とする。それ故エネルギー準位は量子数n, mの関数で$E(n,m)$とかくことが出来る。分離出来なくても可積分系であればある条件の下にトーラスが存在し(Arnol'dの定理)、2種類の互いにreduceできない独立な閉曲線C_1, C_2をトーラスの上につくることが出来る。Einstein-Brillouin-Keller-

Maslovの半古典的な量子化法を C_1, C_2 に対して適用できるから

$$I_i = \frac{1}{2\pi}\oint_{C_i} p\,dq, \qquad i=1, 2,$$

によって

$$I_i = \hbar(n_i + \alpha_i/4), \qquad n_i : \text{integer}$$

量子数 n_i $(i=1,2)$ をきめることが出来る。α_i は Maslovの指数で 0 又は 2 の値をとる。何れの値かは位相空間の中のトーラスのトポロジーに依存する。これは半古典的取扱いによるものであるが，量子力学的にも同様なことが成立するであろう。つまり可積分系のエネルギー固有値は $E(n, m)$ と表わされ，n, m に関してはスムーズな増加関数とみなされるであろう。n, m は格子点の上の点をとるのであるが，$E(n, m)$ を連続変数 n, m の関数としてみると，$E(n, m)=$ 一定のところは n, m 面上に等高線として表わされる。簡単のためにこの等高線はすべて平行な直線であるとすると，格子点を通る等高線の図は図13に画いたようになる。原点に近い順に等高線をとると，そのエネルギーの準位に番号がつけられる。格子点の番号は，エネルギーの準位の順にとる格子点である。これからわかることは，例えば 2, 4, 6, 8 の準位は規則的ならば，2, 3, 4, 5, 6. 7 も同様である。こうして ΔE の規則性が生れると考えることが出来る。等高線は

平行な直線としたが、曲線であっても、平行でなくともその変化の仕方がスムーズであれば上の推論はそのまゝ成立するであろう。但し何れの場合でも等高線の形や傾きの僅かな差によってとるべき格子点が大きく変ることがあるから、ΔEとその形に僅かの不規則性が起ることがある。図13,12あらわれた事情が図8に存在することは直ちに見られる。

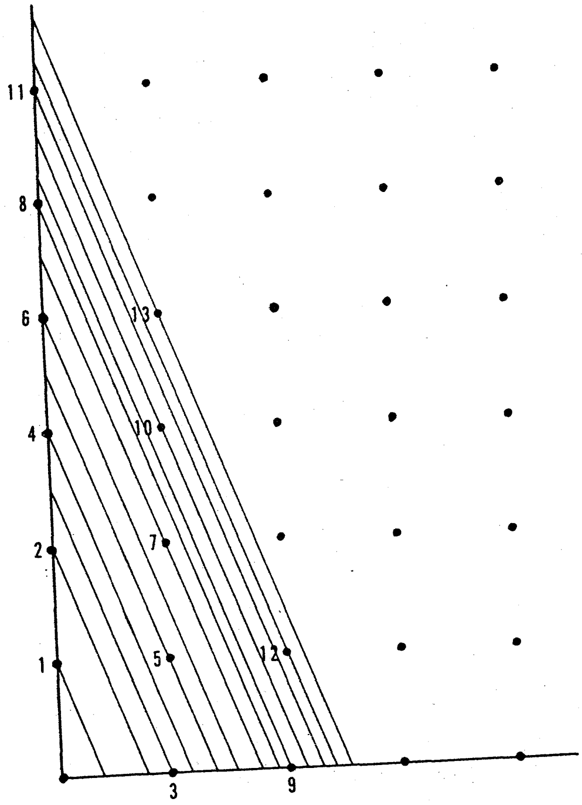

図13、等高線が平行のとき、エネルギー準位に対応する格子点のとる順序を数字で示してある。

非可積分で不規則になることの直接の証明はこれからの問題である。

§3 古典的軌道のPoincaréマップ

量子力学的挙動に対応して、古典力学的にはどのようにな

っているかは興味がある。図14は非可積分系のポアンカレ写像である。ほとんど軌道は規則的であって(almost periodic), KAMトーラスにかこまれていて，カオスは見られない。しかし

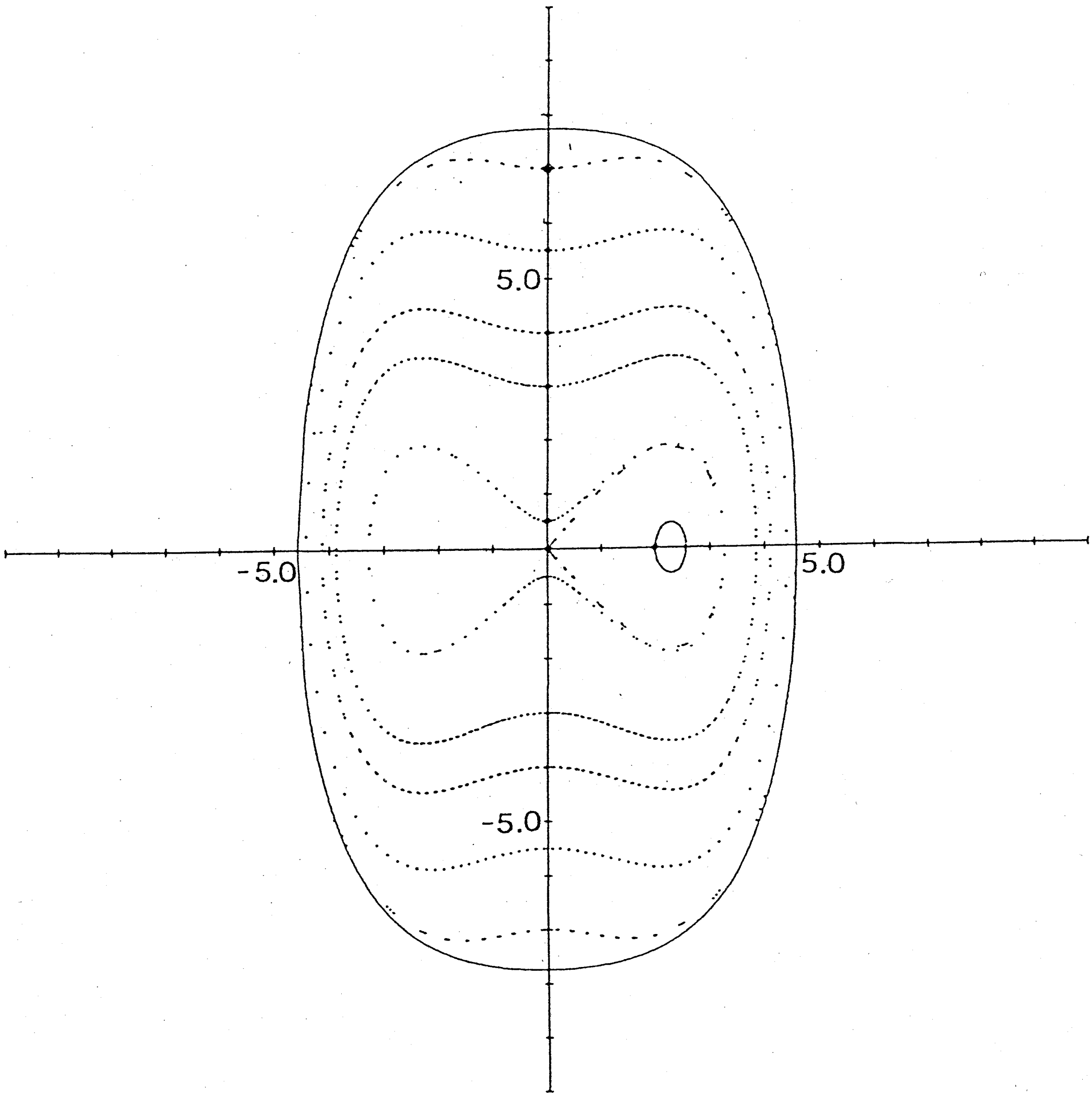

図14. 非可積分系 $a=b=1$, $c=2$ のポアンカレ写像，
縦軸は $\dot{x}$, 横軸は x.

原点は双曲的不動点であって，そのまわりにはカオスがある
(図14)。このほかにも図にはあらわれていないが，高い周

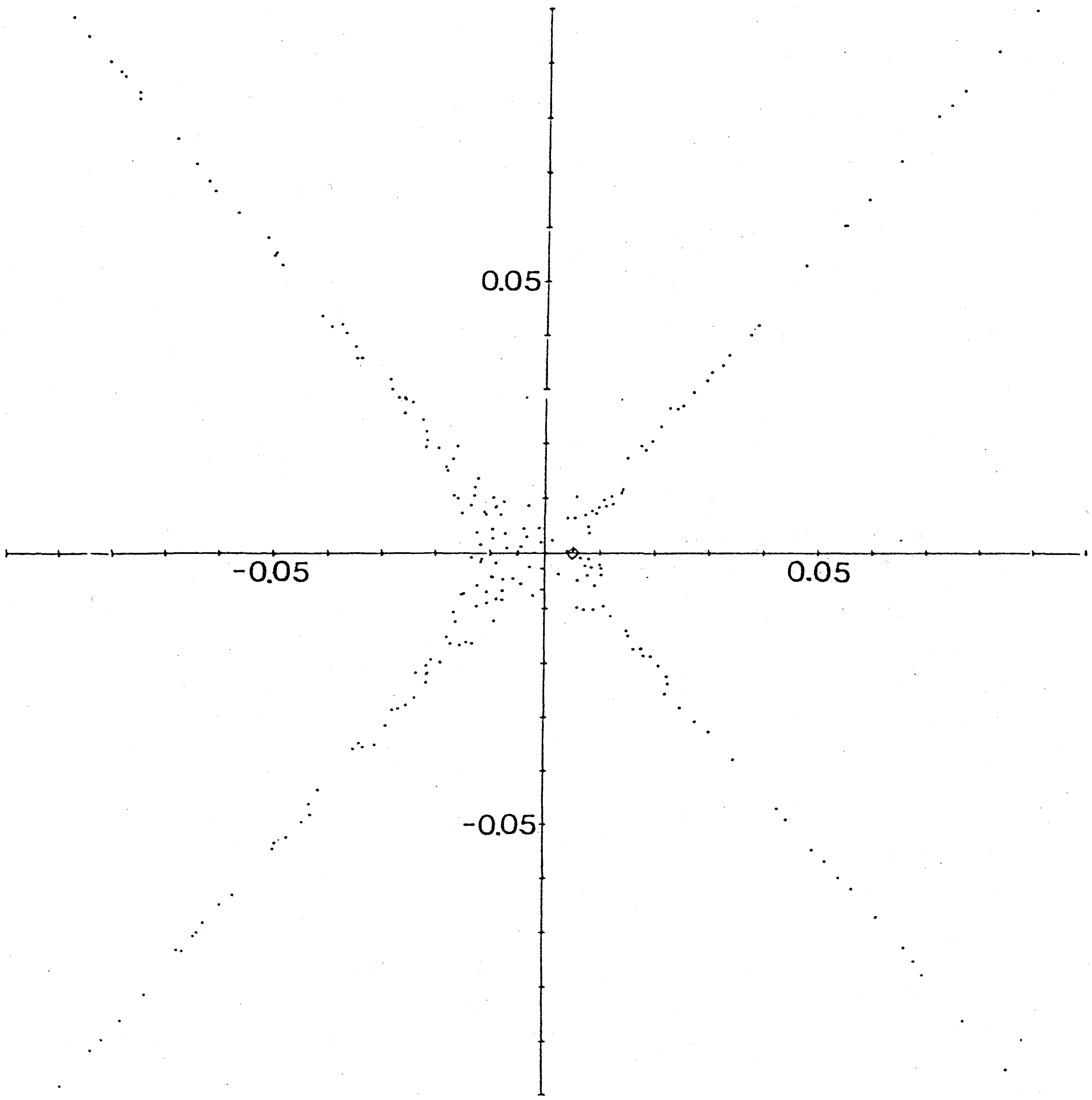

図15，図14の原点のまわりを拡大したもの，原点は双曲的不動点でそのまわりにカオスがある。

期の双曲的不動点があって，そのまわりにもカオスがある。図14ではそれがほとんど目に見えない。このようなカオスでも量子力学的計算には目に見えるように現われることは図9にみた通りであって，このことは興味のある事実である。図3,4,5に関してのべた推測はこのことと関連して考えるべきことのようにも思う。この研究は広岡，小林，黒川らと行ったものである。

文献

1. 広岡一，斎藤信彦：物性研究 39 (1982), No.2, B48
2. L. A. Bunimovich; Funct. Anal. Appl. 8 (1974), 254; Commun. Math. Phys. 65 (1979) 295
3. S. W. McDonald and A. N. Kaufman: Phy. Rev. Lett 42 (1979) 1189
4. R. M. Stratt, N. C. Handy and W. H. Miller: J. chem. Phys. 71 (1979) 3311
5. T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey and S. S. M. Wong: Revs. Mod. Phys. 53 (1981) 385
6. M. V. Berry and M. Tabor: Proc. Roy. Soc. London A 356 (1977) 375
7. A. Voros: Lecture Note in Physics 93 (1979) 326. M. V. Berry: Phil. Trans. Roy. Soc. A 287 (1977) 237.
8. G. Casati, B. V. Chirikov. et al.: Lecture Note in Phys. 93 (1979) 334
9. N. Saitô et al: Proc. Nonequil. Stat. Phys. Prob. in Fusion Plasma (1981), 101