

# 博士論文

## 量子不可逆性の誕生と寿命 ～ 量子カオス系の場合 ～

( Birth of Quantum Irreversibility and its Lifetime:  
Case of Quantum Chaos Systems )

2016 年 9 月

立命館大学大学院理工学研究科  
基礎理工学専攻博士課程後期課程

松井 文宏



立命館大学審査博士論文

量子不可逆性の誕生と寿命

～ 量子カオス系の場合 ～

( Birth of Quantum Irreversibility and its Lifetime:  
Case of Quantum Chaos Systems )

2016 年 9 月

September 2016

立命館大学大学院理工学研究科

基礎理工学専攻博士課程後期課程

Doctoral Program in Advanced Mathematics and Physics

Graduate School of Science and Engineering

Ritsumeikan University

松井 文宏

MATSUI Fumihito

研究指導教員：菅原 祐二 教授

Supervisor: Professor SUGAWARA Yuji



# 量子不可逆性の誕生と寿命 ～ 量子カオス系の場合 ～

## ( Birth of Quantum Irreversibility and its Lifetime : Case of Quantum Chaos Systems )

立命館大学大学院 理工学研究科  
基礎理工学専攻 (物理科学) 博士課程後期課程  
松井 文宏 \*

### 概要

古典極限でカオス性を示す量子系 (量子カオス系) は, 古典カオス系に特徴的な不可逆的挙動を模倣する事が知られている. この性質を用いれば, 少数自由度量子系であるにもかかわらず, 力学的な仕事を“熱化”し, 不可逆的なエネルギー輸送を可能にするダンパーを構成できる事が期待される. 我々は量子カオス系の理想的モデルとされる撃力回転子を用いた撃力量子ダンパー (KQD) モデルを提案し, 計算機模擬実験する事によって, 定常的且つ不可逆なエネルギー輸送が達成され, ある自由度内に熱分布が実現される事を示す. 不可逆性発生は相転移様の閾値現象として観測され, 量子カオス系を構成する自由度間のもつれ合い (エンタングルメント) が極めて重要な役割を演ずる.

この結果を受けて, 量子カオス系の自由度間のもつれ合いと不可逆性との間の関係を解明するために, 与えられた系の不可逆性を定量化する指標として, それが持続する<寿命>の概念を導入する. 寿命を非破壊的に測定する一般的方法が提案され, この方法を用いて, 数値実験と理論的解析を行った結果, 系の固有状態のそれぞれに寿命が存在し, 寿命と自由度間のエンタングルメントとの間に統計的に明確な関連が存在する事が明らかにされる. さらに, 理想的量子カオス系が示し得る寿命が, 従来見積もられてきた時間 (ハイゼンベルグ時間) よりもはるかに長い事が, 数値実験と理論的解析によって初めて示される.

---

\* 本博士論文の内容における一連の研究 [1-4] は, 池田研介教授および山田弘明博士との共同研究によるものであり, 投稿論文も全て共著によるものである.



# 目次

1	序論	5
2	量子カオスに導かれた不可逆的エネルギー輸送の一例： “量子ダンパー”	9
2.1	本章の序論	9
2.2	撃力量子ダンパーモデル	18
2.2.1	撃力回転子と双曲的な振る舞い	18
2.2.2	理想的に乱雑な撃力回転子としての Arnold’s Cat Map 系の導入, および量子化	22
2.2.3	撃力量子ダンパーモデルの導入	26
2.3	数値実験結果と考察	28
2.3.1	古典系における数値計算結果	28
2.3.2	量子系における数値実験結果	29
2.3.3	2-D 結合量子 Arnold’s Cat Map 系を用いた量子系における数値実験結果	33
2.3.4	不可逆転移の閾値および長時間挙動における $\hbar$ 依存性の解析	38
2.3.5	潜在的な不可逆性とその寿命	41
2.4	本章の結論	45
3	量子カオス系にける量子不可逆性の誕生と寿命	47
3.1	本章の序論	47
3.1.1	少数自由度量子系が示し得る不可逆挙動とその寿命	47
3.1.2	モデルの導入	48
3.1.3	系の振る舞いと解析の方針	51
3.2	解析に用いる近似計算および指標の導入	55
3.2.1	MSD の時間発展挙動に関する理論的な見積もり	55
3.2.2	固有状態による MSD の理論値解析と “Diagonal 近似”	58
3.2.3	不可逆性の寿命における定量的な定義, および数値的な測定方法	62
3.2.4	自由度間エンタングルメントと フォン・ノイマン エントロピー	67
3.3	エンタングルメントに伴う不可逆転移現象の解析	73
3.3.1	不可逆性の寿命の統計的な解析	73
3.3.2	転移領域における固有状態のエンタングルメントと異常揺らぎ	76
3.3.3	遷移確率エントロピー	80
3.3.4	不可逆性の寿命における遷移確率エントロピー依存性の解析	86
3.3.5	不可逆性の寿命における転移現象の機構: “量子不可逆性の誕生”	89
3.4	固有状態の重ね合わせと限界寿命	90
3.4.1	不可逆性の寿命における $M$ 依存性	90

3.4.2	確率論による寿命の理論解析	93
3.4.3	$M$ 依存性の消失とハイゼンベルグ時間	97
3.5	本章の結論	103
4	結論	105
5	付録	107
5.1	展望および付録について	107
5.2	Arnold's Cat Map 系における量子化の詳細過程, および各種の数値計算方法	108
5.2.1	量子化, および量子的な時間発展の数値計算方法	108
5.2.2	2 自由度の結合	111
5.2.3	フォン・ノイマンエントロピーの数値的な測定方法	112
5.2.4	時間発展演算子の固有状態の数値計算方法	114
5.3	調和振動子系における各種の数値計算方法	117
5.3.1	古典挙動の写像化	117
5.3.2	量子化, および量子的な時間発展の数値計算方法	118
5.3.3	エネルギー固有状態の数値計算方法	119
5.4	撃力量子ダンパー (KQD) 系に関する各種の数値計算方法	121
5.4.1	量子 Arnold's Cat Map 系と調和振動子系の結合, および時間発展の数値計算方法	121
5.4.2	エネルギー分布およびエネルギー期待値の数値的な測定方法	121
5.5	量子 KR 系と線形振動子系の結合系に関する各種の数値計算方法	124
5.5.1	線形振動子の量子化	124
5.5.2	量子 KR 系と線形振動子系の結合, および量子的な時間発展の数値計算方法	125
5.5.3	MSD の数値的な測定方法	127
5.6	量子 KR 系と線形振動子系の結合系における各種の理論的見積もり (詳細過程)	128
5.6.1	MSD からの相関面積 $A_\tau$ と自己相関関数 $C_r(s)$ の導入過程	128
5.6.2	固有状態による展開	128
5.6.3	MSD の長時間平均	130
5.7	“最小の観測確率エントロピー” としてのフォン・ノイマンエントロピー	132
5.8	固有状態のフォン・ノイマンエントロピーおよび異常揺らぎの $\hbar$ 依存性	134
6	謝辞	137



## 1 序論

我々の日常的なスケールの自然現象において、不可逆的なものは実にありふれている。たとえば熱的な現象は、その最も身近な例の一つである。熱いものを大気中に放っておくとやがて冷めてしまうが、しばらくすると再び勝手に温まっていた、という事は自然には起こらない。もし温まっていたとすれば、目を離した隙に誰かが人為的に加熱したか、より熱いものと何かの拍子に接触してしまったか、とにかく他に何か理由があるに違いない。誰に理由を尋ねても、物理に詳しい人かどうかに関わらず、すぐに同じような答えが返ってくるであろう。即ち、大気中で熱いものが冷めるという自然の過程が不可逆的なのは、我々の生活にとってはあまりにも当たり前の事であって、誰もが日常的な経験を通して知っている事である。さらに、自然現象に見られる不可逆性のもう一つの例として、拡散が挙げられる。拡散は特定の現象というよりは、いくつもの自然現象において様々な形で見られるものである。たとえば気体中での流れによる煙の拡散や、液体中でのブラウン運動による粒子や分子の拡散などがよく例に用いられる。先に述べた、熱いものから大気への熱の移動も、エネルギーにおける一種の拡散である。これらの現象の時間発展はすべて不可逆的である。即ち、拡散的な自然現象においては、ある時に、空間の狭い領域に収束した、あるいは秩序だった初期状態——流体中で一か所に集まった粒子群や、綺麗に整列させて配置した粒子群、または金属板の一か所を周囲の温度よりも熱くした状態など——を用意しても、それは時間の経過に伴って拡がりながら散り散りになっていき、最終的にあらゆる場所で均質かつ無秩序な状態になろうとする。逆に、そのような均質かつ無秩序な状態から、一か所に収束した秩序だった状態へと戻る事は、自然には起こらない。たとえば我々が机に座りながら長時間作業をしているとき、常に同じ場所で呼吸をされているのは、呼吸によって増えた二酸化炭素が周囲へと拡散していき、代わりに減った酸素が周囲から拡散してきて補充されるからである。逆に、口のまわりから酸素だけが逃げていって、代わりに二酸化炭素だけが周囲から集まってきてしまうような事は起こらないし、それを恐れている人も見当たらない。即ち我々は、このような拡散の結果が、最終的に全体が均質に“ならされた”状態に落ち着き、そしてその過程が不可逆的であるという事を、経験的な常識として知っているのだと言える。以上に例を挙げた通り、我々の身の周りの適当な自然現象に注目すると、大抵の場合は、どこかで何かしらの不可逆的な変化を伴っているものである。この世界では苦勞して得たエネルギーも使えば熱になって終わりであるし、形あるものはやがて散り散りになってしまうが、我々は普段それを特に疑問に思う事もなく、とにかく過ぎてしまった事は元に戻らないものなのであって、この世界はそうにできているのだと受け入れて暮らしている。

一方で、なぜ我々の世界がこのように不可逆性に満ちているのかという問いに、はっきりと完全な形で答える事は決して容易ではない。この種の議論は、古くはボルツマンの時代にまで遡り<sup>\*1</sup>、現代でも複数の研究領域においてなお続いている。そのような不可逆性の根源の議論において、まず最初の出発点となる問題は、我々の世界において運動を司る古典力学や量子力学などの基本法則が、時間反転操作に対して対称な形をしているという事実である [5]。即ち、基礎方程式の解とし

---

<sup>\*1</sup> ボルツマンはその代表的な功績として知られる通り、分子運動論的な微視的振る舞いに統計的な観点を併せて用いる事によって、既に経験的に知られていたエントロピー増大則の理論的解釈を与えた。

て得られる任意の運動において、それを時間反転した運動もまた解となるから、そのような運動は実際に起こり得るはずである。たとえば、適当なポテンシャルエネルギーの下で古典力学的な運動をしている粒子があったとして、ある瞬間に速度ベクトルの向きだけを反転させると、それまでの運動において時間を逆回ししたように、粒子は同じ軌道を描きながら戻っていく<sup>\*2</sup>。時間に依存する外力があればそうならないように思えるが、それでも外力が他の自由度との相互作用である事を考えると、互いに影響し得る全ての自由度の初期状態をうまく設定する事ができれば、任意の運動に対して時間を逆回ししたような運動を実現する事ができる。そしてこの事は、古典力学が破綻してしまうような微視的スケールにおいても破れない。適当な量子状態の、純粋に量子力学的な時間発展に対して、やはり時間を逆回ししたように元に戻っていく量子状態（いわゆる時間反転状態）を用意する事が理論上確かに可能である<sup>\*3</sup>。つまるところ、この世界における基本法則の解としては、冒頭で述べたように我々が不可逆的だと見なしている自然現象に対して、その逆過程が起こっても別によいはずであって、それを実際に目にする機会がないという事はそれほど自明ではないのである。このような不可逆性の問題に対する一般的な説明は、主に確率と統計による観点から行われる。即ち、自然現象の逆過程は確かに原理的には起こり得るのであるが、そのような逆方向の変化が起こる確率よりも、順方向の変化が起こる確率の方がずっと大きいので、現実的には一方向的に時間発展するのだというような統計力学の議論がその例である。ただし、物理の基本法則は決定論的であるので、その上で生じる現象を確率論的に見積もるためには、いくつかの前提を置く必要がある。古典統計力学の歴史的な成り立ちの経緯をなぞるように議論が進められる場合は、まず我々の日常スケールを構成する自由度の数が非常に膨大であるという事が前提とされ、それらの間の無数の相互作用によって微視的状态の振る舞いが乱雑化し、系にエルゴード性がもたらされるといふ仮定<sup>\*4</sup>が置かれるのが普通である。さらに我々の日常的なスケールにおける現象は、そのような微視的状态の集団的な振る舞いであるので、それらのある程度の尺度で粗視化して見る事によって、現象の時間発展に確率・統計的な見積もりが適用されるようになる。

しかしそれならば、自然現象の系を構成する自由度の数をずっと少なくしていった場合に、どこまで小さな系において、不可逆的な振る舞いが生じ得るであろうかという点に強い興味が生じるものである。ある程度よりも小さなスケールにおいては系を量子力学的に扱わなければならないであろうが、その極限として1自由度の量子系の振る舞いはどうであろうか？そして2自由度あるいは3自由度とした際に、その振る舞いが不可逆的になってくるような兆候が見られるであろうか？我々の日常スケールの系における自由度の数は実際に膨大なのであるから、そのような極端な状況について知らなくとも十分であるという考えもあるかもしれないが、しかし上の問いは即ち、この世界の振る舞いに不可逆性が誕生する瞬間の描像を掴みたいという、根本的な知的欲求から湧き上がってくるものである。そしてこのような少数自由度の系が示す不可逆性において、極めて重要と

<sup>\*2</sup> たとえば、キャッチボールで受け取ったボールを元の人に投げ返す時などは、これに近い事をしている。

<sup>\*3</sup> ただし、観測による波束の収縮については、それ自身が極めて難しい問題であるため、ここでは想定していない。ここでは、シュレーディンガー方程式に基づく決定論的な（影響し得る全ての自由度を含めた系全体としてユニタリな）時間発展のみを考えている。

<sup>\*4</sup> いわゆるエルゴード仮説であり、実際に成り立つ事が証明されている力学系は限られる。

なるのがカオスの概念である。古典的スケールのニュートン力学においては、自由度の数がある程度限られた状況下であっても、カオスの双曲的な性質による相空間の混合によって、力学系の運動は非常に乱雑なものになり得る。特に、ある種の理想的な力学系のモデル<sup>\*5</sup>は、それ自身の時間発展によってエルゴード性を示し得る事が知られている [6]。自然の系では相空間上のカオス領域が限られている状況が一般的であろうが、しかし強いカオスは運動に初期値鋭敏性をもたらし、系の初期状態における任意に小さい誤差は時間に対して指数的に増大して [7]、適当な時刻の状態との二時刻の自己相関つまり“過去の状態の記憶”は時間経過に伴い減衰しながらやがて喪失する。そして、我々が微視的状态の僅かな違いを認識あるいは制御できる現実的な精度には限界があるので、粗視化によって確率・統計的な観点を持ち込めば、やはり現象の逆過程が実現されるような確率は十分に小さく、そのような逆過程を実現する初期状態を用意する事も極めて困難である事が示される。よって自由度の数の多さを持ち出さずとも不可逆性を説明し得るように思えるのであるが、一方でこのような説明を量子力学的なスケールにそのまま持ち込む事はできない。そこでは量子力学と古典力学そのものの原理的な違いや、系の振る舞いにおける量子-古典対応の破綻などが障壁となる。

そのため量子と古典との間を繋ぐ研究が行われており、これまでに (特に 1970 年代頃から) 多くの重要な結果が示されている。まずそもそも量子状態の完全な時間発展はユニタリであるから、その下での適当な 2 つの状態における同時刻の相関 (即ち状態ベクトルの内積) は時間経過に対して不変であり、従って孤立した量子系のヒルベルト空間における運動に、初期値鋭敏性のような不安定性を見出す事はできないように思える。これに対して、現実的には系が外部から何らかの影響を受けてしまう事を想定し、摂動を受けながら時間発展する状態と、本来の無摂動の状況下で時間発展する状態との間の相関が解析され、その減衰には系の古典対応物がカオスかどうかの影響が示されている [8]。この種の解析指標は Fidelity として用いられ [9]、量子情報などの分野においても盛んに解析されている [10] <sup>\*6</sup>。一方で、量子状態は具体的な基底で表示すれば波動関数で表され、それは空間的に広がりを持った分布関数としての側面を持っているから、カオス系の量子対応物には、波束そのものの時間発展に拡散の概念を当てはめる事が可能である<sup>\*7</sup> [14]。しかし、そのような量子拡散においては、仮に空間が無限の広さを持っている場合においても、量子性によって短時間で拡散が抑圧され、最終的に局在した状態で留まってしまう現象が見られる。たとえば典型的なカオス系である撃力回転子 (Kicked Rotor) 系の一つとして有名な Standard Map 系は、1 自由度の古典系においてもその振る舞いによって自身の運動量空間に永続的な拡散を生じさせるが、その量子対応物における波束の拡散は、非常に短い時間スケールで局在してしまう。この現象はアンダーソン局在の問題に置き換えて解釈できる事が分かっている [15]。ところで先にも触れた通り、現実の系は外部からの多少の影響を受ける事が考えられるが、この拡散の局在は、系に外部から時間変動する古典雑音を加えると、非常に弱い雑音強度において閾值的に解消され、古典系と

<sup>\*5</sup> たとえば K 系 (K-System) など。ここでの“力学系”とは、決定論的な時間発展をする系を数学的にそう呼んでいる。

<sup>\*6</sup> 量子系における相関の喪失は、量子コンピュータなどにおいては逆に深刻な問題として重要である [11-13]。

<sup>\*7</sup> 古典系の拡散現象においては、多数の微視的状态の振る舞いを粗視化して見る事によって分布がもたらされると見なすが、量子系においてはこのように、個々の状態そのものに対しても分布の拡散的な描像を当てはめる事ができる。

同様のエルゴード性や混合、時間反転特性などの性質が回復する事が示されている [16, 17]. ただし、系の外部から加えられる古典雑音というのは、そのもの自体が古典的な不可逆性を内包している概念であって、純粋に量子力学的なユニタリの時間発展の枠外におけるものである事に留意する必要がある. そこで古典雑音の代わりに、カオスな量子撃力回転子の自由度を複数結合すると、純粋に量子力学的な時間発展であるにも関わらず、やはり非常に弱い相互作用強度において閾值的に古典性が回復する事が示されており [18, 19], これは即ち、結合量子カオス系の互いの自由度が、互いの振る舞いを古典雑音のように認識する事で、共同効果のように古典カオス的な不可逆性を回復したと解釈し得るものである [18]. 本博士論文の内容における一連の研究 [1–4] も、そのような観点の影響を強く受けたものである.

無限に広い空間を持つ撃力回転子系や摂動撃力系および乱雑ポテンシャル系などにおいては、量子拡散の局在・非局在転移 [20–23] や時間反転特性 [24–26] などの研究が行われているが、そうした系における拡散は、カオス的に振る舞う自由度の空間そのものの上で生じるのが特徴的である. そのような場合には時間発展演算子の固有状態そのものの空間的な性質が重要である. 一方で我々は本研究において、量子カオスの時間的な振る舞いによって生じる、量子的な雑音源としての性質に最大限の興味を持って議論を行いたい. そのため本研究においては、注目する量子カオス系として、有限面積の閉じた相空間を持ちながらも、一方でその狭い相空間の全域において理想的に乱雑に振る舞う系 (主に Arnold's Cat Map 系) を対象として扱う. 空間が狭いために、自身の自由度の上では量子拡散が生じる余地は無く、さらに時間発展演算子の全ての固有状態も空間的に局在せずに全体に拡がりきってしまっている. そのような系に対して、全くカオスでない調和振動子や線形振動子などの自由度を弱く結合し、そこに生じる量子拡散を通して不可逆性を解析する. それは量子カオスの純粋に時間的な振る舞いによって誘発される拡散である. その振る舞いが雑音的であれば、古典系においては常拡散が永続的に持続し、よって現象は完全に不可逆的なものとなる. さて、量子カオスはどこまで古典雑音を模倣し得るであろうか? 実際に我々はその時間スケールに“不可逆性の寿命”という概念を当てはめて定量的に解析する. ただしその過程は、我々の日常的な感覚とは乖離したやや抽象的な議論を含む. そこでまず第 2 章において、我々にとって馴染みのある“熱”になぞらえた不可逆的なエネルギー輸送という形で、現象論的な導入を行う. そこにおいて、やはり量子カオス同士の結合強度がある閾値を超えると定常的かつ不可逆的なエネルギー輸送が実現され、また調和振動子のエネルギー空間にも、理想極限において期待される統計的な熱分布が実現される事が示される. 続く第 3 章では、同様の閾值的な現象が不可逆性の寿命においても生じる事を示した上で、それと量子カオスの自由度同士のエンタングルメントとの間にある統計的な関連性が明らかになる. さらに、数値実験と理論的解析の結果として、最も理想的な場合において、量子カオス系の不可逆性が示し得る最長の寿命が、従来見積もられてきた時間 (ハイゼンベルグ時間) よりも遥かに長い事が導かれる.

## 2 量子カオスに導かれた不可逆的エネルギー輸送の一例： “量子ダンパー”

### 2.1 本章の序論

熱は、身近な自然現象において見られる不可逆性の典型である。具体的には、我々が「熱的」と呼んでいる自然の振る舞いには、必ず不可逆的なエネルギーの移動が伴っている。たとえば車輪を回すと、回転のエネルギーは軸受けの摩擦によって熱へと変わり、最終的に全てが熱になって車輪は止まる。熱くなった軸受けが、その熱によって車輪を回し、元とちょうど等しいエネルギーの回転運動が再現される事は、どのような装置を用いてもあり得ない。特に、自然にまかせて人為的な工夫をしなければ、生じた熱は、より低温な大気へと移動するのみである。車輪だけでなく、熱を伴うあらゆる運動についても同じ事が言える。熱力学の第二法則から示される通り、力学的な仕事は容易に熱に変わるが、その熱がすべて力学的な仕事へと戻る事は決してない。日常的な何かに対して、我々が加えた仕事は、いくつかの別のエネルギーを経て、最終的に熱になってしまう。このような熱的現象の不可逆性は、一見すると我々にとって不利益であり、この自然における厄介な宿命のように思えるかもしれない。確かに、何をするにも常に摩擦が付き纏ってエネルギーを浪費してしまう事や、永久機関の夢を打ち砕いた事などを考えれば、ある意味ではその通りである。しかし一方で、時間反転対称な基本法則に支配されたこの世界において、時間の流れに伴って多種多様な自然の変化が見られるのは、このような熱的な不可逆性があるからこそのものであるとも言える。そして何よりも、我々は日常において、熱的な不可逆性を常に利用しながら生活をしている。例えば、我々が地面を歩けるのは摩擦のおかげであるが、これはエネルギーの不可逆的な散逸現象である。さらに歩行の際、我々はそっと準静的に足を着地させているわけではなく、ある程度の勢いをもって足をついているが、そのような鉛直方向の運動エネルギーは、靴底のゴムや地面（あるいは関節などの体組織）の変形によって散逸され、最終的に熱へと変わっているはずである。そうでなければ我々は完全弾性体となってしまうから、鉛直方向に弾んでしまつてまともに歩行できなくなる。実際に自動車などでは、車体をスプリングで支えているため、このような鉛直方向の運動エネルギーが振動として蓄積して問題となり得る。そのため、振動のエネルギーを効率的に熱へと変えて減衰させるため、車体と車輪とを繋ぐ箇所に“ダンパー”という装置が用いられている<sup>\*8</sup>。単純なダンパーは図1(a)に示した通り、ピストン状の構造をしており、その動きがシリンダ内の油を攪拌する事によって、油の粘性抵抗で振動を減衰させる。その結果として油の温度が上がり、最終的に大気へと放熱される。従ってこのダンパーは、力学的な仕事を熱に変える事によって、車体の振動から大気へと、常に一定の方向へエネルギーを移し続けている系であると見なせる。これは熱の、不可逆的なエネルギー輸送という性質を、最も積極的に利用している例の一つであると言える。

<sup>\*8</sup> ダンパーとは、振動を減衰させるために一般に用いられる装置の総称であるが、自動車用のもの（ショックアブソーバーとも呼ばれる）が身近で分かりやすいため、ここで具体例として取り上げた。なお、実際の自動車用ダンパーは内部に高圧ガスが封入されている場合もあるため、個人で分解するのは危険であるが、模型自動車用のオイルダンパーが安価で購入でき、それはまさに図1(a)の模式図の通りの構造をしている。実際に粘度の高い油を入れて伸縮させ続けると、少しずつ暖かくなってくる事を体感できる。

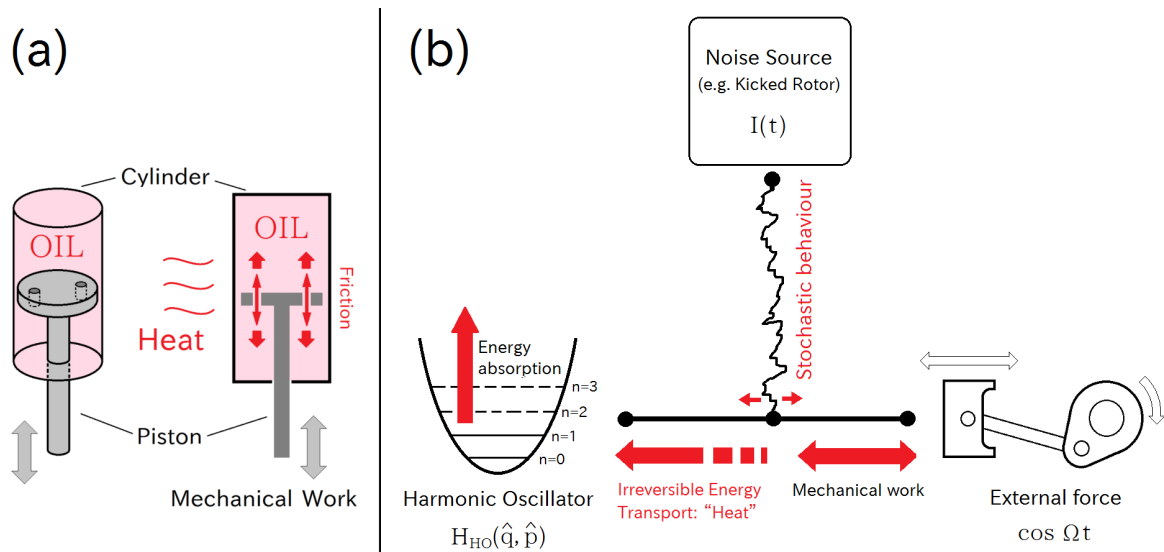


図1 ダンパーの動作の模式図。(a)は我々の日常スケールにおける古典的なダンパーの例である。穴のあいたピストンが、シリンダー内に充填された油を攪拌し、その粘性抵抗によって、振動の力学的な仕事を熱に変えて減衰させる。(b)は本章で扱う“量子ダンパー”における動作の概念図である。外力による振動  $\cos \Omega t$  がもたらす力学的な仕事を、雑音的に振る舞う自由度  $I(t)$  の寄与によって“熱化”し、そのエネルギーを調和振動子へと不可逆的に輸送する仕組みである。本節ではまず  $I(t)$  の時間変化を乱数と見なして、理想的な極限における挙動を見積もるが、後の節においては量子撃力回転子 (Quantum Kicked Rotor) 系を雑音源として用いる。

我々の日常スケールにおいては、このように極めて単純な系によっても、力学的な仕事はたやすく熱へと変わる。自然現象が、このように熱的すなわち不可逆的である理由に対する一般的な説明は、系を構成する自由度の数が、巨視的である事を前提としている。それならば、第1章においても触れた通り、どこまで小さな系において、熱的な現象が生じ得るであろうかという自然な疑問が浮かぶ。究極的な場合として、たった数個の自由度から成る量子系では、熱のような現象は期待できないであろうか。そうとは限らない。巨視的自由度の相互作用によるエネルギー輸送の不可逆化は、あくまでも一つのモデルであると言える。そのようなモデルは、確かに自由度の数がたった数個では全く意味をなさないであろう。しかしそれは、極めて少ない自由度の量子系においても成り立つ、別の不可逆性の機構が存在する事を否定するものではない。実際に古典系においては、熱浴のような大自由度の乱雑な寄与を、少数自由度のカオスが代替し得る。よって巨視的な熱浴の乱雑さからもたらされる不可逆性とは異なり、完全に孤立した量子系においても、少数の内部自由度の相互作用によって、自己組織的に不可逆な振る舞いを生み出す事は不可能ではない。実際に古典的なカオス系は理想的な不可逆性を示す事が可能である [27]。従って、少数自由度の系においても不可逆的なエネルギー輸送のような現象が生じ得るものである [28–30]。ただし熱は本来マクロな概念であるから、少数自由度の量子系にそのまま適用する事はできない。よって本章では、そのように熱に類似した、少数自由度の量子系における不可逆的エネルギー輸送の事を、二重引用符で囲って“熱”と呼ぼう。同様に、そのような現象が実現される事を“熱化”と呼ぶ事にする。本章の

目的は、実際に少数自由度の量子系において、そのような現象の発生を捉える事である。これはつまり、量子スケールのダンパー、即ち“量子ダンパー”のモデルを作る事であるとも言える。それも、可能な限り自由度数の少ないコンパクトなモデルで、いわば究極的にミクロなスケールにおける“熱”の発生を捉え、その性質を詳しく解析したい。方法には、理論面からの見積もりと、計算機上での数値実験を併せて用いる。

具体的に、本章で我々が用いるモデルのハミルトニアンは、以下の  $\hat{H}_{\text{QD}}$  の通りに表される：

$$\hat{H}_{\text{QD}} = \hat{H}_{\text{HO}}(\hat{q}, \hat{p}) + \eta \hat{q} f(I(t)) \cos \Omega t \quad (1)$$

このモデルの模式図は図 1(b) に示した。ハミルトニアン各部の説明を踏まえてつつ、量子ダンパーを構成する上で、最低限必要となる要素を整理しておきたい。まず、量子ダンパーの目的は、力学的な仕事のエネルギーを“熱化”して定常的に輸送する事であるから、それには力学的な仕事を供給する存在が必要である。現実の熱的現象の物理系においては様々なものが考えられるが、ここでは仕事の供給源を、抽象的な外力項  $\cos \Omega t$  で代表させている。これは図 1(a) の“古典ダンパー”の例においては、外部からの入力によってピストンを周期的に動かす事に相当する。量子的なスケールでは外場の振動と見てもよいし、ともかく何らかの振動的な外部自由度の寄与を一般化したものである。続いて必要となるのが、“熱化”されたエネルギーを輸送する先の自由度である。(1) 式において  $\hat{H}_{\text{HO}}(\hat{q}, \hat{p})$  のハミルトニアンで記述されている自由度がそれであり、我々はこれに調和振動子：

$$\hat{H}_{\text{HO}}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2} + \omega^2 \frac{\hat{q}^2}{2} \quad (2)$$

を用いる。 $\hat{q}, \hat{p}$  はそれぞれ調和振動子の位置および運動量であり、 $\omega$  は角振動数である。この調和振動子の役割は、図 1(a) の古典ダンパーでは、仕事を加えられて熱くなる油に相当するし、量子スケールにおいては、励起される原子のようなものと例える事もできる。我々は、この調和振動子のエネルギー分布や期待値を測定し、その時間変化を解析する事によって、系に不可逆的なエネルギー輸送が生じているかどうかを判断する。

以上に述べた、仕事を供給する外力項と、エネルギー輸送先の調和振動子は、(1) 式の相互作用項  $\eta \hat{q} f(I(t)) \cos \Omega t$  の形で繋がっている。ここで  $\eta$  は相互作用強度である。 $I(t)$  は、不可逆的なエネルギー輸送において本質的な役割を果たす、乱雑な寄与を抽象化したものであり、 $f(I)$  は  $I$  の適当な関数である。仮に、この相互作用項から  $f(I(t))$  の部分を除いた場合を考えると、調和振動子は単純に  $\eta \cos \Omega t$  の周期外力で強制振動されるだけの系となるから、そのエネルギー収支の時間発展も振動的となり、よってそこに不可逆的な現象の生じる余地は無くなる。ここで普通の自然現象における熱の発生機構を振り返ると、そこでは最終的に熱を蓄える自由度に対して、力学的な仕事はこのように直接的な形ではなく、乱雑で揺動的な形で作用しているはずである。それは例えば、気体・液体を構成する無数の分子が相互作用した結果であったり、あるいは固体の接触面における無秩序な粗い形状の結果であったりする。そこで我々のモデルでは、このように乱雑に変化する揺動的な寄与を抽象化して  $I(t)$  と置き、それを (1) 式のように相互作用項に組み込んでいる。いわば  $I(t)$  は、系のエネルギー輸送に不可逆性をもたらすための、“雑音源”の自由度である。

我々は後の節において、量子カオスの乱雑な振る舞いによってこの雑音を発生させるが、まずは  $I(t)$  が理想的に乱雑な場合において、系に生じるエネルギー輸送の挙動を見積もっておきたい。そこで簡単のため、いまは  $I(t)$  は周期  $T$  ごとに变化する、 $[0, 2\pi)$  の範囲の一様乱数であると見なそう。そして  $f(I(t)) = \cos I(t)$  とする。まず、調和振動子の生成消滅演算子  $\hat{a} \equiv \sqrt{\omega/2\hbar}(\hat{q} + i\hat{p}/\omega)$  および  $\hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\omega/2\hbar}(\hat{q} - i\hat{p}/\omega)$  を用いて全系のハミルトニアン：(1) 式を記述すると、

$$\hat{H}_{\text{QD}} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \eta \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) f(I(t)) \cos \Omega t \quad (3)$$

のように表される。ハイゼンベルグの運動方程式  $i\hbar(d\hat{a}/dt) = [\hat{a}, \hat{H}]$  と、生成消滅演算子の関係  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$  および  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger \hat{a}] = \hat{a}$  によって、 $\hat{a}$  の時間変化は以下のように導かれる：

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = -i\omega\hat{a}(t) + \frac{i\eta}{\sqrt{2\hbar\omega}} f(I(t)) \cos \Omega t \quad (4)$$

これ以降において、このように時間引数 ( $t$ ) を付けた演算子は、全てハイゼンベルグ描像  $\hat{a}(t) = e^{-\frac{i\hat{H}_{\text{QD}}}{\hbar}t} \hat{a} e^{\frac{i\hat{H}_{\text{QD}}}{\hbar}t}$  によるものとする。ここで  $\hat{b}(t) \equiv e^{i\omega t} \hat{a}(t)$  および  $\hat{b}^\dagger(t) \equiv e^{-i\omega t} \hat{a}^\dagger(t)$  を導入すると、次のように右辺の第一項を落とせる：

$$\frac{d\hat{b}(t)}{dt} = \frac{i\eta}{\sqrt{2\hbar\omega}} f(I(t)) e^{i\omega t} \cos \Omega t \quad (5)$$

ここからは、 $I(t)$  が  $t = nT$  ( $n \in \mathbb{Z}$ ) のタイミングで变化するものとし、その変化の周期  $T$  ごとに運動を見積もる事にしよう。そのため、 $T$  を単位とし、 $I(t)$  の値が変化した直後の瞬間 ( $+0$ ) を指し示す、整数の時刻  $\tau$  を導入する。即ち  $t$  と  $\tau$  との関係は、

$$t = \tau T + 0 \quad (\tau \in \mathbb{Z}) \quad (6)$$

とかける。 $t$  に依存している各部分についても、 $\hat{b}_\tau \equiv \hat{b}(\tau T + 0)$ 、 $I_\tau \equiv I(\tau T + 0)$ 、 $f_\tau \equiv f(I_\tau)$  のように整数時刻  $\tau$  でラベル付けする。このようにすれば、 $\tau T < t < (\tau + 1)T$  の間において、 $f(I(t))$  は  $f_\tau$  のまま不変であるから定数扱いできる。これにより、周期  $T$  ごとの  $\hat{b}$  の変化量は、(5) 式を  $t$  で積分して、

$$\hat{b}_{\tau+1} - \hat{b}_\tau = \frac{\eta}{2\sqrt{2\hbar\omega}} f_\tau \left[ \frac{e^{i\gamma t}}{\gamma} + \frac{e^{i\nu t}}{\nu} \right]_{\tau T}^{(\tau+1)T} \quad (7)$$

のように表される。ここで  $\omega \neq \Omega$  とし、

$$\gamma \equiv \Omega + \omega \quad (8)$$

$$\nu \equiv \Omega - \omega \quad (9)$$

と置いた。これ以降は、 $\omega$  と  $\Omega$  を近共鳴な条件に選んだ  $|\nu| \ll |\gamma|$  の場合を扱う。近共鳴にする理由については、この節の末で詳しく述べる。この場合、 $e^{i\gamma t}/\gamma$  よりも  $e^{i\nu t}/\nu$  の寄与が支配的になるため、前者の寄与はほとんど無視できる。よって (7) 式の値は近似的に、

$$\hat{b}_\tau \simeq \frac{\eta(e^{i\nu T} - 1)}{2\nu\sqrt{2\hbar\omega}} \sum_{k=0}^{\tau-1} e^{ik\nu T} f_k \quad (|\nu| \ll |\gamma|) \quad (10)$$



と見積もれる．このように  $\hat{b}_\tau$  の長期的な挙動は、複素平面上において様々な方向からランダムな揺動  $f_k$  を受けるランダムウォークで近似する事ができる．

さて、時刻  $\tau$  における調和振動子のエネルギーは  $E|_\tau = \hbar\omega (\hat{b}_\tau^\dagger \hat{b}_\tau + 1/2)$  で得られる<sup>\*9</sup>．基底状態のエネルギーは  $E_0 = \hbar\omega/2$  であり、これを初期状態に選ぶ．すると、時刻  $\tau$  までに調和振動子が外力項から“吸収した”エネルギーは  $E|_\tau - E_0$  であり、これは  $\hat{b}_\tau$  の絶対値の自乗に比例する．従って、調和振動子のエネルギーは揺動的に変動するが、しかし長時間の領域ほど、より高い値をとる確率が高まる．ここでいまは  $f_\tau = f(I_\tau)$  であり、 $I_\tau$  は時間変化する乱数列であったが、独立に振った  $I_\tau$  の乱数列の結果について平均  $\langle \dots \rangle$  をとると<sup>\*10</sup>、エネルギー吸収量の期待値  $\Delta E \equiv \langle E \rangle_\tau - E_0$  は、

$$\Delta E \simeq \frac{\eta^2 |e^{i\nu\tau} - 1|^2}{8\nu^2} \sum_{k=0}^{\tau-1} \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \langle f_k f_\ell \rangle \cos((k-\ell)\nu T) \quad (11)$$

$$= \frac{\eta^2 |e^{i\nu\tau} - 1|^2}{8\nu^2} \sum_{\tau'=0}^{\tau-1} A_{\tau'} \quad (12)$$

と表せる．ここで  $A_{\tau'}$  は、(11) 式の和における各時刻ごとの増分：

$$A_\tau \equiv \langle f_\tau^2 \rangle + \sum_{k=0}^{\tau-1} \left( \langle f_k f_\tau \rangle + \langle f_\tau f_k \rangle \right) \cos((k-\tau)\nu T) \quad (13)$$

であり、相関面積 (Correlation Area) と呼ぶ．いまのように、 $I_\tau$  が  $\tau$  について完全に理想的な乱数列であると見なせる場合には、異なる二時刻  $\tau \neq k$  における揺動寄与の自己相関  $\langle f_k f_\tau \rangle$  は 0 に落ちる<sup>\*11</sup>．さらに、いまは  $f(I_\tau) = \cos I_\tau$  であり、 $I_\tau$  の分布は  $[0, 2\pi)$  の範囲で完全に一様としているから、 $A_\tau$  は時間によらず

$$A_\tau \simeq \langle f_\tau^2 \rangle \quad (14)$$

$$\simeq \int_0^{2\pi} \cos^2 IdI \quad (15)$$

$$= \frac{1}{2} \quad (16)$$

のように概ね一定値で推移すると見なせる．従ってこの場合、調和振動子のエネルギー吸収量は、

$$\Delta E \simeq \frac{\eta^2 |e^{i\nu T} - 1|^2}{16\nu^2} \tau \quad (17)$$

<sup>\*9</sup> 順位  $n$  におけるエネルギー固有値  $E_n$  と区別するため、このような  $|_\tau$  の形の表記にしている．期待値をとったものは  $\langle E \rangle_\tau$  とする．

<sup>\*10</sup> 次節以降において  $I$  は量子系の自由度で置き換えられるが、その場合は波動関数がそもそも統計的な分布関数としての性質を持っているため、そこではこの平均操作は、普通に量子力学的な期待値をとる事に相当する．いまは系の理想極限的な挙動を見積もるために  $I$  を乱数化しているので、量子力学的な期待値をとる代わりに、このように独立な乱数列について平均をとっている．

<sup>\*11</sup> つまり (14) 式は、 $I(t)$  に相当する系の振る舞いが、マルコフ過程であると見なせる極限における値である．より一般的なガウス過程の場合においても、十分離れた二時刻  $|k-\tau| \gg 1$  について自己相関  $\langle f_k f_\tau \rangle$  は 0 に落ちるから、 $A_\tau$  の長時間平均  $\lim_{\tau \rightarrow \infty} A_\tau / \tau$  の値は一定値に収束する．よって  $A_\tau$  は、初期のごく短い時間を除いて、この一定値で概ね推移する事が見込める．

のように、時間について線形に増加し続ける事が見込める。また、調和振動子のエネルギー分布、即ち調和振動子のエネルギー測定において  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  の観測値を得る確率分布  $P(E_n)$  は、以下の通り指数関数の形となる事が見積もれる<sup>\*12</sup>：

$$P(E_n) \propto e^{-c E_n} \quad (18)$$

このエネルギー分布はちょうどマクスウェル=ボルツマン分布と同じ形をしている。なお、ここまで述べてきた生成消滅演算子による計算は、あくまでも理論的な見積もりのためであって、実際に調和振動子の時間発展を計算機上で再現する方法については、付録 5.3 に掲載している。

以上の見積もりの通り、このモデルでは確かに、 $\cos \Omega t$  が供給する力学的な仕事を、 $I(t)$  の雑音的な振る舞いによって“熱化”し、調和振動子へと定常的かつ不可逆的に流し続ける事が原理的に可能である。ただし、この結果はあくまでも、 $I(t)$  の振る舞いが完全な乱数として扱える、理想の場合におけるものである。 $I(t)$  に実際の量子系の挙動を当てはめた場合には、事情はより複雑であるが、その詳しい解析は 2.3.2 節以降で行う。ところで、このモデルは量子系であるから、ここでは生成消滅演算子という量子的な量を用いて計算を行ってきたが、(17) 式や (18) 式は古典系においても同様に成り立つものである<sup>\*13</sup>。古典系の振る舞いを計算機上で再現するのは、単純に  $\eta f_\tau \cos \Omega t$  の大きさの力によって強制振動される調和振動子 [31] について、相空間座標  $(q, p)$  の運動を逐次的に計算すればよいだけなので簡単である。そして、その結果によって、量子的な干渉やエンタングルメントなどの影響を一切考えなくてもよい、ある意味で最も理想の場合における挙動を確認する事ができる。そこでまず、量子系の挙動を解析する前に、完全な乱数によって揺動される理想的な古典挙動の様子を確認しておきたい。実際に計算機上で再現した、調和振動子の古典相空間座標の時間発展を図 2 に示した。なお、写像化による高速な数値計算方法を付録 5.3.1 に掲載してある。

図 2 は、古典系において  $I(t)$  の値を疑似乱数<sup>\*14</sup>によって時間変化させつつ計算した、調和振動子の相空間座標  $(q, p)$  を、いくつかの時刻においてプロットしたものである。大量の点が描かれているが、それらは疑似乱数の種を変えた場合において、同時刻での  $(q, p)$  座標を重ねてプロットしたものである。即ち、それぞれの点について、 $I(t)$  の時間変化がそれぞれ別の (独立な) 乱数列として生成されている。左側の図は時刻  $\tau = 0$  での様子を表しており、この図の通り、 $(q, p) = (0, 0)$  の一点に収束した  $E_0 = 0$  の状態を初期状態として選んでいる。中央の図は、そこから時間発展させた時刻  $\tau = 1000$  での結果であり、 $(q, p)$  の分布が拡散的に広がっていく様子が見て取れる。右側の図はさらに時間発展させた時刻  $\tau = 2500$  での結果であり、分布がさらに広範囲に広がっている事が見て取れる。これらの計算において  $\omega = 1$  であり、調和振動子のエネルギー  $E = p^2/2 + \omega^2 q^2/2$  は、 $(q, p)$  の原点からの距離の 2 乗に比例する。従って、このような拡散に伴って、調和振動子の平均的なエネルギーは確かに増加しているはずである。実際に調和振動子のエネルギーの時間発展を求めた結果を図 3 に示した。

<sup>\*12</sup> 複素空間上で回転しつつ乱雑な揺動を受ける点の、原点からの二乗距離分布として、特性関数法により求められる。

<sup>\*13</sup> 古典系の場合は、基底状態におけるエネルギーの制約は無いため、単純に  $E_0 = 0$  となるように初期状態を選ぶほうが都合が良い。

<sup>\*14</sup> C++ の標準ライブラリ (C++11 以降) で提供されている、メルセンヌ・ツイスタ法による疑似乱数 (std::mt19937) を使用している。

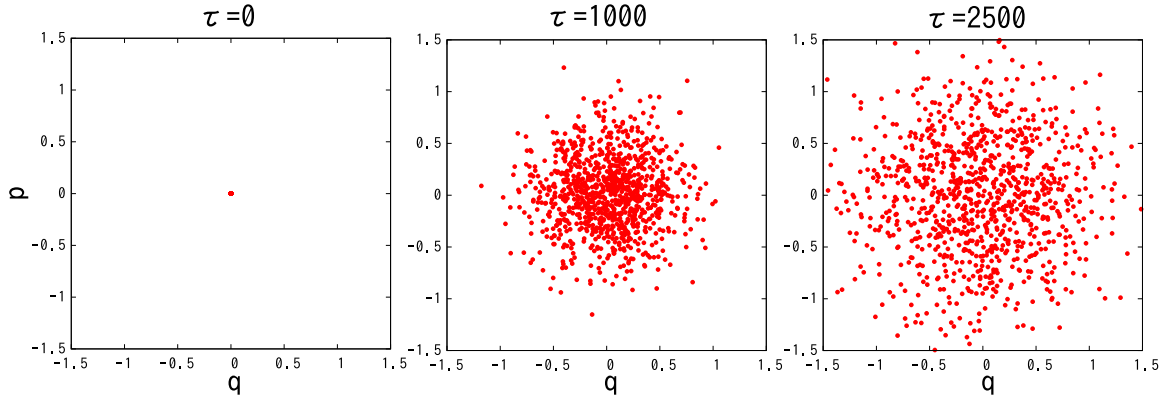


図2 古典系において、 $I(t)$  の値を疑似乱数によって時間変化させつつ計算した、調和振動子の相空間座標  $(q, p)$  の時間発展 (パラメータは 2.2.3 節の表 1 の通り). 大量の点が描かれているが、それらは  $I(t)$  の乱数の種が異なる (即ち独立な乱数による) 場合における、同時刻での結果を重ねてプロットしたものである. 左側の図は  $\tau = 0$  即ち初期状態であり、 $(q, p) = (0, 0)$  の一点に収束した  $E_0 = 0$  の状態に設定している. 中央の図は時刻  $\tau = 1000$  における結果であり、 $(q, p)$  が相空間上で拡散的に時間発展する様子が見て取れる. 右側の図は、さらに時間発展させた時刻  $\tau = 2500$  における結果であり、 $(q, p)$  の分布がより広範囲に拡がっている様子が見て取れる.

図 3(a) は、図 2 同様の計算において乱数の種の数 (図 2 においてはプロット点数に相当) を増やして統計的に求めた、調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E$  の時間発展である. いまは  $E_0 = 0$  となるよう初期条件を設定しているから、この  $\Delta E$  はエネルギー期待値  $\langle E \rangle = \langle p^2/2 + \omega^2 q^2/2 \rangle$  の値そのものである. 赤色の点列が、実際に離散時刻  $\tau$  が 100 ごとのタイミングで測定した  $\Delta E$  の値である. その背後に重なっている黒色の直線は、先の見積もりで得た理想的極限における理論値 (17) 式をプロットしたものである. 両者はよく一致しており、我々の見積もり通り、実際に調和振動子のエネルギーが定常的に増加している事が見て取れる. どれだけ長時間の振る舞いを計算しても、図 3(a) と同様の結果が得られる<sup>\*15</sup>. このように、 $I(t)$  が十分に乱雑に振る舞う場合においては、我々のモデルには確かに定常的かつ不可逆的なエネルギー輸送が生じる事を期待できる. 続いて図 3(b) は、調和振動子のエネルギー分布をいくつかの時刻において測定した結果を表している. なお、古典的には調和振動子のエネルギー分布  $P(E)$  は連続関数であるが、この図では後で扱う量子系との対応を考えて、便宜的に  $\hbar = 2\pi/64$  とした上で、ビン幅  $\hbar\omega$  のヒストグラムにおける相対度数をプロットしている. 横軸は各ビンの中間点におけるエネルギー値  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  であり、縦軸はそのビンにおける相対度数  $P(E_n)$  を対数軸でプロットしたものである. 結果が負の傾きの直線を描いていることから、調和振動子のエネルギー分布が (18) 式の通りの指数分布となっている事が分かる. この分布をマクスウェル=ボルツマン分布になぞらえて解釈するなら、時間  $\tau$  の経過に伴って指数の傾きが水平に近づいて行き、より“高温”になっている様子が見て取れる.

<sup>\*15</sup> ただし数値計算においては、極端に長い時間スケールにおいては計算誤差の蓄積の問題が生じ、さらに数値的に発生させる疑似乱数は一般に有限の (いま用いているものは非現実的なほどの長さであるが) 周期を持つ. そのような数値計算上の都合を除けば、図 3(a) の挙動は永続的に持続するはずである.

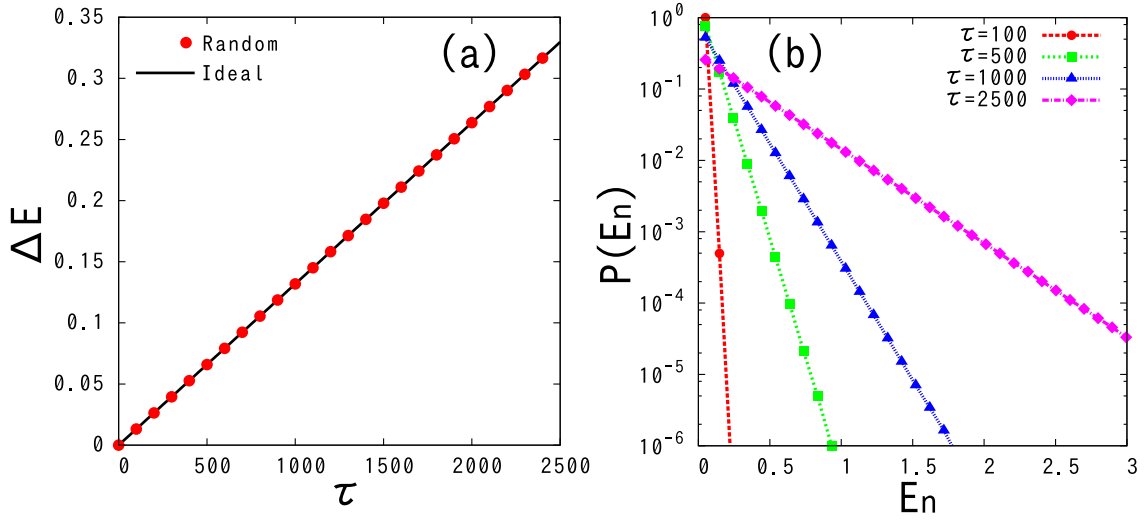


図3 (a) :  $I(t)$  に疑似乱数を用いた理想的な古典極限における、調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E$  の時間発展. 赤色の点列が、実際に計算機上で再現した古典系における結果を表している. 黒色の実線は (17) 式をプロットしたものである. 両者は非常によく一致している. この結果から、 $I(t)$  の振る舞いが理想的に乱雑であれば、少なくとも古典系においては、確かに (17) 式の通りの不可逆的なエネルギー輸送が実現される事が分かる. (b) : 同場合における、調和振動子のエネルギー分布. 本来、古典系でのエネルギー分布は連続関数であるが、後で扱う量子系との対応を考えて、便宜的に  $\hbar = 2\pi/64$  とし、ビン幅  $\hbar\omega$  のヒストグラムにおける相対度数をプロットしている. 横軸は各ビンの中間点におけるエネルギー値  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  であり、縦軸 (対数軸) はそのビンにおける相対度数  $P(E_n)$  である. 複数の時刻における測定結果を、色を変えつつ重ねてプロットしてある. この結果から、(18) 式の通りの理想的な指数分布が実現され、それをマクスウェル=ボルツマン分布になぞらえるなら、時間経過に伴って指数の傾きがより“高温”側へ移行している様子が見て取れる.

ここまでは、 $I(t)$  の時間変化を乱数列と見なしして挙動を見積もってきたが、次節以降では、この  $I(t)$  自体も乱雑に振る舞う量子系の自由度  $\hat{I}(t)$  で置き換える. その事も踏まえて、いくつかのパラメータの選択に際する留意点について述べておく. まず、 $I(t)$  が実際の何らかの系の自由度であるとすれば、それが調和振動子のエネルギー吸収の挙動に影響を与えるのと同様に、調和振動子や外力項  $\cos \Omega \tau$  の運動もまた、反動として  $I(t)$  の振る舞いに影響を及ぼすはずである. 特に、完全周期的な調和振動子との相互作用は、 $I(t)$  の系における運動の乱雑さに大きな影響を与え、 $I(t)$  の雑音源としての性能を“劣化”させてしまう可能性がある. 特に量子系においては、古典系よりもずっと小さな相互作用強度によって、系の振る舞いが変化してしまう事に注意が必要である. よって、この影響を抑えるためには、 $I(t)$  の自由度と調和振動子とを繋いでいる相互作用の強度  $\eta$  をできるだけ小さくしたい. しかしそうすると (17) 式の通り、量子ダンパーに生じるエネルギー輸送量は  $\eta^2$  に比例して劇的に小さくなってしまう. 量子ダンパーという名で呼ぶからには、調和振動子における量子化されたエネルギー単位  $\hbar\omega$  と比べて、有意に大きなエネルギー量の輸送を実現したいものである. そこで (17) 式の分母に注目すると、調和振動子と周期外力の角振動数  $\omega, \Omega$  を近共鳴な条件に選んで、 $\nu = \Omega - \omega$  の値を小さくすれば、エネルギー輸送量を増やせる事がわかる. ただし、 $\nu$

を小さくするだけでは、(17) 式の分子の  $|e^{i\nu t} - 1|^2$  も小さくなって  $O(\nu^2)$  となり、分母の変化の寄与を打ち消してしまうため意味が無い。従って、 $\nu$  を小さくするのに併せて、 $I(t)$  の変化の周期  $T$  を大きくし、 $|e^{i\nu t} - 1|^2$  を  $O(1)$  程度に保ってやる必要がある。以上に述べた理由により、本節で導入した量子ダンパーモデルの基本的なパラメータ  $\eta, \omega, \Omega, T$  の設定値は、以下の条件を満たすように選ぶのがよい：

$$\begin{aligned} & \text{(i)} \quad \eta \ll 1 \\ & \text{(ii)} \quad \nu (= \Omega - \omega) \ll 1 \\ & \text{(iii)} \quad |e^{i\nu T} - 1| \sim O(1) \end{aligned} \tag{19}$$

このように選べば、相互作用項が  $I(t)$  の自由度の雑音源としての振る舞いに与える悪影響を抑えつつ、量子ダンパーのエネルギー流量を減らさずに一定量確保する事が可能である。

なお、現実世界で量子ダンパーを作りたい場合のような実用上の観点を無視すれば、このように近共鳴な条件を用いてエネルギー輸送量を確保する事には、あまり本質的な意味は無いように思えるかもしれない。しかし実際には、非常に重要な意味を持っている。というのも、量子ダンパーには  $\cos \Omega t$  の周期外力項だけでなく、 $I(t)$  の自由度からも、ある程度のエネルギーが供給されるからである。具体的には、撃力の直前における  $I(t)$  の値を便宜的に  $I_-$  と書くと、この値を撃力によって  $I_+$  に瞬間的に切り替える操作に、全系のハミルトニアンを考慮すると  $(I_+^2 - I_-^2)/2T + \eta q [f(I_+) - f(I_-)] \cos \Omega t$  だけのエネルギーを要する。第一項はもともと単体の Arnold's Cat Map 系においても必要なものであるが、第二項は量子ダンパーの相互作用項によって生じるものであり、いわば量子ダンパーの動作のために最低限必要な駆動エネルギーであると言える。そのエネルギー収支は揺動的であるものの、長期的には不可逆的に調和振動子へと流れてしまう。実際に  $\Omega = 0$  即ち  $\nu = -\omega$  として、ハミルトニアンから仕事供給源の周期外力項の寄与を完全に落としても、(17) 式から時間毎に  $O(\eta^2)$  のオーダーの定常的なエネルギー吸収が生じる事が見積もれる<sup>\*16</sup>。即ち、本来は雑音源としての役割を担う  $I(t)$  を動作させるためのエネルギーの一部が、やむを得ず、定常的かつ不可逆的に調和振動子へと流れてしまうのである。そして、たとえ仕事供給源の周期外力項があっても、 $\omega$  と  $\Omega$  を近共鳴でない条件に選んだ場合には、調和振動子の時間毎のエネルギー吸収量のオーダーはあまり変わらず  $O(\eta^2)$  程度に過ぎず、 $I(t)$  の自由度から流入するエネルギーと同程度のオーダーとなる。その場合の  $I(t)$  はもはや雑音源というより、エネルギーの大部分を供給する熱浴と見なすのが相応しい。よってそのような場合には、系が本当に周期外力項  $\cos \Omega t$  由来の力学的な仕事を“熱化”して調和振動子に流しているのか、それとも単に熱浴にさらされた調和振動子のエネルギーが上昇しているだけなのかが、明確に判断できない。量子ダンパーのそもそもの目的は力学的仕事の“熱化”であるから、それを明確な形で実現するには、やはり近共鳴な条件を用いて、時間毎のエネルギー輸送量を  $O(\eta^2)$  と比べて有意に大きい値に保つ事が必要である。

<sup>\*16</sup> ただし (17) 式は、導出の過程で近共鳴条件による近似を用いているため、 $\Omega = 0$  の場合については数値因子に多少の誤差を含む。

## 2.2 撃力量子ダンパーモデル

### 2.2.1 撃力回転子と双曲的な振る舞い

前節においては簡単のため、 $I(t)$  の時間変化を乱数と見なしていた。しかし、そもそも系の振る舞いに乱数の概念を持ち込む事自体が、一般にはその背景に、ブラウン運動や熱浴との相互作用など、我々が制御できない大自由度の乱雑な寄与を暗に想定していると言える。我々の目的は、あくまでも少数自由度の孤立した量子系において“熱的”な現象を捉える事であるから、 $I$  の雑音的な時間変化もまた、具体的な量子系の運動によって実現する必要がある。即ち我々は、なるべく少数の自由度で、かつ可能な限り乱雑に振る舞うような量子系を用意して、それを量子ダンパー全体のハミルトニアンに含まれるように組み込まなければならない。そこで前節において行った見積もりの過程を振り返ってみると、調和振動子に定常的なエネルギー吸収を生じさせるために本質的に重要なのは、 $I$  自由度の振る舞いにおける二時刻の自己相関  $\langle f_k f_\ell \rangle$  が、短い時間スケール ( $|k - \ell|$ ) で喪失する事であったと言える。ところで、古典対応物がカオスである量子系では、そうでない量子系と比べて一般に相関が速やかに落ちる事が知られており、例えば Fidelity [8] の分野でも研究されている<sup>\*17</sup>。そこで本節では、典型的なカオス系である撃力回転子 (Kicked Rotor, KR) 系を量子化し、それを最終的に量子ダンパーの雑音源として組み込む事を考える。

一般の KR のハミルトニアンは、以下の  $\hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  で表される：

$$\hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) = \frac{\hat{I}^2}{2T} + V(\hat{\theta}) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT) \quad (n \in \mathbb{Z}) \quad (20)$$

ここで  $\hat{\theta}$  は位置、 $\hat{I}$  は運動量であって、いまの場合は両者ともに  $2\pi$  の範囲で周期境界が設けられているとする。このハミルトニアンは、物理量が演算子かどうかという点を除いては、古典系でも量子系でも同じ形であるため、本節においては特に必要な場合を除いて両者を区別しない。(20) 式の右辺第一項は、系の運動エネルギーである。なお分母の  $T$  は、KR の運動を  $T$  の値によって変化させないために付け加えているものであり、一般の KR においては付けないのが普通である<sup>\*18</sup>。 $\delta(t - nT)$  はディラックのデルタ関数であり、これの和  $\sum_{n=-\infty}^{\infty}$  によって、周期  $T$  ごとの瞬間に撃力ポテンシャル  $V(\hat{\theta})$  が系に作用する。 $\hat{\theta}$  を角度と見れば、系は定期的に撃力で“蹴られながら回転する”わけであり、ゆえに Kicked Rotor と呼ばれる。運動量  $\hat{I}$  は撃力の瞬間に変化し、 $nT < t < (n+1)T$  の間では変化しないと見なせるから、撃力毎の変化が十分に乱雑であれば、前節の量子ダンパーにおける乱数  $I(t)$  をそのまま KR の  $\hat{I}$  の自由度で置き換える事ができる。

KR を量子ダンパーの雑音源として用いるために最も重要なのは、 $\hat{I}$  の振る舞いが、果たして乱数の寄与を代用できるほど乱雑であるのかという点である。そこではじめに、古典的な描像も踏まえつつ、KR の振る舞いを大雑把に把握しておきたい。KR として非常によく用いられるのは、撃力が

<sup>\*17</sup> Fidelity では、僅かに摂動を加えた系の時間発展と、そうでない元の系の時間発展との相関を調べる。

<sup>\*18</sup> 前節の最後で述べた通り、 $T$  は量子ダンパーのエネルギー輸送量を調整する際に重要な設定パラメータである。よって、 $T$  の値を変える事で  $I_T$  の振る舞いも変化してしまうと面倒であるため、このように KR の時間発展が  $T$  に依存しないようにしている。

テンシャルを  $V(\hat{\theta}) = K \cos \hat{\theta}$  とした<sup>\*19</sup> Standard Map(標準写像)系である。我々はこの系を実際に量子ダンパーで用いるわけではないが、しかし KR のカオス系としての一般的な性質を把握するには最も適しているため、まずはこの系の振る舞いをいくつか例に取り上げておく。Standard Map 系の古典的な運動は、撃力周期  $T$  を単位とする時刻を  $\tau$  として (つまり  $t = \tau T$  として)、以下の写像で表せる [6]：

$$\begin{cases} I_\tau = I_{\tau-1} + K \sin \theta_{\tau-1} \\ \theta_\tau = \theta_{\tau-1} + I_\tau \end{cases} \quad (21)$$

ここで  $\theta$  空間には  $2\pi$  の周期境界があるものとする。この系の相空間  $(\theta, I)$  には写像によって変化しない点が存在し、そのような不動点の性質が古典カオス系において重要である [7]。この写像の原点  $(0, 0)$  は不動点になっており、その近傍で写像を線形近似すると、以下の行列

$$\begin{bmatrix} I_\tau \\ \theta_\tau \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & K \\ 1 & 1+K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{\tau-1} \\ \theta_{\tau-1} \end{bmatrix} \quad (22)$$

で表される。この写像行列の固有値は  $\lambda_1 = (K + 2 + \sqrt{K^2 + 4L})/2 > 1$  および  $\lambda_2 = (K + 2 - \sqrt{K^2 + 4L})/2 < 1$  である。よって相空間の原点近傍における系の運動は、 $\lambda_1$  の固有ベクトルの方向に引き伸ばされつつ、 $\lambda_2$  の固有ベクトルの方向には圧縮されるものとなる。相空間上においてこのような性質の点は双曲的であると呼ばれる。実際に  $K = 0.97$  の場合において、相空間の原点近傍に密集した粒子群を配置し、数回の写像を行った場合の振る舞いを図4に示した。

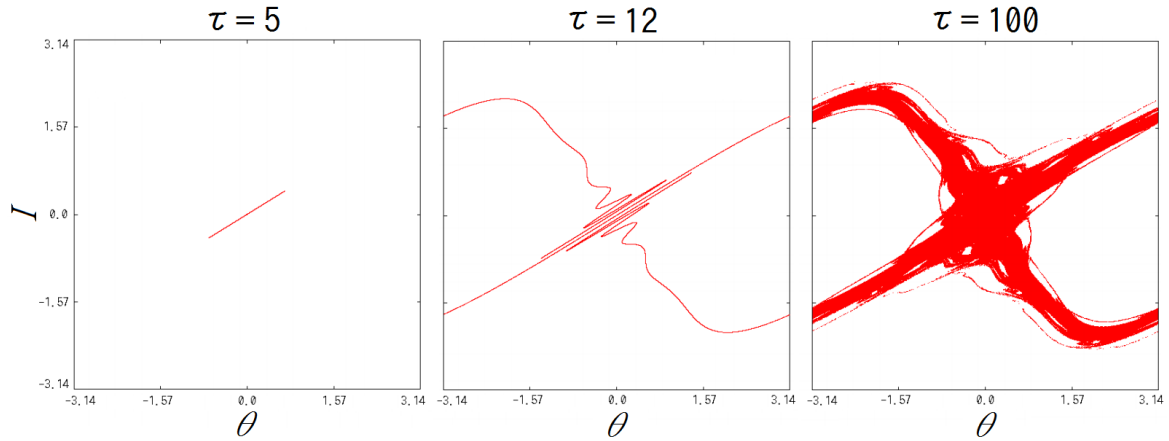


図4 古典 Standard Map 系における相空間挙動の例 ( $K = 0.97$ )。原点が双曲的な不動点になっている。その不動点の近傍に大量の粒子群を設置し、一斉に時間発展させた際の、粒子群の運動をプロットしたものである。双曲的な不動点を中心に、相空間軌道が一方に引き伸ばされ、一方に圧縮される挙動が現れている。

図4の左側の図は、初期状態から5回写像を行った結果であり、中央および右側の図は、それぞれ12回および100回写像を行った結果である。この図には、相空間の双曲的な不動点近傍に配置さ

<sup>\*19</sup>  $V(\hat{\theta}) = K \sin \hat{\theta}$  としても実質的に同じであり、両者は周期的な  $\hat{\theta}$  の空間の取り方を変えたものと見なせる。



れた粒子群が、写像によって一方向に引き伸ばされ、やがて周期境界を跨いで原点に再接近し、再び引き伸ばされる様子がよく表れている。このような運動を永続的に繰り返す事で、初期状態の僅かな違いは指数的に増大し、統計的にほとんど乱雑な振る舞いと見なせるようになる。実際に図4の $\tau = 100$ の時点の様子において、粒子群は相空間の一定の領域(カオス領域)全体に拡がっている事が見て取れるが、これらの粒子群は全て時刻 $\tau = 0$ において非常に近い初期状態から出発した運動であるから、この領域では僅かな状態の違いによって、未来の状態が全く異なってしまう事が分かる。ところで、周期境界は数学的には $\text{mod}$ をとる事に対応しているが、このように一方向に引き伸ばしつつ $\text{mod}$ をとるような運動は、計算機による疑似乱数の生成アルゴリズムである線形合同法を彷彿とさせるものである。即ち、ここで注目したような双曲的な点は、いわば自然の相空間に埋め込まれた、天然の疑似乱数生成器と見なす事ができる。従って、前節では理想的な乱数と見なしていた $I$ を、このようなKRの自由度 $I$ で置き換えてしまっても、ある程度は乱数的な役割を担う事を期待できるものである。

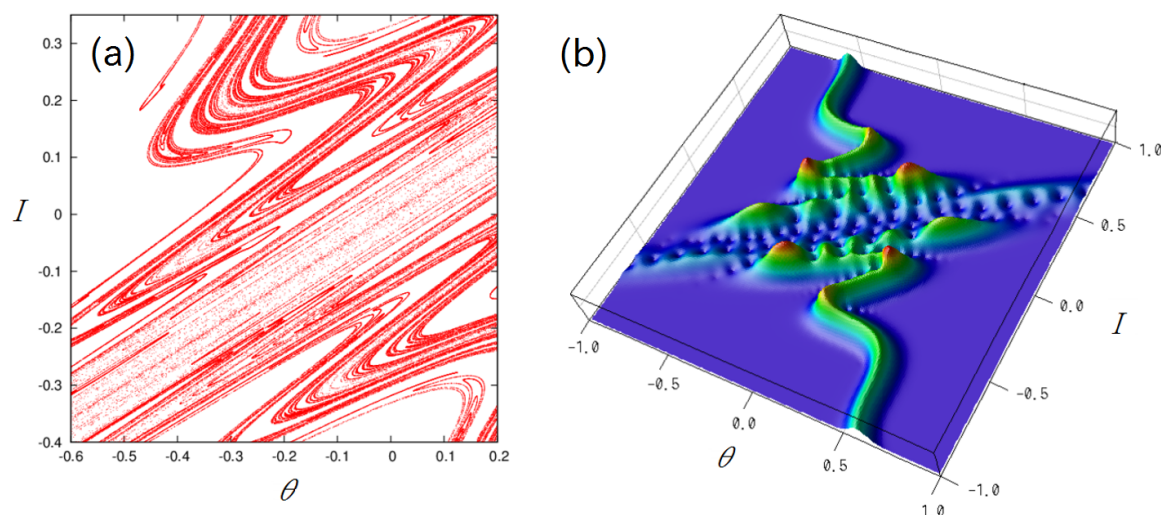


図5 双曲的不動点近傍において、安定多様体と不安定多様体が生み出す相空間構造。(a)は古典系におけるものであり、相空間軌道が安定多様体の作用によって圧縮的に畳まれつつ、不安定多様体の作用によって引き伸ばされる事を無限に繰り返し、それによって稠密かつ自己相似的な相空間構造が形成される。この構造によって、カオス領域における全ての相空間軌道が任意近傍領域に折り畳まれるため、僅かな軌道誤差によってその後の運動が全く異なる。これによって系の振る舞いが乱雑化し、乱数的に見なせるようになる。(b)は量子系において、原点に最小不確定波束を置いて数回時間発展させ、その時点での相空間のおおよその確率分布を伏見表示[32]によって可視化したものである。ただし係数は適当に調整したうえで、微細構造を視認しやすいように平方根をとってある。図4の $\tau = 12$ の様子と見比べると、古典系の特徴的な相空間軌道を概ね模倣している事が見て取れる。しかしその波束は不確定性原理に起因する幅を持っており、それよりも小さな相空間構造は再現されない。波束が重なる領域において、量子干渉によって複雑な凹凸構造が見て取れるが、そのスケールは概ね $\hbar$ 程度となっている。

以上は直観的な議論であるが、KRの振る舞いが乱雑化する機構をもう少し掘り下げておく。図4の中央の図から、双曲的不動点の近傍に配置された粒子群が描く相空間軌道群は、写像毎に一方



向に引き伸ばされ、特徴的な曲線を描いている様子が見て取れるが、これは不安定多様体<sup>\*20</sup>と呼ばれるものである。それとは逆に、写像毎に不動点方向に圧縮されつつ無限に収束する軌道群もあり、それは安定多様体と呼ばれる。双曲的不動点は、安定多様体と不安定多様体が交差する点になっている。図4の中央の図において、周期境界を跨いだ軌道群が、双曲的不動点に再び接近するような方向に圧縮されているのは、安定多様体の作用によるものである。軌道群が双曲的不動点に十分に再接近すると、再び不安定多様体の作用も同時に生じるため、(例えるなら手延べ素麺のように)軌道群が折り畳まれて圧縮されつつ、別の方向には引き伸ばされる事が無限に繰り返される。これによって、図5(a)に示した通り、特徴的な相空間構造(馬蹄構造と呼ばれる)が自己相似的に折り畳まれ続け、稠密な相空間構造が形成される。この稠密な相空間構造によって、無数の異なる相空間軌道が無限に接近するため、系の運動が任意小の誤差に対して不安定となり、ある程度以上の時間スケールでは予測不能なほどに乱雑化する。このような機構により、古典的なKRの振る舞いは乱数的になるのである。

一方で量子系においては、古典系での相空間軌道に相当する概念をどのように当てはめればよいかは自明ではないが、ウィグナー関数や伏見表示[32]などを用いて、波束の大まかな相空間分布の描像を得る事は可能である。実際にその様子を図5(b)に例示してある。同図は量子Standard Map系において、古典系になぞらえて原点近傍に収束した最小不確定波束を初期状態として、数回写像した時点における相空間構造を伏見表示で見たものである。図4の $\tau = 12$ の様子と見比べると、量子系においても、波束は引き伸ばされつつ折り畳まれようとする古典系の相空間構造をある程度まで模倣する様子が見て取れる<sup>\*21</sup>。しかしながら図5(b)には、古典系には見られないような干渉による凹凸や、根本的には不確定性原理に起因する分布の粗さも表れている。この図は $\hbar = 2\pi/64$ として計算したものであるが、図中の細かい凹凸のスケールはちょうど $\hbar$ 程度である。写像をこれ以上の回数繰り返しても、このような凹凸や干渉の構造が広がっていくだけであり、古典系の図5(a)で見られたような稠密な相空間構造は完全には再現されない。即ち、古典系の相空間における振る舞いを量子系が精度よく模倣し得る時間(エーレンフェスト時間)は有限であり、それは図5(b)の場合においては写像数回程度の時間スケールに過ぎない。しかし量子ダンパーにおいて重要となるのは、系の自己相関の喪失であって、それが古典系を模倣する時間スケールはエーレンフェスト時間よりもずっと長い事が知られており、一般にハイゼンベルグ時間によって見積もられる[10]。しかしそれも有限であるから、量子KRを雑音源とする量子ダンパーにおいて、定常的なエネルギー輸送が持続する時間スケールも、やはり有限である事が見込まれる。従って、本章の後半において我々は、“本質的な限界のある量子ダンパーの挙動が、どこまで古典系の理想的な挙動を模倣するか”という観点から解析を行う。具体的には $\hbar$ 依存性や、KRを構成する自由度の数を増やした場合における変化を解析する。

<sup>\*20</sup> 即ち、時間反転 $t \rightarrow -\infty$ において不動点に無限に接近する軌道の集合である。

<sup>\*21</sup> より厳密には、古典系の粒子群における密度分布(リウヴィル方程式に従う)を模倣しようとする。

## 2.2.2 理想的に乱雑な撃力回転子としての ARNOLD'S CAT MAP 系の導入, および量子化

前節において KR の例に挙げた Standard Map 系は, 双曲的な相空間構造がもたらす乱雑さについて説明するには都合が良かったが, しかし注目する相空間の領域によっては, 複素数の固有値をもつ不動点もたらす, 準周期的な運動領域も混在している. そのような領域は楕円的 (トーラス) と呼ばれる. 即ち, Standard Map 系では一つの相空間において, 双曲的な不動点と楕円的な不動点とが共存しているため, 系の振る舞いは領域によって乱雑であったり, 全くそうでなかったりする. もっとも, 一般にカオス系の相空間構造はそのような場合が多いから, Standard Map 系は自然におけるカオス系の振る舞いをよく代表しているとも言える. しかしながら, 量子ダンパーにおいて求められるのは, 可能な限り乱雑に振る舞う量子系であるから, 楕円領域は無い方が好ましい<sup>\*22</sup>. そこで KR のハミルトニアン: (20) 式に戻って, 撃力ポテンシャルを  $V(\hat{\theta}) = -K\hat{\theta}^2/2$  とすると, 相空間の全域が双曲的な性質を持つようになり, 我々の目的においては最も理想的な系となる. この系は Arnold's Cat Map 系と呼ばれる. この系の撃力周期ごとの時間発展は, 古典的には以下の写像で表される:

$$\begin{cases} \theta_{\tau+1} = \theta_{\tau} + I_{\tau} \\ I_{\tau+1} = I_{\tau} + K\theta_{\tau+1} \end{cases} \quad (23)$$

ここで2行目の式の  $\theta_{\tau+1}$  に1行目の式を代入すると  $I_{\tau+1} = I_{\tau} + K\theta_{\tau} + KI_{\tau}$  となるから, この写像は以下の通り行列によって表す事ができる:

$$\begin{bmatrix} \theta_{\tau+1} \\ I_{\tau+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ K & 1+K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_{\tau} \\ I_{\tau} \end{bmatrix} \quad (24)$$

即ち Arnold's Cat Map 系は全域で線形写像である. ここで  $\theta$  空間および  $I$  空間の両方に  $2\pi$  の周期境界があるものとする. この写像行列における固有値は  $\lambda_1 = (K+2 + \sqrt{(K+2)^2 - 4})/2$  および  $\lambda_2 = (K+2 - \sqrt{(K+2)^2 - 4})/2$  であり, これらは  $K < -4, 0 < K$  において共に実数で  $\lambda_1 > 1$  かつ  $\lambda_2 < 1$  となるから, 双曲的な運動を生み出す. 前節の Standard Map 系では不動点近傍における運動を線形近似して注目したが, いまの Arnold's Cat Map 系では (24) 式が相空間の場所によらず成り立つから, 相空間の全域が一様に双曲的な性質を持つ. つまるところ相空間の全域が疑似乱数生成器のように働くため, 量子ダンパーの雑音源とするには理想的である. 実際に Arnold's Cat Map 系における相空間の様子を図6に示した.

図6(a)は,  $K = 10$  の古典 Arnold's Cat Map 系において, 相空間の適当な位置に初期状態を置き, その後の時間発展を線で繋いでプロットしたものである. この図から, 系の運動は相空間の全域を乱雑に巡っており, 一見すると, 乱数の座標をプロットしたものと判別できないほどである事が見て取れる. 実際に, 2.1節の最後で行った, 量子ダンパーの古典極限挙動の計算において, この系の  $I_{\tau}$  の振る舞いをを用いた結果を次の2.3節の図7 - 図8に示してある. その結果から, 古典的な Arnold's Cat Map 系の振る舞いは, 量子ダンパーの雑音源としては疑似乱数とほぼ同等の品質を持っている事が見て取れる. 図6(b)は, 同じく  $K = 10$  において, 相空間に最小不確定波束を

<sup>\*22</sup> Standard Map 系においても,  $K$  の値を十分大きくすれば楕円領域は消失する.

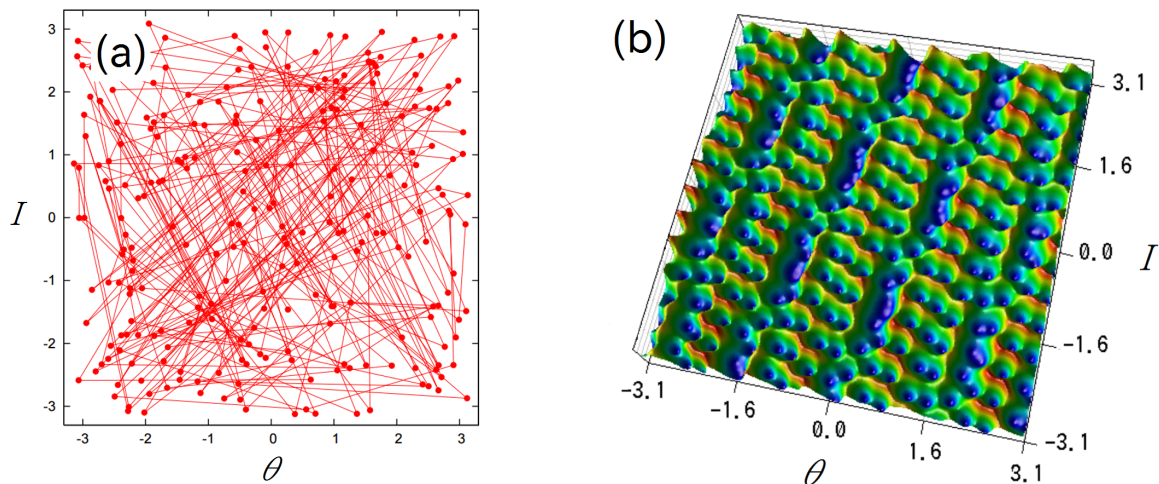


図6 Arnold's Cat Map 系における相空間構造。(a) は古典系において、相空間上の適当な位置(どこでも同様の結果が得られる)に粒子を置いて、時間発展させた軌道を線で繋いだものである。相空間全域を概ね乱雑に巡っている様子が見て取れる。(b) は量子系において適当な位置に最小不確定波束を置いて時間発展させ、適当な時刻における相空間のおおよその確率分布を、伏見表示によって可視化したものである。ただし値の係数は適当に調整してある。相空間の全域に、分布が完全に拡がりきっている様子が確認できる。

置いた上で、量子 Arnold's Cat Map 系の振る舞いを計算機上で再現し、数回写像した時点における相空間の波束分布を伏見表示<sup>\*23</sup>で見たものである。この結果から、量子系においても、波束の分布はやはり相空間の全域に広がっている事が見て取れる。前節の Standard Map 系 ( $K = 0.97$ ) においては、初期波束が周期境界を跨いで原点に最接近するのに 10 回程度の時間を要したが、いまの Arnold's Cat Map 系 ( $K = 10$ ) の場合は 1 ~ 2 回の写像で波束は相空間全域に広がり、3 回も写像すれば、初期波束の形状は完全に砕かれて分からなくなってしまう。よってこの系は量子系においても、量子ダンパーの雑音源としては、少なくとも量子 KR 系の中では最も理想的なものに近い品質が期待できる。ただし図 6(b) は、完全に乱雑な分布というよりは、何らかの規則的なパターン状の構造があるようにも見える。この事からも示唆される通り、Arnold's Cat Map 系は運動が完全に一様であるがゆえに数論的対称性を持つ事がよく知られており、量子系においてはそのような対称性は、時間発展演算子の固有値に縮退が生じる原因となる。そのような縮退は系に共鳴的な挙動を誘発する原因となり得る<sup>\*24</sup>。量子ダンパーにおいては、理想的に乱雑であるという性質のみが必要なのであって、そのような縮退は邪魔なだけである。従って本論文においては、Arnold's Cat Map 系の撃力ポテンシャルに、古典的には運動をあまり変化させないような微小スケールの摂動  $\xi g(\hat{\theta})$  を印加し、対称性による縮退を崩したものをを用いる。具体的な Arnold's Cat Map 系のハミルトニアン

<sup>\*23</sup> ただし係数部は適当に調整している。

<sup>\*24</sup> 時間発展演算子の固有値と拡散挙動 (量子ダンパー系においてはエネルギー輸送挙動) の関係については第 3 章で詳しく扱う。

$\hat{H}_{\text{cat}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  は：

$$\hat{H}_{\text{cat}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) = \frac{\hat{I}^2}{2T} + \left[ -K \frac{\hat{\theta}^2}{2} + \xi g(\hat{\theta}) \right] \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT) \quad (n \in \mathbb{Z}) \quad (25)$$

と表される．前節でも述べた通り，第一項の分母の  $T$  の存在は，写像の  $T$  依存性を除くためであり，一般には付けないのが普通である． $\xi$  は古典的な振る舞いを大きく変化させない程度の小さい値を選ぶ． $g(\hat{\theta})$  の関数形は色々なものが考えられるが，いまは  $\cos(\hat{\theta} - \theta')$  の形に選ぶ．これによって写像は僅かに歪み，相空間全域において厳密に一樣ではなくなって，その事に起因する縮退を崩せる． $\theta'$  はパリティ対称性に起因する縮退を防ぐために 0 でない値を選ぶ．量子系において，古典写像 1 回分に相当する時間発展演算子 (Floquet 演算子) は，

$$\hat{U}_{\text{cat}} = e^{-i[-K\hat{\theta}^2/2 + \xi g(\hat{\theta})]/\hbar} e^{-i\hat{I}^2/2\hbar} \quad (26)$$

のように表される<sup>\*25</sup>．ここで  $e^{-i[-K\hat{\theta}^2/2 + \xi g(\hat{\theta})]/\hbar}$  は撃力瞬間の運動量の変化， $e^{-i\hat{I}^2/2\hbar}$  は撃力から次の撃力までの間の自由回転による位置の変化を生じさせるものである．

既にこれまでに，相空間構造を例示するために量子系の計算結果を参照してきたが，ここで具体的に Arnold's Cat Map 系を量子化して時間発展させる過程についてまとめて述べておく．これ以降，詳細な計算は付録 5.2 に掲載し，ここでは要点のみをまとめるものとする．まず  $\theta$  空間および  $I$  空間の  $2\pi$  周期性によって，それぞれの空間は以下のように原理的に離散化される：

$$I_m = m\hbar \quad (m = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1) \quad (27)$$

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{N} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1) \quad (28)$$

ここで  $N$  は正の偶数であって任意に選べる． $N$  はつまるところ離散化されたヒルベルト空間の次元数であり，数値計算においてはいわゆる“空間メッシュの離散化数”に相当する．ただし，いまの場合に重要なのは，連続空間を離散空間で近似したいわけではなく，周期境界条件によって実際に空間が離散的になるという事である．従ってこの後の計算も，どこにも近似は無く厳密である．なお，(26) 式の時間発展演算子における  $\theta$  方向の  $2\pi$  周期性によって， $K$  の値も整数に制限される．また，有効プランク定数  $\hbar$  の値は  $N$  によって

$$\hbar = \frac{2\pi}{N} \quad (29)$$

のように決定され<sup>\*26</sup>， $\hbar \rightarrow 0$  即ち  $N \rightarrow \infty$  において，系の状態の時間発展は古典極限挙動に漸近する．逆に  $\hbar$  の値が大きいほど，状態の時間発展には量子性 (波動性) が色濃く反映されるように

<sup>\*25</sup> 一般の場合には，末尾の部分は  $e^{-i\hat{I}^2 T/2\hbar}$  のように指数部の肩に  $T$  が付く．なお，時刻 0 の瞬間に撃力  $\hat{K}$  を作用させる場合，即ち系が“蹴られてから転がる”のを写像 1 回と見なす場合は，(26) 式の  $\hat{U}_{\text{cat}}$  における 2 つの指数部は前後が逆の順になる．我々は“転がってから蹴られる”までを 1 回と見なし，このような順としている．我々の扱う時間スケールにおいては，どちらを用いても，単に系を撃力の直前に見るか，もしくは直後に見るかというタイミングの違いでしかないため，両者の区別はほとんど気にする必要はない．

<sup>\*26</sup>  $I$  空間の範囲を  $[0, 2M\pi)$  とした場合は  $\hbar = 2M\pi/N$  となり，(29) 式は  $M = 1$  に相当する．詳しくは付録 5.2 の (143) 式周辺に掲載．

なる。量子系の状態は状態ベクトル  $|\psi\rangle$  で表現されるが、数値計算の事も考慮すると、位置表示の波動関数  $\psi_\theta(\theta_n) = \langle \theta_n | \psi \rangle$  や、運動量表示の波動関数  $\psi_I(I_m) = \langle I_m | \psi \rangle$  で扱うほうが具体的であるため、以降ではそのようにする。ここで  $|\theta_n\rangle$  は  $\hat{\theta}$  演算子の  $n$  番目の固有状態であり、その固有値は (28) 式の  $\theta_n$  である。  $|I_m\rangle$  も同様に  $\hat{I}$  演算子の  $m$  番目の固有状態である。いまは  $\psi_\theta(\theta_n)$  も  $\psi_I(I_m)$  も  $N$  個の点における離散関数となるから、計算機において要素数  $N$  個の複素数配列で表現できる。まず運動量表示で初期状態が与えられたとして、そこから次の撃力までの時間発展は

$$\psi_I(I_m) \Big|_{\text{自由回転後}} = e^{-iI_m^2/2\hbar} \psi_I(I_m) \Big|_{\text{自由回転前}} \quad (30)$$

のように記述される。このように単純な形となるのは、時間発展演算子の自由回転部分の、運動量基底における行列表現が  $\langle I_m | e^{-i\hat{I}^2/2\hbar} | I_n \rangle = e^{-iI_m^2/2\hbar} \delta_{m,n}$  のように対角的になるためである。詳細は付録 5.2 の (153) 式周辺に掲載している。続いて撃力を作用させる前に、位置表示の波動関数  $\psi_\theta(\theta)$  に移っておくのが都合が良い。いまの離散化された空間の場合、 $\psi_\theta(\theta_n)$  と  $\psi_I(I_m)$  は互いに離散フーリエ変換 (DFT)

$$\psi_\theta(\theta_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} \psi_I(I_m) e^{i\frac{2\pi mn}{N}} \quad (31)$$

$$\psi_I(I_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \psi_\theta(\theta_n) e^{-i\frac{2\pi mn}{N}} \quad (32)$$

で対応付けられており、複素数配列に対してこの変換を計算機上で行うのは容易である<sup>\*27</sup>。 (31) 式で位置表示に移った後、撃力が作用する前後における時間発展は

$$\psi_\theta(\theta_n) \Big|_{\text{撃力後}} = e^{-i[-K\theta_n^2/2 + \xi g(\theta_n)]/\hbar} \psi_\theta(\theta_n) \Big|_{\text{撃力前}} \quad (33)$$

のように表される。これも時間発展演算子の撃力部分の、位置表示における行列表現が  $\langle \theta_n | e^{-i[-K\hat{\theta}^2/2 + \xi g(\hat{\theta})]/\hbar} | \theta_m \rangle = e^{-i[-K\theta_n^2/2 + \xi g(\theta_n)]/\hbar} \delta_{m,n}$  のように対角的となる事を利用している。最後に再び (32) 式の DFT によって運動量表示に戻れば、 $\psi_I(I_m)$  における写像 1 回分の時間発展を行った事になる。複数回写像するには、この一連の作業を繰り返せばよい。つまるところ上で行った作業は、ベクトル表現における時間発展結果を運動量表示した

$$\langle I_m | \psi_{\text{写像後}} \rangle = \langle I_m | \hat{U}_{\text{cat}} | \psi_{\text{写像前}} \rangle \quad (34)$$

$$= \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{n'=0}^{N-1} \sum_{m'=0}^{N-1} \sum_{m''=0}^{N-1} \langle I_m | \theta_n \rangle \langle \theta_n | e^{-i[-K\hat{\theta}^2/2 + \xi g(\hat{\theta})]/\hbar} | \theta_{n'} \rangle \langle \theta_{n'} | \hat{I}_{m'} \rangle \langle I_{m'} | e^{-i\hat{I}^2/2\hbar} | I_{m''} \rangle \langle I_{m''} | \psi_{\text{写像前}} \rangle \quad (35)$$

の過程を、 $\theta_n, \theta_{n'}, I_{m'}, I_{m''}$  の各区間に切り分けて、右から左へと逐次的に演算したのと等価である。以上のようにして、Arnold's Cat Map 系の量子化および波束の時間発展を行える。なお、ここ

<sup>\*27</sup> DFT の代わりに高速フーリエ変換 (FFT) を用いれば、計算量を  $O(N^2)$  から  $O(N \log N)$  へと削減できて高速化が可能である。いまは  $N$  がそもそも偶数に制限されているので、ゼロ詰めなどの前処理を行う必要もない。

で述べた内容は Standard Map 系についてもほとんど同様に適用できるが、その場合は  $K$  は離散化されず、任意の実数をとれる。Standard Map 系の場合は (33) 式で代わりに  $e^{-i[K \cos \theta_n + \xi g(\theta_n)]/\hbar}$  もしくは  $e^{-i[K \sin \theta_n + \xi g(\theta_n)]/\hbar}$  を用いる<sup>\*28</sup>。

### 2.2.3 撃力量子ダンパーモデルの導入

これ以降においては、前節で述べた通り量子化した量子撃力回転子 (量子 KR) 系を、2.1 節で導入した量子ダンパーモデルに、雑音源の自由度として組み込んで用いる。そのようなモデルを、本論文においては撃力量子ダンパー (Kicked Quantum Damper, 以下 KQD) と呼ぶ事にする。具体的な KQD モデルのハミルトニアンは：

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) + \hat{H}_{\text{HO}}(\hat{q}, \hat{p}) + \eta \hat{q} \hat{f}(\hat{I}) \cos \Omega t \quad (36)$$

で表される。ここで  $\hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  は (20) 式で定義した KR 系のハミルトニアンであり、我々は次節の数値実験において、これに (25) 式で定義した Arnold's Cat Map 系の  $\hat{H}_{\text{cat}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  を用いる。 $\hat{H}_{\text{HO}}(\hat{q}, \hat{p})$  は (2) 式で定義した、角振動数  $\omega$  の調和振動子のハミルトニアンである。この KQD モデルの時間発展を計算機上で再現する方法については付録 5.4 に掲載している。全系の初期状態  $|\Psi_0\rangle$  は、量子 KR 系の初期状態を  $|\psi_0\rangle$ 、調和振動子の基底状態を  $|E_0\rangle$  として

$$|\Psi_0\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |E_0\rangle \quad (37)$$

のように選ぶものとする。

(36) 式の  $\eta \hat{q} \hat{f}(\hat{I}) \cos \Omega t$  の項は、力学的仕事の供給源である外力項  $\cos \Omega t$  と、それを“熱化”するための雑音源の量子 KR 系、および最終的なエネルギーの輸送先である調和振動子系の相互作用項である。(1) 式では単純に乱数的に振る舞う値としていた  $I$  を、量子 KR 系の運動量  $\hat{I}$  でそのまま置き換えている。これにより、(11) 式などの見積もり計算で表れていた時刻  $k$  における  $\hat{I}$  依存量  $f_k$  は、すべてハイゼンベルグ描像の演算子  $\hat{f}_k = \hat{U}_{\text{KR}}^k \hat{f}(\hat{I}) \hat{U}_{\text{KR}}^{-k}$  に置き換えられる<sup>\*29</sup>。ここで  $\hat{U}_{\text{KR}}$  は KR 系における写像 1 回分の時間発展演算子であり、(11) 式などにおいて独立な乱数の系列についてとっていた期待値  $\langle \dots \rangle$  も、すべてハイゼンベルグ描像における期待値  $\langle \Psi_0 | \dots | \Psi_0 \rangle$  に置き換えられる。なお、 $\eta$  が十分に弱ければ、量子 KR 系と調和振動子系はあまりエンタングルせず、 $\hat{f}_k$  は調和振動子の自由度に依存しないから、この期待値は量子 KR 系の自由度についてとった  $\langle \psi_0 | \dots | \psi_0 \rangle$  であると見てもよい。結果、2.1 節で行っていた見積もり計算は、KQD 系においてもほぼそのまま適用でき、不可逆的エネルギー輸送の実現に重要なのは、量子 KR 系における二時刻の自己相関  $\langle \hat{f}_k \hat{f}_l \rangle$  の喪失であると言え換えられる。

続いて、調和振動子のエネルギー分布、およびエネルギー期待値の測定過程について述べておきたい。詳細な数値計算方法については付録 5.4.2 に掲載しているため、ここでは要点のみをまとめ

<sup>\*28</sup>  $\cos$  か  $\sin$  かは撃力ポテンシャルの定義による。なお運動エネルギー項の分母の  $T$  は入れないのが普通である。

<sup>\*29</sup>  $\hat{I}$  のように時刻表記のない演算子はシュレーディンガー描像によるものである。

る．まず，時刻  $\tau$  における系全体の状態ベクトルを  $|\Psi_\tau\rangle$  とし，その時点における密度演算子  $\hat{\rho}$  は

$$\hat{\rho} = |\Psi_\tau\rangle\langle\Psi_\tau| \quad (38)$$

であるが，これから量子 KR 系の自由度をトレースアウトした，調和振動子自由度の縮約密度演算子  $\hat{\rho}_{\text{HO}}$  を

$$\hat{\rho}_{\text{HO}} = \text{Tr}_{\text{KR}} \hat{\rho} \quad (39)$$

とする．この  $\hat{\rho}_{\text{HO}}$  と，調和振動子の  $n$  番目の固有状態  $|E_n\rangle$  を用いて，時刻  $\tau$  におけるエネルギー分布の  $E_n$  での値は

$$P(E_n) = \langle E_n | \hat{\rho}_{\text{HO}} | E_n \rangle \quad (40)$$

のように求まる．この値は必ず実数である．なお， $|E_n\rangle$  の位置表示 ( $q$  表示) の波動関数は，エルミート多項式によって数値的に求められる (付録 5.3.3)．従って， $\hat{\rho}_{\text{HO}}$  も位置表示で行列表示すれば，この値は単純なベクトルと行列の演算として計算機上で求められる．これを用いて，時刻  $\tau$  における KQD のエネルギー吸収量の期待値  $\Delta E = \langle E \rangle_\tau - E_0$  は

$$\Delta E = -E_0 + \sum_{n=0}^{\infty} P(E_n) E_n \quad (41)$$

として求められる．次節以降では，実際に KQD モデルの振る舞いを計算機上で再現し， $P(E_n)$  および  $\Delta E$  の値の時間発展を数値的に解析する．数値実験に用いるパラメータは，以下の表 1 の通りである．

表 1 KQD モデルの数値実験における主なパラメータの設定値

パラメータ	設定値
$\hbar$	$2\pi/256 \sim 2\pi/16$
$\eta$	$5 \times 10^{-4}$
$K$	10
$T$	$10^2$
$\omega$	1
$\Omega$	$1 + \sqrt{2}/T$
$\hat{f}(\hat{I})$	$\cos \hat{I}$
$g(\hat{\theta})$	$\cos(\hat{\theta} - \theta')$
$\xi$	$4.25 \hbar^2$
$\theta'$	$\sqrt{2}$

表 1 のパラメータ設定においては，2.1 節の最後で述べた通り，KR の乱雑な振る舞いを変化させてしまわないよう，相互作用強度  $\eta$  は十分に弱い値に絞っている．代わりに  $\omega$  と  $\Omega$  を近共鳴な条件にし，エネルギー輸送量を十分確保できるようにしている．

## 2.3 数値実験結果と考察

### 2.3.1 古典系における数値計算結果

本節以降においては、KQD モデルの振る舞いを計算機上で再現し、そこで実際に生じるエネルギー輸送現象を解析した結果について議論する。量子系の結果を解析する前に、まずはそもそも古典系において、Arnold's Cat Map 系が意図通り雑音源としての機能を担えるのかを確認しておきたい。本節における系全体のハミルトニアンは、(36) 式において  $\hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) = \hat{H}_{\text{cat}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  と置いたものとして得られる。実際にこのハミルトニアンにおける古典的な運動を数値的に計算し、調和振動子の相空間座標  $(q, p)$  の時間発展を求めたものを図 7 に示した。同図においては、Arnold's Cat Map 系自由度の初期状態を変えた結果を重ねてプロットしてある<sup>\*30</sup>。なお、調和振動子自由度の初期状態は、図 2 と同様に相空間上の原点  $(0, 0)$  つまり  $E_0 = 0$  の一点に設定されている。図 7 の通り、KQD モデルの古典系において、調和振動子の相空間座標  $(q, p)$  は時間経過に伴って拡散的に広がっていく様子が見て取れる。この結果は、雑音源に疑似乱数を用いた図 2 の結果とよく対応しており、少なくとも古典系においては、Arnold's Cat Map 系は我々の意図通り雑音源としての役割を担えるものと判断できる。

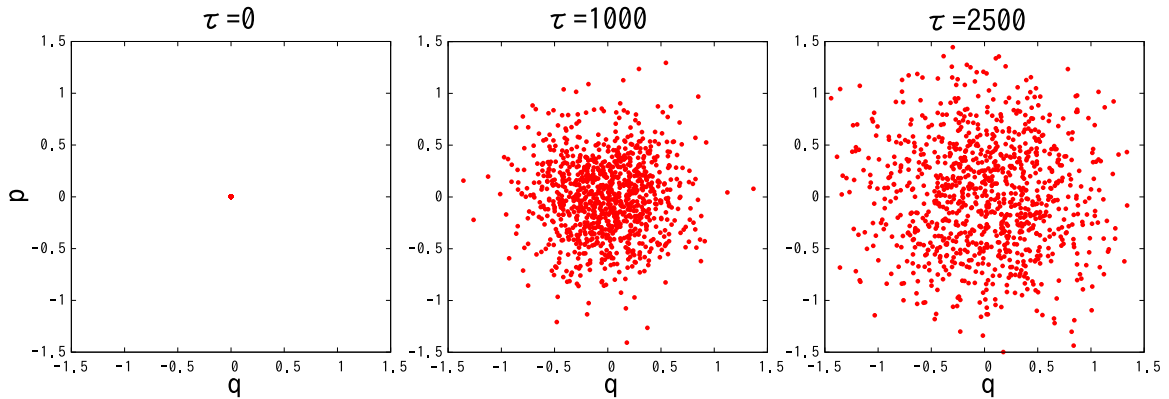


図 7 Arnold's Cat Map 系を雑音源に用いた KQD モデルの古典系における、調和振動子の相空間座標  $(q, p)$  の時間発展。大量の点が描かれているが、それらは雑音源として用いている Arnold's Cat Map 系の初期状態を変えたものである。左側の図は  $\tau = 0$  即ち初期状態であり、 $(q, p) = (0, 0)$  の一点に収束した  $E_0 = 0$  の状態に設定している。中央の図は時刻  $\tau = 1000$  における結果であり、 $(q, p)$  が相空間上で拡散的に時間発展する様子が見て取れる。右側の図は、さらに時間発展させた時刻  $\tau = 2500$  における結果であり、 $(q, p)$  の分布がより広範囲に広がっている様子が見て取れる。これらの結果は、雑音源に疑似乱数を用いた図 2 の結果とよく対応しており、古典的な Arnold's Cat Map 系は確かに雑音源としての役割を担えるものと判断できる。

続いて、Arnold's Cat Map 系の初期状態について平均して求めた、調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E$ 、およびエネルギー分布  $P(E_n)$  の時間発展を図 8 に示した。図 8(a) における赤色の点は、調

<sup>\*30</sup> いまのように古典 Arnold's Cat Map 系を疑似乱数生成器として用いる場合、その初期状態は乱数の種に相当する。ここで用いた具体的な初期状態は、相空間上で偏りなく乱雑に散らばるように用意している。



和振動子のエネルギー期待値  $\Delta E$  の値を、100 回写像ごとにプロットしたものである。その背後にある黒色の直線は、理想的な場合の理論値である (17) 式をプロットしたものである。両者は非常によく一致している。さらに図 8(b) は、 $\tau = 100$  から  $\tau = 2500$  までのいくつかの時刻において、調和振動子のエネルギー分布の変化を見るため、ヒストグラムを作成してプロットしたものである。ここでヒストグラムのビン幅は、 $\hbar = 2\pi/64$  の場合における量子系でのエネルギー離散化単位  $\hbar\omega$  と等しくなるよう設定している。横軸は各ビン中間点におけるエネルギー値  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  であり、縦軸はそのビンにおける相対度数  $P(E_n)$  である。図 8(b) から、理想的な場合に見込まれる指数分布が、時刻によらず常に実現されている事が見て取れる。この結果を、雑音源に疑似乱数を用いた図 3(b) の結果と見比べてみると、指数の傾きまで含めて、両者は目視ではほとんど判別不可能なほど一致している。以上の結果により、雑音源として Arnold's Cat Map 系を用いた KQD モデルは、少なくとも古典系においては、我々の見積もり通りの理想的な挙動を示すものと判断できる。

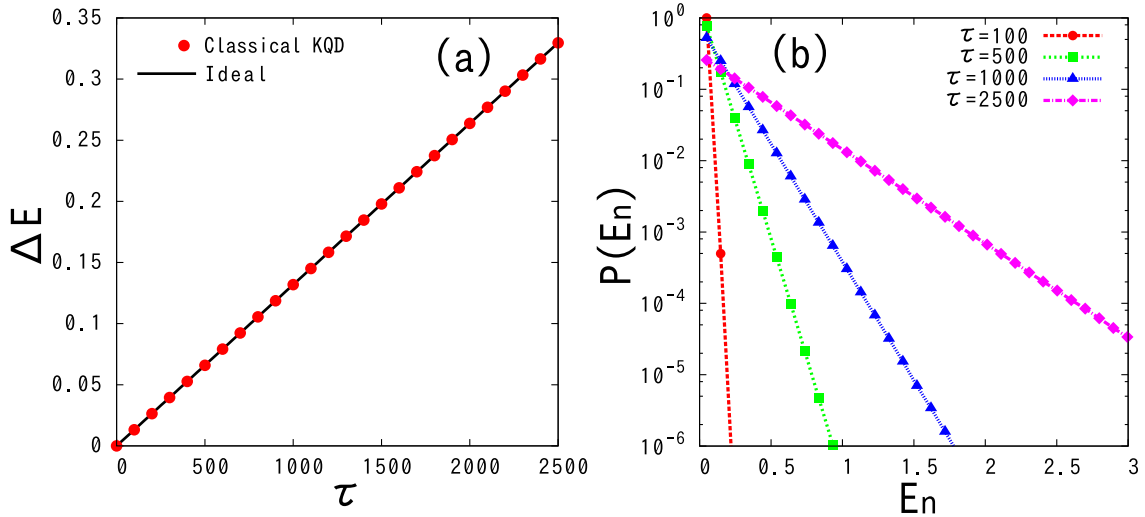


図 8 (a): KQD モデルの古典系における、調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E = \langle E \rangle_\tau - E_0$  の時間発展。いまの場合は  $E_0 = 0$  であるから、この結果はエネルギー期待値  $\langle E \rangle_\tau$  そのものでもある。赤色の点が、100 回写像ごとに測定した  $\Delta E$  の値を表している。黒色の直線は、理想的な場合における理論値である (17) 式をプロットしたものである。両者がよく一致していることから、古典的な Arnold's Cat Map 系は理想的な KQD の雑音源として機能している事が分かる。(b): いくつかの時刻におけるエネルギー分布  $P(P_n)$  の測定結果。乱数を用いた図 3(b) の結果とよく一致しており、やはり理想的な結果が得られていると言える。

### 2.3.2 量子系における数値実験結果

前節における古典系の結果を踏まえた上で、ここからは量子系における結果を解析する。本節における KQD モデルは、前節で扱った古典系をそのまま量子系にしたものであり、雑音源として引き続き 1 自由度の Arnold's Cat Map 系 (これも量子系とする) を用いる。系全体のハミルトニアンは (36) 式において  $\hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) = \hat{H}_{\text{cat}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  と置いたものとして得られる。系全体の初期状態は

(37) 式で表され、それにおいて Arnold's Cat Map 系部分の初期状態  $|\psi_0\rangle$  は

$$|\psi_0\rangle = |I = \hbar N/2\rangle \quad (42)$$

のように設定する<sup>\*31</sup>。パラメータは表1の通りに選ぶものとする。以上に述べた条件において、まずは波束の拡散の様子を見るため、いくつかの時刻において、調和振動子の相空間を伏見表示によって可視化した結果を図9に示した。なお同図は  $\hbar = 2\pi/64$  におけるものである。

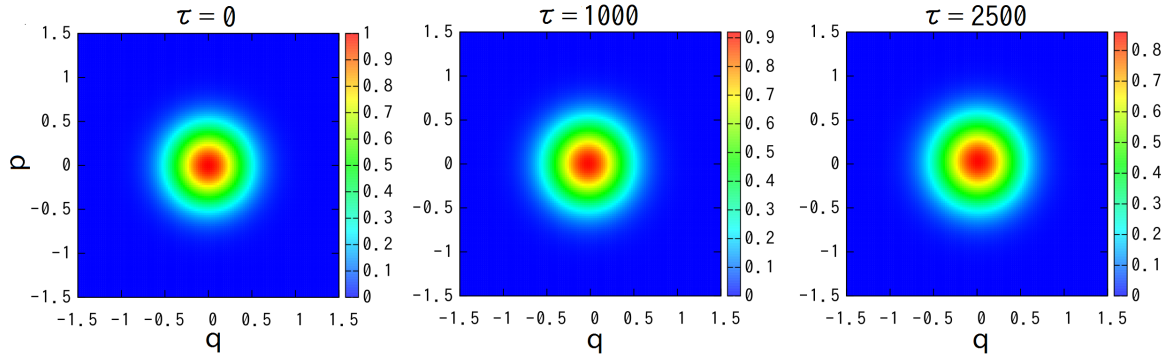


図9 量子的な KQD モデルの調和振動子自由度における、相空間での波束分布 (伏見表示) の時間発展 ( $\hbar = 2\pi/64$ )。係数は初期状態のピーク値がちょうど1になるよう調整してある。雑音源には1自由度の量子 Arnold's Cat Map 系を用いている。古典系での結果である図7と比較すると、初期状態 ( $\tau = 0$ ) こそ不確定性原理によってある程度の分布幅を持っているが、その後の時間発展では波束が殆ど拡がらず、初期状態近傍に局在し続けている事が見て取れる。従って、定常的なエネルギー輸送が十分に実現されていない事が示唆される。

図9を、古典系の結果である図7と見比べると、量子系では初期時刻  $\tau = 0$  においても分布がある程度の幅を持っている事が見て取れるが、これは初期状態に設定した調和振動子の基底状態  $|E_0\rangle$  がそもそも幅を持っているためであり、つまるところ不確定性原理に起因するものである。一方で、その後の時間発展 ( $\tau = 1000, 2500$ ) に注目すると、古典系では分布が定常的に拡散していったのに対して、量子系ではほとんど拡がらず、常に初期状態の近傍に局在した分布をとっている事が見て取れる。これは即ち、調和振動子のエネルギーの大半が基底状態によって占められており、高エネルギー順位へのエネルギー輸送が十分に実現されていない事を示唆するものである。実際に調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E = \langle E \rangle_\tau - E_0$  の時間変化を測定し、横軸に時刻  $\tau$  をとってプロットしたものを図10に示した。

図10において黒色で描かれている直線は、理想的な場合の理論値を示すため、(17) 式の値をプロットしたものである。その下の複数の破線は、実際に量子系において測定したエネルギー吸収量  $\Delta E$  の時間発展であり、上からそれぞれ  $\hbar = 2\pi/256$ ,  $\hbar = 2\pi/128$ ,  $\hbar = 2\pi/64$  ( $N = 256, 128, 64$ ) の

<sup>\*31</sup>  $\hat{I}$  演算子における固有値  $\hbar N/2$  の固有状態であり、即ち  $I$  空間における中間順位励起状態である。この初期状態は、運動量表示で  $\delta$  関数状の波束になるため数値的に作りやすいというだけの理由で選んでおり、1~2回の写像で波束は乱雑化して崩れてしまうため、揺らぎの出方などを除けば、他の初期状態を選んでも本質的にはあまり変わらない。ただし時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{cat}}$  の固有状態は特別であり、初期状態に選ぶと結果の一般性が失われる。詳しくは第3章において扱う。

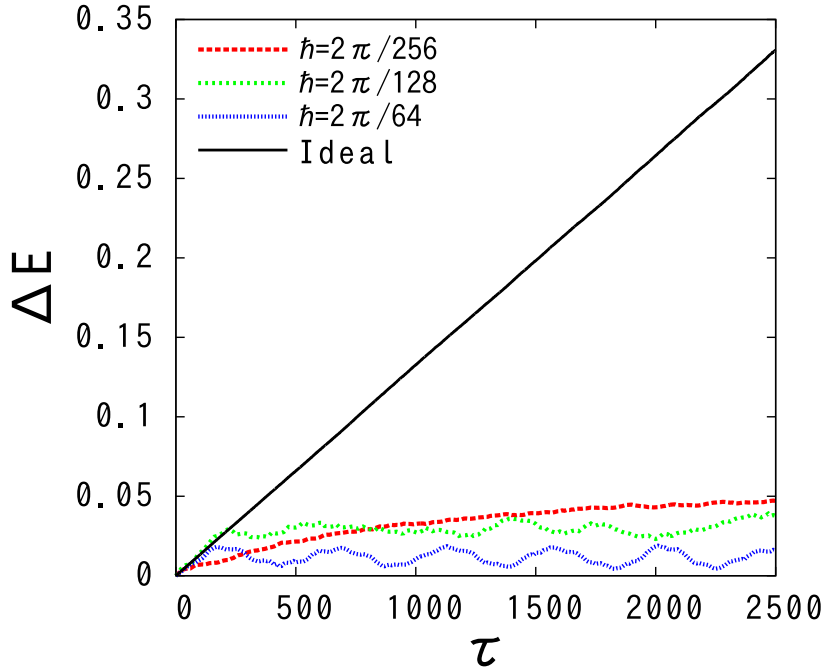


図 10 1 自由度の Arnold's Cat Map 系を雑音源として用いた KQD モデル (量子系) における、調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E = \langle E \rangle_\tau - E_0$  の時間発展. ここで  $E_0 = \hbar\omega/2$ ,  $\hbar = 2\pi/64$  である. この  $\Delta E$  は即ち, KQD モデルの動作によって,  $\cos \Omega t$  の外力項から調和振動子へと輸送された累積エネルギー量の時間発展を表している. 黒色の直線は (17) 式から理想的な場合の理論値をプロットしたものである. その下の複数の破線は, 実際の KQD における結果であり,  $\hbar$  の値が異なる. いずれの結果においても,  $\tau < 200$  程度の短時間しか定常的なエネルギー吸収が持続せず, 2.1 節で見積もった理想的な挙動とは程遠い結果となった.

場合における結果である. この結果から, 少なくとも我々が計算した  $\hbar$  の領域においては, 定常的なエネルギー吸収は  $\tau \sim O(10^2)$  程度の短時間で抑圧され, その後は振動的な飽和挙動に転じた事が見て取れる. これらの結果において, エネルギー吸収量は最大でも概ね  $O(10^{-2})$  程度のオーダーであり, これは量子化されたエネルギー単位  $\hbar\omega$  と同程度に過ぎない (もしくは少ない) 量である. 従って, やはり有効なエネルギー吸収現象が実現されたとは呼べない状況であると判断できる. この事は, 調和振動子のエネルギー分布を見ればより明確になる. 実際にそれを測定した結果を図 11 に示した.

図 11 は, 時刻  $\tau = 100$  (赤色),  $\tau = 500$  (緑色),  $\tau = 1000$  (青色),  $\tau = 2500$  (紫色) における, 調和振動子のエネルギー分布  $P(E_n)$  の測定結果を重ねて描いたものである. これらは全て  $\hbar = 2\pi/64$  における結果である. この結果から, 初期の  $\tau = 100$  程度の時刻までは, 理想的な場合において期待される, 指数関数型のエネルギー分布が実現されていた事が見て取れる. しかしその後は, 時間が経過しても指数の傾きはほとんど変化しなくなり, 局在に転じた事が見て取れる. 従って, 先の図 10 からも示唆された通り, やはりエネルギー分布において基底状態の近傍順位が常に支配的であって, 高い順位へのエネルギーの分配は殆ど生じなかったものと判断できる.

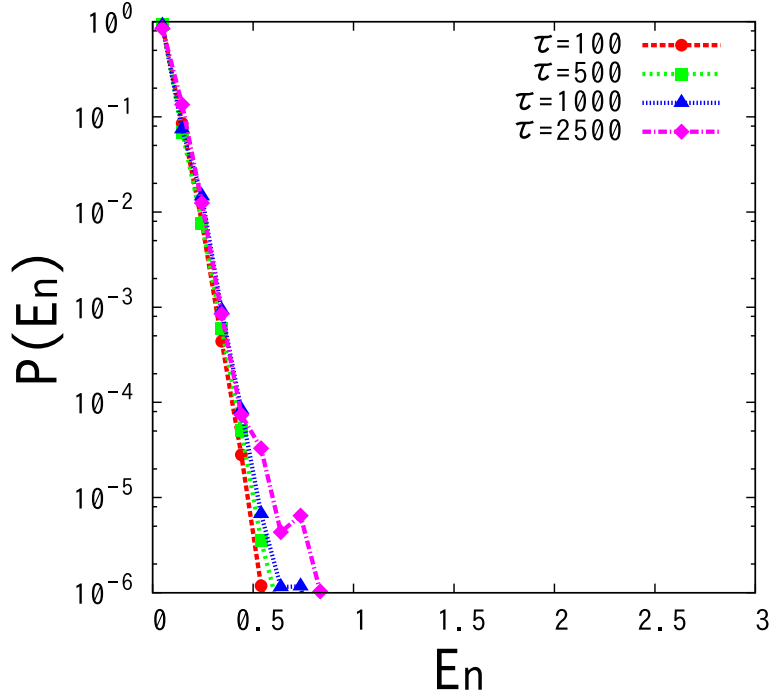


図 11 いくつかの時刻における，調和振動子のエネルギー分布 ( $\hbar = 2\pi/64$ )．最初の  $\tau = 100$  の時点でのみ，理想的な場合に期待される指数分布が実現されている．しかしその後は，指数の傾きは時間が経過してもほとんど変化せず，局在に転じた事が見て取れる．なお，時刻  $\tau = 100$  の系列を図 8 におけるものと比較すると，この時点では量子系の方が，古典系よりも拡散しているように見えるが，これについては後の図 15 で触れる．

以上の結果から，1 自由度の量子 Arnold's Cat Map 系を用いた KQD は，少なくとも我々の設定した  $\hbar$  の範囲では，有効に機能しなかったと結論付けられる．しかしながら，エネルギー期待値とエネルギー分布の両方において，ごく初期の短時間に限って見れば，2.1 節で見積もった理想極限の振る舞いを，実際の KQD モデルが模倣しようとするような兆候も僅かに確認できた．従って本節の結果は，我々の KQD モデルが全く機能しなかったわけではなく，“量子 Arnold's Cat Map 系が雑音源としての役割を果たせる時間スケールが極端に短かった”と判断すべきものである．この事については，以下に述べる通り，理論的にもある程度の定性的な説明を行う事が可能である．

2.2.2 節の量子化の過程で述べた通り，量子 Arnold's Cat Map 系が運動する (部分) ヒルベルト空間は  $N$  次元に離散化されているから，その時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{cat}}$  : (26) 式はちょうど  $N$  個の固有状態  $|m\rangle$  ( $1 \leq m \leq N$ ) を持つ．それぞれの固有状態については  $\hat{U}_{\text{cat}}|m\rangle = e^{-i\gamma_m}|m\rangle$  のように，毎回の写像ごとに一定の位相  $\gamma_m$  しか変化せず，よってその時間発展は位相が回転し続けるだけの周期的なものとなる．簡単のために調和振動子の存在を無視したとすれば，任意の初期状態  $|\psi_0\rangle$  における量子 Arnold's Cat Map 系の時間発展は，この固有状態の時間発展の重ね合わせによって記述される：

$$\hat{U}_{\text{cat}}^\tau |\psi_0\rangle = \sum_{m=1}^N e^{-i\gamma_m \tau} C_m |m\rangle \quad (43)$$

ここで  $C_m = \langle m | \psi_0 \rangle$  であり、これは初期状態を与えた時点で定まる定数である。従って、量子 Arnold's Cat Map 系の振る舞いが、一見どれだけ乱雑に見えたとしても、それは必ず  $N$  個の周期的な振る舞いの重ね合わせで記述されるものである。とすると、計算機で発生させる疑似乱数において周期性がしばしば問題となるように、この量子 Arnold's Cat Map 系の振る舞いを“乱数的”と見なして扱ってもよい時間スケールには原理的に限界があると言える<sup>\*32</sup>。本節で扱った  $\hbar$  の範囲においては、 $\hat{U}_{\text{cat}}$  の固有状態の数は高々 64 ~ 256 個であるから、その周期挙動の重ね合わせで記述される量子 Arnold's Cat Map 系の振る舞いが、ごく短い時間スケールしか雑音源として機能しなかったのも納得できるものである。

以上の事を踏まえると、KQD のエネルギー輸送をより長時間持続させ、多くのエネルギーを“熱化”するためには、二つの方向性が考えられる。一つは、 $\hbar$  をより小さくする事によって、部分ヒルベルト空間の次元数  $N$  を増やす事である。これによって  $\hat{U}_{\text{cat}}$  の固有状態の数も増えるため、系の振る舞いを支配する周期挙動の数も増加し、より長い時間スケールに渡って雑音源としての機能を保てるようになる事が期待される。しかしながら、 $\hbar$  を小さくしていくという方向は、いわば系を半古典極限に近づけていくという方向であるから、可能な限りコンパクトな量子系で“熱化”の現象を捉えるという、我々の当初の趣旨からはやや外れてしまう。そこでもう一つの方向性として、量子 Arnold's Cat Map 系を複数結合する事が考えられる。例えば、本節で用いた量子 Arnold's Cat Map 系を 2 つ用意して結合すれば、部分ヒルベルト空間の次元数は  $N^2$  へと劇的に増えるから、 $\hat{U}_{\text{cat}}$  の固有状態の数もそれだけ増加し、雑音源としての品質が劇的に向上する事が見込める。そして本論文においては、この方向性を採用するものとする。実際にここで見たように、古典的な不可逆挙動が量子性によって抑圧され得る事は、他の系でもよく知られている [14, 15]。いまの我々の系に近い例としては無限の相空間領域における量子カオス拡散などが挙げられる。しかしそれにおいても一方で、結合系にした場合においては、古典的には無視できるほどの弱い相互作用によって古典性が回復する事が知られている [18, 19]。よってこのような方向性は先行研究を踏まえた上でも期待できるものである。また、仮に現実の世界において量子ダンパーの実装を試みる場合を想定しても、 $\hbar$  の値を変える事と比べれば、自由度を 1 つ増やす事の方が現実的であると言える。

### 2.3.3 2-D 結合量子 ARNOLD'S CAT MAP 系を用いた量子系における数値実験結果

前節での結果と考察を踏まえた上で、本節では、量子 Arnold's Cat Map 系を 1 自由度から 2 自由度に増やした場合において、KQD の振る舞いにどのような変化が生じるのかを解析したい。具体的に、本節で扱う 2-D 結合量子 Arnold's Cat Map 系のハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{cat}2}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) = \frac{\hat{I}_A^2 + \hat{I}_B^2}{2T} + \left[ -K_A \frac{\hat{\theta}_A^2}{2} - K_B \frac{\hat{\theta}_B^2}{2} + \varepsilon \cos(\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B) + \xi g(\hat{\theta}_A, \hat{\theta}_B) \right] \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT) \quad (n \in \mathbb{Z}) \quad (44)$$

のように表されるものとする。 $(\hat{\theta}_A, \hat{I}_A)$  は自由度 A の位置および運動量、 $(\hat{\theta}_B, \hat{I}_B)$  は自由度 B の位置および運動量であり、これら 2 つの自由度はそれぞれ単体でも Arnold's Cat Map 系となって

<sup>\*32</sup> ここでの定性的な議論は雑なものである。より厳密な見積もりと定量的な解析については、第3章で詳しく扱う。

いる． $\varepsilon \cos(\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B)$  の項は，これら 2 つの自由度を結合する相互作用ポテンシャルである．この相互作用は撃力の瞬間のみに作用し，結合強度は  $\varepsilon$  の値によって調整する． $\xi g(\hat{\theta}_A, \hat{\theta}_B)$  の項は，縮退を解くために印加する微小な摂動ポテンシャルであって，本論文においては  $g(\hat{\theta}_A, \hat{\theta}_B) = \cos(\hat{\theta}_A - \theta'_A) + \cos(\hat{\theta}_B - \theta'_B)$  とし，位相は  $\theta'_A = \sqrt{2}$ ,  $\theta'_B = -\sqrt{5}$  のように選ぶ<sup>\*33</sup>．また， $\xi$  の値は表 1 に記載してあるものを引き続き用いる． $K_A$  と  $K_B$  の値も，本論文では  $K_A = K_B$  とし，表 1 における  $K$  の値を引き続き用いる．このハミルトニアンにおける写像 1 回分の時間発展演算子は

$$\hat{U}_{\text{cat2}} = e^{-i[-K_A \hat{\theta}_A^2/2 - K_B \hat{\theta}_B^2/2 + \varepsilon \cos(\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B) + \xi g(\hat{\theta}_A, \hat{\theta}_B)]/\hbar} e^{-i[\hat{I}_A^2 + \hat{I}_B^2]/2\hbar} \quad (45)$$

のように表される．

2 つの自由度 A, B 方向における部分空間の離散化数 (部分ヒルベルト空間の次元数) は，それぞれ等しく  $N_A = N_B$  に選ぶものとする．このとき有効プランク定数の値は  $\hbar = 2\pi/N_A = 2\pi/N_B$  で得られる．それぞれの自由度における座標および運動量は，(27) 式と (28) 式の通りに離散化され，同式において  $N$  を  $N_A (= N_B)$  に変えたものとして扱える．波動関数も  $\psi_{\hat{\theta}}(\theta_{Ai}, \theta_{Bj})$  や  $\psi_I(I_{Ai}, I_{Bj})$  のように 2 自由度化される<sup>\*34</sup>．位置表示と運動量表示との間の変換則は，(31) 式および (32) 式をそのまま 2 次元の DFT に置き換えたものとなる．このあたりの詳細は付録 5.2.2 に掲載している．前節と全く同様に，(45) 式の時間発展演算子を自由回転部分と撃力部分とに分けて，波動関数の表示を切り替えながら逐次的に作用させれば，この系の振る舞いを計算機上で数値的に再現できる．それにおいて初期状態は

$$|\psi_0\rangle = |I_A = \hbar N_A/2\rangle \otimes |I_B = \hbar N_B/2\rangle \quad (46)$$

を用いるものとする．

以上で述べた，2 自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系を，KQD モデルに雑音源の自由度として結合する．図 12 にこのモデルの模式図を示してある．系全体の初期状態は (37) 式と (46) 式で表され，また系全体のハミルトニアンは (36) 式において  $\hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) = \hat{H}_{\text{cat2}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  と置いたもので表される．KQD の雑音源の部分は，調和振動子および外力項と，これまでの通り相互作用項  $\eta \hat{f}(\hat{I}) \cos \Omega t$  によって結合されるが，本節においては

$$\hat{f}(\hat{I}) = \cos \hat{I}_A \quad (47)$$

とする．即ち，2 つの量子 Arnold's Cat Map 系のうち，片方の自由度 A のみが，KQD の雑音源として振動子と直接的に相互作用する．もう一つの自由度 B は，その背後で自由度 A のみと相互作用する．このような結合の仕方を採用する理由は， $\varepsilon$  の値を調整する事で，Arnold's Cat Map 系の振る舞いが完全に 1 自由度的なものから 2 自由度的なものへと変化する中間領域において，KQD での雑音源としての品質がどのように変化するのかという点に特に注目したいからである．

<sup>\*33</sup>  $\theta'_A$  と  $\theta'_B$  の値は，前節と同様にパリティ対称性による縮退を防ぐために 0 でない値にする必要があり，さらに自由度間対称性による縮退を防ぐために  $\theta'_A \neq \theta'_B$  に選ぶ必要がある．

<sup>\*34</sup> 計算機上では 2 次元の複素数配列で表せる．KQD に結合すると，これに調和振動子の自由度が加わり，3 自由度の波動関数になる．その場合は計算機上で 3 次元の複素数配列で表せる．詳細は付録 5.2.2 や付録 5.4 に掲載している．



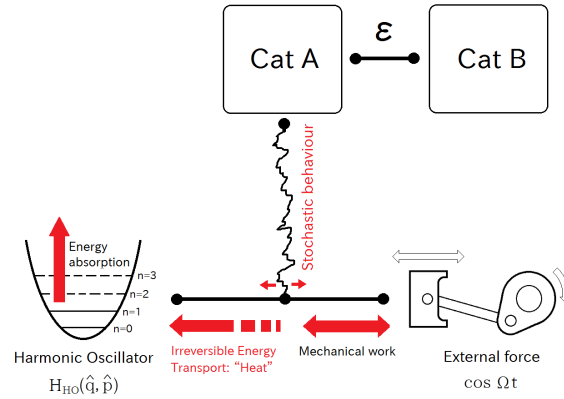


図 12 2 自由度の結合量子 Arnold’s Cat Map 系を雑音源に用いる KQD モデルの模式図. 結合量子 Arnold’s Cat Map 系の片方の自由度 A のみが、振動子と直接的に相互作用する. 自由度 B は、その背後で自由度 A のみと結合強度  $\varepsilon$  で相互作用する.  $\varepsilon = 0$  の場合においては、エネルギー輸送は 1 自由度の量子 Arnold’s Cat Map 系を雑音源に用いた場合と完全に等しくなる.

仮に  $\varepsilon = 0$  の場合には、KQD において自由度 B は完全に孤立するから、その存在は調和振動子のエネルギー吸収の挙動に全く影響を与えない. よってこの場合は、自由度 A が単独で KQD の雑音源としての役割を担う事になり、前節と全く同じ結果が得られるはずである. ところが  $\varepsilon = 1$  の場合になると、自由度 A と B は完全にもつれ合い (エンタングルし)、その運動が生じる部分ヒルベルト空間の次元数は、 $N_A$  から  $N_A \times N_B = N_A^2$  へと劇的に増加する. これによって結合量子 Arnold’s Cat Map 系の運動に寄与する固有状態の数も劇的に増加するから、前節の最後に行った議論の通り、より長い時間スケールに渡って雑音源としての機能が持続するはずである. 従って、 $\varepsilon = 0$  の場合と比べて、 $\varepsilon = 1$  の場合における KQD のエネルギー輸送の挙動は、2.1 節での理想極限の挙動により近づく事が期待できる. 実際に  $\varepsilon = 1$  の場合における量子的な KQD の振る舞いを計算機上で再現し、調和振動子自由度の相空間における波束分布の時間発展を、伏見表示によって可視化した結果を図 13 に示した. なお、同図は  $\varepsilon = 1$ ,  $\hbar = 2\pi/64$  における結果である.

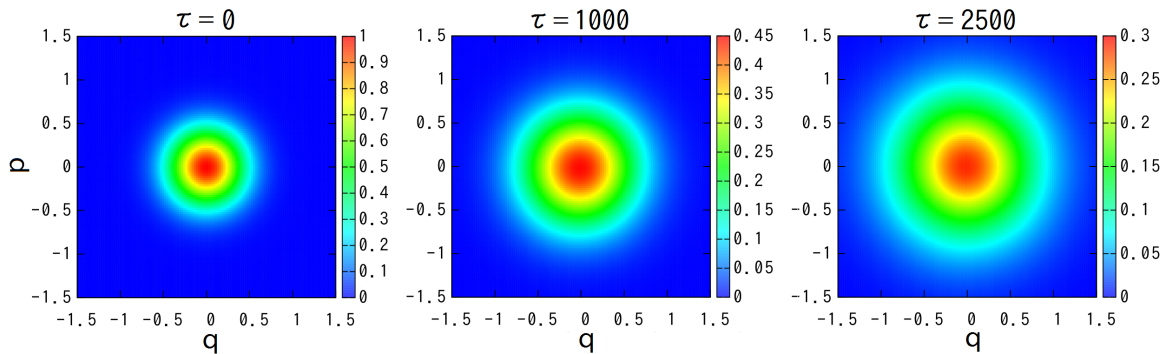


図 13 雑音源に 2 自由度の結合量子 Arnold’s Cat Map 系を用いた、KQD モデルの調和振動子自由度における、相空間での波束分布 (伏見表示) の時間発展 ( $\varepsilon = 1$ ,  $\hbar = 2\pi/64$ ). 図 9 とは異なり、時間の経過に伴って、分布が拡散的に広がっていく傾向が明らかに見て取れる. 従って、調和振動子への有効なエネルギー輸送が実現されている事が示唆される.

図13からは、調和振動子の波束の相空間分布が、時間の経過に伴って拡散的に広がっていく傾向が明らかに見て取れる。この図を、Arnold's Cat Map 系が1自由度の場合である図9と見比べると、両者の違いは歴然としている。図9は、いまの系において  $\varepsilon = 0$  とした結果と厳密に等しいので、やはり  $\varepsilon$  の値の大小によって、KQD の振る舞いが劇的に変化する事が分かる。そして、図13では波束分布が滞りなく拡散しているように見えるから、 $\varepsilon = 1$  の場合には調和振動子への有効なエネルギー輸送が実現されている事が期待できるものである。そこで調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E = \langle E \rangle_\tau - E_0$  の時間発展を数値的に求め、横軸に時刻  $\tau$  をとってプロットしたものを図14(a)に示した。

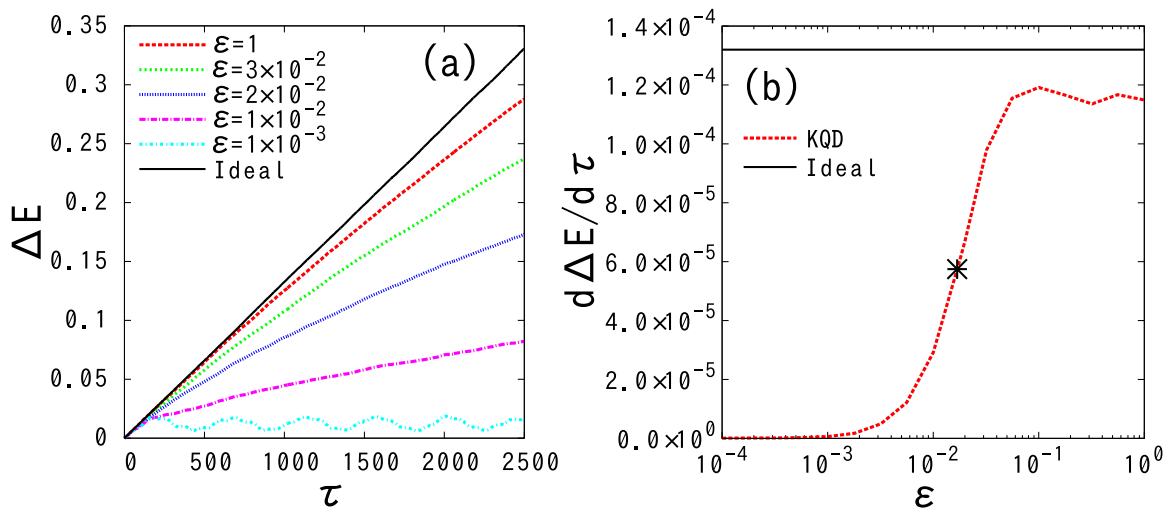


図14 (a): 2自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系を用いた KQD モデルにおける、調和振動子の累積的なエネルギー吸収量  $\Delta E = \langle E \rangle_\tau - E_0$  の時間発展 ( $\hbar = 2\pi/64$ )。上から、結合量子 Arnold's Cat Map 系の結合強度  $\varepsilon$  が強い順に並んでいる。一番上の黒色の直線は、理想的な理論値である (17) 式をプロットしたものである。 $\varepsilon$  が大きいほど、理想的な挙動に近づく事が見て取れる。(b): 時系列データからの線形補間によって求めた、時間あたりのエネルギー吸収率  $d\Delta E/d\tau$  の  $\varepsilon$  依存性 ( $\hbar = 2\pi/64$ )。ただし離散時刻  $\tau$  は連続的であると仮に見なしている。赤色の破線が実際の測定結果、黒色の実線が理想の場合における理論値をプロットしたものである。 $\varepsilon \sim 10^{-2}$  程度の領域において、劇的な変化が生じている事が見て取れる。星印は、この転移的な現象における、便宜的な閾値  $\varepsilon = \varepsilon^*$  の位置を図示したものである。

図14(a)は全て  $\hbar = 2\pi/64$  におけるものであり、この  $\hbar$  における調和振動子の基底状態のエネルギーは  $E_0 \sim 6.9 \times 10^{-2}$  である。異なる色で複数の系列が描かれているが、これらは  $\varepsilon$  の値を変えた結果を重ねて示したものである。最も下にある水色の系列は  $\varepsilon = 0$  によるものであり、これは図10における  $\hbar = 2\pi/64$  の結果と厳密に等しい。その他の系列は、上の系列ほど  $\varepsilon$  の値が大きくなっている。最も上にある黒い色の直線は、理想極限の理論値である (17) 式をプロットしたものである。この図から、 $\varepsilon$  の値が大きいくほど、調和振動子のエネルギー吸収量が、理想的な理論値に近づいていく傾向がある事が分かる。特に  $\varepsilon \sim 10^{-2}$  程度の領域において挙動が劇的に変化している事が見て取れる。この  $\varepsilon$  依存性をもう少し明確な形で表示したい。そこで図14(a)に示した時系列デー



タを、仮に  $\tau$  が連続的であると見なした上で、ある程度線形に見なせる範囲で最小二乗法により線形補間し、時間あたりのエネルギー吸収率  $d\Delta E/d\tau$  を求め、横軸に  $\varepsilon$  をとってプロットしたものを図 14 (b) に示した。この結果から、本節の KQD におけるエネルギー輸送は  $\varepsilon$  に関して転移的<sup>\*35</sup> な挙動を示す事が見て取れる。図 14 (b) の曲線がちょうど立ち上がっている中心付近の点を便宜的な閾値  $\varepsilon^*$  と置いて、 $\varepsilon$  は以下のような 3 つの領域に分けて考える事ができる。

1.  $\varepsilon \ll \varepsilon^*$  の領域：Arnold's Cat Map 系の寄与が 1 自由度的な領域。この領域においては、自由度 B の存在は KQD のエネルギー輸送にほとんど寄与せず、調和振動子のエネルギー吸収は非常に短いタイムスケールで抑圧され、有効なエネルギー輸送は実現されない。
2.  $\varepsilon \sim \varepsilon^*$  の領域：転移領域。この領域において、KQD のエネルギー輸送は、僅かな  $\varepsilon$  の変化に対して劇的に変化する。即ち、自由度 A と自由度 B が結合する事によって、エネルギー輸送に有効な不可逆性がちょうど誕生しつつある領域である。
3.  $\varepsilon \gg \varepsilon^*$  の領域：Arnold's Cat Map 系の寄与が 2 自由度的な領域。この領域では、長い時間スケールに渡って不可逆的なエネルギー輸送が実現されるようになる。

この  $\varepsilon$  依存性についての詳しい解析は次の 2.3.4 節で行うとして、まずは理想的な挙動に最も近い結果が得られている  $\varepsilon \gg \varepsilon^*$  の領域に注目したい。再び図 14(a) を見ると、 $\varepsilon = 1$  での結果 (赤色) において、 $\tau = 2500$  時点でのエネルギー吸収量は  $3.4 \times 10^{-1}$  程度である事が見て取れる。これは  $E_0 \sim 6.9 \times 10^{-2}$  よりも 5 倍程度大きな値である事を考えると、調和振動子のより高いエネルギー順位まで、有効にエネルギーが吸収されたものと判断できる。実際にこの事を確認するため、 $\varepsilon = 1$  の場合において、いくつかの時刻で調和振動子のエネルギー分布  $P(E_n)$  を測定した結果を図 15 に示した。

図 15 の通り、 $\varepsilon = 1$  の場合においては、どの時刻においても、指数関数で落ちるエネルギー分布が高精度に実現されているという結果が得られた。これは KQD の理想的な挙動における理論値：(18) 式から予測される通りのものであり、あたかも統計力学の マクスウェル=ボルツマン 分布を見ているようでもある。そして時間発展に伴い、指数の傾きが“高温”側に移行してゆく様子も見て取れる。以上の結果により、本節で扱った 2 自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系を雑音源に用いた KQD モデルでは、確かに周期外力の力学的な仕事は“熱化”され、ある程度の長い時間スケールに渡って、調和振動子への不可逆的なエネルギー輸送が実現されたものと見なしでもよいであろう。

<sup>\*35</sup> ここで見ている転移は臨界を伴うものではなく、狭義の相転移現象ではない。ここで用いている転移という語は、広義の意味での転移的な現象全般の事を指している。よってここで用いる“不可逆転移”という呼称の是非については恐らく判断の分かれるところであるが、本論文においては暫定的にこの呼称を用いるものとする。この転移の背後にある機構については第 3 章で扱う。

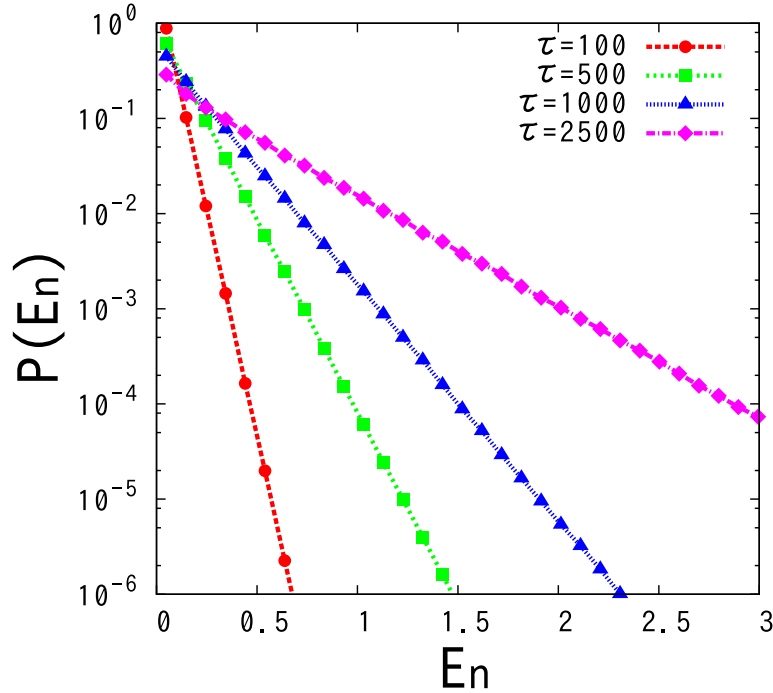


図 15 2 自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系を用いた KQD モデルにおける、調和振動子のエネルギー分布の時間発展 ( $\hbar = 2\pi/64$ ). どの時刻においても、常に理想的な指数分布が高精度に実現されている事が見て取れる. さらに、図の傾きの時間変化から、時間経過と共に“高温”な分布に変化していった事も示されている. なお、この結果を古典系における図 3(b) や図 8(b) と見比べると、同時刻での指数の傾きが異なっている事が見て取れる. これは主に初期状態における分布の違いに起因している. 古典系においては図 7 の通り、時刻  $\tau = 0$  において相空間原点  $(0, 0)$  の一点に収束した分布 ( $E_0 = 0$ ) となっているが、量子系においては図 9 の通り、不確定性原理によってある程度の幅がある分布 ( $E_0 = \hbar\omega/2$ ) となっている. 一方、図 14(a) および図 3(a), 図 8(a) で示したエネルギー吸収量  $\Delta E = \langle E \rangle_\tau - E_0$  は、そもそも初期状態のエネルギーを差し引いた量であるため、このような差は生じない.

### 2.3.4 不可逆転移の閾値および長時間挙動における $\hbar$ 依存性の解析

前節において見られた、 $\varepsilon \sim \varepsilon^*$  の領域における転移的な現象に再び注目したい. これ以降、本論文においてこの現象の事を不可逆転移現象と呼び、 $\varepsilon \sim \varepsilon^*$  の領域の事を単に転移領域と呼ぶものとする. ここで本節の図 8 を振り返ると、古典系においては Arnold's Cat Map 系が 1 自由度でも、ほぼ理想的な挙動が実現されていたから、この不可逆転移は純粋に量子的な現象である. また、転移が生じていた  $\varepsilon^*$  の値は、古典的には系 Arnold's Cat Map 系の運動をほとんど変化させないほどの小さなオーダー ( $\sim O(10^{-2})$ ) であるから、それがどのように  $\hbar$  に依存しているかという点は非常に興味深い課題である. そこで図 14(b) と同様に、調和振動子における時間あたりのエネルギー吸収率  $d\Delta E/d\tau$  を線形補間によって求め、横軸に  $\varepsilon$  をとって、複数の  $\hbar$  による結果を重ねてプロットしたものを図 16(a) に示した. なお同図においては、もはや多量のエネルギーを輸送する事は目的ではなく、よって調和振動子の絶対的なエネルギー吸収量は少なくとも構わないため、KQD

における外力項・調和振動子系・量子 Arnold's Cat Map 系の結合強度  $\eta$  の値を、図 14 よりも弱い  $\eta = 2.0 \times 10^{-4}$  に設定している<sup>\*36</sup>。

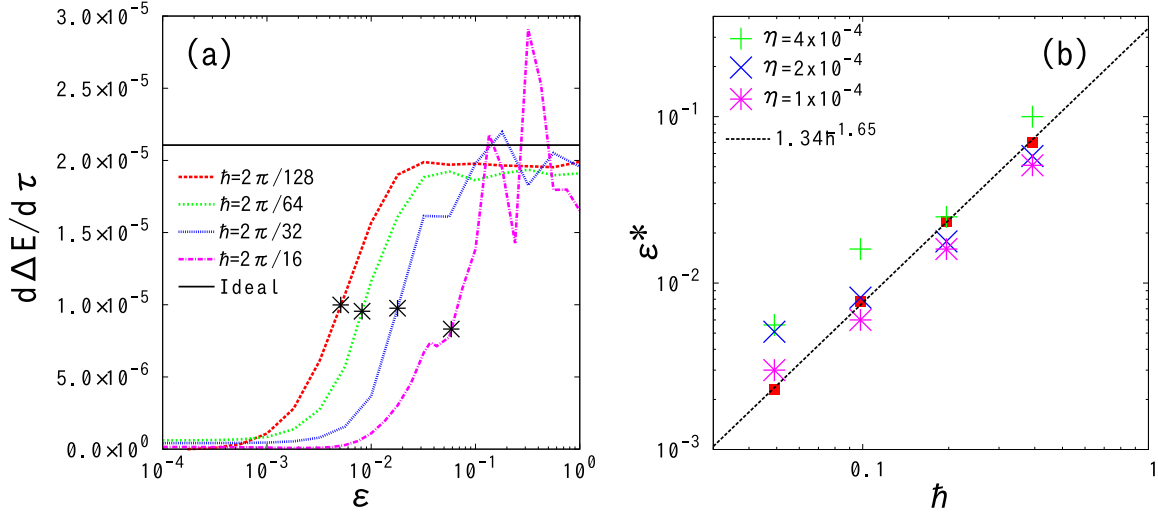


図 16 (a): 時系列データからの線形補間によって求めた、時間当たりの調和振動子のエネルギー吸収量  $d\Delta E/d\tau$  の  $\varepsilon$  依存性 ( $\eta = 2 \times 10^{-4}$ ).  $\hbar$  の値が小さいほど、転移の閾値  $\varepsilon^*$  (図中に星印で表示) の位置も小さい側に移動する事が見て取れる. (b):  $\varepsilon^*$  の  $\hbar$  依存性. 色が違う複数の系列は、 $\eta$  の値を変えたものである. この図は両対数軸であるが、概ね直線上に並んでいる事から、 $\varepsilon^* \propto \hbar^a$  の形に表せる事が示唆される. 赤色の点は、自由度間のエンタングルメントの指標であるフォン・ノイマンエントロピー (詳しくは第 3 章で扱う) において、同様に求めた  $\varepsilon^*$  の値をプロットしたものである (元のデータは付録 5.8 に掲載). 黒色の破線は、それらを繋ぐ  $\varepsilon^* \propto \hbar^{1.65}$  の直線をプロットしたものである.

図 16(a) から、 $\hbar$  の値が小さいほど、より弱い  $\varepsilon$  の領域で転移が生じるようになる傾向が見て取れる. しかしながら、転移領域の幅や、図において閾値曲線が立ち上がる角度は、 $\hbar$  にあまり依存していないようにも見える. この事から、より  $\hbar$  を小さくしていった場合においても、この転移は本質的に、他の量子局在現象においてしばしば見られるような臨界を伴うものとは異なり、 $\varepsilon$  に関してある程度の幅に跨って生じる現象である事を強く示唆している. そこで便宜的な閾値  $\varepsilon^*$  を、以下の関係を満たす通り、即ち閾値直線のちょうど中間点を表すように定義する.

$$\left. \frac{d\Delta E}{d\tau} \right|_{\varepsilon=\varepsilon^*} = \frac{1}{2} \left\{ \left. \frac{d\Delta E}{d\tau} \right|_{\varepsilon=1} + \left. \frac{d\Delta E}{d\tau} \right|_{\varepsilon=0} \right\} \quad (48)$$

このように定義した  $\varepsilon^*$  の値を、図 16(a) 同様のデータから数値的に求め、 $\hbar$  を横軸にとってプロットしたものを図 16(b) に示した. 同図には色違いで複数の系列がプロットされているが、それらは  $\eta$  の値 ( $\varepsilon$  ではない事に注意する必要がある) を変えたものである. 同図において、 $\varepsilon^*$  の値は  $\eta$  によってある程度のばらつきが見られるが<sup>\*37</sup>、しかし全体的には直線上に並んでいる傾向が見て取れ

<sup>\*36</sup> これは、 $\hbar = 2\pi/128$  の場合において、不可逆的なエネルギー輸送がかなり長時間持続するようになるため、相空間の数値計算対象領域から波束が溢れないようにしたいという、主に計算上の都合によるものである.

<sup>\*37</sup> 結合量子 Arnold's Cat Map 系の初期状態: (46) 式の違いについても、この  $\varepsilon^*$  の測定値は多少ばらつく.

る。この図が両対数軸のグラフである事に注意すると、この結果は、 $\varepsilon^*$  が  $\hbar$  の冪関数

$$\varepsilon^* \propto \hbar^a \quad (49)$$

のように表せる事を強く示唆している。この事は他の量子拡散現象における局在・非局在転移などで知られている結果と対応しているものの、しかしながら図 16(b) の傾きから見積もれる大体の  $a$  は、1 よりも大きく 2 よりも小さい半端な範囲にあるから、 $\varepsilon^* \propto \hbar$  や  $\varepsilon^* \propto \hbar^2$  のような単純な指数では表せないように見える事は興味深い。より詳細な解析のためには、より小さな  $\hbar$  領域も含めた解析が望まれるものである。なお、詳しくは第3章で議論するが、自由度 A と B との間のエンタングルメントも、 $\varepsilon$  に関して転移的に生じる。自由度間のエンタングルメントを測るのにあたって、よくフォン・ノイマンエントロピー [33] が用いられる。そこでやや唐突であるが、2-D 結合量子 Arnold's Cat Map 系の全固有状態における平均フォン・ノイマンエントロピーから求めた、“自由度 A-B 間におけるエンタングルメントの閾値”と見なせる  $\varepsilon_S^*$  の値 (付録 5.8 参照) も、図 16(b) に赤色の点としてプロットしてある (エンタングルメントの転移現象の詳細については第3章において扱う)。この  $\varepsilon_S^*$  の大体の値は、KQD のエネルギー輸送から求めた  $\varepsilon^*$  とよく対応しているように見える。この  $\varepsilon_S^*$  は図 16(b) においてほとんど一直線上に並んでおり、その傾きから概ね  $\varepsilon_S^* \propto \hbar^{1.65}$  程度であると見積もれる。実際に同図において、 $\hbar^{1.65}$  に比例する直線を黒色の破線で引いてある。

ところで 2.3.2 節の最後で行った議論からすると、たとえ本節のように量子 Arnold's Cat Map 系の自由度を 2 つに増やしたとしても、そのヒルベルト空間の次元数が有限である限り、その振る舞いが乱雑であると見なせる時間スケールは原理的に有限である。従って、KQD において最も理想の場合に近い挙動が実現された  $\varepsilon = 1$  の場合においても、不可逆的なエネルギー輸送はやがて抑圧され、調和振動子のエネルギー吸収量もある水準で飽和してしまうはずである。そしてその限界はヒルベルト空間の次元数によるものであるから、 $\hbar$  の値に依存するはずである。実際にその様子を見るため、いくつかの  $\hbar$  の値の下で、 $\varepsilon = 1$  での調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E$  の時間発展をプロットしたものを図 17 に示した。なお同図では、先の図 16 と同様に  $\eta = 2.0 \times 10^{-4}$  に設定している。

図 17 から、確かに  $\varepsilon = 1$  でもやがて KQD のエネルギー輸送は停滞し、それに至るまでの時間スケールは、 $\hbar$  の値を小さくするごとに伸びていく事が確認できる。なお、 $\hbar = 2\pi/128$  および  $\hbar = 2\pi/256$  の系列は、不可逆的なエネルギー輸送の持続時間が非常に長くなるため、この図では完全な飽和に至るまでの挙動を掲載できていないが、それでも理想の場合の理論値をより忠実に模倣するようになる傾向が確認できる。以上の結果から、 $\hbar \rightarrow 0$  の極限において、KQD における不可逆的エネルギー輸送は、理想的な挙動 (= 古典挙動) に漸近していくものと判断できる。以上の結果を踏まえた上で、再び 2.3.2 節の最後の議論を振り返ってみると、結局のところ KQD の不可逆的なエネルギー輸送をより長時間持続させるためには、 $\hbar$  を小さくする事と、量子 Arnold's Cat Map 系の構成自由度を増やす事とで、どちらが有利なのかという点に興味及ぶのは自然である。そこで図 17 には比較のため、 $\varepsilon = 0$  つまり量子 Arnold's Cat Map 系が 1 自由度と等価な場合における、 $\hbar = 2\pi/256$  での計算結果 (灰色) を掲載してある。これと  $\varepsilon = 1$  かつ  $\hbar = 2\pi/16$  での計算結果 (水色) は、量子 Arnold's Cat Map 系における部分ヒルベルト空間の次元数がちょうど等し

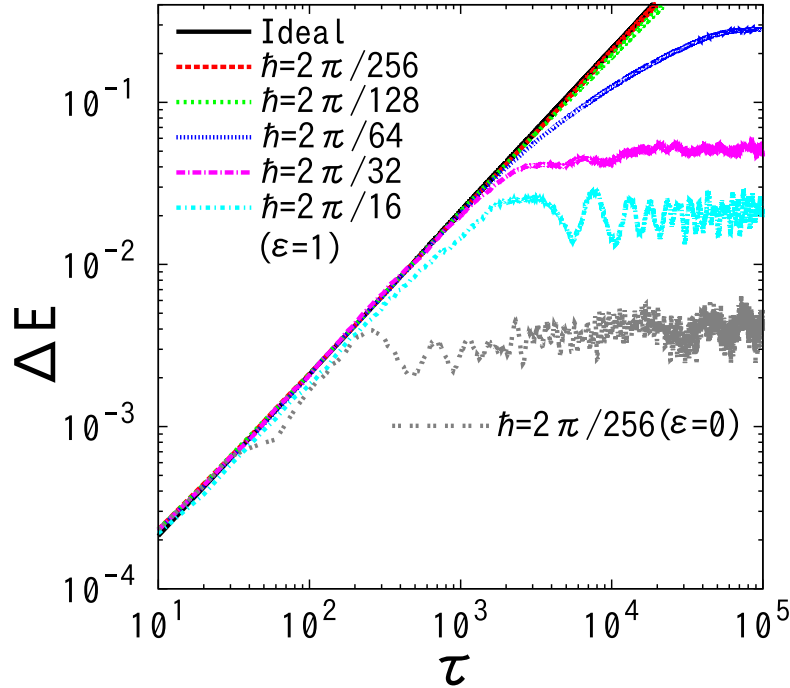


図 17 複数の  $\hbar$  における，調和振動子のエネルギー吸収  $\Delta E$  の長期的な挙動 (すべて  $\varepsilon = 1$ ，一番下の系列のみ  $\varepsilon = 0$ )．この図と図 16 のみ  $\eta = 2 \times 10^{-4}$  である．色が異なる複数の系列は， $\hbar$  の値を変えた結果を意味している．一番上の黒い直線は，理想的な理論値である (17) 式をプロットしたものである．この結果から， $\varepsilon = 1$  の場合においても，長時間ではやがてエネルギー輸送が停滞する事が見て取れる．また，その挙動は  $\hbar$  の値を小さくするほど古典挙動をよく追従し，不可逆的なエネルギー吸収が持続する時間スケールが伸びていく傾向も表れている．

く  $N = 16^2$  である．そして両者を比較すると，少なくともこの結果においては， $\hbar$  を小さくするよりも自由度を増やした方が，より長時間に渡って不可逆的なエネルギー輸送が持続しているように見て取れる．従って，KQD の挙動をより理想的なものに近づけたい場合は， $\hbar$  を小さくするよりも，自由度の数を増やす方が有利である可能性が示唆されるものである<sup>\*38</sup>．

### 2.3.5 潜在的な不可逆性とその寿命

図 17 の各  $\hbar$  の系列を注意深く見比べると， $\hbar = 2\pi/32$  の結果を境に，長時間の振る舞いが若干変化している様子が見て取れる．この原因を解析したところ，その背後に非常に興味深い事実がある事が分かった．具体的には，KQD の振る舞いが変化する  $\varepsilon$  の強度に閾値があったのと同じように， $\eta$  の強度にもやはり閾値  $\eta^*$  があり，それも  $\hbar$  に依存しているという事である．即ち， $\eta < \eta^*$  の領域においては，量子 Arnold's Cat Map 系の振る舞いは調和振動子との結合による影響をほとんど受

<sup>\*38</sup> ただし，この点をより詳しく検証するには，より小さな  $\hbar$  における  $\varepsilon = 0$  での挙動も確認する必要がある．しかし，KQD モデルは  $\hbar$  の値を小さくした際の計算コストの増大が著しく，その長時間挙動を計算するのは容易ではない．

けないが、しかし  $\eta > \eta^*$  の領域では両者には若干のもつれ合い (エンタングルメント) が生じてしまい、それによって量子 Arnold's Cat Map 系の乱雑な振る舞いに変化してしまうのである。この  $\eta \sim \eta^*(\hbar)$  の境目が、図 17 においてはちょうど  $\hbar \sim 2\pi/32$  の程度の領域にあり、その上下で振る舞いの質が変化しているように見えていと判断できる。 $\eta > \eta^*$  の領域においては、KQD のエネルギー輸送の挙動が早期に失速しはじめ、理想的な古典極限挙動から乖離するようになる事も判明した。これは  $\varepsilon$  依存性とは逆の結果である。この事は、安定な調和振動子系とのエンタングルメントが、量子 Arnold's Cat Map 系の乱雑な振る舞いを“劣化”させる方向に寄与する事を示唆している。本節においては、古典的にはほとんど運動を変化させない  $\eta \sim O(10^{-4})$  程度の条件を用いてきたが、しかしやはり量子系においては、古典系よりもずっと微弱な相互作用強度によって無視できない影響が生じてしまうのであり、我々のこれまでの結果も、その影響をある程度受けていたものであると考えられる。実際に図 17 と同様の図において、 $\eta$  の値を小さくしていくと、それに伴って  $\hbar = 2\pi/32$  や  $\hbar = 2\pi/64$  などの系列も、より長時間に渡って理想的な古典極限挙動を追従し、限界を迎えた後は直ちに飽和挙動に転じるようになる。

以上の結果は、次のような非常に興味深い視点をもたらすものである。即ち、量子 Arnold's Cat Map 系のように十分に双曲的な量子カオス系は、完全に孤立した状態において、最も理想的な不可逆性を“潜在的に”持っていると思わせる。その不可逆性を、本節で用いた KQD のエネルギー輸送のように具体的な物理現象として引き出すためには、調和振動子などの何らかの自由度を結合しなければならないが、それによって量子カオス系に内在していた不可逆性は、理想的な水準からは劣化してしまうのである。このような視点が得られると、我々の自然における不可逆性の根源を探る上では、本章で見てきたエネルギー輸送のような具体的な物理現象からは一旦離れて、上で述べたように量子カオス系そのものが潜在的に持つ、理想的な不可逆性について深く追求したくなるものである。そのような潜在的な不可逆性を解析する事は、本章で扱ったような KQD モデルにおいて、 $\eta$  の値を十分に小さくすれば可能である。そうすると、調和振動子に生じる絶対的なエネルギー吸収量も非常に小さくなってしまいが、しかしそれでも、その推移を理想的な古典極限の結果 ( $\propto \tau$ ) と比較する事はできるから、不可逆的な振る舞いが持続する時間スケールを見る上では問題無い。即ち、その場合は振動子に、量子カオス系が潜在的に示し得る不可逆性の時間スケールを、劣化させず“非破壊的に”測定するための detector としての役割を担わせるわけである。

ところで上のような目的においては、本章で扱ってきた KQD モデルを、より適した形へと改修すると都合が良い。具体的には、調和振動子 ( $\hat{q}, \hat{p}$ ) の自由度を、古典的な正準変換  $q = \sqrt{2J/\omega} \cos \phi, p = -\sqrt{2J\omega} \sin \phi$  を用いて作用角変数 ( $\hat{\phi}, \hat{J}$ ) で近似的に置き換える。これは調和振動子の線形振動子近似と呼ばれる。作用角変数の量子対応物は知られていないため、現実はこのモデルに相当する物理系を作れるかは分からないが、我々はあくまで思考実験的なモデルとして利用する。系全体のハミルトニアンは、(36) 式において  $\hat{H}_{\text{HO}}(\hat{q}, \hat{p})$  を  $\omega \hat{J}$  に置き換え、さらに相互作用項を  $\eta \hat{f}(\hat{I}_A) \cos \hat{\phi}$  に置き換えたものとなる。さらに簡単のため、 $\Omega = 0$  とすれば外力項も  $\cos \Omega t = 1$  となって落とせる<sup>\*39</sup>。このモデルの詳しい導入と運動の見積もりは次章の 3.1 節および 3.2.1 節にお

<sup>\*39</sup> 系へのエネルギーの供給源が無くなってしまいうように思えるが、しかし Arnold's Cat Map 系の撃力からある程度の

いて行うため、ここでは要点のみを述べる．ともかくとして上のように変換すると、線形振動子の  $\hat{J}$  空間に量子拡散が生じ、その平均二乗変位 (Mean Square Displacement, MSD):  $\Delta J^2 \equiv \langle (\hat{J}_\tau - \langle \hat{J}_\tau \rangle)^2 \rangle$  の時間発展が、係数部を除いて KQD の調和振動子のエネルギー吸収量  $\Delta E$  と同じ形になる:

$$\Delta J_\tau^2 = D \sum_{k=1}^{\tau-1} \sum_{\ell=1}^{\tau-1} \langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle \cos((k-\ell)\omega T) \quad (50)$$

$$= D \sum_{j=0}^{\tau-1} A_j \quad (51)$$

$$D = \frac{2\eta^2}{\omega^2} \sin^2 \frac{\omega T}{2}, \quad (52)$$

ここで線形振動子の角周波数  $\omega$  の値に、調和振動子を用いた KQD モデルでの  $\nu = \Omega - \omega$  の値を用いれば、この式は確かに係数部を除いて (11) 式と同じ形になる．いまは係数部には興味が無いので、それで割った  $\Delta J_\tau^2/D = \sum_{j=0}^{\tau-1} A_j$  の振る舞いを見る事にする．この値は理論上  $\eta$  に全く依存しないため、純粋に量子 Arnold's Cat Map 系の振る舞いにおける二時刻相関のみによって定まるものである．一方で、実際にこの値の時間発展を計算してグラフにプロットしてみると、ある程度よりも  $\eta$  が大きい領域においては、やはり線形振動子と量子 Arnold's Cat Map 系の自由度がエンタングルしてしまうために  $\eta$  依存性が見られる．そしてそこから  $\eta$  を少しずつ弱めながら結果の変化を解析すると、ある領域において  $\eta$  依存性が消失する．このようにして、量子 Arnold's Cat Map 系が線形振動子の影響を全く受けない  $\eta < \eta^*$  の領域に入った事を、実際にグラフを確認しながら判断するわけである．その領域においては、孤立した量子 Arnold's Cat Map 系自身の振る舞いが潜在的に示し得る不可逆性を、確かに非破壊的に測定できていると見なせる．実際にこのようにして測定した“非破壊的な  $\Delta J_\tau^2/D$  の時間発展”を、横軸に時刻  $\tau$  をとってプロットしたものを図 18 に示した．

図 18(a) は実数軸のグラフ、(b) は両対数軸のグラフである．色違いで複数の系列がプロットされているが、それらは  $\varepsilon$  の値を変えた結果である．全ての系列において  $\hbar = 2\pi/64$  である．なお、いまは MSD の値を係数  $D$  で割っているため、この結果は  $\eta$  に依存しない<sup>\*40</sup>．図 18(a) は、前節までの KQD モデルにおいては図 14(a) に対応するものである．両者を見比べると概ね類似しており、 $\varepsilon$  に関する不可逆転移の現象が、本節のモデルでも見られる事を確認できる．従ってこの不可逆転移は、本質的には調和振動子などの存在とは関係なく、孤立した結合量子 Arnold's Cat Map 系自身において生じている現象であると判断できる．実際に我々は本節と同じモデルを用いて、この転移の

エネルギーがもたらされるため、本節のように微弱な拡散現象を生じさせる上では、このように外力項を落としてしまっても問題は無い．ただし調和振動子を用いた KQD 系において外力項を落とすと、エネルギー輸送量を多量に確保する事はできなくなる．なお、第3章において見積もる通り、この線形振動子を用いた系では  $\langle \hat{J} \rangle$  が時間によらず一定となるから、仮に外部からのエネルギー供給が全く無くても、原理的には拡散は発生し得ると思われる．

<sup>\*40</sup> ただし前提として、量子 Arnold's Cat Map 系の振る舞いが劣化しない  $\eta < \eta^*$  の領域から  $\eta$  を選ぶ必要がある．逆に、図 18 のような結果が  $\eta$  によって変わらない事を確認すれば、Arnold's Cat Map 系が劣化していない領域での結果を得られていると判断できる．経験的には、 $N_A \leq 64$  の場合は  $\eta \sim O(10^{-5})$  から  $O(10^{-6})$  程度に選べばよいと思われる．あまり極端に小さくすると計算精度上の懸念が生じる事に注意する必要がある（しかしこのモデルの計算アルゴリズムでは、 $\eta$  の影響は主に浮動小数点数の仮数部ではなく指数部に表れるので、仮数部のいわゆる桁落ち誤差にはあまり関連しない）．



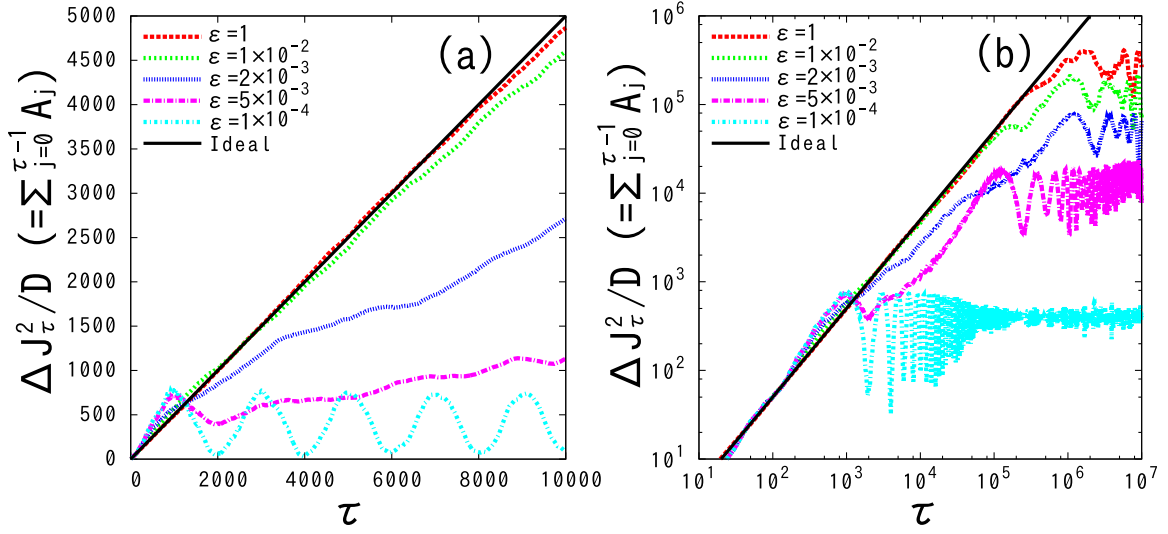


図 18 (a): 比較的短時間における  $\Delta J_\tau^2/D$  の時間発展. 色の違う複数の系列は,  $\varepsilon$  の値を変えた結果を意味している. 一番上の黒い直線は, 相関が瞬間的に落ちる理想的極限における理論値  $\Delta J_\tau^2/D = \sum_{j=0}^{\tau-1} A_j = \tau/2$  をプロットしたものである ((16) 式参照). この結果は図 14(a) と概ね類似しており,  $\varepsilon$  に関する不可逆転移の現象が, 本節のモデルでも見られる事が分かる. (b): より長時間における  $\Delta J_\tau^2/D$  の時間発展. 両軸とも対数軸である. 理想的な不可逆挙動を追従する時間スケールが, これまでに見てきた結果よりも非常に長くなっている様子が見て取れる.

詳しい機構を第3章において解析する.

続いて図 18(b) の長時間挙動に着目すると, 特に  $\varepsilon = 1$  の場合において, 理想的な挙動を追従する時間スケールが非常に長くなり,  $\tau \sim O(10^5)$  から  $O(10^6)$  程度の領域に達している事が見て取れる. この結果を前節の図 17 における  $\hbar = 2\pi/64$  の結果と比較すると, そちらでは  $\tau \sim O(10^3)$  から増加挙動が“丸み”を帯びて失速しはじめ, やがて  $\tau \sim O(10^5)$  程度で飽和に達していたが, この“丸み”の部分の結合量子 Arnold’s Cat Map 系の劣化によるものであったと推察できる. そして, 本節のように劣化の影響を排除した場合においては, そのような“丸み”が消失する事によって, 不可逆性が持続する限界の時間スケール, 即ち理想的に不可逆的な古典極限挙動から乖離する点, より明確な形で現れる事が見て取れる. 次の第3章においては, この時間スケールを“不可逆性の寿命”と呼び, それを量子カオス系における潜在的な不可逆性を測る指標として用いる事によって, 本章でこれまで見てきた  $\varepsilon$  による不可逆転移や  $\hbar$  依存性などを定量的に解析する.



## 2.4 本章の結論

次章の内容へと進む前に、ここで本章のこれまでの内容において得られた結果を、簡潔に整理してまとめておきたい。

熱的現象は自然における最も身近な不可逆現象の一つであるが、その背後に、一般には膨大な数の微視的自由度の存在を前提とするものでもある。一方で、熱的現象は不可逆的なエネルギーの移動と不可分であるが、古典的にカオスな系は少数自由度においても理想的な不可逆性を示し得る。さらに、古典極限でカオス性を示す量子系(量子カオス系)は、古典カオス系に特徴的な不可逆的挙動を模倣する事が知られている。そこで我々は本章において、典型的な量子カオス系である撃力回転子の振る舞いによって、外力の力学的な仕事を“熱化”し、そのエネルギーを調和振動子へと不可逆的に輸送する事が期待できる、撃力量子ダンパー (KQD) モデルを提案した。その振る舞いを計算機上で再現して模擬実験した結果、まず撃力回転子が1自由度の場合においては、有効なエネルギー輸送はほとんど実現されなかったものの、しかし有効プランク定数  $\hbar$  の値を小さくするにつれて、僅かながら理想的な古典挙動に近づいていく傾向も見られた。一方で、固定した  $\hbar$  の条件下においても、撃力回転子を2自由度結合した場合においては、結合強度  $\varepsilon$  がある程度の閾値を超えると系の振る舞いが劇的に変化し、定常的かつ不可逆的なエネルギー輸送が実現されると同時に、調和振動子のエネルギー分布においても理想的な場合に期待される熱分布が実現さるようになった。加えて、そこから  $\hbar$  を小さくするにつれて、より弱い結合強度  $\varepsilon$  でそのような閾値的な変化が生じるようになり、不可逆挙動もより高精度かつ長時間持続するようになるという結果が得られた。

さらに、付随的な興味深い結果として、撃力回転子と調和振動子および外力項との間の相互作用強度を弱めていくほどに、絶対的なエネルギー輸送量は当然減少してしまうものの、しかし不可逆的なエネルギー輸送現象が持続する時間スケールは長くなり、そしてある程度以上弱い領域において不変となるという結果も得られた。これは、我々の撃力回転子系が潜在的に示し得る不可逆性の“寿命”が、系が完全に孤立している場合において最も長くなるという事を示唆するものであり、次章において重要な基盤となる結果である。



### 3 量子カオス系にける量子不可逆性の誕生と寿命

#### 3.1 本章の序論

##### 3.1.1 少数自由度量子系が示し得る不可逆挙動とその寿命

第2章においては、エネルギー輸送の“熱化”という観点から、量子系の不可逆的な振る舞いを観測する事を試みた。このような観点をういた理由は、熱的な現象が我々の一般的な感覚で想像しやすく、馴染みのあるものであったからである。しかしながら、二時刻の自己相関が喪失するような振る舞いがあれば、それを揺動力とする事で、“熱的”な形態に限らず、何らかの散逸的な物理現象と結びつける事ができる。例えば、第2章で扱った KQD モデルにおいて、不可逆的なエネルギー吸収が生じるのは調和振動子の自由度であったが、相関の喪失が生じるのは結合 Arnold's Cat Map 系の自由度であった。実際に前者を線形振動子に取り換えてしまっても、作用空間における拡散という形で、エネルギー吸収とは別の形の散逸現象が生じる事を第2章の最後で扱った。よってこれらのモデルでは、量子不可逆性を考える上で本質的に重要なのは、雑音源として乱雑に振る舞う自由度であって、振動子はそれを観測可能な形で表面化させるための自由度に過ぎないと言える。従って、量子不可逆性について考える際に、本質的に重要なのは相関の喪失であり、目に見えて表面化している散逸的な物理現象がどういう形であるか、さらに言えば表面化しているかどうかは重要ではない。そして、この第3章における内容は、第2章の現象論的な結果を踏まえた上で、研究対象をより一般化し、量子不可逆性そのものを定量化して解析する。

本章において具体的に我々が着目するのは、量子系の挙動が、古典系の不可逆的な挙動をどこまで模倣し得るかという時間スケールである。我々はこの量子-古典対応が破れる時間を、本論文において“不可逆性の寿命”と呼ぶ。まず前提として、古典カオス系では、ある程度以上に離れた時間スケールにおいて二時刻相関はやがて0に落ちるから、これを揺動力とする散逸過程は一種のブラウン運動と等価となる。よって、このような系の古典挙動においては、何らかの量の永続的な拡散という形で、不可逆的な性質が顕在化して見える。第2章においては、これを調和振動子のエネルギー期待値という形で見ていたと言える。そして、その結果でも示した通り、少なくとも少数自由度の孤立した量子系においては、定常的な拡散が持続する時間スケールは有限である(特に狭く閉じた相空間領域を持つ系では本質的にそうである)。よって、古典系が拡散のように永続的に不可逆な挙動を示す量に注目すれば、そこには量子-古典対応の破れが明確な形で表れる。従って我々は、その破綻時間に“寿命”という概念を当て嵌める事が確かにできるのであり、それを指標とすれば、量子不可逆性について定量的に解析する事が可能となる。本章の研究における根本的な動機は、我々の自然に不可逆性が生じる機構を掘り下げて調べる事である。量子系の相関喪失に関する課題は Fidelity などの分野においても研究されているが [8,9], 量子不可逆性の時間スケールを、このように寿命という観点から定量的に深く追求した研究は、我々が知る限り過去に存在しないものである。

## 3.1.2 モデルの導入

続いて、本章において用いるモデルを導入する。我々が本章で用いるモデルは、結合 KR 系の片方の自由度に線形振動子 (Linear Oscillator) を結合したものである。これは第2章で扱った KQD モデルにおける調和振動子  $(\hat{q}, \hat{p})$  を、線形振動子  $(\hat{\phi}, \hat{J})$  に置き換えたものであると言える。実際に第2章の最後の2.3.5節において、我々はそのようなモデルを既に少し扱ったが、本章で用いるモデルもそれと同じものである。系全体のハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{tot}}$  は以下のように表される：

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) + \omega \hat{J} + \eta \hat{f}(\hat{I}) \cos \hat{\phi} \quad (53)$$

ここで  $\hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  は結合 KR 系のハミルトニアンであり、具体的な形は (55) 式で定義する。  $\omega$  は線形振動子の角振動数、  $\hat{J}$  は作用演算子である。線形振動子のハミルトニアンは  $\omega \hat{J}$  のみであり、よってここには表れていないが、線形振動子の角度演算子を  $\hat{\phi}$  とする。ここで線形振動子とは、調和振動子の位置および運動量  $(\hat{q}, \hat{p})$  を、古典的な正準変換  $q = \sqrt{2J/\omega} \cos \phi, p = -\sqrt{2J\omega} \sin \phi$  を用いて作用角変数  $(\hat{\phi}, \hat{J})$  に置き換えたものである<sup>\*41</sup>。  $\eta \hat{f}(\hat{I}) \cos \hat{\phi}$  の項は KR 系と線形振動子の相互作用項であるが、厳密に調和振動子を線形振動子へと置き換えると、ここには本来  $\sqrt{2\hat{J}/\omega}$  がかかるはずである。しかしながら、我々が扱うように  $\eta$  が十分小さい場合においては、波束は  $J$  空間においてほとんど初期状態の順位の近傍に収束しているため、それが基底状態から十分離れているとの仮定の下で、  $\sqrt{2\hat{J}/\omega}$  を定数と見なして  $\eta$  に組み込んでいる<sup>\*42</sup>。  $\hat{f}(\hat{I})$  は、KR の乱雑な (stochastic な) 振る舞いの寄与を相互作用項に与えるための関数である。我々は第2章に引き続き、KR を2自由度 A,B の結合系として、その片方の自由度 A のみを線形振動子に結合する。具体的には

$$\hat{f}(\hat{I}) = \sin \hat{I}_A \quad (54)$$

に設定するものとする<sup>\*43</sup>。そうする事で、結合 KR 系の自由度 A,B 間の相互作用強度  $\varepsilon$  が0である場合に、線形振動子の時間発展は KR が1自由度の場合と厳密に等しくなる。よって  $\varepsilon$  の値を調節する事で、KR の自由度数が1個から2個に増える事によって生じる変化を解析する事ができる。

すぐ後の節で詳しく見積もるが、この系においては、KR の乱雑な振る舞いに揺動されて、線形振動子の  $J$  空間に量子拡散が生じる。これは第2章の最後においても示した通りである。このモデルのように、KQD モデルの調和振動子を線形振動子に置き換えて用いると、線形振動子の角度変数  $\hat{\phi}$  の振る舞いが、作用変数  $\hat{J}$  に依存しないため、系の運動にとって  $J$  空間は全域で一様な空間と

<sup>\*41</sup> このような変換は調和振動子の線形振動子近似と呼ばれる。作用角変数の量子対応物は知られていないため、現実はこのモデルに相当する物理系を作れるかは分からないが、本章ではあくまで思考実験的なモデルとして利用する。

<sup>\*42</sup> 波束の運動は  $J$  空間において一様であるから、実際の数値計算において初期状態の励起準位に制約は無い。

<sup>\*43</sup>  $\hat{I}_A$  および  $\hat{I}_B$  は  $[0, 2\pi)$  の範囲で周期的であるから、  $\hat{f}(\hat{I})$  の関数形は  $\hat{I}_A, \hat{I}_B$  に関する  $2\pi$  周期関数である必要がある。いまのように  $\hat{I}_A$  のみに依存させる場合は、  $\hat{f}(\hat{I}_A)$  は  $\hat{I}_A$  に関する  $2\pi$  周期関数であれば何でもよいが、ただし Arnold's Cat Map 系の任意の固有状態  $|m\rangle$  として、  $\langle m|\hat{f}(\hat{I}_A)|m\rangle = 0$  となるように選ぶと都合が良い。そうでないものを選ぶと、  $\omega = 0$  の条件下において MSD の弾道的 (ballistic) な発散が生じ、解析が難しくなる。  $\omega \neq 0$  の場合にはそのような事は起こらないが、我々は本章の最後に  $\omega = 0$  の場合を扱う必要がある。 Arnold's Cat Map 系の固有状態  $|m\rangle$  の波動関数の絶対値は、  $\hat{I}_A, \hat{I}_B$  空間において原点对称であるため、ここでのように  $\hat{f}(\hat{I}_A) = \sin \hat{I}_A$  と選べば、  $\hat{I}_A$  空間が連続的であっても離散的であっても、常に厳密に  $\langle m|\hat{f}(\hat{I}_A)|m\rangle = 0$  となる。よってこのように選んでいる。

見なせる．よって  $J$  空間は，そこに量子拡散を生じさせて解析するには理想的な空間となる．さらに調和振動子よりも線形振動子の方が，理論的な解析計算においても数値的な計算においても扱いやすく都合が良い<sup>\*44</sup>．つまるところ本章で我々が用いるモデルは，第2章の KQD モデルでは調和振動子のエネルギー吸収として捉えていたのと同じ現象を，線形振動子の作用空間での拡散という形に置き換えて解析できるようにした，一種の最適化モデルであると言える．しかしながら，モデルの意図と用途は全く異なる．KQD モデルの目的は，力学的な仕事を“熱化”し，そのエネルギーを調和振動子に不可逆的に輸送する事であった．しかし本章のモデルにおいては，KR の振る舞いの不可逆性そのものに焦点を当て，その自己相関の喪失が生み出す不可逆性の時間スケールを測るために，線形振動子の量子拡散を用いるのである．このような目的のため，本章のモデルにおいては，KR 自身の振る舞いを線形振動子に変化させてしまわないように，両者の間の相互作用強度  $\eta$  を非常に弱い値に絞る．即ち，本章における振動子の役割は，KR の量子不可逆性を非破壊的に測定するための，ある種の受動的な“detector”としてのものであり，第2章のように主役的な位置づけのものではない．本章における議論の中心はあくまでも KR そのものである．

本章では第2章に引き続き，解析対象の KR として，2 自由度の結合 Arnold's Cat Map 系を用いる．まず結合 KR のハミルトニアンは：

$$\hat{H}_{\text{KR}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) = \frac{\hat{I}_A^2 + \hat{I}_B^2}{2} + \left[ V(\hat{\theta}_A) + V(\hat{\theta}_B) + \varepsilon \cos(\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B) + \xi g(\hat{\theta}) \right] \delta(t - nT) \quad (55)$$

のように表される<sup>\*45</sup>．この系の写像 1 回あたりの時間発展を与える (Floquet) 演算子  $\hat{U}_{\text{KR}}$  は：

$$\hat{U}_{\text{KR}} = e^{-i \left[ V(\hat{\theta}_A) + V(\hat{\theta}_B) + \varepsilon \cos(\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B) + \xi g(\hat{\theta}) \right] / \hbar} e^{-i \left[ \hat{I}_A^2 + \hat{I}_B^2 \right] T / 2\hbar} \quad (56)$$

と記述できる．結合 KR の各自由度 A,B の相空間は  $[0, 2\pi) \times [0, 2\pi)$  の有限領域で狭く閉じているものとする．ここで  $\xi g(\hat{\theta})$  は，対称性による量子順位の縮退を解くために印加する，古典的には無視できるオーダーの微小な摂動であり，第2章と同様  $g(\hat{\theta}) = \cos(\hat{\theta}_A - \theta'_A) + \cos(\hat{\theta}_B - \theta'_B)$  の形に設定するものとする．(55) 式においてポテンシャルを  $V(\hat{\theta}_i) = -K_i \hat{\theta}_i^2 / 2$  に設定すれば，我々が扱う Arnold's Cat Map 系になる．本章においては，少数自由度量子系が示す量子不可逆性の限界を知りたいので，KR の古典的な振る舞いは可能な限り乱雑であってほしい． $K_i < -4$  および  $0 < K_i$  において相空間構造が一様に双曲的となる Arnold's Cat Map 系は，その理想極限を解析するのに相応しい系であると言える．我々は  $K_A = K_B = 10$  として用いる．ところで  $V(\hat{\theta}_i) = K_i \cos \hat{\theta}_i$  とすると，この KR は結合 Standard Map 系になる．その場合も非線形パラメータ  $K_i$  が十分に大きい領域においては，古典相空間の全域がカオス領域となるため，結合 Arnold's Cat Map と同様の振る舞いが見込める<sup>\*46</sup>．しかし  $K_i \sim O(1)$  程度かそれ以下の領域においては，Standard Map 系の相空間には，楕円

<sup>\*44</sup> 本章のモデルは数値計算において，KQD モデルと比較して数十～百倍程度の高速計算が可能である．KQD モデルでも第2章の結果を計算するのに大して時間がかかる訳ではないが，しかし本章においてはアンサンブル平均をとって統計的な性質を解析する必要があるため，第2章で行ったような計算を数百～数千回繰り返す必要がある．従って，ここではモデルの数値計算効率が非常に重要な要素となる．本章のモデルは，数値計算効率に関して最大限に最適化したモデルでもある．

<sup>\*45</sup> 第2章では解析の都合のため，運動エネルギー項の分母に  $T$  を含ませていたが，本章では除く．

<sup>\*46</sup> 実際に本章で扱う数値計算において，概ね同様の結果が得られる．

的な領域とカオス領域が混在する複雑な構造が形成されるため、古典系の振る舞いも理想的に乱雑とは見なせなくなる。そのような、古典的にも不完全な場合における量子不可逆性については、非常に興味深い問題ではあるが、本論文では扱わない。本論文においては、あくまでも古典系が理想的に乱雑に振る舞う事を前提として、その場合における量子不可逆性に焦点を絞って扱う。

なお、いまの場合のような周期的な相空間においては、第2章でも述べた通り、ヒルベルト空間は離散化される。自由度  $A, B$  ごとの離散化数をそれぞれ  $N_A$  および  $N_B$  とするが、簡単のため本論文全体を通して  $N_A = N_B$  とする。ヒルベルト空間全体の次元数  $N_{\text{tot}}$  および有効プランク定数  $\hbar$  は:

$$N_{\text{tot}} = N_A N_B \quad (57)$$

$$\hbar = 2\pi/N_A \quad (= 2\pi/\sqrt{N_{\text{tot}}}) \quad (58)$$

である。 $N_{\text{tot}}$  は我々が任意に選べる設定パラメータであり、その選択によって  $\hbar$  の大きさを変えて、系の振る舞いにおける量子性の度合いを調整する。 $N_{\text{tot}}$  が大きい、即ち  $\hbar$  が小さい古典極限方向において、量子系の振る舞いが、より古典挙動をよく追従するようになる事が見込まれる。しかし我々は本章において、古典不可逆性が量子性によって抑圧される現象に注目するため、 $N_{\text{tot}}$  の値は大きいほど好ましいという訳では無い。 $N_{\text{tot}} (= N_A^2)$  は  $16 \times 16$  から  $64 \times 64$  程度の領域が、古典性と量子性の境界領域の振る舞いが表面化して解析しやすい。その他、本章において計算で用いる全てのパラメータを含めた設定値を、表2にまとめて示した。

表2 本章の数値実験における主なパラメータの設定値

パラメータ	設定値
$N_A (= N_B)$	16, 32, 64
$K_A (= K_B)$	10
$\varepsilon$	0 ~ 1 の範囲
$\eta$	$10^{-6}$
$\omega$	$\sqrt{2}$
$T$	1
$\hat{f}(\hat{I})$	$\sin \hat{I}_A$
$g(\hat{\theta})$	$\cos(\hat{\theta}_A - \theta'_A) + \cos(\hat{\theta}_B - \theta'_B)$
$\xi$	$4.25 \hbar^2$
$\theta'_A, \theta'_B$	$\sqrt{2}, -\sqrt{5}$

ただし、この表の  $\theta'_A$  および  $\theta'_B$  の値については、後の節においてアンサンブル平均が必要になった際、代わりに乱数値を割り当てる。その際、偶然  $\theta'_A \approx \theta'_B$  の状況になってしまうと、自由度間の対称性に起因する縮退が生じる懸念があるため、そうならないように注意する必要がある。また、 $\xi$  の値については、本論文で扱う範囲において概ね縮退を解消できる水準に選んだが、しかしその決定過程は経験則的なものなので、より大きな  $N_{\text{tot}}$  の領域においては再考の余地がある<sup>\*47</sup>

<sup>\*47</sup> 我々が扱う  $N_{\text{tot}}$  の範囲においては、 $\xi = 4.25\hbar^2$  もちようど  $O(\hbar)$  程度のオーダーであり、代わりに  $\xi = 2\hbar$  程度に設

## 3.1.3 系の振る舞いと解析の方針

本章で行う計算において、KR 部分の初期状態  $|\psi_0\rangle$  は

$$|\psi_0\rangle = |I_A = \hbar N_A/2\rangle \otimes |I_B = \hbar N_B/2\rangle \quad (59)$$

のように設定するものとする。ここで  $|I_A = \hbar N_A/2\rangle$  は  $\hat{I}_A$  演算子における固有値  $\hbar N_A/2$  の固有状態 (時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{KR}}$  の固有状態ではない事に注意が必要である) であるが、その事に深い意味は無く、単にこの状態の波束を数値的に作りやすいという理由だけで選んでいる<sup>\*48</sup>。KR の 1 回ないし数回の写像によって、波束はすぐに乱雑になってしまうから、 $\hat{U}_{\text{KR}}$  の固有状態のような定常的なものを選ばない限り、どのような初期状態を選ぶかはあまり重要ではない。

KR に線形振動子を結合した、全系の初期状態  $|\Psi_0\rangle$  は

$$|\Psi_0\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |J = 0\rangle \quad (60)$$

のように設定する。 $|J = 0\rangle$  は  $\hat{J}$  演算子における固有値 0 の固有状態である。この初期状態選択の利点は 3.2.1 節で述べる。このような初期状態において、実際に系の時間発展を数値的に計算すると、線形振動子の  $J$  空間に量子拡散が生じる様子を確認できる。その拡散を定量的に解析するため、 $J$  空間に生じる拡散の平均二乗変位 (Mean Square Displacement, MSD) :

$$\Delta J_\tau^2 \equiv \langle (\hat{J}_\tau - \langle \hat{J}_\tau \rangle)^2 \rangle \quad (61)$$

の時間変化に着目する。ここで  $\tau$  は KR の撃力周期  $T$  を単位として離散化した時刻である。我々の初期状態の下では、時刻  $\tau = 0$  において  $\Delta J_\tau^2 = 0$  である。もしも KR の振る舞いが理想的に乱雑かつ不可逆的であれば、この  $\Delta J_\tau^2$  は時刻  $\tau$  に関して線形に増加する。その詳しい理論的な見積もりは 3.2.1 節において行うが、先に実際の典型的な挙動を確認しておきたい。数値計算によって MSD の時間発展を求め、横軸に時刻  $\tau$  をとってプロットした結果を図 19 に示した。なお、この図の計算に際して、線形振動子と結合する事による、KR の振る舞いの変化は、無視できるほど小さい事を確認してある<sup>\*49</sup>。よって図 19 に示した拡散は、線形振動子の存在とは関係なく、純粋に KR (具体的には量子 Arnold's Cat Map) 自身の乱雑な振る舞いを反映しているものである。

図 19 において黒い実線で示されているのは、古典系における計算結果であり、それも 1 自由度つまり  $\varepsilon = 0$  におけるものである。この黒い実線が傾き 1 の直線となっている事から、古典系においては、確かに MSD が時刻  $\tau$  に比例して増加している事が確認できる (この図は両対数軸である事に注意する必要がある)。計算の時間スケールをさらに伸ばしても、この古典系の結果は、このま

定してもよい。我々は系に印加する“余計な”摂動がなるべく小さく済むように、経験的に探って  $4.25\hbar^2$  に帰着したが、しかし  $N_{\text{tot}}$  の値が本論文で扱うより大きな場合には、 $\xi$  の値が小さくなり過ぎるかもしれない。よって  $\hbar$  に比例するように選んだ方が無難かもしれない。

<sup>\*48</sup> 中間順位  $N_A/2$  を選んでいる事にも深い理由はない。むしろこのように適当に選んだ  $|\psi_0\rangle$  が、 $\hat{U}_{\text{KR}}$  の全ての固有状態  $|m\rangle$  を、概ね乱雑な重み  $|\langle\psi_0|m\rangle|^2$  で含んでいる事が重要である。この点において  $|\psi_0\rangle$  は一般的な状態をある程度代表しているものと見なせる。

<sup>\*49</sup> KR と線形振動子の結合強度  $\eta$  の値を、ある程度よりも弱い領域まで絞れば、図 19 の各系列の概形が  $\eta$  に依存せず同じ形に収束し、グラフの縦軸がスケールされるだけとなる。それは即ち、線形振動子の存在が KR の相関を変質させていない事の保証となる。

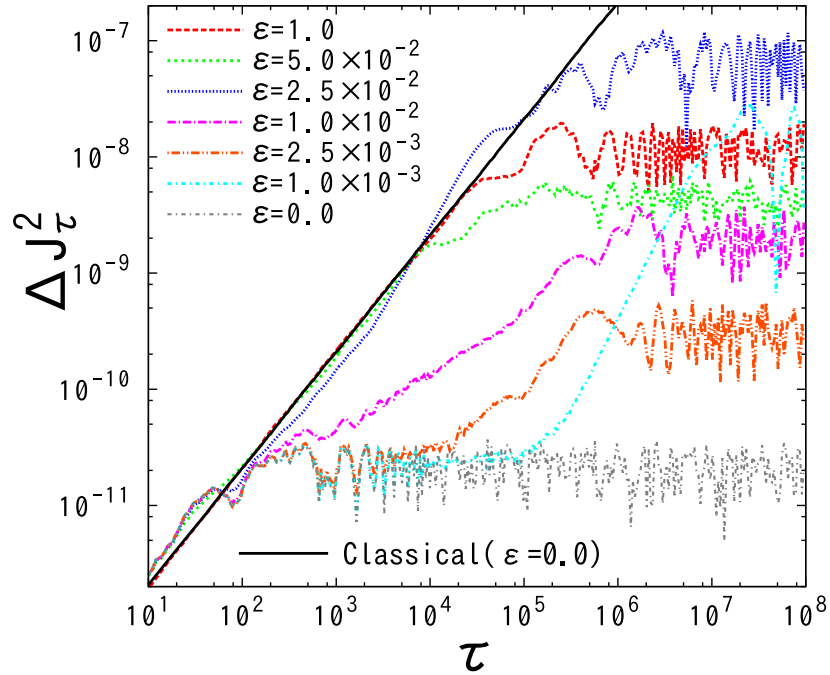


図 19 本章で扱う系において、線形振動子の  $J$  空間に生じる量子拡散の、平均二乗変位 (MSD)  $\Delta J_\tau^2 = \langle (\hat{J}_\tau - \langle \hat{J}_\tau \rangle)^2 \rangle$  の時間発展. KR の自由度には第 2 章に引き続き、2 自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系を用いている. この結果は  $\hbar = 2\pi/32$  ( $N_A = N_B = 32$ ) におけるものであり、その他のパラメータは表 2 の通りに選んでいる. 色の違いは  $\varepsilon$  の値を変えた結果を意味している. 一番上の黒色の直線は、古典系での  $\varepsilon = 0$  における結果である. これらの結果から、まず古典系においては KR が 1 自由度 ( $\varepsilon = 0$ ) であっても、MSD はいつまでも線形に増加し続け、理想的に不可逆な挙動が永続的に実現される事が分かる. それに対して量子系では、有限の時間スケールにおいて古典系の不可逆な挙動をよく模倣するものの、やがて振動的な飽和挙動に移行してしまう事が見て取れる. この量子-古典対応の乖離点が、本章において我々が解析指標とする“不可逆性の寿命”である. 寿命は  $\varepsilon$  の値によって劇的に変化している事が見て取れるが、一方で、MSD の時間発展は非常に揺動的であり、どこが寿命なのかがあまり明確でない事も分かる. よって、後の節での定量的な解析においては、アンサンブル平均などの統計処理が必須となる.

ま直線的に伸び続けるだけである. また、 $\varepsilon$  の値を変えても結果はほとんど変化しない事を確認してある. この結果から、古典的な Arnold's Cat Map 系においては、たとえ 1 自由度であっても、やはり理想的に不可逆な振る舞いが永続的に持続すると見なせる事が分かる.

続いて量子系における計算結果に注目する. 図 19 に様々な色で描かれている複数の系列が、量子系での計算結果であり、色の違いは  $\varepsilon$  の設定値が異なる結果を表している. これらの系列では全て  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32$  即ち  $\hbar = 2\pi/32$  におけるものである. まず  $\varepsilon = 0$  の系列 (灰色) を見ると、初期のごく短いタイムスケールにおいてのみ、MSD が古典値の近傍を追従しているが、しかしその後は古典挙動から完全に離れ、振動に転じてしまっている事が見て取れる. 振動というのは、即ち定期的に同じ値が再現される事を意味するから、それは一種の可逆的な振る舞いであって、不可逆性の対



極にあるものである。よって、このような常拡散挙動から振動挙動へと転ずる事について、“不可逆性が有限の時間しか持続しない”と言い表す事ができるであろう<sup>\*50</sup>。この“有限の不可逆性”が尽きる時間が、本論文を通して我々が注目する、不可逆性の寿命である。従って、この  $\varepsilon = 0$  の結果における不可逆性の寿命は、量子挙動が古典挙動からまさに乖離し始めている  $\tau \sim O(10^2)$  程度の時点であると判断できる。続いて  $\varepsilon = 1$  における系列 (赤色) を見ると、その挙動は  $\varepsilon = 0$  の場合よりも遥かに長時間に渡って古典挙動を追従し、その破綻時間、即ち不可逆性の寿命は、 $O(10^4) \sim O(10^5)$  程度のオーダーまで劇的に延びている事が見て取れる。 $\varepsilon$  の値をさらに強めても、不可逆性の寿命は、この  $\varepsilon = 1$  の場合とあまり変化しない。よってこれら  $\varepsilon = 0$  と  $\varepsilon = 1$  の結果は、それぞれ Arnold's Cat Map 系が 1 自由度の場合と 2 自由度の場合における代表的な振る舞いをよく表していると言える。

そして我々が本論文を通して注目するのは、それらのちょうど中間において、系の振る舞いが 1 自由度的なものから、2 自由度的なものへと変化しつつある領域である。実際にそのような中間領域における計算結果を、図 19 において青色、緑色、紫色、橙色、および水色で示してある。これらの結果を見ると、MSD の挙動は長期間に渡って非常に揺動的かつ複雑ではあるが、しかし  $\varepsilon$  の増加に伴って、古典挙動をより正確に模倣しようとしている様子が表れている。また、我々が注目している不可逆性の寿命も、あまり明瞭ではないものの、 $\varepsilon$  の増加に伴って延びようとしている傾向がある事が見て取れる。この結果は、まさに量子系に新たな自由度が 1 つ結合する事によって、量子不可逆性が誕生する瞬間を捉えていると言える。従ってこれは、我々の自然における不可逆性の根源を追及する上で、恐らく最も基本となる現象の一つである。より多自由度の場合において、どのような結果が得られるかは非常に興味深いが、しかし本論文においてはまず、この 2 自由度の場合における現象の解明に焦点を絞る。

以上に示した通り、本章で扱うモデルにおいては、線形振動子の  $J$  空間に生じる量子拡散によって、確かに KR が示す不可逆性の寿命を測る事ができる。しかしながら、その定量的な解析は容易ではない。図 19 からも示唆される通り、1 自由度と 2 自由度の中間領域における MSD の振る舞いは非常に揺動的であって、初期状態の選択やポテンシャルの摂動によって大きく変化する。よって不可逆性の寿命も、それらの条件設定に対して非常に揺らぐ。また、特定の固定した条件において、普遍的な法則性を見出す事も非常に困難であり、寿命の測定値と  $\varepsilon$  の値の大小関係が反転する事も頻繁に見られる。従って、この転移現象をより深く解析するにあたって、何らかのアンサンブルを構成し、統計的な性質を解析する事は必須である。とすると、図 19 のような図から目視で (人

<sup>\*50</sup> ただし言葉の定義の問題として、「不可逆性 (irreversibility) とは永続的に元に戻らない性質を指すのであるから、やがて可逆的 (reversible) な運動に転じるのであれば、それは不可逆性と呼ぶべきではない」という指摘もあり得る。実際にこの“不可逆性”という語については、投稿論文において幾度となく問題となった。しかしながら、この現実世界において、基礎方程式は基本的に可逆なのであるから、仮にこの宇宙の全ての自由度を対象に考えると、自然現象に対して“完全な不可逆性”という概念を当て嵌める事がむしろ不自然であると言う事もできる。一般の散逸的な自然現象も、我々の認識の限界を超える大自由度の寄与や、制御できない微視的状態の粗視化などによって、我々にとって不可逆的に見えるのであるから、その実態を“不完全な不可逆性”における、ある種の理想極限として考えるのは、決して奇妙な事ではないはずである。我々はまさに、量子系が示す“不完全な不可逆性”が、自由度の増加や  $\hbar \rightarrow 0$  の古典極限において“完全な不可逆性”へと漸近していくという観点で、この現象を見ている。

力で) 不可逆性の寿命を判定するには限度があるから, MSD の計算値から直接, 数値的に不可逆性の寿命を判定する方法を用意する必要がある. さらに, 結合 KR の自由度間のもつれ具合 (エンタングルメント) を定量化する指標も導入する必要がある.

よって次の 3.2 節ではまず, 具体的に現象を解析する前に, 土台として必要となる指標や近似式などの導入を行う. MSD の理論的な計算についてもそこで扱う. それらを踏まえた上で, その次の節から具体的な現象の解析を行う. 3.3 節においては, 本論文を通しての一貫した課題である, 自由度間相互作用に伴う不可逆性の転移現象を解析する. 既に図 19 から, 第 2 章での KQD モデルの結果によく類似した転移現象の存在が見て取れるが, 3.3 節ではこれを, 不可逆性の寿命とエンタングルメントのエントロピーという観点から統計的に解析し, 現象の背後にある機構を掘り下げて究明する. それに際して, 我々はここで扱ったような一般的な初期状態  $|\psi_0\rangle$  ではなく,  $\hat{U}_{KR}$  の固有状態に着目して解析を行う. それが非常に有用である事は, 次節における MSD の近似計算によって明らかになる. 続く 3.4 節では, 固有状態の重ね合わせ方によって, 不可逆性の寿命がどのように変化するのかを解析し, それと 3.3 節での結果を踏まえて, 不可逆性の寿命を見積もる理論の構築を行う. その結果から, 系が示し得る不可逆性の寿命の限界値を導出し, 従来この種の量子-古典対応の見積もりで用いられてきたハイゼンベルグ時間に対して, 比較と再解釈を行う.

## 3.2 解析に用いる近似計算および指標の導入

### 3.2.1 MSD の時間発展挙動に関する理論的な見積もり

前節の後半では、我々のモデルの線形振動子に生じる量子拡散の振る舞いについて、実際の数値実験における MSD の時間発展挙動を具体的に例示しながら説明してきた。ここでは、その MSD の時間発展挙動について、理論的な観点から見積もりを行っておく。この節において、 $\hat{\phi}(t)$  のように時間引数 ( $t$ ) を付けた演算子はハイゼンベルグ描像、付けないものはシュレーディンガー描像によるものとする。両者は時刻  $t = 0$  において一致するものとし、従って両者の関係は簡潔に  $\hat{\phi}(t) = \hat{U}^\dagger \hat{\phi} U$  と表せるものとする。

まず、ハイゼンベルグの運動方程式  $i\hbar d\hat{J}(t)/dt = [\hat{J}(t), \hat{H}(t)]$  および  $\hat{J}(t) = -i\hbar \partial/\partial \hat{\phi}(t)$  を用いて、 $\hat{J}(t)$  演算子の時間変化は:

$$\frac{d\hat{J}(t)}{dt} = \left[ -\frac{\partial}{\partial \hat{\phi}(t)}, \eta f(\hat{I}(t)) \cos \hat{\phi}(t) \right] \quad (62)$$

$$= \eta f(\hat{I}(t)) \sin \hat{\phi}(t) \quad (63)$$

のように導かれる。まったく同様に  $i\hbar d\hat{\phi}(t)/dt = [\hat{\phi}(t), \hat{H}(t)]$  および  $\hat{\phi}(t) = i\hbar \partial/\partial \hat{J}(t)$  を用いて、 $d\hat{\phi}(t)/dt = \omega$  即ち:

$$\hat{\phi}(t) = \hat{\phi} + \omega t \quad (64)$$

が得られる。ここで  $\hat{\phi}(t=0) = \hat{\phi}$  を用いた。続いて第2章と同様、 $\hat{I}(t)$  が KR の撃力の瞬間にしか変化しない事をうまく利用するため、運動を KR の撃力周期  $T$  ごとのタイミングで見積もる事にする。よって撃力直後の瞬間を指し示す、整数の離散化時刻  $\tau$  を導入し、演算子の時刻もそれによってラベル付けする:

$$t = \tau T + 0 \quad (\tau \in \mathbb{Z}) \quad (65)$$

$$\hat{J}_\tau \equiv \hat{J}(t) \quad (66)$$

$$\hat{f}_\tau \equiv \hat{f}(\hat{I}(t)) \quad (67)$$

このようにラベル付けした演算子は、KR の次の撃力までの間  $\tau T \leq t < (\tau+1)T$  においては変化しない。これにより、 $\hat{J}(t)$  演算子の撃力周期ごとの変化は、(62) 式と (64) 式から

$$\hat{J}_{\tau+1} - \hat{J}_\tau = \eta f_\tau \int_{\tau T}^{(\tau+1)T} \sin(\hat{\phi} + \omega t) dt \quad (68)$$

$$= \frac{2\eta \sin(\omega T/2)}{\omega} \hat{f}_\tau \sin\left(\hat{\phi} + \tau\omega T + \frac{\omega T}{2}\right) \quad (69)$$

のように導かれる。よって  $\hat{J}(t)$  演算子の長時間的な挙動は、 $\hat{J}_\tau = \hat{J}_0 + \sum_{k=0}^{\tau-1} (\hat{J}_{k+1} - \hat{J}_k)$  であるから (69) 式の累積的な和の振る舞いによって支配される。

これ以降において、系全体の初期状態  $|\Psi_0\rangle$  は、自由度ごとの直積状態となっており、そして線形振動子の自由度については、 $\hat{J}$  演算子の固有状態に設定されているものとする。この状態においては、線形振動子を  $J$  空間で見れば波束は  $\delta$  関数に収束しており、 $\hat{\phi}$  空間で見れば等確率で拡がり

きっている。このような初期状態の条件下で、まずは  $\hat{J}_\tau$  演算子の期待値<sup>\*51</sup>  $\langle \hat{J}_\tau \rangle \equiv \langle \Psi_0 | \hat{J}_\tau | \Psi_0 \rangle$  が時間変化しない事を示そう。ただし、線形振動子と KR の自由度は常にほとんど独立に扱えて<sup>\*52</sup>,  $\hat{I}$  と  $\hat{\phi}$  の自由度について独立に期待値をとってもよいと仮定する。すると

$$\langle \hat{J}_\tau \rangle = \langle \hat{J}_0 \rangle + \frac{2\eta \sin(\omega T/2)}{\omega} \sum_{k=0}^{\tau-1} \langle \hat{f}_k \rangle_{\hat{I}} \langle \sin(\hat{\phi} + k\omega T + \omega T/2) \rangle_{\hat{\phi}} \quad (70)$$

$$= \langle \hat{J}_0 \rangle \quad (\text{初期状態の}\phi\text{空間における一様性のため}) \quad (71)$$

が導かれる。ここで  $\langle \dots \rangle$  記号の右下の添え字は、どの自由度について期待値をとるのかを意味している (特に明示する必要が無い場合においては、今後この添え字は省略する)。 (70) 式の右辺第2項を落としたのは、いまの初期状態の設定において波束は  $\hat{\phi}$  空間の全域において等確率で広がっているから、 $\langle \sin(\hat{\phi} + k\omega T + \omega T/2) \rangle_{\hat{\phi}} = 0$  となるからである。よって  $\langle \hat{J}_\tau \rangle$  はまったく時間変化しないので、 $\langle \hat{J}_0 \rangle = \langle \hat{J} \rangle = 0$  となるような状態、具体的には  $\hat{J}$  演算子の固有値 0 の固有状態  $|J=0\rangle$  を、線形振動子自由度の初期状態に選べば簡単である。そして実際に、本章においてはそのように選ぶものとする。即ち、KR の任意の自由度の初期状態を  $|\psi_0\rangle$  として、系全体の初期状態  $|\Psi_0\rangle$  は：

$$|\Psi_0\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |J=0\rangle \quad (72)$$

のように設定する。実際に前節の図 19 に示した計算も、このように初期状態を設定したものである。

さて、本章において我々が注目するのは、(61) 式で導入した  $J$  空間の MSD 即ち  $\Delta J_\tau^2$  である。特に我々の初期条件においては、 $\langle \hat{J} \rangle = 0$  によって  $\Delta J_\tau^2 = \langle \hat{J}_\tau^2 \rangle$  となる。さらに先と同様の理由によって  $\langle \cos(2\hat{\phi} + (k+\ell)\omega T + \omega T) \rangle_{\hat{\phi}} = 0$  となる事を用いれば：

$$\Delta J_\tau^2 = \frac{2\eta^2 \sin^2(\omega T/2)}{\omega^2} \sum_{k=0}^{\tau-1} \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle \cos((k-\ell)\omega T) \quad (73)$$

$$= D \sum_{\tau'=0}^{\tau-1} A_{\tau'} \quad (74)$$

のように MSD の時間発展挙動を導ける。ここで  $D \equiv (2\eta^2/\omega^2) \sin^2(\omega T/2)$ ,  $A_{\tau'}$  は相関面積 (Correlation Area):

$$A_\tau \equiv \sum_{s=-\tau}^{\tau} \text{Cr}_\tau(s) \cos(s\omega T) \quad (75)$$

$$\text{Cr}_\tau(s) \equiv \frac{\langle \hat{f}_\tau \hat{f}_{\tau-s} \rangle + \langle \hat{f}_{\tau-s} \hat{f}_\tau \rangle}{2} \quad (s \geq 0) \quad (76)$$

<sup>\*51</sup>  $\langle \hat{J}_\tau \rangle$  は、時刻  $t = \tau T$  における シュレーディンガー 描像の  $\hat{J}$  演算子の期待値と一致する： $\langle \hat{J}_\tau \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{J}_\tau | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{U}^{-\tau} \hat{J} \hat{U}^\tau | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_\tau | \hat{J} | \Psi_\tau \rangle$

<sup>\*52</sup> 線形振動子と KR との間の相互作用強度  $\eta$  が十分に弱く、両自由度について状態がほとんどエンタングルしなければ、このように独立に扱う事が可能である。そして我々は実際にモデルをそのように弱い  $\eta$  において使うから、実情にも即している。

である. この  $A_\tau$  は (13) 式のようにも書ける<sup>\*53</sup>.  $\text{Cr}_\tau(s)$  は **KR** に関する二時刻の自己相関関数であり, 実数関数<sup>\*54</sup> であって  $\text{Cr}_\tau(-s) = \text{Cr}_\tau(s)$  とする. この  $\text{Cr}_\tau(s)$  は即ち, 離散化された時刻  $\tau$  における **KR** の状態が, そこから  $s$  だけ未来または過去の状態について,  $\hat{f}$  を通じてどれだけの相関を持っているかの指標を与えるものである.

ところで (73) 式は, 係数部を除けば第2章で扱った **KQD** のエネルギー輸送の理論値: (11) 式と等しいので, この先の見積もりは第2章で行ったものと同じ方向を辿る事になる. しかし第2章の見積もりでは, やや曖昧で定性的な議論のまま残してきた部分も多い. よって, ここでは第2章よりももう少し厳密な形で整理しながら議論を進める. まず古典系においては, 我々のモデルのように有限領域の狭いカオス領域に置かれた初期状態の集合は, 時間発展するとその領域内にすぐに乱雑に拡がりきってしまうから, (76) 式の  $s = 0$  での古典値は時刻  $\tau$  によらず<sup>\*55</sup>:

$$\text{Cr}_{(\text{cl})}(0) \simeq \int_{\kappa} (f(I))^2 dI \quad (77)$$

$$= \frac{1}{2} \quad (\text{我々のモデルの場合}) \quad (78)$$

のように見積もれる. ここで  $\kappa$  は **KR** の古典的な相空間  $(I, \theta)$  におけるカオス領域 (stochastic 領域) 全体である. いまの我々のモデルでは  $f(I) = \sin I_A$  であり, さらに  $I$  の区間が  $[0, 2\pi)$  で有限であって, 相空間全域において運動が理想的に stochastic であるから, 右辺の積分は単純に  $\int_0^{2\pi} \sin^2 I_A dI_A$  となり, 上式の値が導かれる. さらに古典系においては, いわゆる古典カオスの“記憶喪失”によって, 未来または過去の状態に対する相関はやがて失われる<sup>\*56</sup>. よって  $\text{Cr}_{(\text{cl})}(s)$  は  $s$  に関して, この  $\text{Cr}_{(\text{cl})}(0)$  から (一般に指数的な) テールを引きずりつつ落ちていき, ある程度以上の  $s$  に対しては  $\text{Cr}_{(\text{cl})}(s) \simeq 0$  と見なせる. その理想的な場合として, 二時刻相関がただちに落ちる  $\text{Cr}_{(\text{cl})}(s) = \text{Cr}_{(\text{cl})}(0) \delta_{s,0}$  の場合においては, 相関面積  $A_\tau$  の古典値を  $A_{(\text{cl})}$  として:

$$A_{(\text{cl})} \simeq \text{Cr}_{(\text{cl})}(0) \quad (= \text{一定}) \quad (79)$$

$$\Delta J_\tau^2 \Big|_{\text{古典系}} = D A_{(\text{cl})} \tau \quad (80)$$

$$= \frac{D}{2} \tau \quad (\text{我々のモデルの場合}) \quad (81)$$

のように見積もれる. このように古典系においては, **MSD** が時間について線形に増加する, 即ち  $J$  空間における常拡散が永続的に持続する事が導かれる. 実際に **Arnold's Cat Map** 系に対して数値的に計算した, 古典系の  $\Delta J_\tau^2$  の挙動は, (80)-(81) 式とほぼ完全に一致する<sup>\*57</sup>.

<sup>\*53</sup>  $k = \tau - s$  と置いた上で,  $\text{Cr}_\tau(s)$  が  $s$  の符号の正負について対称である条件を用いて, 和の範囲を選び直している.

<sup>\*54</sup> 古典系であれば  $\langle \hat{f}_\tau \hat{f}_{\tau-s} \rangle$  がそもそも実数で  $\langle \hat{f}_{\tau-s} \hat{f}_\tau \rangle$  と等しいから,  $\text{Cr}_\tau(s) \equiv \langle \hat{f}_\tau \hat{f}_{\tau-s} \rangle$  と定義するのが簡潔に思えるが, それでは量子系で複素数となる. (76) 式のように和から共役項同士を組み合わせで定義すれば, 量子系でも実数となる.

<sup>\*55</sup> 即ち, 初期状態の集合 (古典系の場合) や波束 (量子系の場合) が古典カオス領域に拡がりきった後は,  $\text{Cr}_\tau(0)$  は概ね一定値で推移すると見なしている. 従って, 狭く収束した初期状態集合 (または波束) から時間発展を開始した場合, それが古典カオス領域全体に拡がりきるまでの数ステップの間においては,  $\text{Cr}_\tau(0)$  の値はこの  $\text{Cr}_{(\text{cl})}(0)$  から少し外れている. その後すぐに  $\text{Cr}_{(\text{cl})}(0)$  に漸近する.

<sup>\*56</sup> この性質は, 乱数について期待されるものと同じであり, 自然の乱雑さを古典的に説明する根拠の一つである.

<sup>\*57</sup> 実際に図 19 にプロットすると, 古典系の計算結果と区別できないほど重なる (見分けるのが困難なのでプロットしていない).

これに対して、量子系での  $\Delta J_T^2$  の時間発展は、初期において (80)-(81) 式の古典挙動をよく模倣するものの、ある程度の時間スケール以降では、量子性によって拡散が抑圧されて振動に転じてしまう。この事は第2章において KQD のエネルギー輸送という形で見てきたし、前節の図 19 でも示した通りである。その原因と密接に関連している事として、量子系においては、二時刻相関  $Cr_T(s)$  が  $|s| \gg 1$  においても 0 には落ちない事が知られている。量子系の  $Cr_T(s)$  は  $s = 0$  において  $Cr_{(cl)}(0)$  の値 (この場合は  $1/2$ ) とよく一致するものの、しかし  $|s| \gg 1$  においても 0 には漸近せず、0 付近で乱雑に振動するテールを永続的に引きずる。従って量子系においてはいわゆる“記憶喪失” [24, 26, 43] は完全では無く、系の現在の状態は、非常に離れた未来または過去の状態に、無視できない相関を確実に残すのである。

ただし相関面積  $A_T$  においては、(75) 式の通り異なる  $s$  について  $Cr_T(s)$  の和を取るため、そのような乱雑に振動的なテールの寄与は互いに打消し合って 0 へと収束する。これにより  $s = 0$  の項の寄与のみが打ち消されずに残り、よって  $A_T$  はほぼ一定値で推移する事が見込めて、その値は古典値  $A_{(cl)}$  と概ね一致する。その結果として、量子系における (73) 式の挙動は、やはり古典系の常拡散挙動: (80) 式をよく模倣するのである。しかしそれが持続する時間は原理的に限られている。なぜならば、有限次元のヒルベルト空間における量子系の運動は、時間発展演算子  $\hat{U}_{KR}$  の有限個の固有状態によって支配されるから、一見すると乱雑であるかのように見える  $Cr_T(s)$  のテールも、実際には周期関数によって記述されるからである。この事は実際に次節で示す。よって疑似乱数の周期問題のように、このテールを乱数的なものとも見なしてもよい時間スケールには限りがある。その時間スケールを超えるような  $s$  の領域については、(75) 式の和において打消し合いはもはや期待できず、よって  $A_T$  の一定値での推移は破綻し、MSD: (74) 式が時間について線形に伸びる常拡散挙動も持続しなくなる。従って、このように固有状態の存在を前提として考えれば、我々の扱う量子系における拡散の MSD はやがて必ず古典挙動から乖離し、それによって不可逆性の寿命が生じる事が避けられないのである。この事をより具体的に掘り下げるため、次節では実際に固有状態の観点から MSD の理論値の解析を行う。

### 3.2.2 固有状態による MSD の理論値解析と“DIAGONAL 近似”

一般の連続時間の系において、定常状態に着目するのが有用であるように、本論文で我々が扱っている離散時間の KR 系においても、写像の時間発展演算子  $\hat{U}_{KR}$  の固有状態を考える事は非常に有用である。 $\hat{U}_{KR}$  の固有状態は、縮退が無ければヒルベルト空間の次元数と同数存在し、その  $m$  番目のものを  $|m\rangle$  と記述する事にする。ただし順序は特に問わない。 $|m\rangle$  に  $\hat{U}_{KR}$  を作用させると、何らかの複素数の固有値  $\zeta_m$  によって状態は  $\zeta_m|m\rangle$  へと変化するが、時間発展において確率和は保存するから  $|\zeta_m| = 1$  であり、よって  $\zeta_m = e^{-i\gamma_m}$  の形に書き表せる。即ち：

$$\hat{U}_{KR}|m\rangle = e^{-i\gamma_m}|m\rangle \quad (82)$$

である。ここで  $\gamma_m$  を一般に eigen angle と呼ぶ。このように固有値を指数関数の形で表す方が計算において都合が良いため、我々もこの形で解析を行う。これ以降、本論文において固有状態とい

うと、特に断らない限  $\hat{U}_{\text{KR}}$  の固有状態を指すものとする．ところで固有状態同士の直交性によって、その組  $\{|m\rangle \mid 1 \leq m \leq N_{\text{tot}}\}$  は我々の離散ヒルベルト空間において完全な基底を張る．従って、任意の状態  $|\psi\rangle$  は固有状態の組によって完全に展開する事ができる．そこで **KR** の初期状態  $|\psi_0\rangle$  を固有状態で展開すると特に有用である．即ち

$$|\psi_0\rangle = \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} C_m |m\rangle \quad (83)$$

であり、ここで  $C_m \equiv \langle m | \psi_0 \rangle$  とする．これを用いて **KR** の二時刻相関  $\text{Cr}_\tau(s)$  : (76) 式を展開すると

$$\text{Cr}_\tau(s) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} \sum_{u=1}^{N_{\text{tot}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} C_m^* C_u \langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle \langle n | \hat{f}(\hat{I}) | u \rangle e^{i(\gamma_m - \gamma_n)\tau} e^{i(\gamma_n - \gamma_u)(\tau - s)} + \text{複素共役項} \quad (84)$$

が得られる (付録 5.6.2). 従って前節でも示唆した通り、確かに量子系における  $\text{Cr}_\tau(s)$  は、有限個の周期関数の組み合わせによって表す事ができる．特に、初期状態  $|\psi_0\rangle$  を固有状態  $|m\rangle$  に選んだ場合においては、 $u = m$  の項のみが残って

$$\text{Cr}_\tau(s) \Big|_{|m\rangle} = \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2 \cos((\gamma_m - \gamma_n)s) \quad (85)$$

のように簡潔な形に表される．なお、この周辺の詳細な計算については付録 5.6 にまとめて掲載しているため、ここでは重要な式展開のみを選んで追う事にする．

さて、ここで仮に以下のような近似が成り立てば非常に都合が良い：

$$\text{Cr}_\tau(s) \Big|_{\text{任意の初期状態 } |\psi_0\rangle} \simeq \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \text{Cr}_\tau(s) \Big|_{|m\rangle} \quad (86)$$

我々はこの近似を“**Diagonal** (対角項) 近似”と呼ぶ．もしこのような近似が成り立てば、**MSD** 即ち  $\Delta J_\tau^2$  の時間発展においても、固有状態  $|m\rangle$  を初期状態とした場合の値  $\Delta J_\tau^2 \Big|_{|m\rangle}$  を用いて、以下のように近似的に展開する事が許される：

$$\Delta J_\tau^2 \Big|_{\text{任意の初期状態 } |\psi_0\rangle} \simeq \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \Delta J_\tau^2 \Big|_{|m\rangle} \quad (87)$$

この近似は決して自明ではないが、しかし数値的な検証を行うと、この近似が非常によく成り立つ事を確かめる事ができる<sup>\*58</sup>．実際にその様子を図 20(a) に示してある．図 20(a) での具体的な  $|\psi_0\rangle$  は (59) 式の通り選んでいるが、この状態は全ての固有状態を乱雑に含んでいると見なせるから、近似が一般に成立する事を検証するには適した初期状態であると言える．図 20(a) において様々な色で描かれている複数の系列は、(59) 式の初期状態  $|\psi_0\rangle$  において、実際の量子系における  $\Delta J_\tau^2$  の

<sup>\*58</sup> ただし、この近似が成り立つのは、恐らく系が古典的にカオスである場合に限られると思われる．しかし詳細な理由についてはまだ解析できていない．カオスによるコヒーレンスの喪失がこのような形で表面化しているのかもしれない．

時間発展を計算してプロットしたものである<sup>\*59</sup>。色の違いは  $\varepsilon$  の設定値が異なる結果を表している。これらの色付きの系列と重なるように黒色の点が打たれているが、それらが (87) 式に基づいて  $\Delta J_\tau^2 |_{|m\rangle}$  を重ね合わせた結果を示している。その重ね合わせる比率  $|C_m|^2$  の分布は、 $\varepsilon = 1$  の系列 (赤色) におけるものを図 20(b) に示してある。なお、ここでの  $\Delta J_\tau^2 |_{|m\rangle}$  および  $|C_m|^2$  については、実際に全ての固有状態  $|m\rangle$  を数値的に求めて測定した結果を用いている。

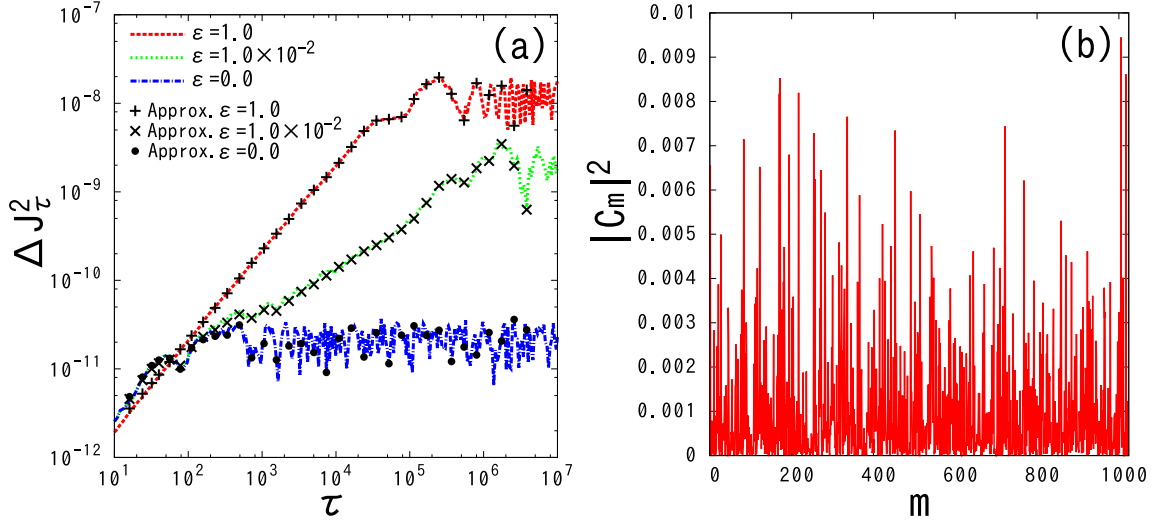


図 20 (a): 実際の MSD の時系列データを用いた Diagonal 近似の検証結果。各系列の背後に重なっている黒色の点が、Diagonal 近似によって計算した値をプロットしたものである。近似がよく成立している事が見て取れる。なお、(88) 式の値を直接計算してプロットしても、やはりほぼ重なる結果が得られる。(b):  $\varepsilon = 1$  の場合における  $|C_m|^2 = |\langle \psi_0 | m \rangle|^2$  の分布。初期状態  $|\psi_0\rangle$  は、全ての (時間発展演算子の) 固有状態  $|m\rangle$  を概ね含んでいる事が見て取れる。

図 20(a) に示した結果から、(87) 式の近似が、実際に高い精度で成り立っている事が分かる。この近似の精度は  $\hbar$  の値が小さくなるほど向上し、 $\varepsilon$  の値にはあまり依存しない。この近似は、少なくとも本章において扱う  $\hbar$  と  $\varepsilon$  の範囲、および注目する時間スケールにおいて、図 20(a) 同様によく成り立つ事を確認してある。図 20(a) に示したのは  $\hbar = 2\pi/32$  における結果である。以上に示した通り、この Diagonal 近似が成立する事によって、我々の系における MSD の挙動の解析は、固有状態を初期状態とする MSD の、単純な重ね合わせ問題に帰着できる。従って、系が示す不可逆性の寿命の解析においても、KR の固有状態に着目する事が本質的に重要となる。実際に 3.3 節および 3.4 節において、我々は固有状態の観点から解析を行う。

さて、(85) - (87) 式を用いて、近似された MSD の具体的な形は：

$$\Delta J_\tau^2 \simeq \frac{D}{2} \sum_{\tau'=0}^{\tau-1} \sum_{s=-\tau'}^{\tau'} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2 \cos((\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)s) \quad (88)$$

のように表される。ここで和は  $\pm\omega T$  の両方の符号についてとるものとする。このように固有状

<sup>\*59</sup> このデータは 3.1.3 節で示した図 19 と同じものである。



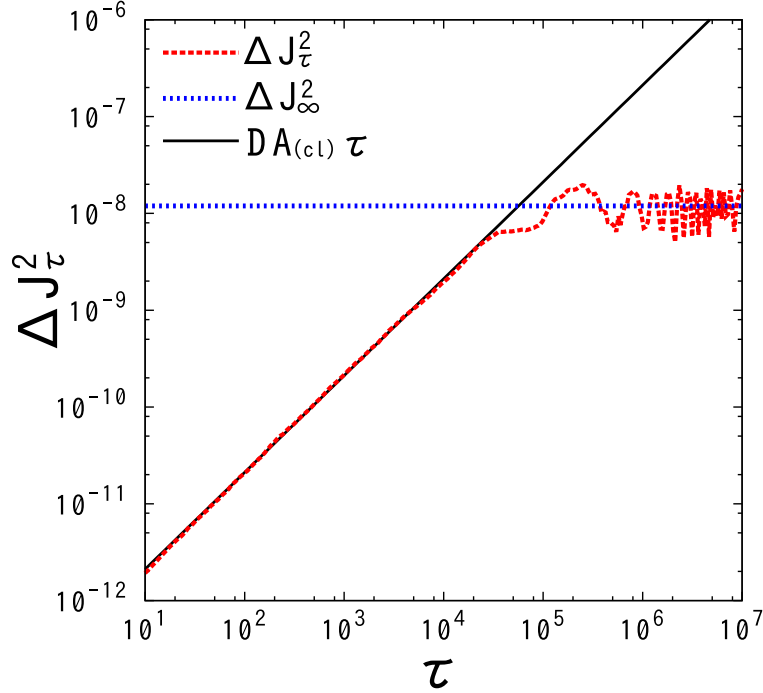


図 21 MSD の時間発展  $\Delta J_\tau^2$  と長時間平均値  $\Delta J_\infty^2$  の対応関係 ( $\hbar = 2\pi/32$ ,  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32$ ,  $\varepsilon = 1$ ). 赤色の破線は、実際の量子系における MSD の時間発展  $\Delta J_\tau^2$  を測定してプロットしたものであり、図 20(a) の  $\varepsilon = 1$  の系列と同じデータを用いている。青色の破線は、全固有状態を数値的に求めた上で、(90) 式の通りに  $\Delta J_\infty^2$  の値をそのまま計算し、その位置に線を引いたものである。黒色の実線は、(80) 式に示した理想的な古典極限における MSD の理論値  $DA_{(\text{cl})}\tau$  をプロットしたものである。この結果から、実際の量子系における MSD の時間発展  $\Delta J_\tau^2$  が、初期において古典理論値を追従しながら線形に増加しつつも、やがて  $\Delta J_\tau^2 \sim \Delta J_\infty^2$  の水準に達して以降は、振動的な飽和挙動に転じてしまう様子がよく見て取れる。

態で展開する事によって、無限の長時間までを含む MSD の振る舞いもまた、有限個の周期的な関数によって支配されている事が明らかとなる。この結果は、MSD の時間発展を非常に長い時間スケールで追い続ければ、いずれ必ず振動に転じてしまうという事を、これ以上なく明確に表している。この事は即ち、我々の系において、不可逆性の寿命が必ず存在するという事の証明にもなっている。実際に再び図 19 に注目すると、初期の線形増加が見られる時間領域や、その後の揺動的に振る舞う時間領域を過ぎた後、最終的にはどの系列の値もやがて飽和し、一定の水準を中心とする振動に転じようとしている傾向が確かに見て取れる。最終的に振動に転じた時点での MSD のおよその水準、即ち飽和値は、(88) 式の無限の時間までの長時間平均値として、以下のように見積もれる：

$$\Delta J_\infty^2 \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\Delta J_\tau^2}{\tau} \quad (89)$$

$$\simeq \frac{D}{4} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2 \times \left[ \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\delta_{mn}^+}{2}\right)} + \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\delta_{mn}^-}{2}\right)} \right] \quad (90)$$

詳細な計算は付録 5.6.3 に掲載している。ここで

$$\delta_{mn}^{\pm} \equiv \gamma_m - \gamma_n \pm \omega T \quad (91)$$

と置いた。実際に、系の全固有状態を数値的に求めた上で、(90) 式の通りに  $\Delta J_{\infty}^2$  の値を計算した結果を、図 21 に青色の破線で示した。同図には、実際の量子系における MSD の時間発展  $\Delta J_{\tau}^2$  も、比較検証のために赤色の破線でプロットしてある。パラメータ設定や初期状態は、図 20(a) における  $\varepsilon = 1$  の場合と全く同じである。この結果から、確かに (90) 式に示した  $\Delta J_{\infty}^2$  の値は、実際の MSD が振動挙動に転じて以降の、およそその飽和水準を与えている事が見て取れる。

ところで量子系における MSD の時間発展が、初期において、古典的な MSD の時間発展をよく模倣する事は既に見てきた通りである。古典的な MSD の時間発展は、(80) 式で見積もった通り、理想的極限における理論値  $\Delta J_{\tau}^2 = DA_{(cl)}\tau$  で近似できる。実際にその値を図 21 に黒色の実線で引いてあるが、量子系における MSD(赤色) の系列と、確かにある程度の時刻までよく一致している。これから、非常に大雑把な見積もりとして、MSD は長くとも  $\Delta J_{\infty}^2 / DA_{(cl)}$  程度の時間スケールで飽和値に達し、完全に振動に転じてしまうと推察する事ができる。よって、概ねそれまでのどこかの時点において、不可逆性の寿命が出現すると見積もれる。ただし、実際の MSD の振る舞いは図 19 にも示した通り、線形に増加する初期領域を終えた後、完全に振動的な飽和領域に至るまでの間に、長時間に渡って非常に揺動的に振る舞う過渡領域が存在する。この過渡領域の揺らぎによって、ここで概算したような、いわゆる“飽和時刻”の値は、我々の定義における不可逆性の寿命<sup>\*60</sup>の値と必ずしも一致せず、むしろ一般に大きく乖離する。しかしながら、アンサンブルを対象とする統計的な描像においては、ここで行ったような見積もりは極めて重要な意味を持つ。実際に暫く後の 3.4 節において、我々はこのような観点を再び用いる事によって、不可逆性の寿命の統計的な見積もりを与える理論を構築する。

### 3.2.3 不可逆性の寿命における定量的な定義、および数値的な測定方法

不可逆性の寿命について理論的な解析を行うためには、まずその土台として、ある程度の定性的な性質を、現象論的に把握しておかなければならない。そのためには図 19 で行ったように、様々な場合において系の振る舞いを数値的に再現し、実際に不可逆性の寿命を測定して、その背後に存在する法則性を掴む必要がある。しかしながら、これまでも述べた通り、我々の系の振る舞いは非常に揺動的であるから、安定した結果を得る事は容易ではない。よって、普遍的な法則性を表面化させて捉えるためには、要素数が十分に大きいアンサンブルを用意して、不可逆性の寿命の値を統計的に解析する事が必須となる。それに際して、図 19 で行ったように目視によって不可逆性の寿命を判断するのは、まず労力的に限界があるし、測定基準の曖昧さという点からも好ましくない。そこで本節においては、これまでの“量子挙動における古典挙動の追従が破綻する時間”という定性的な定義から離れて、不可逆性の寿命の定量的な定義を行う。それと平行しながら、数値的に不可逆性の寿命を測定する方法も構築する。つまるところ本節で議論するのは、図 19 のような図にお

<sup>\*60</sup> 線形に増加する (= 古典挙動を追従する) 初期領域の終端の時刻。

いて、各系列が古典挙動から乖離し始める点を、MSD の時系列データから一意に判定する方法についてである。

まず、図 19 のような両対数軸の空間に描かれた関数において、その局所的な傾きは、その近傍での変化の指数を与えている事に着目する。即ち、図 19 の適当な時刻  $\tau'$  に着目して、その点における傾きを  $\alpha(\tau')$  とすれば、 $\tau'$  の近傍において MSD は：

$$\Delta J_{\tau'}^2 \propto \tau'^{\alpha(\tau')} \quad (92)$$

のように変化していると見なせる。この  $\alpha(\tau')$  を、 $\tau'$  における局所的な拡散指数 (diffusion exponent) と呼ぶ。これまで見てきた通り、我々の系における古典挙動はほぼ理想的な常拡散であって  $\Delta J^2 \propto \tau$  であるから、拡散指数は時刻によらず常に  $\alpha = 1$  となる。とすると、量子挙動が古典挙動から乖離し始める領域においては、時刻  $\tau$  の増加に伴って、 $\alpha(\tau)$  の値が次第に 1 から離れていく挙動が見られるはずである。よって量子系における  $\alpha(\tau)$  の時間変化を解析するのは、古典挙動からの乖離を見る上で有用である。

ここで課題となるのは、具体的に MSD の時間変化が与えられたとき、そこからどのようにして拡散指数  $\alpha(\tau)$  の時間変化を求めるかという方法である。最も単純に思い浮かぶのは、図 19 のような両対数軸の空間において、毎時刻ごとの変化率  $[\log \Delta J_{\tau+1}^2 - \log \Delta J_{\tau}^2] / [\log(\tau+1) - \log \tau]$  の値を  $\alpha(\tau)$  と見なすという方法である。ところがこれは全く現実的ではない。図 19 では細かすぎて視認できないが、実際の  $\Delta J_{\tau}^2$  の時間変化は、長期的には安定して線形に増加しているように見えても、短期的には細かく揺らぎながら推移している。従って、我々が図 19 から見て取れるような“近傍の傾き”と、上の通り隣接時刻間で求めた“瞬間的な傾き”は、全く一致しない。実際にその具体例を例示するため、図 19 においてもっとも揺らぎが少ないように見える  $\varepsilon = 1$  の系列を選び、さらに十分に古典挙動を追従しているように見える領域を拡大した様子を図 22 に示した。なお同図においては、実際に対数軸空間での傾き、つまり  $\alpha(\tau)$  を求める事を想定して、横軸および縦軸の目盛りを  $\log \tau$  および  $\log \Delta J_{\tau}^2$  の値で表示してある。

図 22 において赤色で示した系列が、座標  $(\log \tau, \log \Delta J_{\tau}^2)$  を線で繋いでプロットしたものである。このグラフの形は、図 19 の  $\varepsilon = 1$  の系列において  $\tau \sim e^7$  即ち  $\tau \sim 10^3$  程度の領域を拡大したものと見なせる。図 19 ではこの領域の振る舞いはほぼ理想的に線形に見えていたが、しかしこのように拡大すると微細な揺動が存在し、瞬間的には傾きが負になる時すらある事が見て取れる。この結果から、先に述べたように隣接時刻間での傾きを数値的に求めても、それは図 19 における微細な揺動を反映する、乱雑でノイズのような結果を得るだけである事が分かる。一方で、図 22 の領域全体を俯瞰して見ると、揺らぎながらも直線的な形状であるように見える。そしてそれは、図中に黒い破線で示した傾き 1 の直線と概ね重なっている。従って我々は本来、この領域において  $\alpha(\tau) \simeq 1$  と判断したいものである。

そこで  $(\log \tau, \log \Delta J_{\tau}^2)$  の座標列を、ある程度の幅の区間  $[\tau' - \Delta\tau, \tau' + \Delta\tau]$  において最小二乗法で線形近似し、それによって求めた傾きを、その区間の中間点における値  $\alpha(\tau')$  であると見なそう。例えば図 22 のグラフの区間において、このような処理を行えば、同図の全体を近似する直線の傾きが求まるから、確かに  $\alpha(\tau') \simeq 1$  程度の値を得る事が見込まれる。とすると、新たな課題となる

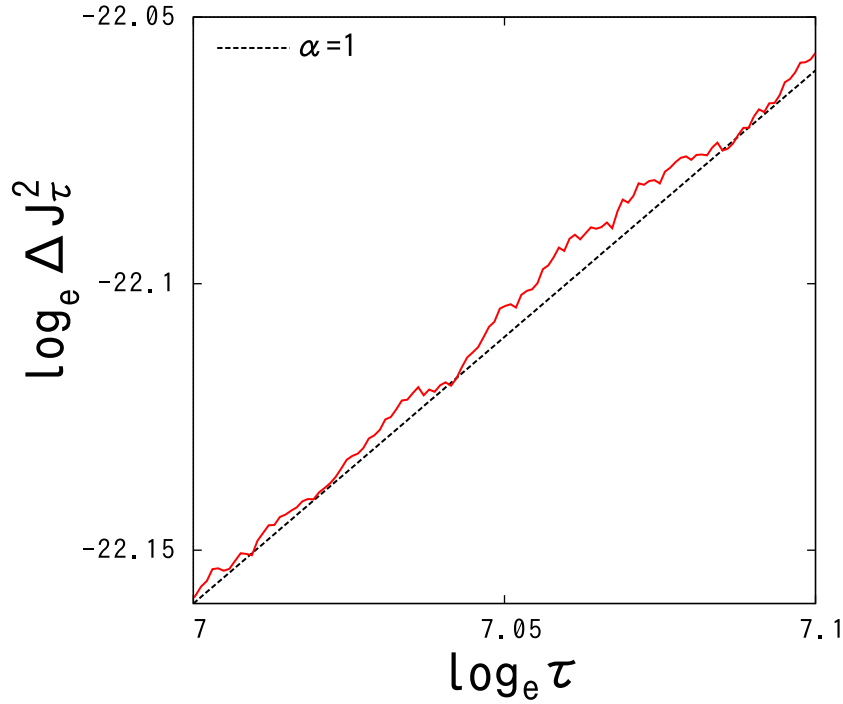


図 22 座標  $(\log \tau, \log \Delta J_\tau^2)$  を線で繋いでプロットした例 (赤色の系列). 図 19 の  $\varepsilon = 1$  の系列において  $\tau \sim e^7$  即ち  $\tau \sim 10^3$  程度の領域を拡大したものと見なせる.  $\log\text{-}\log$  空間における傾き  $\alpha$  は, 実-実空間における MSD の局所的な拡散指数 (diffusion exponent)  $\Delta J_\tau^2 \propto \tau^\alpha$  を表す. 黒色の破線は, 常拡散挙動の目安として  $\alpha = 1$  の直線をプロットしたものである. この図から, 中長期的には MSD が常拡散  $\Delta J_\tau^2 \propto \tau$  で推移しているように見えても, 短期的には微細な揺動がいくらかでも含まれている様子が見て取れる. これは我々が解析したい不可逆性の寿命によるものではなく, 偶発的な揺らぎである. よって, 我々の注目する時間スケールで意味のある拡散指数  $\alpha$  の値を得るためには, MSD をある程度の幅の時間区間において補間する必要がある.

のは, 線形近似する区間の半幅  $\Delta\tau$  をどのように決めればよいかという事である.  $\Delta\tau$  を短くとりすぎれば, 上で見たような短期的な揺動の影響を受けてしまい, 偶発的な寄与が支配的となって結果の安定性が損なわれるし, ノイズが増加して解析も困難になる. 逆に,  $\Delta\tau$  を長くとりすぎれば, それよりも短い時間スケールの変化は平均化されて見えなくなってしまうから, いわば時間の分解能が低下し, 不可逆性の寿命が短い領域を解析するのが困難となる. よって  $\Delta\tau$  の値は, 注目する振る舞いの時間スケールに合わせて適切に設定する必要があるが, しかし不可逆性の寿命は,  $\varepsilon$  の値に伴って数桁以上のオーダーで変化する事に注意しなければならない. 即ち, ある一定値に決めた  $\Delta\tau$  によって, 不可逆性の寿命を精度よく解析するのは殆ど不可能である. 従って我々は,  $\Delta\tau$  の値を  $\tau$  に比例して変化させ, 図 19 のように対数軸で見たときに  $\Delta\tau$  が一定幅になるようにする. このようにすれば, ちょうど図 19 から目視で判断した傾きに近い値を求められる. 本論文で用いる具体的な値は:

$$\Delta\tau = 0.4\tau \quad (93)$$

とする. このような  $\Delta\tau$  の条件下では, 図 19 において, ちょうど一桁程度の幅で線形近似して傾き

を求める事になる．よって解析結果の精度はオーダー程度になると言える．しかし後の節で行うように統計的な処理を施せば，1 オーダー以内の数値因子の変化も概ね捉えられるだけの分解能はある．なお，(93) 式のように  $\Delta\tau$  を変化させる場合， $\tau$  があまり大きくない短時間領域において，線形近似する座標 ( $\log \tau$ ,  $\log \Delta J_\tau^2$ ) の点数が少なくなりすぎないように注意が必要である．そこで我々は，少なくとも測定時刻  $\tau'$  の前後に 5 点ずつは座標点が含まれるよう， $\Delta\tau$  に下限を設けた<sup>\*61</sup>．以上のように設定した区間  $[\tau' - \Delta\tau, \tau' + \Delta\tau]$  において，実際に MSD のデータを両対数空間で線形補間し，数値的に求めた拡散指数  $\alpha(\tau)$  の時間変化を図 23 に示した．

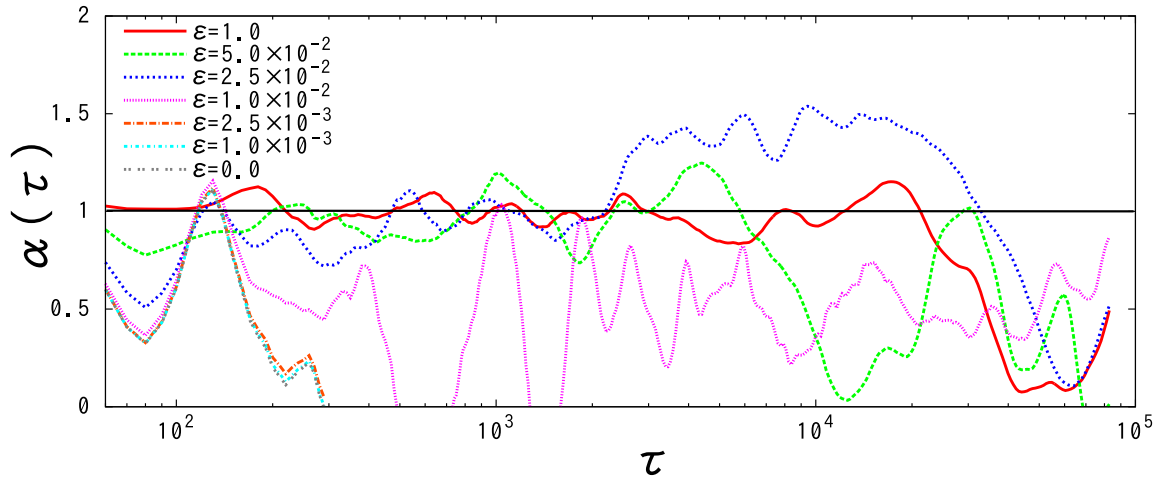


図 23 MSD の時系列データ (図 19) から求めた，拡散指数  $\alpha(\tau)$  の時間発展．MSD はそれぞれの時刻  $\tau$  の近傍において，近似的に  $\Delta J_\tau^2 \propto \tau^{\alpha(\tau)}$  の形で表される．中心に水平に引かれている黒色の直線は，常拡散に相当する  $\alpha(\tau) = 1$  の線をプロットしたものであり，理想的に不可逆な古典系においては， $\alpha(\tau)$  は常にこの線を追従する．それ以外の系列は量子系における結果であり，色の違いは  $\varepsilon$  の値を変えた結果を表している． $\varepsilon \sim O(10^2)$  程度の領域において， $\alpha(\tau)$  の値が 1 程度の近傍で推移し続ける時間スケールが，劇的に伸びている事が見て取れる．やがて  $\alpha(\tau)$  は 1 から大きく乖離しはじめるが，その時刻が不可逆性の寿命  $\tau_L$  である．

図 23 において，横軸が時刻  $\tau$ ，縦軸がその時刻の近傍における拡散指数  $\alpha(\tau)$  である．この結果を図 19 と見比べると，ここで求めた  $\alpha(\tau)$  の値は，確かに両対数空間における MSD の時間発展の，おおよその傾き (即ち拡散の指数) に一致している事が見て取れる．まず両図において  $\varepsilon = 1$  の結果 (赤色) に注目すると，図 19 の MSD はおおよそ  $\tau \sim O(10^4)$  から  $O(10^5)$  程度の時刻で古典挙動から乖離して，その後振動へ転じているが，図 23 の  $\alpha(\tau)$  も，ちょうどその程度の時間スケールまで 1 程度で推移した後，やがて 1 から大きく外れ始めている様子が見て取れる．その後  $\alpha(\tau)$  は 0 付近まで落ちた後，揺動的に上下を繰り返すようになるが，それは MSD が振動に転じた後におけ

<sup>\*61</sup> 逆に，線形補間で傾きを求めるのに際して，( $\log \tau$ ,  $\log \Delta J_\tau^2$ ) の点数は，必要以上に密である必要はない．重要なのは  $\Delta\tau$  の幅であって，その中に含まれている点の密度は，大体の傾きが分かる程度の点数が含まれていれば十分である．よって  $\Delta J_\tau^2$  の値は，必ずしも毎時刻測定する必要はなく，log-log プロットで概ね不可逆性の寿命を見て取れる程度があればよい．実際に本論文での不可逆性の寿命測定において，我々は  $10\tau$  ごとに測定した MSD のデータを用いた．

る傾きの上下動を反映するものである<sup>\*62</sup>。続いて  $\varepsilon = 2.5 \times 10^{-2}$  (青色) の結果に注目すると、MSD は  $\tau \sim O(10^3)$  程度の時刻で一旦古典挙動の傾きを上回った後、暫く後の  $\tau \sim O(10^4)$  から  $O(10^5)$  の領域で今度は下回っている (その後はやがて振動に転じる)。このとき  $\alpha(\tau)$  も、やはり同じ領域で一旦 1 から上側にそれた後、やがて下降して 1 を大きく下回っている。さらに  $\varepsilon = 1.0 \times 10^{-2}$  (紫色) の結果では、MSD が長時間に渡って半端な傾き ( $< 1$ ) で推移していたのと同様に対応して、 $\alpha(\tau)$  も 0.5 付近で揺動的に推移している様子が見て取れる。その他の  $\varepsilon$  の結果においても、 $\alpha(\tau)$  の値は図 19 における MSD の傾きをよく反映している。従って、我々は確かに (92) 式が表す拡散指数の時間変化を、概ね正確に捉えられていると判断できる。

さて、図 23 のように求まった拡散指数  $\alpha(\tau)$  から、不可逆性の寿命をどのように判定すればよいであろうか。結局のところ  $\alpha(\tau)$  も非常に揺動的であるから、多少強引にでも基準を定めて判定せざるを得ない。その基準には様々なものが考え得るであろうが、我々の基準では、 $\alpha(\tau)$  の値が 1 から一定以上乖離する最初の時刻をもって、不可逆性の寿命と見なすものとする。即ち：

$$|\alpha(\tau_L) - 1| > r \quad (94)$$

が最初に満たされる時刻  $\tau_L$  の値が、不可逆性の寿命の定量的な定義である。ここで  $r$  は判定の閾値であり、我々は本論文を通して

$$r = 0.5 \quad (95)$$

の値を使用する。 $r$  の値を小さく絞った方が、より厳密に MSD の常拡散の持続時間を捉える事ができるが、しかし MSD の偶発的な揺らぎによって解析誤差が増えるという問題も生じる。逆に  $r$  の値が大きすぎると、MSD における線形な常拡散が終焉した後、振動に転じるまでの間に存在する、揺動的な過渡領域の振る舞いに強く影響されてしまい、やはり解析誤差が増大する<sup>\*63</sup>。ここでの  $r = 0.5$  という値は、実際に様々な  $\hbar$  および  $\varepsilon$  の領域において解析を繰り返し、結果の安定性などから最終的に帰着した、経験則的な値である。その妥当性はたとえば 3.3.1 節における図 26 などから判断できる。実際にこの  $r$  と (94) 式に基づく、不可逆性の寿命  $\tau_L$  の測定結果を図 24 に示した。

図 24 には、KR の自由度間相互作用強度がある程度の閾値  $\varepsilon \sim \varepsilon^*$  を超えると、不可逆性の寿命が劇的に増加する様子が明確に表れている。この事は、第 2 章の図 14(b) で見てきた、KQD の調和振動子のエネルギー吸収に生じた転移現象ともよく対応している。同様の転移的な現象は、この種の結合 KR 系において様々な形で知られている。この結果は、そのような結合 KR 系における“

<sup>\*62</sup> 注意して見ると、他の  $\varepsilon$  の系列においても、一旦  $\alpha(\tau) \sim 1$  の付近から乖離した後、 $\alpha(\tau)$  の変動の幅が増大している事が見て取れる。図では省いているが、MSD の飽和領域は、 $\alpha(\tau)$  においては激しい上下動の変動領域として見える。 $\varepsilon = 0$  の系列において一旦 0 付近まで落ちた後の  $\alpha(\tau)$  は、剣山のように激しく振動している。

<sup>\*63</sup>  $r$  が大きい場合は特に、量子系に特有の共鳴的な現象などによって、 $\alpha(\tau)$  が 1 以上で長時間推移する (即ち MSD が古典挙動から上側にそれる) 場合が大きな解析誤差を生む。そのような共鳴的な挙動は特別なものではなく、これまでに扱った計算でも  $\varepsilon$  の値によっては出現するし、図 19 の  $\varepsilon = 2.5 \times 10^{-2}$  の系列にも、そのような共鳴の傾向が見て取れる。この系列のように  $\alpha(\tau)$  が若干 1 から上にそれる程度の場合も多いが、中には長時間に渡って  $\alpha(\tau) \sim 2$  付近で推移する、即ち MSD が ballistic に激増するような場合も存在する (最後はやがて振動に転ずる)。実際に  $\varepsilon = 1.0 \times 10^{-3}$  の系列の MSD を注意深く見ると、一旦振動に転じた後、突然共鳴し始めて ballistic に増大した後、再び振動に転じている様子が見て取れる。

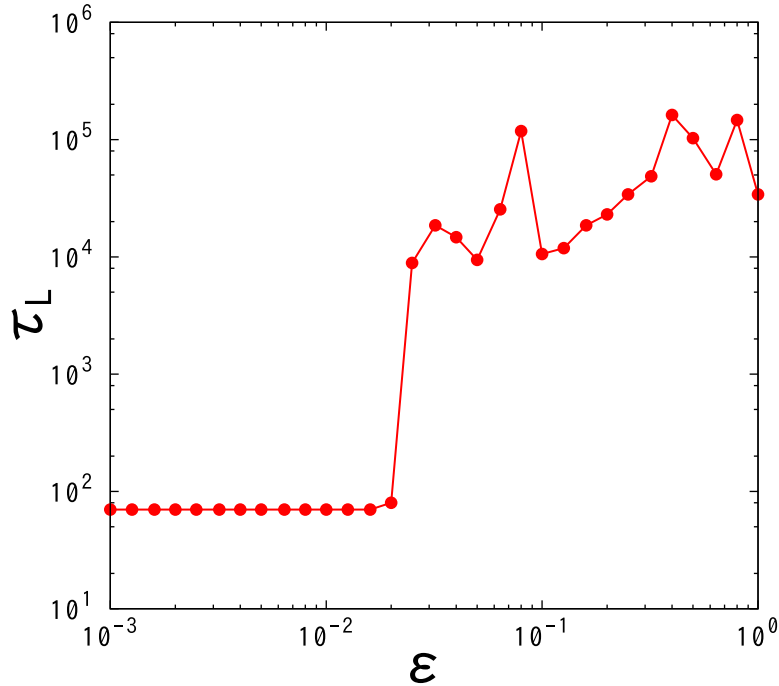


図 24 数値的に求めた不可逆性の寿命  $\tau_L$  の  $\epsilon$  依存性. 図 23 に示したような  $\alpha(\tau)$  の時系列データにおいて,  $\alpha(\tau)$  の値が 1 から一定以上乖離し,  $|\alpha(\tau_L) - 1| > r$  が満たされる最初の時刻を, 不可逆性の寿命  $\tau_L$  と見なして (定義して) 求めている. 閾値  $r$  は  $0 < r < 1$  の範囲から選ぶが, 本章においては  $r = 0.5$  の値を用いる. この図から, KR の自由度間相互作用強度がある程度の閾値  $\epsilon \sim \epsilon^*$  を超えると, 不可逆性の寿命が劇的に増加する様子が明確に見て取れる. この図では, それは  $\epsilon \sim O(10^{-2})$  程度のオーダーの領域で生じている.

不可逆転移”の現象を, 不可逆性の寿命という特徴的な時間スケールによって初めて捉えたものである. 我々はこの不可逆性の寿命を指標として用いて, この種の転移現象の機構を解明するための統計的な解析を 3.3 節で行う. ただしそのためには, これまで見てきたような量子拡散の挙動とは別に, この転移領域において, KR 自身の量子状態にどのような変化が生じているのかも併せて解析する必要がある. ところで, 自由度間相互作用によって生じる量子系の変化について議論する際の, 非常に重要な概念として, 量子的なもつれ合い (エンタングルメント) が挙げられる. 実際に結合量子系におけるエンタングルメントはよく解析されている [34–38]. そこで次節では, まず準備として, 我々の結合 KR における自由度間のエンタングルメントについて考察し, それを測るための指標として フォン・ノイマン エントロピーを導入する.

### 3.2.4 自由度間エンタングルメントと フォン・ノイマン エントロピー

これまでに見てきた通り結合 KR 系の自由度間の相互作用強度  $\epsilon$  がある程度の値を超えると, 系が示す不可逆性が転移的に変化する. 特に我々が用いているモデルの場合, 結合 KR に接続した線形振動子を通して現象を観測しているものの, その事は結合 KR 自身の振る舞いを変化させないよ



う、いわば非破壊的に観測している事が重要である。従って、この不可逆転移の現象は、線形振動子やその他の拡散自由度の接続の有無に関わらず、結合 **KR** 自身に生じている何らかの劇的な変化に起因しているはずである。ここでいまの我々のモデルにおいては、線形振動子を結合 **KR** の片方の自由度 **A** のみに接続していた事を思い出したい。実際、前節まで我々が量子拡散を観測してきた線形振動子の  $J$  空間において、そのハイゼンベルグ描像での時間発展を与える (69) 式に着目してみると、我々は  $\hat{f}(\hat{I}) = \sin(\hat{I}_A)$  に設定しているから、自由度 **B** への依存性は陽な形では含まれていない。よって線形振動子の視点に立って考えれば、“結合 **KR** 系の片方のみに注目したときの振る舞いが、その背後にあるもう片方の自由度との相互作用によって、どのように変化するか” という視点が非常に重要であると言える。本節ではこのような観点から、議論を一般化し、2 自由度の量子状態において片方のみの自由度に注目した際における、もう片方の自由度の寄与について考察する。本論文の中における本節の最終的な目的は、自由度間のもつれ合い (エンタングルメント) を定量的に測る指標として、よく用いられるフォン・ノイマン エントロピーを導入し、実際に我々の系に適用する事である。フォン・ノイマン エントロピーは後の 3.3 節において、不可逆転移現象の機構を解析する上で非常に重要な役割を担うものである。

さて、古典系では、2 自由度の結合系における片方の自由度 **A** の振る舞いが、もう片方の自由度 **B** に影響を与える事は、直観的にも素直に理解できる。いまの我々の結合 **KR** では、自由度 **A** の相空間  $(\theta_A, I_A)$  における古典粒子の運動は、自由度 **B** の相空間  $(\theta_B, I_B)$  における古典粒子の運動から相互作用を受ける事によって変化するため、ある時刻の自由度 **A** の相空間座標には、それまでの過去における自由度 **B** の運動の累積的な寄与が、陰な形で含まれていると言える。ところが量子系においては、たとえば結合 **KR** 系の  $I$  表示の状態を表す波動関数  $\psi(I_A, I_B)$  は、自由度 **A**, **B** の両方の軸で張られる空間上の存在であるから、これを古典系と同じように、自由度 **A** の成分  $\psi^{(A)}(I_A)$  と自由度 **B** の成分  $\psi^{(B)}(I_B)$  に分けて考える事は、一般にはできない。そのような事が可能なのは、結合 **KR** 系全体の状態ベクトルが自由度ごとの直積で表せる  $|\psi\rangle \simeq |\psi^{(A)}\rangle \otimes |\psi^{(B)}\rangle$  の場合のみに限られるし、そして後に示す通り、このような関係はまさに我々が注目している不可逆転移現象の領域において完全に破れてしまう。従って、その現象の原因となっている結合 **KR** 系の変化を解析する上で、たとえ類推であっても、古典的な相互作用の描像を適用する事は全く不可能である。実際、我々が注目している転移現象は、古典系では  $\varepsilon = 0$  でも  $\varepsilon = 1$  でも拡散挙動に変化は見られず、 $\varepsilon$  の閾値のスケールから判断しても純粋に量子的な現象である。

それでは、結合 **KR** 系の自由度 **A, B** 間における相互作用は、量的には、どのような仕組みで線形振動子の  $J$  空間に影響を及ぼしていたのであろうか? ここで線形振動子と **KR** との間の相互作用強度  $\eta$  は十分に弱いから、系全体の状態  $|\Psi\rangle$  は、線形振動子の状態と **KR** の状態との直積状態で概ね近似できる事に着目する。即ち、我々は結合 **KR** 系の自由度 **A** と **B** を分けて考える事は許されないが、しかし **KR** と線形振動子とを分けて考える事は可能である。そこで線形振動子の視点から **KR** の振る舞いを見る事を考えよう。(69) 式において、**KR** の自由度についてのみ期待値  $\langle \dots \rangle_{\hat{I}}$  をとると、 $\hat{J}_\tau$  が毎時刻 **KR** から受ける大体の寄与は、係数部を除いて  $\langle \hat{f}_\tau \rangle_{\hat{I}} \sin(\hat{\phi} + \tau\omega T + \omega T/2)$  と見積もれる。ただし、ここから線形振動子についても期待値  $\langle \dots \rangle_{\hat{\phi}}$  をとってしまうと、この寄与は 0 に落ちてしまうが、それは我々がそのように都合のよいモデル設計と初期状態設定を行ったからであっ



て、一般的な事ではないからいまは気にしない<sup>\*64</sup>。いまの我々の目的は、このように結合 KR 系の片方のみに接続された自由度から見て、結合 KR 同士の相互作用の影響が、どのような形で表面化して見えるのかを、単純化した形で見積もる事である。よってここからは議論の対象を、 $\langle \hat{f}_\tau \rangle_{\hat{f}}$  にどのような形で  $\varepsilon$  依存性が生じるのかという点に絞る。さらに議論を一般化するため、 $\hat{f}_\tau$  も自由度 A のみに依存する任意の演算子  $\hat{A}$  に置き換える。期待値記号の右下の添え字  $\langle \dots \rangle_{\hat{f}}$  も省略する。

まず最も単純かつ自明な場合として、結合 KR 系の状態が、自由度ごとの直積状態  $|\psi\rangle = |\psi^{(A)}\rangle \otimes |\psi^{(B)}\rangle$  に分離できる場合の結果を示す。この場合、自由度 A のみに依存する演算子を  $|\psi\rangle$  に作用させても、状態の自由度 B 成分  $|\psi^{(B)}\rangle$  は変化しないから、期待値  $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  において  $|\psi^{(B)}\rangle$  成分は  $\hat{A}$  を挟まずにすり抜けられて

$$\langle \hat{A} \rangle \Big|_{|\psi\rangle=|\psi^{(A)}\rangle \otimes |\psi^{(B)}\rangle} = \langle \psi^{(B)} | \psi^{(B)} \rangle \langle \psi^{(A)} | \hat{A} | \psi^{(A)} \rangle \quad (96)$$

$$= \langle \psi^{(A)} | \hat{A} | \psi^{(A)} \rangle \quad (97)$$

となる。よってこの場合、 $\langle \hat{A} \rangle$  の値は自由度 B の状態には全く影響されない。続いて、 $|\psi\rangle$  がこのような直積状態では表せない場合について考える。一般にこのような状態の事を、自由度 A, B について量子的にもつれ合った (エンタングルした) 状態であると呼ぶ。まず準備として、自由度 A, B それぞれについて任意の完全な正規直交基底  $\{|x_a^{(A)}\rangle \mid a \in \mathbf{Z}\}$  および  $\{|x_b^{(B)}\rangle \mid b \in \mathbf{Z}\}$  を用意し、その要素の直積：

$$|x_{a,b}\rangle \equiv |x_a^{(A)}\rangle \otimes |x_b^{(B)}\rangle \quad (98)$$

によって 2 自由度の完全な正規直交基底  $\{|x_{a,b}\rangle \mid a, b \in \mathbf{Z}\}$  を張る。そして、それによって結合 KR 系の状態を

$$|\psi\rangle = \sum_{a,b} C_{a,b} |x_{a,b}\rangle \quad (99)$$

のように展開する。このとき、2 自由度の密度行列  $\rho_{a,a',b,b'} \equiv C_{a,b} C_{a',b'}^*$  (これは系全体の密度演算子  $\hat{\rho} \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$  を行列表示したものである) を用いて、 $\hat{A}$  の期待値は

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{a,a'=1}^{N_A} \sum_{b,b'=1}^{N_B} \rho_{a,a',b,b'} \langle x_{a',b'} | \hat{A} | x_{a,b} \rangle \quad (100)$$

$$= \sum_{a,a'=1}^{N_A} \rho_{a,a'}^{(A)} \langle x_{a'}^{(A)} | \hat{A} | x_a^{(A)} \rangle \quad (\text{基底の直交性 } \langle x_{b'}^{(B)} | x_b^{(B)} \rangle = \delta_{b',b} \text{ による}) \quad (101)$$

のように表せる。ここで  $\rho_{a,a'}^{(A)}$  は、 $\rho_{a,a',b,b'}$  から自由度 B の方向  $b, b'$  についてのみ部分トレースをとって 1 自由度に落とした (すなわち自由度 B をトレースアウトした)、A 部分系の部分密度行

<sup>\*64</sup> 即ち、我々は拡散の 1 次のモーメント  $\langle \hat{f}_\tau \rangle$  が無視できたほうが計算が単純になるため、そのように工夫したのであって、そうしなければ一般に  $\langle \hat{f}_\tau \rangle$  にも何らかの形で KR 由来の  $\langle \hat{f}_\tau \rangle_{\hat{f}}$  が影響するはずである。我々の系でも 2 次のモーメント  $\langle \hat{f}_\tau^2 \rangle$  の変化量は 0 に落ちないが、それを土台として本節の議論を進めるには、二時刻相関  $\langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle$  における累積的なエンタングルメントの寄与を考える必要があるため、非常に複雑になってしまう。本節の主目的は、あくまで自由度間のエンタングルメントが、片方の自由度のみに依存する物理量に与える影響について考察する事であるから、単純化するためにこのように  $\langle \hat{f}_\tau \rangle_{\hat{f}}$  に焦点を絞った。

列 [39]

$$\rho_{a,a'}^{(A)} \equiv \sum_{b=b'} \rho_{a,a',b,b'} \quad (102)$$

である。トレースのユニタリ不変性により、この操作は本質的に基底によらないから、(102) 式はより一般化した  $\hat{\rho}^{(A)} \equiv \text{Tr}_{(B)} \hat{\rho}$  の形で書き表す事もできる。

ところで  $\rho_{a,a'}^{(A)}$  は半正定値のエルミート行列であり、縮約密度演算子  $\hat{\rho}^{(A)} \equiv \rho_{a,a'}^{(A)} |x_a^{(A)}\rangle \langle x_{a'}^{(A)}|$  を基底  $\{|x_k^{(A)}\rangle\}$  において行列表示したものに对应している。そしてエルミート行列は適当なユニタリ行列によって対角化可能であり、量子系における基底の変換はユニタリである。よって、いまは任意の基底  $\{|x_k^{(A)}\rangle\}$  で  $\hat{\rho}^{(A)}$  を見ているが、特にその対角基底  $\{|\lambda_k^{(A)}\rangle\}$  で見れば  $\hat{\rho}^{(A)} = \sum_{a=1}^{N_A} \lambda_a^{(A)} |\lambda_a^{(A)}\rangle \langle \lambda_a^{(A)}|$  のように対角形で表せる。半正定値エルミート行列の固有値が満たす性質として  $\lambda_a^{(A)}$  は実数かつ  $\lambda_a^{(A)} \geq 0$  である。また規格化によって  $\sum_{a=1}^{N_A} \lambda_a^{(A)} = 1$  が保証される。このとき  $\hat{A}$  演算子の期待値は：

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{a=1}^{N_A} \lambda_a^{(A)} \langle \hat{A} \rangle_a \quad (103)$$

のように表せる。ここで  $\langle \hat{A} \rangle_a \equiv \langle \lambda_a^{(A)} | \hat{A} | \lambda_a^{(A)} \rangle$  と置いた。(103) 式もトレースのユニタリ不変性により、より一般的な  $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho}^{(A)} \hat{A}$  の形で書き表せる。

さて、自由度 A,B について全くエンタングルしていない状態  $|\psi\rangle = |\psi^{(A)}\rangle \otimes |\psi^{(B)}\rangle$  においては、 $\hat{\rho}^{(A)} = |\psi^{(A)}\rangle \langle \psi^{(A)}|$  となるから、 $\hat{\rho}^{(A)}$  演算子は唯一つの固有状態  $|\lambda_1^{(A)}\rangle = |\psi^{(A)}\rangle$  と固有値  $\lambda_1^{(A)} = 1$  を持つ (つまり A 部分系は純粋状態である)。よって (103) 式は単純に  $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi^{(A)} | \hat{A} | \psi^{(A)} \rangle$  となり、自由度 B の存在をまったく無視できる。これは最初に直接的な計算で示したのと同じ結果である。しかし自由度 A,B についてエンタングルした状態においては、 $\hat{\rho}^{(A)}$  演算子は複数の 0 でない固有値  $\lambda_a^{(A)}$  を持つ。この  $\lambda_a^{(A)}$  は物理的な解釈として、A 部分系の状態を基底  $\{|\lambda_a^{(A)}\rangle \mid a \in \mathbf{Z}\}$  において観測したとき、系がいずれかの  $|\lambda_a^{(A)}\rangle$  状態に収束する確率を与える。そして (103) 式の  $\langle \hat{A} \rangle$  の値は、それぞれの状態における値  $\langle \hat{A} \rangle_a$  を、 $\lambda_a^{(A)}$  の確率分布で統計した形になっている。つまり A 部分系の状態は、独立な  $|\lambda_a^{(A)}\rangle$  状態が複数重ね合わされた混合状態となっていると解釈できる。この A 部分系の混合は、これまでの議論の通り、自由度 A,B 間のエンタングルメントによって生じたものであるから、 $\lambda_a^{(A)}$  の分布に自由度 B の寄与が含まれている。このような形によって、自由度 A のみに依存する演算子の期待値に、自由度 B が存在する事の影響が生じるのである。

そこで、 $\lambda_a^{(A)}$  の分布に対するエントロピー、いわゆるフォン・ノイマンエントロピー [33]：

$$S_{\hat{\rho}^{(A)}} = - \sum_a \lambda_a^{(A)} \log \lambda_a^{(A)} \quad (\text{和は } \lambda_a^{(A)} \neq 0 \text{ の項についてとる}) \quad (104)$$

$$= -\text{Tr} \hat{\rho}^{(A)} \log \hat{\rho}^{(A)} \quad (105)$$

を導入しよう。この量は  $\lambda_a^{(A)}$  の値の散らばり具合を反映するから、A 部分系の演算子すなわち物理量に対して、自由度 B の寄与がどの程度含まれるのかを、定量的に見積もる指標として有用である。これはつまるところ、自由度 A,B 間のエンタングルメントの度合いを測る指標として扱えるとも言える。よって後の章では、 $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の事を特にエンタングルメントエントロピー (EE) とも呼

ぶ、一般に  $1 \geq \lambda_a^{(A)} \geq 0$  であるから  $S_{\hat{\rho}^{(A)}} \geq 0$  である。最小値  $S_{\hat{\rho}^{(A)}} = 0$  は、固有値が唯一つ  $\lambda_1^{(A)} = 1$  のときに実現される。すでに述べた通り、これは系全体の状態が自由度ごとの直積状態で表せるときであり、そのとき A 部分系に自由度 B の存在は寄与しない。よって  $S_{\hat{\rho}^{(A)}} = 0$  は自由度 A, B がまったくエンタングルしていない事を意味する。逆に、すべての  $a$  について固有値が  $\lambda_a^{(A)} = 1/N_A$  と等分配されているとき、 $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  は最大値  $\log N_A$  をとる。このとき A 部分系は最大限に混合された状態となっているから、自由度 B の寄与も最大になっていると言える。よって  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  が最大値をとっているときは、自由度 A, B が最大限にエンタングルしていると見なせる<sup>\*65</sup>。

以上の議論を俯瞰すると、自由度 A のみに依存する演算子の期待値  $\langle \hat{A} \rangle$  において、自由度 B の寄与は、状態が 2 自由度的にエンタングルする事によって表面化し、その度合いはフォン・ノイマンエントロピー  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  によって見積もれると言える。この事を踏まえた上で本節冒頭の議論に戻ると、結合 KR 系の片方のみに接続された  $J$  空間に生じる量子拡散の挙動においては、自由度 A, B 間のエンタングルメントを通じて、自由度 B の寄与が反映されるものであると判断できる。とすると、拡散に転移的な変化が見られたのと同程度の  $\varepsilon$  の領域において、結合 KR 系のエンタングルメントにも何らかの劇的な変化が生じている事が示唆される。そして、この事は数値的にも容易に確認できる。実際に 2 自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系において、(59) 式の通りに自由度 A, B が全くエンタングルしていない初期状態を設定し、いくつかの  $\varepsilon$  の条件下で状態を時間発展させ、 $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の値の時間変化を測定した結果を図 25(a) に示した。

図 25(a) において、横軸が時刻  $\tau$ 、縦軸がその時刻における  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の測定値である。色が異なる複数の系列は、それぞれ  $\varepsilon$  の設定値が異なる結果である。どの  $\varepsilon$  の系列においても、初期状態: (59) 式はエンタングルしていないため  $\tau = 0$  において  $S_{\hat{\rho}^{(A)}} = 0$  であるが、しかし時間発展に伴って、自由度間相互作用により状態がエンタングルしていく様子がよく表れている。また、系列ごとの違いに注目すると、やはり  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  が増加するペースが、ちょうど  $J$  空間の拡散に転移的な挙動が見られたのと同程度の  $\varepsilon$  の領域において、劇的に変化している様子が見て取れる。続いて、図 25(a) における  $\tau = 100$  の時点における  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の値を、 $\varepsilon$  を横軸にとってプロットしたものを図 25(b) に示した。同図には、定時刻における  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の値が  $\varepsilon$  に対して閾値的に立ち上がる様子が表れている<sup>\*66</sup>。この結果から、やはり KR の自由度間のエンタングルメントにおいても、 $J$  空間の拡散と同様、転移的な現象が発生している事が見て取れる。

<sup>\*65</sup> 補足的な事項として、フォン・ノイマンエントロピーは、あらゆる基底において自由度 A 部分系を観測した場合における観測値の確率論的エントロピーの、数学的な下限を抑えているという性質がある。具体的には、部分密度行列  $\rho_{a,a'}^{(A)}$  の対角項を  $d_a^{(A)}$  とすると、その値は  $\hat{\rho}^{(A)}$  の行列表示基底における状態の観測確率を与えるから、確率論的エントロピーとして  $S'_{\hat{\rho}^{(A)}} = -\sum_a d_a^{(A)} \log d_a^{(A)}$  を定義する事ができる。この量はいわば、系を任意基底で観測した際における乱雑さの度合いを表すと見る事ができるが、その値は基底によって異なる。その基底に  $\hat{\rho}^{(A)}$  の対角基底  $\{|\lambda_a^{(A)}\rangle \mid 1 \leq a \leq N_A\}$  を選べば、 $S'_{\hat{\rho}^{(A)}}$  はまさにフォン・ノイマンエントロピーとなり、このとき  $S'_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の値はあらゆる基底選択の中で最小となっている事が証明できる。この事を逆に捉えれば、フォン・ノイマンエントロピーが最大限に飽和していれば、状態をどのような基底で観測しても最大限に乱雑化していると言える。この証明は付録 5.7 に掲載している。

<sup>\*66</sup> ただし、非常に長時間が経過した時点での  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の値で同図を作成すると、閾値曲線の下側の値も、 $\varepsilon$  の大きい側から順に(根元付近から順に)徐々に上昇してくる。しかしその値は、閾値曲線の上側の水準まで達する事はなく、中途半端な値で飽和する結果が得られている。

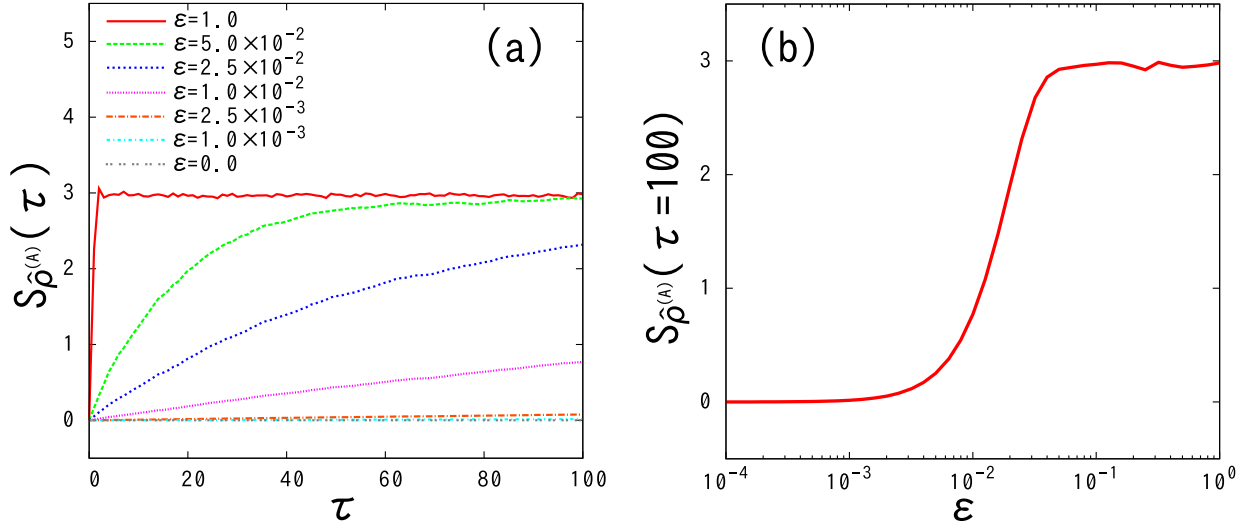


図 25 (a): 2 自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系において, 自由度 A,B が全くエンタングルしていない初期状態を設定した場合における, A 部分系のフォン・ノイマン エントロピー (エンタングルメントエントロピー)  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の時間発展.  $\hbar = 2\pi/32$  ( $N_A = N_B = 32$ ) の結果である. 色の違う複数の系列は,  $\epsilon$  の値を変えた結果を表している. 時刻  $\tau = 0$  においては  $S_{\hat{\rho}^{(A)}} = 0$  であるが, そこから時間発展するにつれて自由度 A,B がエンタングルし,  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の値が増加している様子が表れている.  $\epsilon$  の値が大きいほど,  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の増加も激しい事が見て取れる. (b): 時刻  $\tau = 100$  の時点におけるフォン・ノイマン エントロピーの値を,  $\epsilon$  を横軸にとってプロットした結果.  $\epsilon \sim O(10^{-2})$  程度の領域において劇的な変化が生じている事が見て取れる. これは, 図 24 において不可逆性の寿命  $\tau_L$  に劇的な変化が見られた領域と, ちょうど同じオーダーである.

この結果を踏まえた上で, 我々のこれまでの考察の流れを俯瞰すると,  $J$  空間の拡散における不可逆転移現象は, 根本的には上述のエンタングルメントの転移現象に起因していると推察するのが自然である. 実際に次の 3.3 節では, これまでに導入した指標と統計解析を組み合わせることで, この事を証明するための解析を行う. ただしそれに際して障壁となり得るのは, 図 25(a) の通り,  $S_{\hat{\rho}^{(A)}}$  の値が時々刻々と変化するという事である. そして不可逆性の寿命は, 拡散挙動における特徴的な時間スケールの事であるから, 時間に依存して変化する量との間の相関を, 精密に解析するのは難しい. よって, そのような特徴的な時間スケールとの間の関係性を解析するには, ここでの例のように時間変化する状態についてではなく, 時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{KR}}$  の全ての固有状態についてフォン・ノイマン エントロピーを測定し, それを時間に依存しない静的なエンタングルメントの指標として用いる方がよい. 実際に次の 3.3 節では, そのような方針をとるものとする.

### 3.3 エンタングルメントに伴う不可逆転移現象の解析

#### 3.3.1 不可逆性の寿命の統計的な解析

本章のこれまでに於いて、我々は結合 **KR** 系における不可逆転移の現象を、不可逆性の寿命という観点から解析してきた。特に 3.2.3 節においては、その定量的な定義を行い、実際に不可逆性の寿命において転移的な挙動が観測される事を示した。1つの量子自由度に、もう1つの新たな量子自由度が加わる事によって生じるこの不可逆転移の現象は、我々の自然における不可逆性の根源を知る上で、最も基本的な理解を与えるものであるとも言える。よって、その詳しい機構を探る事は極めて意義深いものである。しかしながら、これまでの解析過程で示してきた通り、量子系の振る舞いが生み出す不可逆性は、古典系と比べて非常に揺動的かつ不完全なものである。従って、定量的な法則性を見出すためには、何らかの方法によってアンサンブルを構成し、統計的に解析する必要がある。本節では実際にそれを行い、いくつかの新しい指標の導入と理論的な見積もりを踏まえながら、不可逆転移現象の背後に存在する機構を掘り下げて究明する。

まず課題となるのが、どのようにアンサンブルを構成すればよいかという点である。この種の量子拡散の解析において、普通よく用いられるのは、初期状態の異なるアンサンブルである。たとえば我々が用いている (59) 式において、 $N_A/2$  や  $N_B/2$  としている部分を乱数値で割り振る事などが考えられる。これは非常に簡単に構成できるアンサンブルである。しかしながら、不可逆性の寿命は非常に揺らぎの大きい量であるから、結果の安定性を確保するためには、本当によいアンサンブルになり得るかという事を、理論的にもある程度慎重に検討しておく必要がある。結果として、このように初期状態によって構成したアンサンブルは、不可逆性の寿命という観点においては、偏った不完全なアンサンブルになってしまう可能性がある。ここでその具体的な理由を示すため、不可逆性の寿命が生じる根本的な原因であった、MSD の飽和挙動の水準を与える (90) 式を振り返ろう。初期状態  $|\psi_0\rangle$  を変えるという事は、固有状態の集合  $\{|m\rangle\}$ 、およびその **eigen angle** によって定まる集合  $\{\delta_{mn}^\pm\}$  を保ったまま、(90) 式において  $|C_m|^2$  の分布のみを変えろという事に対応している。そして後に示す通り、不可逆性の寿命においては、個々の固有状態と  $\{\delta_{mn}^\pm\}$  の組が本質的に重要な役割を担っている。よって理想的な統計解析のためには、 $|C_m|^2$  の分布だけでなく、固有状態の組も異なるアンサンブルが必要になる。ところで普通、固有状態は系のハミルトニアンを与えた時点で決定されるから、同じ系においてそのようなアンサンブルを構成するのは困難であるように思える。しかしいまの我々のハミルトニアンには (55) 式の通り、量子系特有の縮退を解くための微小な摂動  $\xi g(\hat{\theta})$  を印加していた事を思い返したい。この摂動は、系の古典的な振る舞いを変化させないほどには小さいが、しかし縮退が解けているという事は、量子系の固有状態には十分な影響を与え得るという事を示唆している。よってこの摂動項のパラメータを変えてアンサンブルを構成すれば、(90) 式において固有状態の組も  $\{\delta_{mn}^\pm\}$  の組も、無論  $|C_m|^2$  の分布も異なる理想的なアンサンブルとなる<sup>\*67</sup>。具体的には、摂動項の関数形  $g(\hat{\theta}) = \cos(\hat{\theta}_A - \theta'_A) + \cos(\hat{\theta}_B - \theta'_B)$  において、位相  $\theta'_A, \theta'_B$  の値を乱数で振って変化させるものとする。実際にこのようなアンサンブルを構成して、その個々の

<sup>\*67</sup> 即ち我々は、古典的には殆ど同じであるが、僅かに異なるハミルトニアンの集合として、アンサンブルを構成すると言える。逆に、初期状態  $|\psi_0\rangle$  を変える必要は無くなる。固有状態が変われば  $|C_m|^2$  の分布も十分に変わるからである。

要素について MSD の時間発展を求め、図 23 で行ったように拡散指数  $\alpha(\tau)$  の時間変化を求めた様子を図 26 に示した<sup>\*68</sup>。

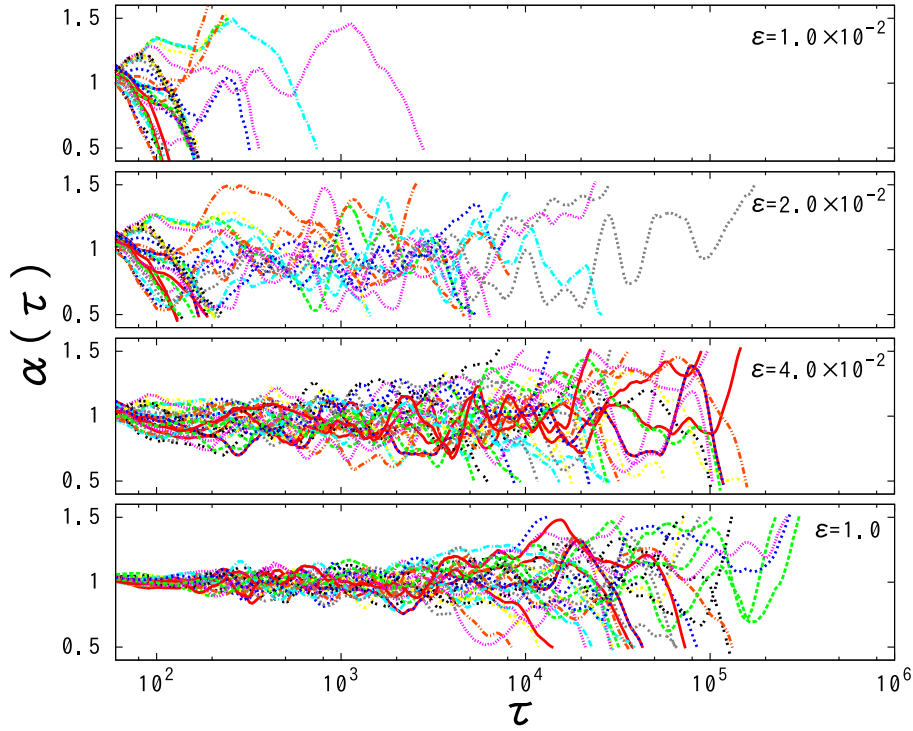


図 26 アンサンブルの各要素における、拡散指数  $\alpha(\tau)$  の時間発展. MSD は時刻  $\tau'$  の近傍において概ね  $\Delta J_{\tau}^2 \propto \tau^{\alpha(\tau')}$  で推移すると見なせる. 即ち  $\alpha(\tau) \sim 1$  程度で推移している間は常拡散が持続していると見なせる. 上から 4 つの図が並んでいるが、それぞれ  $\varepsilon$  の値を変えた結果である. 色の違う複数の系列は、アンサンブルの個々の要素を表している (同じ図中の系列では、 $\varepsilon$  の値は全て等しい). この図において、 $\alpha(\tau)$  の値が最初に  $[0.5, 1.5]$  の区間から外れる瞬間が、我々の定義における不可逆性の寿命  $\tau_L$  である. この図では、各系列の線は不可逆性の寿命の時点で切っており、線が右端で切れている点における横軸の値が  $\tau_L$  と見なせる. この結果から、同じ  $\varepsilon$  の条件下でも、寿命はアンサンブルの要素によって非常に大きく揺らぐ事が見て取れる. しかし全体的に見ると、 $\varepsilon$  の値の増加に伴って、確かに長寿命していく傾向が見て取れる. より詳しい定量的な解析を行うためには、 $\tau_L$  のアンサンブル平均を求める必要がある.

図 26 において、色の異なる多数の線が描かれているが、それぞれがアンサンブルの 1 要素での計算結果を表している.  $\alpha(\tau)$  が  $\sim 1$  程度の水準で推移している間は、MSD が古典的に不可逆な挙動を追従している事を意味している. 我々の定義においては、図 26 において  $\alpha(\tau)$  が最初に  $[0.5, 1.5]$  の区間から外れる瞬間が、不可逆性の寿命の値  $\tau_L$  である. この結果から、アンサンブルの要素ごとに、MSD の変動および寿命  $\tau_L$  の値は十分にばらついており、従って統計的な性質を解析するのに

<sup>\*68</sup> 本論文に掲載している数値計算結果においては、 $N_{\text{tot}} = 64 \times 64$ ,  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32$ ,  $N_{\text{tot}} = 16 \times 16$  の場合におけるアンサンブルの要素数をそれぞれ 25 個, 50 個, 100 個としている. 要素数は多いほど望ましいが、 $N_{\text{tot}}$  が少ない ( $\hbar$  の値が大きい) ほどあらゆる揺らぎが大きくなる傾向があるため、特にその場合にアンサンブルの要素数を増やし、収束性を確保している.

概ねよいアンサンブルを構成できていると判断できる．続いて、アンサンブルの個々の要素に対して、3.2.3節で導入した方法によって $\tau_L$ の値を測定し、そのアンサンブル平均値を $\langle\tau_L\rangle$ とする．実際に $\langle\tau_L\rangle$ の値を、横軸に $\varepsilon$ をとってプロットした結果を図27に示した．

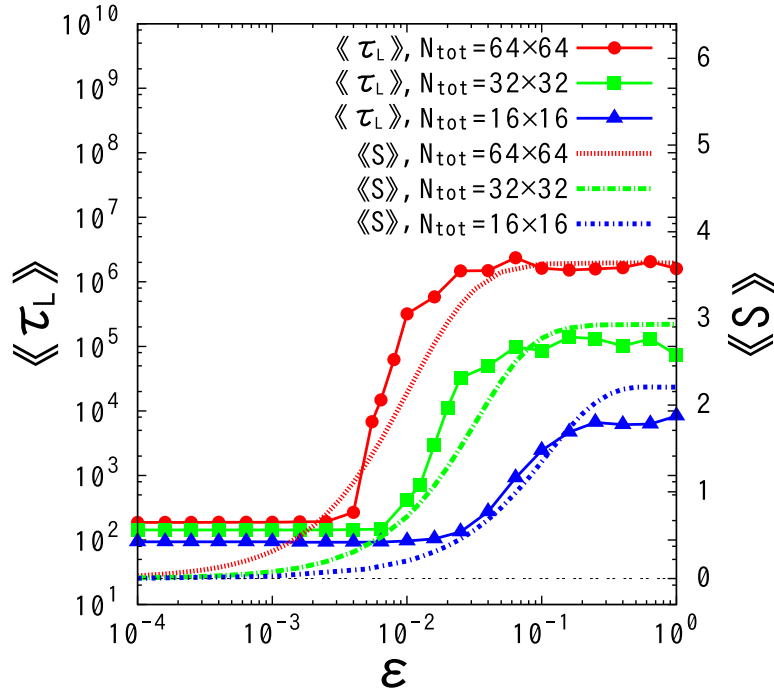


図27 アンサンブル平均した不可逆性の寿命 $\langle\tau_L\rangle$ の $\varepsilon$ 依存性(実線でつながれたマーカー)．色の違いは $N_{\text{tot}}$ の違いであり、上から $N_{\text{tot}} = 64 \times 64$ (赤色),  $32 \times 32$ (緑色),  $16 \times 16$ (青色), ここで $\hbar = 2\pi/\sqrt{N}$ である．破線でプロットしてある曲線は、全固有状態の平均 EE である $S = \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} S_m/N_{\text{tot}}$ のアンサンブル平均値を求めた結果である．両者はよく対応しており、寿命の転移現象と、自由度間のエンタングルメントの転移現象との間に、機構的な関連性がある事を強く示唆している．なお、 $\varepsilon \gg \varepsilon^*$ の“フルエンタングルメント領域”における寿命は、いわゆるハイゼンベルグ時( $\propto N_{\text{tot}}$ )よりも遥かに長く、従来の一般的な量子-古典対応時間の見積もりが、ここではまったく通用しない事も見て取れる．この点については次節で詳しく扱う．

図27において、実線で繋がれたマーカーが $\langle\tau_L\rangle$ をプロットしたものである．色の違いは $N_{\text{tot}}$ の違いを表しており、上から $N_{\text{tot}} = 64 \times 64$ (赤色),  $32 \times 32$ (緑色),  $16 \times 16$ (青色)によるものである．ここで $\hbar = 2\pi/\sqrt{N_{\text{tot}}}$ である．図27の通り、 $\langle\tau_L\rangle$ は $\varepsilon$ に関して転移的な閾値曲線に収束するが、しかし転移領域にはある程度の幅がある事が見て取れる．なお、この閾値曲線は、摂動の代わりに初期状態や $\omega$ の値を変えて構成したアンサンブルを用いても、概ね同様の曲線に収束する<sup>\*69</sup>．よって、この閾値曲線が立ち上がる“幅”の範囲において、結合KR系に何らかの構造変化が生じてい

<sup>\*69</sup> 即ち、初期状態や $\omega$ を変えたアンサンブルでも、それなりに統計的な性質は見れるアンサンブルにはなる．しかし、後で固有状態の組が異なるアンサンブルが必要になるので、やはりポテンシャルの微小摂動項に関するアンサンブルは必要である．また、後の章で述べる通り、 $\omega = 0$ の場合の現象は非常に特例的であるため、 $\omega = 0$ の制約の元でのアンサンブルも必要となる事が挙げられる．

るはずである。これ以降では、この範囲を単純に“転移領域”と呼び、特にこの領域に注目して結合 KR 系に生じる変化を解析する。

### 3.3.2 転移領域における固有状態のエンタングルメントと異常揺らぎ

まずは、転移領域における、結合 KR 系の自由度 A,B 間のエンタングルメントを解析する。いまの我々のモデルでは、線形振動子は自由度 A のみに接続されている<sup>\*70</sup>ので、仮に自由度 A,B 間のエンタングルメントが無視できる程度の場合においては、 $\langle\tau_L\rangle$  は KR が 1 自由度の  $\varepsilon = 0$  の場合と同じ値になるはずである。逆に、 $\langle\tau_L\rangle$  の値が  $\varepsilon = 0$  での値と大きく異なる場合、それは自由度 B の影響によるものである。よって図 27 の結果から、自由度 A,B 間のエンタングルメントにおいても、 $\langle\tau_L\rangle$  と同じ領域において転移的な現象が生じているはずであり、実際に 3.2.4 節の最後で行った計算ではその傾向が見られた。ここでは、そのエンタングルメントの転移について、さらに掘り下げて解析する。自由度間のエンタングルメントを測る指標として、前章の 3.2.4 節で導入した通り、結合 KR 系の一方の自由度をトレースアウトした部分系のフォン・ノイマンエントロピーを用いる。本節においてはこれを、物理的意味を強調してエンタングルメントエントロピー (EE) と呼ぶ。ところで図 25(a) において示した通り、一般に EE は時間に伴って変化するので、そのままでは不可逆性の寿命と EE との間の相関を解析するのが難しい。そこで、全ての固有状態について EE を測定し、その平均値

$$S \equiv \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} S_m \quad (106)$$

を、自由度 A,B 間のエンタングルメントの度合いを表すものと見なす。ここで  $S_m$  は、系の状態が  $m$  番目の固有状態である場合  $|\psi\rangle = |m\rangle$  において測定した EE の値であり、(105) 式において、 $\hat{\rho}^{(A)} = \text{Tr}_{(B)} |m\rangle\langle m|$  とすれば得られる。 $S_m$  や  $S$  の値は、時間によらない普遍的なエンタングルメントの指標<sup>\*71</sup>として扱えるため、 $\varepsilon$  依存性や不可逆性の寿命との相関を調べる上で都合が良い。さらに  $S$  について、 $\langle\tau_L\rangle$  と全く同様にアンサンブル平均をとったものを  $\langle S \rangle$  とする。実際に系のすべての固有状態を数値的に求め、 $\langle S \rangle$  の値を測定した結果を、図 27 に破線の曲線として重ねて示してある。この閾値曲線から、やはり  $\langle S \rangle$  も  $\varepsilon$  について転移的な挙動をする事が見て取れる。その転移点の位置や閾値曲線の概形は、 $\langle\tau_L\rangle$  のものと見事に一致している。この結果は、不可逆性の寿命における転移現象が、自由度間のエンタングルメントにおける転移現象と、機構的に関連している事を示唆するものである。

ここで平均的な描像からさらに掘り下げて、個々の固有状態のエンタングルメントに着目してみると、実は転移領域において、もう一つの重要な現象が生じている。それは EE の揺らぎの異常な増大であり、実際に図 28 にその様子を示した。図 28 において、黒色の曲線は (106) 式の通り、EE の固有状態平均値  $S$  を  $\varepsilon$  について連続的に描いたものである。重ねて描かれているエラーバー

<sup>\*70</sup> 猫と線形振動子との相互作用項  $\eta \hat{f}(\hat{I}) \cos \hat{\phi}$  において  $\hat{f}(\hat{I}) = \sin \hat{I}_A$  に設定しているため。

<sup>\*71</sup> ある瞬間ではなく無限までの時間発展を見渡ししながら、いわば“ダイナミクスのもつれ合い”を測っているわけである。



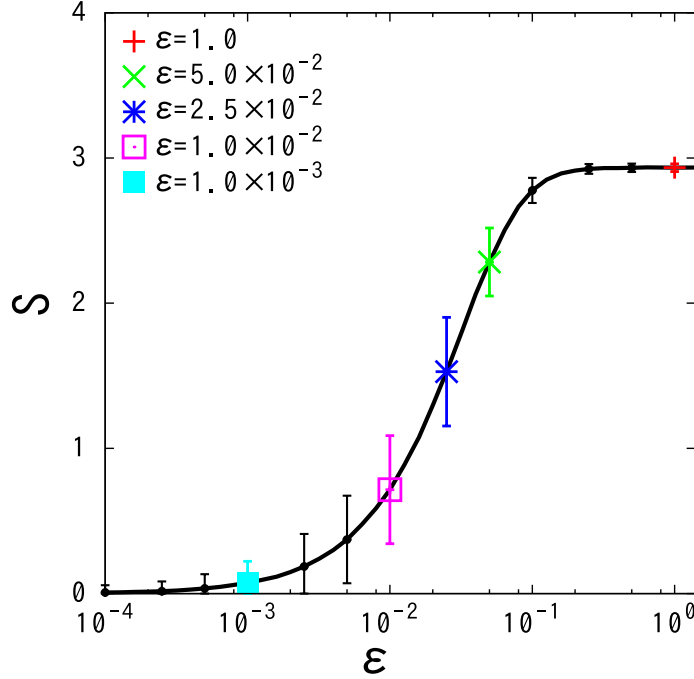


図 28 アンサンブルの 1 つの要素における、EE の全固有状態平均値  $S = \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} S_m / N_{\text{tot}}$  の  $\varepsilon$  依存性 ( $\hbar = 2\pi/32$ ,  $N_A = N_B = 32$ ,  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32 = 1024$ ). 図 27 に示したようにアンサンブル平均した結果と同様に、個々の要素においても、固有状態平均 EE は  $\varepsilon$  に関して閾值的な曲線を描いて飽和する事が見て取れる. いくつかの地点に示してあるエラーバーは、固有状態ごとの EE の揺らぎ (ばらつき) を見るために標準偏差  $\sigma$ : (107) 式を求めた結果を表しており、長さが  $2\sigma$  となるように描いてある. 固有状態平均 EE の閾値曲線がちょうど立ち上がる中央付近において、固有状態ごとの EE の揺らぎが著しく増大している事が見て取れる.

は、全固有状態の EE の値が、平均値からどの程度揺らいでいるか (どの程度の範囲内ではばらついてるか) を見るため、その標準偏差

$$\sigma \equiv \sqrt{\frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} (S - S_m)^2} \quad (107)$$

を求めて示したものである. エラーバーの長さは、平均値の上下方向に対称に  $\sigma$  ずつ、ちょうど  $2\sigma$  となるよう描いてある<sup>\*72</sup>.

図 28 から、固有状態間の EE の揺らぎは、 $\varepsilon$  の強度が転移領域よりも十分に弱い領域においては殆ど見られないが、転移領域に差し掛かると  $\varepsilon$  の増加に伴って著しく増大し、ちょうど転移領域の中央付近で極大に達する事が見て取れる. さらに  $\varepsilon$  を強めて転移領域を抜けると、揺らぎは逆に収束していく様子も見えている. この転移領域での揺らぎは、量子系によく見られる普通の揺らぎ

<sup>\*72</sup> 仮に分布が理想的なガウス型である場合、図 28 のエラーバーは、おおよそ分布の半値幅に近い範囲を表していると見なせる. ただしすぐ後に述べる通り、転移領域の中央付近を除けば、分布はまったくガウス型とはかけ離れている事に注意する必要がある.

とは異なり、 $\hbar$  にあまり依存せず、古典極限においても収束する傾向が見られない、異常なものである (付録: 図 40). 一般の様々な転移現象においても、転移領域での異常な揺らぎを経て構造が変化する事を踏まえると、この結果はまさに転移領域において、量子系に何らかの劇的な構造変化が生じている事を示唆するものである<sup>\*73</sup>. なお、図 28 の  $S$  の値およびエラーバーは、図 27 のようにアンサンブル平均  $\langle \dots \rangle$  をとってはいない. 図 28 の結果はアンサンブルの個々の要素においてほぼ共通、即ちポテンシャルに印加される摂動に対して安定であり、さらに言えばポテンシャルを Arnold's Cat Map の形  $V(\hat{\theta}) = -K\hat{\theta}^2/2$  から Standard Map の形  $V(\hat{\theta}) = K \cos \hat{\theta}$  ( $K \gg 1$ ) に変えてもほぼ同様の結果が得られる. 従って、このような固有状態の EE の転移と異常揺らぎは、有限の相空間領域において双曲的な自由度同士がエンタングルメントする際における普遍的な現象である可能性が高い. この異常な揺らぎの発生に際して、全固有状態の EE がどのような分布を形成しているのかを見るため、EE の最小値から最大値までの間を 50 個の区間に分割して作成した、 $S_m$  のヒストグラムを図 29 に示した. なおヒストグラムの縦軸は、度数を全固有状態数で割り、全てのビンの長さの合計が 1 になるよう規格化してある. 図 29 には複数の分布が重ね描きされているが、それらは  $\varepsilon$  の値の違いによるものであり、図 28 に用いたのと同じ色が同じ  $\varepsilon$  に対応するように塗り分けてある.

図 29 には、 $\varepsilon$  を強めるごとに、分布が全体的に左側 (低 EE 側) から右側 (高 EE 側) へと移動していく様子がよく表れている.  $\varepsilon$  が弱い左側から順に見ていくと、まず  $\varepsilon = 0$  の場合 (灰色) には、全ての固有状態  $|m\rangle$  が全くエンタングルしない事は明らかであり、実際に  $S_m = 0$  の位置に鋭いピークが立っている. この分布は、 $\varepsilon$  の強度が転移領域よりも弱い領域ではほぼ変化しない. しかし、転移領域に差し掛かり始める  $\varepsilon = 10^{-3}$  程度 (水色) になると、分布のピークは依然として鋭く  $S_m = 0$  の位置にありながらも足が若干広がっており、エンタングルした固有状態が少数出現し始めている事が分かる. ここから  $\varepsilon$  を 1 桁強めた  $\varepsilon = 10^{-2}$  程度の領域 (紫色) では、さらにエンタングルする固有状態の数が劇的に増え、分布のピークはついに  $S_m = 0$  から離れている. 分布は非常に幅広になり、先に述べた異常揺らぎの領域に突入しつつある事が見て取れる. ここから 2.5 倍に  $\varepsilon$  を強めた  $\varepsilon = 2.5 \times 10^{-2}$  の領域 (青色) では、整った山型の分布が形成され、ピークは最大値と最小値のちょうど中央付近に位置している. 実際に図 28 を見ても、ちょうど同じ  $\varepsilon$  において EE の全固有状態平均値  $S$  も閾値曲線の中央付近に位置している. 分布の幅はほとんど最大値付近から最小値付近までの範囲にまで広がっており、ここがエンタングルメントの異常揺らぎの極大点であろう事も見て取れる<sup>\*74</sup>. 実際、これ以上  $\varepsilon$  を強めても分布の幅は狭まっていき、揺らぎが収束していく傾向が  $\varepsilon = 5.0 \times 10^{-2}$  の結果 (緑色) から分かる. しかしこの段階では、まだ分布の中心は  $\varepsilon$  の増加に伴って移動を続けている. やがて図 28 の閾値曲線が天井に差し掛かるあたりの  $\varepsilon$  強度になると、分布の幅は細く収束しながら<sup>\*75</sup> 高 EE 領域に鋭いピークが形成されていく. 最終的に全ての

<sup>\*73</sup> 恐らくヒルベルト空間における時間発展の構造的変化であり、いまは EE をオーダーパラメータに用いてそれを捉えていると考えられるかもしれない. しかし、それがどのようなものか、なぜ  $\varepsilon \sim \varepsilon^*$  の相互作用でこのように突然転移するのかは、現在のところ全く不明である.

<sup>\*74</sup> この転移は臨界現象ではないため閾値  $\varepsilon^*$  が曖昧であったが、分布や平均値および揺らぎの極大点を踏まえた上で、やはりここを便宜的な閾値  $\varepsilon^*$  であると定義するのが妥当であろう.

<sup>\*75</sup> 図 29 の  $\varepsilon = 1$  の結果を注意深く見ると、転移が完了した後においても、分布の形状は  $\delta$  関数状というよりは細い山

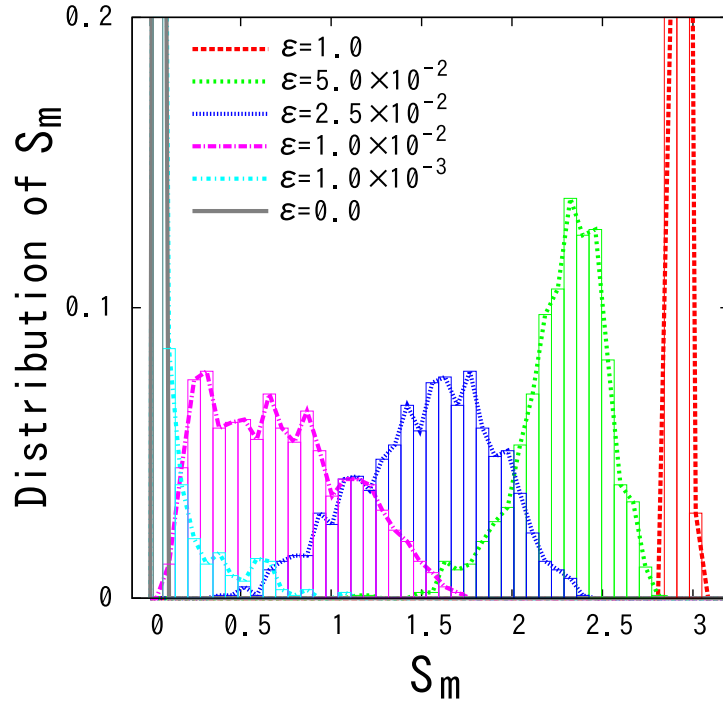


図 29 全固有状態  $|m\rangle$  における EE の値  $S_m$  の分布 ( $\hbar = 2\pi/32$ ,  $N_A = N_B = 32$ ,  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32 = 1024$ ). EE の最小値 0 から最大値  $\log N_A$  までの間を 50 この区間に分割し、ヒストグラムをプロットしたものである。色の違う複数の系列は、 $\varepsilon$  の値を変えた結果を表している。図 28 に示したエラーバーと見比べた際、同じ色が同じ  $\varepsilon$  の値に対応するように着色してある。まず  $\varepsilon = 0$  の場合 (灰色) においては、全固有状態において EE は厳密に 0 である。また、 $\varepsilon = 1$  の場合 (赤色) においては、全固有状態の EE がほぼ最大になっている事が見て取れる。さらに、図 28 において EE の揺らぎが著しく増大していた  $\varepsilon = 2.5 \times 10^{-2}$  の場合 (青色) を見てみると、非常に幅広の分布が形成されており、ほとんどエンタングルしていない固有状態から、最大値付近までエンタングルした固有状態までが存在している事が分かる。

固有状態が限界までエンタングルした状況が実現され、それ以上はもはや  $\varepsilon$  を強めても、分布が高 EE 側へ移動する余地が無くなり、転移が完了する。その分布は  $\varepsilon = 1$  の結果 (赤色) に表れている。

以上が、転移領域における EE 分布変化の全過程である。ここで再び図 19 に示した MSD の時間発展挙動を振り返ってみると、振動的な 1 自由度の挙動から拡散的な 2 自由度の挙動へと変化する過程において、非常に揺動的な挙動が見られたが、それはあたかも本節におけるエンタングルメントの異常揺らぎと対応しているかのようである。即ち、アンサンブル平均量である  $\langle \tau_L \rangle$  と  $\langle S \rangle$  がよく相関していた事に加えて、平均をとらない個々の要素についても、揺らぎの大きさという尺度で見れば、やはり MSD の挙動と固有状態の EE との間には密接な関連性がある事が示唆されるものである。

型であり、分布幅が完全には収束しきらない事が見て取れる。この“フルエンタングルメント領域における EE の揺らぎ”は、これ以上  $\varepsilon$  を強めても収束しないが、しかし通常の量子的な揺らぎと同様に、 $\hbar$  の値を小さくするほどに収束していく。従ってこの揺らぎは、(ほぼ  $\hbar$  非依存で収束しない) 転移領域の異常揺らぎとは、恐らく別の原因によるものであると考えられる。

## 3.3.3 遷移確率エントロピー

ここからは、これまでの現象論的な結果を踏まえた上で、 $\varepsilon \sim \varepsilon^*$  の転移領域で不可逆性の寿命が劇的に変化する機構を究明していきたい。出発点となるのは (87) 式の近似であり、これはいまの我々の系での MSD の時間発展が、KR を固有状態に設定した場合における MSD の、単純な重ね合わせによって記述されるという事を意味している。この重ね合わせ的な描像と、3.3.1 節と 3.3.2 節の結果を照らし合わせると、次のような仮説に思い至る：“低 EE の「1 自由度的な」固有状態は短い不可逆性の寿命を持っており、高 EE の「2 自由度的な」固有状態は長い不可逆性の寿命を持っているのではないか？” このような仮説の観点からすれば、転移前の  $\varepsilon \ll \varepsilon^*$  の領域では全固有状態が低 EE ゆえに短い寿命しか持たないため、それらの“重ね合わせ”としてどのような初期状態を選んでも確かに短寿命となるであろうし、同様に転移後の  $\varepsilon \gg \varepsilon^*$  の領域では長い寿命を獲得するようになるのも妥当であるように思える。さらに  $\varepsilon \sim \varepsilon^*$  の転移領域では先述の異常揺らぎにより、低 EE から高 EE までの固有状態が非常に幅広く存在する事になるから、そららを全て含むような一般的な初期状態 (いまの我々の場合であれば (59) 式) の MSD の時間発展が、短寿命とも長寿命とも言い切れないような揺動的な挙動を示したのも納得がいく。即ち、この仮説によって、これまで見てきた量子不可逆性の転移現象の機構を、固有状態のエンタングルメントを介して説明できそうな見通しが立つ。

実際に、我々は上述の仮説の数値的な検証を試みた。既に見てきた通り、不可逆性の寿命は  $\varepsilon$  の値によって大きく変化してしまうが、転移領域では  $\varepsilon$  の値を適当に固定しても、前節で扱った異常揺らぎによって、EE の値が大きく異なる固有状態を多数用意できる。そこで、もし仮説が正しければ、固有状態の寿命と EE の散布図をとれば正の相関が観測されるはずである。さらに寿命を EE の適当な関数で表す事ができれば、その関数形から、寿命と EE との因果関係を解明する上で、有力な手がかりを得られる事が期待された。ところが実際の結果は予想に反して、固有状態の寿命と EE は散布図上でほとんど乱雑に散らばっており、そのノイズの影にかろうじて微弱な相関の存在を推察できる程度であって、関数形の解析まではほとんど不可能であった。この結果は、固有状態における寿命と EE との間の因果関係が、仮に存在したとしても当初予想されたような直接的な形では無く、もう少し複雑な別の機構を介して、間接的に繋がっている事を示唆するものであった。

従って、不可逆性の寿命と EE との間の因果関係を解析するには、再び MSD の時間発展の理論に立ち戻り、何が両者を仲介しているのかを明らかにする必要がある。まず (87) 式を KR の固有状態で展開した (88) 式において  $|\psi_0\rangle = |m\rangle$  とすると、固有状態  $|m\rangle$  を初期状態とする MSD の時間発展は：

$$\Delta J_\tau^2 \Big|_{|m\rangle} = \frac{D}{2} \sum_{\tau'=0}^{\tau-1} \sum_{s=-\tau'}^{\tau'} \left| \langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle \right|^2 \cos((\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)s) \quad (108)$$

のように簡潔に表される (和は  $\pm \omega T$  の両方の符号についてとる)。確かに (108) 式には EE が陽な形で含まれている訳ではないから、自由度間のエンタングルメントがどのような形で寄与するのかは不明瞭である。ところで eigen angle の組  $\{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{N_{\text{tot}}}\}$  における隣接間距離分布は、自由度間相互作用に伴うレベル反発によって変化する事が一般に知られており、その事が (108) 式にも

大きく影響するよう思えるかもしれないが、実際にはそうではない。この件について詳しくは次の3.4節で扱うが、 $O(1)$ 程度の $\pm\omega T$ の項が付加される事により、実際に(108)式に寄与する $\{w_m - w_n \pm \omega T \pmod{2\pi}\}$ の組における隣接間距離分布は、ほとんど乱数の組におけるものと同一視してよいという結果が得られている。とすると、エンタングルメントの影響は(108)式の $\cos$ 関数の部分ではなく、 $|\langle m|\hat{f}(\hat{I})|n\rangle|^2$ の部分に現れるものと推測できる。ところでこの部分は、 $\hat{f}(\hat{I})$ の相互作用によって、固有状態 $|m\rangle$ が別の固有状態 $|n\rangle$ に遷移する確率を与えると解釈する事が可能である。ただしそれには確率の総和が1になるよう規格化しておく必要があり、そうすると厳密な“遷移確率” $\Lambda_{mn}$ は:

$$\Lambda_{mn} \equiv \frac{|\langle m|\hat{f}(\hat{I})|n\rangle|^2}{\sum_{n'=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m|\hat{f}(\hat{I})|n'\rangle|^2} \quad (109)$$

と表せる。このように規格化しておいた方が後々にも都合が良い。この遷移確率とEEとの間の関連性を詳しく調べる前に、まずは全固有状態が全くエンタングルしない $\varepsilon = 0$ の場合と、逆に最大限にエンタングルする $\varepsilon = 1$ の場合、および転移領域において、この値にどのような差異が生じるのかを確認しておこう。いまの場合、 $|m\rangle$ を初期状態としているから $m$ の値は固定し、 $\Lambda_{mn}$ を $n$ の関数としてグラフにプロットしたものを図30に示した。同図は $N_{\text{tot}} = 32 \times 32 = 1024$ の場合におけるものである。横軸は $n$ の値であり1から $N_{\text{tot}}$ までの範囲であるが、順序についての規則は設けておらず、乱雑な順で全固有状態が横に並んでいるものと見てよい。縦軸は、それぞれの固有状態 $|n\rangle$ への(適当に固定した $|m\rangle$ からの)遷移確率 $\Lambda_{mn}$ の値である。

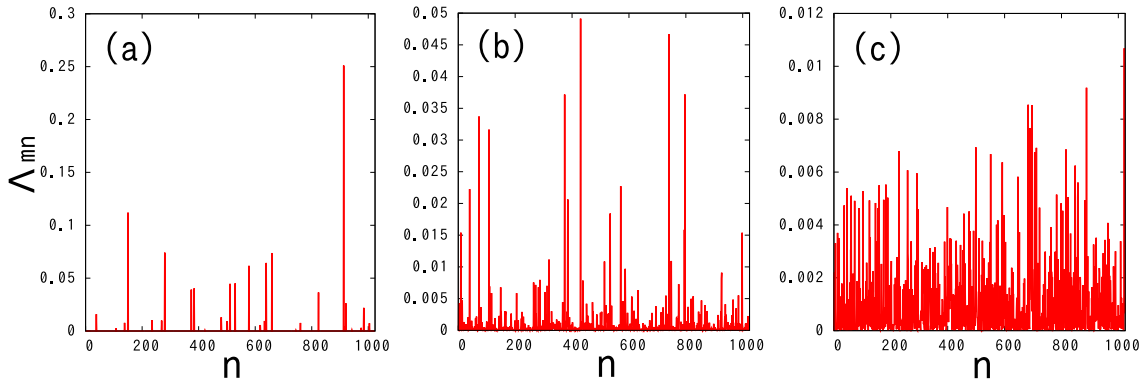


図30 適当に $|m\rangle$ を固定した場合における遷移確率 $\Lambda_{mn}$ を、すべての $|n\rangle$ について測定した結果( $\hat{f}(\hat{I}) = \sin \hat{I}_A$ ).  $\hbar = 2\pi/32$ であり、 $|n\rangle$ は $N_{\text{tot}} = 32 \times 32 = 1024$ 個存在する。(a)は全固有状態が全くエンタングルしない $\varepsilon = 0$ における結果であり、非常に限られた $|n\rangle$ についてのみ、 $\Lambda_{mn}$ が0でない値をとっている事が見て取れる。これは(110)式の制約によるものであり、実際にピークの本数を数値的に数えると厳密に32本になっている。(b)は固有状態ごとのEEの揺らぎが最も大きくなる $\varepsilon = 2.5 \times 10^{-2}$ における結果であり、エンタングルした固有状態が(110)式の制約から解放され、 $\Lambda_{mn}$ が無視できない大きさをとる $|n\rangle$ の数が、劇的に増加しつつある様子が見て取れる。しかし依然として、少数の $|n\rangle$ の寄与が支配的である傾向も見られる。(c)は全固有状態がほぼ最大限にエンタングルする $\varepsilon = 1$ における結果であり、全ての $|n\rangle$ について $\Lambda_{mn}$ が乱雑かつ制約無く分配されている事が見て取れる。なお、 $|m\rangle$ を変えても概ね同様の結果が得られる。

まず図 30(a) は  $\varepsilon = 0$  における場合であるが、この場合はごく少数の  $|n\rangle$  にのみ遷移確率  $\Lambda_{mn}$  が分配されており、それ以外では厳密に  $\Lambda_{mn} = 0$  であるという、線スペクトル的な特徴が見て取れる。この理由は次のようにして簡単に説明できる。 $\varepsilon = 0$  では全固有状態が全くエンタングルしないため  $S_m = S_n = 0$  であり、よってそれらを  $|m\rangle = |u^{(A)}\rangle \otimes |k^{(B)}\rangle$ ,  $|n\rangle = |v^{(A)}\rangle \otimes |\ell^{(B)}\rangle$  のように、自由度ごとの固有状態の直積状態で表す事ができる。加えて、いまの我々の系では  $\hat{f}(\hat{I})$  を、 $\hat{f}(\hat{I}_A) = \sin I_A$  のように自由度 A のみに依存するよう設定している。これらの事によって、(109) 式の絶対値の中身は

$$\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle \Big|_{S_m=S_n=0} = \begin{cases} \langle u^{(A)} | \sin \hat{I}_A | v^{(A)} \rangle & (k = \ell) \\ 0 & (k \neq \ell) \end{cases} \quad (110)$$

のように求められる。ここで 1 自由度固有状態の直交性  $\langle k^{(B)} | \ell^{(B)} \rangle = \delta_{k\ell}$  を用いた。いまは  $|m\rangle$  を固定しているから  $|k^{(B)}\rangle$  も固定されており、よって (110) 式の値が 0 とならない  $|n\rangle$  の組み合わせは、 $|n\rangle = |1^{(A)}\rangle \otimes |k^{(B)}\rangle$ ,  $|2^{(A)}\rangle \otimes |k^{(B)}\rangle$ , ...,  $|N_A^{(A)}\rangle \otimes |k^{(B)}\rangle$  までの  $N_A$  通りに制限されてしまう。実際に図 30(a) のピークの本数を数値的にカウントしてみると、厳密に正しく  $N_A = 32$  本になっている。続いて図 30(b) に示した  $\varepsilon = 2.5 \times 10^{-2}$  の場合を見てみよう。これは図 29 に青色で EE 分布を示した通り、低 EE から高 EE までの固有状態が最も幅広く混在している場合である。図の底辺付近に注目すると細かいピークが数多く見られ、 $|m\rangle$  から遷移可能な  $|n\rangle$  の数が、 $\varepsilon = 0$  の場合よりも確実に増えている事が分かる。これは、固有状態の多くがエンタングルした事によって、もはやそれらを 1 自由度固有状態の直積では近似できなくなり、(110) 式の制約が解け始めたためであると見なせる。しかし依然として遷移確率の分配は大きく偏っており、少数の  $|n\rangle$  が支配的であるように見える。一転して、図 30(c) に示した  $\varepsilon = 1$  の場合を見てみると、ピークはほとんどノイズ状となり、遷移確率が無秩序に分配されている様子が見て取れる。ピークの本数を数値的にカウントしてみても上限の  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32 = 1024$  本に達している。この事から、全固有状態が最大限にエンタングルした場合においては、(110) 式のように特定の固有状態の組を結びつけるような制約は特に見当たらず、全ての固有状態同士がほぼ自由に遷移可能な状況が実現されていると見られる。

以上の結果は、最初に選んだ“遷移元”の固有状態  $|m\rangle$  の特殊性によるものではない。 $N_{\text{tot}}$  個ある  $|m\rangle$  の中からどれを選んできても、無論ピークの出方は異なるものの、 $\Lambda_{mn}$  のピークの本数や分配の乱雑さという観点では同様の結果が得られる事を確認してある。とするとこの現象は、固定した遷移元固有状態からの視点で眺めるよりも、図 31 に示す模式図のように、全固有状態における遷移可能性のネットワークという描像で捉えてみると全体像を理解しやすい。図 31 において、暗い色の点がエンタングルしていない固有状態を、明るい色の点がエンタングルした固有状態を意味している。それらは、互いに遷移可能な(遷移確率が無視できない程度に大きい)もの同士が線で繋がれている。まず全固有状態が全くエンタングルしていない図 31 (a) のような状況においては、固有状態は要素数  $N_A$  個のネットワークが  $N_B$  群あるように見なせて、それぞれのネットワーク内では互いに遷移可能であるが、異なるネットワークに属する固有状態間では遷移不可能である。ところが、エンタングルした固有状態がいくつか存在する図 31 (b) のような状況においては、その固有状態は (110) 式の制約から解放されるため、そこから異なるネットワーク間に遷移可能な繋がりが生じる。最終的に、全ての固有状態が最大限にエンタングルした図 31 (c) のような状況において

は、それぞれのネットワークを区切っていた垣根は完全に解消され、全固有状態同士が互いに遷移可能な、一つの大きなネットワークが完成される。

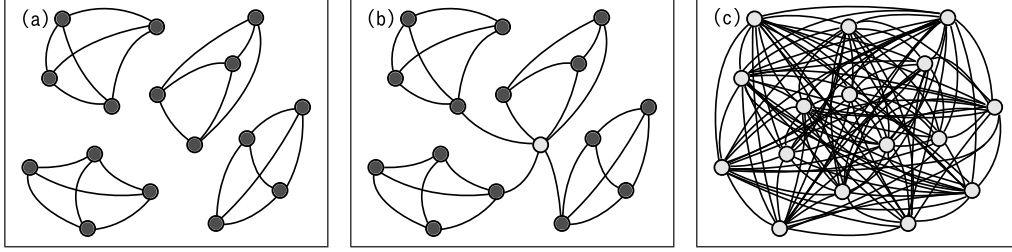


図 31 固有状態間における互いに遷移可能なネットワークの模式図. この図では  $N_A = N_B = 4$ , 即ち  $N_{\text{tot}} = 16$  である. 暗い色の点がエンタングルしていない固有状態, 明るい色の点がエンタングルした固有状態を表している. 互いに遷移可能な (遷移確率が無視できない程度に大きい) 固有状態同士が線で繋がれている. (a) は全固有状態が全くエンタングルしていない状況である. この場合は全固有状態が  $|m\rangle = |u^{(A)}\rangle \otimes |k^{(B)}\rangle$  のように自由度ごとの直積に分解できるため, (110) 式の制約によって, B 自由度成分を共有する  $N_A$  個の固有状態が互いに遷移可能なネットワークを形成する. そのようなネットワークが  $N_B$  群ある. (b) はエンタングルした固有状態が少数存在する状況である. エンタングルした固有状態は 1 自由度ごとの直積状態には分解できないため, (110) 式の制約から解放され, そこを起点としてネットワーク間に繋がりが生じる. (c) は全固有状態が最大限にエンタングルした状況である. ネットワークの垣根となっていた制約は解消され, 全固有状態が互いに遷移可能な, 一つの大きなネットワークが形成される.

以上の考察により, ある  $|m\rangle$  に注目した際, そこからの遷移確率  $\Lambda_{mn}$  がどれだけ幅広い  $|n\rangle$  に分配されているかは, 確かに  $|m\rangle$  のエンタングルメントの度合いと直接的に関連していると考えられる. そこで (104) 式で EE つまり フォン・ノイマン エントロピーを導入したように,  $|m\rangle$  からの遷移確率の散らばり具合に対するエントロピー  $S_m^T$  を以下のように定義しよう<sup>\*76</sup>:

$$S_m^T \equiv - \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \Lambda_{mn} \log \Lambda_{mn} \quad (111)$$

ここで和は  $\Lambda_{mn} \neq 0$  の項についてのみとる. 我々はこのエントロピーを“遷移確率エントロピー”(Transition-rate Entropy, 以下 TE) と呼ぶ. TE は即ち,  $|m\rangle$  が他の固有状態に対して, どれだけ幅広く遷移可能なネットワークを張っているかを測る指標であるとも言える. 図 30 (c) のように,  $\Lambda_{mn}$  が上限の  $N_{\text{tot}} = N_A \times N_B$  本のピークを持つ状況においては, 仮にそれらが等分配つまり  $\Lambda_{mn} = 1/N_{\text{tot}}$  であつたと仮定すると,  $S_m^T$  は理論上の最大値  $\log N_{\text{tot}}$  の値をとる. また, 図 30 (a) のように  $\Lambda_{mn}$  が  $N_A$  本のピークを持つ状況においては, 仮にそれらが等分配ならば  $S_m^T$  は  $\log N_A$  の値をとる. 我々の系では  $N_A = N_B$  即ち  $\log N_{\text{tot}} = 2 \log N_A$  であるから, 実際には完全な等分配では

<sup>\*76</sup> 3.2.4 節で フォン・ノイマン エントロピーを導入する際にも触れたが, 確率分布  $P_n$  に対してエントロピーを  $-\sum_n P_n \log P_n$  の形で定義するのは一般的である. ここでは  $P_n = \Lambda_{mn}$  と置いたと見ればよい.  $\Lambda_{mn}$  の定義において規格化を行ったのは, このようにエントロピーを定義して散らばり具合を測るためである. もし規格化せずに用いれば,  $\Lambda_{mn}$  の  $n$  に関する総和が  $m$  ごとに異なってしまう, 散らばり具合を公平に測る事ができず, 後に不可逆性の寿命との関係を解析する際に誤差が大きくなる.



ないため少し値がずれるものの、TE は  $\varepsilon = 0$  から  $\varepsilon = 1$  までの変化に伴って概ね 2 倍程度増加すると見込める。そしてこれまでの考察の通り、 $|m\rangle$  がエンタングルするほど  $\Lambda_{mn}$  の  $n$  に関する散らばり具合が増大するならば、 $\varepsilon$  を固定して全固有状態の EE と TE を測定すると、両者の間には強い正の相関が観測されるはずである。実際にそのような測定を行った結果を図 32 (a) に示してある。

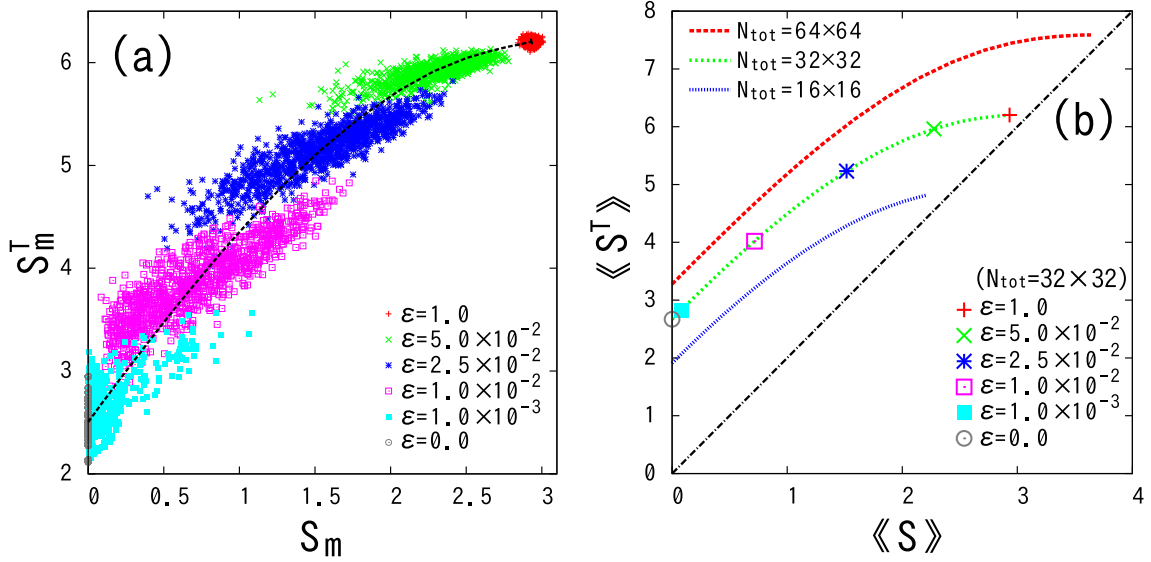


図 32 (a): 全固有状態における EE および TE 測定値の散布図. ( $\hbar = 2\pi/32$ ,  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32 = 1024$ ). すべての固有状態  $|m\rangle$  について、EE の値  $S_m$  と TE の値  $S_m^T$  を測定し、座標  $(S_m, S_m^T)$  に点をプロットしたものである。1 つの点が、1 つの固有状態に対応している。色の異なる複数の系列は、 $\varepsilon$  の値を変えた結果を表している。この結果から、EE と TE との間には、固定した  $\varepsilon$  の条件下においても明確な正の相関の存在が見て取れる。また、転移領域において EE の異常揺らぎが生じているのに伴って、TE にも異常揺らぎが生じている事が分かる。さらに、各  $\varepsilon$  ごとに全固有状態の平均 EE および平均 TE を求め、 $\varepsilon$  の値を少しずつ変えながらプロットした結果を、黒色の破線で示してある。この結果から、全固有状態の平均 TE は、平均 EE の滑らかな一価関数で記述可能である事が分かる。(b): 全固有状態の平均 EE:  $S = \sum S_m / N_{\text{tot}}$  と平均 TE:  $S^T = \sum S_m^T / N_{\text{tot}}$  とが描く曲線 ((a) における黒色の破線) のアンサンブル平均  $\langle \dots \rangle$  をとり、 $N_{\text{tot}}$  を変えてプロットした結果。色の違いが  $N_{\text{tot}}$  の違いを表している。この結果から、平均 EE と平均 TE とが描く曲線は、少なくともここで計算した範囲においては、 $N_{\text{tot}}$  を変えても概ね形状を保ったままスケールが変化していく傾向が見て取れる。なお、EE の理論上の最大値は  $\log N_A$  であり、TE の理論上の最大値は  $\log N_{\text{tot}} = 2 \log N_A$  であるから、これらの曲線の右上端の座標は、概ね傾き 2 の直線上に乗る事が見込まれる。実際にこの直線を黒色の破線で示してある。さらに  $\varepsilon = 0$  において EE は最小値 0 をとり、その際の TE の値は概ね  $\log N_A$  程度と見積もれる。よって、この図の曲線が張る弦は、座標  $(0, 1)$  と座標  $(1, 2)$  をと結ぶ直線を、原点を中心として  $\log N_A$  倍したものと近似的に見積もれる。この見積もりにおける弦の傾きは 1 であって  $\hbar$  に依存しない。

図 32 (a) において、横軸が EE かつ縦軸が TE であり、1 個の固有状態  $|m\rangle$  に対する測定値を座標  $(S_m, S_m^T)$  上の 1 つの点とし、全固有状態の点を散布図プロットしてある。色の違いは  $\varepsilon$  の違いを表



しており、図 28 や図 29 と同じ  $\varepsilon$  の系列が同じ色に対応している。青色の系列が、転移領域の中心かつ異常揺らぎの最大点である  $\varepsilon = 2.5 \times 10^{-2}$  のものであり、低 EE から高 EE まで最も幅広い固有状態を含んでいるが、その散布図は傾いた細長い楕円状の広がりを描いている。この事は、同じ  $\varepsilon$  の条件下であっても、やはり EE と TE との間に強い正の相関がある事を証明している。続いて他の  $\varepsilon$  の系列にも着目し、全体的に点のばらつき具合を見比べてみると、TE においても揺らぎの異常増大現象が、EE とちょうど同じ  $\varepsilon$  領域で発生している様子が表れている<sup>\*77</sup>。そして、その揺らぎの範囲内で、両者には一貫して正の相関がある事が明確に見て取れる。

ここで (106) 式で EE の固有状態平均値  $S = \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} S_m / N_{\text{tot}}$  を導入したように、TE についても固有状態平均値

$$S^T \equiv \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} S_m^T \quad (112)$$

を導入しよう。図 32 (a) において黒色の破線で示してある曲線は、 $\varepsilon$  の値を  $[0, 1]$  の範囲で非常に細かく連続的に変化させながら、それぞれの  $\varepsilon$  において EE と TE の全固有状態平均値の座標  $(S, S^T)$  が描く軌道を求めてプロットしたものである。この結果から、平均的な描像においては、TE は EE の滑らかな一価関数で記述可能である事が分かる。この曲線に対して 3.3.1 節と同様にアンサンブル平均  $\langle \dots \rangle$  をとり、 $\hbar$  を変えてプロットした結果が図 32 (b) である。同図より、TE と EE の平均値曲線は、 $\hbar$  の変化に際して、概ね形状を保ったままスケールが変化していく傾向が見て取れる。曲線の丸みが若干異なる様子も見られるが、しかし少なくとも  $\hbar$  に関して急な形状変化ではなく、何らかの普遍曲線に漸近していくかのようにも見える。この形状変化に関する詳しい解析は恐らく難しいが、しかし曲線の両端を結んだ弦の  $\hbar$  依存性については、次のように簡単に見積もれる。曲線の左端は  $\varepsilon = 0$  の点であるが、仮に遷移確率が  $N_A$  本のピークに等分配される理想の場合においては、この点のグラフ上の座標は  $(0, \log N_A)$  となる。また、曲線の右端は  $\varepsilon = 1$  の点であって、同様に理想の場合の座標は、EE と TE の最大値  $(\log N_A, 2 \log N_A)$  となる。従って、曲線の両端が張る弦は、座標  $(0, 1)$  と座標  $(1, 2)$  とを結ぶ直線を、原点を中心に  $\log N_A = \log(2\pi/\hbar)$  倍にスケールしたものと近似的に見積もれる。重要なのは、その直線の傾きが 1 であって  $\hbar$  に依存しない事である。とすると、EE の異常揺らぎの射影のように生じている TE の異常揺らぎも、やはり  $\hbar \rightarrow 0$  の古典極限方向で収束しない事が示唆される。さらに両者の平均的な関係は、曲線の丸みを無視して弦によって近似すれば、

$$\langle S^T \rangle \sim \langle S \rangle + \log N_A \quad (113)$$

のような形で大まかに見積もれる。この値は  $\langle S \rangle$  の 0 から最大値までの変化に伴って 2 倍になる。

<sup>\*77</sup> ただし  $\varepsilon = 0$  の系列に着目すると、そこでは EE の揺らぎは存在しないが、TE の揺らぎはある程度存在している事が分かる。この系列内における全ての点 (固有状態) は、 $\Lambda_{mn}$  が厳密に  $N_A$  本のピークを持っているが、それらの長さは理想的な等分配とはならず、図 30(a) のように偏りを持つため、このように TE が揺らいでいるのである。従ってこの揺らぎは、EE との相関によって生じている転移領域の異常揺らぎとは区別すべきであり、TE 自身が EE とは無関係に持っている揺らぎである。即ち TE は、MSD の理論値と直接的な関連性を持つものの、しかしエンタングルメントの度合いを反映する精密さという点においては、EE よりも粗いと言える。この粗さは、固有状態における不可逆性の寿命と EE との相関解析を困難にしていた原因の一つと考えられる。

## 3.3.4 不可逆性の寿命における遷移確率エントロピー依存性の解析

遷移確率は、規格化定数を除けば (108) 式にそのまま含まれているから、MSD の時間発展と直接的な関連性を持っている量である。従って EE と TE との間を繋ぐ相関の存在は、固有状態におけるエンタングルメントと MSD の振る舞いとの間が、遷移確率を介した間接的な因果関係によって、確かに繋がっている事を証明していると言える。不可逆性の寿命もまた、MSD の振る舞いの一種であるから、原理的にはやはり固有状態のエンタングルメントと、間接的な因果関係によって繋がっていると言える。しかし既に述べた通り、寿命と EE との間の関連性を直接解析するのは、相関が弱く困難であった。そこで本節においては EE の代わりに TE を用いる事で、再び寿命との間の関連性の解析を試みよう。即ち、 $\varepsilon$  を固定した状況下において、固有状態の寿命と TE との間の相関を測り、最終的に寿命の TE 依存性の関数形を明らかにするのである。

MSD に関して、TE は EE とは違って直接的な因果関係で繋がっているため、より相関を明確に解析できる利点がある。加えてその前に、理論面からもある程度の定性的な見積もりを行っておく事が可能である。重要なのは、不可逆性の寿命が尽きた後における MSD のおおよその飽和値 (厳密には  $\tau \rightarrow \infty$  での長時間平均) を与える (90) 式である。簡単のため、仮に  $\{\delta_{mn}^{\pm} = w_m - w_n \pm \omega T\}$  を殆ど乱数の組と見なしてしまえば<sup>\*78</sup>、 $|\langle m|\hat{f}(\hat{I})|n\rangle|^2$  の値が  $m, n$  について幅広く散らばっているほど、(90) 式の右辺における和に寄与する項の数が増え、より小さな  $\delta_{mn}^{\pm}$  の項が含まれる確率が高くなる。これはつまり、初期状態が含む固有状態が高 TE であるほど、より MSD の飽和値が大きくなる事が、統計的には見込めるという事である。ただし図 19 から見て取れる通り、不可逆性の寿命の長さとは MSD の飽和値の大きさは、必ずしも常に対応しているわけではない。しかし統計的な観点においては、やはり両者の間には正の相関があると考えるのが自然であろう。このようにして、高 TE の固有状態は、長い寿命を獲得するであろう事が、アンサンブル平均においては確かに期待できる。

ところで上の議論は、これまで我々が想定してこなかった、もう一つの重要な現象の存在も示唆している。というのも、初期状態が含む固有状態の数  $M$  が多いほど、(90) 式の右辺の和の項数が増えるため、上に述べたのと同じ理屈によって、より寿命が長くなる事が見込まれるのである。そしてこの現象は実際に生じる。その詳しい解析は次節で行うが、結果を先に引用すると、寿命のおおよその値は  $M$  に比例して延びる。この“寿命の  $M$  依存性”の現象は、本質的にはいまの関心対象である TE 依存性と独立に解析できるものであり、実際そうすればよいと思えるかもしれないが、しかし一つ面倒な技術的問題が生じる。というのも、個々の固有状態における寿命、即ち  $M = 1$  における寿命というのが短すぎて、我々の寿命測定のアプローチでは適切に測れないのである<sup>\*79</sup>。

そこでこの現象を逆に利用し、寿命が安定的に測定できる程度のオーダーになるように、固有状態を適当に  $M$  個重ね合わせて、それを MSD の時間発展の初期状態とする事を考えよう。寿命の TE 依存性を解析するためには、なるべく TE の値に近い固有状態を選んで重ね合わせる必要があ

<sup>\*78</sup> この事の妥当性に関わる議論は次節で行うが、肯定的な結果が得られる。

<sup>\*79</sup>  $M = 1$  の場合、MSD の log-log 空間における時間発展から最小二乗法によって  $\alpha(\tau)$  を安定的に求めるには、 $\varepsilon = 1$  においてなんとか可能となる水準である。よって  $\varepsilon$  がさらに弱い領域においては、TE 依存性の関数形を解析できるほどの精度を確保できない。

る．そこでまず，全固有状態を TE の値の順にソート（並び替え）処理し，その順にインデックス  $m$  を振りなおす．続いて， $m$  が小さい順，即ち TE 値が小さいものから順に選んで，等しい重みで  $M$  個ずつ重ね合わせる．すると，構成固有状態の TE 平均値が異なる， $N_{\text{tot}}/M$  個の初期状態を用意する事ができる．低 TE 側から  $k$  番目の初期状態を  $|\psi_{[k]}\rangle$  と記述し，その TE 平均値を  $S_{[k]}^T$  としよう：

$$|\psi_{[k]}\rangle \equiv \sum_{m=(k-1)M+1}^{kM} \frac{|m\rangle}{\sqrt{M}} \quad (S_m^T \text{が昇順になるように } m \text{ を割り振る}) \quad (114)$$

$$S_{[k]}^T \equiv \sum_{m=(k-1)M+1}^{kM} \frac{S_m^T}{M} \quad (115)$$

ここで  $1 \leq k \leq N_{\text{tot}}/M$  であり，(114) 式の分母の平方根は規格化条件を満足するためである．このような  $|\psi_{[k]}\rangle$  からの MSD の時間発展に対して不可逆性の寿命を測り，その測定値を  $\tau_{L[k]}$  とする．我々が知りたいのは  $\tau_{L[k]}$  の  $S_{[k]}^T$  依存性である．ただし両者の関係は，既に議論した通り統計的なものであろうから，3.3.1 節と同様の方法でアンサンブル平均をとり， $\langle S_{[k]}^T \rangle$  と  $\langle \tau_{L[k]} \rangle$  を求めた上で解析する必要がある．ところで実際に数値実験を行う際，固有状態の重ね合わせ個数  $M$  はどの程度にすればよいであろうか？ 寿命測定という観点においては，なるべく長寿命である方が安定して測定しやすいから， $M$  が多い方が有利である．しかし  $M$  を多くしすぎると，用意できる  $|\psi_{[k]}\rangle$  の個数  $N_{\text{tot}}/M$  が不足し，TE 依存性の関数形解析という観点においては逆に不利になってしまう．その兼ね合いを考慮しながら結果が安定するように選ぶ．我々の経験則では  $M = \sqrt{N_{\text{tot}}} = N_A$  程度に選べば解析しやすい．つまり  $N_{\text{tot}}$  個の固有状態の中から TE 順に  $N_A$  個ずつ重ね合わせて  $N_A$  個の初期状態を構成するわけである．実際に  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32$ ， $M = 32$  の場合において測定した， $\langle S_{[k]}^T \rangle$  と  $\langle \tau_{L[k]} \rangle$  の値をプロットしたグラフを図 33 に示した．

図 33 において，横軸が TE，縦軸が不可逆性の寿命である．ただし縦軸は対数軸になっている．色違いで複数の系列が描かれているが，これらは  $\varepsilon$  の値の違いによるものであり，図 32(a) と同じ色が同じ  $\varepsilon$  に対応している．それぞれの  $\varepsilon$  において， $k = 1$  から 32 までの測定結果を座標 ( $\langle S_{[k]}^T \rangle$ ,  $\langle \tau_{L[k]} \rangle$ ) に対応させ，線で結んである．青色の系列が，EE 及び TE の異常揺らぎがほぼ最大となる  $\varepsilon = 2.5 \times 10^{-2}$  におけるものである．紫色の系列は  $\varepsilon = 1.0 \times 10^{-2}$  におけるものであり，そこにおいても異常揺らぎはほとんど最大に近い．これらの系列はそれぞれ，図上で概ね直線状に並んでいる事が見て取れる．縦軸は対数軸であるから，この結果は，それぞれの  $\varepsilon$  において，平均寿命  $\langle \tau_{L[k]} \rangle$  が平均 TE  $\langle S_{[k]}^T \rangle$  の指数関数で記述される事を意味している．続いて，他の  $\varepsilon$  の系列にも目を向けて見よう．すると，個々の  $\varepsilon$  の系列内では，異常揺らぎが収束するにつれて TE 依存性がはっきりしなくなる事が分かる． $\varepsilon = 1$  (赤色) や  $\varepsilon = 0$  (灰色) の系列では異常揺らぎは収束しきっているが，TE 依存性もほとんど消失している．しかしながら，異なる  $\varepsilon$  の系列を含めて全体的に眺めると，それらは概ね直線的に配列しており，この事から全系列が同一の指数関数を追従しているように見える．実際に図 33 において， $e^{\langle S^T \rangle}$  に比例する黒い直線を引いてある<sup>\*80</sup>．

<sup>\*80</sup> 具体的には  $\langle \tau_L \rangle = \frac{2M}{\pi^2} e^{\langle S^T \rangle}$  の線を引いているが，この係数については次節で導出する．

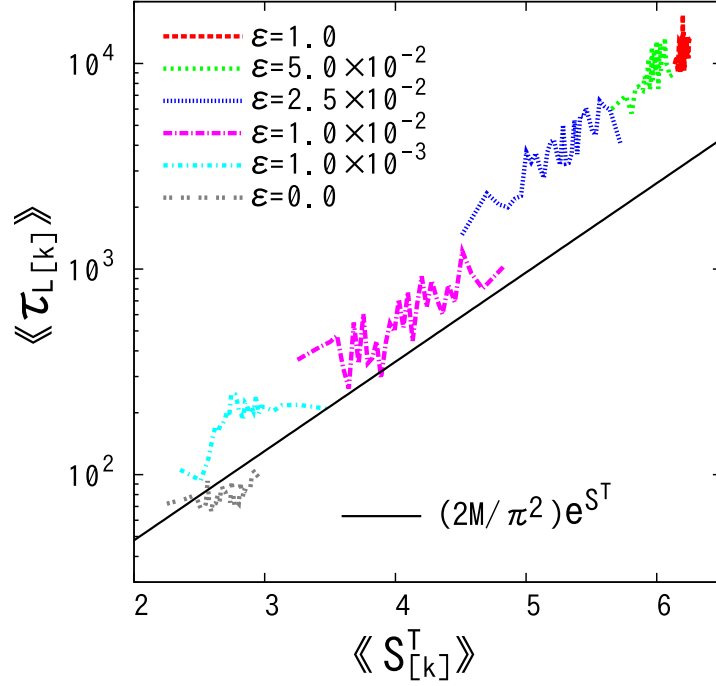


図 33 不可逆性の寿命の TE 依存性 ( $\hbar = 2\pi/32$ ,  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32$ ,  $M = 32$ ). 全固有状態の中から, (114) 式の通りに TE 値の近い固有状態を  $M$  個ずつ重ね合わせた初期状態  $|\psi_{[k]}\rangle$  に対して, その平均 TE 値  $S_{[k]}^T$  を横軸に, 不可逆性の寿命の測定値  $\tau_{L[k]}$  縦軸にとってプロットしたものである. 平均 TE 値が異なる複数の初期状態  $|\psi_{[k]}\rangle$  ( $1 \leq k \leq M$ ) における結果を線で繋いであり, さらにその結果のアンサンブル平均  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  をとってある. 色が違う複数の系列は,  $\varepsilon$  の値を変えた結果を表している. 図 28 や 図 32(a) と見比べた際, 同じ  $\varepsilon$  の値のものが同じ色になるように着色してある. この図において, 全ての  $\varepsilon$  の系列が, 概ね同一の直線上に並んでいる傾向が見て取れる. 縦軸は対数軸であるから, この結果は, TE と不可逆性の寿命との間に, 統計的に指数関数の関係  $\langle\langle \tau_L \rangle\rangle \propto e^{\langle\langle S^T \rangle\rangle}$  が成り立つ事を示している. 実際に  $e^{S^T}$  に比例する線を, 図中に黒色の直線として引いてある. 数値因子 (係数) の見積もりと理論的な解釈は, 次の 3.4 節の最後で行う.

この結果は即ち,  $\varepsilon$  の区別を忘れてしまって普遍的に

$$\langle\langle \tau_L \rangle\rangle \propto e^{\langle\langle S^T \rangle\rangle} \quad (116)$$

の関係が成り立つという事を強く示唆している. ここで  $S^T$  は全固有状態平均値でなくとも, 恐らく初期状態において適当に (しかし概ね均一な重みで) 混ぜた固有状態についての平均値でよいが, ただし個数は統一しておく必要がある. この結果はつまり平均的な描像において, 固有状態の不可逆性の寿命が,  $\tau_L(S^T(\varepsilon))$  のように TE を介する形で  $\varepsilon$  に依存している事を意味している. さらに, 既に見てきたように, TE は EE を介して  $\varepsilon$  に依存しているから, より厳密な依存性の階層構造は  $\tau_L(S^T(S(\varepsilon)))$  の形になっていると言える.

## 3.3.5 不可逆性の寿命における転移現象の機構：“量子不可逆性の誕生”

ところで、本論文において一貫して興味の対象としてきたのは、「1 自由度の有界な量子系に、新たな自由度が結合する事で、系が示す不可逆現象の振る舞いがどのように変化するか」という点であった<sup>\*81</sup>。これはつまり、2 つの自由度の結合によって、量子不可逆性が誕生する瞬間を解析してきたと言える。第2章では現象論的な例を示し、この第3章では、その機構を探ってきた。そして、これまでの結果を全て繋ぎ合わせれば、その機構について、以下のように一通りの説明を行う事ができる。

1. まず、自由度間の相互作用強度  $\varepsilon$  がある閾値以上に強まると、KR の時間発展演算子の固有状態が2 自由度的にもつれ合い、そのエンタングルメントエントロピー EE が転移的に上昇する<sup>\*82</sup>。その閾値曲線のグラフは図 27 に示した通りである。また、転移領域の全域において、全固有状態における EE が著しくばらつく異常揺らぎが発生する。その様子は図 28 や図 29 に示してある。
2. 上記の EE の上昇に伴い、一方の自由度のみに依存する  $\hat{f}(I_A)$  演算子を介した、KR 固有状態間の遷移確率のネットワーク (図 31) が密に結合しはじめる。その結果、高 EE な固有状態ほど、遷移確率エントロピー TE も高い値をとるようになる。その様子は図 32 に示してある。また、EE と対応して TE にも異常揺らぎが生じる。
3. そのように KR の固有状態の TE が増加すると、(108) 式の和が長周期の項を含む確率が高まり、その固有状態を初期状態とする MSD が、より長時間に渡って古典不可逆挙動を模倣する事が可能になる。これにより、統計的には、高 TE の固有状態が示す不可逆性は長寿命化し、TE との間に (116) 式の指数的な関係が成り立つ。
4. KR の任意の初期状態における MSD の時間発展は、(87) 式の近似により、KR の固有状態における MSD の時間発展の重ね合わせで記述できる。よって、固有状態の長寿命化に伴って、それら全てが重ね合わさっている、(59) 式のような一般的な初期状態の寿命も延びる<sup>\*83</sup>。ただし EE および TE の異常揺らぎが生じる領域においては、短寿命から長寿命までの固有状態が混在するため、一般初期状態における MSD は非常に揺動的な時間発展を見せる。

以上が我々の系における不可逆転移の機構である。

<sup>\*81</sup> あくまでも、その理想的な検証モデルの一つとして、相空間が有限かつ一様に双曲的な結合 Arnold's Cat Map 系を用いてきた。

<sup>\*82</sup> 現時点においてこの部分の根本的な理由は (我々が知る限り) 未解決である。

<sup>\*83</sup> 固有状態の重ね合わせに関する、寿命の詳しい見積もりは次節において行う。ここでは定性的な議論に留めておく。

### 3.4 固有状態の重ね合わせと限界寿命

#### 3.4.1 不可逆性の寿命における $M$ 依存性

前節までの内容で、不可逆性の寿命における  $\varepsilon$  依存性については、その機構も含めて大部分が明らかになったと言える。しかしその議論の過程において、次のような重要な課題を、非常に雑な見積りのまま残してきた：“固有状態を重ね合わせる事によって、不可逆性の寿命はどのように、そして何故変化するのか？”<sup>\*</sup>。これはつまり、(87)-(88) 式において固有状態を重ね合わせる個数を  $M$  としたとき、その  $M$  に対して寿命がどう依存しているかという課題であり、任意初期状態における寿命を理論的に見積もるためには、その機構も含めて明らかにする必要がある。この課題を本論文の最後まで残してきたのには、以下のような二つの理由がある。一つは、この“寿命の  $M$  依存性”の挙動が、これまで一貫して注目してきた  $\varepsilon$  依存性——機構として EE 依存性や TE 依存性を含む——とは独立であり、よって先にどちらか一方に集中して解析する必要があったためである<sup>\*84</sup>。もう一つの理由は、 $M$  依存性の機構を解明するにあたって、不可逆性の寿命に関する理論を、確率論的な立場からより深く掘り下げないといけないからである。これらの理由から、定性的な見積もりでも比較的解釈しやすい  $\varepsilon$  依存性についての議論を、前節で先に済ませたのである。本節の最後に、不可逆性の寿命に関する完全な理論を求めた上で、再び前節の結果を振り返って捉え直す。

理論的な議論に入る前に、はじめに寿命の  $M$  依存性の挙動を数値的に確認しておきたい。本節においては簡単のため、固有状態  $|m\rangle$  のインデックスを、完全にランダムな順序で割り振るものとしよう<sup>\*85</sup>。即ち  $m$  の値の大小が、寿命に影響する EE や TE 等の量と、全く相関しないようにしておく。そして、それらを  $M$  個重ね合わせて構成した状態を  $|\psi_{(M)}\rangle$  と定義する：

$$|\psi_{(M)}\rangle \equiv \sum_{m=1}^M \frac{|m\rangle}{\sqrt{M}} \quad (\text{完全にランダムな順に } m \text{ を割り振る}) \quad (117)$$

このような  $|\psi_{(M)}\rangle$  を初期状態として、MSD の時間発展を計算し、測定した不可逆性の寿命を  $\tau_{L(M)}$  とする。この節において我々が知りたいのは、 $\tau_{L(M)}$  における  $M$  依存性の関数形、およびその背後にある機構である。

既に何度か触れた通り、初期状態が含む固有状態の数  $M$  が多いほど、不可逆性の寿命が長くなる傾向がある。ところでこの現象は一見すると、前節で扱ったエンタングルメントによる長寿命化の機構によって、ある程度説明できそうに思える事に注意する必要がある。というのも、初期状態が含む固有状態の数が多いほど、その中に偶発的に高 TE な固有状態が含まれる確率が高まるため、それによって長寿命化すると解釈する余地がありそうだからである。実際にこの事は少しばか

<sup>\*84</sup> しかしながら前節の解析の最後において、我々はやむを得ず  $M$  依存性の解析結果を先取りして利用したが、それは「単一の固有状態の寿命は短すぎて解析が難しい」という全く技術的な理由であった。もっとずっと大きな  $N_{\text{tot}}$  の条件下で計算する事ができれば、全体的に長寿命化するから、単一の固有状態に対しても、前節と同様の TE 依存性の結果を捉えられるはずである。

<sup>\*85</sup> 前節の (114) 式においては  $S_m^T$  が昇順になるようにインデックスを割り振ったが、本節との違いに注意する必要がある。

り寿命に影響するであろうが、しかし図 33 の一つの系列内において、TE の違いによって寿命にどの程度の差があるかに注目すると、最も差が大きくなる転移領域においてさえ、高々数倍の範囲内である事が見て取れる。これから扱う  $M$  依存性の現象は、寿命の長さにおいて数桁以上の変化を伴うものであるから、そのような高 TE の固有状態の偶発的な混入による寄与は、ほとんど無視できる。しかしながら、より純粋に  $M$  依存性のみを解析するためには、 $\varepsilon = 1$  のように、全ての固有状態が最大限にエンタングルする“フルエンタングルメント領域”を用いるのが理想的である。同領域では図 32 (a) から見て取れる通り、全固有状態における TE のばらつきが収束して最も小さくなるため、どのように固有状態を重ね合わせても平均 TE が同程度になり、よって TE 依存性が寿命に与える影響を排除できる。その様子は図 33 の  $\varepsilon = 1$  の系列を見れば明らかである。実際に  $\varepsilon = 1$ ,  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32$  の条件下において、 $M$  の値を複数変えながら計算した、MSD の時間発展挙動を図 34 に示した。

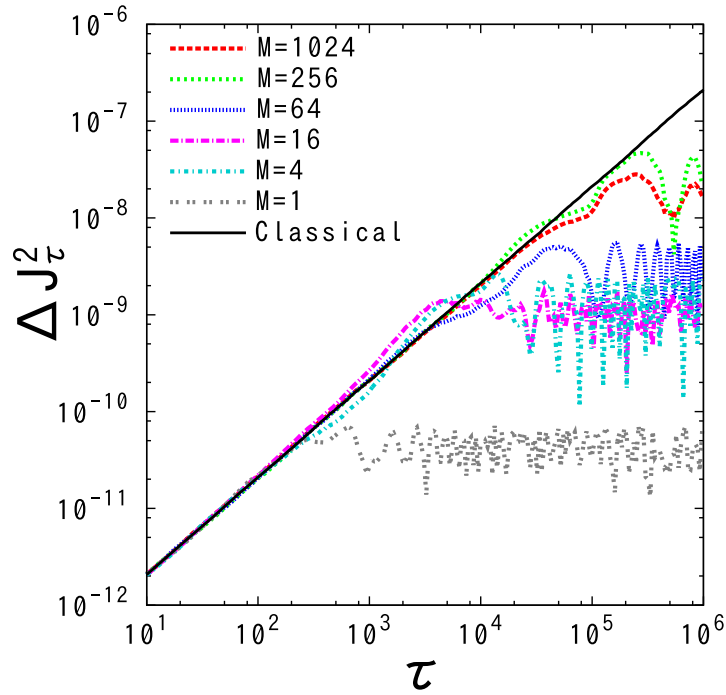


図 34 固有状態を乱雑な順で  $M$  個重ね合わせた初期状態  $|\psi_{(M)}\rangle$  における、MSD の時間発展の様子 ( $\hbar = 2\pi/32$ ,  $N_{\text{tot}} = 32 \times 32 = 1024$ ,  $\omega = \sqrt{2}$ ). 固有状態の重ね合わせ方は (117) 式の通りである。色の違う複数の系列は、 $M$  を変えた結果を表している。黒色の直線は古典系における結果をプロットしたものであり、この直線から各系列が乖離している点が、おおよその不可逆性の寿命と見なせる。ところどころで関係が逆転しているものの、全体的に見れば、 $M$  を増やすごとに長寿命化していく傾向が見て取れる。ただし、この結果は固有状態の組み合わせや、微小な摂動などに関してある程度揺らぐため、このような図からはっきりとした関係までは判断できない。より詳しく定量的な関係性までを解析するには、寿命を数値的に測定し、アンサンブル平均をとって  $M$  依存性を見る必要がある。

図 34 において、横軸が時刻、縦軸が MSD の値である。色違いで複数の線が重ねてプロットされ

ているが、それらが  $M$  の違いを表している。  $M$  の値は 1 ~ 1024 までの範囲で 4 倍ずつ変えてある。黒色の直線は古典系における挙動<sup>\*86</sup> であり、不可逆性の寿命  $\tau_{L(M)}$  は、この直線から各系列の線が乖離し始めている時点として大まかに見積もれる。この図において、  $M$  を増やすごとに、不可逆性の寿命が延びていく傾向が確かに表れている。この結果は、ランダムに選んでいる固有状態の違いや、ポテンシャルの僅かな摂動によって変化するし、  $M$  に対する寿命の長短関係が一部逆転しているような結果を得る事もよくあるが(実際に図 34 もそうである)、しかし  $M$  に対する全体的な増加傾向は概ね安定して見られる。

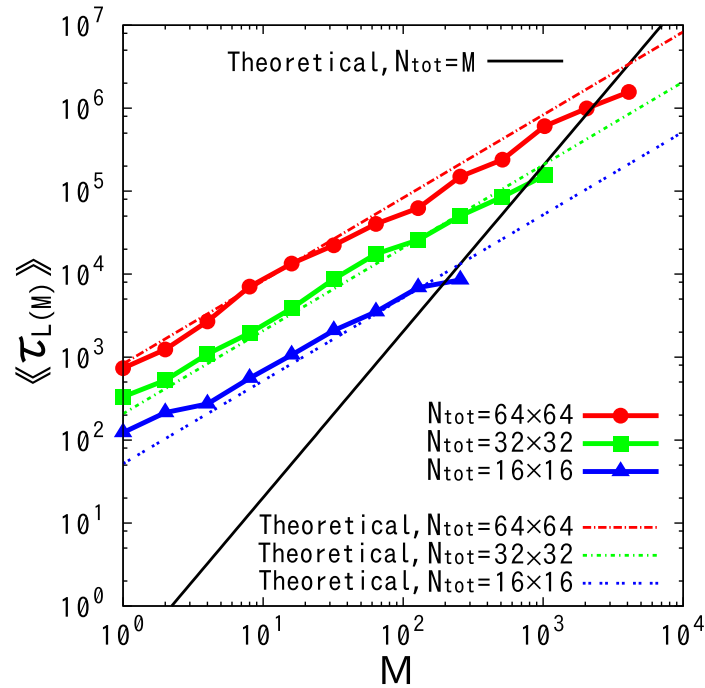


図 35 不可逆性の寿命のアンサンブル平均値における  $M$  依存性と  $\hbar$  依存性 ( $\omega = \sqrt{2} \neq 0$  の場合). (117) 式のように固有状態を乱雑に  $M$  個重ね合わせた初期状態  $|\psi_{(M)}\rangle$  において、MSD の時間発展から不可逆性の寿命  $\tau_{L(M)}$  を測定し、アンサンブル平均  $\langle\langle\dots\rangle\rangle$  をとった上で、座標  $(\langle\langle\tau_{L(M)}^{-1}\rangle\rangle, M)$  にマーカーをプロットして線で繋いだ。背後に破線で引いてある直線は、後で導出する理論値: (126) 式をプロットしたものである。色の違う複数の系列は、  $N_{\text{tot}}$  つまり  $\hbar = 2\pi/\sqrt{N_{\text{tot}}}$  の値を変えたものである。この結果から、不可逆性の寿命は、  $M$  と  $N_{\text{tot}}$  の両方に比例する事が見て取れる。また、系が示し得る最長の寿命は、  $M = N_{\text{tot}}$  の時 (つまり初期状態が全固有状態を含んでいる時) に実現され、それは  $N_{\text{tot}}^2$  に比例する事も分かる。これは従来見積もられてきたハイゼンベルグ時間 ( $\sim O(N_{\text{tot}})$ ) よりも逸脱して長い時間スケールであると言える。実際に  $M = N_{\text{tot}}$  に比例する線を、図中の黒色の線で示してある。係数は (126) 式の通りである。

続いて、統計的な  $M$  依存性の関数形を解析するため、前節と同様の方法でアンサンブル平均をとった寿命  $\langle\tau_{L(M)}\rangle$  を求め、横軸に  $M$  をとってプロットした結果を図 35 に示した。同図におい

<sup>\*86</sup> ここでの古典系の挙動は、固有状態の重ね合わせなどとは無関係であり、単純に理想極限における挙動の目安として、これまでと同様に求めたものである。



て、色の違いは  $\hbar = 2\pi / \sqrt{N_{\text{tot}}}$  の違いを表しており、上から順に  $N_{\text{tot}} = 64 \times 64, 32 \times 32, 16 \times 16$  における結果である。両対数軸における傾きが概ね 1 であることから、 $M$  と  $\langle\tau_{L(M)}\rangle$  は 1 次の比例関係にあるものと判断できる。また、 $N_{\text{tot}}$  が異なる系列を見比べると、図上でそれぞれ一定の間隔でずれている事が見て取れるが、対数軸で等差的に見えるという事は、実際の値は等比的という事である。その比を調べてみると、上の線は下の線を 4 倍した程度になっており、これは丁度  $N_{\text{tot}}$  の比に等しい。このことから、 $\langle\tau_{L(M)}\rangle$  は  $N_{\text{tot}}$  に関しても 1 次の比例関係にあると判断できる。以上の結果は

$$\langle\tau_{L(M)}\rangle \propto MN_{\text{tot}} \quad (118)$$

のようにまとめる事ができる。なお、この結果は単純な形であるが、しかし次に述べるような、非常に重要な事実を明らかにしており、発見的な意義が大きいものである<sup>\*87</sup>：即ち、(118) 式は  $M = N_{\text{tot}}$  のときに最大になるから、我々の系が示し得る最長の寿命は、 $N_{\text{tot}}^2$  に比例する。そしてこれは、この種の量子古典対応の時間スケールを見積もるのに従来よく用いられていた、ハイゼンベルグ時間 ( $\propto N_{\text{tot}}$ ) よりも逸脱して長いのである。この事については後の 3.4.3 節において再び議論する。

### 3.4.2 確率論による寿命の理論解析

本章のここまでの内容によって、寿命  $\tau_L$  が陽に依存していると思われるパラメータ  $M, N_{\text{tot}}, S^T$  (即ち TE) に対する関数形は、全て明らかになった。なお  $\varepsilon$  依存性や EE 依存性は、TE 依存性を介して陰に含まれていると見なす。無論、他にも未知のパラメータに対する陽な依存性があるかもしれないが、少なくとも本論文で見えてきた現象論的な振る舞いを記述するには、上記の 3 つのパラメータ依存性で全て足りる。そこで本節では、これらの結果を踏まえた上で、確率論的な視点から不可逆性の寿命を導出し、理論的な説明を行う。

出発点として、まず MSD の時間発展に対し、図 36 に示すような模式的なモデルを適用する。即ち MSD は、寿命までの時間  $\tau \leq \tau_L$  に渡って古典挙動を精密に追従した後、即座に飽和的な挙動に移行すると近似的にみなすのである。古典挙動を追従している間の MSD の時間発展は (80) 式から概ね  $\Delta J_\tau^2 \sim DA_{(\text{cl})}\tau$  のように近似できるから、飽和値  $\Delta J_\infty^2$  に達するまでの所要時間を考えれば、この模式的なモデルにおける不可逆性の寿命は

$$\tau_L \simeq \frac{\Delta J_\infty^2}{DA_{(\text{cl})}} \quad (119)$$

のように見積もれる。分母は定数であり、よって重要なのは  $\Delta J_\infty^2$  のスケールであるから、その見積もりに移ろう。 $\Delta J_\infty^2$  の理論値は (90) 式で与えられる。いまの場合は同式において  $|C_m|^2 = 1/M$  である。また、いま注目しているフルエンタングルメント領域においては、 $|\langle m|\hat{f}(\hat{I})|n\rangle|^2$  の値が、 $n$  に関してほぼ制約無く無秩序に分配されている事は既に述べた通りである。簡単のため、これを  $n$

<sup>\*87</sup> そもそも、双曲的な振る舞いのもとで限界までエンタングルしたような、いわば“最大限に乱雑な”固有状態の重ね合わせ方に対して、このようにはっきりとした違いが統計的に見られる事自体も、それなりに驚くべき結果である。

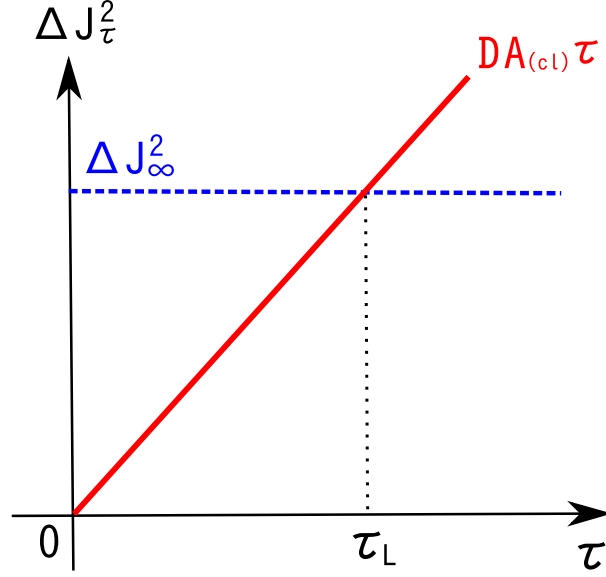


図 36 MSD の飽和値  $J_\infty$  から、不可逆性の寿命のおおよその値を見積もるための、理論モデルの模式図。恐らく図 21 と併せて見ると意図を把握しやすい。まず不可逆性の寿命までの時間  $\tau \leq \tau_L$  においては、MSD は理想的な古典挙動  $\Delta J_\tau^2 \simeq DA_{(cl)} \tau$  を完全に追従すると見なす。そして MSD が飽和値  $\Delta J_\infty^2$  の水準に達した瞬間を不可逆性の寿命  $\tau_L$  と見なし、その後は即座に飽和挙動へと移行するものと見なす。このような模式化を前提とすると、不可逆性の寿命は概ね  $\tau_L \simeq \Delta J_\infty^2 / (DA_{(cl)})$  程度であると見積もれる。

に関する等分配であると近似的に見なそう。  $|m\rangle$  および  $|n\rangle$  は  $I$  表示でほとんど乱雑な波束となっているであろうから、  $\sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2$  の値は古典カオス領域における  $|f(I)|^2$  の平均値と概ね一致する (実際に数値的に確かめてある)。これと (77) 式から  $|\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2 \sim \text{Cr}_{(cl)}(0)/N_{\text{tot}}$  程度であると見積もれる。よっていまの場合の  $\Delta J_\infty^2$  は：

$$\Delta J_\infty^2 \simeq \frac{D \text{Cr}_{(cl)}(0)}{4MN_{\text{tot}}} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \left[ \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\delta_{mn}^+}{2}\right)} + \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\delta_{mn}^-}{2}\right)} \right] \quad (120)$$

のように見積もれる。この式において  $\delta_{mn}^\pm$  以外は全て定数である。よって  $\Delta J_\infty^2$  がどの程度大きなスケールになるのかは、つまるところ  $\delta_{mn}^\pm$  がどの程度小さな値を取るのかという問題に帰着される。そこでここからは、和の中で最も小さい値  $\min(\delta_{mn}^\pm)$  を持つ項に注目し、そのスケールを見積もろう。

$\min(\delta_{mn}^\pm)$  の見積もりにあたって、まず以下のような仮定を置く： $\delta_{mn}^\pm$  の値は  $[0, 2\pi)$  の範囲で完全に乱雑かつ独立に散らばっているものとする。この仮説は、 $\omega = 0$  においては順位間のレベル反発の寄与が表面化して破綻するが、しかしそうでない一般の  $\omega \neq 0$  の場合においては、それなりに妥当である事を数値的に確認してある。まずは  $\delta_{mn}^+$  のみを対象とし、さらに  $m$  を固定して考える。表記を簡潔にするため、 $\{\delta_{m1}^+, \delta_{m2}^+, \dots, \delta_{mN_{\text{tot}}}^+\}$  を  $\{w_1, w_2, \dots, w_{N_{\text{tot}}}\}$  と置こう。いまの仮定の下では、これらは  $[0, 2\pi)$  の範囲の一様乱数である。これらの中から適当な  $w_i$  に注目し、その値を  $w$

と置く．選んだ  $w$  がどのような値であるかは， $[0, 2\pi)$  の範囲で全く一様な確率である．しかしそれが  $\{w_1, \dots, w_{N_{\text{tot}}}\}$  の中で最小の値であるためには，他の任意の  $w_j$  が  $[w, 2\pi - w]$  の範囲に値をとらなければならない．もう一つ適当に選んだ  $w_j$  ( $j \neq i$ ) がそのような範囲内に値をとる確率は等しく  $(2\pi - 2w)/2\pi$  である．この様子を表す模式図は以下の図 37 に示した．

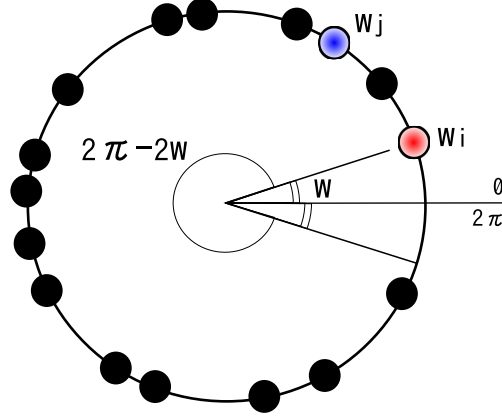


図 37  $\omega \neq 0$  の場合における， $w_j$  の模式図． $\delta_{mn}^{\pm}$  が  $[0, 2\pi)$  の範囲で完全に独立かつな乱雑に散らばっていると見なした上で， $m$  を適当に固定し，表記を簡単にするために  $w_j = \delta_{mj}^+$  (もしくは  $\delta_{mj}^-$ ) と置く．これらを一様乱数として扱えるものと仮定すると，その最小値が  $w$  程度の値をとる確率は  $p(w) \sim (N_{\text{tot}}/\pi)e^{-(N_{\text{tot}}/\pi)w}$  のように見積もれる．ただし，これはあくまでも 1 つに固定した  $m$  の条件下での見積もりである．そこから全ての  $m$  についての見積もりに拡張すると，最終的に (124) 式が得られる．

$w$  が最小，即ち全ての  $w_j$  が  $[w, 2\pi - w]$  の範囲内に割り込まない確率は  $(2\pi - 2w)^{N_{\text{tot}}-1}/(2\pi)^{N_{\text{tot}}}$  である．同じ事が  $N_{\text{tot}}$  通りの  $w_i$  の選択について言えるため，結局のところ最小値が  $w$  程度である確率はこの  $N_{\text{tot}}$  倍になる．ところで，そもそも (120) 式に寄与する  $\sin^2(\delta_{mn}^{\pm}/2)$  のスケールを見積もるという目的においては，集合  $\{w_1, \dots, w_{N_{\text{tot}}}\}$  の最小値と同様に，集合  $\{2\pi - w_1, \dots, 2\pi - w_{N_{\text{tot}}}\}$  の最小値も同程度の影響を与える．この補正のために，後者の集合についても適当に選んだ  $2\pi - w_i$  を  $w$  と置いて，それがまた最小値である確率を加味すると<sup>\*88</sup>，最終的に最小値が  $w$  程度の値をとる確率  $p(w)$  は 2 倍されて

$$p(w) = \frac{2N_{\text{tot}}(2\pi - 2w)^{N_{\text{tot}}-1}}{(2\pi)^{N_{\text{tot}}}} \quad (121)$$

$$\sim \frac{N_{\text{tot}}}{\pi} e^{-\frac{N_{\text{tot}}}{\pi}w} \quad (N_{\text{tot}} \text{ が十分大きい場合}) \quad (122)$$

のように見積もれる．

ここまでは，ある固定した  $m$  について議論してきたが，続いて (120) 式の  $m$  についての和の寄与を見積もう．我々の最初の仮定の下では，異なる  $m$  における  $\{w_i = \delta_{mi}^+ \mid 1 \leq i \leq N_{\text{tot}}\}$  の集合

<sup>\*88</sup> このあたりの見積もり方をどうするかによって数値因子は多少異なってくるし，さらに我々は  $\sin^2(\delta_{mn}^{\pm}/2)$  の最小項のみの寄与によって (120) 式のスケールを見積もうとしているが，実際にはそれ以外の項もある程度は寄与し，それもまた最終結果の数値因子を変化させるはずである．しかし我々がいま最も知りたいのは  $M, N_{\text{tot}}$  依存性の関数形であるから，細かい数値因子の見積もりはあまり気にしないものとする．

同士は、それぞれ互いに独立な乱数の組であると見なせる。その中で適当な  $m$  における  $\{w_i\}$  を選んで最小値を求めると、それが  $w$  程度である確率は  $p(w)$  であり、それは  $m$  の違いについて  $M$  通りある。さらに他のあらゆる  $m$  における  $\{w_i\}$  が、それより小さい範囲に割り込まない確率を考えれば、最終的に  $\delta_{mn}^+$  の最初値が  $w$  程度である確率  $P(w)$  は：

$$P(w) = Mp(w) \left[ \int_w^\infty p(w') dw' \right]^{M-1} \quad (123)$$

$$\sim \frac{MN_{\text{tot}}}{\pi} e^{-\frac{MN_{\text{tot}}}{\pi} w} \quad (124)$$

のように見積もれる<sup>\*89</sup>。よって  $w$  は平均的に  $\pi/MN_{\text{tot}}$  程度の値をとり、従って  $\sin^2(\delta_{mn}^+/2)$  の最小項は  $\pi^2/(4M^2N_{\text{tot}}^2)$  程度の値をとるであろう。以上の議論は全く同様に  $\sin^2(\delta_{mn}^-/2)$  についても行えるから、その最小項も同様に  $\pi^2/(4M^2N_{\text{tot}}^2)$  程度と見なそう。この結果と (120) 式および (119) 式から、不可逆性の寿命は

$$\tau_L \sim \frac{2\text{Cr}_{(\text{cl})}(0)}{\pi^2 A_{(\text{cl})}} MN_{\text{tot}} \quad (125)$$

$$= \frac{2}{\pi^2} MN_{\text{tot}} \quad (\text{我々のモデルの場合}) \quad (126)$$

程度になるであろう。分数の部分は全て定数であるが、それらは線形振動子のパラメータに依存しておらず、被測定対象である KR 自身のパラメータによって寿命が記述されている事を強調しておく<sup>\*90</sup>。以上の結果は、数値実験によって得られた (118) 式とよく整合している。さらに (126) 式の値を、数値実験結果である図 35 に破線で重ねて示してあるが、両者の結果は概ねよく一致している。ただし、我々が本節で行った見積もりでは、細かい数値因子にはあまりこだわっておらず、さらに数値実験結果の数値因子も  $r = 0.5$  などの測定パラメータ (3.2.3 節参照) を変える事で多少前後する事に留意しておく必要がある。よって、数値因子の一致はある程度の偶然を含んでいると判断するのが妥当であるが、しかしながら、少なくとも実験値と理論値が互いに全く乖離したオーダーにはならなそうであるから、本節の議論の正当性に対して一定の支持を与えている。

以上のようにフルエンタングルメント領域における寿命の理論を得た上で、再び  $\varepsilon \sim \varepsilon^*$  の転移領域を振り返りたい。そこでは  $|\langle m|\hat{f}(\mathbf{I})|n\rangle|^2$  の値の分配に制約が生じ、その散らばりの度合いを表すエントロピーとして TE を導入した。仮に  $|\langle m|\hat{f}(\mathbf{I})|n\rangle|^2$  の値が  $B_m$  個の  $n$  に対してのみ等分配されている状況においては、 $S_m^T = \log B_m$  となる事を踏まえて、“遷移数”  $B_m$  を以下のように定義する：

$$B_m \equiv e^{S_m^T} \quad (127)$$

そして多少強引ではあるが、逆に TE の値が  $S_m^T$  であるとき、 $|\langle m|\hat{f}(\mathbf{I})|n\rangle|^2$  の値は概ね  $B_m$  通りの  $n$  に分配されており、他の  $n$  については無視できるほど小さい値をとっていると近似的に見なそ

<sup>\*89</sup> 実際には  $w$  は  $\infty$  までの値を取り得ないが、しかし  $p(w)$  は指数的に落ちて  $w \gg 1$  のどこに範囲をとってもあまり影響しないため、簡単のためこのような範囲で積分している。

<sup>\*90</sup> ただし後で述べる通り、この結果は  $\omega \neq 0$  を前提とした場合におけるものであり、 $\omega = 0$  の場合は全く別に扱う必要がある。その意味では、寿命は線形振動子の  $\omega$  に限定的ではあるが依存しているとも言える。しかしながら、我々は“ $\omega$  でフーリエ変換された相関関数が示す不可逆性の寿命”を測っているのだと思えば、 $\omega$  もまた被測定対象のパラメータに含まれると見なす事もできる。

う．転移領域においては，TE の値は固有状態  $|m\rangle$  ごとに大きく異なるが，しかし同程度の TE を持つ固有状態を  $M$  個選んで重ね合わせた状況を考えて，寿命はどの程度になるであろうか？これはまさに 3.3.4 節において数値実験を行ったのと同じ状況である．重ね合わせる固有状態における大体の TE の値を  $S^T$ ，遷移数を  $B$  としよう．このような状況においては，先述の  $\{w_i\}$  集合の要素数を  $N_{\text{tot}}$  個から  $B$  個に減らした  $\{w_1, w_2, \dots, w_B\}$  に対して，先と全く同様の議論を行えば，(125) 式は  $N_{\text{tot}}$  が  $B$  に置き換わって最終的に

$$\tau_L \sim \frac{2\text{Cr}_{(\text{cl})}(0)}{\pi^2 A_{(\text{cl})}} M e^{S^T} \quad (128)$$

$$= \frac{2}{\pi^2} M e^{S^T} \quad (\text{我々のモデルの場合}) \quad (129)$$

のように補正される．フルエンタングルメント領域においては全固有状態が遷移可能になるから  $B \sim N_{\text{tot}}$  となり，(128) 式は (125) 式と等しく<sup>\*91</sup>になる．以上の議論はやや強引な印象を残すものかもしれないし，係数部の数値因子や，細かいパラメータ依存性のずれなどについては，より緻密な見積もりによる補正の余地があると思われる．しかしながら，図 33 に黒い直線で引いたのは実は (129) 式そのものであり，数値実験の結果と概ね整合している．よってここで行った議論は，転移領域における寿命変化の本質を，少なくともオーダーレベルで説明する事には成功していると判断できる．そして 3.3.4 節の議論を振り返れば，(129) 式には， $S^T$  を介して  $\varepsilon$  依存性も陰に含まれていると言える．よって (129) 式は，本論文において一貫して追求してきた，量子系が示す不可逆性と，自由度の結合との間の関連性を定式化した，一応の終着点であると言える．

### 3.4.3 $M$ 依存性の消失とハイゼンベルグ時間

この論文における本筋の議論は，前節までで概ね完了したと言えるが，しかしその内容の一般性を主張するためには，解決しなければならない重要な問題が残っている．具体的に問題となるのは，我々の結果から導かれた不可逆性の寿命が，この種の量子-古典対応において従来見積もられてきた時間スケールと比べて，あまりにも長過ぎるという事である．我々の結果によれば，不可逆性の寿命は，初期状態が含む固有状態の数に伴って長寿命化する．さらに，寿命は全固有状態が最大限にエンタングルした状況において最も長くなる．従って，系が示し得る最長の寿命を限界寿命  $\max(\tau_L)$  と呼ぶ事にすると，それは (125) 式において  $M = N_{\text{tot}}$  のときに実現され，その  $N_{\text{tot}}$  依存性は

$$\max(\tau_L) \propto N_{\text{tot}}^2 \quad (130)$$

であると言える．(59) 式のような一般的な初期状態も，概ね全ての固有状態を含むから，(130) 式と同程度のオーダーの寿命を持つと言える．一方で，我々が扱ってきた拡散現象は，KR の自己相関の喪失に起因するが，それが持続すると見なせる時間スケールを見積もるのに，ハイゼンベルグ

<sup>\*91</sup> 実際にはフルエンタングルメント領域においても，遷移確率の分配は完全に一様ではなく，揺らぎがあるから， $S_m^T$  の実測値は  $\log N_{\text{tot}}$  よりも若干小さくなる．よって両式の値は数値的に完全に一致するわけではない事に注意が必要である (近い値にはなる)．

時間 [10] が従来よく用いられてきた。いまの我々の系にハイゼンベルグ時間を当てはると、それは

$$\tau_H \sim N_{\text{tot}} \quad (131)$$

程度のオーダーであると見積もれる (細かい係数は除く)。従って我々の系は、従来見積もられていた相関喪失の時間スケールと比べて、逸脱して長い時間に渡って不可逆的な挙動を示していた事になる。そのため、本論文で扱ってきた結果は、一見すると過去の研究と整合しないように見えるのである。本節ではこの問題について議論し、最終的に我々の研究がハイゼンベルグ時間と矛盾せず、むしろ従来よりも拡張された形で、量子不可逆性の時間スケールの見積もりを与える理論となっている事を示す。

まず我々の系において、拡散の揺動力となっている (69) 式に再び注目しよう。分数にまとめたある係数部については、MSD の値を時間によらずスケールリングするだけであるから<sup>\*92</sup>、不可逆性の寿命には影響しないため気にしない。重要なのは係数部を除いた  $\hat{f}_\tau \sin(\hat{\phi} + \tau\omega T + \omega T/2)$  の部分で、ここには KR の寄与  $\hat{f}_\tau$  の他に、線形振動子の角振動数  $\omega$  を含む振動的な寄与がかかっている。ここから、我々が測定した不可逆性の寿命は、 $\omega$  についてのみ、KR 以外のパラメータに陽に依存する余地が残っていると判断できる。この  $\omega$  は、MSD の時刻ごとの増分 (係数部は無視する) においては (75) 式の形で寄与する。そしてこの形はちょうど KR の自己相関関数のフーリエ変換<sup>\*93</sup>であると見なせる。従って我々はこれまで、KR の自己相関の累積量が示す不可逆性ではなく、自己相関のフーリエ変換が示す不可逆性を測定していたと解釈する事ができる。そして  $\omega = 0$  の場合においてのみ、KR の自己相関の累積量そのものが示す不可逆性を測定している事になる。従って、相関喪失の時間スケールに関連しているハイゼンベルグ時間と比べるには、より相関喪失の寄与が直接的に表れる  $\omega = 0$  での寿命を測定すべきである。実際に 3.4.1 節の図 35 と全く同じ条件において、 $\omega = 0$  として測定した不可逆性の寿命を図 38 に示した。

図 38 において、横軸は初期状態 ((117) 式) を構成している固有状態の数  $M$  であり、縦軸が不可逆性の寿命のアンサンブル平均値  $\langle \tau_L \rangle$  である。色が異なる複数の系列は、 $\hbar$  つまり  $N_{\text{tot}}$  の値の違いを表しており、上からそれぞれ  $N_{\text{tot}} = 64 \times 64$  (赤色)、 $N_{\text{tot}} = 32 \times 32$  (緑色)、 $N_{\text{tot}} = 16 \times 16$  (青色) における結果である。同図から、 $M$  が少ない領域においてのみ、寿命に若干の  $M$  依存性が見られるものの、しかし図 35 と比べると、全体として  $M$  依存性がほぼ消失してしまっている事が見て取れる。また、系列間での寿命の比率を調べると、概ね 4 倍ずつ異なっており、これは系列間における  $N_{\text{tot}}$  の比率と同じである。従ってこの結果は、

$$\max(\tau_L) \Big|_{\omega=0} \propto N_{\text{tot}} \quad (132)$$

のようにまとめられる。これはまさに (131) 式のハイゼンベルグ時間と同じ  $N_{\text{tot}}$  依存性の形をしている。

<sup>\*92</sup> ただし  $\eta$  が十分小さく、KR と線形振動子がエンタングルしない範囲においてである。

<sup>\*93</sup> 厳密には離散コサイン変換の形になっているが、 $\text{Cr}_\tau(s)$  は  $s$  について偶関数であるから離散フーリエ変換と等しい。

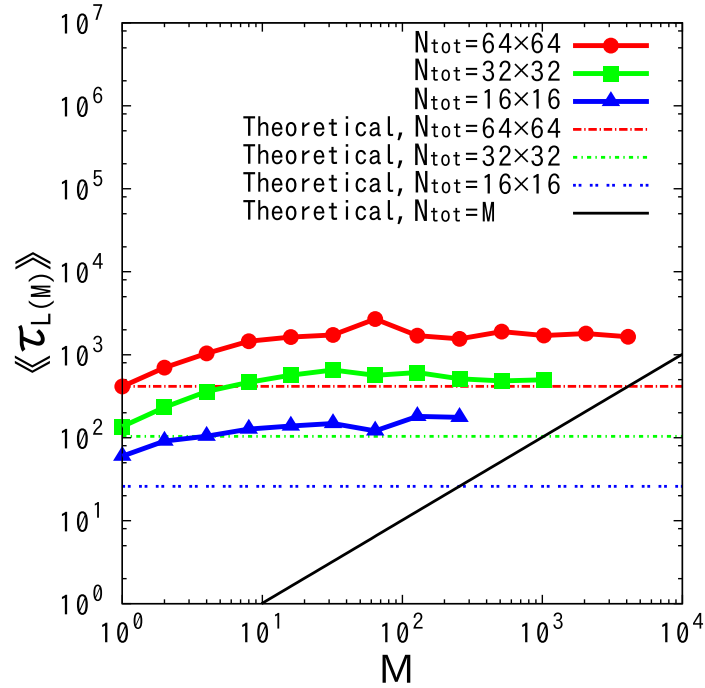


図 38 不可逆性の寿命のアンサンブル平均値における  $M$  依存性と  $\hbar$  依存性 ( $\omega = 0$  の場合).  $\omega$  の値が異なる以外は、図 35 と全く同様に作成した図である. 破線で引いてある直線は、後で見積もる理論値: (137) 式をプロットしたものであり、黒色の実線はそれにおいて  $N_{\text{tot}} = M$  としたものである. この結果から、 $\omega = 0$  の場合においては、不可逆性の寿命は  $M$  にほとんど依存しなくなり、 $N_{\text{tot}}$  にのみ比例するようになる事が分かる. この寿命の  $N_{\text{tot}}$  依存性は、従来見積もられてきたハイゼンベルグ時間 ( $\sim O(N_{\text{tot}})$ ) と整合している. 即ち、図 35 の結果も併せて考えると、我々の系において不可逆挙動が持続する時間スケールは、 $\omega = 0$  の場合においてのみ、ハイゼンベルグ時間による見積もりが成立すると判断できる.

この結果について議論する前に、前節と同様の確率論的な見積もりによって、(132) 式の  $N_{\text{tot}}$  依存性が理論的にも導かれる事を示しておく. この見積もりは前節で扱った  $\omega \neq 0$  の場合よりも容易に行える. 基本的な方針は前節と同様、(120) 式において最も寄与する、 $\sin^2(\delta_{mn}^\pm/2)$  の最小項のスケールによって見積もる. ここでいまの場合は  $\omega = 0$  であるから、

$$\delta_{mn}^+ = \delta_{mn}^- \quad (133)$$

$$= \gamma_m - \gamma_n \quad (134)$$

である事に注意しよう.  $\gamma_m$  は固有状態における eigen angle:  $\hat{U}_{\text{KR}}|m\rangle = e^{-i\gamma_m}|m\rangle$  であるが、双曲的な量子自由度が相互作用すると準位間のレベル反発が生じ、その最近接距離分布がウィグナー分布となる事がよく知られている. その平均的な隣接距離は我々の場合において  $2\pi/N_{\text{tot}}$  程度である. この様子を表す模式図は図 39 に示した. このように、 $\gamma_m$  と  $\gamma_n$  との間の間隔には、本来は明確な制約が存在するのであるが、しかし前節においてはその反発距離よりも十分に大きい  $\omega T$  ( $\sim O(1)$ ) の項

が加わる事で、この事は表面化しなかった<sup>\*94</sup>。ところが  $\omega = 0$  の場合には、 $\{\gamma_m\}$  集合の間隔そのものが直接的に (120) 式に寄与するため、レベル反発こそが寿命の決定において最も重要となる。

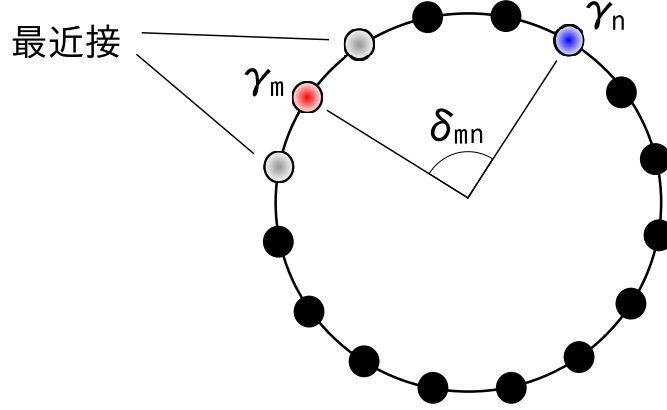


図 39 レベル反発によって互いに退け合う eigen angle の組  $\{\gamma_m\}$ 、および  $\omega = 0$  の場合における  $\delta_{mn} = \gamma_m - \gamma_n$  の模式図。  $\delta_{mn}$  の最小値は明らかに  $m = n$  の場合における値 0 であるが、その項は我々の  $\hat{f}(\hat{I}_A)$  の設定によって運動に寄与しない ( $\omega = 0$  の場合にはそうしないと拡散的ではなく弾道的な MSD の挙動が生じる)。よってそれを除くと、 $m$  を適当に固定したとき、実質的な  $\delta_{mn}$  の最小値は、eigen angle の最近接項からもたらされる。そしてそれは  $m$  を変えても概ね同程度であると見積もれるが、この事が  $M$  依存性の消失における直接の原因であると言える。

ところで一般の場合において、 $\delta_{mn}$  は明らかに  $m = n$  において最小値 0 をとる。そうであれば  $\Delta J_\infty^2$  は収束値を持たないように思えるが、これはどういう事であろうか？ これには  $\hat{f}(\hat{I}_A)$  の関数形の選択が重要な意味を持っている。実際に  $\hat{f}(\hat{I}_A)$  が適当な形の場合、 $\omega \neq 0$  の場合においては、問題無くこれまで議論した通りの拡散が見られるのであるが、しかし  $\omega \neq 0$  の場合においては、MSD の時間発展は弾道的 (ballistic) に発散していく。従って  $\omega = 0$  の場合においては、これまでのような我々のやり方で、不可逆性の寿命を定義ないし測定する事が困難になるのである<sup>\*95</sup>。そこで固有状態の空間的な対称性を考慮した上で  $\hat{f}(\hat{I}_A)$  の関数形をうまく選ぶと、 $m = n$  の場合において  $|m|\hat{f}(\hat{I}_A)|n\rangle$  の値を 0 にでき、よって  $\delta_{m=n} = 0$  の項は (90) 式において  $\Delta J_\infty^2$  の値に寄与なくなるため、 $\omega = 0$  の条件下においても MSD は拡散的な時間発展を示すようになる。実際に我々が用いている  $\hat{f}(\hat{I}_A)$  はそのように選んでいる<sup>\*96</sup>。さて、このような事を前提とした上で、図 39 において、ある  $m$  を固定して考えた際、 $m \neq n$  で最も  $\delta_{mn}$  が小さくなる  $\gamma_n$  は、明らかに  $\gamma_m$  に

<sup>\*94</sup>  $\gamma_m$  が、 $\omega T$  ( $\sim O(1)$ ) だけ離れた  $\gamma_n$  に対して、一定以上近づけないという制約は無いからである。ただし、それもあくまでも仮定であって、実際には  $\omega \neq 0$  の場合でも  $\delta_{mn}^*$  に何かしらの制約が存在するかもしれないが、しかし前節の結果を踏まえれば、少なくとも我々の問題においては無視して計算しても妥当なようである。なお、 $\omega$  が厳密に 0 でなくても非常に小さく、 $\omega T$  が  $\{\gamma_m\}$  集合の平均間隔と同程度以下のオーダーになると、レベル反発の寄与が無視できなくなり、影響が生じてくる事が予想される。

<sup>\*95</sup> ただし発散していく前の初期において、MSD が拡散的な時間発展を示す時間スケールは存在し、それは  $O(N_{\text{tot}})$  のオーダーである [1]。ただしここで行うような  $\Delta J_\infty^2$  の収束値に基づいた形での見積もりは適用できない事に留意する必要がある。

<sup>\*96</sup> このような事と条件設定は、Fidelity の領域においてはよく知られているようである。



隣接しているものである (同程度の大きさのものが両隣に 2 つ存在する) <sup>\*97</sup>. これらの大きさは  $\sin^2(\delta_{mn}^\pm/2) \sim \pi^2/N_{\text{tot}}^2$  程度であると見積もれる. これら 2 つが和の中で最も支配的な寄与をすると判断すると, (120) 式の  $n$  に関する和は:

$$\sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\delta_{mn}^\pm}{2}\right)} \sim \frac{2N_{\text{tot}}^2}{\pi^2} \quad (135)$$

程度であると見積もれる. 実際には  $\gamma_m$  の最近接項以外もある程度は寄与するため, この見積もりは数倍程度のずれを含んでいるであろうが, いまは  $N_{\text{tot}}$  依存性の導出が目的であるから, 細かい数値因子はあまり気にしないものとする. さて, 固定していた  $m$  を変えても, レベル反発によって最近接距離があまり変わらないと仮定すれば, (135) 式の値は  $m$  によらず概ね同程度となる事が見込める<sup>\*98</sup>. 従って (135) 式の値を  $m$  について和をとれば, 結果はその  $M$  倍程度になるであろう. 以上の結果を (119)-(120) 式に代入すれば,  $\omega = 0$  の場合における不可逆性の寿命は最終的に

$$\tau_L \Big|_{\omega=0} \sim \frac{\text{Cr}_{(\text{cl})}(0)}{\pi^2 A_{(\text{cl})}} N_{\text{tot}} \quad (136)$$

$$= \frac{1}{\pi^2} N_{\text{tot}} \quad (\text{我々のモデルの場合}) \quad (137)$$

のように見積もれる. この (137) 式の値を図 38 において破線で示してあるが, 数倍程度の数値因子のずれはあるものの, 数値実験結果とオーダーや概形は一致していると言えるであろう. よって, 理論上でも数値実験上でも, やはり  $\omega = 0$  の場合においては, 不可逆性の寿命は  $O(N_{\text{tot}})$  程度のオーダーになるものと結論付けられる.

従って, KR の振る舞いの自己相関が, この  $\omega = 0$  の場合のように直接的な形で寄与する量子拡散現象においては, その量子-古典対応の時間スケールは, やはり従来のようにハイゼンベルグ時間 ( $\sim N_{\text{tot}}$ ) で見積もっても妥当であると言える. 従って, 我々の定義における不可逆性の寿命と, その測定モデルは, ハイゼンベルグ時間とよく整合しており, それを前提とする過去研究とも矛盾しないものである. ところが  $\omega \neq 0$  の場合のように, KR の振る舞いの自己相関に何らかの振動的な寄与が加わって, (75) 式のようにフーリエ変換の形で寄与する量子拡散現象においては, その量子-古典対応の時間スケールは劇的に延び, ハイゼンベルグ時間の 2 乗のオーダーとなると言える. ところで, 現実の世界での微視的な相互作用において,  $\omega = 0$  と  $\omega \neq 0$  の場合は, どちらの方がより一般的であろうか? 微視的スケールの自由度は, 多くの場合, 何らかの振動的な振る舞いを伴っているであろうし, また外場も厳密に静的ではないはずである. よって自由度間の相互作用において, 何らかの 0 でない周波数による振動的な寄与が含まれるのは, 極めて自然である. 逆に, 何の

<sup>\*97</sup>  $\omega \neq 0$  の場合において問題となるのは「 $\omega T$  だけ足し引きした距離においてどれだけ近いか」であるから,  $\delta_{mn}^\pm$  を最小化する  $\gamma_n$  は一般に  $\gamma_m$  の両隣にはならない. そこで図 39 において  $\{\gamma_n\}$  の集合全体に  $\omega \neq 0$  を足した (引いた) ものを  $\{w_n\}$  と置いて並べた模式図が, 前節で用いた図 37 である. それぞれの場合に合わせてそれぞれの図を参照する必要がある, 混同には注意が必要である.

<sup>\*98</sup> この事が,  $M$  依存性が消失する直接的な原因であると考えられる. ただし実際の図 38 では,  $M$  の小さい領域において若干の  $M$  依存性が表れたため, さすがに数個程度は  $m$  を変えて探した方が, より小さい  $\delta_{mn}^\pm$  が見つかる確率が多少は高まるものと思われる. それは最近接距離のばらつきを想定するとむしろ自然である.

振動的な寄与も含まれず、自由度間が直接的に相互作用するという状況は非常に限定的と言えるであろう。よって我々は、 $\omega = 0$  よりも  $\omega \neq 0$  の状況の方がより一般的であり、現実の世界における微視的相互作用の実情をより反映しているものと考え、従ってここでの結果を踏まえれば、現実における少数自由度量子系の世界は、少なくとも従来見積もられていたよりも、ずっと散逸的かつ不可逆的である事が示唆されるものである。

### 3.5 本章の結論

最後に、本論文全体の結論へと進む前に、本章の内容において得られた結果を、ここで一度整理してまとめておく。

本章においては、有限の閉じた相空間領域を持つ量子カオス系の振る舞いが示し得る不可逆性の持続時間に“不可逆性の寿命”という概念を当てはめ、それを定量的に測定するための一般的な方法を提案し、実際に計算機上の模擬実験によって測定を実行して統計的な解析を行った。まずは前の第2章で見たような、2自由度の結合量子撃力回転子(KR)系において生じる、結合強度 $\varepsilon$ に対する閾値的な不可逆性発生の機構を解明するため、自由度間のもつれ合い(エンタングルメント)と不可逆性の寿命との間の関連性を重点的に解析した。その結果、一般的な初期状態における不可逆性の寿命と、撃力回転子系の時間発展演算子における全固有状態の平均的なエンタングルメントとの間に、統計的に明らかな正の相関が観測された。また、固有状態のもつれ合いが成長する領域において、個々の固有状態ごとの異常な揺らぎが観測され、この閾値現象は臨界を伴うものではないものの、あたかも相転移様の機構を背後に持つ事が示唆される結果となった。さらに、個々の固有状態においても不可逆性の寿命が内在しており、それはやはり自由度間のエンタングルメントと機構的に密接に関連していて、統計的にはエンタングルするほど長くなる事が導かれた。実際に両者の間には、遷移確率エントロピーという指標を介して間接的にはあるが、統計的に明確な対応関係が存在する事が確認された。さらに全く予想し得なかった結果として、一般的な初期状態における不可逆性の寿命が、その状態を構成する固有状態の数に概ね比例する事が判明した。この事から、我々が扱ったような量子カオス系が、一般に従来見積もられてきた時間(ハイゼンベルグ時間)よりも遥かに長時間に渡って不可逆性を示し得る事が明らかになった。ただし、その結果は特定の条件下においてのみハイゼンベルグ時間と一致する事も示され、従来の見積もりとの間の整合性も確保されるものであった。以上の結果は、確率論的な理論解析によっても説明され、導かれた理論値は数値実験結果ともよく整合する事が確認された。



## 4 結論

最後に、各章における結論 (2.4 節および 3.5 節) を総合的に俯瞰した上で、本博士論文全体としての結論を取りまとめたい。まず背景として、我々の世界における自然現象は不可逆性に満ちており、その理由はふつう、日常的スケールの系を構成する膨大な数の微視的自由度が、乱雑に相互作用する事を前提として説明される場合が多い。一方で、自由度の数を少なくしていった極限においては系のカオス性も重要である。古典極限でカオス性を示すような量子系の振る舞いは、古典カオス系の不可逆的な挙動を模倣する事が知られているが、しかしながら量子拡散の動的局在などに代表されるように量子-古典対応が破綻をきたす現象も存在し、両者の間を繋ぐ研究が行われている。

無限に広い空間を持つ系における量子拡散の局在・非局在転移や臨界現象などは既に研究されているが、そのような場合においては、系の固有状態の空間的な性質が重要である。一方で我々は、量子カオスの時間的な振る舞いに最大限に注目するため、有限の狭い相空間を持つ量子カオス系を用いて、それが古典カオスの雑音的な振る舞いをどこまで模倣し得るかという観点から研究を行った。特に、そのような量子カオス系を 2 自由度結合する事によって生じる変化の解析に重点を置いた。まず第 2 章においては、そのような結合量子カオス系に雑音源としての機能を担わせる事で、周期外力と調和振動子との間に不可逆的なエネルギー輸送現象を生じさせる撃力量子ダンパー (KQD) モデルを提案し、その現象を我々の身近な概念である“熱”になぞらえつつ解析した。その結果、量子カオス自由度同士の結合強度がある閾値を超えると、定常的なエネルギー輸送や統計的な熱分布といった、古典系と同様の不可逆挙動が長時間に渡って高い精度で実現された。続く第 3 章においては、そのような不可逆的な現象が持続する時間スケールに“不可逆性の寿命”の概念を当てはめ、それを定量的に測定するための一般的な方法を提案し、まず数値実験による定量的な解析を行ったところ、やはり量子カオス自由度同士の結合強度に関して閾値的かつ劇的に長寿命化する現象が観測された。その機構を解析する上で、量子カオス系の時間発展演算子における個々の固有状態そのものに不可逆性の寿命が内在しており、それと自由度間のもつれ合い (エンタングルメント) との間には密接な機構的関連性が存在して、具体的にはエンタングルするほど統計的に寿命が長くなる事が判明した。さらに、一般的な初期状態が示す不可逆性の寿命は、それを構成する固有状態の数が多いほど長くなり、そして系が示し得る最長の寿命は、従来の見積もりから予想される時間スケール (ハイゼンベルグ時間) よりも遥かに長い事が明らかとなった。

ところで、自然の系を構成する微視的自由度の振る舞いについて考えると、相空間上の運動可能領域が限られているという状況は決して特別なものではなく、むしろ一般的であると言える。さらに、その有限の領域内において、外部から揺さぶられつつ乱雑に振る舞うという状況も恐らく非常に一般的である。本研究から得られた結果は、そのような微視的自由度が 2 つ結合する瞬間において、どのような機構によって量子的な振る舞いに不可逆性が生み出され、またそれがどの程度まで理想的あるいは不完全な側面を持つのかという問いに対して、一定の描像を与えてくれるものである。ただし現時点で得られたのは、自由度がたった 2 つという、最も単純な場合での結果である。さらに自由度を 3 つや 4 つ、あるいは 10 個、100 個と増やしていく過程において、量子不可逆性がどのように変化していくのかは依然としてわからないが、将来的な解明が期待されるものである。



## 5 付録

### 5.1 展望および付録について

目下、最大限の関心事は、本研究で扱ったような有限の相空間領域をもつ量子 KR 系の自由度を 3 個もしくは 4 個結合した場合に、それが示す不可逆性にどのような変化が生じるかである。たとえば我々は本研究において、エンタングルメントエントロピーなどの量に異常揺らぎの発生を伴う、あたかも相転移様の閾値現象を“不可逆転移”と呼んで解析してきたが、しかしそれは臨界を伴うものではなく、結合強度  $\varepsilon$  について数桁に渡って発生する幅広いものであった。自由度の数を増やした場合に、果たしてどこかで臨界が発生し、“真の相転移”が観測されるであろうか？ 我々が見てきた不可逆性の“転移”は、機構的には固有状態における自由度間エンタングルメントの“転移”に起因するものであったが、そのさらに背後にある機構は依然として不明であるので、自由度を増やした場合にどのような変化が起こっても不思議ではないと言える。

一方で、本研究で行ったように、全ての固有状態を数値的に求めて機構的变化を直接調べるようなやり方は、恐らく 3 自由度以上においては計算機上の都合によって相当な困難に直面する事が予想される。まず根本的な障壁となるのは、固有状態を数値的な対角化法によって求めるための行列サイズが、自由度数に関して累乗的に大きくなる事である。特に、計算機のメモリとして現在主流である DRAM の微細化は限界に達しつつあるため、現在までの増加ペースのまま今後も容量が増えていく事はあまり期待できなくなりつつある。次世代のいくつかの形式のメモリが実用化されて十分に普及する頃には事情が変わるかもしれないが、それにはまだ 10 年単位で待たなければならないかもしれない。さらに対角化の計算コストは、我々が必要とする一般複素対角化においては、アルゴリズムにもよるが行列サイズの 3 乗以上を覚悟しなければならない。よって総合的に鑑みてあまり現実的では無いと言える。

従って 3 自由度以上においては、やはり波束を時間発展させつつ挙動を解析する、即ち時間ドメインによる解析が主な手段になると考えられる。その場合も、計算コストや要求メモリ容量は、やはり自由度数に関して累乗的に増えてしまうが、しかし全ての固有状態を求めるために必要な水準よりはずっと現実的な範囲におさまる。また、近年は CPU の演算性能の向上が一応の落ち着きを見せつつある一方で、GPU のようなベクトル形式のプロセッサの演算性能が夢のような向上を続けている。そして本研究で行ったような数値計算において必要となるのは、大半が配列の独立な要素に対する演算のループであるが、それはまさにベクトル形式のプロセッサが得意とするものである。さらに波束の時間発展に必要なフーリエ変換も、GPU による高速処理が可能である。よって少なくとも 3 自由度の解析までは現時点でも現実的に行える余地が見えるものであるし、今後の性能向上次第では 4 自由度の解析も現実的な領域に入ってくるかもしれないものである。

本章では、実際に本研究で行った数値計算の具体的な処理内容や、本編で省略したいくつかの解析計算の詳細過程、および補足的な内容などを掲載する。なお、これまでの章における掲載内容については正確さに注意を払って確認しているが、本章の掲載内容は付録の位置付けであるため、誤表記などが混入している可能性について一定程度留意する必要があるかもしれない。

## 5.2 ARNOLD'S CAT MAP 系における量子化の詳細過程, および各種の数値計算方法

### 5.2.1 量子化, および量子的な時間発展の数値計算方法

まず量子系においては, 系の状態は波動関数で表現されるが, これを位置表示したものを  $\psi_{\hat{\theta}}(\theta)$ , 運動量表示したものを  $\psi_{\hat{I}}(I)$  とする<sup>\*99</sup>. 即ち系の状態ベクトルは  $|\psi\rangle = \int_0^{2\pi} \psi_{\hat{\theta}}(\theta) |\theta\rangle d\theta = \int_0^{2\pi} \psi_{\hat{I}}(I) |I\rangle dI$  であって, ここで  $|\theta\rangle$  は  $\hat{\theta}$  演算子の固有状態かつ固有値が  $\theta$ , 同様に  $|I\rangle$  は  $\hat{I}$  演算子の固有状態かつ固有値が  $I$  である. これらの波動関数は  $\theta$  および  $I$  方向の  $2\pi$  周期境界条件によって,

$$\psi_{\hat{\theta}}(\theta + 2\pi) = \psi_{\hat{\theta}}(\theta) \quad (138)$$

$$\psi_{\hat{I}}(I + 2\pi) = \psi_{\hat{I}}(I) \quad (139)$$

を任意の  $\theta$  および  $I$  の値について満たさなければならない. しかし座標と運動量は互いに独立では無いために重要な制約が生じる. 先に  $\theta$  方向の周期境界条件による制約について考える. まず  $\psi_{\hat{\theta}}(\theta) = \langle \theta | \psi \rangle = \int_0^{2\pi} \psi_{\hat{I}}(I) \langle \theta | I \rangle dI$  であるから, これが  $2\pi$  周期性を満足するためには,  $\hat{I}$  演算子の任意の固有状態  $|I\rangle$  を位置表示したもの

$$u_I(\theta) \equiv \langle \theta | I \rangle \quad (140)$$

$$= \frac{1}{C} e^{i \frac{I\theta}{\hbar}} \quad (141)$$

が周期境界条件  $u_I(\theta) = u_I(\theta + 2\pi)$  の関係を満足する必要がある. ここで  $C$  は規格化定数である. この条件が任意の  $\theta$  の値について満足されるためには,  $I$  の値, 即ち  $\hat{I}$  演算子の固有値は, 以下のような離散値しかとる事を許されない:

$$I_m = m\hbar \quad (m = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1) \quad (142)$$

ここで  $N$  は任意の正の整数 (後の条件によって偶数に制限される) である. これが (27) 式である.  $\hat{I}$  演算子の固有値が有限個に制限されるという事は, 固有状態つまり基底の個数が有限個に制限されるという事であるから, これは  $I$  空間そのものが  $N$  分割に離散化される事に他ならない. 即ち,  $N$  は数値計算の場においては, いわゆる “空間メッシュの刻み数” に相当する. いまの我々のモデルでは  $I$  の区間は  $[0, 2\pi)$  であるが, より一般的に整数で  $M$  倍された  $[0, 2M\pi)$  の範囲である場合も含めて考えると<sup>\*100</sup>, 有効プランク定数  $\hbar$  の値は

$$\hbar = \frac{2M\pi}{N} \quad (\text{我々の場合は } M = 1) \quad (143)$$

となる. これが (29) 式である. 本編でも述べたが,  $\hbar \rightarrow 0$  即ち  $N \rightarrow \infty$  において, 系の状態の時間発展は古典極限挙動に漸近する. 逆に  $\hbar$  の値が大きいほど, 状態の時間発展には量子性 (波動性) が色濃く反映されるようになる. ここまでと全く同様の議論が,  $\hat{\theta}$  演算子の固有状態  $|\theta\rangle$  を運動量表示したもの  $v_{\theta}(I) \equiv \langle I | \theta \rangle = (1/C) e^{-iI\theta/\hbar}$  についても行える. これが  $I$  方向の周期境界条件

<sup>\*99</sup> ハット記号の付いていない引数の  $\theta$  および  $I$  は, 演算子ではなく普通の数値であるものとする.

<sup>\*100</sup> 例として, Standard Map 系などで  $I$  空間に生じる量子拡散を解析したい場合などが挙げられる.



$\nu_\theta(I + 2\pi) = \nu_\theta(I)$  を満足するためには,  $\theta$  空間もまた  $N$  分割に離散化される.  $\theta$  の範囲は  $[0, 2\pi)$  であるから, とり得る離散値は

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{N} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1) \quad (144)$$

となる. これが (28) 式である. このように, 結局のところ  $u_I(\theta)$  も  $\nu_\theta(I)$  も  $N$  個の点で定義される離散関数となり, その指数関数部分の絶対値は常に 1 であるから, これらの規格化定数は  $C = \sqrt{N}$  となる. また, 位置表示と運動量表示の波動関数も同様に  $N$  個の点で定義される離散関数となつて, それらの関係は,

$$\psi_\theta(\theta_n) = \langle \theta_n | \psi \rangle \quad (145)$$

$$= \langle \theta_n | \left[ \frac{1}{C} \int_0^{2\pi} \psi_I(I) |I\rangle dI \right] \quad (146)$$

$$= \langle \theta_n | \left[ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} \psi_I(I_m) |I_m\rangle \right] \quad (147)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} \psi_I(I_m) \langle \theta_n | I_m \rangle \quad (148)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} \psi_I(I_m) e^{i \frac{2\pi m n}{N}} \quad (149)$$

のように導かれる. ここで  $\langle \theta_n | I_m \rangle = e^{i \theta_n I_m / \hbar} = e^{2\pi i n m / N}$  を用いた. 同様に

$$\psi_I(I_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \psi_\theta(\theta_n) e^{-i \frac{2\pi m n}{N}} \quad (150)$$

が導かれ, よって  $\psi_\theta(\theta_n)$  と  $\psi_I(I_m)$  は互いに離散フーリエ変換 (DFT) の関係で対応付けられる. これが (31) 式および (32) 式である. この変換は, 表式通りに行うと  $O(N^2)$  のオーダーの計算コストを要するが, 実際の数値計算においては DFT の代わりに高速フーリエ変換 (FFT) を用いれば,  $O(N \log N)$  のオーダーまで計算コストを抑えられて高速処理できる.

続いて系の時間発展について考える. 撃力周期ごと, つまり古典写像 1 回分に相当する時間発展演算子 (Floquet 演算子) は,

$$\hat{U}_{\text{cat}} = e^{-i[-K\hat{\theta}^2/2 + \xi g(\hat{\theta})]/\hbar} e^{-i\hat{I}^2/2\hbar} \quad (\hat{H}_{\text{cat}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) \text{ の定義によつては末尾は } e^{-i\hat{I}^2 T/2\hbar}) \quad (151)$$

のように表される. これを撃力の瞬間の時間発展と, その間の時間発展とに分けて考える. まず後者, つまり撃力から次の撃力までの間における時間発展は,  $\hat{I}^2/2T$  の運動エネルギーによって時間  $T$  だけ自由回転 (Free) するから, その時間発展演算子は

$$\hat{F} = e^{-i\hat{I}^2/2\hbar} \quad (152)$$

と表される. 数値計算においては, この  $\hat{F}$  の運動量基底における行列表現が  $\langle I_m | \hat{F} | I_n \rangle = e^{-i I_m^2/2\hbar} \delta_{m,n}$  のように対角的である事を利用すると便利である. 具体的には, この演算子を作用させて “回転し

た”後の状態  $\hat{F}|\psi\rangle$  の波動関数を、運動量表示で見る事を考えると、

$$\psi_f(I_m) \Big|_{\text{回転後}} = \langle I_m | \hat{F} | \psi \rangle \quad (153)$$

$$= \sum_{n=0}^{N-1} \langle I_m | \hat{F} | I_n \rangle \langle I_n | \psi \rangle \quad (154)$$

$$= e^{-iI_m^2/2\hbar} \psi_f(I_m) \Big|_{\text{回転前}} \quad (155)$$

のように、回転前の波動関数  $\psi_f(I_m)$  からの時間発展を非常に単純に表せる。これが (30) 式である。計算機において波動関数  $\psi_f(I_m)$  は、要素数  $N$  個の複素数配列として扱えるが、その各要素に  $e^{-iI_m^2/2\hbar}$  の値を乗ずれば  $\hat{F}$  を作用させた事になる。ところで系の時間発展演においても、 $I_m$  での値は周期境界条件によって  $I_m + 2\pi$  の点と同一視されなければならない。即ち、

$$e^{-iI_m^2/2\hbar} = e^{-i(I_m+2\pi)^2/2\hbar} \quad (156)$$

が任意の  $I_m$  について満足される必要がある。右辺を変形すると  $e^{-iI_m^2/2\hbar} e^{-2i\pi I_m/\hbar} e^{-2i\pi^2/\hbar}$  となるから、条件は

$$e^{-2i\pi I_m/\hbar} e^{-2i\pi^2/\hbar} = 1 \quad (157)$$

となるが、ここで  $\hbar = 2\pi/N$  (簡単のため  $M = 1$  とする) および  $I_m = m\hbar$  を用いると、この条件は結局

$$e^{-2\pi m i} e^{-\pi N i} = 1 \quad (158)$$

となる。左辺第一項は常に 1 であるから、左辺第二項も常に 1 となる必要がある。従って、正の整数  $k$  によって

$$N = 2k \quad (k \in \mathbb{Z}) \quad (159)$$

と表される必要があり、これが  $N$  が偶数に制限される理由である。

次に撃力 (Kick) の瞬間における時間発展について考える。この時間発展演算子は

$$\hat{K} = e^{-i[-K\hat{\theta}^2/2 + \xi g(\hat{\theta})]/\hbar} \quad (160)$$

と表される。この演算子  $\hat{K}$  は、今度は位置の基底において行列表現が  $\langle \theta_n | \hat{K} | \theta_m \rangle = e^{-i[-K\theta_n^2/2 + \xi g(\theta_n)]/\hbar} \delta_{m,n}$  のように対角的となるから、計算機においては波動関数も位置表示で扱った方が容易である。よって、先ほどの  $\hat{F}$  の作用を終えた後、波動関数を運動量表示から位置表示に変換する必要があるが、それには波動関数  $\psi_f(I_m)$  の値を格納する複素数配列に対して、(149) 式の通りの DFT の処理を行えばよい。そして得られた  $\psi_{\hat{\theta}}(\theta_n)$  に対して撃力演算子  $\hat{K}$  を

作用させた結果を位置表示で見ると

$$\psi_{\hat{\theta}}(\theta_n) \Big|_{\text{撃力後}} = \langle \theta_n | \hat{K} | \psi \rangle \quad (161)$$

$$= \sum_{m=0}^{N-1} \langle \theta_n | \hat{K} | \theta_m \rangle \langle \theta_m | \psi \rangle \quad (162)$$

$$= e^{-i[-K\theta_n^2/2 + \xi g(\theta_n)]/\hbar} \psi_{\theta}(\theta_n) \Big|_{\text{撃力前}} \quad (163)$$

のように変化する．これが (33) 式である．即ち数値的には、 $\psi_{\hat{\theta}}(\theta_n)$  を格納する配列の各要素に  $e^{-i[K\theta_n^2/2 + \xi g(\theta_n)]/\hbar}$  を乗ずれば、 $\hat{K}$  を作用させた事になる．この後は再び自由回転の  $\hat{F}$  演算子を作用させる事になるが、その前に (150) 式の DFT 処理で運動量表示に戻ればよい．ところで、この時間発展においても先程と同様、 $\theta_n$  の値は周期境界条件によって  $\theta_n + 2\pi$  の点と同一視されなければならない． $\xi g(\theta_n)$  の部分については、我々の場合はそもそも  $g(\theta)$  を  $2\pi$  周期関数  $g(\theta) = \cos(\theta - \theta')$  の形に選んでいるから問題ない<sup>\*101</sup>．制約を生むのは撃力ポテンシャルの部分であり、これが

$$e^{iK\theta_n^2/2\hbar} = e^{iK(\theta_n+2\pi)^2/2\hbar} \quad (164)$$

を満足しなければならない．これは即ち

$$e^{2i\pi K\theta_n/\hbar} e^{2i\pi^2 K/\hbar} = 1 \quad (165)$$

とかけるが、いまの  $M = 1$  の場合においては  $\theta_n = n\hbar$  かつ  $\hbar = 2\pi/N$  であるから最終的に

$$e^{2i\pi K n} e^{i\pi K N} = 1 \quad (166)$$

という条件となる．ここで  $N$  が先の制約によって偶数である事も踏まえて考えると、この条件が任意の  $n$  について満足されるには

$$K \in \mathbb{Z} \quad (167)$$

が要請され、即ち  $K$  が整数であればよい．これが  $K$  の値が離散化される理由である．

### 5.2.2 2 自由度の結合

続いて、量子 Arnold's Cat Map 系を 2 自由度結合する．これにより、結合系のヒルベルト空間は、片方の自由度  $A(N_A \text{ 次元}) \times$  もう片方の自由度  $B(N_B \text{ 次元})$  で張られる、 $N_A N_B$  次元の空間となる．結合系の波動関数  $\psi$  は、たとえば両自由度が位置表示の場合に

$$\psi_{\hat{\theta}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}) \quad (0 \leq s \leq N_A - 1, 0 \leq v \leq N_B - 1,) \quad (168)$$

のように表される．ここで自由度  $A$  の位置および運動量は  $(\theta_s^{(A)}, I_r^{(A)})$ 、自由度  $B$  の位置および運動量は  $(\theta_v^{(B)}, I_u^{(B)})$  であるものとする．この波動関数  $\psi_{\hat{\theta}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)})$  は、計算機上では要素数が  $N_A \times N_B$

<sup>\*101</sup> 同様の理由により、Standard Map 系では撃力ポテンシャルがそもそも  $2\pi$  周期的であるから、ここで述べるような  $K$  の離散化は生じない．

個の 2 次元の複素数配列として表現できる．波動関数の位置表示と運動量表示との間は，以下のよう  
に 2 次元に拡張された DFT

$$\psi_{\hat{\theta}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}) = \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_{r=0}^{N_A-1} \sum_{u=0}^{N_B-1} \psi_{\hat{I}}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}) e^{i \frac{2\pi r s}{N_A}} e^{i \frac{2\pi u v}{N_B}} \quad (169)$$

$$\psi_{\hat{I}}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}) = \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_{s=0}^{N_A-1} \sum_{v=0}^{N_B-1} \psi_{\hat{\theta}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}) e^{-i \frac{2\pi r s}{N_A}} e^{-i \frac{2\pi u v}{N_B}} \quad (170)$$

によって対応付けられる．ここでも実際の数値計算では DFT の代わりに FFT を用いる事で高速に変換できる．

この結合系のハミルトニアンは (44) 式で与えられ，よって撃力周期  $T$  ごとの時間発展演算子は

$$\hat{U}_{\text{cat2}} = e^{-i[-K_A \hat{\theta}_A^2/2 - K_B \hat{\theta}_B^2/2 + \varepsilon \cos(\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B) + \xi g(\hat{\theta}_A, \hat{\theta}_B)]/\hbar} e^{-i[\hat{I}_A^2 + \hat{I}_B^2]/2\hbar} \quad (171)$$

のように表される．1 自由度の量子 Arnold's Cat Map 系の場合と同様，この  $\hat{U}_{\text{cat2}}$  を自由回転部分  $\hat{F}$  と撃力部分  $\hat{K}$  に分解する：

$$\hat{F} \equiv e^{-i[\hat{I}_A^2 + \hat{I}_B^2]/2\hbar} \quad (172)$$

$$\hat{K} \equiv e^{-i[-K_A \hat{\theta}_A^2/2 - K_B \hat{\theta}_B^2/2 + \varepsilon \cos(\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B) + \xi g(\hat{\theta}_A, \hat{\theta}_B)]/\hbar} \quad (173)$$

$\hat{K}$  演算子が  $\hat{\theta}_A$  および  $\hat{\theta}_B$  について  $2\pi$  周期性を満足しなければならないから， $K_A$  および  $K_B$  の値は整数に制限されるが，しかし自由度間の相互作用項  $\varepsilon \cos(\hat{\theta}_A - \hat{\theta}_B)$  はもともと  $2\pi$  周期関数であるから， $\varepsilon$  の値には何も制約は生じない．

$\hat{F}$  演算子および  $\hat{K}$  演算子は，それぞれ運動量および位置の基底で行列表示すれば対角形となる．よって付録 5.2.1 と全く同じ要領で，波動関数の位置表示と運動量表示を (169)-(170) 式の DFT で切り替えながら， $\hat{F}$  演算子と  $\hat{K}$  演算子を逐次的に作用させれば，結合量子 Arnold's Cat Map 系の時間発展を計算機上で再現できる：

$$\psi_{\hat{I}}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}) \Big|_{\text{自由回転後}} = e^{-i[(I_r^{(A)})^2 + (I_u^{(B)})^2]/2\hbar} \psi_{\hat{I}}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}) \Big|_{\text{自由回転前}} \quad (174)$$

$$\psi_{\hat{\theta}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}) \Big|_{\text{撃力後}} = e^{-i[-K_A (\theta_s^{(A)})^2/2 - K_B (\theta_v^{(B)})^2/2 + \varepsilon \cos(\theta_s^{(A)} - \theta_v^{(B)}) + \xi g(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)})]/\hbar} \psi_{\hat{\theta}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}) \Big|_{\text{撃力前}} \quad (175)$$

### 5.2.3 フォン・ノイマンエントロピーの数値的な測定方法

ここでは，上で述べた 2 自由度量子 Arnold's Cat Map 系において，自由度間のエンタングルメントの指標となるフォン・ノイマンエントロピーの値を，数値的に測定する方法について掲載する．理論面におけるフォン・ノイマンエントロピーの導入と考察については第 3 章の 3.2.4 節で行っているのので，必要に応じて併せて参照されたい．なお，説明の流れの都合上，これ以降において同節と意味的に重複している内容が一部含まれているが，ここではより具体的な数値計算を意識した記述を行う．

まず、いまはハミルトニアンは結合量子 Arnold's Cat Map 系を構成する 2 つの自由度 A,B に  
よって完全に記述され、それ以外に外部自由度は存在せず孤立しているから、系全体の状態は常に  
純粋状態であると見なせる。従ってその状態ベクトルを  $|\Psi\rangle$  とすると、全系の密度演算子  $\hat{\rho}$  は

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (176)$$

のように表される。これを適当な基底 (例として  $\hat{I}$  演算子の固有状態の組を用いる) によって行列表  
示した密度行列  $\rho_{r,r',u,u'}$  は

$$\rho_{r,r',u,u'} = \left( \langle I_r^{(A)} | \otimes \langle I_u^{(B)} | \right) \hat{\rho} \left( | I_{r'}^{(A)} \rangle \otimes | I_{u'}^{(B)} \rangle \right) \quad (177)$$

$$= \left( \langle I_r^{(A)} | \otimes \langle I_u^{(B)} | \right) |\Psi\rangle\langle\Psi| \left( | I_{r'}^{(A)} \rangle \otimes | I_{u'}^{(B)} \rangle \right) \quad (178)$$

$$= \Psi_I(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}) \Psi_I^*(I_{r'}^{(A)}, I_{u'}^{(B)}) \quad (179)$$

のように、その表示基底における波動関数  $\Psi_I(I_r^{(A)}, I_u^{(B)})$  を用いて表される。付録 5.2.2 で述べた通  
り、我々はこのような波動関数を (時間発展も含めて) 数値的に扱えるから、 $\rho_{r,r',u,u'}$  の各成分の値  
を具体的に求める事ができる。ただし、 $\rho_{r,r',u,u'}$  は計算機上においては要素数が  $N_A^2 \times N_B^2 = N_A^4$  個  
の 4 次元の複素数配列として表現されるから、全要素の値を素直に求めるのは、要求メモリ量も計  
算コストも  $O(N_A^4)$  のオーダーになってしまうので避けるべきである。というのも、我々にとって  
必要なのは、 $\rho_{r,r',u,u'}$  から自由度 B について部分トレースをとった (自由度 B をトレースアウトし  
た)、自由度 A における部分密度行列 [39]

$$\rho_{r,r'}^{(A)} = \sum_{u=u'} \rho_{r,r',u,u'} \quad (180)$$

$$= \sum_{u=0}^{N_B-1} \Psi_I(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}) \Psi_I^*(I_{r'}, I_u^{(B)}) \quad (181)$$

であり、 $\rho_{r,r',u,u'}$  の全要素の値は必要ないからである。この  $\rho_{r,r'}^{(A)}$  は計算機上においては要素数が  $N_A^2$   
個の 2 次元の複素数配列として表現でき、要求メモリ量は  $O(N_A^2)$  である。 $\rho_{r,r'}^{(A)}$  に関しては全要素の  
値を具体的に求める必要があるが、 $\rho_{r,r',u,u'}$  を介さずに (181) 式によって直接求めれば、その計算コ  
ストは  $O(N_A^3)$  で済み、計算量を節約できる。

続いて必要となるのは、この  $\rho_{r,r'}^{(A)}$  行列における全ての固有値  $\lambda_k$  ( $1 \leq k \leq N_A$ ) を求める事である。  
具体的にその値を求めるアルゴリズムについては、少し複雑であるからここでは扱わないが、  
一般的な行列計算ライブラリにはふつう実装されているから、それを用いるのがよい。その  
際、 $\rho_{r,r'}^{(A)}$  はエルミート行列であるから、そうでない単なる複素行列と比べれば、比較的高速に固有  
値を計算することができる。ところで、 $\rho_{r,r'}^{(A)}$  の固有値を求めるという事は、即ち、適当なユニタリ変  
換によって  $\rho_{r,r'}^{(A)}$  の表示基底を移って対角化し、その対角成分を求めるという事と同じである。従っ  
て、ここまでは例として運動量表示 ( $I$  表示) を用いてきたが、最終的に得られる固有値  $\lambda_k$  の組  
は、 $\rho_{r,r'}^{(A)}$  の具体的な表示基底によらない。さらに、行列のトレース操作はユニタリ不変であるか  
ら、(180) 式や (181) 式で部分トレースをとる自由度 B の表示基底もまた、具体的に何を選んでも

よい. あとは,  $\lambda_k$  の値が 0 ではない  $k$  について,

$$S = - \sum_k \lambda_k \log \lambda_k \quad (182)$$

を計算すれば, フォン・ノイマンエントロピー  $S$  の値が得られる.

#### 5.2.4 時間発展演算子の固有状態の数値計算方法

ここでは, 量子 Arnold's Cat Map 系において, 時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{cat}}$  の固有状態を数値的に求める方法を掲載する. ここでは, 写像周期  $T$  を単位とする時刻  $\tau$  における状態ベクトルを  $|\psi_\tau\rangle$  と書き, その運動量表示による波動関数を  $\psi_I(I_m, \tau)$  のように書き表すものとする. まずは簡単のため, 量子 Arnold's Cat Map 系が 1 自由度である場合について扱う. はじめに, 系の初期状態を運動量演算子の固有状態  $|I_m\rangle$  で展開して<sup>\*102</sup>

$$|\psi_0\rangle = \sum_{m=0}^{N-1} |I_m\rangle \langle I_m | \psi_0 \rangle \quad (183)$$

$$= \sum_{m=0}^{N-1} \psi_I(I_m, 0) |I_m\rangle \quad (184)$$

と表しておく. 量子力学の基礎方程式は線形であるから, 写像 1 回分つまり  $\tau = 1$  における系の状態  $|\psi_1\rangle$  は

$$|\psi_1\rangle = \hat{U}_{\text{cat}} |\psi_0\rangle \quad (185)$$

$$= \sum_{m=0}^{N-1} \psi_I(I_m, 0) \hat{U}_{\text{cat}} |I_m\rangle \quad (186)$$

のように,  $|I_m\rangle$  を初期状態に設定して時間発展させた状態  $\hat{U}_{\text{cat}} |I_m\rangle$  の重ね合わせで表せる.

そこで, この状態  $\hat{U}_{\text{cat}} |I_m\rangle$  を運動量表示 ( $I$  表示) で見た波動関数の,  $I_{m'}$  の点における値を

$$K_{m', m} \equiv \langle I_{m'} | \hat{U}_{\text{cat}} | I_m \rangle \quad (187)$$

とおく. この  $K_{m', m}$  行列の各要素の値を数値的に求めるには, 実際にすべての  $0 \leq m < N$  について,  $|I_m\rangle$  を系の初期状態に設定して写像 1 回分だけ時間発展させ, その運動量表示 ( $I$  表示) における波動関数を求めればよい. 具体的に波動関数を時間発展させる方法は付録 5.2.1 で掲載した通りである. その際の波動関数の初期波束については,  $|I_m\rangle$  を運動量表示で見た波動関数  $\psi_I(I_k, 0) = \langle I_k | I_m \rangle = \delta_{k, m}$ , つまり  $I_m$  の一点に完全に収束した波束に設定すればよい. 即ち,  $K_{m', m}$  はより具体的に

$$K_{m', m} = \psi_I(I_{m'}, 1) \Big|_{\psi_I(I_k, 0) = \delta_{k, m}} \quad (188)$$

<sup>\*102</sup>  $|I_m\rangle$  の  $m$  は離散化された  $I$  空間のインデックスであり, 時刻ではない. 一方で  $|\psi_\tau\rangle$  の  $\tau$  は時刻であり, 少し紛らわしいので, 添え字の意味を混同しないよう注意する必要がある.

とも書き表せる．つまるところ  $K_{m',m}$  は， $I$  空間における写像 1 回分のプロパゲータ [6, 40] であり， $I$  空間が離散化されているため行列になっているものである．この“プロパゲータ行列”を用いて，一般の初期状態における時刻  $\tau = 1$  での波動関数は

$$\psi_{\hat{I}}(I_{m'}, 1) = \langle I_{m'} | \psi_{\tau} \rangle \quad (189)$$

$$= \sum_{m=0}^{N-1} \psi_{\hat{I}}(I_m, 0) \langle I_{m'} | \hat{U}_{\text{cat}} | I_m \rangle \quad (190)$$

$$= \sum_{m=0}^{N-1} K_{m',m} \psi_{\hat{I}}(I_m, 0) \quad (191)$$

のように表せる．即ち  $K_{m',m}$  行列は，波動関数にかけると，写像 1 回分の時間発展結果を与える行列となっている．よって，この行列の固有ベクトルを求めれば，それは時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{cat}}$  の固有状態  $|n\rangle$  を， $I$  表示で見た波動関数となっている（縮退が無ければ  $N$  個存在する）．計算機上において  $K_{m',m}$  行列は，要素数が  $N \times N$  個の 2 次元の複素数配列として表現できるから，一般的な行列計算ライブラリによって固有ベクトルを求める事が可能であり，従って数値的に固有状態の波動関数表現を得る事ができる．同時に固有値  $\lambda_n$  も得られ，そこから  $\lambda_n = e^{-i\gamma_n}$  を逆に解けば， $\gamma_n$  つまり eigen angle の値も求まる．

続いて，2 自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系の場合について考える．その場合は付録 5.2.2 で扱った通り，系の波動関数は  $\Psi_{\hat{I}}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}, \tau)$  のような形で 2 自由度に拡張される．このように自由度の数が増えても，基本的な流れはこれまでと全く同じであり，最終的にプロパゲータの行列

$$K_{r',u',r,u} \equiv \left( \langle I_{r'}^{(A)} | \otimes \langle I_{u'}^{(B)} | \right) \hat{U}_{\text{cat}2} \left( | I_r^{(A)} \rangle \otimes | I_u^{(B)} \rangle \right) \quad (192)$$

$$= \psi_{\hat{I}}(I_{r'}^{(A)}, I_{u'}^{(B)}, 1) \Big|_{\psi_{\hat{I}}(I_s^{(A)}, I_v^{(B)}, 0) = \delta_{r,s} \delta_{u,v}} \quad (193)$$

の固有ベクトルを求めればよい． $K_{r',u',r,u}$  の各成分の値は，実際に  $I_r^{(A)}, I_u^{(B)}$  の地点に完全に収束した初期波束  $\psi_{\hat{I}}(I_s^{(A)}, I_v^{(B)}, 0) = \delta_{r,s} \delta_{u,v}$  を，付録 5.2.2 で扱った通りの方法によって，写像 1 回分だけ時間発展させれば得られる．ところで  $K_{r',u',r,u}$  は計算機上において，要素数が  $N_A \times N_A \times N_B \times N_B$  個の 4 次元の複素数配列として表現できるが，一般的な行列計算ライブラリによって固有ベクトルを求めるためには，これを 2 次元の配列として表す必要がある．それには，たとえば以下のような規則によって配列のインデックスを変換すればよい：

$$k \equiv r N_B + u \quad (194)$$

$$k' \equiv r' N_B + u' \quad (195)$$

もしくは  $k \equiv r + u N_A$ ,  $k' \equiv r' + u' N_A$  など，とにかく  $(r, u)$  の組が  $k$  の値に一意に対応する変換規則であればなんでもよい．このようなインデックス変換  $(r, u \rightarrow k)$  を

$$K_{k',k} = K_{r',u',r,u} \quad (196)$$

の通りに適用したプロパゲータの行列  $K_{k',k}$  は，計算機上において要素数が  $N_A N_B \times N_A N_B$  個の 2 次元の複素数配列として表現できる．よって一般的な行列計算ライブラリで扱えるようになる．ただ

しその結果として得られる固有ベクトルは、要素数が  $N_A N_B$  個の 1 次元の複素数配列である。従って (194) - (195) 式のようなインデックス変換を逆向き ( $k \longrightarrow r, u$ ) に適用して、要素数が  $N_A \times N_B$  個の 2 次元の複素数配列に直す必要がある。その結果として、2 自由度の固有状態  $|n\rangle$  の、 $I$  表示における波動関数が得られる。eigen angle 即ち  $\gamma_n$  については、1 自由度の場合と全く同様に、固有値  $\lambda_n$  の値から  $\lambda_n = e^{-i\gamma_n}$  を逆に解けば求まる。



### 5.3 調和振動子系における各種の数値計算方法

#### 5.3.1 古典挙動の写像化

ここでは、量子ダンパーモデルにおける、調和振動子の時間発展の計算方法についてまとめる。まずは簡単のため、全系は古典的であるものとする。KR の撃力から次の撃力までの間においては、 $f(I(t))$  は一定であるから、簡単のためこれを  $f$  と置く。また、KR の撃力の瞬間を時刻  $t_0$  とし、そこからの経過時刻を  $t'$  にとるものとする。即ち  $t = t' + t_0$  と置く。この時間区間において、量子ダンパー系の調和振動子部分は、 $-\eta f \cos \Omega t$  の力<sup>\*103</sup>で単純に強制振動される調和振動子と見なせるから、その運動の  $t'$  に対する古典的な運動方程式は

$$\frac{d^2 q}{dt'^2} = -\omega^2 q - \eta f \cos \Omega(t' + t_0) \quad (197)$$

と表される。この運動方程式の一般解は

$$q(t' + t_0) = \frac{\eta f}{\Omega^2 - \omega^2} \cos \Omega(t' + t_0) + A \cos(\omega t' + \delta) \quad (198)$$

のように記述される [31]。  $\delta$  および  $A$  は初期状態 ( $t' = 0$  つまり  $t = t_0$ ) によって決まる定数である。右辺の第1項はこの方程式の特殊解となっており、第2項は同時方程式の一般解となっている。以後、前者を単に“特殊解”、後者を“同時一般解”と呼ぶ。なお、運動量  $p(t)$  の時間発展については  $p(t) = dq/dt$  より (我々の系では質量  $m = 1$  である)

$$p(t' + t_0) = -\frac{\eta f \Omega}{\Omega^2 - \omega^2} \sin \Omega(t' + t_0) - A \omega \sin(\omega t' + \delta) \quad (199)$$

のように記述される。

まずは上で述べた調和振動子の挙動を、KR の撃力周期ごとのタイミングで写像化して処理したい。ただし写像は  $t$  を陽に含んでもよい。基本的な方針として、調和振動子の運動を、特殊解の寄与を引いた座標で見れば、同時一般解のみの運動として見える事を利用する。そのために、調和振動子の相空間座標ベクトル  $(q, p)$  に左から作用し、特殊解の寄与だけ移動させる写像演算子を以下のように定義する：

$$Q_t^\pm : q \longrightarrow q \pm \frac{\eta f}{\Omega^2 - \omega^2} \cos \Omega t \quad (200)$$

$$P_t^\mp : p \longrightarrow p \mp \frac{\eta f \Omega}{\Omega^2 - \omega^2} \sin \Omega t \quad (201)$$

また、同時一般解の運動は相空間上において楕円軌道を描くが、 $\omega = 1$  の場合には真円の回転となり、角度  $-\omega T = -T$  の回転行列で表す事ができて都合が良い<sup>\*104</sup>。従ってこれ以降では  $\omega = 1$  に選

<sup>\*103</sup> いまは質量  $m = 1$  であるから正準方程式より、調和振動子が受ける力は  $\frac{d^2 q}{dt^2} = \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial}{\partial q} \hat{H}_{\text{QD}} = -\omega^2 q - \eta f \cos \Omega t$  であり、第1項が普通のいわゆる復元力、第2項が外力項由来の強制振動力である ( $f$  は一定と見なしている)。なお  $\hat{H}_{\text{QD}}$  は (1) 式で与えられる。

<sup>\*104</sup> 回転行列を作用させて、相空間全体を一様に回転させるだけであるから、 $A$  および  $\delta$  の値を明示的に求める必要も無くなる。

ぶものとする (本論文で行った KQD モデルの計算でも全て  $\omega = 1$  であった). 角度  $-T$  の回転行列は, 以下のように  $p$  方向の移動を行う行列  $R_p$  と,  $q$  方向の移動を行う行列  $R_q$  を組み合わせた行列積に分解する事ができる:

$$R_p R_q R_p \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ (\cos T - 1)/\sin T & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \sin T \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ (\cos T - 1)/\sin T & 1 \end{bmatrix} \quad (202)$$

$$\left( = \begin{bmatrix} \cos T & \sin T \\ -\sin T & \cos T \end{bmatrix} \right) \quad (203)$$

このような形に分解すると量子化の際に利点がある. 以上を用いて, 撃力から次の撃力までの  $0 \leq t' \leq T$  の間における調和振動子の相空間座標  $(q, p)$  の時間発展は

$$\begin{bmatrix} q(T + t_0) \\ p(T + t_0) \end{bmatrix} = Q_{t_0+T}^+ P_{t_0+T}^- R_p R_q R_p P_{t_0}^+ Q_{t_0}^- \begin{bmatrix} q(t_0) \\ p(t_0) \end{bmatrix} \quad (204)$$

のように 7 個の写像を作用させる事によって再現できる. この直後に **KR** の撃力によって  $f(I)$  が変化する. その後は  $t_0 + T$  を新たに  $t_0$  と置きなおして (204) 式の写像を再び作用させれば, さらに次の撃力までの間の調和振動子の時間発展を再現できる. 以上を逐次的に繰り返す事で, 量子ダンパーモデルの古典対応物における調和振動子系の振る舞いを, 写像によって高速に計算できる.

### 5.3.2 量子化, および量子的な時間発展の数値計算方法

続いて, 上でまとめた古典的な調和振動子の運動を量子化する. まず我々は便宜的に, 調和振動子の相空間  $(q, p)$  が  $[-\pi, \pi) \times [-\pi, \pi)$  の範囲で有限であり, 境界は周期的になっていると見なす. ただし Arnold's Cat Map 系とは異なり, 調和振動子ではこのように相空間を周期的と見なす根拠は無いため, これは計算の都合のための近似である. よって, 計算機上における系の時間発展に際して, 波束が相空間の境界に達しないよう, 常に注意しなければならない. このような相空間を前提とする事で, 付録 5.2 で扱った Arnold's Cat Map 系の量子化と全く同様に, 調和振動子の位置と運動量は以下のように離散化される:

$$q_s = 2\pi s/N \quad (s = -N/2, \dots, -1, 0, 1, \dots, N/2 - 1) \quad (205)$$

$$p_r = 2\pi r/N \quad (r = -N/2, \dots, -1, 0, 1, \dots, N/2 - 1) \quad (206)$$

また, 簡単のため系の自由度が調和振動子のみである場合を考えると, これも Arnold's Cat Map 系の場合と同様, 波動関数の位置表示  $\zeta_{\hat{q}}(q_s)$  と運動量表示  $\zeta_{\hat{p}}(p_r)$  との間は離散フーリエ変換 (DFT)

$$\zeta_{\hat{q}}(q_s) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{r=-N/2}^{N/2-1} \zeta_{\hat{p}}(p_r) e^{i \frac{2\pi r s}{N}} \quad (207)$$

$$\zeta_{\hat{p}}(p_r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=-N/2}^{N/2-1} \zeta_{\hat{q}}(q_s) e^{-i \frac{2\pi r s}{N}} \quad (208)$$

によって対応付けられる<sup>\*105</sup>。この波動関数  $\zeta_{\hat{q}}(q_s)$  および  $\zeta_{\hat{p}}(p_r)$  は、計算機上では要素数が  $N$  個の複素数配列として表現できる。

KR の撃力周期ごと、即ち時刻  $t$  から  $t + T$  の間における調和振動子の時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{HO}}$  は、 $\omega = 1$  の場合における (204) 式の古典写像を量子化して

$$\hat{U}_{\text{HO}}|_{\omega=1} = e^{-iF\hat{p}\cos(t+T)/\hbar} e^{-i\mu\hat{q}\cos(t+T)/\hbar} \quad (209)$$

$$\times e^{i\hat{q}^2(\cos T - 1)/2\hbar \sin T} e^{-i\hat{p}^2 \sin T/2\hbar} e^{i\hat{q}^2(\cos T - 1)/2\hbar \sin T} \quad (210)$$

$$\times e^{iF\hat{q}\cos t/\hbar} e^{i\mu\hat{p}\cos t/\hbar} \quad (211)$$

のように表される<sup>\*106</sup>。ここで  $F \equiv \eta f/(\Omega^2 - \omega^2)$  と置いた。また  $\hbar = 2\pi/N$  である。付録 5.2 で扱った Arnold's Cat Map 系の場合と同様に、波動関数の位置表示  $\zeta_{\hat{q}}(q_n)$  と運動量表示  $\zeta_{\hat{p}}(p_n)$  とを (207)-(208) 式の DFT で切り替えながら、この  $\hat{U}_{\text{HO}}$  の 7 つの指数部を右のものから逐次的に作用させれば、撃力周期  $T$  ごとの調和振動子の時間発展  $|\zeta(t+T)\rangle = \hat{U}_{\text{HO}}|\zeta(t)\rangle$  を計算機上で再現できる。

### 5.3.3 エネルギー固有状態の数値計算方法

調和振動子のエネルギー固有状態は、エルミート多項式によって表現できる [40]。ここでは、実際にこの事を用いて、調和振動子のエネルギー固有状態を数値的に表現する方法を掲載する。簡単のため、ここでは質量  $m = 1$  かつ角振動数  $\omega = 1$  であるものとする。また、既に述べたように空間は離散化されているものとする。基底状態を 0 として  $n$  番目の順位、即ち固有値  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  のエネルギー固有状態を  $|E_n\rangle$  とすると、それを位置表示で見た波動関数  $\varphi_{E_n}(q_s) \equiv \langle q_s | E_n \rangle$  は

$$\varphi_{E_n}(q_s) = C_n e^{-q_s^2/2\hbar} H_n(q_s/\sqrt{\hbar}) \quad (212)$$

のように求められる。ここで  $C_n$  は規格化定数であり、解析的に書き表す事もできるが、その値を素直に計算すると大きな階乗項を扱わないといけないため、計算手順を少し工夫する必要がある。それよりも、波動関数の確率和  $\sum_s |\varphi_n(q_s)|^2$  がちょうど 1 になるように、数値的に  $C_n$  の値を求めた方が簡単である。 $H_n(x)$  はエルミート多項式であり、これも定義通りに素直に計算すると、 $n$  が大きい領域での計算コストが問題となる。この問題は、以下に述べるように漸化式を用いて計算すると回避できる。

まず、 $H_n(x)$  は本来は  $x$  について連続的であるが、我々は  $x$  に  $q_s/\sqrt{\hbar}$  を代入した値を用いるだけなので、離散的な

$$x_s \equiv q_s/\sqrt{\hbar} \quad (-N/2 \leq s \leq N/2 - 1) \quad (213)$$

<sup>\*105</sup> 調和振動子では相空間の原点  $(0,0)$  を中心にとっているため、 $(\pi, \pi)$  を中心にとった Arnold's Cat Map 系の DFT : (149) - (150) 式とは和の範囲が異なっている。

<sup>\*106</sup> 仮想的なハミルトニアン  $H'$  における単位時間の運動を考え、(204) 式における 7 つの古典写像項と対応する量子写像項  $e^{-iH'/\hbar}$  を求めて並べる。指数部の符号を求める際、正準方程式  $\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}$ ,  $\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$  の符号の寄与が紛らわしいので注意が必要である。

における  $H_n(x_s)$  の値が分かれば十分である．よって、ある一つの  $n$  における  $H_n(x_s)$  の値は、計算機上で要素数  $N$  個の複素数配列として保持しておく事ができる．そこでまず、いくつかの  $n$  について

$$H_0(x_s) = 1 \quad (214)$$

$$H_1(x_s) = 2x_s \quad (215)$$

$$H_2(x_s) = 4x_s^2 - 2 \quad (216)$$

$$H_3(x_s) = 8x_s^3 - 12x_s \quad (217)$$

$$H_4(x_s) = 16x_s^4 - 48x_s^2 + 12 \quad (218)$$

$$\dots \quad (219)$$

の値を、それぞれ  $s$  をインデックスとする複素数配列として保持しておく．これらから、エルミート多項式の  $n$  について成り立つ漸化式

$$H_n(x_s) = 2x_s H_{n-1}(x_s) - 2(n-1)H_{n-2}(x_s) \quad (220)$$

を用いて、より大きな  $n$  についての  $H_n(x_s)$  の値を逐次的に求める事ができる．そこで数値計算プログラムの実行開始時などに、KQD モデルの解析で必要となるエネルギー順位  $n$  までの範囲で、 $H_n(x_s)$  の値を漸化式から全てまとめて求めておき、 $s$  をインデックスとする複素数配列として保持しておく．つまるところエルミート多項式のルックアップテーブルを作るわけである．そして、 $H_n(x_s)$  の値が実際に必要となったタイミングで、そこから値を参照して用いればよい．

## 5.4 撃力量子ダンパー (KQD) 系に関する各種の数値計算方法

### 5.4.1 量子 ARNOLD'S CAT MAP 系と調和振動子系の結合, および時間発展の数値計算方法

題2章で導入した撃力量子ダンパー (KQD) モデルは, 先に述べた通りに量子化した調和振動子系を, 量子 Arnold's Cat Map 系に結合した系である. 簡単のため Arnold's Cat Map 系が1自由度であるとする, KQD モデルの全系のヒルベルト空間は, Arnold's Cat Map 系の自由度 ( $N$  次元)  $\times$  調和振動子の自由度 ( $N$  次元) で張られる,  $N^2$  次元の空間となる. 全系の波動関数  $\Psi$  は, たとえば各自由度が位置表示の場合に

$$\Psi_{\hat{u}, \hat{q}}(\theta_v, q_s) \quad (0 \leq v \leq N-1, -N/2 \leq s \leq N/2-1) \quad (221)$$

のように表される. これは計算機上では, 要素数が  $N \times N$  個の2次元の複素数配列として表現できる. ここから Arnold's Cat Map 系の自由度のみ運動量表示に移りたければ, すべての  $q_s$  について,  $\theta_v$  方向に (150) 式の DFT をかければよい:

$$\Psi_{\hat{I}, \hat{q}}(I_u, q_s) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{v=0}^{N-1} \Psi_{\hat{u}, \hat{q}}(\theta_v, q_s) e^{-i \frac{2\pi u v}{N}} \quad (222)$$

ここからさらに, すべての  $I_r$  について,  $q_s$  方向に (208) 式の DFT をかければ, 全自由度において運動量表示である波動関数となる:

$$\Psi_{\hat{I}, \hat{p}}(I_u, p_r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=-N/2}^{N/2-1} \Psi_{\hat{I}, \hat{q}}(I_u, q_s) e^{-i \frac{2\pi r s}{N}} \quad (223)$$

ここで  $-N/2 \leq r \leq N/2-1$  である. なお (222) 式のように, 異なる自由度については位置表示と運動量表示を混在させたまま処理しても問題は無い.

撃力周期ごとの全系の時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{KQD}}$  は,

$$\hat{U}_{\text{KQD}} = \hat{U}_{\text{cat}} \hat{U}_{\text{HO}} \quad (224)$$

と表す事ができる. ここで  $\hat{U}_{\text{cat}}$  は (151) 式,  $\hat{U}_{\text{HO}}$  は (211)-(209) 式で与えられる. それらを代入して明示的に書き下せば, この  $\hat{U}_{\text{KQD}}$  は, Arnold's Cat Map 系と調和振動子のそれぞれの自由度について, 位置か運動量の一方のみに依存する指数関数の, いくつかの積の形で表現される. 従って, 波動関数の各自由度について DFT をかけながら位置表示と運動量表示をやりながら処理すれば, 付録 5.2 で扱った Arnold's Cat Map 系の場合と同じ要領で, KQD の全系の時間発展  $|\Psi(t+T)\rangle = \hat{U}_{\text{KQD}} |\Psi(t)\rangle$  を計算機上で再現できる.

### 5.4.2 エネルギー分布およびエネルギー期待値の数値的な測定方法

続いて, KQD における調和振動子自由度のエネルギー分布, およびエネルギー期待値を数値的に測定する方法を掲載する. なお, ここでは時間は, ある適当な時刻に固定して考えるものとする. また,  $n$  はエネルギー順位を表すものとする (離散化された空間のインデックスと混同しないよ

う注意が必要である). 簡単のため, ここでも量子 Arnold's Cat Map 系の構成自由度は 1 自由度とするが, 2 自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系にした場合でも同じ要領で扱える.

まず, KQD の系全体は常に純粋状態であるから, ある時刻の全系の状態ベクトルを  $|\Psi\rangle$  とし, その状態における密度演算子は  $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  と表される. 数値計算においては, この密度演算子を適当な基底で行列表示して密度行列にする必要があるが<sup>\*</sup>, それは

$$\rho_{u,v,r,s} = \left( \langle\theta_u| \otimes \langle q_r| \right) |\Psi\rangle\langle\Psi| \left( |\theta_v\rangle \otimes |q_s\rangle \right) \quad (225)$$

$$= \Psi_{\hat{\theta},\hat{q}}(\theta_u, q_r) \Psi_{\hat{\theta},\hat{q}}^*(\theta_v, q_s) \quad (226)$$

のように, その基底で表示した波動関数によって表される. ここから量子 Arnold's Cat Map 系の自由度について部分トレースをとり, 調和振動子における部分密度行列 [39]

$$\rho_{r,s}^{(\text{HO})} = \sum_{u=v} \rho_{u,v,r,s} \quad (227)$$

$$= \sum_{u=0}^N \Psi_{\hat{\theta},\hat{q}}(\theta_u, q_r) \Psi_{\hat{\theta},\hat{q}}^*(\theta_u, q_s) \quad (228)$$

を求める. これは計算機上では, 要素数が  $N \times N$  個の 2 次元の複素数配列として表現できる. 上のようなトレース操作はユニタリ不変であるから, どのような基底で  $\hat{\rho}$  を行列表示して行っても構わないが, すぐ後で調和振動子の位置表示 ( $q$  表示) の波動関数との積を計算するので, 調和振動子の自由度については位置の基底で表示しておいた方がよい. なお,  $\rho_{r,s}^{(\text{HO})}$  の演算子表現, つまり縮約密度演算子を  $\hat{\rho}^{(\text{HO})}$  とすると, この操作は  $\hat{\rho}^{(\text{HO})} = \text{Tr}_{\text{cat}} \text{の自由度} \hat{\rho}$  と記述できる.

さて, 調和振動子のエネルギーを測定 (観測) した際, 測定値  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  を得る確率は

$$P(E_n) = \langle E_n | \hat{\rho}^{(\text{HO})} | E_n \rangle \quad (229)$$

$$= \sum_{r=-N/2}^{N/2-1} \sum_{s=-N/2}^{N/2-1} \langle E_n | q_r \rangle \langle q_r | \hat{\rho}^{(\text{HO})} | q_s \rangle \langle q_s | E_n \rangle \quad (230)$$

$$= \sum_{r=-N/2}^{N/2-1} \sum_{s=-N/2}^{N/2-1} \varphi_{E_n}^*(q_r) \rho_{r,s}^{(\text{HO})} \varphi_{E_n}(q_s) \quad (231)$$

のように表される. ここで  $|E_n\rangle$  は固有値が  $E_n$  のエネルギー固有状態であり,  $\varphi_{E_n}(q_s)$  はその波動関数表現であって, 付録 5.3.3 に掲載した方法によって数値的に求める事ができる. 計算機上では  $\varphi_{E_n}(q_s)$  と  $\varphi_{E_n}^*(q_r)$  は要素数  $N$  個の複素数配列として表現でき, また  $\rho_{r,s}^{(\text{HO})}$  は要素数が  $N \times N$  個の 2 次元の複素数配列として表現できるから, (231) 式の値は計算機上で具体的に計算する事ができる<sup>\*107</sup>.

<sup>\*107</sup> (231) 式の値はつまるところ横ベクトルに行列をかけて縦ベクトルとの内積をとるという, 初等的な行列計算と見なせる. 従って一見すると, 表式通りにプログラミングして計算するよりも, 行列計算ライブラリに行わせれば高速化できそうに思えるが, それは実際にはあまり意味がない. なぜならば, (231) 式の計算コストは  $O(N^2)$  のオーダーであるが, 部分密度行列を求める (228) 式の計算コストが意外に重く,  $O(N^3)$  のオーダーになっているからである.

以上のようにして、ある程度の範囲<sup>\*108</sup>の  $n = 0, 1, 2, \dots, n_{\max}$  について  $P(E_n)$  の値を求めれば、KQD 系における調和振動子のエネルギー分布を得る事ができる。図 11 や図 15 は、実際にこのようにして計算したものである。さらに  $P(E_n)$  の値を用いて、調和振動子のエネルギー期待値は

$$\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{n_{\max}} E_n P(E_n) \quad (232)$$

$$= \sum_{n=0}^{n_{\max}} \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) P(E_n) \quad (233)$$

の値を計算すれば求められる。この値から、調和振動子自由度の初期状態である基底状態 ( $n = 0$ ) のエネルギー  $E_0 = \hbar\omega/2$  を引けば、KQD の動作によって調和振動子が吸収したエネルギー量

$$\Delta E = \langle E \rangle - \frac{\hbar\omega}{2} \quad (234)$$

の値が求まる。ここまでは、時間を適当な時刻に固定してきたが、同様の処理を時刻  $\tau$  を変えながら繰り返し行えば、調和振動子のエネルギー吸収量の時系列データが得られる。図 10 や 図 14(a) などは、実際にこのようにして計算したものである。

---

<sup>\*108</sup> 原理的には  $n$  に上限は無いが、しかし KQD での調和振動子のエネルギー分布は  $E_n$  について指数的に減少するため、本論文で行った解析においては大体  $n_{\max} \sim N/2$  程度までを目安に求めれば十分である。なお、調和振動子の時間発展の数値計算においては付録 5.3.2 で述べた通り、相空間を有限の領域に制限しているため、あまり大きな  $n$  においてはエネルギー固有状態の波束がその領域内に納まらなくなってしまう事に注意が必要である (伏見表示で確認できる)。

## 5.5 量子 KR 系と線形振動子系の結合系に関する各種の数値計算方法

### 5.5.1 線形振動子の量子化

ここでは、線形振動子の量子的な時間発展を、計算機上で再現する方法を掲載する。まず、付録 5.2 で扱った Arnold's Cat Map 系の量子化の場合と同様に、線形振動子も  $\phi$  方向に  $2\pi$  周期性があるから、それによって  $J$  空間が原理的に離散化される：

$$J_m = m\hbar \quad (m \in \mathbb{Z}) \quad (235)$$

我々は線形振動子を量子 Arnold's Cat Map 系に結合して用いるので、 $\hbar$  の値は (143) 式の  $M = 1$  での値と等しい値に設定するものとする<sup>\*109</sup>。さて、 $J$  空間つまり線形振動子の作用空間は、本来であれば境界が無く無限の広さを持っている。しかし計算機上で無限の空間を扱う事はできないので、便宜的に  $J$  空間は有限であって、適当に選ぶ正の整数  $L$  を用いて  $[-L\hbar, L\hbar]$  の範囲であると見なそう。さらに境界条件は周期的であって、 $m = L$  の点は  $m = -L$  の点と同一であるとする。これによって  $m$  の範囲は

$$-L \leq m \leq L-1 \quad (236)$$

に限定される。無論、この操作は線形振動子の相空間のトポロジーを完全に変えてしまっているで、波動関数の波束が周期境界  $m = \pm L$  の点に達すると (もしくは跨ぐと)、その後の運動は、本来の線形振動子のものとは異なるものになってしまう事に注意する必要がある。しかしながら、我々が選ぶ初期状態：(72) 式は、 $J$  空間で見れば  $J = 0$  即ち  $m = 0$  の一点に  $\delta$  関数状に収束しており、その後の時間発展においても、波束はこの点を中心として徐々に拡散的に広がっていく。従って、 $L$  の値 (つまり  $J$  空間の広さ) を、拡散の解析において注目する時間スケール内で、波束が周期境界に達してしまわない程度の大きさに設定すれば問題無い。幸いにも我々のモデルにおいては、線形振動子と量子 Arnold's Cat Map 系との相互作用強度  $\eta$  を非常に小さく絞るため、 $J$  空間に生じる量子拡散は微弱であり、 $m = 0$  の順位とそれに隣接する  $m = \pm 1$  の順位さえあれば、MSD の大体の値は得られる<sup>\*110</sup>。よって  $L = 2$  か、余裕を踏まえても  $L = 4$  程度に設定すれば十分に実用的な精度を保てる<sup>\*111</sup>。以上のように、 $J$  空間に便宜的な周期性を設ける事によって、 $\phi$  空間もまた離散化される：

$$\phi_n = \frac{\pi n}{L} \quad (-L \leq n \leq L-1) \quad (237)$$

仮に、系の自由度が線形振動子の 1 自由度のみである場合には、付録 5.2 で述べたのと同様の理

<sup>\*109</sup> そうしなければ、自由度ごとに  $\hbar$  の値が異なる、原理的におかしな量子系になってしまう。

<sup>\*110</sup>  $J$  空間の波束の運動は、一般的な量子拡散よりも、2 順位系の励起現象のようなものと見なす方がイメージしやすい。

<sup>\*111</sup> 線形振動子の時間発展の計算コストは概ね  $O(2L \log 2L)$  に比例するため、 $L$  が小さいほど高速計算が可能となる。



由により、波動関数の位置表示  $\zeta_{\hat{\phi}}(\phi_n)$  と運動量表示  $\zeta_{\hat{J}}(J_m)$  との間は離散フーリエ変換 (DFT)

$$\zeta_{\hat{\phi}}(\phi_n) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{m=-L}^{L-1} \zeta_{\hat{p}}(p_m) e^{i\frac{2\pi mn}{2L}} \quad (238)$$

$$\zeta_{\hat{J}}(J_m) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{n=-L}^{L-1} \zeta_{\hat{q}}(q_n) e^{-i\frac{2\pi mn}{2L}} \quad (239)$$

によって対応付けられる.

### 5.5.2 量子 KR 系と線形振動子系の結合、および量子的な時間発展の数値計算方法

題3章で導入した“寿命測定”モデルは、上で量子化した線形振動子を、2自由度の結合量子 Arnold's Cat Map 系に結合した系である. これによって全系のヒルベルト空間は、結合量子 Arnold's Cat Map 系の自由度 ( $N_A N_B$  次元)  $\times$  調和振動子の自由度 ( $2L$  次元) で張られる、 $2L N_A N_B$  次元の空間となる. 全系の波動関数  $\Psi$  は、たとえば全自由度が位置表示の場合に

$$\Psi_{\hat{\theta}, \hat{\phi}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}, \phi_n) \quad (0 \leq s \leq N_A - 1, 0 \leq v \leq N_B - 1, -L \leq n \leq L) \quad (240)$$

のように表される. ここで  $(\theta^{(A)}, I^{(A)})$  が結合量子 Arnold's Cat Map 系における片方の自由度 A であり、 $(\theta^{(B)}, I^{(B)})$  がもう片方の自由度 B, そして  $(\phi, J)$  が線形振動子の自由度である. この波動関数  $\Psi_{\hat{\theta}, \hat{\phi}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}, \phi_n)$  は、計算機上において要素数が  $N_A \times N_B \times 2L$  個の3次元の複素数配列として表現できる. ここから線形振動子の自由度のみ運動量 (作用) 表示に移りたければ、すべての  $\theta_s^{(A)}$  および  $\theta_v^{(B)}$  について、 $\phi_n$  方向に (239) 式の DFT をかければよい:

$$\Psi_{\hat{\theta}, \hat{J}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}, J_m) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{n=-L}^{L-1} \Psi_{\hat{\theta}, \hat{\phi}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}, \phi_n) e^{-i\frac{2\pi mn}{2L}} \quad (241)$$

ここからさらに、すべての  $J_m$  について、量子 Arnold's Cat Map 系の自由度である  $\theta_s$  および  $\theta_v$  方向に (170) 式の2次元 DFT をかければ、全自由度において運動量 (作用) 表示である波動関数が得られる:

$$\Psi_{\hat{I}, \hat{J}}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}, J_m) = \frac{1}{\sqrt{N_A N_B}} \sum_{s=0}^{N_A-1} \sum_{v=0}^{N_B-1} \Psi_{\hat{\theta}, \hat{\phi}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}, J_m) e^{-i\frac{2\pi s r}{N_A}} e^{-i\frac{2\pi u v}{N_B}} \quad (242)$$

同様に適当に DFT をかけて  $\Psi_{\hat{I}, \hat{\phi}}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}, \phi_n)$  などの表示にも移れる.

この波動関数の時間発展を計算機上で再現するにあたって、調和振動子を用いた KQD モデルと同じく、KR の撃力周期  $T$  ごとの変化を写像化して計算する. ただし、KQD モデルの時間発展の数値計算においては普通のシュレーディンガー描像を用いたが、いまのモデルの場合では、線形振動子のハミルトニアン  $\omega J$  の相互作用描像 [41] を用いると、より効率的に数値計算を行う事が可能である [42]. この相互作用描像における全系の状態ベクトル  $|\Psi'\rangle$  は

$$|\Psi'\rangle = e^{i\omega \hat{J} t / \hbar} |\Psi\rangle \quad (243)$$

と表される． $e^{i\omega\hat{J}t/\hbar}$  は， $\hat{J}$  演算子の固有状態の基底で行列表示すると対角的  $\langle J_m | e^{i\omega\hat{J}t/\hbar} | J_n \rangle = e^{i\omega J_m t/\hbar} \delta_{m,n}$  である．この事を用いて，計算機上に保持されたシュレーディンガー描像の波動関数  $\Psi_{\hat{I},\hat{J}}(I_r^{(A)}, I_v^{(B)}, J_m)$  を，相互作用描像の波動関数  $\Psi'_{\hat{I},\hat{J}}(I_r^{(A)}, I_v^{(B)}, J_m)$  へと変換する処理は

$$\Psi'_{\hat{I},\hat{J}}(I_r^{(A)}, I_v^{(B)}, J_m) = \left( \langle I_r^{(A)} | \otimes \langle I_v^{(B)} | \otimes \langle J_m | \right) |\Psi'\rangle \quad (244)$$

$$= \left( \langle I_r^{(A)} | \otimes \langle I_v^{(B)} | \otimes \langle J_m | \right) e^{i\omega\hat{J}t/\hbar} |\Psi\rangle \quad (245)$$

$$= \left[ \langle I_r^{(A)} | \otimes \langle I_v^{(B)} | \otimes \left( \sum_{n=-L}^{L-1} \langle J_m | e^{i\omega\hat{J}t/\hbar} | J_n \rangle \langle J_n | \right) \right] |\Psi\rangle \quad (246)$$

$$= e^{i\omega J_m t/\hbar} \left( \langle I_r^{(A)} | \otimes \langle I_v^{(B)} | \otimes \langle J_m | \right) |\Psi\rangle \quad (247)$$

$$= e^{i\omega J_m t/\hbar} \Psi_{\hat{I},\hat{J}}(I_r^{(A)}, I_v^{(B)}, J_m) \quad (248)$$

のように具体的に表される．即ち，線形振動子について作用表示である波動関数の各  $m$  における値に  $e^{i\omega J_m t/\hbar}$  を乗ずれば，相互作用描像の波動関数となる．この変換は  $\Psi'_{\hat{\theta},\hat{J}}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}, J_m)$  に対しても同様に行える．逆変換として，波動関数の各  $m$  における値に  $e^{-i\omega\hat{J}_m t/\hbar}$  を乗ずればシュレーディンガー描像の波動関数に戻る．

以下， $\hat{H}_{\text{tot}}$  は (53) 式で与えられる全系のハミルトニアンであり， $\hat{H}_{\text{cat2}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t)$  は結合量子 Arnold's Cat Map 系のハミルトニアンであるとする．いまの相互作用描像のとり方においては， $\hat{H}_{\text{tot}} - \omega\hat{J}$  が摂動ハミルトニアンに相当するが，それを相互作用表示したものを  $\hat{H}'(t)$  とすると

$$\hat{H}'(t) = e^{i\omega\hat{J}t/\hbar} (\hat{H}_{\text{tot}} - \omega\hat{J}) e^{-i\omega\hat{J}t/\hbar} \quad (249)$$

$$= e^{i\omega\hat{J}t/\hbar} (\hat{H}_{\text{cat2}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) + \eta\hat{f}(\mathbf{I}) \cos \hat{\phi}) e^{-i\omega\hat{J}t/\hbar} \quad (250)$$

$$= \hat{H}_{\text{cat2}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) + \eta\hat{f}(\mathbf{I}) \cos \left( e^{i\omega\hat{J}t/\hbar} \hat{\phi} e^{-i\omega\hat{J}t/\hbar} \right) \quad (251)$$

$$= \hat{H}_{\text{cat2}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t) + \eta\hat{f}(\mathbf{I}) \cos (\hat{\phi} + \omega t) \quad (252)$$

となる．また，相互作用表示における状態ベクトルの時間発展は

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi'\rangle = \hat{H}'(t) |\Psi'\rangle \quad (253)$$

であるから，時間順序積 (time ordered product) を  $T_{\text{op}}$  として，撃力周期  $T$  ごとの時間発展演算子  $\hat{U}_{\text{tot}}$  は

$$\hat{U}_{\text{tot}}(t) = T_{\text{op}} e^{-(i/\hbar) \int_t^{t+T} \hat{H}'(t') dt'} \quad (254)$$

$$= T_{\text{op}} e^{-(i/\hbar) \int_t^{t+T} \hat{H}_{\text{cat2}}(\hat{\theta}, \hat{I}, t') dt'} e^{-(i/\hbar) \int_t^{t+T} \eta f(\mathbf{I}) \cos(\hat{\phi} + \omega t') dt'} \quad (255)$$

$$= \hat{U}_{\text{cat2}} e^{-i\eta f(\mathbf{I}) [\sin(\hat{\phi} + \omega t + \omega T) - \sin(\hat{\phi} + \omega t)] / \hbar \omega} \quad (256)$$

$$= \hat{U}_{\text{cat2}} e^{-2i\eta f(\mathbf{I}) \cos(\hat{\phi} + \omega t + \omega T/2) \sin(\omega T/2) / \hbar \omega} \quad (257)$$

$$(258)$$

のように表せる．ここで  $\hat{U}_{\text{cat2}}$  は結合量子 Arnold's Cat Map 系における写像 1 回分の時間発展演算子である．あとは，これまでに扱ってきた他のモデルの場合と同様に  $\hat{U}_{\text{tot}}(t)$  を適当に分割

し、その行列表示が対角形になるように、相互作用描像の波動関数  $\Psi'_{\theta,\phi}(\theta_s^{(A)}, \theta_v^{(B)}, \phi_n)$  の各自由度における位置/運動量 (作用) 表示を切り替えながら逐次的に作用させていけば、全系の時間発展  $|\Psi'(t+T)\rangle = \hat{U}_{\text{tot}} |\Psi'(t)\rangle$  を計算機上で再現できる。

### 5.5.3 MSD の数値的な測定方法

続いて、時間発展する全系の波動関数に対し、線形振動子の  $\hat{J}$  空間における拡散の MSD

$$\Delta J^2 = \langle (\hat{J} - \langle \hat{J} \rangle)^2 \rangle \quad (259)$$

$$= \langle \hat{J}^2 \rangle - \langle \hat{J} \rangle^2 \quad (260)$$

を数値的に測定する方法を掲載する。なお、ここでは時刻を表す添え字は省略する。ここでの計算は全て、ある固定された時刻におけるものとし、記号の右下の添え字は、離散化された空間の番号であるものとする。まず、ある時刻におけるシュレーディンガー描像での全系の波動関数を  $\Psi_{\hat{J},j}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}, J_m)$  とする。KR の自由度に関する表示はなんでもよいが、線形振動子の自由度については必ず  $\hat{J}$  表示にしておく必要がある。いまは全自由度を含む系全体としては純粋除隊であるから、波動関数と同じ表示基底における、全系の密度行列 (密度演算子の行列表現) は

$$\rho_{r,s,u,v,m,n} = \Psi_{\hat{J},j}(I_r^{(A)}, I_u^{(B)}, J_m) \Psi_{\hat{J},j}^*(I_s^{(A)}, I_v^{(B)}, J_n) \quad (261)$$

として得られる。この行列は、計算機上においては要素数が  $4N_A^2 N_B^2 L^2$  個の 6 次元の複素数配列として表現できる。ここから KR の自由度について部分トレースをとり、線形振動子における部分密度行列 [39]  $\rho_{mn}^{(L)}$  を求める：

$$\rho_{m,n}^{(L)} = \sum_{r=s} \sum_{u=v} \rho_{r,s,u,v,m,n} \quad (262)$$

この対角成分  $\rho_{m,m}^{(L)}$  は、 $\hat{J}$  の観測において測定値  $J_m$  を得る確率を与えるものである。よって

$$\langle \hat{J} \rangle = \sum_{m=-L}^{L-1} J_m \rho_{m,m}^{(L)} \quad (263)$$

$$\langle \hat{J}^2 \rangle = \sum_{m=-L}^{L-1} J_m^2 \rho_{m,m}^{(L)} \quad (264)$$

の値を計算して (260) 式に代入すれば、この時刻における MSD の値  $\Delta J^2$  を求める事ができる。これを時刻を進めながら繰り返し測定し、記号の右下に時刻を表す添え字を付ければ、第3章で用いた MSD の時系列データ  $\Delta J_\tau^2$  が得られる。

## 5.6 量子 KR 系と線形振動子系の結合系における各種の理論的見積もり (詳細過程)

### 5.6.1 MSD からの相関面積 $A_\tau$ と自己相関関数 $\text{Cr}_\tau(s)$ の導入過程

ここでは、第3章で扱った KR+ 線形振動子モデルにおける MSD や相関面積、二時刻の自己相関関数、およびそれらの固有状態展開の詳細な計算過程を記載しておく。まず MSD の時間発展挙動は、3.2.1 節の (73) 式で導いた通り：

$$\Delta J_\tau^2 = D \sum_{k=0}^{\tau-1} \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle \cos((k-\ell)\omega T) \quad (265)$$

$$= D \sum_{\tau'=0}^{\tau-1} A_{\tau'} \quad (266)$$

であり、相関面積  $A_\tau$  はその時間ごとの増分として導入される。

$$A_\tau = \langle \hat{f}_\tau^2 \rangle + \sum_{m=0}^{\tau-1} \left[ \langle \hat{f}_\tau \hat{f}_m \rangle + \langle \hat{f}_m \hat{f}_\tau \rangle \right] \cos((\tau-m)\omega T) \quad (267)$$

ここで  $s \equiv \tau - m$  つまり  $m = \tau - s$  と置くと、 $m : 0 \rightarrow \tau - 1$  で  $s : \tau \rightarrow 1$  に動くので

$$A_\tau = \langle f_\tau^2 \rangle + \sum_{s=1}^{\tau} \left[ \langle \hat{f}_\tau \hat{f}_{\tau-s} \rangle + \langle \hat{f}_{\tau-s} \hat{f}_\tau \rangle \right] \cos(\omega T s) \quad (268)$$

であり、さらに  $\text{Cr}_\tau(s) = (\langle \hat{f}_\tau \hat{f}_{\tau-s} \rangle + \langle \hat{f}_{\tau-s} \hat{f}_\tau \rangle) / 2$  ( $s \geq 0$ )、 $\text{Cr}_\tau(-s) = \text{Cr}_\tau(s)$  の定義を用いれば

$$A_\tau = \langle f_\tau^2 \rangle + \frac{1}{2} \left\{ \sum_{s=1}^{\tau} \left[ \langle \hat{f}_\tau \hat{f}_{\tau-s} \rangle + \langle \hat{f}_{\tau-s} \hat{f}_\tau \rangle \right] \cos(\omega T s) + \sum_{s=1}^{\tau} \left[ \langle \hat{f}_\tau \hat{f}_{\tau-s} \rangle + \langle \hat{f}_{\tau-s} \hat{f}_\tau \rangle \right] \cos(\omega T s) \right\} \quad (269)$$

$$= \text{Cr}_\tau(0) + \sum_{s=1}^{\tau} \text{Cr}_\tau(s) \cos(\omega T s) + \sum_{s=1}^{\tau} \text{Cr}_\tau(s) \cos(\omega T s) \quad (270)$$

$$= \text{Cr}_\tau(0) \cos(\omega T 0) + \sum_{s=1}^{\tau} \text{Cr}_\tau(s) \cos(\omega T s) + \sum_{s=-\tau}^{-1} \text{Cr}_\tau(s) \cos(\omega T s) \quad (271)$$

$$= \sum_{s=-\tau}^{\tau} \text{Cr}_\tau(s) \cos(\omega T s) \quad (272)$$

とかける。これが (75) 式である。

### 5.6.2 固有状態による展開

$\langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle$  の  $\langle \dots \rangle$  は KR の初期状態  $\langle \psi_0 | \dots | \psi_0 \rangle$  で挟んだ期待値であり、また  $f_k$  は  $\hat{f}(\hat{\mathbf{I}})$  演算子をハイゼンベルグ描像によって表示したものの  $f_k = \hat{U}_{\text{KR}}^{-k} \hat{f}(\hat{\mathbf{I}}) \hat{U}_{\text{KR}}^k$  である。 $\langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle$  を KR の固有状態によっ

て展開すると：

$$\langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle = \langle \psi_0 | \hat{U}_{\text{KR}}^{-k} \hat{f}(\hat{I}) \hat{U}_{\text{KR}}^k \hat{U}_{\text{KR}}^{-\ell} \hat{f}(\hat{I}) \hat{U}_{\text{KR}}^\ell | \psi_0 \rangle \quad (273)$$

$$= \left[ \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} C_m^* \langle m | \right] \hat{U}_{\text{KR}}^{-k} \hat{f}(\hat{I}) \hat{U}_{\text{KR}}^k \left[ \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |n\rangle \langle n| \right] \hat{U}_{\text{KR}}^{-\ell} \hat{f}(\hat{I}) \hat{U}_{\text{KR}}^\ell \left[ \sum_{u=1}^{N_{\text{tot}}} C_u |u\rangle \right] \quad (274)$$

$$= \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \sum_{u=1}^{N_{\text{tot}}} C_m^* \langle m | e^{i\gamma_m k} \hat{f}(\hat{I}) e^{-i\gamma_n k} |n\rangle \langle n| e^{i\gamma_n \ell} \hat{f}(\hat{I}) e^{-i\gamma_u \ell} |u\rangle C_u \quad (275)$$

$$= \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} \sum_{u=1}^{N_{\text{tot}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} C_m^* C_u \langle m | \hat{f}(\hat{I}) |n\rangle \langle n | \hat{f}(\hat{I}) |u\rangle e^{i(\gamma_m - \gamma_n)k} e^{i(\gamma_n - \gamma_u)\ell} \quad (276)$$

とかける．ここで  $C_u = \langle u | \psi_0 \rangle$  であって  $\hat{U}_{\text{KR}} |u\rangle = e^{-i\gamma_u} |u\rangle$  である．この結果から  $\text{Cr}_\tau(s)$  の定義通り，複素共役項を足して2で割った上で，インデックス  $(k, \ell)$  を  $(\tau, \tau - s)$  に置き換えれば (84) 式が得られる．ところで初期状態が固有状態である場合  $|\psi_0\rangle = |m\rangle$  においては  $C_u = \delta_{m,u}$  となるから  $m, u$  についての和は落として：

$$\langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle \Big|_{|\psi_0\rangle=|m\rangle} = \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \langle m | \hat{f}(\hat{I}) |n\rangle \langle n | \hat{f}(\hat{I}) |m\rangle e^{i(\gamma_m - \gamma_n)k} e^{i(\gamma_n - \gamma_m)\ell} \quad (277)$$

$$= \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \left| \langle m | \hat{f}(\hat{I}) |n\rangle \right|^2 e^{i(\gamma_m - \gamma_n)(k - \ell)} \quad (278)$$

とかける．この結果から，カオスによるコヒーレンスの喪失を想定して，一般の初期状態  $|\psi_0\rangle$  についても以下のような近似：

$$\langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle \sim \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \left| \langle m | \hat{f}(\hat{I}) |n\rangle \right|^2 e^{i(\gamma_m - \gamma_n)(k - \ell)} \quad (279)$$

を行ってしまおうというのが，我々が **Diagonal** 近似と呼んでいるものである．この近似は必ずしも  $\langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle$  単体の水準でよく成り立っているわけではないが，しかし  $A_\tau$  のような長時間の累積値に対してあまり寄与しない量だけが除かれている．そのため，この近似を用いて計算した  $A_\tau$  や  $\Delta J_\tau^2$  は，近似を用いない実測値とよく一致する．この近似を用いると， $\text{Cr}_\tau(s)$  の固有状態展開は：

$$\text{Cr}_\tau(s) = \frac{\langle \hat{f}_\tau \hat{f}_{\tau-s} \rangle + \langle \hat{f}_{\tau-s} \hat{f}_\tau \rangle}{2} \quad (280)$$

$$\sim \frac{1}{2} \left[ \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \left| \langle m | \hat{f}(\hat{I}) |n\rangle \right|^2 e^{i(\gamma_m - \gamma_n)s} + \text{複素共役項} \right] \quad (281)$$

$$= \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \left| \langle m | \hat{f}(\hat{I}) |n\rangle \right|^2 \times \frac{e^{i(\gamma_m - \gamma_n)s} + e^{-i(\gamma_m - \gamma_n)s}}{2} \quad (282)$$

$$= \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} \left| \langle m | \hat{f}(\hat{I}) |n\rangle \right|^2 \cos((\gamma_m - \gamma_n)s) \quad (283)$$

のように展開できる．これが (86) 式の具体的な形である．よって相関面積は：

$$A_\tau = \sum_{s=-\tau}^{\tau} \text{Cr}_\tau(s) \cos(\omega T s) \quad (284)$$

$$\sim \sum_{s=-\tau}^{\tau} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{\mathbf{I}}) | n \rangle|^2 \cos((\gamma_m - \gamma_n)s) \cos(\omega T s) \quad (285)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{s=-\tau}^{\tau} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{\mathbf{I}}) | n \rangle|^2 \cos((\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)s) \quad (286)$$

と展開でき，さらに MSD は：

$$\Delta J_\tau^2 = D \sum_{\tau'=0}^{\tau} A_\tau \quad (287)$$

$$\sim \frac{D}{2} \sum_{\tau'=0}^{\tau-1} \sum_{s=-\tau'}^{\tau'} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{\mathbf{I}}) | n \rangle|^2 \cos((\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)s) \quad (288)$$

と展開できる．これが (88) 式である．一方で，(265) 式に (279) 式を直接代入する事によって，MSD は以下の形にも展開できる：

$$\Delta J_\tau^2 = D \sum_{k=0}^{\tau-1} \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \langle \hat{f}_k \hat{f}_\ell \rangle \cos((k - \ell)\omega T) \quad (289)$$

$$\sim D \sum_{k=0}^{\tau-1} \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{\mathbf{I}}) | n \rangle|^2 e^{i(k-\ell)(\gamma_m - \gamma_n)} \times \frac{e^{i(k-\ell)\omega T} + e^{-i(k-\ell)\omega T}}{2} \quad (290)$$

$$= \frac{D}{2} \sum_{k=0}^{\tau-1} \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{\mathbf{I}}) | n \rangle|^2 e^{i(k-\ell)(\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)} \quad (291)$$

ここで和は  $\pm\omega T$  の両方の符号についてとるものとする．この形は (288) 式と比べると，値が実数である事が一目瞭然ではないため冗長に思えるかもしれないが，しかしながら  $\cos$  関数よりも指数関数の方が計算が楽な場合も多いため，式変形の土台として使うにはそれなりに有用である．

### 5.6.3 MSD の長時間平均

(291) 式を以下のように，時刻  $k, \ell$  ごとに分解する：

$$\Delta J_\tau^2 \sim \frac{D}{2} \sum_{k=0}^{\tau-1} \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{\mathbf{I}}) | n \rangle|^2 e^{i(k-\ell)(\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)} \quad (292)$$

$$= \frac{D}{2} \sum_{k=0}^{\tau-1} \sum_{\ell=0}^{\tau-1} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{\mathbf{I}}) | n \rangle|^2 e^{i(\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)k} e^{i(\gamma_n - \gamma_m \mp \omega T)\ell} \quad (293)$$

ここで  $\pm\omega T$  と  $\mp\omega T$  は，前者が + の場合に後者が - となるよう，符号を対応させて書き分けているため，混同しないよう注意が必要である． $\gamma_m$  と  $\gamma_n$  の順序も前後の指数部で逆であるため注意す

る必要がある．このような形に変形すると，指数部分はインデックス  $k, \ell$  についてそれぞれ等比数列であると見なせる．よって  $k, \ell$  のそれぞれについて等比数列の和の公式を用いれば：

$$\Delta J_\tau^2 \sim \frac{D}{2} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2 \times \frac{(1 - e^{i(\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)\tau})(1 - e^{i(\gamma_n - \gamma_m \mp \omega T)\tau})}{(1 - e^{i(\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)}) (1 - e^{i(\gamma_n - \gamma_m \mp \omega T)})} \quad (294)$$

$$= \frac{D}{2} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2 \times \left[ \frac{1 - \cos((\gamma_m - \gamma_n + \omega T)\tau)}{1 - \cos(\gamma_m - \gamma_n + \omega T)} + \frac{1 - \cos((\gamma_m - \gamma_n - \omega T)\tau)}{1 - \cos(\gamma_m - \gamma_n - \omega T)} \right] \quad (295)$$

の形に変形できる．この結果において， $\cos((\gamma_m - \gamma_n \pm \omega T)\tau)$  の部分は時刻  $\tau$  に関して振動的であるから，長時間平均をとれば 0 に収束していく．従って無限の長時間における MSD の平均値，即ち飽和値は， $\delta_{mn}^\pm \equiv \gamma_m - \gamma_n \pm \omega T$  として：

$$\Delta J_\infty^2 \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\Delta J_\tau^2}{\tau} \quad (296)$$

$$\sim \frac{D}{2} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2 \times \left[ \frac{1}{1 - \cos \delta_{mn}^+} + \frac{1}{1 - \cos \delta_{mn}^-} \right] \quad (297)$$

$$= \frac{D}{4} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} |C_m|^2 \sum_{n=1}^{N_{\text{tot}}} |\langle m | \hat{f}(\hat{I}) | n \rangle|^2 \times \left[ \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\delta_{mn}^+}{2}\right)} + \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\delta_{mn}^-}{2}\right)} \right] \quad (298)$$

に収束する．これが (90) 式である．

### 5.7 “最小の観測確率エントロピー”としてのフォン・ノイマンエントロピー

フォン・ノイマンエントロピーは、あらゆる基底において系の状態を観測した場合における、観測確率のエントロピーの下限値を抑えるという性質がある。ここでは、この性質に触れつつ、その証明を行う。まず、 $\hat{\rho}$  を注目している部分系の密度演算子 (3.2.4 節においては  $\rho^{(A)}$  がこれに該当する) とし、その部分ヒルベルト空間を張る任意の完全な直交基底を  $\{|x_n\rangle | 1 \leq n \leq N\}$  とする。ここで  $N$  は部分ヒルベルト空間の次元数 (3.2.4 節においては  $N_A$ ) である。まず、この部分系をこの基底で観測した際、観測値  $x_n$  を得る確率は：

$$P(x_n) = \langle x_n | \hat{\rho} | x_n \rangle \quad (299)$$

与えられる。これはある種の確率変数と見なせるから、確率分布  $P(x_n)$  に対してエントロピー  $S_{\{|x_n\rangle\}}$  は以下のように定義される：

$$S_{\{|x_n\rangle\}} = - \sum_{n=1}^N P(x_n) \log P(x_n) \quad (300)$$

ここで和は  $P(x_n) \neq 0$  の項についてのみとるものとする。この量は当然ながら基底  $\{|x_n\rangle\}$  の選択に依存する。極端な例として、系の状態が運動量演算子  $\hat{I}$  の  $k$  番目の固有状態であった場合、系を  $\hat{I}$  の基底で観測すれば必ず唯一の観測値  $I_k$  を得るから、 $P(I_k) = \delta_{n,k}$  である。よってその観測確率のエントロピーは  $S_{\{|I_n\rangle\}} = 0$  であると思なせる。一方で、同じ状態を今度は位置 (座標)  $\hat{\theta}$  の基底で観測すれば、確率分布は完全に広がりきって  $P(\hat{\theta}_k) = 1/N$  となるから、観測確率のエントロピーは  $S_{\{|\hat{\theta}_n\rangle\}} = \log N$  即ち理論上の最大値をとる。 $S_{\{|x_n\rangle\}}$  は観測確率のばらつきであるから、一見すると系の状態における乱雑さを測る指標に使えそうに思えるが、しかしこのように基底に完全に依存するから都合が悪い。ある基底においてエントロピーが最大であるから、系が最大限に乱雑であるように見えても、別の基底で見れば、実は全く乱雑ではなかったという事があり得るからである。上で挙げた例はまさにその典型的な場合である。

そこで、系の状態の本質的な乱雑さをなんとかエントロピーで測れないかと考察すると、あらゆる基底における  $S_{\{|x_n\rangle\}}$  の中で下限値に着目する事に思い至るのは自然である。それが大きな値をとっていれば、どの基底で観測しても状態が乱雑であることを保証できるからである。その具体的な値を求めるため、まず  $\hat{\rho}$  演算子の固有状態を  $|\lambda_m\rangle$  と置こう。即ち  $\hat{\rho}|\lambda_m\rangle = \lambda_m|\lambda_m\rangle$  である。これらを用いて、 $\hat{\rho}$  演算子は以下のように分解できる：

$$\hat{\rho} = \sum_{m=1}^N \lambda_m |\lambda_m\rangle \langle \lambda_m| \quad (301)$$



続いて (300) 式を以下のように変形する：

$$S_{\{|x_n\rangle\}} = - \sum_{n=1}^N \langle x_n | \hat{\rho} | x_n \rangle \log \langle x_n | \hat{\rho} | x_n \rangle \quad (302)$$

$$= - \sum_{n=1}^N \langle x_n | \left[ \sum_{m=1}^N \lambda_m |\lambda_m\rangle \langle \lambda_m| \right] | x_n \rangle \log \langle x_n | \left[ \sum_{m=1}^N \lambda_m |\lambda_m\rangle \langle \lambda_m| \right] | x_n \rangle \quad (303)$$

$$= - \sum_{n=1}^N \left[ \sum_{m=1}^N \lambda_m |\langle \lambda_m | x_n \rangle|^2 \right] \log \left[ \sum_{m=1}^N \lambda_m |\langle \lambda_m | x_n \rangle|^2 \right] \quad (304)$$

$$= - \sum_{n=1}^N f(\lambda_m X_{mn}) \quad (305)$$

ここで  $X_{mn} \equiv |\langle \lambda_m | x_n \rangle|^2$ ,  $f(x) = x \log x$  と置いた.  $f(x)$  に関しては,  $d^2 f(x)/dx^2 = 1/x$  であり, これは区間  $(0, \infty)$  において正であるから,  $f(x)$  はこの区間において凸関数である. 凸関数では, 任意の  $x_1, x_2$ , および  $c_1 + c_2 = 1$  を満たす非負の  $c_1, c_2$  について, 以下の関係式が成立する：

$$f(c_1 x_1 + c_2 x_2) \leq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) \quad (306)$$

この関係を多変数に拡張したものはイエンゼン (Jensen) の不等式：

$$f\left(\sum_{n=1}^N c_n x_n\right) \leq \sum_{n=1}^N c_n f(x_n) \quad (307)$$

としてよく知られている. ここで  $\sum_{n=1}^N c_n = 1$  である. この証明については本筋から外れるためここでは省くが, 数学的帰納法を用いれば簡単に証明できる. いまの我々の場合においては  $X_{mn}$  は非負であり, さらに  $\sum_{n=1}^N X_{mn} = 1$  であるから, (305) 式にイエンゼンの不等式をそのまま適用できる. すると：

$$S_{\{|x_n\rangle\}} \geq - \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N X_{mn} f(\lambda_n) \quad (308)$$

の関係が導かれる. 等号が成り立つのは  $X_{mn} = \delta_{m,n}$  の場合であるが, これは任意の  $n$  について  $|x_n\rangle = |\lambda_n\rangle$  の場合, 即ち  $\hat{\rho}$  演算子の固有状態を基底に選んだ場合であると言える. このとき  $S_{\{|x_n\rangle\}}$  は最小値：

$$S = - \sum_{n=1}^N \lambda_n \log \lambda_n \quad (309)$$

をとるが, これはまさにフォン・ノイマンエントロピーに他ならない.

### 5.8 固有状態のフォン・ノイマン エントロピーおよび異常揺らぎの $\hbar$ 依存性

第3章の本文中でも扱ったが，結合量子 KR 系の結合強度  $\varepsilon$  がある程度の領域において，時間発展演算子の全固有状態の平均フォン・ノイマン エントロピー (エンタングルメントエントロピー, EE)

$$S \equiv \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} S_m \quad (310)$$

が閾值的に増大する．ここで  $S_m$  は固有状態  $|m\rangle$  に対して測定した EE の値であり，(105) 式において  $\hat{\rho}^{(A)} = \text{Tr}_{(B)} |m\rangle\langle m|$  とすれば得られる．この値の  $\varepsilon$  依存性および  $\hbar$  依存性は図 27 において見た通りであるが，その最大値は  $\log N_A$  に比例するため， $\hbar (= 2\pi/N_A)$  の値によって変化する．従って  $S$  の値を最大値  $\log N_A$  でスケールリングして，純粋に閾値曲線の  $\hbar$  依存性を見たいものである．実際にそのようにプロットしたものを図 40(a) に示した．

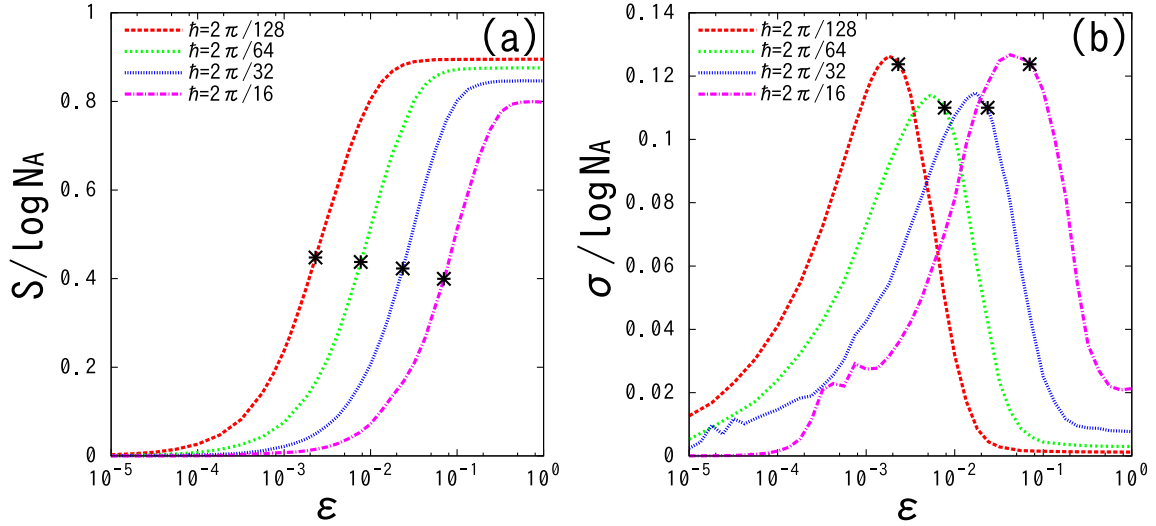


図 40 (a): 全固有状態の平均 EE: (310) 式の  $\varepsilon$  依存性. (b): その固有状態ごとの揺らぎを見るための標準偏差: (311) 式の  $\varepsilon$  依存性. なお，これらの結果はアンサンブル平均をとっていないものであるが，その代わりに  $\hbar = 2\pi/128$  の系列まで求めてある．星印で示してあるのは，便宜的な転移の閾値  $\varepsilon^*$  の位置であり，その  $\hbar$  依存性は図 16(b) に示してある．

図 40 から，最大値でスケールリングした  $S$  の閾値曲線は， $\hbar$  の値を変えても概ね相似的な形状をしている事が見て取れる．つまり，少なくとも我々の計算した範囲においては， $\hbar \rightarrow 0$  の方向においても，この領域の幅のオーダー<sup>\*112</sup>が狭まっていくような傾向は全く見られない．この事は，少なくとも 2 自由度においては，我々の注目している現象が，本質的に臨界を伴う相転移現象ではない事を強く示唆している．

\*112 横軸が対数軸である事に注意する必要がある．

続いて、本文中の図 28 において示した、固有状態ごとの EE の揺らぎ (ばらつき) を表す標準偏差

$$\sigma \equiv \sqrt{\frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{tot}}} (S - S_m)^2} \quad (311)$$

についても、やはり EE の最大値  $\log N_A$  でスケーリングしつつ  $\hbar$  依存性を確認したい。実際にそのようにプロットしたものを図 40(b) に示した。同図から、やはり EE の揺らぎも  $\hbar \rightarrow 0$  の方向において収束していくような傾向は全く見らない事が見て取れる。従ってこの揺らぎ現象は、様々な現象でふつう見られるような量子揺らぎとは異なり、半古典極限においても収束しない異常なものであると言える。このような背景があるため、本文中ではこの EE 揺らぎを“異常揺らぎ”と呼んでいたものである。



## 6 謝辞

学部生の卒研時代から量子カオスの道をご指導下さり、本研究を共同研究として進めて下さった池田研介教授に、心より感謝申し上げます。池田先生には、入学直後の学部1回生の頃から本当に長期に渡ってお世話になりました。日常においても、よく身の周りの物理に関する話をして下さり、その度に様々な現象について深く考える貴重な機会を与えて下さりました。さらに、同じく本研究を含む一連の研究を共同研究として進めて下さり、投稿論文の共著者でもある山田弘明博士に、心より感謝申し上げます。幾度か体調を崩してしまい、せっかくの重要な打ち合わせの場に参加できなかった事は、本当に申し訳ございませんでした。量子カオスに関する知識や経験において非常に未熟な私が、博士課程の研究生生活をなんとか一応の所まで漕ぎ着けられたのは、池田先生と山田様に様々な事をご教示賜った事に尽きるものです。そして、博士後期課程から研究室に受け入れて下さった菅原祐二教授に、心より御礼申し上げます。お陰様で、立命館で博士課程の研究生を送る事ができ、感謝の念に堪えません。加えて、研究の最終段階において、投稿論文の英文表現に関する数多くのご助言を頂いた Peter Davis 様に、深く感謝申し上げます。特に、不可逆性の寿命といった概念が上手く伝わらず苦難していた際、主張したい表現と伝わりやすさとの間の障壁について親身にご相談に応じて頂き、前に進む事ができました。さらに、学部・修士時代から研究等も含めて度々ご助言下さった清水寧教授、現・中部大学の奥島輝昭准教授、および俵口忠功博士に深く感謝申し上げます。清水先生には、1回生の力学講義から、非線形モデルの数値計算の基礎まで、実に多くの事を長期に渡りご教示賜りました。奥島様には、卒研ゼミや修士時代、研究室生活などにおいて本当にお世話になり、非線形物理学やカオスにおける重要な知識をご教示賜りました。俵口様には、4回生の研究室配属時におけるカオス入門ゼミで大変お世話になり、カオスの議論に初めて本格的に接する機会を賜りました。また、これまで長期に渡りお世話になり、各分野の基礎をご教示賜った、物理科学科の先生方に重ねて感謝申し上げます。加えて、優しく親切でありながら、物理の知識や解析計算、計算機の扱いなどにおいて“雲の上”の先輩方に囲まれて、幾多のご助言や議論の機会を賜った事は、本当に恵まれた経験でした。現・金沢大学の新山友暁博士からは、学部2回生の理論物理学セミナーの頃から卒研・修士課程時代に渡って本当にお世話になり、博士課程以降もお会いする度に研究生生活などについての親身なご助言を賜りました。また、修士課程時代を中心にお世話になった打田旭宏先輩には、ゼミでの議論をはじめとして、計算機や量子系の数値計算に関する知識などもご教示賜りました。宮本英司先輩には、やはりゼミで大変お世話になった上に、古典カオスに関するいくつかの知識をご教示賜りました。山村良平先輩には、物理だけでなく、思考・認識プロセス等に関する非常に興味深い議論の機会を賜りました。さらに多くの元・研究室仲間や同回生、および先輩や後輩の方々にも大変お世話になりました。特に他研究室でありながら、同じ博士課程において度々議論や雑談に応じて頂き、日常の空気を和ませてくれた土田君にはとても感謝しています。最後に、高校を中退せざるを得なかった私に対して、大学で再び学業に接する機会を与えてくれた上に、博士課程まで送り出してくれた両親と、会う度に(幾度となく電話でも)応援の声を送ってくれた祖母には本当に感謝しています。これまで本当に多くの方に支えて頂き、どれだけ感謝の言葉を並べても足りませんが、この場をお借りして心より御礼申し上げます。



## 参考文献

- [1] F. Matsui, H. S. Yamada and K. S. Ikeda, "Measuring lifetime of correspondence with classical decay of correlation in quantum chaos", *Europhys. Lett.* **113**, 40008, (2016).
- [2] F. Matsui, H. S. Yamada and K. S. Ikeda, "Relation between irreversibility and entanglement in classically chaotic quantum kicked rotors", under review.
- [3] F. Matsui, H. S. Yamada and K. S. Ikeda, (Full paper of above letters), unpublished.
- [4] F. Matsui, H. S. Yamada and K. S. Ikeda, "A Quantum Damper"(Full paper), unpublished.
- [5] リチャード・P・ファインマン, ロバート・B・レイトン, マシユー・サンズ著, 富山小太郎 訳, 「ファインマン物理学 II 光・熱・波動」, 岩波書店, (1986)
- [6] Martin C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, (1990)
- [7] Michael Tabor, *Chaos and Integrability in Nonlinear Dynamics: An Introduction*, A Wiley-Interscience Publication, (1989)
- [8] A. Peres, "Stability of quantum motion in chaotic and regular systems" *Phys. Rev.* **A30**, 1610 (1984).
- [9] Ph. Jacquod and C. Petitjean, "Decoherence, entanglement and irreversibility in quantum dynamical systems with few degrees of freedom", *Advances in Physics*, **58**, 67, (2009).
- [10] T. Gorin, T. Prosen, T. H. Seligman, and M. Znidaric, "Dynamics of Loschmidt echoes and fidelity decay", *Phys. Rep.* **435**, 33, (2006).
- [11] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press 2001).
- [12] C. Miquel, J. P. Paz, and W. H. Zurek, "Quantum Computation with Phase Drift Errors", *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 3971 (1997).
- [13] G. Benenti, C. Casati, S. Montangero, and D. L. Shepelyansky, "Efficient Quantum Computation of Complex Dynamics", *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 227901 (2001).
- [14] G. Casati *et al*, in *Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems*, edited by G. Casati and J. Ford, Lecture Notes in Physics Vol.93 (Springer-Verlag, Berlin, 1979), p. 334.
- [15] S. Fishman, D. R. Grempel, and R. E. Prange, "Chaos, Quantum Recurrences, and Anderson Localization", *Phys. Rev. Lett.* **49**, 509 (1982).
- [16] E. Ott, T. M. Antonsen, Jr., and J. D. Hanson, "Effect of Noise on Time-Dependent Quantum Chaos", *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2187, (1984)
- [17] S. Adachi, M. Toda, and K. Ikeda, "Potential for Mixing in Quantum Chaos", *Phys. Rev. Lett.* **61**, 655, (1988)
- [18] S. Adachi, M. Toda, and K. Ikeda, "Quantum-classical Correspondence in Many-Dimensional Quantum Chaos", *Phys. Rev. Lett.* **61**, 659 (1988).
- [19] B. Gadway, J. Reeves, L. Krinner, and D. Schneble, "Evidence for a Quantum-to-Classical Transition in a Pair of Coupled Quantum Rotors", *Phys. Rev. Lett.* **110**, 190401 (2013).

- [20] G. Casati, I. Guarneri, and D. L. Shepelyansky, "Anderson Transition in a One-Dimensional System with Three Incommensurate Frequencies" *Phys. Rev. Lett.* **62**, 345 (1989).
- [21] G. Lemarie, B. Gremaud, and D. Delande, "Universality of the Anderson transition with the quasiperiodic kicked rotor", *Europhys. Lett.* **87**, 37007 (2009)
- [22] M. Lopez, J. F. Clement, P. Szriftgiser, J. C. Garreau, and D. Delande, "Experimental Test of Universality of the Anderson Transition", *Phys. Rev. Lett.* **108**, 095701 (2012).
- [23] H. S. Yamada, F. Matsui, and K. S. Ikeda, "Critical phenomena of dynamical delocalization in a quantum Anderson map", *Phys. Rev.* **E92**, 062908 (2015).
- [24] K. Ikeda, in *Quantum Chaos*, edited by G. Casati and B.V. Chirikov (Cambridge Univ. Press, 1996), p.145.
- [25] H. S. Yamada and K. S. Ikeda, "Universal irreversibility of normal quantum diffusion", *Phys. Rev.* **E82**, 060102(R) (2010).
- [26] L. E. Ballentine and J. P. Zibin. "Classical state sensitivity from quantum mechanics", *Phys. Rev.* **A54**, 3813, (1996).
- [27] I. Prigogine, *From Being to Becoming: Time and Complexity in the Physical Sciences*, Freeman, San Francisco, (1980).
- [28] K. Ikeda, "Self-Organization of Dissipation in Classically Chaotic Systems", *Ann. Phys.* **227**, 1 (1993).
- [29] D. Cohen, "Quantum Dissipation due to the Interaction with Chaotic Degrees of Freedom and the Correspondence Principle", *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4951 (1999).
- [30] D. Cohen *Ann. Phys.* **283**, 175 (2000).
- [31] エリ・デ・ランダウ, イエ・エム・リフシッツ 著, 広重徹, 水戸巖 訳, 「ランダウ=リフシッツ 理論物理学教程 力学」, 東京都書株式会社, (1974)
- [32] K. Husimi, "Some Formal Properties of the Density Matrix", *Proc. Phys. Math. Soc. Jpn.* **22**, 264, (1940)
- [33] J. v. ノイマン 著, 井上健, 広重徹, 恒藤敏彦 訳, 「量子力学の数学的基礎」, みすず書房, (1957)
- [34] A. Lakshminarayan, "Entangling power of quantized chaotic systems", *Phys. Rev.* **E64**, 036207, (2001).
- [35] H. Fujisaki, T. Miyadera, and A. Tanaka, "Dynamical aspects of quantum entanglement for weakly coupled kicked tops", *Phys. Rev.* **E80**, 066201, (2003).
- [36] R. Demkowicz-Dobrzanski, and M. Kus, "Global entangling properties of the coupled kicked tops", *Phys. Rev.* **E70**, 066216, (2004).
- [37] N. N. Chung and L. Y. Chew, "Dependence of entanglement dynamics on the global classical dynamical regime", *Phys. Rev.* **E80**, 016204, (2009).
- [38] M. Lombardi and A. Matzkin, "Entanglement and chaos in the kicked top", *Phys. Rev.* **E83**, 016207, (2011).
- [39] リチャード・P・ファインマン 著, 田中新, 佐藤仁 訳, 「ファインマン統計力学」, シュプリン



ガー・ジャパン, (2009)

- [40] 桜井純 著, 桜井明夫 訳, 「現代の量子力学 (上)」, 吉岡書店, (1989)
- [41] 桜井純 著, 桜井明夫 訳, 「現代の量子力学 (下)」, 吉岡書店, (1989)
- [42] 打田旭宏, 「一様な共鳴面上での Arnold 拡散とその量子版の解析」, 立命館大学大学院 修士論文, (2009)
- [43] G. Benenti and G. Casati, "How complex is quantum motion?", *Phys. Rev.* **E79**, 025201(R) (2009).
- [44] G. P. Berman and G. M. Zaslavsky, "Condition of stochasticity in quantum nonlinear systems", *Physica* **A91**, 450 (1978).
- [45] D. L. Shepelyansky, "Some statistical properties of simple classically stochastic quantum systems", *Physica* **D8**, 208 (1983).