O-17

シュレディンガー・ランジュバン方程式とその性質

Properties of Schrödinger-Langevin equation

○長尾優輝[1], 鈴木隆史[2], 出口真一[3]
*Nagao Yuuki[1], Takafumi Suzuki[2], Shinichi Deguchi[3]

Abstract : We investigate properties of the Schrödinger-Langevin equation and derive it using Nelson's stochastic quantization.

1. 導入

散逸量子系は，様々な視点から多くの人々により研究されている．それらの中で，次のシュレディンガー・ランジュバン方程式（SL 方程式）に関する研究がある．

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\psi(x,t) + \frac{\hbar\gamma}{2im}\left[\log\frac{\psi}{\overline{\psi}} - \left\langle \log\frac{\psi}{\overline{\psi}}\right\rangle\right]\psi(x,t), \tag{1}$$

ここで，$\gamma(>0)$ は減衰係数であり，期待値は $\langle A\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\overline{\psi}A\psi dx$ のように定義される．SL 方程式は Kostin によりランジュバン方程式との対応に基づいて導かれた．[1]

本研究では初めに，具体例として SL 方程式の調和振動子解を求め，実際にそれが散逸を表すことを確認する．次に，SL 方程式から確率保存則，エネルギーの減衰，エーレンフェストの定理を導く．最後に，ネルソンの確率量子化を用いて SL 方程式をより系統的に導出する．

2. SL 方程式の調和振動子解

調和振動子の SL 方程式を解くために

$$\psi_n(x,t) = u_n(x-\chi(t))\exp\left[i\left\{\frac{xP(t)}{\hbar} - \frac{E_n}{\hbar}t - g(t)\right\}\right] \tag{2}$$

という波動関数を仮定する．ここで，$\chi(t), P(t), g(t)$ は t の未知関数であり，$u_n(x)$ は

$$u_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} H_n(\alpha x)\exp\left[-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right] \tag{3}$$

($\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$) と定義される調和振動子の固有関数である．式 (2) を SL 方程式に代入すると

$$P(t) = m\dot{\chi}(t), \tag{4a}$$

$$\dot{P}(t) = -\left(m\omega^2\chi(t) + \frac{\gamma}{m}P(t)\right), \tag{4b}$$

$$\dot{g}(t) = \frac{1}{\hbar}\left[\frac{P^2(t)}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\chi^2(t) - \frac{\gamma}{m}P(t)\chi(t)\right] \tag{4c}$$

が得られ，式 (4) から P を消去すると，

$$\ddot{\chi}(t) + \frac{\gamma}{m}\dot{\chi}(t) + \omega^2\chi(t) = 0 \tag{5}$$

が求まる．この方程式の解は

$$\chi(t) = \chi_0\exp\left[-\frac{1}{2}\frac{\gamma}{m}t\right]\cos(\omega t - \delta) \tag{6}$$

であり，古典的な減衰調和振動子を表している．ここで，δ は初期位相，χ_0 は最大振幅である．この $\chi(t)$ を式 (2) に代入することにより，量子論的な減衰調和振動子の振る舞いを知ることができる．

3. SL 方程式の性質

SL 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi + L\psi \tag{7}$$

のように書ける。ただし，$\hat{H}$ と L は次式で定義される．

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V,\ L = \frac{\hbar\gamma}{2im}\left[\log\frac{\psi}{\overline{\psi}} - \left\langle\log\frac{\psi}{\overline{\psi}}\right\rangle\right]. \tag{8}$$

（1）確率保存則

SL 方程式 (7) の両辺に $\overline{\psi}$ をかけると

$$i\hbar\overline{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \overline{\psi}\left(\hat{H} + L\right)\psi. \tag{9}$$

が得られ，式 (9) の複素共役をとると次式が得られる．

$$-i\hbar\psi\frac{\partial\overline{\psi}}{\partial t} = \psi\left(\hat{H} + L\right)\overline{\psi} \tag{10}$$

式 (9) から式 (10) を引くと L が相殺して連続の方程式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \tag{11}$$

が求まる．ただし，$\rho = |\psi|^2$, $J = \frac{\hbar}{2im}\left(\overline{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\overline{\psi}}{\partial x}\right)$ である．このようにして確率保存則が導かれる．

（2）エネルギーの減衰

全エネルギー E は $E = \int_{-\infty}^{\infty}\overline{\psi}\hat{H}\psi dx$ で定義される．これの時間微分を計算すると，

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial L}{\partial x}Jdx \tag{12}$$

が得られる．波動関数の極表示 $\psi = R\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]$ を式 (8) の L と確率の流れ密度 J に代入すると，$L = \frac{\gamma}{m}[S - \langle S\rangle]$ と $J = \frac{1}{m}R^2\frac{\partial S}{\partial x}$ が導かれる．これらを式 (12) に代入すると

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{\gamma}{m^2}\left\langle\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\right\rangle \tag{13}$$

[1] 日大理工・院（前）・量子　[2] 日大・研究員・量科研　[3] 日大・教員・量科研

が求まり，時間発展でエネルギー E が減衰することがわかる．

(3) エーレンフェストの定理

運動量演算子の期待値は $\left\langle \hat{P} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi dx$ で定義される．この式を時間微分すると

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{P} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle - \frac{\gamma}{m}\left\langle \frac{\partial S}{\partial x} \right\rangle \tag{14}$$

が得られる．これは，抵抗力のある場合のエーレンフェストの定理である．

(4) 減衰項のあるハミルトン-ヤコビ方程式

波動関数の極表示を SL 方程式に代入すると

$$\begin{aligned} & i\hbar\frac{\partial R}{\partial t} - R\frac{\partial S}{\partial t} \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} - \frac{i\hbar}{m}\frac{\partial R}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x} - \frac{i\hbar}{2m}R\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \\ & + \frac{R}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + VR + \frac{\gamma}{m}\left(S - \langle S \rangle\right) R \end{aligned} \tag{15}$$

が得られる．式 (15) を実部と虚部に分けると，実部は

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m}\frac{1}{R}\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} - \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - V - \frac{\gamma}{m}\left(S - \langle S \rangle\right) \tag{16}$$

となり，虚部は

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{1}{m}\frac{\partial R}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x} - \frac{R}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \tag{17}$$

となる．実部の古典的極限をとると

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V + \frac{\gamma}{m}\left(S - \langle S \rangle\right) = 0 \tag{18}$$

が導かれるが，これは減衰項のあるハミルトン-ヤコビ方程式である．一方で虚部は式 (11) に一致する．

4. 確率量子化による SL 方程式の導出

一般に，散逸系のラグランジアンやハミルトニアンの設定は難しい．そこで，運動方程式に基づく量子化法であるネルソンの確率量子化 [3] を用いて SL 方程式の導出を試みる．[4]

量子力学に従う粒子の運動が確率過程 $X(t)$ によって

$$dX(t) = \begin{cases} b(X(t),t)dt + \sqrt{\dfrac{\hbar}{m}}dW(t) & (dt > 0) \\ b_*(X(t),t)dt + \sqrt{\dfrac{\hbar}{m}}dW_*(t) & (dt < 0) \end{cases} \tag{19}$$

と表されると仮定する．ここで，$W(t)$ はウィーナー過程，$*$ は時間反転，$b(X(t),t)$ は平均前方速度場を表す．

条件付き期待値 $E_t\left[\bullet\right] = E\left[\bullet | X(t)\right]$ を用いて確率過程 $f(t)$ の平均微分を

$$Df = \lim_{dt \to 0+} E_t\left[\frac{df}{dt}\right], \quad D_* f = \lim_{dt \to 0-} E_t\left[\frac{df}{dt}\right] \tag{20}$$

と定義し，$X(t)$ の平均速度 v と平均加速度 a を

$$v = \frac{1}{2}\left(DX + D_* X\right), \quad a = \frac{1}{2}\left(DD_* X + D_* DX\right) \tag{21}$$

と定義する．平均速度 v の平均微分を実行すると $v = \frac{1}{2}\left(b + b_*\right)$ が得られ，平均加速度 a は

$$a = \frac{\partial v}{\partial t} + v\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2m^2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\sqrt{\rho}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sqrt{\rho}\right) \tag{22}$$

と求まる．ただし，ここでフォッカー・プランク方程式を用いた．式 (22) を速度に比例する項を持つニュートン・ネルソンの運動方程式 $ma + \gamma v + \frac{\partial V}{\partial x} = 0$ に代入すると

$$m\frac{\partial v}{\partial t} + mv\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\sqrt{\rho}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sqrt{\rho}\right) + \gamma v + \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \tag{23}$$

が得られる．ここで，$v = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}$ とおき，式 (23) を x で積分すると

$$\begin{aligned} & \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 \\ & - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\sqrt{\rho}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sqrt{\rho}\right) + \frac{\gamma}{m}S + V + C = 0 \end{aligned} \tag{24}$$

が求まる．ただし，C は t の任意関数である．式 (24) に $\psi = \sqrt{\rho}\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]$ を代入すると，

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\psi + \frac{\hbar\gamma}{2im}\left(\log\frac{\psi}{\overline{\psi}}\right)\psi + C\psi \tag{25}$$

が得られる．これが平均的にシュレディンガー方程式になるように C を選ぶと式 (25) は，

$$\begin{aligned} & i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} \\ & = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\psi + \frac{\hbar\gamma}{2im}\left[\log\frac{\psi}{\overline{\psi}} - \left\langle \log\frac{\psi}{\overline{\psi}} \right\rangle\right]\psi \end{aligned} \tag{26}$$

となり，SL 方程式を導くことができる．

5. まとめと今後の課題

本研究では SL 方程式の調和振動子解を求め，それが散逸を表すことを確認した．また，SL 方程式から確率保存則，エネルギーの減衰，エーレンフェストの定理を導いた．また，ネルソンの確率量子化を用いて SL 方程式を導出した．

今後の課題として，散逸量子系に関する他の研究（例えば [5]）との比較検討を行うことが挙げられる。

参考文献

[1] M.D. Kostin, J. chem. Phys. **57** (1972)
[2] J.J. Griffin and K -K. Kan, Rev. Mod. Phys. **48** (1976)
[3] E. Nelson, Phys. Rev. **150**, (1966)
[4] 保江邦夫. 物性研究 **26(6)**, (1976)
[5] S.Deguchi, Y.Fujiwara, Phys. Rev. A101, 022105 (2020)