

古典統計的手法による量子トンネル効果の計算

平山 貴之*

Quantum tunneling using the classical stochastic method

Takayuki HIRAYAMA*

(Received 5th Mar. 2025)

Solving the time-dependent Schrödinger equation for many-particle systems is notoriously challenging. The classical stochastic method, a relatively recent approach, has emerged as a promising tool for simulating quantum dynamics in such systems. To assess their accuracy in capturing quantum dynamics, we evaluate these methods by calculating tunneling effects in single-particle quantum mechanics. Given that extending the classical stochastic method from single-particle systems to many-particle systems is conceptually straightforward, this validation carries substantial significance.

Keywords: Quantum tunneling effect, stochastic method

1. 背景

時間依存シュレディンガー方程式を解き、量子ダイナミクス(時間発展)をシミュレーションする研究は、非常に幅広い物理学の重要な領域で進められています。その例として、量子コンピュータの発展、電子スピンやホール効果、励起状態に関わる量子物性物理学、さらにインフレーションや宇宙初期の相転移といった量子宇宙論の研究などが挙げられます。

しかし、粒子数が増加すると、時間依存シュレディンガー方程式を解くことは極めて困難になります。本研究では、この困難を克服する新しい計算手法である「classical stochastic method (古典統計的手法)」(参考文献 1)の正確性と有効性を検証することを目的としています。具体的には、量子トンネル効果の数値計算を通じて、この手法がどの程度有用であるかを示します。

2. 手法

シュレディンガー方程式を解くことで、波動関数の時間発展を計算することができます。一方、量子力学には別の等価な計算方法として、ハイゼンベルクの運動方程式を解くことで演算子の時間発展を計算する手法があります。時間依存ハイゼンベルク運動方程式を解くアプローチとして注目されているのが古典統計的手法です。

これまでの先行研究における「classical statistical method」は、量子力学や量子論を近似する手法として利用されてきましたが、正確な計算を行うことはできず、量子力学と一致しないことが知られていました。しかし、(参考文献 1)における研究により、ハイゼンベルクの運動方程式に基づく新しい手法である古典統計的手法が、量子力学および量子論を

* 数理・物理サイエンス学科 (Department of Mathematical and Physical Sciences)

正確に計算できることが理論的に示されました。

ただし、この理論的な結果を実際の数値計算に適用することは別の課題です。数値計算によって新しい手法が正しく実現されて初めて、その有効性が確認されます。本研究では、古典統計的手法とそれを支える数値計算の具体的な方法について説明します。

粒子の位置を $x(t)$ とすると、量子力学の基底状態では、安定な粒子の場合、期待値はゼロ、 $\langle x(t) \rangle = 0$ 、ですが、二乗期待値は不確定性原理を示す、 $\langle x(t)^2 \rangle = \hbar/2$ となります(ここで $\hbar$ はプランク定数です)。古典統計的手法では、この特性をホワイトノイズとして実現し、さらにそれを複素ホワイトノイズで拡張することで、量子力学と等価な結果が得られることが示されます。複素ホワイトノイズは、実数ホワイトノイズ $J_1(t)$ と $J_2(t)$ を用いて $J(t) = J_1(t) + iJ_2(t)$ と定義され、ハイゼンベルグ運動方程式に加えられます。

$$\partial_t^2 x(t) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} + J(t)$$

ここで、トンネル効果を示すポテンシャル $V(x)$ として、先行研究で用いられた以下の形状を採用しました：

$$V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2 \left(1 - \frac{x^2}{x_0^2}\right) / \left(1 + \frac{x^4}{x_0^4}\right)$$

ハイゼンベルグ運動方程式を数値的に解く上での初期条件として、基底状態のエネルギー $E = \hbar\omega/2$ に対応するランダムノイズを設定し、微分方程式を時間に沿って解き $x(t)$ が得られます。この計算を何度も繰り返し、ホワイトノイズ全体にわたって平均を取ることによって期待値 $\langle x(t)^2 \rangle$ が計算されます。

先行研究(参考文献 2)では、初期条件にランダムノイズを与えたものの、ハイゼンベルグ運動方程式にはホワイトノイズ項が含まれていませんでした。このため、計算された $\langle x(t)^2 \rangle$ と時間依存シュレディンガー方程式で得られる結果にはズレが生じていました(図 1 参照)。しかし、本研究では複素ホワイトノイズ項を加えることで、図 2 に示すように量子力学と一致する結果が得られることを確認しました。

現在、統計誤差をさらに減らすため、数値計算の効率化に取り組んでいます。多粒子系の量子力学(量子論)では、ハイゼンベルグ運動方程式を利用するため、シュレディンガー方程式を解く以外の手法が不可欠です。その点で、量子ダイナミクスを正確に計算できる古典統計的手法は、今後極めて重要で応用範囲の広い手法となるでしょう。本研究が、量子ダイナミクスを正しく計算できることを確認した意義は非常に大きいといえます。

3. 図

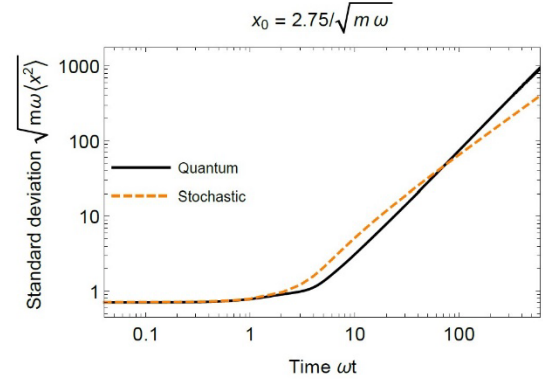


図 1: 実線が波動関数。点線が先行研究

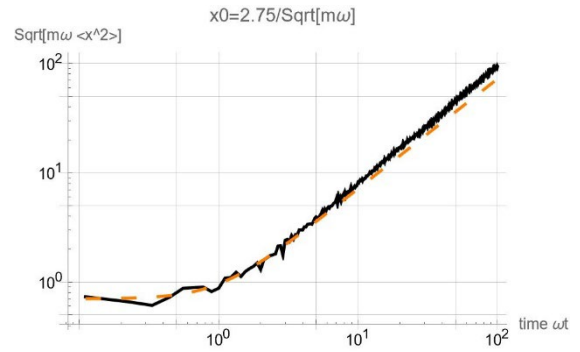


図2: 点線が先行研究。実線が今回の結果

4. 参考文献

参考文献 1: Classical Statistical simulation of Quantum Field Theory, 平山 貴之, JHEP01(2024)097

Particle creation using the classical stochastic method, 平山 貴之, Journal of the Chinese Statistical Association に掲載予定

参考文献 2: Quantitative Analysis of the Stochastic Approach to Quantum Tunneling, M. P. Hertzberg, F. Rompineve and N. Shah, PhysRevD.102.076003