一次元ランダム系における自発的散逸 [1]

新潟大工　山田 弘明 [2]
Faculty of Engineering,
Niigata University,
Ikarashi 2-Nocho 8050, Niigata 950-2181

Abstract

従来, 量子系の性質を調べる際には, 注目する系＋結合する無限自由度系（熱浴）などを導入し計算を進めることが多かった。ここでは, 少数自由度の閉じた量子系の中で不可逆現象を引き起こす単純なモデルとして, 有限個の調和振動子と相互作用する一次元ランダム系を使い, シミュレーションの結果を示す。

1　序

入射した電子がランダムに分布した不純物に散乱される一電子問題を考える。簡単のため一次元または, 擬一次元系とする。ランダムな多重散乱による干渉効果が局在を誘発し, 電子の伝導性は低下する [1, 2]。もし, 外場により加速された電子の伝導に定常状態が実現するためには, 考えている系内に散逸が存在しなければならない。そこで, 全系＝注目する体系＋相互作用する外系と見なし, 注目する体系のもつ性質を取り扱うという様々な手法が用いられている。電気伝導の計算においても, 線形応答理論は全系に混合性を仮定しているし, ランダウアー公式は接触した外系での急激な散逸を仮定している。また, 相互作用する外系の自由度を無限自由度の調和振動子系（量子ランジュバン方程式に対応する）として, この自由度分を積分し有効作用を求め, 散逸のある量子系として取り扱う手法も広く用いられている [3, 4]。これらは, いわば**開いた量子系**を取り扱い散逸の効果を含めていることになる。

これに対し, 我々が考えたいのは, **閉じた量子系**における散逸の問題である。具体的には, **一つの閉じた量子系として有限個の調和振動子と相互作用する一次元ランダム系を考え, 系内で散逸的定常状態が実現するか否かや, 局在と散逸的定常状態がどのように関わっているか**等を探ることである。一般的に言えば, 完全な時間反転対称性をもつ閉じた量子系がどのようにしてその記憶を散逸し, 対称とする系に不可逆性を生みだすのか, そのメカニズムを明らかにすることが目標である。そのための一つの有望な候補は, この量子系における散逸の起源をカオスに求めることであるが, ここではこれに関する議論はしない [5, 6]。

そこで, 本稿は散逸につながる不可逆的エネルギー輸送を一電子系＋格子系（高々２または３自由度系）において, 数値計算により実現させた結果の報告である。またこの不可逆的エネルギー輸送を生じさせる条件を, モデルの構成とシュミレーションを通して議論した。より詳しい計算結果の中身や考察については, 出版予定の論文 [7] を参照されたい。この報告の内容は, 池田研介氏との共同研究にもとづいている.

---

[1] 2001年1月 第9回「非平衡系の統計物理」シンポジウム。初稿には計算結果の図を多数含んでいたが, 急きょ5ページに短縮することになりその多くを省いた。詳しくは、文献 [7] を見てください。

[2] Email address: hyamada@cc.niigata-u.ac.jp

2 モデル

閉じた量子系（自励系）を考える。これは, 有限個の調和振動子と結合した一次元ランダム系 $H_{tot} = H_{el} + H_{ph} + H_{int}$ とする [8]。ハミルトニアンの各項は次のように与えられる。

$$H_{el}(t) = \sum_{n=1}^{N} |n > V(n,t) < n| + \sum_{n}^{N} (|n >< n+1| + |n+1 >< n|). \tag{1}$$

$$H_{ph} = \sum_{j=1}^{M} \left(\frac{\hat{p}_j^2}{2} + \frac{\omega_j^2 \hat{q}_j^2}{2} \right), \tag{2}$$

$$H_{int} = \sum_{n=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} (|n > V(n) < n|) b_j \hat{q}_j. \tag{3}$$

ここで b_j は結合強度を表す定数である。H_{ph} は $M \to \infty$ で連続スペクトルを持つときには, 通常の熱浴として機能することになる。また, その調和振動子が高励起状態にあるという条件の下で, その振動子と同じ振動数の時間に依存した外摂動が加わわった非自励系と等価であることも注意すべきである [5, 8]。実際の計算においては, 数値計算における制限のみならずいくつかの興味深い観点から, 幾つかの調和振動子を外摂動で置き換えたモデルを扱う。そのシュレーディンガー方程式は次式で与えられる。

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(n, \{q_j\}, t)}{\partial t} = \Psi(n+1, \{q_j\}, t) + \Psi(n-1, \{q_j\}, t) + \{ \sum_{j=1}^{M} \left(\frac{\hat{p}_j^2}{2} + \frac{\omega_j^2 \hat{q}_j^2}{2} \right)$$
$$+ \sum_{n=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} b_j V(n) \hat{q}_j + V(n)[1 + \frac{\epsilon}{\sqrt{L}} \sum_{i=1}^{L} \cos(\Omega_i t + \alpha_i)] \} \Psi(n, \{q_j\}, t). \tag{4}$$

ここで,$V(n)$ はランダムなサイトエネルギーである。$b_j(=b)$ は結合強度,ϵ は摂動強度と呼ぶことにする。また,$\{\omega_j\}$ 及び $\{\Omega_j\}$ は $O(1)$ で全て互いに非整数比の振動数,α_i はランダムな位相である。今回の数値計算では $M = 0, 1$ と $L = 0, 1, 2, ...,$ の場合を示す。

3 非自励系における結果

非自励系（$M = 0$）での量子拡散における結果を簡単にまとめておく。この規則的摂動が加わった一次元ランダム系における波束の量子拡散についての詳しいことは, 文献 [9, 10, 11] を参照されたい。

- 単色摂動の場合 ($L = 1$): 無摂動の場合の指数関数的局在の局在長をこえて拡散するが, 長時間ではこの拡散は抑圧され止まる傾向をもつ。
- 多色摂動の場合 ($M \geq 2$) の場合: 数値計算の範囲では, 特異拡散的振る舞いが持続される. この特異拡散の拡散指数 $\alpha(< n^2 > \propto t^{\alpha})$ は摂動としての振動数の数 M, またその強度 ϵ が大きくなるにつれて, 正常拡散 ($\alpha = 1$) に近づく。この拡散は時間, 空間によるダイナミカルなスーリング則に従う。
- 電子の拡散が起こっている間のフォノンモードが得るエネルギー $< E_J >$ は あるレベルで振動する。つまり, 本質的にエネルギー移動はない。これは, もともと電子の初期状態 ($\Psi(t = 0) = \delta_{n,0}$) が, 全てのエネルギーが均等に関与して作られていてほぼエネルギー零であることを考慮すれば当然といえる。

結局, 一次元ランダム系における局在は（確率的でない）コヒーレントな外摂動に対して, 不安定であり, 非局在化し拡散的広がりをする。この様にして広がった状態を動的非局在状態とよぶ。この動的非局在状態が不可逆性または散逸などの性質を内包している可能性を次節でみる。

4　不可逆的エネルギー移動

前節における, コヒーレントな外摂動としてのモードの一つを陽な内部自由度（調和振動子）に置き換えるとどうなるであろうか。つまり, モデル（4）において,$M = 1$ とした系を扱うことになる。電子系とこの内部自由度間のエネルギーの移動を調べ, 不可逆的輸送がおこる条件を探ろう。そのために, 初期状態としてまず一次元強結合モデルのランダム系を局在した高励起状態 ($|e>$) に用意し, 内部自由度の調和振動子を基底状態 ($|g>$) に, 結合した系の状態 ($\Psi(t=0) = |e> \otimes |g>$) の時間発展を行い, 電子系のエネルギー $E_{el}(t) =< \Psi(t)|H_{el}|\Psi(t) >$ フォノン系のエネルギーの時間変化 $E_{ph}(t) =< \Psi(t)|H_{ph}|\Psi(t) >$ をモニターする。この節の内容についてより詳しいデータや説明は [8, 7] を参照されたい。

有限個の振動数で特徴付けられるコヒーレント摂動を外部から加えた場合 ($L \geq 1$), つまり局在が解けた状態（動的非局在状態）に，基底状態にある一個の調和振動子を結合 ($M = 1$) させ, エネルギー移動を調べる。図１は単色摂動でその摂動強度を変えた場合, 図２は摂動強度を一定に保ち色の数を増した場合である。いずれの場合も, 不可逆的エネルギー移動が生じ, 電子系が殆ど零エネルギーになるまで十分に緩和していることがわかる。その緩和の速さは, 摂動強度が強いほど, また色数が多いほど速い。さらに, エネルギーの有限効果が利いてくるまでは, 非局在状態から調和振動子へ準定常的なエネルギー移動が生じていることも確認できる。この準定常的流れは局在電子状態の拡散（実空間での緩和）とも強く関わっていることがわかる。結合強度や摂動強度が大きいほどエネルギー増加の割合は大きくなっている。電子系のエネルギーがほぼ零に緩和した平衡状態は, 全ての電子の固有状態に対しほぼ等重率で分布したものである。電子の自由度と調和振動子の結合 H_{int} の形を変えてもエネルギー移動に関する定性的性質は変わらないことも確認した。

5　内部自由度の状態

さて, 初期時刻に基底状態に用意され電子系からエネルギーを得た調和振動子の状態はどうなっているのであろうか。図９に典型的な場合のフォク空間におけるフォノン分布の時間変化を示す。指数関数的分布を示していることがわかる。つまり，$|< n|\Psi(t) >|^2 \propto exp\{-n/k_BT(t)\}$ の様に時間に依存した「温度」で特徴づけられる（通常は熱平衡状態であらわれる）ボルツマン分布が実現しているとみなせる [12]。

特に, 結合強度や摂動強度が大きく, 不可逆的エネルギー移動が生じ十分緩和する場合ほど, この分布がボルツマン分布で近似される様にみえる。（もちろん, ノイズを加えた場合もきれいな分布が実現する。）この温度の上昇はエネルギーの増加に対応しており, ほぼ線形である。

このように, 非可逆的エネルギー移動と温度の実現は熱浴との接触の無いこの量子系のなかに自発的に生成された, 確率的現象の両面になっている。もちろん, ブロッホ状態に対しては,（確率的摂動を加えた場合以外には）このようなボルツマン分布や温度の実現はみられない。

6　まとめと課題

不可逆的なエネルギー移動を, 高々２または３自由度の有限量子系 ($M = 1, L = 1$) にみいだされた。また, 準定常的エネルギー移動が生じているとき, テストモードのフォノン分布関

数は時間に依存する「温度」で特徴づけられるボルツマン分布を示す。この動的非局在状態の性質については, さらに詳しい数値計算または解析的に特徴づけるための方法が必要である。

さらに, 高エネルギー状態におかれた局在電子が基低状態におかれた調和振動子と相互作用し, 不可逆的エネルギー緩和を生じるために加えなければならない調和振動子の数 ($M=2$) が, 3節でまとめた非自励系に動的非局在化が起こる条件 ($M=0, L \geq 2$) と対応している。また, 電子から振動子への定常的エネルギーの流れが生じているときのみ, 局在電子が拡散的に広がっていく。

我々が行ったのは純粋状態の時間発展のシミュレーションであった。従って, ナイーブな意味では全系におけるエントロピーの増大は全く存在しない。しかし, 数値計算で我々が得たように, 動的非局在状態は系に不可逆性を起こしあたかもエネルギーを「熱」に転化するような潜在的「散逸性」を備えていることが期待される。これらの量子状態を特徴付けるためには, 「量子系における複雑さ」の定義のような新たな尺度が必要とされる。

References

[1] K. Ishii, Prog.Theor. Phys. Suppl. **53**, 77(1973); P.Erdos and R.C.Herndon, Adv. Phys. **31**, 65(1982).

[2] P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena* (Academic press, 1995).

[3] *Quantum Transport and Dissipation* ed. by T. Dittrich *et al*, (Wiley-VCH, 1998).

[4] この研究会の報告として物性研究に出版されているものの中にも関連するものも多い。例えば、**71-5,72-3,73-4** や本報告.

[5] K. S.Ikeda, Ann. Phys.**227**, 1(1993).

[6] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos: Second Revised and Enlarged Edition*, (Springer-Verlag, 2001).

[7] H. Yamada and K. S. Ikeda, submitted to Phys. Rev. E; H. Yamada, submitted to Proceedings of Japan-Italy Joint Waseda Workshop on: Fundamental Problems in Quantum Physics.

[8] H.Yamada and K.S.Ikeda, Phys. Lett. **A222**,76(1996).

[9] H.Yamada and K.S.Ikeda, Phys. Lett. **A248**,179(1998).

[10] H.Yamada and K.S.Ikeda, Phys. Rev. **E59**, 5214(1999).

[11] H. Yamada, Physica **E9**, 389(2001).

[12] これに関し, 池田氏より温度モドキが出現したのは内部自由度として一次元ランダム系に結合させたものが調和振動子であることに起因する可能性がある, との指摘を受けた。これについては現在検討中であるが, 結合する自由度を等間隔のエネルギーレベルをもつ調和振動子から非調和振動子に置き換えたとき, きれいなボルツマン分布が観測されなくなる傾向がある。

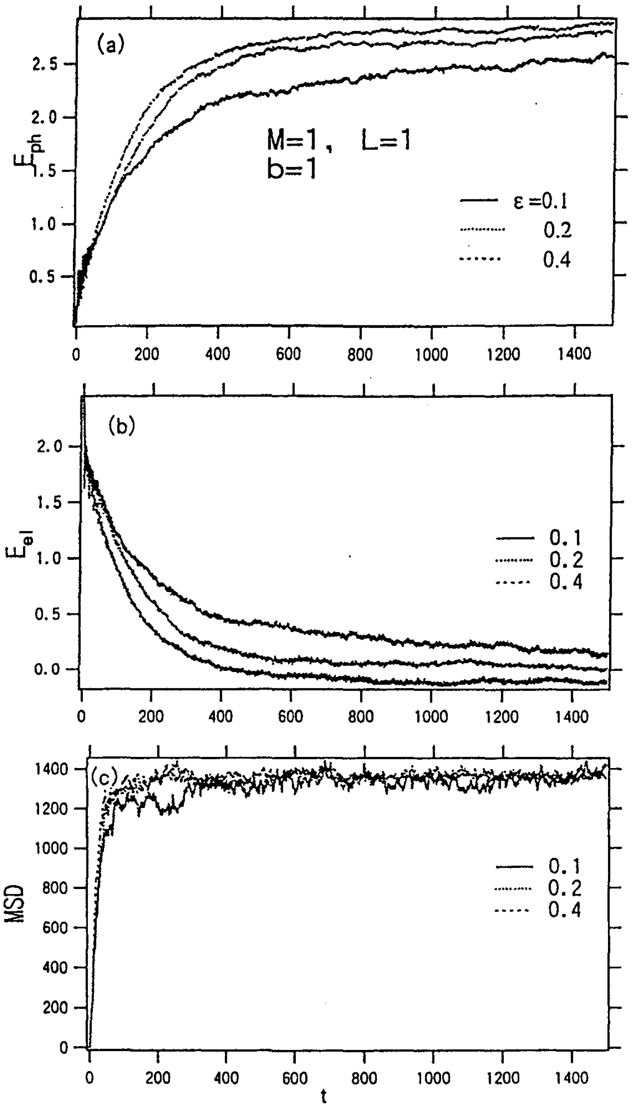

図 1: ランダム系に単色の外摂動が加わった場合 $M = 1, L = 1$。

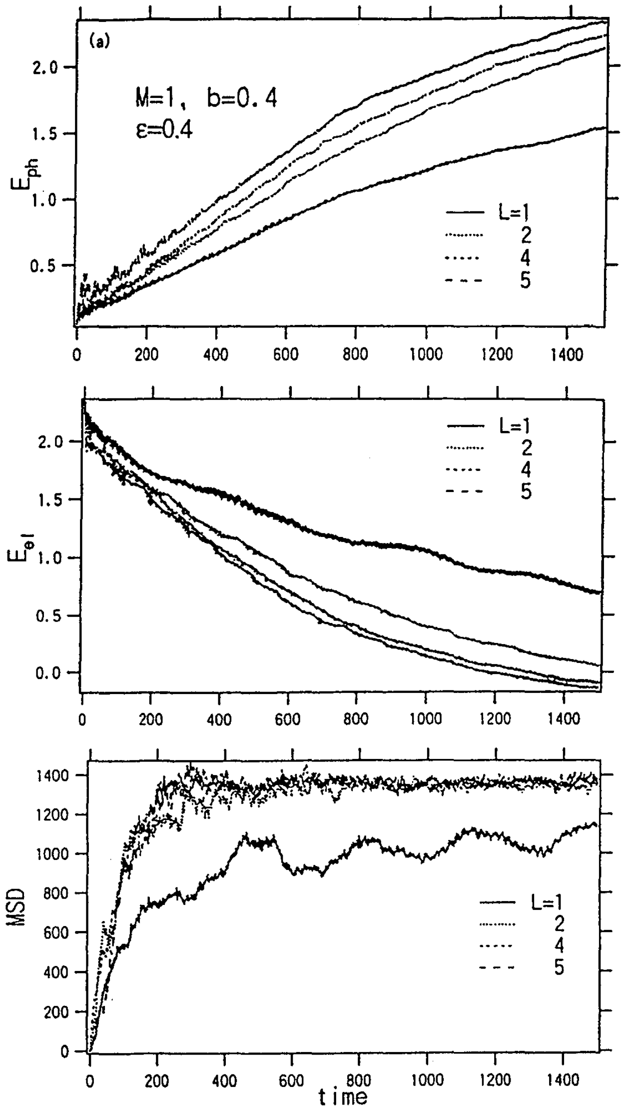

図 2: ランダム系に多色の外摂動が加わった場合 $M = 1, L \geq 2, \epsilon = 0.4$。