

一次元ランダム系における局在と散逸¹

新潟大工

山田 弘明²

Faculty of Engineering,
Niigata University,
Ikarashi 2-Nocho 8050, Niigata 950-21

Abstract

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報告する. 数値計算の結果は, 無摂動の場合の指数関数的局在は解け, 摂動強度等のパラメータに依存した特異な拡散を示す. また, この拡散は時間, 空間によるダイナミカルなスレーピング則に従う.

1 序

物理法則がミクロな世界を支配する量子力学からマクロな世界を支配する古典力学に, どうなるのかを知ることは, 様々な分野でトピックスとなっている. 例えば, 初期の量子宇宙から現在のわれわれの住む宇宙への発展を知ることともそうであろうし, 固体の中での電気抵抗をミクロな量子輸送に基づき, 理解しようということもそうであろう. これらの現象に共通する問題は, 完全の時間反転対称性をもつ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うみだすのか, そのメカニズムを明らかにすることである. 一つの有望な候補は, 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 [1, 2, 3].

一次元ランダム系のスペクトルは点スペクトルをもちその固有関数は全て指数関数的にアンダーソン局在する [4, 6]. その結果, 波束の量子拡散はあるレベル (局在長) でとまる [6]. つまり, 実空間において一次元ランダム系は初期状態の記憶の消失 (散逸) が起こらず, 非エルゴデックであるといえる [6, 5]. また, 古典カオスのモデルとして有名なスタンダードマップの量子系を考えたとき, 古典系で観測される拡散的エネルギーの増大も, 量子系における干渉効果のため短時間で飽和してしまう (ダイナミカル局在) [7, 2]. この現象も, 撃力回転子の角運動量表示でのハミルトニアンが強結合 (擬似) ランダム系にマッ

¹1997年12月 第6回「非平衡系の統計物理」シンポジウム

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

プされることにより理解されている。一次元ランダム系での拡散は、平均自由行程 ℓ と局在長 ξ が同程度なためその途中での拡散的振る舞いが観測されることはない [6].

一方、この一次元ランダム系に確率的に変動する摂動を加えると局在は解け拡散的振る舞いを示すことは有名で、不純物半導体中でのエキシトンのダイナミックスのモデル等としても知られている [8].

ここでは、一次元ランダム系における量子干渉効果による局在と初期状態の記憶の散逸として典型的なブラウン運動的拡散の間の関係を、規則的な（非確率的な）摂動を加えることにより、もとに系統的に調べることを目的とする。また、数値計算に基づく結果の報告が中心である。

同様の内容に基づく研究会報告（基研研究会「ハミルトン系のカオス」）が物性研究に掲載されているので重複する部分はなるべく避け、相補的なデータをもとに話を展開する。

2 モデル

一次元ランダム系の定性的性質は連続系でも離散系でも同様であると考えられるので、次のハミルトニアンであたえられる一次元強結合モデルを考える [13].

$$H(t) = \sum_{n=1}^N |n\rangle (V_0(n) + V_1(n, t)) \langle n| + t \sum_n |n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|, \quad (1)$$

$$V_1(n, t) = V_1(n) \frac{\epsilon}{\sqrt{M}} \sum_{j=1}^M \cos(\omega_j t). \quad (2)$$

ここで、 $\{|n\rangle\}$ はサイト表示の完全規格直交系、 $V_0(n)$ と $V_1(n)$ ($= V_0(n)$ とする) はサイトエネルギーで $[-W, W]$ の乱数である。（ここでは $W=0.9$ と固定しておく。）また、 $\{\omega_i, i = 1, 2, \dots\}$ はオーダー 1 の互いに非整合な振動数の組、とする。さらに、対角項の変動は

$$\langle V_1(n, t)^2 \rangle_t / \langle V_1(n) \rangle^2 = \frac{\epsilon^2}{2}, \quad (3)$$

となるように規格化しておく。結局、このモデルのパラメータは摂動の強度 ϵ と振動数の数 M となる。次の積分を SI-FFT 法で数値的におこなうことにより精度が高く、効率のよい波束の時間発展を得ることができる [12].

$$\Psi(n, t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t [2\cosh(\partial/\partial x) + V_0(n) + V_1(n, t)] dt\right\} \Psi(n, 0). \quad (4)$$

ここで、 $2\cosh(\partial/\partial x)$ は差分型の運動エネルギー演算子である。

3 動的非局在化

初期状態として局在していた波束 ($\Psi(t=0) = \delta_{n,0}$) の時間発展をモニターする. このため, 平均二乗変位 (MSD; mean square displacement) を定義する.

$$m_2 \equiv \xi(t)^2 = \langle\langle (\hat{n} - \langle \hat{n} \rangle)^2 \rangle\rangle_{\Omega}, \quad (5)$$

ここで, $\langle \dots \rangle_{\Omega}$ はサンプル平均をあらわす. いくつかの摂動強度に対して $M=1$ の場合の $\xi(t)^2 (= m_2(t))$ が図1である. 摂動により一部の量子相関は壊され拡散的振る舞いが単色 ($M=1$) の場合より延長され, 短時間の数値計算では拡散が生じているようにみえるが, 長時間では拡大局在長 (enhanced localization length) で局在する. これは, 振動による混合が平均自由行程と局在長の間の拡散的振る舞いを長時間に渡りみせてくれたものとみなせる.

また, 摂動強度を固定して, 振動数の数を変えた場合の $\xi(t)^2$ が図2である. この結果は, M に依存した特異拡散 ($m_2(t) \simeq t^{\alpha}$) を示している. 振動数の数 M を固定して, 摂動強度 ϵ 依存性も類似の様子を示す. 図3, 4に拡散指数 α の M, ϵ 依存性を示している. 摂動強度また振動数の数の増大と共に拡散指数は徐々に増大し, 正常拡散 ($\alpha=1$) に漸近していくと思われる.

量子系での非干渉化は位相乱雑化と散逸によってもたらされる. 周期系での MSD は t^2 とバリスチックな拡散 (初期記憶の散逸) を示すが, 位相乱雑化 (phase randomization or dephasing) は生じていないので記憶の回復が可能である. ランダム系 ($M=0$) では局在するので MSD はとまる. このときは, 位相の乱雑化は生じているが, 散逸が生じていないので非干渉性は存在しない. しかし, 規則的摂動により量子系で非干渉化が実現される可能性があるといえる.

そこで, 初期状態の記憶を強く残した相関のある拡散を特徴づけるため高次のモーメントを考える. 特に, ガウス分布からのズレをあらわす指標としてエクセス $M_G(t)$ (非ガウスパラメーター (NGP; non-Gaussian parameter) と呼ばれることもある.) を調べる.

$$M_G(t) = \frac{\langle\langle \Delta n^4 \rangle\rangle_{\Omega}}{3 \langle\langle \Delta n^2 \rangle\rangle_{\Omega}^2} - 1. \quad (6)$$

二次相転移点近傍におけるべき的長距離相関のある領域で, 正常拡散を妨げられることを思い出す [9]. 実際, この量は過冷却状態で中心極限定理に従わないイオンのダイナミクスを特徴づけるためによく用いられる. もしガウス分布ならば NGP は零となる.

図5は確率的変動を摂動として加えた場合の, NGP の時間依存性とその両対数である. ノイズの強度が大きいほど NGP は逆べき則に従ってより速く零にちかづくことがわかる. このとき, ガウス過程にしたがって分布関数の時間発展が行われていると思われる.

図6は、 $M = 0, 2, 5$ の場合における NGP の時間発展とその両対数である。摂動の振動数の数が増すにつれて、より速く零に近づくことがわかる。

また、拡散不在を定義し局在と非局在を識別する量としてよく用いられる零点確率 $P_0(t) \equiv \langle |\Psi(n=0, t)|^2 \rangle_\Omega$ の減衰を図7に示す。初期記憶を保つ局在の場合 $P_0(t)$ は減衰せず、ガウス過程では $P_0(t) \propto t^{1/2}$ で減衰する。摂動強度を固定した場合、振動数の数 M が増えるとともに、より急速に零に漸近していくことがわかる。

さらに、この特異拡散の特徴をより詳しく調べるため、速度速度相関関数を計算している [13]。

4 量子拡散の動的スケーリング

さて、動的非局在化が起こっているときの分布関数 $P(n, t) \equiv \langle |\Psi(n, t)|^2 \rangle_\Omega$ の時間発展はどのようなになっているであろうか？図8にそのスナップショットを示す。摂動強度が小さい場合 ($\epsilon \ll 1$) は、局在の名残を示し原点でのピークがみられる。また、 $\alpha \simeq 1$ の場合には、ガウス過程にしたがって古典ブラウン運動的拡散しているようにみえる。つまり、摂動による量子相関の攪乱（混合）が十分ならば初期記憶を完全に失いガウス過程に従った拡散が実現し、摂動による攪乱が不十分ならば散乱波間の干渉効果が残っている。

このパラメーターに依存する量子拡散を統一的に理解するため、次のようなスケーリング形をつかう [13]。

$$P_t(n, t^*) = \frac{\xi(t)}{\xi(t^*)} P\left(\frac{\xi(t)}{\xi(t^*)} n, t\right). \quad (7)$$

図9に $t^* = 700$ としスケールされた典型的な $P_t(n, t^*)$ の片対数プロットをしめす。データは分布をスムージングしたものを用いている。分布の初期段階を除いて $P_t(n, t^*)$ はよく一致するのでそれぞれの時間発展過程はこの関数形でかなりよくスケールできると思われる。従って、この確率分布関数は次のスケーリング形をもつ。

$$P(n, t) = \xi(t)^{-1} P_{sc}\left(\frac{n}{\xi(t)}\right). \quad (8)$$

そこで、 $P_{sc}(x) = e^{-g(x)}$ として、つぎの関数形を仮定してフィッティングする..

$$g(x) - g_0 \propto |x|^\beta. \quad (9)$$

図10に示すように、いづれも分布を特徴づける指数 β ($1 < \beta < 2$) でよくあらわせることがわかる。しかもこれは、様々のパラメータ ϵ と M の組みについてもいえる。このことにより、時間、空間変化が次ぎの関数形（拡張ガウス型）で与えられる。

$$P(n, t) \propto \exp\left\{-\text{const.} \left(\frac{n}{t^{\alpha/2}}\right)^\beta\right\} \quad (10)$$

これは、指数関数的局在 ($\alpha = 0, \beta = 1$) とガウス過程 ($\alpha = 1, \beta = 2$) を両極端に含む形である [15]. (局在のとき, $P(n, t) \propto \exp\{-|n - n_0|/\xi(t)\}$, ガウス過程のとき, $P(n, t) \propto \exp\{-(n - n_0)^2/(2\xi(t)^2)\}$.) ガウス過程が実現していることを考えると, 規則的摂動により量子系で非干渉化がおこり古典的ブラウン運動が実現しているといえる. いくつかのパラメータにたいする α と β を図 11 に示す. に強い相関があり一つの曲線上にのるようにみえるが, 詳しくは今後の研究を待たねばならない.

この分布 (10) のときの, MSD と NGP は,

$$m_2(t) \propto t^\alpha, M_G(t) = \frac{\Gamma(1/\beta)\Gamma(5/\beta)}{3\Gamma(3/\beta)^2} - 1, P_0(t) \propto t^{-\alpha/2}. \quad (11)$$

となる. また, 同様の拡張ガウス型の分布関数が, 相関の強いフラクタル格子上での長時間の記憶効果を持った古典系での緩和に見られるということは興味深いことである [9].

5 散逸の自己誘起

さて, 量子系における散逸との関係をより明確にするには, 時間依存する摂動をもつこの非自励系を閉じた量子系 (自励系) に変換して考えるとよい. これは, 調和振動子と結合したランダム系 (ハミルトニアンを $H_{tot} = H_{el} + H_{ph} + H_{int}$ とする) と, その調和振動子が高励起状態にあるという条件の下で, 等価であることがわかっている [11, 10].

$$H_{el} = \sum_{n=1}^N |n\rangle V_0(n) \langle n| + \sum_{n \neq m}^N |n\rangle \langle m|, \quad (12)$$

$$H_{ph} = \sum_{j=1}^M \left(\frac{p_j^2}{2} + \frac{\omega_j^2 q_j^2}{2} \right), \quad (13)$$

$$H_{int} = \sum_{n=1}^N \sum_{j=1}^M b_j (|n\rangle V_1(n) \langle n|) q_j, \quad (14)$$

ここで b_j ($=1.0$) は結合定数である. 詳しく論じないが, この量子自励系における不可逆性の発生の数値実験結果が文献 [10] に与えられている. 高エネルギー状態におかれた局在電子が基底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 節で議論した動的非局在化がおこる条件 $M \geq 2$ 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という結果も得られている.

この事実と 3 節での動的非局在化とエネルギー散逸の関係を明確に議論するには、エネルギー固有状態間の摂動による遷移を調べる必要がある。図 1 2 に摂動パラメータに対する固有値の変化を示す。エネルギー非交差に基づくソリトン描像があるが、レベル間隔分布はポアソン分布を示す。これをみると、非断熱遷移が複雑におきて、非局在化に効いていると思われるが、これに関しては別の機会に議論する。

6 まとめと議論

一自由度の自励系ではその古典極限においてさえ、カオスが存在しないので、量子系でも当然初期記憶の消失はあらわれない。古典非自励系または 2 自由度以上の系ではカオスが現れる。さらに、古典系におけるアーノルド拡散に、カオス的振る舞いの位相空間における大域化起源を求めると、3 自由度以上でなければならない。ランダム系では少なくとも二つ以上の振動子が結合しなければ非局在化は生じない [16]。摂動系でも自励系でも $M \geq 2$ ではじめて動的非局在化もエネルギー一定常流も生じることは、上記の条件と無矛盾である。

また、二自由度の撃力回転子 [14] やホストヘルパー系 [11] での結果とも無矛盾である。もちろんこの結果は数値実験の範囲内であるので、長時間極限での結果への対応を裏付けるには、さらに研究が必要である [13]。簡単にまとめておく。

1. $M = 1$ の場合、局在長を越えて拡散がおこるがその拡散はあるレベルでおさえられる。つまり、非局在化を起こすことができない。二次元ランダム系の場合に対応していると思われる。
2. $M \geq 2$ 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。それを特徴づける拡散指数 $\alpha(\xi(t)^2 \propto t^\alpha)$ 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。
3. 確率分布関数の時間発展 $P(n, t)$ は $\xi(t)$ をとうしてスケールされる。さらに、その関数形は $P(n, t) \sim \exp\{-\text{const.}(|n|/t^{\alpha/2})^\beta\}$ で与えられる。

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。

References

- [1] See for example, *Quantum Chaos-Quantum Measurement* ed. by P. Cvitanovic, I.

- Percival and A. Wirzba (Kluwer, Amsterdam, 1992) ; *Quantum Chaos-between order and disorder*, ed. by G. Casati and B. Chirikov (Cambridge Univ. Press, 1995).
- [2] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos* (Springer-Verlag, 1992).
- [3] *Quantum Transport and Dissipation* ed. by T. Dittrich *et al*, (Wiley-VCH, 1998).
- [4] For a recent review see, B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469(1993) and references therein.
- [5] See, for example, P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena* (Academic press, 1995).
- [6] K. Ishii, Prog.Theor. Phys. Suppl. **53**, 77(1973); P.Erdos and R.C.Herndon, Adv. Phys. **31**, 65(1982).
- [7] S. Fishman, D. R. Grempel and R. E. Prange, Phys. Rev. Lett. **49**, 509(1982).
- [8] H. Haken and G. Strobl, Z. Phys. **262**, 135(1973).
- [9] K. G. Wang, L. K. Dong, X. F. Wu, F. W. Zhu and T. Ko, Physica **A203**, 53(1994); A. Aharony and A. B. Harris, Physica **A205**, 335(1994); M. Goda, T. Okabe, H. Yamada and M. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jpn.**63**, 2841(1994).
- [10] H. Yamada and K. S. Ikeda, Phys. Lett. **A222**, 76(1996).
- [11] K. S. Ikeda, Ann. Phys.**227**, 1(1993).
- [12] K. Takahashi and K. S. Ikeda, J. Chem. Phys.**99**, 8680(1993).
- [13] H. Yamada and K. S. Ikeda, submitted to Phys. Rev. Lett.
- [14] M. Toda, S. Adachi and K. S. Ikeda, Prog. Theor. Phys. Suppl. **98**, 232(1989).
- [15] H. Yamada and K. S. Ikeda, in preparation.
- [16] L. E. Reichl, *The Transition to Chaos: In Conservative Classical Systems: Quantum Manifestations* (Springer, New York, 1992).

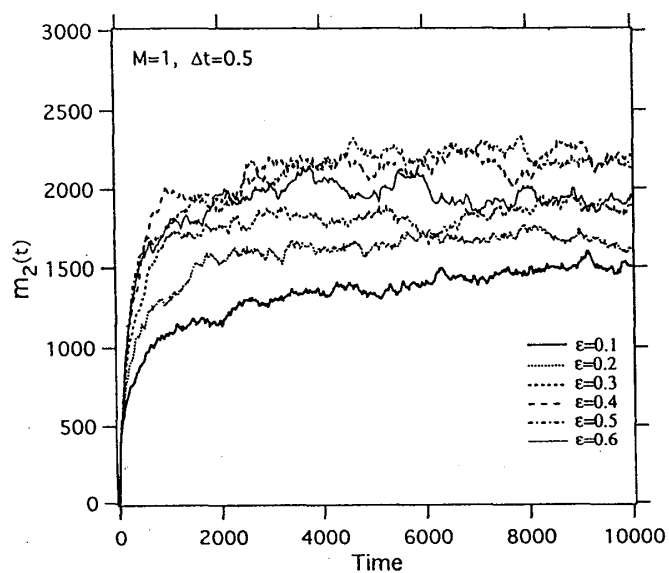


図1. 様々な摂動強度 ϵ に対する $M=1$ の場合の MSD.

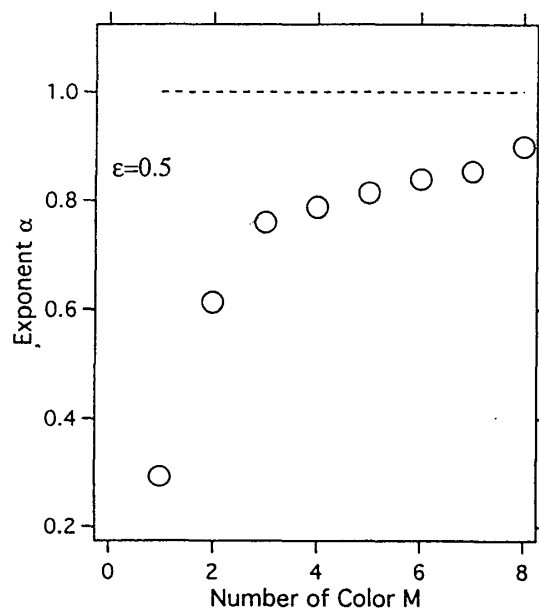


図3. 拡散係数 α の M 依存性 ($\epsilon = 0.5$).

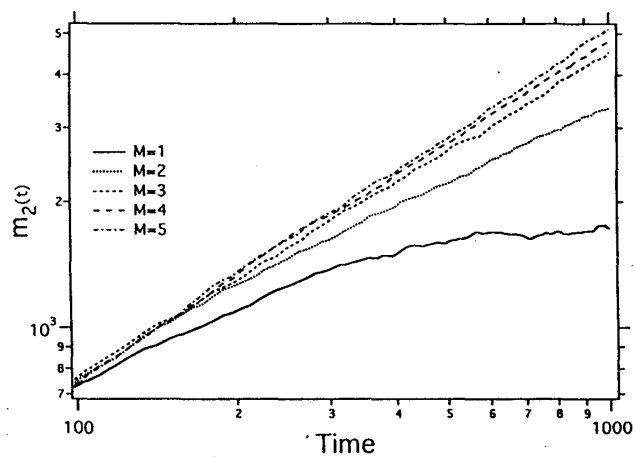


図2. 様々な M に対する MSD ($\epsilon = 0.5$).

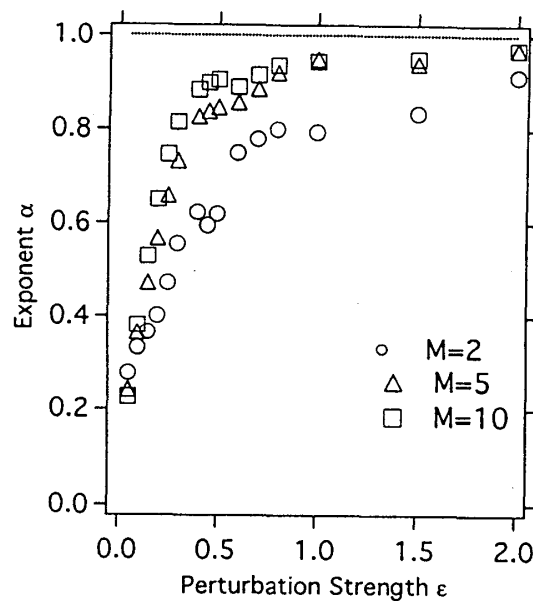


図4. 拡散係数 α の ϵ 依存性.

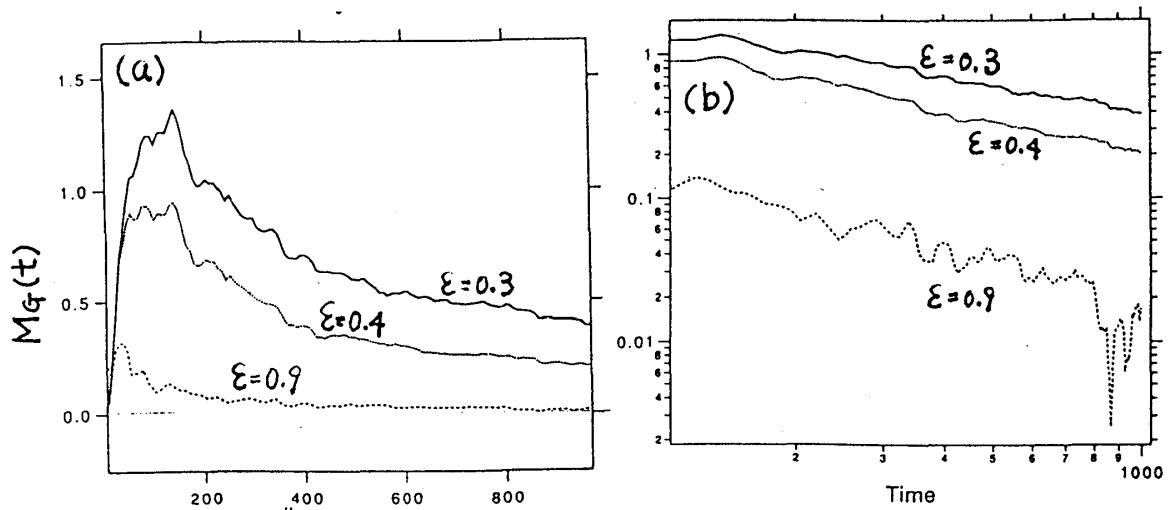


図5. 摂動が確率的な場合の様々な摂動強度 ϵ に対する NGP とその両対数プロット.

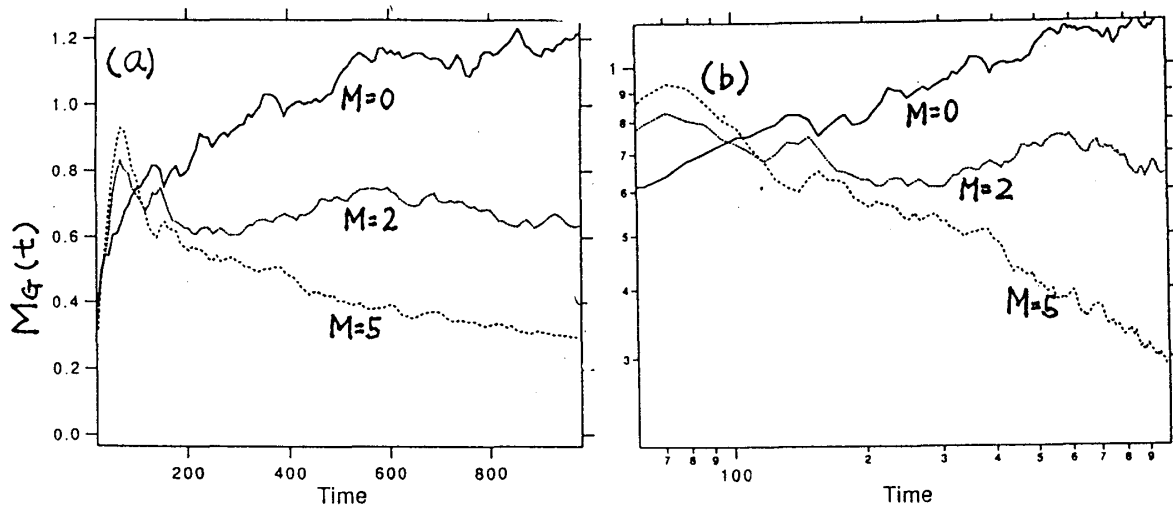


図6. 様々な M に対する NGP ($\epsilon = 0.5$) とその両対数プロット.

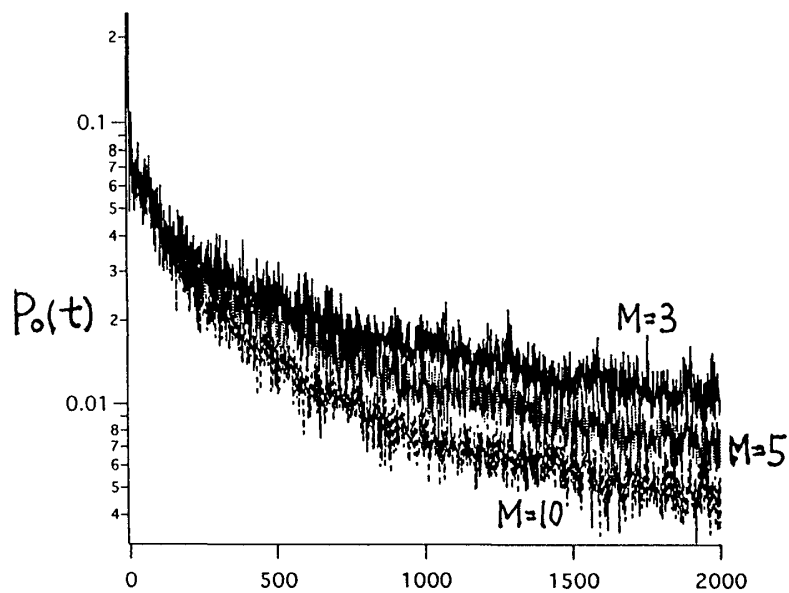


図7. 様々な M に対する $P_0(t)$ ($\epsilon = 0.5$).

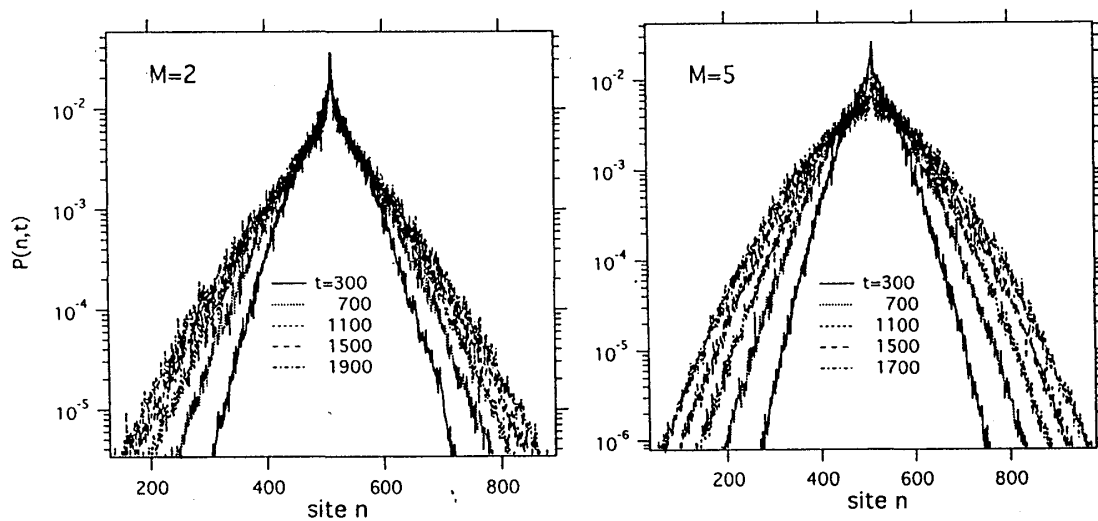


図8. $M=2, 5$ に対する確率分布 $P(n, t)$ の snapshot ($\epsilon = 0.5$).

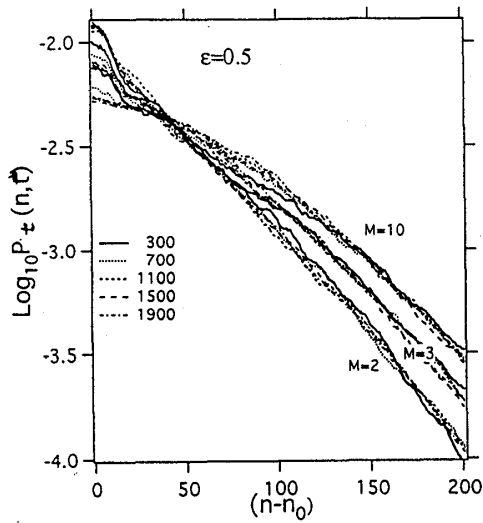


図9. $t^* = 700$ としてスケールした $P_t(n, t^*)$ ($\epsilon = 0.5$).

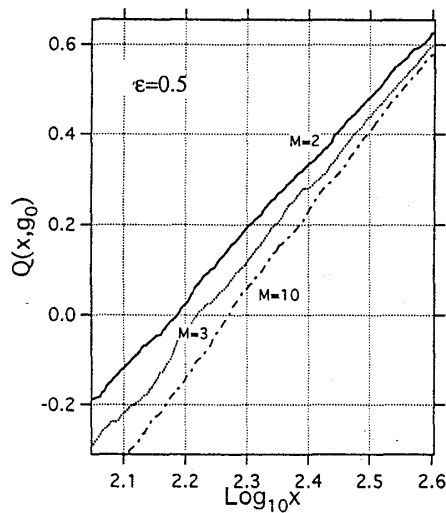


図10. いくつかの M に対する分布 $P(n, t^* = 700)$ ($\epsilon = 0.5$) ここで $Q(x, g_0) \equiv \log \{-\log P_{sc}(x) + g_0\}$ で g_0 は適当な定数である.

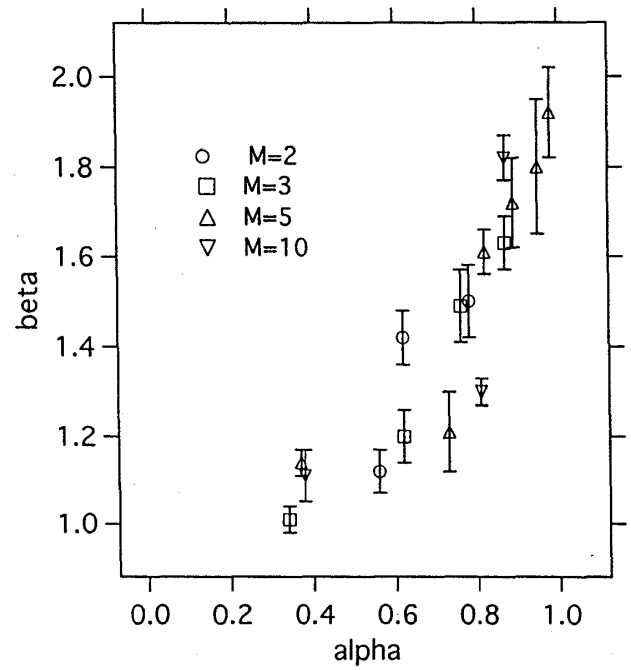


図11. 様々な M 及び $\epsilon = 0.5$ に対する α, β の関係.

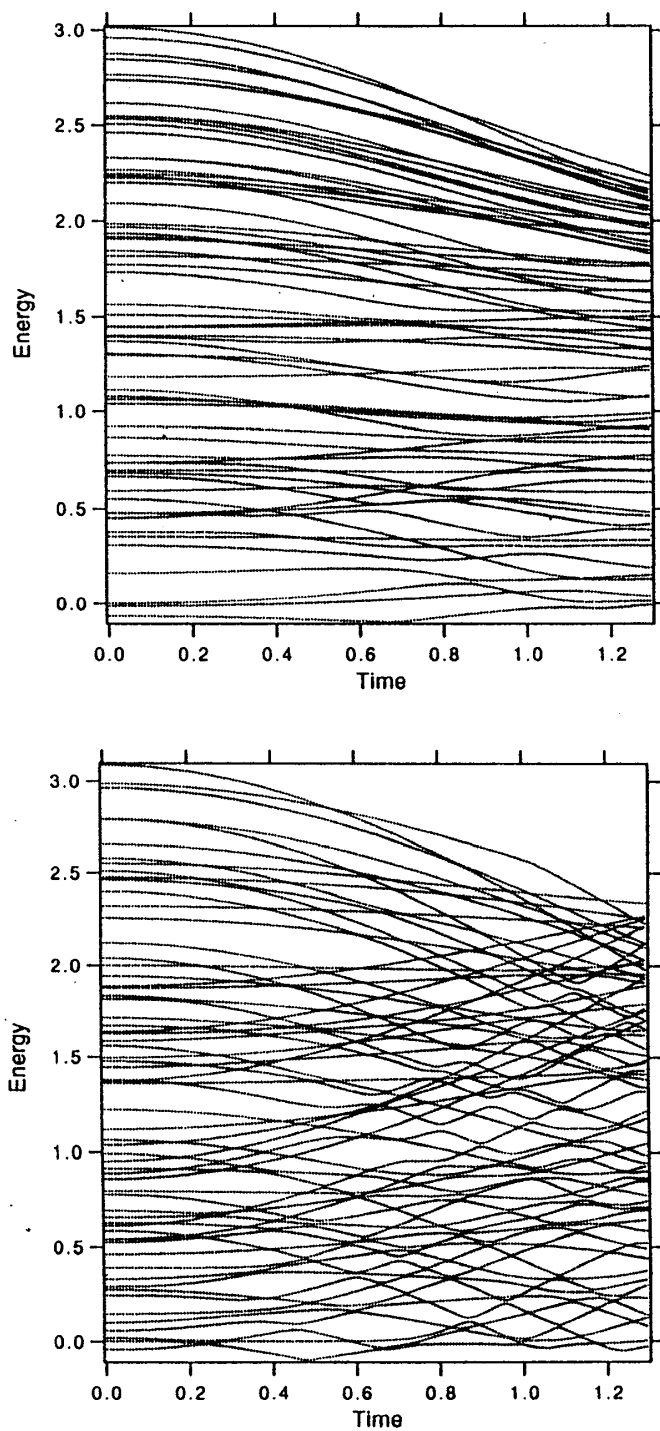


図 1 2. 時間に対するエネルギー固有値の変化. (a) $M=5, \epsilon=0.5$ の場合, (b) $V_1(n) = n$ で $\epsilon=0.02$.