

GOE 型量子準位統計を持つ一次元保存系

成蹊大学工学部物理情報工学科 富谷光良、坂本昇一
 埼玉大学理学部物理学科 吉永尚孝

一次元の保存系は可積分であることが証明されている。しかし、一方でカオス系（例えばランダム行列）から得られた固有値を、基底状態から順に充分多数有限個持つようなポテンシャルを構成することも示されている[1,2]。ここでは、ガウス型集合に従う量子エネルギー準位統計を持つ非時間依存性の一次元系を数値的に研究した。ポテンシャルの数値的構成法として最急降下法と逆散乱法を採用した。

一次元の時間非依存シュレディンガー方程式は、無次元単位系： $m = \hbar = 1$ を採用しポテンシャルを $V(x)$ とすると

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x^2} + V(x)\right)\phi_i(x) = e_i^s \phi_i(x), \quad (1)$$

と記述される。最急降下法は実践的であるだけでなく、多数の準位を充分な精度で再現するポテンシャルを構成することもできる。ただし、この方法は原理的に近似手法なので常に計算精度について充分注意を払わなくてはならない。もちろん、充分に高い精度でエネルギー準位を再現することができる。

GOE 型のランダム行列より得られたエネルギー準位をアンフォールディングしたものを $e_i (i=1,2,\dots,N)$ とおく。また、与えられたシュレディンガー方程式(1)の固有値を $e_i^s (i=1,2,\dots,N)$ とする。最急降下法は目標の固有値群 e_i をもつポテンシャル $V(x)$ を構成するために、評価関数

$$F[V(x)] = \sum_{i=1}^N (e_i^s - e_i)^2 \quad (2)$$

を定義し、この評価関数が最小になるような $V(x)$ を探す手法である[1]。すると、評価関数 F の $V(x)$ による汎関数微分

$$\frac{\delta F}{\delta V(x)} = 2 \sum_{i=1}^N (e_i^s - e_i) \phi_i^2(x) \quad (3)$$

が得られる。ここで $\phi_i(x)$ はシュレディンガー方程式(1)の基底状態から i 番目の正規固有関数である。すると、反復探索

$$V_{\text{new}}(x) = V_{\text{old}}(x) - 2\varepsilon \sum_{i=1}^N (e_i^s - e_i) \phi_i^2(x) \quad (4)$$

によって漸近的に $e_i (i=1,2,\dots,N)$ を与えるポテンシャルを得ることができる。実際にはシュレディンガー方程式も数値的に解くことになるので、一次元の格子上で差分化して解くことになる。この差分方程式を Numerov 法によって解き、式(4)は差分化され

$$V_{\text{new}}(x_m) = V_{\text{old}}(x_m) - 2\varepsilon \sum_{i=1}^N (e_i^s - e_i) \phi_i^2(x_m), \quad (1 \leq m \leq M) \quad (5)$$

となる。ここで M は数値計算を行うべき格子点の総数である。

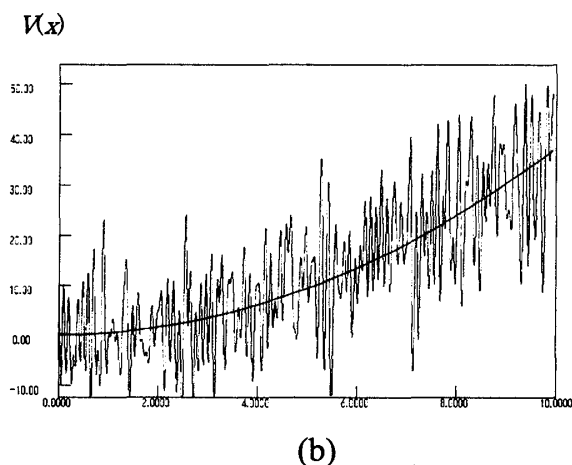
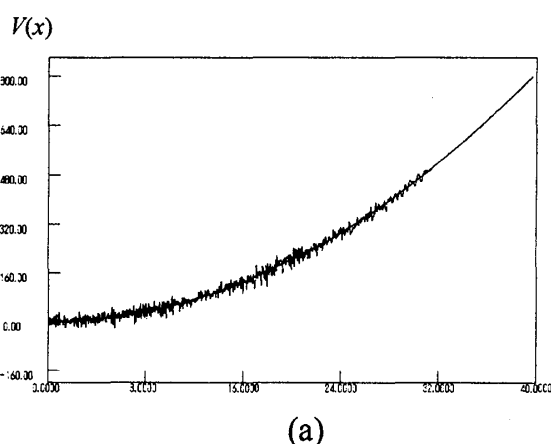


図1: GOE 型行列から得られた 500 個の固有エネルギーを再現するポテンシャル。ポテンシャルの構成法(5)より、構成されたポテンシャルは必ず原点に對称 $V(x) = V(-x)$ となる。(a): ポテンシャル $V(x)$ を $0 \leq x \leq 40$ の範囲でプロットしたもの。(b): より形状の詳細を見るために、ポテンシャル $V(x)$ を $0 \leq x \leq 10$ の範囲でプロットしたもの。

反復探索(5)のための初期ポテンシャルとして、量子準位間隔がすべて1となる調和振動子ポテンシャル $V(x)=x^2/2$ を採用した。格子間隔を $\Delta x=0.001$ と採ったので、格子点数は $M=50001$ となる。ポテンシャル上のひとつの振動的揺らぎに対し100格子点以上を用意したことになる。結果、構成されたポテンシャルの持つ固有値の再現精度は $e_i^s - e_i$ の平均は 2.2×10^{-8} 、標準偏差は0.0033となった。これは、以前の仕事より格段に良い精度が得られている[3]。このように、500本のGOE型エネルギーを持つポテンシャルを $0 \leq x \leq 50$ の範囲で数値的に構成することができた。

そのポテンシャルを図1に示す。アンフォールディングにより平均準位密度=1であることから大まかな形は調和振動子であり、その上に振動的な揺らぎがたくさん載った形になっている。揺らぎは原点 $x \approx 0$ に近いところほど振幅が大きく、かつ細かくなっている。 $N=100$ 等の場合と比較してみると、 N が大きいほどより広い範囲でポテンシャルにより激しくかつ細かい振動が載っていることがわかった。また、再現すべき固有値のうち最大のものの古典転回点を少し越えたあたりでその揺らぎはなくなる。

半古典近似の議論によると、もし完全にランダム行列の準位統計を再現することができたなら、通常のポテンシャル系とは異なり最短周期軌道が存在できないことが示唆される[4]。より高エネルギーまでの固有値を用いると、より複雑で細かな振動がポテンシャルに載ってくると予想できる。これは、高エネルギーの極限ではポテンシャルの形状がフラクタルになることを示唆している。つまり、高エネルギーの極限ではポテンシャルは連続だが、至る所で微分不可能となる。

そこで、このポテンシャルのフラクタル性をボックスカウント法で評価した[3]。 $N=500$ の場合も $N=100$ の場合も形状のフラクタル次元は1.7...となることを示した。もちろん、ボックスカウントに使用するボックスサイズが小さくなりすぎると、計算した次元は1になってしまうが、そうなる臨界サイズも N が大きくなるにつれて小さくなることも揺動により細かい成分が現れることから説明できる。

逆散乱法[5]は近似法ではなく理論的に厳密な手法であるが、反面手法の性質上、計算量が N が大きくなるにつれて急速に大きくなってしまふ。我々の用いたアルゴリズムの場合、計算量は $2M$ に比例してしまふ。したがって、 N が小さい場合のポテンシャルの構成しかできないが、同じ N の場合に最急降下法の結果とたいへんよく似たポテンシャルを構成することができた。これは、我々の得たポテンシャルの形状は数値的に求めたものあるにもかかわらず、ユニークであることを示唆している[3]。この形状のフラクタル性は、カオス系の最短周期軌道の非存在を説明できるかもしれない。

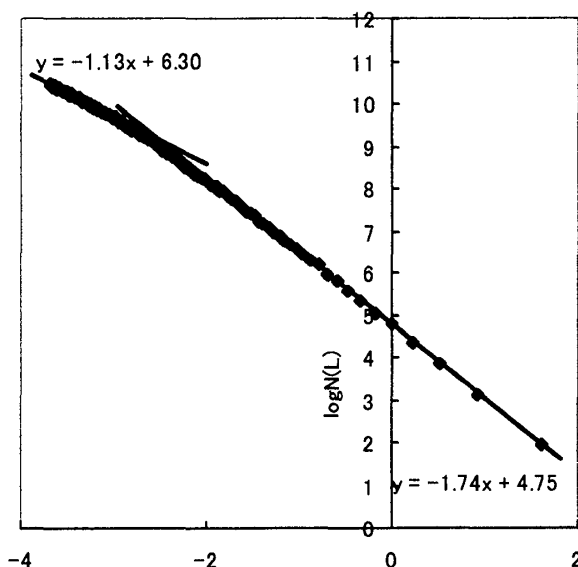


図2: ボックスカウントしたボックスの数 N をボックスのサイズ L に対してプロットしたもの。両軸とも対数を取って表示している。フィットした直線の傾きの絶対値がフラクタル次元となる。領域 $\log L \geq -2.7 (= \log L_c)$ においては、フラクタル次元は1.74と求められた。領域 $\log L \leq -2.7$ においては、フラクタル次元はほぼ1(≈ 1.1)となるが、これは、 $L_c \approx \exp(-2.7) \approx 0.067$ 以下の規模のポテンシャルの振動構造がないことを表している。

参考文献

- [1] H. Wu, M. Vallizères, D. H. Feng and D. W. L. Sprung: Phys. Rev. A **42**(1990)42.
- [2] M. Tomiya, N. Yoshinaga, Suppl. J. Phys. Soc. Jpn. **72** (2003)115, Suppl. C.
- [3] M. Tomiya, N. Yoshinaga, Shoichi Sakamoto, e-J. Surf. Sci. Nanotech. **1**(2003)175.
- [4] M. V. Berry, Proc. R. Soc. London Ser. A **400** (1985)229.
- [5] H. B. Thacker, C. Quigg and J. L. Rosner, Phys. Rev. **D18** (1978)274.