

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 18 日現在

機関番号：25407

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2009～2013

課題番号：21560064

研究課題名(和文) 古典-量子マルチスケール輸送現象の可視化統合シミュレーション

研究課題名(英文) Simulation for Integrated Visualization of Classical-Quantum Multiscale Transport Phenomena

研究代表者

石尾 広武 (ISHIO, Hiromu)

福山市立大学・都市経営学部・教授

研究者番号：40271035

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円、(間接経費) 1,080,000円

研究成果の概要(和文)：2次元開放系ビリヤードモデルの輸送現象に着目し、基本原理に忠実に基づく高精度な数値シミュレーションを広範なエネルギー領域において実行した。その結果、カオス系の場合、低エネルギーな量子波の領域から高エネルギーな古典粒子の領域に至る過程で、波の局在(スカー)が現れ、それがエネルギーと共に連続的にフラクタル性を獲得していく過程を明らかにすることができた。この研究により、カオス系に見られるマルチスケールな輸送現象が可視化され、その量子領域から古典領域に至る遷移を統一的に理解することができるようになった。

研究成果の概要(英文)：Considering transport phenomena in 2D open billiard models, we carried out high-precision numerical simulations in wide energy regions following a truly fundamental principle. As a result, we found that, in the case of chaotic systems, wave localization (scar) emerges in the transition from a low energy region of quantum waves to a high energy region of classical particles. We also demonstrated the process that the scar is gaining fractality continuously as a function of energy. This research visualizes multiscale transport phenomena as are seen in chaotic systems and enables us to understand the transition from the quantum to the classical regime in an integrated way.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎、工学基礎

キーワード：シミュレーション工学 計算物理 可視化

1. 研究開始当初の背景

20世紀の初頭に、デンマークのコペンハーゲンでニールス・ボーアを始めとする物理学者達によって構築された「コペンハーゲン解釈」は、それから90年近く経った今、量子力学の基本思想として、全ての物理学者に受け入れられるようになった。このコペンハーゲン解釈によれば、例えば電子の振舞いは、粒子らしく振舞う面と波らしく振舞う面の両方の側面がある。波というのは電子の存在する確率を与え、電子を観測すると同時に観測値に対応する状態に波束が収束すると解釈される。この解釈を否定するような事実はこれまでに見付かっていないが、直観的には容易に理解し難いものである。

一方、近年の科学技術の発達によるダウンサイジングの流れの中で、我々が取扱い可能な系がますます小さくなってきた。例えば、最近の原子・分子操作や半導体超微細構造作成といった最先端高度技術の発展に伴い、我々が直接観察したり加工したりできる系の大きさがどんどんと小さくなってきた。そして、量子コンピュータなどが現実味を帯びてきた今日、もはや17世紀にニュートンによって確立した粒子を基本とする古典力学の世界だけでなく、波を基本とする量子力学に支配される微視的世界が直接の研究対象となっている。そこでは、量子-古典対応の問題が姿を現す。これまで長年にわたり難しい解釈問題として置き去りにされてきた量子(波)と古典(粒子)の中間領域の理解は、単に哲学や机上論ではなく、既に現実問題として避けて通れなくなってきた。特に、1918年にボーアによって提唱された対応原理は、ミクロ(微視)からマクロ(巨視)への高エネルギー極限で、量子論から古典論へ漸移的に移行しなければならないことを意味する。言い換えれば、系のサイズに比べて電子の波長が大きい(即ち、エネルギーが小さい)場合から波長が小さい(即ち、エネルギーが大きい)場合へ移行したときに、波が粒子に収束するというのである。しかし、それを直接観察するのは無理だとしても、計算機シミュレーションで明らかにすることもこれまでに行われることはなかった。

このボーアの対応原理に基づく量子-古典遷移の問題は、閉じた系の場合には厄介である。閉じたミクロ世界の特徴であるエネルギー準位などに見られる不連続性は、マクロな極限で連続性に移行するというのであるが、そもそも不連続と連続の接続は、エルゴード性にも関係して、数学的にも困難な問題である。一方、開放系の場合には、取り得るエネルギーの値が常に連続であり、任意の波長をもつ波の散乱問題を考えることができるため、量子論と古典論との対応関係がどこまで成り立つのかという問題を考える上で、少なくとも不連続と連続の接続の問題を回避できる。

更に、量子-古典対応を考える上で、特に注目すべきは、カオスの問題である。即ち、古典力学に見られるカオスが量子の世界にどのように反映されるかについては、未だにはっきりとは分かっていない。

2. 研究の目的

開放系におけるカオス的な量子輸送が問題となる実例として、メゾスコピックな半導体量子井戸中の電気伝導やナノスケールの分子架橋などが挙げられる。これらを簡略化したモデルが「カオス的開放系ビリヤード」である。

本研究では、2次元カオス的開放系ビリヤードの輸送現象に着目し、基本原理に忠実に基づく高精度な数値シミュレーションを広範なエネルギー領域において実現する。それにより、カオス系に見られるフラクタルなどのマルチスケールな輸送現象が可視化される。そうして、古典系のカオスに見られるマルチスケールな特徴が、量子系の波の世界にどう現れるのかなど、その量子領域から古典領域に至る遷移の過程を統一的に理解することを目的とする。

3. 研究の方法

(1) 波動関数と輸送係数の数値解

典型的な2次元カオス的ビリヤードとしてスタジアム型ビリヤードを採用する。スタジアム型ビリヤードは、正方形を1対の半円ではさんだ形状をしており、中の粒子の運動は、完全なカオスを示すことが知られている。これに2つの開口を設け、それぞれに半無限大の長さをもつ擬1次元的リード線(チャンネル)を接続することで、開放系スタジアム型ビリヤードが得られる。初期条件として、一方のリード線の無限遠から平面波を入射する。入射した波は、ビリヤード内の2次元自由空間を伝播していき、境界でのみ散乱が起こる。境界条件として、ビリヤードの壁は全てディリクレ型とする。何回かの散乱の後、ある割合の波は入射した時と同じ開口から出て行き反射確率を与え、残りの波はもう一方の開口から出て行き透過確率を与える。各チャンネルモードへの透過確率の総和から、コンダクタンス(抵抗の逆数)が計算される。

与えられた初期条件及び境界条件の下で開放系スタジアム型ビリヤードの波動関数を求めるため、シュレディンガー方程式(ヘルムホルツ方程式)を数値的に解く。数値解法として平面波展開法を用いる。これは、至る所の波動関数解を平面波の基底関数を使って展開する。平面波の伝播方向を離散化することで高次元複素行列方程式が得られる。これを計算機で解くことにより、波動関数及びコンダクタンスなどの輸送係数が求まる。

(2) 数値データの蓄積

開放系スタジアム型ビリヤードの波動関数と輸送係数の数値解を、低エネルギー領域（波長が系の大きさの数分の1）から高エネルギー領域（波長が系の大きさの数千分の1）までの各エネルギーについて繰り返し求める。特に、高エネルギー領域においては、系の大きさに比べて波長が極めて短いため、より高精度な計算が求められる。こうして得られる数値データを巨大なストレージに蓄積する。

(3) 膨大な数値データの可視化

蓄積された膨大な数値データをつなぎ合わせて、エネルギーの関数として波動関数や輸送係数の振舞いなどがどう変わるのかを映像として可視化する。これによって、本研究の目的である数値シミュレーションが完成する。

4. 研究成果

開放系スタジアム型ビリヤードの輸送現象に着目し、基本原理に忠実に基づく高精度な数値シミュレーションを広範なエネルギー領域において実行した。その結果、カオス系の特徴として、低エネルギーな量子波の領域から高エネルギーな古典粒子の領域に至る過程で、波の局在(スカー)が徐々に現れ、それがエネルギーの増加と共に連続的にフラクタル性を獲得していく様子が観察された。そこでは、ある波の局在パターンを拡大すると、再び自己相似な波の局在パターンが現れ、エネルギーが高いほどその繰り返しの階層が深くなることが分かった。このスカーは対応する古典軌道に沿って現れ、その局在幅はエネルギーの増加と共に減少するため、古典軌道に漸近することも確かめられた。

この研究により、カオス系に見られるマルチスケールな輸送現象が可視化され、その量子領域から古典領域に至る遷移を統一的に理解することができるようになった。

本研究の本質や意義と共に、得られた結果の一部は、平成22年度ひらめきときめきサイエンス「コンピュータシミュレーションで探る微小な世界～量子の不思議～」(2010年8月8日、立命館大学)において、高校生(保護者を含む)を対象にしたアウトリーチ活動の中で、研究代表者が分かり易い説明を付けて紹介した。

本研究の結果を踏まえた今後の展開としては、現代物理学の重要なテーマの一つである量子の不思議な世界を、一般の人にもより分かり易く紹介する教材開発を引き続き進めていきたい。更に、カオスのような複雑な現象をより効果的に可視化する方法を探るために、人間とコンピュータとの相互作用の観点から、人間工学的な研究(特に視機能と

画像認識の研究)を深めていきたいと考えている。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計3件)

1) H. Ishio, S. Sano, T. Shiomi, T. Kanda, H. Hori, K. Uemoto, A. Sugiyama, M. Niwa, A. Hasegawa, S. Matsunuma and M. Miyao: Visibility Experiment and Evaluation of 3D Character Representation on Mobile Displays, "Communications in Computer and Information Science", Vol. 174 (Part II) (Springer, 2011), pp. 46-51, DOI: 10.1007/978-3-642-22095-1_10 (査読有)

2) 山下 芳樹, 坂東 昌子, 石尾 広武, 上田 倫也, 川村 康文, 前 直弘: 自然現象の可視化 親子理科実験教室から学ぶ, 立命館高等教育研究, Vol. 11 (2011), pp. 199-212 (査読有)

3) 坂東 昌子, 山下 芳樹, 上田 倫也, 石尾 広武, 川村 康文, 前 直弘: 擬人化と体験学習, 京都大学高等教育研究, Vol. 16 (2010), pp. 49-60 (査読有)

[学会発表](計5件)

1) H. Ishio, T. Kojima, T. Oohashi, Y. Okada, H. Takada and M. Miyao: Effects of Long-Time 3D Viewing on the Eye Function of Accommodation and Convergences, The 15th International Conference on Human-Computer Interaction (HCI2013), 2013年7月26日, ラスベガス(アメリカ)

2) T. Oohashi, H. Ishio, Y. Okada, T. Yanase, T. Kojima and M. Miyao: Measure of Lens Accommodation and Convergence during Viewing 3D Videos Containing Text Information, The 15th International Conference on Human-Computer Interaction (HCI2013), 2013年7月26日, ラスベガス(アメリカ)

3) 石尾 広武, 上本 啓太, 塩見 友樹, 堀 弘樹, 宮尾 克: 3D映像視聴時における水晶体調節 - 輻輳の同時計測と映像の鮮明度の半定量測定, 電子情報通信学会総合大会, 2012年3月21日, 岡山大(岡山県)

4) H. Ishio, S. Sano, T. Shiomi, T. Kanda, H. Hori, K. Uemoto, A. Sugiyama, M. Niwa, A. Hasegawa, S. Matsunuma and M. Miyao: Visibility Experiment and Evaluation of 3D Character Representation

on Mobile Displays, The 14th International Conference on Human-Computer Interaction (HCI12011), 2011年7月12日, オランダ (アメリカ)

5) 塩見 友樹, 石尾 広武, 高橋 卓也: 溶質周囲の水のダイナミクスと分極電荷の計算, 第23回分子シミュレーション討論会, 2009年12月1日, 吹上ホール(愛知県)

〔図書〕(計1件)

1) 石尾 広武: 福山市立大学開学記念論集 (児島書店, 2011), pp. 387-397

〔その他〕

1) 平成22年度ひらめき ときめきサイエンス「コンピュータシミュレーションで探る微小な世界～量子の不思議～」(2010年8月8日, 立命館大学),
<http://www.jsps.go.jp/hirameki/ht22000/ht22141.pdf>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

石尾 広武 (ISHIO, Hiromu)

福山市立大学・都市経営学部・教授

研究者番号: 40271035