

平成 30 年 6 月 22 日現在

機関番号：34315

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2017

課題番号：15K13539

研究課題名(和文)カオス系における拡散と局在の古典論と量子論—低次元から高次元へ—

研究課題名(英文)Classical and quantum dynamics behind diffusion and localization in chaotic systems—from low to high dimensional dynamics—

研究代表者

清水 寧 (SHIMIZU, Yasushi)

立命館大学・理工学部・教授

研究者番号：30388128

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,000,000円

研究成果の概要(和文)：カオス系での確率流の「局在」と「非局在」(拡散)に着目し、古典論と量子論の立場から多自由度カオスを数値的に研究した。(1)古典系であるレナードジョーンズクラスターの異性化過程におけるカオスダイナミクスと遷移状態理論の関係を安定異性体の寿命分布を用いて明らかにした。また(2)複数の安定状態をもつ遷移ネットワークに対し、ボトルネックとなる最も遅い緩和過程を特定する数値的手法を開発した。(3)量子写像系での動的局在において、局在長に関する現象論的スケールング則を見だし、その導出に成功した。また多自由度量子カオス系での局在-非局在転移を量子Coupled Kicked Rotor系を用いて議論した。

研究成果の概要(英文)：We have numerically investigated some classical and quantal aspects of many dimensional chaos by paying a special emphasis on the localization and non-localization(diffusion) of probability flow.

(1)For classical systems, we elucidate the relationship between chaotic dynamics and micro-canonical transition state theory in the isomerization dynamics of a Lennard-Jones cluster in terms of the lifetime distributions for stable isomers. Moreover,(2)we developed a novel numerical method to extract the bottleneck process (the slowest relaxation mode) from the complicated transition network among stable states.(3)For quantum map systems, we have found a phenomenological scaling rule for the localization length, which can be derived by the self-consistent mean-field theory on the basis of a new hypothesis.The localization to non-localization transition in multidimensional quantum chaotic maps has been discussed by means of the so-called quantum coupled kicked rotor.

研究分野：非線形ダイナミクス

キーワード：多自由度カオス クラスタ 量子カオス 動的局在 カイネティクス 遅い緩和

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

古典系、量子系にかかわらず、多くの興味深い遷移過程は、多次元の相空間内の確率流の異常として理解することができる。ダイナミクスにおけるカオスは、力学系の混合性の起源であり、相空間をかき混ぜることでノーマルな拡散(確率流の**非局在**)を引き起こすことが知られている。その一方で、対応する量子系においては、量子干渉効果によって波動関数の指数関数的な**局在(いわゆる動的局在)**を起こす起源となっている。このような局在現象を引き起こす量子カオス系は、ある条件(メリーランド変換)下で、1次元アンダーソンモデルと等価であることを考慮すると、古典系および量子系のカオスにおける、相空間の確率流が、力学的構造(不変多様体)によってどのように規定されているかという問題は、局在現象全般にも通ずる「一般的な問題」であると捉えられる。実際これまで、「動的局在」を示す量子写像系として、対応する古典系が、典型的な低自由度カオスとなる量子標準写像系が広く研究されている。しかしながら、自由度が高くなると、力学系の相空間内の構造は、劇的に変化し、古典系で言えば、アーノルド拡散のように、ネットワーク的に連なる非常に遅い拡散という、大自由度特有の現象が現れることが知られている。こうした自由度の多さに由来する多様な側面を、量子系と古典系を同時に、あるいは並行して調べることによって、局在-非局在現象に対する統一的な視点を得ることを本研究では目指した。

### 2. 研究の目的

本研究では、カオス系における「局在」と「非局在」(拡散)に着目し、古典論と量子論の双方の立場から、多自由度カオス系を統一的に理解することを目的とした。特に多自由度カオス力学系の相空間での輸送を、少数自由度カオス系と比較することで多自由度力学系の特異性を明らかにするとともに、その力学的起源を明らかにすることを最終的な目標とした。

### 3. 研究の方法

古典カオス系と量子カオス系のそれぞれについての「局在」「非局在(拡散的)」現象を、特に相空間の構造の視点から、同時あるいは並行して調べることによって統一的な見方を浮かび上がらせることを目標とした。

清水、奥島は少数自由度系としてのクラスター系の遷移ダイナミクスに着目し、遷移確率の視点から、相空間内の非局在(拡散)について研究した。マイクロカノニカル遷移状態理論による結果と力学過程を比較することで、統計性の成立や破れ、拡散のタイムスケールの評価方法を調べた。特に奥島は、自由度の多さに由来して遷移ダイナミクス

のネットワークが複雑化した時に、ボトルネックとなる遅い緩和を特定する手法の開発に注力した。

池田は、複数の量子写像を用いて、動的局在の局在長のスケーリング則とカオスとの関係を中心に研究した。

### 4. 研究成果

主として次の3つの成果を上げた。

(1)多自由度ハミルトン力学系ダイナミクスにおける統計的遷移状態理論の成立と破れの検証

(2)複雑な地形構造をもつポテンシャル曲面に支配された遷移過程における緩和解析のための新手法の確立。よおよびその手法の多自由度系(クラスター系)への適用

(3)2次元のdisordered系とメリーランド返還で結ばれる量子写像系における動的局在現象に対する新たなスケーリング理論の発見。カップルしたKicked Rotor系での振動子運動量空間における動的局在に類似した現象の発見。

(1)-(3)それぞれについて成果の内容を以下で解説する。

(1)7個の原子からなるレナードジョーンズクラスター(LJ<sub>7</sub>)を用いて、4つの安定な異性体構造(PBP, COCT, IST, SKEW)の寿命分布を分子動力学的手法によって精査した。異性体間の構造遷移が始まるエネルギー領域(固液共存領域)を中心に、ミクロカノニカルな遷移状態理論と実際の力学的遷移の頻度を比較することで、従来指摘されていた統計理論の破れが誤りであり、寿命分布が指数分布に従うことを見いだした。いわゆる固液共存状態において、調和近似を用いた遷移状態理論から導かれる予想と分子動力学計算の結果の間に極めて良い一致があることも数値的に確認した。これらにより従来いわれていたLJ<sub>7</sub>系における非統計的な振舞いは否定された。その一方で、同じ固液共存状態における異性体間の遷移ダイナミクスを、3つの安定構造

(OCT, CTBP, CTBP')をもつ6原子からなるクラスター(LJ<sub>6</sub>)で調べたところ、寿命分布に非自明な振動構造があることがわかった。これは異性体間遷移が長時間(10振動分程度)の力学的相関をもちながら起こることを示唆し、まさにこの場合において、従来のミクロカノニカル遷移状態理論が破れていることが予想される。現在この力学相関がどのような相空間構造によって引き起こされているかを調べている。これは非常に特殊な事例かもしれないが、遷移状態近傍の相空間の確率流が、不変多様体により制約

を受ける条件を学ぶための良い事例となる可能性を秘めている点で意味がある。

(2)レナードジョーンズポテンシャルのような二体ポテンシャルによって相互作用する多体系の安定な構造間の遷移過程は、もしカオスが十分発達していれば、遷移確率行列が支配するレート方程式で記述される。様々な時間スケールの緩和過程が内包されるこの系に対して、我々は最も遅い緩和スケールを抽出するため、メタベイズン法と組み合わせた、新たな繰り込み手法を開発した。この手法は少ない計算コストで平衡化を規定する遅い緩和時間と緩和プロセスを抽出することを可能とする方法である。この手法の妥当性を検証するためにナノクラスター内での空孔の拡散過程へ適用し、分子動力学計算との比較によって、その実用性も確認した。実際、この方法によって従来はレート方程式に現れる巨大な確率行列を直接対角化するしか求めることができなかった遅い時間スケールの情報を、より簡便に求める処方箋を提供することができた。さらに、手法の物理的な解釈が明確であることから、緩和を支配する物理的なメカニズムを特定することが容易であるという利点があるので、この手法の多様な応用が期待できる。

(3)ある条件で2次元のランダム系と等価である、「単色(monochromatic)な摂動を加えた量子写像(標準写像とアンダーソンマップの2つの例)」における動的局在長を数値的に調べた。その結果2つの例で見られた、局在長のパラメータ依存性に対する現象論的表式をえた。この現象論的表式は、アンダーソン局在の自己無撞着な平均場理論を元にして、カットオフ長へ新たな仮定を導入することによって得られることがわかった。また池田らは典型的な多自由度量子カオス系である Coupled Kicked Rotor (CKR)系を用いて「不可逆性」と「もつれ(エンタングルメント)」の関係を数値的に調べた。ここでいう「不可逆性」とは、2つの CKR 系に弱く結合した線形振動子の運動量が一方向的かつ拡散的に増大することを意味する。つまり、このモデルの不可逆性は、線形振動子系の運動量空間での拡散を指す一方、運動量空間の局在は不可逆性の飽和を意味する。池田は CKR 系が示す不可逆性が、どれだけ持続するかを定量化するために「不可逆性の寿命の持続時間」という指標を導入し、従来から用いられる「エンタングルメントエントロピー」(EE)の振る舞いと比較した。CKR 系の時間発展を数値的に長時間にわたり調べると、KR 間のカップリング強度がある閾値をこえた場合、EE と「不可逆性の寿命の持続時間」は正の相関をもちながら急激に増大することを見出した。特に閾値ちかくでは、EE は臨界ゆらぎに似た大きなゆらぎを示し、あた

かも不可逆性の発生が相転移ライクな振る舞いを見せることを指摘した。これは CRK 系に、従来の量子カオス写像の運動量空間での局在-非局在の相転移的な特性と相似な構造あることを示唆するものである。

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 7 件)

1)H.S.Yamada,F.Matsui,and K.S.Ikeda;  
Scaling properties of dynamical  
localization in monochromatically  
perturbed quantum maps:Standard map and  
Anderson map,査読有, Phys.Rev.**E97**  
(2018)012210,13pages,DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.012210>

2)T.Okushima,T.Niiyama,K.S.Ikeda,and  
Y.Shimizu; Slowest kinetic modes  
revealed by metabasin renormalization,  
査読有,Phys.Rev.**E97**(2018)021301,  
5pages,DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.021301>

3) F.Matsui,H.S.Yamada,and K.S.Ikeda;  
A Quantum Damper(2017),7pages,査読なし,  
cond-mat arXiv:1709.03115

4)T.Niiyama,T.Okushima,K.S.Ikeda, and  
Y.Shimizu; Size dependence of vacancy  
migration energy in ionic nano particles:  
a potential energy landscape perspective,  
査読有,Chem.Phys.Lett.**654**(2016)52-57,  
<https://doi.org/10.1016/j.cpllett.2016.04.088>

5) F.Matsui, H.S.Yamada,and K.S.Ikeda;  
Measuring lifetime of correspondence with  
classical decay of correlation in quantum  
chaos,査読有,Eur.Phys.Lett.**113**(2016)  
40008,6pages,doi:10.1209/0295-5075/113/4  
0008

6) F.Matsui, H.S.Yamada,and K.S.Ikeda;  
Relation between irreversibility and  
entanglement in classically chaotic  
quantum kicked rotors,査読有, Eur.Phys.  
Lett.**114**(2016) 60010,5pages,  
doi:10.1209/0295-5075/114/60010

7)H.S.Yamada,F.Matsui,and K.S.Ikeda;  
Critical Phenomena of Dynamical  
Delocalization in Quantum Anderson Map, 査  
読有, Phys.Rev.**E92**(2015)062908,5pages,  
DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.062908>

〔学会発表〕(計 13 件)

- 1) 清水寧, 馬場朋広 「レナードジョーンズクラスター LJ7 における固液転移とカオス II」日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017 年)
- 2) 池田研介, 花田康高, 首藤啓 「対応原理によりインスタントン非インスタントン転移の研究 IV」日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017 年)
- 3) 池田研介, 山田弘明 「単色摂動アンダーソン写像におよび標準写像の 2 次元局在現象」日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017 年)
- 4) 池田研介, 「A Quantum Damper」第 22 回レーザーのカオス・ノイズダイナミクスとその応用(2017 年)
- 5) 奥島輝昭, 新山友暁, 池田研介, 清水寧 「マルコフ状態モデルの遅い緩和に対するメタベイスンを用いた繰り込み方法」日本物理学会 2017 年春季大会 (2017 年)
- 6) 馬場朋広, 清水寧 「レナードジョーンズクラスター LJ7 における固液転移とカオス」第 14 回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム (2017 年)
- 7) T. Niiyama, T. Okushima, K. Ikeda and Y. Shimizu 「Size-dependent potential energy landscapes of vacancy migration in ionic nano particles」8th International Conference on Multiscale Materials Modelling (MMM2016) (2016 年)
- 8) 馬場朋広, 清水寧 「レナードジョーンズクラスター LJ7 における固液転移とカオス I」日本物理学会 2016 年秋季大会 (2016 年)
- 9) 松井文宏, 山田弘明, 池田研介 「量子カオス系における固有状態の重ね合わせと不可逆性の寿命」日本物理学会 2016 年秋季大会 (2016 年)
- 10) 新山友暁, 奥島輝昭, 池田研介, 清水寧 「サイズ依存性をもつ空孔拡散ダイナミクスのポテンシャルエネルギー超曲面構造」マルチスケール材料力学シンポジウム(日本材料学会第 21 回 分子動力学シンポジウム)(2016 年)
- 11) 奥島輝昭, 池田研介 「多自由度ハミルトン系における周期軌道の軌道不安定性に基づく緩和現象の研究 VII」日本物理学会 2016 年春季大会 (2016 年)

12) 松井文宏, 池田研介, 山田弘明 「量子系における時間の矢の寿命測定」日本物理学会 2015 年秋季大会 (2015 年)

13) 松井文宏, 池田研介, 山田弘明 「もつれ合いの異常ゆらぎと時間の矢」日本物理学会 2015 年秋季大会 (2015 年)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

清水 寧 (Shimizu Yasushi)  
立命館大学・理工学部・教授  
研究者番号：30388128

### (2) 研究分担者

池田 研介 (Ikeda Kensuke)  
立命館大学・理工学部・教授  
研究者番号：40151287

奥島 輝昭 (Okushima Teruaki)  
中部大学・工学部・准教授  
研究者番号：10434721