

これまでの研究概要と今後の研究予定

これまでの研究概要

「量子系における局在・非局在と脱干渉化構造」が主な研究課題である。以下の(1),(2)でその経緯について説明し、(3)はそれ以外の研究成果についてまとめてある。文末の業績の番号は出版された業績リストの番号に対応するものである。

(1) 相関のある一次元ランダム系における局在・非局在転移：量子物性物理学の理論的研究に興味を持ち、1989年4月から1992年3月まで新潟大学自然科学研究科の博士課程において、「相関のある一次元ランダム系における局在・非局在問題」を研究して以来、継続している研究内容である。ランダム系に関しては、1979年に提唱された、いわゆる4人組の局在に関するスケーリング理論により「一次元及び二次元系は指数関数的に局在し、三次元系では移動度端により局在・非局在状態が分けられる」という実空間の繰り込み（有限サイズスケーリング）に基づくユニヴァーサルクラスに分け整理されている。しかし、スケーリング理論ではポテンシャルや強結合モデルのサイトエネルギー列が理想化された無相関の場合（この場合一次元系では小谷理論などによる数学的厳密な扱いが可能）が想定されており、相関が冪的（スケールフリー的）減衰を示すランダム系における一電子状態（固有関数や波束の量子状態や固有値の特性）に関しては全く不明であった。こういった構造上のべき的に減衰する相関は規則・不規則転移転直上に現れることが期待される。私は、計算機実験とフルステンベルグ型定理に基づく理論的考察により、相関のべき指数が比較的大きく速く減衰する場合（定常な場合）は、固有関数の指数関数的局在が維持されるが、冪指数の大きさによりさらにクラスが分かれる可能性が大きいことを示した（業績2,3,4,5）。さらに、サンプル集団を考えたときのリャプノフ指数の分布における揺らぎの収束性が、システムサイズが無限大になる場合中心極限定理に従う無相関ランダム系とは異なるスローな収束性を示すことも明らかにした（業績2,4）。上記の研究は、相関の強さをコントロールできる一次元写像（変形ベルヌーイマップ）を用いて相関のある列を生成し行った先駆的なものであった。その後、1995年頃からべき相関のあるランダム系の研究がいくつかのグループで行われ始め、システムの構造の相関が誘起する一次元ランダム系での移動度端の存在、局在・非局在転移の存在などが示唆されている。私自身も2013年頃から現在にかけて、ワイエルシュトラス関数を利用した（フラクタルな系で位相に乱れをもつ）相関のある一次元ランダム系において、ポテンシャルの強度や相関の強さにより局在・非局在転移の存在を数値計算により強く示唆した（業績86,90）。

この相関のある一次元系あるいは擬一次元系の応用面としては、DNA(DNAの塩基配列は $1/f$ を示す冪的相関をもつという報告もある)や高分子の電子状態や電気伝導に関することが考えられる。実際に2003年から2010年にかけて現実のDNA配列を用いたり、二本鎖、三本鎖に拡張した場合のリャプノフ指数などにを研究し、その特殊な相関や構造に基づく特異な電子状態を示した（業績53,55,60,67,74）。さらに、数値解析に用いる相関のある N 次元ランダム行列の積($N \times N$ 行列の積)に関する極限定理は、擬一次元系や量子細線における伝導特性、または一次元古典多粒子系の力学的不安定性の解明とも関わる興味深い問題である（業績31,33,39）。

(2) 多色摂動に誘起される一次元ランダム系における波束の局在・非局在転移と散逸化：(1)は主に時間に依存しないシュレーディンガー方程式の性質を調べたものであった。初期状態とし

ての局在波束が時間依存のシュレーディンガー方程式に従い如何に変動するか、すなわち波束の量子拡散の問題はより直接的に物性研究にも結びつく基本問題でもある。一般に摂動の無い一次元ランダム系における波束の量子拡散は、その局在長で抑制される。また確率的摂動（ノイズ）を加えた場合、典型的にブラウン運動型の正常拡散が続く。（相関のある一次元ランダム系の波束の量子拡散の研究は現在でもほとんど行われていない。）

1993年から「一次元ランダム系の強力な指数関数的局在が如何なる条件下で非局在化するか」という問題意識により、コヒーレントな時間に依存する摂動を加えた系（典型的には余弦関数的な時間依存性をランダムポテンシャルに加える）の量子拡散の研究を開始した（業績6,7,8）。その結果、1色の摂動（振動数成分が1つ）の場合は局在は解けず、多色摂動の場合には特異拡散を示すことを明らかにした（業績6,7,8）。このようにしてコヒーレントな摂動により広がった状態を、ブロッホ状態や準周期系の広がった状態などと区別し、「動的非局在状態」と呼んだ。さらに、その特異拡散領域では、集団平均した波束の空間的プロフィールは、ガウス分布とは異なり stretched Gaussian となることも発見した（業績10,14,16,22,26,36）。また、典型的な準周期系であるハーバーモデルの局在がこのコヒーレント摂動で非局在化する様子も報告した（業績30,41）。近年、交流電場中のガラスの物性の解明に類似のモデルが使われている。

この動的非局在状態はミクロな量子系と（ボルツマン分布が形成されるような）マクロな熱力学系との繋がりを調べるための最小モデルの一つになりうると考え、動的非局在状態を基底状態にある他の自由度（典型的には一つの調和振動子）と結合させ、全系内のエネルギー移動を調べた。これは対象とする系（この場合は非局在化する動的摂動下の一次元ランダム系）のもつ潜在的散逸性を具現化し観測していることから、「散逸性テスト」と呼んだ。その結果、周期系のブロッホ状態に摂動を加えた場合は、リカレントなエネルギー変動が起こるのみで決して観測されない、動的非局在状態の著しい特徴といえる準定常的エネルギー流が観測された（業績10,41,42,43）。さらに、調和振動子に流れたエネルギーが温度を定義できるようなボルツマン分布になっていることも発見し、これに対する現象論的解釈を与えた（業績42）。これらの内容を2001年9月に早稲田大学で開かれた、日伊セミナー「量子力学の基本問題」の招待講演で発表した（業績43）。さらに、2003年から現在まで、より長時間計算を精密に出来る一次元ランダム系のモデルとしてアンダーソン写像系を考案し、その動的非局在状態について研究を続けている。その結果として最近、動的非局在状態の最たるものである量子系の正常拡散状態の対称性を乱す摂動に対する反応性（fidelity や量子ロシュミットエコーとも類似するもの）を調べ、量子標準写像系の結果と比較しながら、その時間反転特性を明らかにした（業績76,79,80,81）。

(3) その他の研究: 以下に、1996年から博士課程の大学院生らと共同研究（研究指導を含む）をした課題と結果を簡単にまとめる。

(3-1) 古典多粒子系の力学的・統計力学的性質: 分子動力学法（MD法）による古典多粒子系の力学的、統計力学的性質の研究を行った。まず、シンプレクテック積分法を定温定圧の能勢・フーバー系に適用し計算を進めるためのスキームと誤差の評価などの道具作りから始めた（業績11）。さらにそれを使い、一次元 Lennard-Jones 系（LJ系）の力学的性質として、最大リヤプノフ指数の全エネルギー依存性とリヤプノフスペクトルを調べ、この系の不安定性の起源を明確にした（業績17,18,19,21,35）。このエネルギー依存性には”潜熱”を伴う一次転移のような領域が存在する。これは Fermi-Pasta-Ulam の格子振動モデルやソフトコア系では存在しないものである（業績32）。また、粒子間ポテンシャルをモース型に変えたときの特異拡散等の拡散特性を明らかにした（業績25,29）。さらに、三次元 LJ系と超イオン導電体の AgI における粒子拡散を数値的に解析し、ガウス分布に漸近するまでのメソスコピック時間領域において、

特徴的な前駆ガウス過程が観測されるという結果を得た（業績 15,20,27,28,34）。

(3-2) 生物現象とネットワーク構造の関係: スケールフリー構造の存在が、物理学、生物学、社会学、経済学など様々な分野で発見されてきた。スケールフリー構造とは、ノード（節）とそれを結ぶリンクより成るネットワークにおいてリンク数の分布が逆冪法則で特徴付けられるテイルを示すものであり、従来から研究されていたランダムネットワークとは異なり、多くのノードとリンクをもつハブの存在や最頻経路の存在などがその特徴である（業績 58,59,61,65）。一方、カウフマンが生物進化の起源を説明するため、ランダムネットワーク上でのブール代数（統計物理学のスピン系に類似したモデル）に従う状態変化を用い、細胞サイクルの多様性のモデルに「カオスの縁」という概念を導入して以来、リンク数による相転移などの研究が理論生物学においても盛んになった。そこでスケールフリー構造上でのオーダー相やカオス相を分ける臨界点や、その周辺でのブール動力学の振る舞いをカウフマンのモデルと比較しながら研究をし、適応度地形の統計性などは、ハブ構造の存在を反映して逆冪法則になることを観測した（業績 68,69,70,72）。また、このネットワークにおけるアトラクターサイズの分布をネットワークサイズを変えながら調べ、臨界的リンク数を境に、その平均値が代数的分布から指数関数的分布へと変化するという結果を得た。そして形成されたアトラクターの外的摂動に対する安定性やアトラクター間遷移構造そのものが持つ安定性についてもランダムネットワークとの違いを示した（業績 73,75,78）。

(3-3) 二重井戸ポテンシャル系でのトンネル効果: 非可積分系における量子トンネル現象を、二重井戸ポテンシャルに周期時間摂動を印加した系（カオス系）で考える。この状況で片方の井戸に局在した波束の力学的運動やトンネル現象を調べ、確率的な摂動による効果と比較した（業績 57,63,71）。その際、周期摂動はコヒーレントフォノン、確率的摂動は熱的フォノンと見なすことにより、実験的状況との対応も可能だと考えられる。また、摂動が印加されている状況下での波束のトンネル現象がどれくらい制御可能であるかを、量子系の最適制御理論に基づき調べた結果、二重井戸中の波束の移動制御は、条件により、系にカオス状態が実現している場合の方が容易になることが確認できた（業績 56,62）。また、リャプノフ指数で分類される古典カオス運動と比較しながら、量子波束の運動を Wigner 関数（波動関数の位相空間表示）などにより詳しく調べ、「規則的、弱カオス的、強カオス的」と分類した。これらの知見は、レーザーや熱的攪乱により分子の運動（化学反応）の解釈や制御などへの応用が期待できる。

以上のように、私の研究上の興味の対象は、量子系、古典系にはこだわらず、様々な物事において、理想的極限から外れた中間的状态や理想極限へ漸近する過渡的状态に興味がある。例えば、ミクロとマクロ中間であったり、量子と古典の中間であったりである。また、同じ問題を多くの研究者と競合して行うのは好まず、なるべく素朴なモデルや独自の問題設定をし、数値計算や解析的手法を用いてなんらかの非自明な結果を得たいと心がけている。

今後の研究予定

これまで主に、ランダム系や古典多粒子系などを対象として統計物理と物性物理の境界領域及び量子力学の基礎、統計物理の基礎に関わる問題に取り組んできた。「これまでの研究概要」で示した(1), (2) および(3-2)に関連した研究は現在も継続中である。これらの延長線上の研究や今後は是非取り組んでいきたい研究課題は以下の通りである。その具体的方向性を以下に示す。文末の業績の番号は出版された業績の番号に対応するものである。

(1) 関連のある高次元ランダム系の局在・非局在転移：研究経緯の(1)に関わる局在非局在の問題に関し、二次元ランダム系で擬移動度端を持つモデル(Azbelモデル)の解析的及び数値的研究を行ったが十分な結論には至らなかった(業績24,38)。乱れた二次元Si-MOSEFTやGaAs-based Materialにおいて、金属的状态が存在するという報告もあるが、理論的に二次元ランダム系の局在やスケール理論に関しては不明な点も多い。ここ数年来4人組の1パラメータスケール理論から外れるランダム系、つまり2パラメータスケール理論で説明される二次元ランダム系なども実験的にも発見されており興味深い。そこで、2変数のワイエルシュトラス関数等を用いて関連のある二次元ランダム系での移動度端をもつモデル作りとその解析を数値的手法を基に進め、二次元ランダム系の局在・非局在問題を掘り下げてみたい。実験との対応や観測可能性も追求したい。また、研究経緯の(3-2)に関わるスケールフリー構造での電子状態やリンクをバネ(一般的な相互作用)に見立てた場合の格子振動の特徴にも興味がある(業績24,38)。ハブの周りの状態はどうなっているのだろうか、また、不純物による効果や局在・非局在転移の存在はどうなるのか明確にしたい。これらの系における量子波束の拡散問題も不明な点が多い。研究経緯の(2)における非局在化転移の問題や時間反転特性を明確にしていきたい。さらに、上記の非局在化転移と研究経緯の(2)知見を基に、多色摂動系において振動数スペクトルを典型的な音響フォノンスペクトルに対応させ、いまだ実験的に不明な点もあるランダム系における広領域ホッピング伝導の解明にも取り組みたいと考えている。

(2) 量子における散逸現象と波動関数の解析性：研究経緯の(2)に関わる動的非局在状態において、振動子を結合させた散逸性テストの結果、純粋状態から自発的に非可逆的現象やボルツマン分布が形成される結果を得たが、この現象の一般性などの検証はまだ不十分である。全系の初期状態を電子と振動子の直積状態にとり純粋状態の時間発展から絡み合い状態が形成され、エネルギーが”熱”という形態に変換された可能性を示唆する興味深い現象であり、さらに追及する価値がある。当然、量子論では”熱”という概念は存在しない(古典論ですらそうであるが)。この現象の詳細な解析と伴に、この絡み合い状態の複雑さ等をうまく表現する量(エンタングルメントエントロピーなど)を定義して調べていきたい。これは容易なことではないであろうが、量子計算における散逸問題とも深く関わり、今後避けては通れない重要な問題であると思う。そして、量子系で発生する動的非局在状態、また準散逸的現象においてその特徴を波動関数の解析性に関連付けて理解したいと考えている。これは、古典カオスにおけるカオスへの転移をKAMトーラスの解析性の破れにより特徴付ける議論の量子版とも見なすこともできる。現在までの研究で自然境界をもつ関数に対するPade近似の有効性を確認しつつ、プロトタイプとして比較的良好にその性質が研究されているHarperモデルにおける臨界固有状態の解析性をPade近似などにより評価した(業績79,82,83,84)が、時間依存する動的非局在状態に対する適応はこれからの問題である。これは他の自由度に見立てた線形振動子の初期位相変化に対する対象系の量子状態の変動の解析性を特徴付ける問題としても応用したい。具体的

には、これを多自由度系とみなし、他の自由度の初期状態変化の系の鋭敏性を調べ、量子系の不安定性として軌道の多様化のような概念を導入できるか否かの検討をすることになる。この敏感性を通して、量子状態の古典化を特徴づけられる可能性があると考えている。さらに上記と同様な現象は、典型的な量子カオス研究のモデルのひとつである撃力を受けた回転子 (kicked rotor) などでも期待される。この系はランダム系の強結合モデルと異なり、古典極限が存在するので半古典論による解析が可能であるという利点をもつ。時間反転特性の研究で行ったことと同様に、これらの系の比較研究も行う予定である (業績 79,87)。

(3) 古典多自由度系の集団運動：研究経緯の (3-1) に関わる古典 LJ 系や Morse 系をモデルとし、古典多自由度系の集団運動における力学的構造の詳細な解析を行いたい。特に、リヤプノフベクトルの高次元空間でのダイナミクスを表現したい。このとき可視化の技術が必要になる。また、超イオン導電体におけるキャタピラー拡散機構やクラスター系の高速度合金化機構は、典型的な高速集団拡散現象として知られている。力学系を用いたモデルにより、この集団運動の力学的起源をカオス的軌道不安定性を通して明らかにする。また、外場の下では熱拡散と粒子拡散が同時に起こる。この力学的量でない ”熱” の拡散を力学的な情報の流れとして解析したい。計算機実験の必要性から一人で行うことは困難なので、共同研究者が見つければ実行してみたいことである。

(4) 教育と日常科学：教育を通して生まれてくる問題がある。当たり前で使用していた事実や当然だと思っていた現象も、講義や議論のためじっくり詳しく説明しようとするとうわかないことだらけであることにしばしば気付く。例えば、研究概要の (3-2) に関わるスケールフリー (フラクタル) や $1/f$ 型スペクトルと並んで、古くから発見されている逆ベキ乗則に、ジップの法則がある。所得、人口、単語や氏名の頻度分布 (ランク・サイズ関係式) が、逆ベキ乗で減衰するという歴史は古いものである。一方、エントロピーをの相加性を犠牲にして要素間の相関を取り込むことで、従来の指数分布 (ボルツマン分布) を拡張した q -指数分布が導かれる。この q -指数分布を用いて、様々な国における氏名分布の rank-size 関係式を Fitting し、tail の部分も含め分布全体がよくスケールされることを発見した (業績 66)。しかし、何故これが q -指数分布になるのかはまだ不明な点も多い。高度で専門的なものでも最先端の問題でもなく、学部の学生でも発見できたり、調べたりすることができる課題が教育により掘り起こされる例である。

実験技術や計算機の性能の向上が著しい近年、物質科学の側からも現象やそのメカニズムの解明に情報科学に基づく新たな知見が要求される。この場合、物質や個々の現象を縦糸とすれば、情報論や数理的見方が横糸のように例えられ、物理学による視点の中でそれらをうまく織り込みながら、全体像を浮き掘りにするよう進めていきたい。そして、この他にも良い問題、興味深い問題に出会ったらその都度考えていく予定である。