研究会報告

量子ラチェットとその周辺[1]

東京大学大学院工学系研究科　湯川論[2]

1 イントロダクション

1.1 ラチェットとは

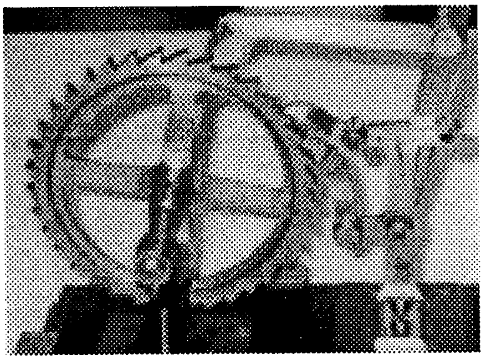


図 1: ラチェット

ラチェットとは非対称な歯をもつ歯車とその回転をとめるような爪でできている機械的な機構であり、歯車の回転方向を一方向に抑制する効果がある。このような性質を利用して日常生活では広く使われ、いわゆるラチェットドライバーやテニスコートでネットを張るときにつかわれている歯車などはラチェットである。

このようなラチェットを理論的に見直してみると、歯車の軸に与えられた平均として回転方向の異方性のないようなトルクを、歯車の歯の非対称性とその回転を停めるための爪で起きるエネルギーの散逸の効果で一方向への回転に変換するような機構と見なすことができる。

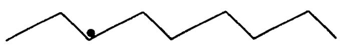


図 2: 非対称周期ポテンシャル中の粒子系

この効果をもっとも端的に取り出すモデルとして、非対称周期ポテンシャル中の粒子の運動を考えよう。非対称周期ポテンシャルを歯車の非対称な歯、粒子を歯の運動を停めている爪とみるのである。ラチェットでは歯車が動いて、爪が止まっているのであるが、このモデルではポテンシャルが止まっていて、粒子が動くとする。もともとのラチェットでは、歯車の歯はどの歯でも同等であるから、簡単化したモデルでも非対称周期ポテンシャルの周期ごとに並進の対称性があると仮定する。このため、ポテンシャルの空間的な勾配は平均として存在しない。

ラチェットの軸に異方性のないトルクをかけるということは、今のモデルでは、粒子に空間的なバイアスのないような外力を加えることに対応する。またもともとのラチェットで軸に適当な外力をくわえ歯車を回した操作の前後で、歯車が回転したとしても、歯の周期的な性質から見た目の配置は全く変わっていないように見える。これは、今のモデルでは系にエネルギーの散逸を加えることによって、外力を加えたあと最終的にはどこかの周期ポテンシャルの底に粒子が存在するような状況をつくることで表現する。

[1]もともとの発表はラチェット系のレビューを含む量子ラチェット系の話をお願いされていたので、ここでは一般的な話に焦点を当てる。詳細な古典および量子系のラチェットのレビューは最近の cond-mat[1] を参照してください。

[2]E-mail: yukawa@ap.t.u-tokyo.ac.jp

これらを総合して、最終的なラチェットを表すモデルとして、空間的に周期的な並進対称性をもち各ユニットセルでは空間反転対称性がやぶれているようなポテンシャル中の粒子系をとる。さらに粒子に空間方向のバイアスがないような外力を加え、エネルギーの散逸を導入する。このようなモデルをここでは「狭義のラチェット」と呼ぶことにする。

さてこのようなモデルで実際のラチェット系でみられたような回転方向の一方向への抑制というものは、粒子の一方向へのながれと見なすことができることに注意しよう。この現象は、外力の空間的なバイアスがないにも関わらず、ある方向への流れがでるという意味で一見非自明である。しかし、このような現象は対称性の議論から考えてみるととくに禁止されているようなものではない。1894 年に発表された Curie の原理によると、[2]「(自発的対称性の破れがないときに) 対称性の破れのある現象は系の対称性の破れを反映している。」のであるから、空間反転対称性と時間反転対称性が破られている今のモデルで一方向への粒子の流れが起きても良いのである。実際そのようなカレントが存在することが理論的、実験的にも確かめられている。

1.2　歴史的な発展

このようなラチェット系は、実際に存在するようなラチェット機構の物理的モデル化として出てきたのではない。狭義のラチェット系のそもそもの始まりは、筋肉の収縮のモデルとして導入されたことにある。[3, 4, 5, 6] 筋収縮は、筋肉中の actin の上を ATP の加水分解のエネルギーをつかって myosin が移動することによって起きるのであるが、そのときの actin の空間的な非対称周期構造と ATP の加水分解による方向性のないエネルギーで myosin が動くということに注目し、ラチェット的なモデルが提案された。その後、筋肉の一分子計測などの実験的な検証がおこなわれ、現状では単純なラチェットモデルではないという結果が得られているようであるが、[7] さらに高次の構造をもつ複雑なラチェット系である可能性も捨てきられてはいない。

その後、筋肉のモデルとしてはもちろん、ATP のエネルギーを方向性のない揺らぎだと見なすことで、方向性のない「揺らぎ」から、粒子の一方向への流れをうみだすという整流作用に注目した理論的な研究も行われている。また、ラチェット系をそのままマイクロマシン、ナノマシンの動力として応用しようというような研究も行われている。

一方、ラチェット系に対する熱力学的な議論も古くから行われている。このような熱力学的な議論を行う場合には、ラチェットのエネルギーの散逸先を熱浴にとる。こうしてバイアスのかかっていない外力から熱浴へのエネルギーの流れを作り出し、その途中でラチェットを動かすのである。このような熱力学的な議論でもっとも有名なのは、Feynman のテキストで行われた熱力学第二法則に関連した議論であろう。[8] そこでは、バイアスのない外力の源も、エネルギー散逸先 (低温熱浴) とはちがう別の温度 (高温) の熱浴としてとられ、一種の熱機関を作り出し第二法則と関連した議論が行われている。この問題は最近でもいろいろな場面で取り上げられ理論的な研究が行われている。[9, 10]

いままでのラチェットは古典的なマクロ系、あるいはせいぜい熱揺らぎが重要になるミクロ系までの話である。このようなラチェット系をどんどん小さくし、さらに低温にしていくと、量子的な効果が無視できなくなるであろう。このような状況でのラチェット系を「量子ラチェット」と呼ぶ。[11, 12, 13] 量子ラチェットに関する研究は始まったばかりであり、まだ十分な理解も

得られてはいないが、量子デバイスとしての可能性や、しいては量子機械などが実現されたときの、動力としての可能性がある。また、量子非平衡状態の熱力学的な理論研究 [14] の道具としても利用できるであろう。

このようなラチェットの話は理論ばかりではなく、実験的にもいろいろ調べられている。非対称周期ポテンシャルを基盤上のクリスマスツリー型電極で実現し、そのうえでの荷電コロイド粒子の輸送現象を観測したり、[15] 半導体ヘテロ構造で非対称周期ポテンシャルをつくり、量子トンネルが支配的な領域で対称な外力からトンネル電流をある方向へ流すなどの実験が行われている。[16, 17]

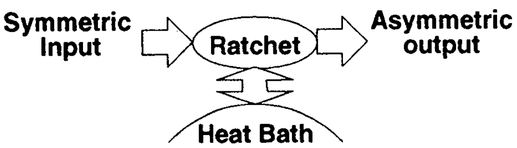


図 3: 広義のラチェットの模式図

また、ラチェットを対称性をもった外力から非対称性をうみだす機構として捉えれば、空間的に対称な入力から空間的に非対称な出力を産み出すだけではなく、時間的に対称な入力から時間的に非対称な出力を産み出すなどの別のタイプの現象も考えられる。このようなラチェットを広義のラチェットと呼ぼう。たとえば、文献 [18] で取り扱われているような系は広義のラチェット系と見なすことができるであろう。このようなものまでラチェットに含めるとすればさまざまなものがラチェット系として認識され、その基本的な性質や熱力学的性質を理解することは重要な問題になるであろう。

今後考えるべき課題などをまとめてあげておく。

- 古典ラチェット系における効率、熱力学的議論。またカレント生成の効率が良い条件、エネルギー論的に効率が良い条件の議論。
- 広義のラチェット系のバリエーション。
- 古典/量子ラチェットの実際上の応用、デバイスとしての応用など。

2 量子ラチェット

ここでは、講演者の仕事に関連して量子ラチェットに関する簡単な紹介を述べる。量子ラチェット系とは、前節でも述べたが量子力学的領域におけるラチェット系である。古典ラチェット系を量子領域で考えることにより、古典系ではみられなかったような性質や新たな量子デバイスとしての可能性を調べることができる。また、量子非平衡状態での熱力学的性質を調べることにも利用できる。

具体的なモデルの一例として次のような Hamiltonian で記述されるものを考えよう。

$$
\begin{aligned}
H(t) &= H_{sys}(t) + \epsilon H_{int} + H_B, \\
H_{sys}(t) &= \sum_n \left(|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|\right) + \sum_n \left(V_{n \bmod L} - F_n(t)\right)|n\rangle\langle n|, \\
H_{int} &= \epsilon H_I \otimes \xi, \\
H_B &= \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha \left(a_\alpha^\dagger a_\alpha + \frac{1}{2}\right)
\end{aligned}
$$

$H(t)$は全系のハミルトニアンであり、$H_{sys}(t)$は非対称周期ポテンシャル$V_{n \bmod L}$を持つラチェット系である。ここではタイトバインディングモデルの形でモデルを記述している。H_Bは調和振動子の集団として記述されている熱浴である。相互作用を

$$H_I = \sum_n \left(|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1| \right), \tag{1}$$

$$\xi = \sum_\alpha \left(a_\alpha + a_\alpha^\dagger \right) \tag{2}$$

ととる。外力として周期Tでポテンシャルが対称的にオンオフされるような物を考えることにする。式で書けば

$$F_n(t) = V_{n \bmod N} \Theta(T/2 - t \bmod T)$$

となる。Θはステップ関数である。具体的な計算では、熱浴のモードの分布のモデルとして、分布関数 $J(\omega) = \eta\omega \exp(-\lambda\omega)$ というモデルを取り、熱浴部分をトレースアウトしてラチェット系のみの密度行列のダイナミクスを計算する。[3]これはラチェット系の要素である非対称周期ポテンシャルとエネルギーの散逸、さらにバイアスのかかっていない外力という三つを取り込んだ量子力学的モデルになっている。もちろん、これ以外の形の量子ラチェットモデルも存在する。

これから数値的に計算すると、古典的な状況で期待されるカレントとは違った性質のカレントが発生することがわかる。また、例えば熱浴を取り除くとカレントが平均として存在しなくなることや、対称ポテンシャルでカレントが存在しなくなることなどいろいろなことがわかる。さらに、熱揺らぎのないような絶対零度でもカレントが存在すること、カレントの発生には量子力学的な共鳴が関係していることなどがわかる。(図 2 参照)

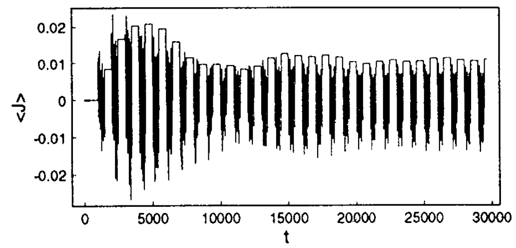
3　まとめ

ラチェット系というのはデバイス的な見方をすれば対称な入力から非対称な出力を産み出すようなエネルギーの散逸をともなう系であり、動力学的見方をすれば、外場による非平衡化と熱浴による熱平衡化の競合状態である種の機能を発揮する系である。また、熱力学的な見方からは外場によるエネルギーの注入と熱浴に対するエネルギーの散逸の狭間で仕事(カレントの生成)をするような系であるとみることもできる。このような様々な側面を狭義のラチェット系でさえ見せているために、単純に単なるカレントを発生させる系以上の深さをもっていると思われる。今後のラチェット系に関する研究がさらに進展し、広がりを見せることを期待しつつこの報告を締めくくりたい。

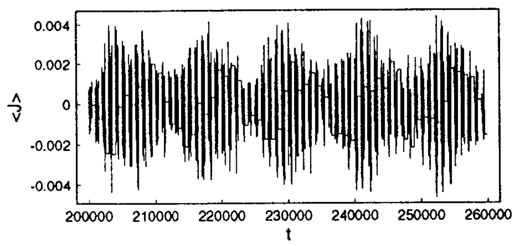
謝辞

ラチェットの研究に対し共同研究者の菊池誠氏(阪大サイバー)、多々良源氏(阪大理)、松川宏氏(阪大理)、齊藤圭司氏(東大工)などの人たちに普段から議論をしてもらっています。あらためて感謝します。

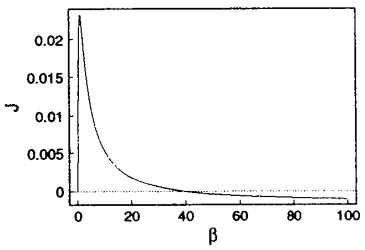
[3]計算の具体的な方法は [19, 20] などを参照してください。



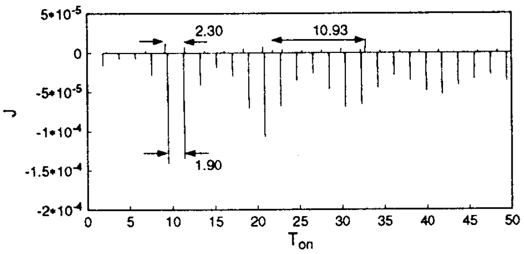
(a) 熱浴つきの場合のカレントの時系列、正のカレントが平均として残ることが分かる。



(b) 熱浴無しのカレントの時系列、平均としてカレントが存在しないことが分かる。



(c) 逆温度とカレント



(d) 単純化したラチェットモデルにおける周期に対するカレントの振る舞い、量子力学的な共鳴がみられる。数字はモデルから計算される共鳴周期

図 4: 量子ラチェット系での結果

参考文献

[1] P. Reimann, “Brownian motors: noisy transport far from equilibrium”, cond-mat/0010237 (2000).

[2] P. M. P. Curie, “Sur la symétrie dans les phénomenes physiques, symétrie d'un champ électrique et d'un champ hagnétique”, J. de Phys. III. **3** (1894), 393.

[3] R. D. Vale and F. Oosawa, “Protein motors and maxwell's demons: does mechanochemical transduction involve a thermal ratchet?”, Adv. Biophys. **26** (1990), 97.

[4] M. O. Magnasco, “Forced Thermal Ratchets”, Phys. Rev. Lett. **71** (1993), 1477.

[5] R. D. Astumian and M. Bier, “Fluctuation Driven Ratchets: Molecular Motors”, Phys. Rev. Lett. **72** (1994), 1766.

[6] F. Jülicher, A. Ajdari and J. Prost, “Modeling molecular motors”, Rev. Mod. Phys. **69** (1997), 1269.

[7] K. Svoboda, P. P. Mitra and S. M. Block, “Fluctuation analysis of motor protein movement and single enzyme kinetics”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **94** (1994), 11782.

[8] R. P. Feynman, R. B. Leighton and M. Sands, "The Feynman Lectures on Physics Vol. I", (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1996)

[9] K. Sekimoto, "Energetics of thermal ratchet models", J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997), 1234.

[10] H. Sagakuchi, "A Langevin Simulation for the Feynman Ratchet Model", J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998), 709.

[11] S. Yukawa, M. Kikuchi, G. Tatara and H. Matsukawa, "Quantum Ratchets", J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997), 2953.

[12] P. Reimann, M. Grifoni and P. Hänggi, "Quantum Ratchets", Phys. Rev. Lett. **79** (1997), 10.

[13] G. Tatara, M. Kikuchi, S. Yukawa and H. Matsukawa, "Dissipation Enhanced Asymmetric Transport in Quantum Ratchets", J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998), 1090.

[14] S. Yukawa: "A quantum analogue of the Jarzynski equality", J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000), 2367.

[15] J. Rousselet *et al.*, "Directonal motion of brownian particles induced by a periodic asymmetric potential", Nature **370** (1994), 446.

[16] H. Linke *et al.*, "A quantum dot ratchet: Experimet and theory", Europhys. Lett. **44** (1998), 341.

[17] H. Linke *et al.*, "Experimental Tunneling Ratchets", Science **286** (1999), 2314.

[18] T. Hondou and Y. Sawada, "Dynamical Behavior of a Dissipative Particle in a Periodic POtential Subject to Chaotic Noise: Retrieval of Chaotic Determinism with Broken Parity", Phys. Rev. Lett. **75** (1995), 3269.

[19] 湯川諭,「量子非平衡定常ダイナミクスに対する計算物理学的アプローチ」第43回物性若手夏の学校テキスト

[20] S. Yukawa, "Nonequilibirum Flow in Classical and Quantum Dynamical Systems", PhD Thesis, Osaka University (1999).