称号及び氏名　　博士(理学)　中出　捷

学位授与の日付　2022 年 3 月 31 日

論　文　名　One-Dimensional Quantum Transport Theory in Terms of the Complex Spectral Analysis of Liouvillian
(リウビリアンの複素固有値問題に基づく一次元量子輸送理論)

論文審査委員　主査　神吉　一樹
副査　田中　智
副査　溝口　幸司
副査　会沢　成彦

論文要旨

One-Dimensional Quantum Transport Theory in Terms of the Complex Spectral Analysis of Liouvillian（リウビリアンの複素固有値問題に基づく一次元量子輸送理論）

大阪府立大学大学院 理学系研究科
物理科学専攻
中出 捷

一次元量子系における非平衡量子輸送現象を，微視的な力学原理であるリウビル-フォン・ノイマン方程式の複素スペクトル表示に基づいて研究した成果を報告する.

不可逆な現象はこの世界のあらゆる場所に溢れているが，それらを可逆な力学原理から説明することは，現在でも物理学の基本的問題として議論されている．不可逆な現象を取り扱う従来の方法として，Boltzmann 方程式に代表される運動論的方程式による解析がある．しかし，これらの運動論的方程式は粗視化を含む現象論的な近似を経て導出されたものであり，Boltzmann 以降，不可逆性が現れる根拠が，巨視的な自由度や情報を処理できない人間の不完全さにあるという主張がなされてきた．それに対して，Ilya Prigogine による散逸構造理論では，高度で複雑な構造が物理学の法則に従いながら自発的に創出されるためには，熱力学第二法則，すなわち不可逆性の存在が必要条件として不可欠であり，人間の不完全さが原因で生まれるものではないとした.

そして，運動論に対する微視的力学原理からの基礎づけが，近年，Tomio Petrosky, Ilya Prigogine らによって開発されたリウビリアンの複素スペクトル表示による非平衡統計力学の新しい定式化によって与えられた．この方法では連続スペクトルを持つ環境系も含めた無限自由度の全系の密度演算子の時間発展を司るリウビリアンの固有値問題を非エルミート空間に拡張して，その複素固有値問題として考える．この定式化により，不可逆性が現れるために本質的である共鳴特異性の寄与を明確にしながら，可逆な力学原理に無矛盾に不可逆な現象を定量的に分析することができる.

リウビリアンの複素固有値問題による定式化は，様々な物理系に対して適用され，大きな成果を上げてきた．本研究は，この理論を用いて一次元量子分子鎖における非平衡輸送現象を微視的視点から解析したものである．リウビリアンの複素固有値の虚部から，拡散係数などの輸送係数を計算することができる．一次元系における不可逆な輸送特性

については, その数学的な単純さ故に高度に複雑な事象を解析的に論じる可能性を与えてくれている．さらに，低次元であることに起因する特異性から以下に論じるように，一次元特有な興味ある現象が見られる．また，近年の実験技術の進展により低次元系の輸送現象の観測が可能になり, 単なる数学的な興味とされていた一次元系の物理的な振る舞いの分析の重要性も増している．

本研究では，一次元量子系の具体例として，Davydov の一次元タンパク質分子鎖モデルを扱った．このモデルは，一次元量子分子鎖上で熱浴としてのフォノンと弱結合した励起子伝播を扱うモデルである．タンパク質上の励起子伝播は実験で観測されており，それもこのモデルを選んだ理由の一つである． このモデルは励起子に対する一次元タイトバインディングモデルに熱浴としてのフォノン系が弱結合した単純なモデルとなっているため，このモデルの解析により，生体系に限らず物性論で論じられている一次元量子系の輸送現象のユニバーサルな性質も明らかになる．

本論文の構成と各章の内容の要約を以下にまとめる．本論文は 5 章からなる．

第 1 章はイントロダクションであり，本研究の背景，主要な成果，構成について述べる．

第 2 章では，一次元量子分子鎖モデルとして Davydov モデルを導入する．フォノン系は熱平衡状態であるとして，全系の密度演算子が従う力学原理であるリウビル-フォンノイマン方程式から出発して不可逆な Boltzmann 方程式を導出する．そのために，リウビリアンの複素固有値問題を考える. リウビル空間におけるウィグナー基底を用いた表現形式を導入し， Brillouin-Wigner-Feshbach の射影演算子法を使って，有効リウビリアンを導出する. 有効リウビリアンの固有値は全系のリウビリアンの固有値に一致する．弱結合の状況においては，この有効リウビリアンが，流れ項と衝突項からなる Boltzmann の衝突演算子に一致する．本論文では，リウビリアンの複素固有値問題から導出された Boltzmann の衝突演算子を解析することで，励起子の輸送現象を解析していく．

第 3 章では, 流体力学的領域において局所平衡下で出現する一次元量子系に特有な輸送モードについて述べる. 励起子は衝突演算子で表されるフォノンとの共鳴条件を満たす状態のみに遷移先が制限されるので，一次元量子系では，その一次元性のために励起子の運動量が互いに素な部分空間に分離する．そのため，衝突演算子の固有値は各部分空間毎に存在し，固有値から定義される励起子伝播の輸送係数は運動量依存性を持つ．その結果，輸送現象に位相混合による効果が現れる．この位相混合の効果はよく知られているように各自由度の分散公式が非線形なことによって引き起こされる．実際，我々

の取り扱う系においても励起子の分散公式は運動量依存性に関して非線形性が仮定されている．

励起子の空間的不均一性を表す波数 k がゼロの場合の衝突演算子の固有値問題を解くことで，励起子の運動量分布の時間発展が解析できる．固有値問題を解いた結果，純虚数の値を持つ離散的な固有値スペクトラムが得られた．また，ゼロ固有値と非ゼロの固有値の間に縮退がないことがわかった. 波数 k は連続変数でいくらでも小さな値をとることができるため，流体力学的領域を満たす十分小さな波数 k では，運動量の緩和時間が，空間分布の不均一性が均される時間に比べて充分に短く，局所平衡が成立する．

次に，波数 k が非ゼロの場合，すなわち，空間的な不均一性が存在する場合の衝突演算子の固有値問題を考えた．ただし，波数 k が十分小さく，時間対称性を破る衝突項に対し，時間対称な流れ項が十分小さく摂動とみなせる流体力学的領域を考えた．摂動の一次の効果までを取り入れると，局所平衡下で，励起子のウィグナー分布関数が線形波動方程式に従う流体力学的音波が現れる．このことは量子系であるにも関わらず，確率振幅ではなく確率そのものが線形波動方程式に従うという意味で驚くべきことである．そして一次元の線形波動方程式に従うということは, 波束は形を変えず安定的に伝播していく．ただし，輸送係数である流体力学的音波の伝播速度（音速）が運動量依存性を持つため，非線形性に起因した位相混合の効果で波束は拡がっていく．

流体力学的な音波は, 散逸がないときに最も安定化するフォノンの音波とは決定的に異なり，時間対称性を破る衝突項が本質的となる状況，すなわち散逸が本質的となる状況で出現する．このことは，通常，系を不安定化させるはずの散逸効果のおかげで，安定な音波的伝播が出現するという逆説的な結果を意味している．

ここまでの結果は先行研究として既に得られていた結果である．本論文では，散逸に基づいた安定化では, その音波を完全に安定させることは原理的に不可能であることに着目し. 摂動の二次の効果に起因した拡散現象まで考慮した励起子の輸送モードを論じる．拡散効果まで考慮した輸送モードは移流拡散方程式に従い，音波は徐々に減衰していく．また，本論文では，輸送係数である音速と拡散係数の解析を行い，音速については楕円テータ関数を用いた解析関数として表現することに成功している. これによって, 音速の運動量依存性，温度依存性が明らかになった．

さらに，本研究の新たな寄与は，一次元量子系における流体力学的音波の出現メカニズムが, 古典ガス系でよく知られている従来の流体力学的音波の出現メカニズムとは全く異なる新しいメカニズムであることを明らかにしたことである．古典ガス系では，衝突演算子のゼロ固有値の縮退が解けることによって音波モードが現れるが, 一次元量子

分子鎖の衝突演算子には，古典ガス系の意味でのゼロ固有値の縮退は存在しない．それにも関わらず，一次元量子系で音波が現れるのは，一次元性のため運動量空間が互いに素な部分空間に分かれた結果，各部分空間内で運動量の反転対称性が破れているからである．二次元以上の系では，全ての運動量が結合して熱平衡状態に達するため，運動量空間内で運動量の反転対称性は保たれ，音波は現れない．

第 4 章では，一次元量子輸送現象に現れるいくつもの非自明で特異な性質を示す．まず，この系の輸送現象では，励起子の変位の分散の時間微分で定義した現象論的な拡散係数が時間に線形に増大し，長時間極限で発散してしまうという意味で異常拡散が起きていることを示す．異常拡散の原因は，輸送係数である音速が運動量依存性を持つため，拡散効果に加えて位相混合の効果によって波束が拡がるためである．輸送係数である音速と拡散係数が運動量に依存しない通常の移流拡散方程式の場合であれば，現象論的拡散係数は移流拡散方程式の輸送係数としての拡散係数に一致する．

初期分布に最小不確定波束を与えた場合は，現象論的な拡散係数は時間線形な位相混合項と定数項である拡散項だけを持つ．拡散項は必ず正の値を持ち，現象論的な拡散係数は常に正の値をとっている．しかし，初期分布を一般化した場合には現象論的拡散係数には，最小波束の場合にはなかった新たな定数項が現れ，拡散効果と位相混合効果が競合している状況では，この新たな定数項が大きな負の値を持ち，現象論的な拡散係数が負の値となって，見かけ上の負の拡散が起こる場合があることを示す．ただし，見かけ上の負の拡散が起こる状況でも H 定理は成立しており，この系で熱力学第二法則が破れていないことを示した．すなわち．ミクロな理論から導出される拡散係数は熱力学第二法則と矛盾することなく，常に正であるが，現象論的に導かれた拡散係数は位相混合という非線形性の効果により，負の値も取り得ることになり，見かけ上熱力学第二法則に矛盾した振る舞いをしているに過ぎないのである．

第 5 章は以上で述べた結果を整理しまとめた．

List of publications

1. Anomalous diffusion of a quantum Brownian particle in a one-dimensional molecular chain, S. Nakade, K. Kanki, S. Tanaka, and T. Petrosky, Physical Review E, **102**, 032137-1--17 (2020).

2. Anomalous diffusion with an apparently negative diffusion coefficient in a one-dimensional quantum molecular chain model, S. Nakade, K. Kanki, S. Tanaka, and T. Petrosky, Symmetry, **13**(5), 506-1--11 (2021).

学位論文審査結果の要旨

学位論文題目　One-Dimensional Quantum Transport Theory in Terms of the Complex Spectral Analysis of Liouvillian

（リウビリアンの複素固有値問題に基づく一次元量子輸送理論）

提出者氏名　中出 捷

非平衡統計物理学の目的は、時間反転対称な微視的力学法則から巨視的な系に現れる不可逆な時間発展がどのように生じるのかを明らかにし、不可逆な時間発展を特徴づける輸送係数を導くことである。本学位論文ではこの立場から、力学の基本原理に基づいたリウビリアンの複素固有値解析の方法を用いて１次元量子系の輸送現象を分析した結果を報告している。

１次元量子系としては、粒子が音響フォノンと結合したDavydov模型を取り扱った。リウビリアンの複素固有値解析においては、射影演算子法を用いて導出される有効リウビリアンが､流れ項と衝突項からなるボルツマンの衝突演算子と一致する。運動量分布が先に熱平衡に達し、長い波長をもつ空間的不均一性が残っている流体力学領域においては、衝突項に対して流れ項を摂動として取り扱うことにより、流体力学モードが得られる。運動量分布の緩和過程においては、１次元性のために運動量状態が互いに素な部分集合に分離し、各部分集合の中でのみ状態間の遷移が起こる。そのため、衝突演算子の固有値は運動量の各部分集合ごとに存在し、固有値が与える輸送係数は運動量依存性をもつ。これは、散逸過程を現象論ではなく力学の原理に基づいて微視的に扱ってはじめて明らかになったことであり、量子１次元系において普遍的な現象である。

流体力学領域におけるリウビリアンの固有値の摂動計算を進めることにより、先行研究で見出されていた音波モードには減衰が加わり、減衰を特徴付ける量として拡散係数が定義できることを示した。さらに、この系では音波の伝播と拡散過程が共存し、音速が運動量依存性をもつことから、実空間における分布の幅の拡がりに拡散と位相混合という２つの機構があり、分布の幅が拡がる速さで定義される現象論的な拡散係数が時間に比例して発散していくことを発見した。さらに、拡散効果と位相混合効果の競合により、現象論的な拡散係数が負になる場合があることも見出した。これらの一見異常な拡散現象が現れる場合においても、真の拡散係数は常に正の定数であり､H定理が成立し､熱力学第二法則は破れていないことも示した。

以上のように、本研究は、非平衡輸送現象の力学原理に基づく定式化を行い、１次元量子系における新奇な現象を予言したものであり、意義のある研究である。本委員会は本論文を学位論文として十分な内容を有しているものと判断した。

委員長　神吉 一樹

田中 智

溝口 幸司

会沢 成彦