

称号及び氏名 博士（理学） 橋本 一成

学位授与の日付 平成 27 年 3 月 31 日

論文名 **Whole Structure of the Complex Spectrum of the Liouvillian for a One-dimensional Quantum Lorentz Gas and Transport Process**

（1次元量子ローレンツ気体に関するリウビリアンの複素スペクトルの全構造と非平衡輸送過程）

論文審査委員  
主査 田中 智  
副査 大西 利和  
副査 会沢 成彦  
副査 神吉 一樹

## 論文要旨

理学系研究科物理科学専攻  
物性理論グループ  
橋本 一成

本論文は全6章から成り、無限自由度からなるガス系の単純化されたモデルの一つである1次元量子ローレンツ気体における非平衡輸送過程を、微視的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について報告する。

近年、物質科学における試料作製技術や、時間に依存した物理現象の測定技術の長足の進歩にともなって、平衡から遠く離れ線形理論が破綻してしまう非平衡な状況にある物理系の示す輸送現象を精確に解析できる理論的枠組の構築が強く求められている。従来、無限自由度からなるハミルトニアン系の非平衡輸送現象は、ボルツマン方程式に代表される運動論的方程式に基づいて解析されてきた。しかしながら、これら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、その導出の際に用いられた近似の妥当性の範囲が明らかではない。そのことが、運動論的方程式を平衡から遠く離れた状況まで拡張する際に重大な困難となっている。この困難を克服する為には、現象論的なアプ

ローチではなく、物理学の第一原理から出発した微視的アプローチが不可欠である。

運動論に対する微視的力学原理からのひとつの基礎づけが、近年 Ilya Prigogine らが開発したリウビル演算子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。この理論では、運動論における密度行列の時間発展を司る衝突演算子が、リウビル方程式に対して **Brillouin-Wigner-Feshbach** の方法を適用することで得られる有効リウビリアンと同じものであることが示されている。熱力学的な物理系においては、この有効リウビリアンが共鳴特異性により非エルミート演算子となり、複素固有値を持つことができ、その固有値の虚部から、拡散係数などの輸送係数を計算することが出来る。この複素固有値に対応する状態は、ハミルトニアン系において共鳴状態と呼ばれているものと、数学的には同等なものである。

この理論はその定式化以来、ローレンツ気体、比較的濃密気体、ポーラロン系、熱浴と結合した分子鎖系など広範な物理系に対して適用され、大きな成果を挙げてきた。しかしながら、これら先行研究でリウビル演算子の固有値解析が行われたのは、粒子分布の空間的不均一性とその平均自由行程に比べて十分なだらかな所謂流体力学領域など、依然として平衡状態に近い領域に限られてきた。すなわち、この微視的理論がその真価を発揮する非流体力学領域まで含めた状況で、リウビル演算子の複素スペクトルの全貌が明らかにされた例は皆無であった。

本研究の主眼は、無限自由度を持つ具体的な物理系に関して、このリウビル演算子の複素スペクトルの構造の全貌を明らかにし、その系における非平衡輸送過程を、このスペクトル構造に基づいて議論することである。その具体的な物理系として、本研究では弱結合した1次元量子ローレンツ気体を扱った。

ローレンツ気体は、空間的に一様に分布した重い粒子系と、それらと相互作用しながら動きまわる1つの軽い粒子（試験粒子）からなるガス系の単純化されたモデルであり、もともとは金属中に一様に分布したイオンによる散乱を受ける電子の伝導を考察する目的で、H. A. ローレンツによって導入された。近年では電離ガス中でイオンによって散乱される電子の輸送現象の解析に用いられるほか、非縮退半導体中で不純物による散乱を受ける電子の伝導現象に対して良く適用できることが知られている。

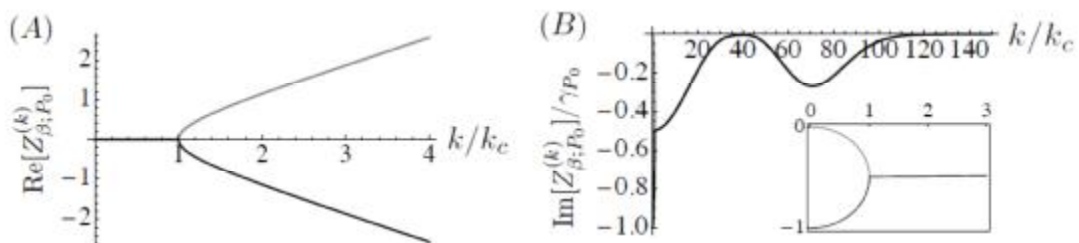


図1 リウビル演算子の複素スペクトルの(A)実部及び(B)虚部。  $k_c$  は平均自由行程の逆数の大きさの波数。

本論文で報告する主要な成果は以下のとおりである。

1. 試験粒子の分布の空間的不均一性を測るパラメータである波数  $\mathbf{k}$  がその平均自由行程の逆数より十分大きい非流体力学領域において、リウビル演算子の複素スペクトルを解析的に評価した。その結果、この領域においてスペクトルが試験粒子と重い粒子との間の相互作用ポテンシャルの形という系の微視的構造を反映した豊富な構造を持つ事を明らかにした (図 1 B)。
2. 他方、 $\mathbf{k}$  が平均自由行程の逆数程度の大きさまでの領域では、ボルツマンの衝突演算子の固有値がリウビル演算子の固有値の良い近似を与える。従って、この領域でのスペクトルは、系の微視的な詳細に陽に依らず、運動量緩和率など少数のマクロなパラメータで特徴付けられた構造を持つ。このように、我々の得たスペクトルは、 $\mathbf{k}$  が比較的小さい領域における巨視的な運動論的記述と、 $\mathbf{k}$  が大きい非流体力学領域における微視的な力学的記述を統一する解になっている。
3.  $\mathbf{k}$  がちょうど平均自由行程の逆数の値をとる点において、リウビル演算子のスペクトルが **exceptional point** (例外点) と呼ばれる非エルミート演算子特有の縮退点を持つ (図 1  $\mathbf{k}=\mathbf{k}_c$ )。この点では、通常の縮退点とは異なり、固有値だけでなく固有ベクトルも縮退している。その結果この点では衝突演算子は対角化できず、代わりに **Jordan** ブロック構造を持つ。なお、例外点は  $\mathbf{k}=\mathbf{0}$  における衝突演算子の離散的な純虚数固有値が、流れ項によって結び付けられた結果現れる。このことから、例外点は多くの物理系のリウビル演算子の固有値に現れる普遍的な構造であることが示唆される。また、この例外点を取り扱う方法として、**Jordan** ブロックを例外点以外の点に拡張した「拡張擬固有ベクトル」による表示を開発した。
4. 上述した諸々のスペクトル構造が、系の輸送過程に与える効果を論じるため、試験粒子に関する **Wigner** 分布関数の時間発展を、リウビル=フォン・ノイマン方程式のスペクトル展開に基づいて議論した。その結果以下の知見が得られた **i**) 非流体力学的状況においては、スペクトルの豊富な構造を反映して、異なる微視的空間スケールに対応するモードの重ね合わせによる「うなり現象」や、初期条件の情報の一部がいつまでも消えない非マルコフ効果などの、新奇な輸送現象が現れることを発見した。また、**ii**) リウビル演算子の複素スペクトルが  $\mathbf{k}$  空間に例外点を持つ場合には、**Wigner** 分布関数の実空間での時間発展が、時間に関する 1 階と 2 階微分の項をもつ波動方程式と拡散方程式を組み合わせた形の電信方程式に従うこと、並びに長時間極限において漸近的に拡散方程式で表される時間発展に移行することがわかった。

この系のように無限自由度を持ち、尚且つ拡散現象を伴って平衡状態へと緩和してゆくハミルトニアン系に関してリウビル演算子の複素スペクトルの全貌が明らかにされた例は、これが初めてである。本研究で得られた知見は、今後のリウビル演算子の複素スペクトル表示に基づく非平衡統計力学の研究のモデルケースとして重要な役割を果たすことが期待される。

本論文の構成と各章の内容の要約を以下にまとめる。

第1章では本研究への導入として、**Prigogine** ら **Brussels-Austin** 学派によってリウビル演算子の複素スペクトル表示の理論が開発されるに至る歴史的な経緯をまとめた後、本研究の主要な成果とその位置づけを議論する。

第2章では、リウビル演算子の複素スペクトル表示の理論を、弱結合した1次元量子ローレンツ気体に対して適用し、この系に関する衝突演算子を導出する。この衝突演算子は、それ自身の固有値に依存しており、従ってその固有値問題は非線形になっている。これ以降の議論では、この非線形固有値問題を任意の波数  $k$  に対して解くことが主題となる。

第3章では、前章で導出した衝突演算子を、試験粒子の波数  $k$  が比較的小さい状況に限って **Boltzmann** の衝突演算子で近似し、その固有値問題の解について議論する。この系では、1次元性により **Boltzmann** の衝突演算子が2次正方行列で表すことができ、その固有値問題の解析解が得られる。このスペクトルは  $k$  が平均自由行程より小さい状況では純虚数値をとり、大きい状況では複素数値をとる。また、その境目となる点が **exceptional point** (例外点) と呼ばれる非エルミート演算子特有の縮退点になっている事が示される。ここで得られた **Boltzmann** の衝突演算子の固有ベクトルを新たな基底にとり、リウビル演算子のスペクトルと **Boltzmann** の衝突演算子のスペクトルの差を評価した結果、波数  $k$  が平均自由行程の逆数よりもある程度大きい領域に至るまで、後者が前者の良い近似になっている事が示される。ただし、例外点近傍では **Boltzmann** の衝突演算子の固有ベクトルに規格化定数が発散する特異性があるため、ここではその領域の議論を次章に保留する。

第4章では、例外点近傍におけるリウビル演算子のスペクトルと **Boltzmann** の衝突演算子の関係が論じられる。上述のように、例外点近傍では **Boltzmann** の衝突演算子の固有ベクトルには規格化定数が発散する特異性があるため、これを基底として用いるのは適当ではない。この章では、例外点近傍での発散を取り除く新しい基底系として拡張擬固有ベクトルを導入し、その新たな表示を用いてスペクトルの誤差を評価する。その結果、やはりこの領域においても、**Boltzmann** の衝突演算子のスペクトルが、リウビル演算子のスペクトルの良い近似を与えることが示される。

第5章では、波数  $k$  が平均自由行程の逆数より遥かに大きい非流体力学的状況が論じられる。この領域では、もはやリウビル演算子のスペクトルを **Boltzmann** の衝突演算子のスペクトルで近似することは出来ない。この章では、両者の誤差を **Boltzmann** の衝突演算子の固有ベクトルを基底に取った摂動論で評価することで、弱結合の範囲でのリウビル演算子のスペクトルを解析的に導出する。このスペクトルが、粒子間の相互作用ポテンシャルという系の微視的構造に陽に依存した構造を持つことが示される。

第6章では、これまでに得られたリウビル演算子のスペクトル構造に基づいて、試験粒子に関する **Wigner** 分布関数の実空間での時間発展が論じられる。

## 学位論文審査結果の要旨

非平衡現象を力学法則から理解することは、時間の矢の問題と深く関連し、近年の時間・空間分解能の向上した実験結果を解析するための基礎として、さらに平衡から遠く離れた系での構造の理解につながっていく重要な問題である。この問題に対して、リウビル=フォン・ノイマン演算子（リウビリアン）の複素スペクトル表示に基づく非平衡統計力学の理論的枠組みがあり、統一的視点を与えているが、具体的な系についてリウビリアンの複素スペクトルの全貌が明らかにされた例は皆無であった。本論文では、1次元量子ローレンツ気体について、リウビリアンの複素固有値問題を弱結合の範囲内で完全に解いた結果、およびそのことから明らかになった物理現象を論じている。

リウビリアンの複素固有値問題を解く過程で、現象論的なボルツマン方程式の適用限界を明らかにし、ボルツマンの衝突演算子の固有状態を基にして、試験粒子の空間的不均一性を表す波数  $k$  の全領域での複素固有値問題の解を得た。波数  $k$  が大きい非流体力学的状況においては、系の微視的構造に依存したスペクトルの構造を反映して、異なる微視的空間スケールに対応するモードの重ね合わせによる「うなり現象」や、初期条件の情報の一部がいつまでも消えない非マルコフ効果などの、新奇な輸送現象が現れることを発見した。また、 $k$  がちょうど平均自由行程の逆数の値をとる点が、例外点と呼ばれる非エルミート演算子特有の縮退点になっていることを見出した。さらに、ウィグナー分布関数の時間発展が、波動方程式と拡散方程式を組み合わせた形をもつ電信方程式に従うこと、並びに長時間極限において漸近的に拡散方程式で表される時間発展に移行することを示した。合わせて、例外点近傍での固有ベクトルの成分が発散的振る舞いをする困難を解決するために、擬固有ベクトルを用いた新しい表現を導入した。

以上のように、リウビリアンの複素スペクトルの構造から豊かな物理現象が現れることを示した本研究は、独創的で卓越したものであり、高く評価できる。また、本研究で得られた知見は、非平衡統計力学の研究のモデルケースとして重要な役割を果たすことが期待される。

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して判断した。