



TITLE:

Conduction and diffusion of Fermi particles on lattices -from the standpoint of nonequilibrium statistical mechanics-(Abstract_要旨)

AUTHOR(S):

Yamaga, Kazuki

CITATION:

Yamaga, Kazuki. Conduction and diffusion of Fermi particles on lattices -from the standpoint of nonequilibrium statistical mechanics-. 京都大学, 2021, 博士(工学)

ISSUE DATE:

2021-03-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k23193>

RIGHT:

京都大学	博士（工学）	氏名	山家一樹
論文題目	Conduction and diffusion of Fermi particles on lattices -from the standpoint of nonequilibrium statistical mechanics- （格子上の Fermi 粒子の伝導と拡散 - 非平衡統計力学の観点から - ）		
（論文内容の要旨）			
<p>本論文は 格子系における量子非平衡状態を一貫して数理物理的に扱ったものであり、一般論と具体的な系の解析から構成されている。具体例として特に焦点が挙げられ調べられているのは、種々のポテンシャル下を運動する相互作用しない Fermi 粒子多体系である。第一章から第三章までが基本概念の導入にあてられ、第四章から第八章までが本論となっている。</p> <p>第一章は序論として本論文の研究対象である量子非平衡状態の概観がなされ、その後論文全体の構成が説明されている。</p> <p>第二章では、量子論の一般的枠組みが紹介されている。特に、本論文における無限系の取り扱いに備え、作用素代数 (C^*環) を用いた量子論の定式化が説明され、また散逸のある場合を含めたマルコフ的なダイナミクスの一般的記述 (Lindblad 方程式) が導入されている。</p> <p>第三章では、第二章の代数的定式化の下で Fermi 粒子多体系の厳密な記述が紹介されている。まず Fermi 粒子系をあらゆる場のなす代数系として CAR(Canonical Anticommutation Relation)系が導入され、その後、全ての相関関数の記述が二点相関関数に帰着される状態である quasi-free state の概念が説明される。また、一体ポテンシャル下を相互作用せずに運動する場合のダイナミクスの記述がなされた後、E. B. Davies により導入された散逸のあるダイナミクスが紹介されている。</p> <p>第四章では、非平衡状態を研究する手法の一つである久保公式によるアプローチについて、その問題点と解決手法が記述されている。久保公式を無限系上の一定電場に適用する際には、物理的由来のはっきりしない断熱因子を導入して、積分を収束させる必要がある。これはこの系が定常状態を持たないこととも関係している。この断熱因子の問題と定常状態の不存在の問題を解決すべく、本章では、1次元格子上の相互作用しない Fermi 粒子系に散逸のある（第三章で導入された Davies による）ダイナミクスを取り入れ、その上で一定電場により駆動される状況が研究されている。その結果として、この状況では、時間無限大極限で得られる非平衡定常状態が存在することが証明され、また、その状態における電流の計算において、散逸の強さに対応した項として断熱因子が自然に現れることが厳密に示されている。</p> <p>第五章では、左右に異なる温度の熱浴（粒子溜）がついた有限長の一次元格子系における定常状態について、電流の大きさの長さ依存性が議論されている。ここでは熱浴の効果は Markov 的な散逸項として取り入れられており、ダイナミクスは Lindblad 方程式により記述されている。このモデルは第四章とは異なり、Landauer 的アプローチに関するものと見なす</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	山家 一樹
<p>ことができる。主結果の一つとして、このモデルにおいて一体ポテンシャルの形によらず広く適用可能である新しい電流公式が求められている。その後、この公式が様々な一体ポテンシャルに適用され、コンダクタンスのサンプル長依存性が詳細に議論されている。具体的には、（ポテンシャルがない）自由粒子系や周期ポテンシャルの場合は、コンダクタンスがサンプル長に依らないというバリスティック伝導が正当化され、また不純物を含んだ系を模したランダムポテンシャルの場合には、コンダクタンスがサンプル長に対して指数的に減衰すること、また準結晶を模したようなポテンシャルの場合には冪的に減衰することが厳密に示されている。さらに、この電流公式を拡張し、各格子点に環境との接触による（干渉項を喪失させるような）散逸の効果をとり入れたダイナミクスに適用することが行われており、この場合にはオームの法則のようにコンダクタンスがサンプル長と反比例することが証明されている。</p> <p>第六章では、散逸が非常に強い状況で現れる普遍的なダイナミクスが論じられている。具体的には、粒子の配位を頻繁に測定するような散逸が取り扱われている。この場合には、時間スケールを適当に調整すると、ポテンシャルや相互作用に依らず古典粒子の拡散方程式が得られることが証明されている。</p> <p>第七章では、非平衡定常状態のモデルに依らない熱力学的性質について議論が行われている。ここでは一般の一次元格子系について、左右に温度やケミカルポテンシャルの異なる熱浴（粒子溜）がついたダイナミクスにより時間無限大の極限で達成されるような定常状態が散乱理論的手法により扱われている。平衡状態からはサイクリックな作業を用いて仕事を取り出すことはできないという熱力学の第2法則が存在するが、非平衡状態ではこの法則は成り立たない。本章では、この取り出せる量（を体積で割った密度）には上限があることが、その上限の具体的表式と共に示されている。本結果は、熱力学の第二法則の非平衡定常状態への拡張とも見なすことができるものである。</p> <p>第八章には、全体のまとめと今後の展望が記されている。</p>			

(論文審査の結果の要旨) 本論文は量子系における非平衡状態に関する数学的に厳密な種々の解析と結果から構成されている。平衡状態は Gibbs 状態 (KMS 状態) で記述され、その性質もよく調べられているが、非平衡状態はそのような記述は知られておらず、一般論の展開と具体例の解析の両面から研究を行うことが有益である。ここでは、特に (有限及び無限) 格子上の相互作用しない Fermi 粒子系に焦点をあてながら、初期条件や、散逸を含んだダイナミクスの効果により長時間極限で実現される定常状態について様々な手法により調べられている。主な内容と成果は以下の通りである。

(1) 定常電流に対する久保公式に現れる断熱因子の物理的由来について明らかにした。無限次元系上に一定電場のみをかけた状況では、定常状態は存在せず、それと関連して電気伝導度を調べる久保公式はそのままでは収束しない。これに対し、温度平衡状態へと導くような散逸を入れた系に一定電場をかけた状況を解析し、定常状態が存在することと、散逸の強さに応じた断熱因子が自然に現れることを証明した。

(2) 種々の一体ポテンシャルにおけるコンダクタンスのサンプル長依存性について調べた。左右に熱浴を配した有限長次元格子系について Lindblad 方程式を用いて定式化し、その定常流を表す新たな公式を発見した。また、その公式を種々のポテンシャル系に適用し、自由粒子系と周期ポテンシャル系についてはコンダクタンスがサンプル長に依らないこと、またランダムポテンシャル系については指数関数的に減衰することなどを示した。さらに、各格子点に非干渉化をもたらす散逸を導入すると、自由粒子系においてはコンダクタンスがサンプル長に対して反比例するオームの法則が成り立つことを導いた。

(3) 強い散逸下では、拡散方程式が普遍的に現れることを証明した。粒子の配位を頻繁に測定するような散逸の下では、適切に時間スケールを変換すると拡散方程式による記述が現れることを示した。これは量子情報における量子 Zeno 効果のある種の応用ともなっている。

(4) 非平衡定常状態について熱力学の第二法則の拡張を行った。次元無限格子系において、初期条件として左右に異なる温度状態を配した場合に長時間極限で達成される定常状態について、サイクリックな過程により取り出せる仕事を体積で割ったもの (仕事密度) に上限が存在することを示し、その上限を陽な形で求めた。

以上のように、本論文は格子系における相互作用しない Fermi 粒子系の解析を軸としつつ、種々の異なる側面から量子非平衡定常状態の研究を数理物理学的に行ったものである。これまでに得られている非平衡状態に関する厳密な知見は少なく、本論文の結果の重要性は高い。よって本論文は博士 (工学) の学位論文として価値あるものと認める。また、令和 3 年 2 月 24 日に論文内容とそれに関する試問を行い、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。