

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 28 日現在

機関番号：24403

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540411

研究課題名(和文) リウビル演算子の複素固有値問題からみた低次元量子系における輸送現象の理論

研究課題名(英文) Complex spectral analysis on transport phenomena in low dimensional quantum systems

研究代表者

神吉 一樹 (Kanki, Kazuki)

大阪府立大学・理学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：10264821

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：環境のなかの量子系の振る舞いは、やがて量子系のもっていたエネルギーが環境へむかって流れて失われる散逸をともなうものとなる。散逸量子系の振る舞いを現象論的方程式ではなく、力学法則に基づく方法であるリウビル演算子の複素スペクトル解析の理論を適用して分析した。その結果、低次元系特有の保存量が存在することにより新しい輸送形態が発現することを見出したほか、時間発展が単純な減衰から振動しながら減衰する振る舞いへと変化する現象が散逸系に普遍的に存在することを発見した。

研究成果の概要(英文)：A quantum system in an environment dissipate its energy to the environment. We studied behaviors of various dissipative systems by applying complex spectral analysis of the Liouville operator, which describes behaviors of the systems on the basis of the fundamental laws of nature. We found exotic transport phenomena in low dimensional systems as a result of there being invariants of motion. We also found it a commonplace phenomena in dissipative systems that a damping behavior changes over to a damped oscillation.

研究分野：物性理論

キーワード：非平衡統計力学 リウビル方程式 輸送現象 拡散 非エルミート縮退

1. 研究開始当初の背景

熱浴と接している非平衡物理系の動的性質はリウビル=フォン・ノイマン演算子(リウビリアン)のスペクトルの性質で決まる。力学の基本原則に基づく時間発展の生成演算子であるリウビリアンは、ハミルトニアンと同様にヒルベルト空間の中ではエルミート演算子である。しかしそれにもかかわらず、時間の対称性を破る散逸現象は、ハミルトニアンの共鳴状態に対応するリウビリアンの共鳴状態の時間発展として力学的に厳密に記述されることが、本研究の研究協力者(海外共同研究者)の T. Petrosky と I. Prigogine によって明らかにされていた。そのことが可能なのは、共鳴状態がヒルベルト空間に属さないために、その状態が時間の対称性の破れに対応した複素固有値を数学的に矛盾なく持つことができるからである。

リウビリアンの複素固有値問題においては、ハミルトニアン系で自己エネルギーに対応する部分が、現象論における分子運動論的方程式の衝突演算子を拡張したものになっている。そして、リウビリアンのスペクトルは、時間対称性を破るこの拡張された衝突演算子のスペクトルと一致する。この衝突演算子はエントロピー生成を伴う不可逆過程の運動の生成演算子である。エントロピー生成のメカニズムは、熱平衡状態から十分に離れた状況における非平衡構造の出現や構造の在り方に本質的な役割を演じており、衝突演算子のスペクトルの多様な可能性を探ることは、非平衡現象を理解するために特に重要である。リウビリアンの固有値問題が解かれた例はそれまでにほとんどなかったが、我々は1次元量子ローレンツ気体や1次元ポーラロン模型において、リウビリアンの複素固有値を得ることに成功していた。特に、1次元ポーラロン模型において、リウビリアンの複素スペクトルにフラクタル構造が現れるなどの興味深い結果を得ていたが、それからの物理現象としての帰結は明らかにならなかった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、低次元量子系における衝突演算子のスペクトルに関する多様性を探り、その物理的役割を論ずることであった。これまでに得られていた結果を基にさらに詳細に物理的な帰結の考察を行うとともに、熱平衡状態への緩和過程ばかりではなく、平衡から十分に離れた状態や非平衡定常状態の成立する過程を徹底的に理解することを目指した。

3. 研究の方法

リウビリアンの複素固有値問題の立場から非平衡量子物理系における緩和・輸送現象を論じた。そのために、ミクロなモデルに基づいて、具体的なリウビリアンを出発点として注目する部分自由度に対する有効リウビリ

アンである衝突演算子を導出し、その固有値問題を解析的あるいは数値的に解いた。その解を用いて、固有関数展開により密度行列の時間発展を求め、その性質を詳細に分析した。

4. 研究成果

(1) 先行研究で、ダビドフ模型に基づいて、分子鎖における音響フォノン・モードと結合した振動励起子に対するリウビル演算子の複素スペクトルが、励起子のエネルギー・バンド幅に対するフォノンのバンド幅の比により決まる無次元パラメータが有理数であるか無理数であるかによって全く異なった様相を示し、そのことからホフスタッターの蝶に類似したフラクタルを含む構造が現れることを発見していた。今回の研究ではさらに、励起子とフォノンの結合の仕方によってスペクトルが全く異なったものになり、この違いは、緩和過程における指数減衰とベキ減衰という違いにつながることを明らかにした。指数減衰を示す系においては流体力学領域が存在し、そこでは流体力学的量子音波と量子拡散の現象が起こることを見だし、特にフォノン系の熱雑音により波束の運動が安定化されるという反直感的な帰結を導いた。また、量子音波が存在する場合には、速度自己相関関数が時間に依存しない定数成分をもち、久保公式で定義される拡散係数が発散することを見出した。これは、1次元性により散乱過程が制限されるために、運動量の緩和が互いに分離した部分空間で起こる結果として理解できる。しかし、この場合でも、各部分空間に限れば有限の拡散係数が存在し、拡散過程を記述することができることを示した。

(2) 一様に分布した重い粒子の集団から散乱される軽い試験粒子の量子力学的運動を考える1次元量子ローレンツ気体の問題では、質量比が零の極限(完全ローレンツ気体)で弱結合の場合に、任意の波数の空間変調がある空間における衝突演算子の固有値問題を厳密に解いた。その過程で、現象論的なボルツマン方程式の解を基にして、そこからのずれを摂動として取り扱い、あわせてボルツマン方程式の適用範囲を明らかにした。衝突演算子の固有値問題に対する厳密な解を用いることにより、ボルツマン方程式の適用できないような大きな波数をもつ空間的変調がある非流体力学的な状況において、自由粒子的に伝搬するモードが存在し、モードの重ね合わせによりうなりが起こることなど特異な現象が現れることを明らかにした。また、波数が大きな極限では減衰率はゼロに漸近して、自由粒子の振る舞いに近づいていくことを示した。

(3) 1次元完全量子ローレンツ気体におけるリウビリアンの複素固有値問題に対する弱結合の場合の完全な解を得ていたが、その解

を再検討した。その結果、ボルツマン方程式が有効な、空間的変調の長さのスケールが平均自由行程と同程度かそれより長いような領域において、「例外点」(exceptional point)と呼ばれるリウビリアンが対角化できず Jordan ブロックの構造をもつ点が存在することを見出した。空間的不均一性を表す波数を変化させたとき、例外点を境にしてリウビリアンの固有値は純虚数から実部をもつ複素数へと変わり、系の振る舞いは指数関数減衰から振動減衰へと移り変わる。例外点に近づくにつれて、固有ベクトルの規格化因子が発散的に大きくなるため取り扱いが困難になるが、我々は Jordan 標準系を用いた表示を拡張し、例外点で有限で連続な基底を用いた新しい解析的な取り扱い方法を開発した。そして、ローレンツ気体の時間発展を詳細に分析した結果、例外点を境にして、系の時間発展における振る舞いが質的に変化し、そのことから分布の動きに2つの異なる機構があることが分かった。すなわち、例外点の波数より小さい波数をもつ成分は拡散的振る舞いを示すが、運動量の緩和が完了するまでの時間領域において、運動量分布に不均衡があるために分布が移動するのに対して、例がいての波数より大きい波数においてはリウビリアンの固有値は実部をもち、波動方程式に従う波束が動くのと同じ理由で分布が移動する。

(4) 1次元量子ローレンツ気体に対するボルツマン方程式は電信方程式と等価であることを見出したほか、1次元ポーラロン系においてもローレンツ気体と同様の例外点を含むリウビリアンのスペクトル構造を発見し、電信方程式が例外点を含む系の時間発展をある時間領域において実効的に記述する方程式として普遍的であることが分かった。電信方程式の初期値問題に対する解析解から、1次元量子ローレンツ気体の時間発展を Wigner 関数で見たときに、次のような性質をもつことを明らかにした。分布は、初期に与えられた速度で動きながら指数関数的に減衰していく成分と、拡散的に広がっていく成分よりなり、時間発展していく過程で前者が後者へと転換していく。拡散成分は、中心が平均自由行程の距離だけ移動した後、そこを中心に広がっていくという通常の拡散方程式で記述される振る舞いを示す。さらに、1次元ポーラロン系の場合には、相互作用の性質によっては、リウビリアンのゼロ固有値が縮退し、その結果流体力学領域に例外点が見ることがあることが分かった。

(5) 電信方程式は波動方程式と拡散方程式を折衷した形をしているが、電信方程式と等価な1次元量子ローレンツ気体に対するボルツマン方程式は、拡散方程式とは異なり、分布は初期値位置から初期速度に時間を掛けた位置までしか移動しないという意味で、因

果律を満たしている。しかし、リウビル演算子の正しい固有値を用いることにより、この因果律が破れていることを示した。従って、現象論的なボルツマン方程式の解は力学と矛盾しており、この方程式の示す因果律は見せかけのものである。また、正しい力学の解は相互作用ポテンシャルの非局所性の効果を含んでいることを明らかにした。

(6) 例外点では、固有値ばかりでなく固有関数も一致するという、非エルミート演算子の固有値問題特有の現象が起こっている。リウビリアンはヒルベルト空間の中ではエルミート演算子であるが、関数空間を拡張することにより複素固有値をもてるようになる。また、射影演算子を用いて導かれる部分系における有効リウビリアンは一般に非エルミート演算子であり、例外点の出現はリウビリアンの固有値問題に偏在する現象であることを見出した。さらに、系のパラメータを変化させたとき、例外点で純虚数の2つの固有値が一致した後、固有値の虚部は一致したまま実部が正負対称に現れる現象は、リウビリアン・ダイナミクスに内在する PT 対称性の破れとして理解できることを明らかにした。特に、ボルツマン型の方程式においては、実数の衝突項に対して、虚数の流れ項が PT 対称性を破るはたらきをすることを示した。また、1次元ポーラロン系においては、パラメータの選び方により、PT 対称性のある場合とない場合の両方が実現する。このとき、PT 対称性のあるなしにより系の時間発展に次のような顕著な違いが現れることを明らかにした。PT 対称性のある場合には、例外点が出現し、長時間領域での有効方程式は電信方程式である。一方、PT 対称性のない場合には、例外点は現れず、長時間の流体力学領域での有効方程式はドリフト拡散方程式である。ドリフト拡散方程式に従う系は、(1)のダビドフ模型において流体力学的量子音波が存在する場合に対応し、ウィグナー関数は各運動量において一定速度で移動しながら、分布の幅が広がっていく拡散的振る舞いを示す。

(7) 非熱的輻射場と結合した分子系においても、リウビリアンの例外点が見られ、指数関数減衰から振動減衰へと移り変わる振る舞いが現れることを発見した。この系においては、場との結合が弱いとき、分子の量子準位の占有確率はマルコフ型のマスター方程式に従う。分子が一定温度の熱浴と接している場合には、遷移確率は詳細つりあいの条件を満たすために、常に指数関数減衰をすることを示すことができる。温度の異なる複数の熱浴と接している場合を調べたが、例外点は現れなかった。これらのことから、マスター方程式において例外点が見られるための必要条件是、詳細つりあいの破れが強いことであることが分かった。また、マスター方程式に現れる遷移確率を行列要素とする実行列を相

似変換により PT 対称性をもつような複素行列に変換できることを示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 7 件)

1) K. Hashimoto, K. Kanki, H. Hayakawa and T. Petrosky, Non-divergent representation of a non-Hermitian operator near the exceptional point with application to a quantum Lorentz gas, Progress of Theoretical and Experimental Physics, 2015, 023A02-1--22 (2015). 査読有 DOI: 10.1093/ptep/ptu183

〔学会発表〕(計 53 件)

- 1) 神吉一樹、リウビリアン・ダイナミクスから導かれる PT 対称性とその破れ、日本物理学会第 70 回年次大会、2015 年 03 月 21 日、早稲田大学 (東京都新宿区)
- 2) 神吉一樹、1 次元量子ローレンツ気体におけるボルツマン方程式の解と因果律、日本物理学会 2014 年秋季大会、2014 年 9 月 9 日、中部大学 (愛知県春日井市)
- 3) 神吉一樹、リウビル演算子の複素固有値問題と輸送現象の中に現れる Jordan ブロック構造、日本物理学会第 69 回年次大会、2014 年 03 月 30 日、東海大学 (神奈川県平塚市)
- 4) 神吉一樹、3 つの熱浴とつながった分子鎖における非平衡定常熱流の制御：熱トランジスター、日本物理学会 2013 年秋季大会、2013 年 09 月 26 日、徳島大学 (徳島県徳島市)
- 5) K. Kanki, Quantum hydrodynamic modes with Hofstadter ' s butterfly-like fractal spectrum of the Liouville-von Neumann operator for molecular chains, The 25th International Conference on Statistical Physics, 2013 年 07 月 23 日, Seoul (Korea)
- 6) 神吉一樹、分子鎖上の粒子とフォノン場の共鳴による緩和とバルタン星人型かつフラクタル型の輸送係数、日本物理学会第 68 回年次大会、2013 年 3 月 29 日、広島大学 (広島県東広島市)
- 7) 神吉一樹、一次元ポーラロン系における流体力学的音波と拡散、日本物理学会 2012 年秋季大会、2012 年 9 月 18 日、横浜国立大学 (神奈川県横浜市)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

神吉 一樹 (KANKI, Kazuki)

大阪府立大学・大学院理学系研究科・准教授

研究者番号：10264821

(2) 研究分担者

田中 智 (TANAKA, Satoshi)

大阪府立大学・大学院理学系研究科・教授

研究者番号：80236588

(3) 研究協力者

トミオ ペトロスキー (PETROSKY, Tomio)

テキサス大学・複雑量子系センター・上級
研究員