

論文審査の結果の要旨

氏名 波多野恭弘

非平衡状態における物質の特徴を体系的に記述しようとする試みは、非平衡熱力学や非平衡統計力学として研究されてきた。前者では、流れと外場の関係を変分原理で特徴づけること、後者では、外場に対する流れの応答係数を計算する枠組を与えることを主眼としてきた。それらによって、少なくとも平衡に近い非平衡状態に関しては、十分に体系化されている、と考えられてきた。

しかし、例えば、ずり応力などの非平衡力による液体の凝固点移動を決める物理量は何か、という素朴な疑問に対して、これらの理論は答えることができない。平衡に近い非平衡定常状態に限定しても、状態量の関係に対する理解が不十分であり、普遍的なもの個別的なものとの分離がなされていないのである。さらに、非平衡定常状態を越えて、より多彩な非平衡現象を対象とするときには、量の関係を整理することが第1になされるべきことであり、その関係を踏まえて、ミクロな立場から現象の機構を明らかにしていくことが、今後、ますます重要になってくるだろう。このような状況を踏まえ、波多野恭弘氏は博士論文で、非平衡定常状態における量の関係を普遍的に記述する枠組である定常状態熱力学をミクロな動力学モデルに基づいて論じている。

本論文はIII部12章130ページからなる。第I部では、こうした問題意識のもとで、非平衡熱力学や非平衡統計力学の発展を批判的にふりかえりながら、定常状態熱力学の位置付けが述べられる。現象論としての定常状態熱力学は複数の研究者によって提案されているが、本論文では、大野らによって提案された枠組が参照され、その妥当性がミクロな動力学モデルから問題とされる。定常状態熱力学の概略と先行研究が紹介され、現在までの到達点と限界が述べられる。

第II部では、周期ポテンシャル中のブラウン粒子が、一定外場で駆動される場合が考察される。ブラウン粒子の集まりを対象にすると、外場による輸送という非平衡定常状態が実現する。この状態では、熱容量、ポテンシャル操作に伴う力、輸送係数という三つの特徴的な量を有するので、非平衡定常状態における量の普遍的な関係が議論できるもっとも簡単な題材になる。もし、外場がなければ、熱容量とポテンシャル変化にともなう力だけが問題となり、エントロピーなどの熱力学関数によって統合的に記述され、種々の熱力学関係式が導出されることは、平衡熱力学の範囲でよく知られている。そこで、問題の焦点は、エントロピーを非平衡定常状態に拡張し、三つの特徴的な量を統合的に記述することになる。

この際、熱力学第2法則を非平衡定常状態間の遷移に適用できるように拡張することによって、非平衡エントロピーが定義される。具体的には、全発熱や全仕事から定常状態を維持するために必要な発熱である維持発熱をひいた過剰発熱や過剰仕事に対して、拡張されたケルビンの原理が成り立てば、熱力学と類似の方法により非平衡エントロピーが定義される。

本論文のもっとも重要な寄与は、拡張された熱力学第2法則を導く維持発熱がミクロモデルから構成できることを示した点にある。そして、その結果として、同時に非平衡エン

トロピーの表現が導かれ、例えば、輸送係数の温度依存性が非平衡エントロピーの流れ依存性と関係するという非平衡に拡張されたマクスエル関係式などが得られる。

一般的な非平衡定常状態間遷移に関する第2法則の存在を具体的に示したのは、本論文の研究が初めてなしとげた成果であり、これにより、いままで形式的な提案にとどまっていた定常状態熱力学という枠組を具体的に検討できるようになった。実際、簡単な動力学モデルで得られた定常状態熱力学の構成法をより現実的な非平衡系に適用していくことも可能になる。

そのひとつの試みとして、第III部において、熱伝導が考察される。熱伝導を、ミクロな動力学モデルに基づいて考察するとき、熱浴モデルのデザインや相関の長時間振舞の異常性という、熱伝導固有の性質を明確に整理しなければならない。第III部前半では、これらについて従来の誤解を指摘し、正しい理解の仕方が示される。これを踏まえて、第II部で得られた知見が応用される。

以上のように、波多野氏はその論文において、熱力学の非平衡定常状態への拡張をミクロな動力学にもとづいて構築する方法論を与えた。この方法論が幅広い非平衡定常状態系に適用できるのかどうか、そして、諸量の関係についてどれくらい明確な予言ができるのかどうか、については今後明らかにされるべきである。また、定常状態熱力学に対応する統計力学は、従来の非平衡統計力学を含んだ形になっているはずだが、その関係がどうなっていて、新しい部分として何が加わるのか、というのも興味ある問題である。さらには、非平衡定常状態を越えた方法論の探索も重要な課題であろう。このように、本論文は、非平衡系の一般的な研究に対して、新しい視点を明確な形で持ち込んだものであり、将来、大きく発展する可能性を秘めた研究の第一歩として位置付けることができる。

なお、本論文の内容は、第II部の前段階の試みと第III部の前半がそれぞれ論文として出版されており、第II部の骨格部分が投稿中である。また、数値実験や具体的な応用について、投稿準備がすすめられている。

以上の点から本論文は博士(学術)の学位を与えるのにふさわしい内容であると審査委員会は全員一致で判定した。