

論文の内容の要旨

論文題目： New universal relations in small nonequilibrium systems

和 訳： 小さい非平衡系における新しい普遍的関係式

氏 名： 林 久美子

1. 背景

粒子が外力によって駆動される系（多体系及び1体系）は、系に熱浴をつけることで定常状態を実現する。本論文は、熱力学・統計力学・輸送理論が確立していない線形応答領域を外れる非平衡定常状態（外力が大きい平衡状態から遠い状態）において、新しい普遍的関係式を見つけることを目指した試行錯誤のまとめである。

平衡状態とその周りの線形応答領域では、熱力学・統計力学・輸送理論の三位一体の精巧な絡み合いが多く、普遍的関係式で表現され、私たちの物理的な物の見方を豊かにしてきた。一方、線形応答理論が破綻する強い非平衡性を示す状態では、熱力学・統計力学・輸送理論が未発達であるために普遍的関係式はほとんど知られていない。そこで、著者はこのような平衡から遠い状態でも成立する新しい普遍的関係式を（在るならば）探したいと思う。（注釈：著者が本論文で、普遍的関係式を探することに固執する理由は関係式自体を発見して喜びたいというよりむしろ、新しい関係式を見つける過程で新しい熱力学・統計力学・輸送理論の様子を垣間みるためである。）

新しい普遍的関係式探索に取り組むにあたって、非平衡系の実験（Figs. 1, 2, 3）には非常に刺激を受けた。著者が注目する典型的な実験系は、例えば、溶媒中を浮遊するビーズ（コロイド粒子）である。このような系は”小さい系（small systems）”と呼ばれ（長さのスケール $\sim 10^{-6}$ m、力のスケール $\sim 10^{-12}$ N、時間スケール $\sim 10^{-3}$ sec）、観察及び操作技術の向上により近年新しい実験対象として注目されている。ビーズは原子や分子よりもはるかに大きいため、溶媒中を浮遊するビーズの振る舞いはそれ自体が熱力学や統計力学の対象となる。一方、ビーズは原子や分子よりもはるかに大きい溶媒中でブラウン運動をみせる程度には小さい。こういうサイズのビーズにはそれ自体に直接外力をかける事が可能であり、ブラウン運動（ゆらぎ）がこの非平衡性により大きく変化する。このようなビーズから成る多体系ももちろん非平衡効果が大きい。故に、平衡状態との定性的・定量的相違を”小さい非平衡系”で調べることが面白いのである。本論文ではこのような小さい非平衡系をモデル化し、数値計算実験や摂動計算などの理論解析によって、非平衡現象を調べていく。

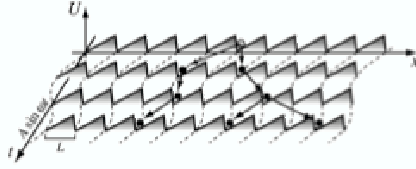


FIG. 1: 光学ポテンシャルを利用しポテンシャル場を作り、ビーズ（コロイド粒子）の一次元運動を制御する。時間に依存したポテンシャル場を作ることで非平衡状態が実現 [T. Harada et al., Phys. Rev. E 69, 031113 (2004)]。

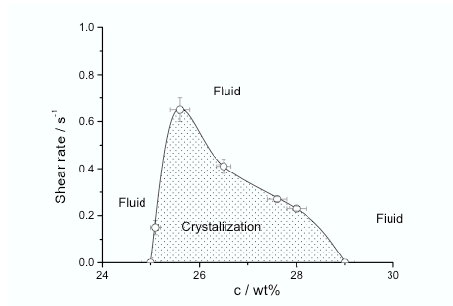


FIG. 2: コロイド粒子の集団で多体系を作る。非平衡条件下における、相図を示す。縦軸（非平衡性の強さ）、横軸（密度） [P. Holmqvist et al., cond-mat/0508693 (2005)]。

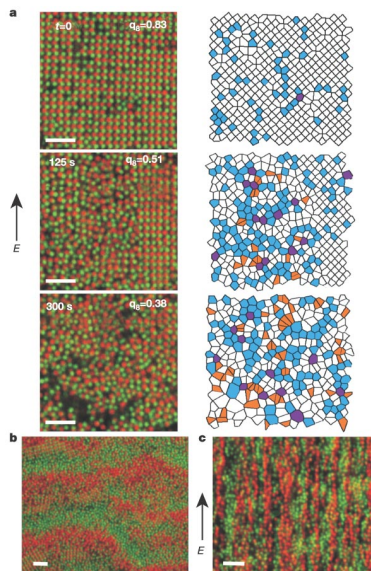


FIG. 3: 反対の電荷を持つ二種類のコロイド粒子から成る多体系に電場をかけた様子。外場に駆動されるコロイド多体系の実験も始まっている [M. E. Leunissen et al., Nature 437, 235 (2005)]。

2. 内容

本論文で、試行錯誤により、著者は非平衡定常状態でありえるかもしれない世界観を作り上げてきた。その概要を Fig. 4 に記す。

本論文で著者は大きく分けて、確率過程モデルとハミルトン系（確率過程モデルよりミクロなモデル）という階層の違う二つの系を研究対象として意識している。非平衡確率過程モデルでは、粒子が外力により駆動されるモデルを扱い、外力に垂直な方向と外力に平行な方向についてそれぞれの統計性質を調べた。外力に垂直な方向では熱力学揺らぎの理論（Chapter I）と揺動散逸関係式の拡張（Chapter II）を新しい理論として提案し、拡張された揺らぎの理論と揺動散逸関係式の相互関係を理解するため、平衡状態とその線形応答領域の熱力学・統計力学・輸送理論を復習した（Chapter III）。

外力に平行な方向の統計性質については、小さい非平衡系の典型的モデルである非平衡ランジュバン系（1体系）を研究した（Chapter IVとChapter VI）。この系の研究で著者は非平衡定常状態で新しい概念である「有効温度」と「力の分解」を導入し、これらの有用性を多体系においても検討した（それぞれ、Chapter VとChapter VII）。最後に、Chapter I-VIIで発見された新しい非平衡現象を将来的に確率過程よりミクロなモデルであるハミルトン系で研究するために、その土台作りとして力学系特有の量を数値計算で測定するための新しい測定方法の開発に取り組んだ（Chapter VIII）。

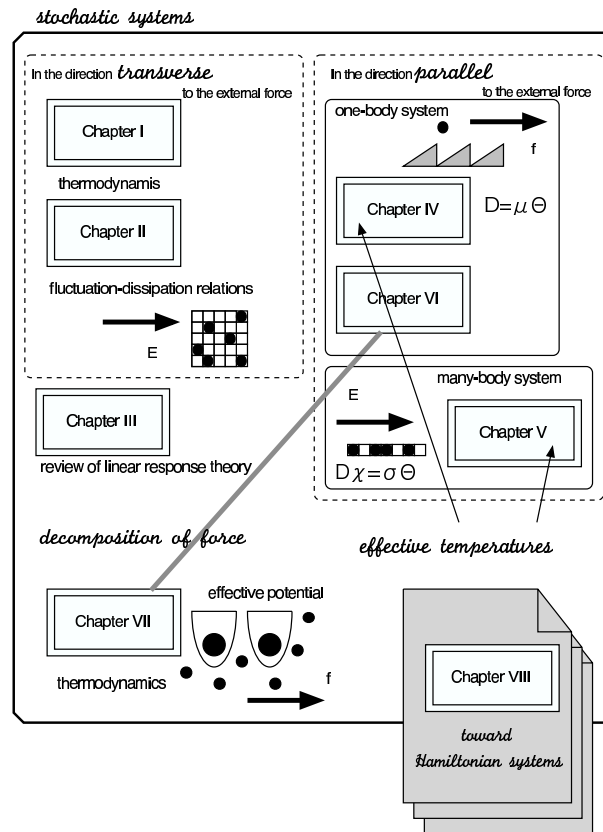


FIG. 4: 本論文の各 Chapter の相互関係。

外力に垂直な方向の統計性質：具体的には、Chapter Iの研究では、二次元の非平衡確率過程モデルで、外力に垂直な方向に諸物理量を数値計算実験で測定し、これらの値が平衡状態のものとは大きく異なるにも関わらず平衡状態と類似した形式で自由エネルギーを構成することに成功した。この章の大事な結果は、非平衡定常状態の化学ポテンシャルの新しい定義を与えたことと、自由エネルギーから得られる新しいゆらぎの式を発見したことである。Chapter IIでは、前章の新しいゆらぎの式の見つけ方を手掛かりにして、同モデルにおいて輸送理論の拡張を議論している。線形応答領域を外れた状態においても（注：外力に平行な方向には線形応答関係式は成立していない状況で、という意味）、外力に垂直な方向に粗視化された密度に関して線形応答関係式（揺動散逸関係式）の成立を数値的に確認した。非平衡確率過程モデルの遷移確率は詳細釣り合いを満たさない。揺動散逸関係式の成立は詳細釣り合いと密接に関係するので、粗視化された密度に関する線形応答関係式の成立は、マクロなゆらぎの詳細釣り合いが存在することを示唆している。非平衡定常状態の外力に垂直な方向において、ミクロに詳細釣り合いという良い性質が破れていてもマクロな量のゆらぎに関しては良い性質が回復するのではない。

外力に平行な方向の統計性質：外力に平行な方向の統計性質を調べるために、小さい非平衡系の典型的モデルである「外力に駆動されるブラウン粒子が周期ポテンシャル中を運動する」という系を対象に研究を行った。拡散係数と微分易動度の比が環境の温度に一致することが、1体系のアインシュタイン関係式（揺動散逸関係式の一つ）であるが、外力が強くなるとこの比は環境の温度に一致しない。このように平衡から遠く離れた状態で、外力に平行な方向においては関係式が破れるのが特徴である。Chapter IVでは系のゆっくりした動きを摂動計算で取り出し、揺動散逸関係の破れを表す拡散係数と微分易動度の比が粗視化された粒子の位置の分布関数に現れる量であることを示した。つまり、拡散係数と微分易動度の比は粗視化された世界の温度の役割を果たす。故に、その比を有効温度と呼ぶ。ところで、この結果（ランジュバン系の粗視化）はフォッカー・プランク方程式の摂動計算によって得られたが、Chapter VIでは同じ系の粗視化を「周期ポテンシャルが粒子に及ぼす力の有限時間平均を分解する」という一風変わった視点から研究してみた。（注：ここで言う力の分解とは、典型的には、溶媒中を浮遊するコロイド粒子の溶媒分子たちから受ける力が、自由度消去や時間平均で散逸力+熱ノイズに分解されるような現象をさす。）ブラウン粒子は、周期ポテンシャルというデコボコと衝突しながら外力に駆動されて進む。非平衡定常状態では、この周期ポテンシャルの及ぼす力の有限時間平均は、新しく発見された力の分解条件によって「散逸力+ノイズ+駆動力」に分解されることが分かった。この分解を利用すれば、フォッカー・プランク方程式を利用した摂動法からでなくランジュバン方程式を直接粗視化することができる。Chapter VIの研究は新しい粗視化の方法を提案しただけではなく、新しい力の分解条件を利用して、拡散係数と易動度の新しい普遍的不等式 [Phys. Rev. E 71, 020102(R) (2005)] 及びランジュバン系のエネルギー散逸を揺動散逸関係の破れで表現する Harada-Sasa equality [Phys. Rev. Lett. 95, 130602 (2005)] の導出へと広がっていった。

展望：最後に今後の展望を含め、Chapter VIIのモチベーションについて触れる。著者は、非平衡定常状態の研究が他の分野に広がっていく事が重要だと思っている。複雑ではあるが、「小さい非平衡系」には生体内の分子機械系が含まれる。分子機械系はビーズ（コロイド粒子）と違って非常に自由度が多いのが特徴である。平衡統計力学で磁性体が演習問題であったのと同様に非平衡統計力学においても分子機械系を演習問題として扱うことが出来れば面白いだろう。アクチンフィラメントの上を歩くミオシンは中川・小松 [J. Phys. Soc. Jpn. 74, 1653 (2005)] 等によって多体ランジュバン系でモデル化されている。Chapter VIIで著者はシンプルな非平衡ランジュバン多体系で非平衡定常状態の自由度消去と有効相互作用ポテンシャルの構築の問題を研究した。分子機械系の粗視化モデルを作ること（注：ラチェット系より良いモデルを目指す）はまだまだ先の話だが、Chapter VIIの理論に改良を重ねて非平衡状態でもっと使える理論を作っていきたい。