

氏名	やま おか ひで たか 山 岡 英 孝
学位(専攻分野)	博 士 (情 報 学)
学位記番号	情 博 第 159 号
学位授与の日付	平成 17 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当
研究科・専攻	情 報 学 研 究 科 数 理 工 学 専 攻
学位論文題目	Studies on stratified reduction of quantum and of classical many-body systems (量子及び古典多体系の層化簡約化に関する研究)
論文調査委員	(主 査) 教 授 岩 井 敏 洋 教 授 宗 像 豊 哲 教 授 中 村 佳 正

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は多体系の重心系(配位空間という)を回転群の作用によって層化し、各層上で古典および量子力学系を構成し、かつ主層の境界での古典および量子力学系の振舞いに興味をもって研究したもので、5章から成っている。簡単にいうと、多体系を単に分子と呼ぶとき、直線状分子と非直線分子では自由度の違いから数学的には別個に研究する必要があるのだが、本論文は実際にそのような研究を行った上で、非直線状分子の形状が直線状に近づいたときの振舞いをさらに研究したものである。

第1章は序論であり、研究の動機、目的、続く各章の概要を述べている。

第2章では、多体系の量子力学を取り扱っている。配位空間を層化したとき、主層は非直線的な分子の配位からなり、その次の層は直線的な分子の配位からなることをまず説明し、次に回転群に対してピーター・ワイルの定理を利用して、配位空間上の波動関数を一般フーリエ展開し、波動関数の空間が同変関数の空間に直和分解できることを導いている。この分解と主層が主バンドルをなすことを利用して、具体的に非直線分子に対する運動エネルギー作用素を、配位空間の回転群による商空間である形状空間上で局所座標を用いて導いている。また、その作用素は、主層の形状空間の境界付近で特異性を示すのであるが、申請者は波動関数の境界付近での振舞いを考慮して、運動エネルギー積分が作用素の特異性にもかかわらず発散しないことを、特に3体系に対して具体的に証明している。また、主層の境界をなす層での微分幾何学的考察から、直線分子に対する運動エネルギー作用素を、上記の関数空間の分解と波動関数の同変性を利用して巧みに導いている。

第3章では、多体系の古典力学を取扱っている。配位空間を層化し、各層ごとに変分原理を用いてラグランジュおよびハミルトンの運動方程式を導いている。この際、主層が主バンドルとなることおよび主層上に接続が定義されることを巧みに利用して、接または余接バンドルにおいて適切な局所座標系を選ぶことにより、力学系が回転対称性を持つ場合に簡約化を実行しやすくしている。簡約化された力学系は、ラグランジュ形式でもハミルトン形式でも、主層の形状空間上の接または余接バンドルと随伴または余随伴バンドルとの直和バンドル上で定義されることを示している。主層の境界をなす層においても、やはり変分原理と簡約化法でラグランジュおよびハミルトンの運動方程式を導いている。ただし、この場合には運動方程式には拘束条件が付加される。この結果、直線状および非直線状分子の運動方程式がラグランジュ形式およびハミルトン形式で統一的に導かれたことになる。特に3体系に対して、非直線分子に対して導いた運動方程式が特別な場合には直線分子の運動方程式に帰着することを示している。

第4章では、再び多体系の古典力学を取り扱っている。第3章では、層化力学系を取り扱った結果、直線分子は直線分子の状態を運動し、非直線分子は直線状にはならないという制約があった。しかし、直線、非直線のどちらの形状も運動の間に取りうる可能性がある。平衡の状態で直線状であるような分子が振動をおこすと、直ちに非直線状になり得るので、配位空間の主層と境界層を往来する運動が起こることになる。このような運動を考察したのが本章である。多体系の全角運動量がゼロの場合の運動を振動運動と呼ぶ。本章ではまず、振動運動を一般的に取り扱った後、微小振動をラグランジュ形式お

よびハミルトン形式の双方で論じている。特に3体直線分子の微小振動を微分幾何学的に厳密に論じ、直線分子と非直線分子とは独立な振動モードの個数が異なることの幾何学的理由を明らかにしている。また、微小振動の摂動と周期解の存在に関するモーザーの定理を適用し、3体系でも特別な場合には摂動後も周期解のあるものは生き残り、その結果、摂動微小振動において長時間の経過後には配位空間での分子の回転が引き起こされることを証明している。

第5章は結論で、本論文のまとめと、今後の課題について述べている。

論文審査の結果の要旨

本論文は、多体系の量子および古典力学における変換群論的研究の有効性を示したもので、特に、配位空間を回転群の作用で層化した上で、各層ごとの古典および量子力学系の構成と、さらに主層の境界での古典および量子力学系の振舞いの考察は従来の力学系研究にはなかったもので、今後実際上の問題の考察におおいに貢献が期待できる。

多体系の量子および古典力学に幾何学的なアプローチが有効なことは、すでに1980年代に明らかになっていたのだが、多体系が回転群の作用に関して特異な配位をとる場合の考察は、主バンドルの理論が適用できないという理由で除外されていた。しかし、2000年代になって、特異配位を含めた研究が、変換群論を活用して進展しはじめた。多体系の古典および量子力学の研究では具体的な座標表示にたよるものが多い中で、本論文は、変換群論の立場から大域的、幾何学的考察をすすめているのが特長である。

配位空間を層化して、主層において運動エネルギー作用素を導くと、主層の境界において作用素に特異性が現れる。この特異性は慣性作用素の逆作用素が境界で定義できないために起こるのであるが、本論文では波動関数の境界付近での振舞いから、エネルギー積分は実際には発散しないことを証明し、この特異性は本質的なものではないことを示した。また、直線状分子に対する運動エネルギーも、直線状分子の配位からなる層における幾何学的考察と、配位空間における回転群に関する波動関数のフーリエ展開から、拘束条件を置くことなく導き出している。古典力学では、直線状の分子の運動方程式に拘束条件が必要となるのであるが、量子力学においてはそれが不要でないということは、不確定性原理に抵触しない興味深い結果である。

多体系の古典力学においても配位空間を層化して、各層ごとに変分原理で運動方程式を導くという考え方は、多体力学系を総括的に捉える上で重要な考え方である。ラグランジュ形式、ハミルトン形式の双方でこの考えを実行し手際よく運動方程式を導き出した点は大いに評価できる。また、直線状分子の微小振動は、配位空間の主層の境界で起こっている運動であり、これを微分幾何学的手法で研究し、次元の異なる層を往来して起こる振動運動に幾何学的基礎付けを与えたことは、多体力学系の精緻な研究に途を開くものである。また、微小振動の摂動と周期解の存在に関するモーザーの定理を適用して、摂動微小振動では長時間の後には分子の回転が引き起こされることを証明したことは、従来の微小振動論を一步進める新しい結果である。

以上、本論文は、配位空間に回転群の作用があるという最小限の仮定から、変換群論の手法を用いて、多体系の量子および古典力学を研究し、有用な知見を得たものであり、今後の具体的な問題の基礎付けを与えるものとして、学問上実際上寄与するところが大きい。よって、本論文を京都大学博士(情報学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成17年2月22日実施した論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。