

氏 名	鈴木 大 助
学位の種類	博士 (情報学)
学位記番号	情 博 第 113 号
学位授与の日付	平成 16 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	Efficiency and Energetics of Brownian Motors (ブラウニアンモーターの効率およびエネルギー解析)

論文調査委員 (主 査) 教授 宗 像 豊 哲 教授 岩 井 敏 洋 教授 中 村 佳 正

論 文 内 容 の 要 旨

ブラウニアンモーターは空間的な周期性と非対称性を持つラチェットポテンシャルを利用してブラウン運動を整流するシステムの総称であり、熱統計物理の基礎部分や生物物理との関連で最近多くの人々の関心を集めている。特にファインマンラチェットや、モータータンパクの基礎的なモデルであるフラッシングラチェットなどがよく知られている。本論文はフラッシングラチェットとファインマンラチェットについて、

1. モーターと熱浴、外場との間のエネルギーフローの解明、
2. ラチェットによるブラウン運動の整流メカニズムの解明、
3. 整流効率の導出、

を目的として、計算機実験および理論の両面から解析したものである。

第一章では、序論として、ブラウニアンモーターの研究の背景および歴史的経緯について述べられている。

第二章では、本論文で用いられる理論の基礎および数値計算法について述べられている。

第三章では、フラッシングラチェットについて従来の過減衰の取り扱いを拡張し、慣性項を含めたランジェバン方程式に基づいてエネルギーバランスを論じている。その中で、モーターの一方方向運動に伴う不可避の散逸エネルギーを整流の有効エネルギーと捉える立場から整流効率を提案している。これは従来の効率と異なり、モーターの整流効果を評価する効率であり、また、外部負荷の無い環境下でも測定が可能となっている。こうした理論的解析に基づく提案に加えて、整流効率の温度、摩擦、および、外部負荷依存性、また、ラチェットの稼働率の意義を数値計算を通じて議論している。稼働率は生物物理の分野で提唱された量で、モータータンパクがレールタンパクに接触している時間の割合である。これはフラッシングラチェットモデルにおいてはブラウニアンモーターがラチェットポテンシャルを感じている時間の割合に対応する。稼働率が異なるとモータータンパクの機能も異なるという生理実験結果が存在するが、本章の計算機実験結果はこれを支持するものとなっている。

第四章では、前章で導出した整流効率をファインマンラチェットのような熱機関に適用できるよう拡張、一般化している。前章で取り扱ったフラッシングラチェットは熱浴を一つしか持たないモデルであるため、これに基づいて導出した整流効率は、そのままではファインマンラチェットのように二つの熱浴の温度差を利用して働くいわゆる熱機関には適用できない。そこで本章ではこうした熱機関へ適用できるよう整流効率を一般化している。前章同様、ファインマンラチェットについて、慣性項を含めたランジェバン方程式に基づいてエネルギーバランスを論じ、より一般的な整流効率を提案している。上記理論的解析に加えて、ラチェットの回転速度、および整流効率の熱浴温度差依存性を計算機実験によって調べ、温度差の変化に伴う動作原理の変化を論じている。また慣性が存在する場合、熱浴の温度差の符号のみからは運動方向が決まらないことを指摘している。

第五章は、定常状態での確率流に注目することで、非平衡熱機関としてのファインマンラチェット特有の性質、動作原理、

および低効率の原因を明らかにしている。また慣性の効果も併せて論じている。前章ではファインマンラチェットをランジェバン方程式を以って取り扱い、その長時間平均のエネルギーバランスに注目していた。一方、ランジェバン方程式で取り扱えるシステムは相補的にフォッカープランク方程式で取り扱うことが可能である。これによると、分布や確率流を知る事ができ、平均的な量だけでなく、システムの総合的な挙動を把握することができる。本章では定常状態での確率流を過減衰の系および慣性項を含めた系に対して計算機実験により求め、議論している。どちらの場合にも非平衡定常状態においては確率流の渦が存在することが確認された。また、確率流渦の回転方向が二つの熱浴の温度差の符号で決定され、渦の回転方向と系の運動方向の間に一定の関係があることを簡単な熱力学的議論により明らかにしている。また慣性の存在が、渦の回転方向と系の運動方向の関係性を変化させることを計算機実験結果を以って指摘している。

第六章は結論である。

論文審査の結果の要旨

ブラウンアンモーターは非平衡環境下で不可逆的に動作するため、平衡を維持しながら可逆的に働く熱機関に対するエネルギー解析および従来の効率は、そのままでは適用できない。これを踏まえ、本論文は、ブラウンアンモーターのエネルギーバランス、整流メカニズム、および整流の効率に関して計算機実験と理論的解析の両面より研究したものであり、以下のような成果が得られている。

1. 慣性項を含めたランジェバン方程式の確率積分という手法によって、フラッシングラチェットの定常状態におけるエネルギーバランスの定式化に成功している。またこうした理論的解析に基づいて提案された整流効率は従来の効率とは違い、整流効果自体を評価できる効率であり、外部負荷の無い環境下でも測定可能な定義になっている。また、稼働率の違いによってモータータンパクの機能の違いが説明できるとする生理実験結果をモデル上で定性的に再現している。
2. 熱非平衡システムであるファインマンラチェットに対しても上記1と同様の方法論により、定常状態におけるエネルギーバランスの定式化を行い、整流効率の一般化に成功している。また計算機実験によって熱浴温度差に依存した整流メカニズムの変化、低効率性、およびこれまで無視されてきたブラウンアンモーターの慣性が整流に及ぼす効果について指摘している。
3. ファインマンラチェットの整流メカニズムを理解する方法として、位置空間における定常確率流場に基づく方法を提案している。慣性のある場合も、過減衰の場合もともに、位置空間における定常確率流場には、確率流の渦が存在することを計算機実験により示している。また、熱浴の温度差の符号によって確率流の渦の回転方向が決まり、さらに、渦の回転方向からラチェットの回転方向が決まることを、簡単な熱力学的議論で説明できることを示している。

以上、本論文はブラウンアンモーターの、新しいエネルギー解析手法の開発、詳細な計算機実験による新しい現象の発見などにより、学術上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（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16年2月23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。