



「KMS 条件」

緒方 芳子 (数理学研究科 准教授)

Kubo-Martin-Schwinger (KMS) 条件という物理学者の名前を冠した条件が、作用素環という数学の分野で、基本的な重要概念として定着している。ここで "Kubo" というのは本学でも教鞭をとられた、統計力学の大家、久保亮五先生のことである。本コラムではこの KMS 条件についてお話ししよう。

大学に入って学ぶ講義として、熱力学と量子力学がある。熱力学は分子がたくさん集まってできた物理系の性質を記述し、量子力学は反対にミクロな系の性質を記述する。この、ミクロな力学とマクロな力学を結び付けるのが量子統計力学である。量子力学では物理量は演算子で与えられる。とくに重要なのが、エネルギーを表すハミルトニアンという演算子 H で、統計力学で学ぶ、熱平衡状態を表すカノニカル分布では、物理量 A の期

待値は $\frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} A)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}$ (β は温度の逆数に比例) で与えられる。このような簡単な式で、ひじょうに多くの構成要素からなる物理系が記述できるのは驚きであるが、これはむしろ自由度が大きいこと、そしてわれわれが興味があるのがマクロな量だけである、(個々の分子の位置などは気にしていない)ということに起因する。

さて、物理量 A, B について、

$$t \in \mathbb{R} \mapsto \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} A e^{itH} B e^{-itH})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}$$

なる関数を考える。トレースの性質を使ってこの関数をいじってみると、それがある境界条件を満たすことがわかる。これが Kubo-Martin-Schwinger 条件である。この条件は R. ハーグ (R. Haag), N.M. フーゲンホルツ (N.M. Hugenholtz), M. ウィニンク (M. Winnink) らにより熱平衡状態の数学的な定式化として採用さ

れた。

これと同時期に書かれた富田稔のモジュラー理論の論文に、Haag, Hugenholtz, Winnink の論文に現れる式がいくつも登場する。一方は物理的な興味をもとし、一方は純粋に数学的なことをテーマとした論文であるのでこれは驚きである。この理由は後に竹崎正道により解明され、作用素環を用いた統計力学の解析に道が開かれることとなった。作用素環の富田竹崎理論はさまざまところで強力な武器となっている。

数理学研究科では河東泰之教授が共形場理論の作用素環の側面についての研究を、筆者は作用素環を用いた量子系の平衡非平衡統計力学の研究をしている。



「グラフマイナー理論」

今井 浩 (情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻 教授)

道路網は交差点を点、交差点を結ぶ道路を枝で表して、点集合と2点を結ぶ枝集合からなるグラフとして表現でき、カーナビはこのグラフ上の最短経路問題を解いている。正方・ハニカム・カゴメ格子などの結晶構造、化学構造・電気回路もグラフである。

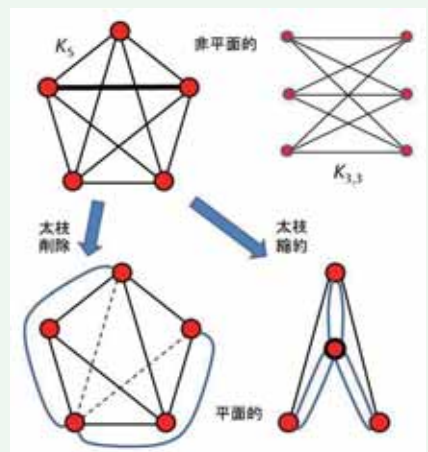
道路網は立体交差等がない限り平面上に枝の交差なく描画できる平面グラフであり、正方格子等も同様である。一方、5点中の2点を全ての組合せで枝で結んだグラフ K_5 は、平面上にどう描こうが枝交差ができ、非平面グラフである。6点の内の3点の各点を、他の3点の各点と枝で結んで得られるグラフ $K_{3,3}$ も非平面グラフである (図参照)。ここで、グラフのマイナーを、枝を単に削除か両端点を同一化して削除 (縮約) を繰り返して得られるグラフとすると、グラフが平面的である必要十分条件は $K_5, K_{3,3}$ をマイナーとしてもたないことであり、平面グラフに対して $K_5, K_{3,3}$ は「禁止マイ

ナー」になっている。電池を直並列に接続してできる2端子電気回路のグラフに代表される直並列グラフの禁止マイナーは K_4 、植物の木のように閉路を持たないグラフ (木) の禁止マイナーは K_3 となる。

平面・直並列・木グラフのマイナーは引き続き平面・直並列・木である。グラフのクラスで、すべてのマイナーがそのクラスに属するものを、マイナーに関して閉じているという。グラフマイナー理論の第一定理は、「マイナーについて閉じたグラフのクラスは、有限個の禁止マイナーで特徴づけられる」というものである。平面・直並列・木は、禁止マイナーが2個・1個・1個だが、他の場合も有限な定数個の禁止マイナーによって特徴づけられる。

グラフマイナー理論は、グラフの深遠な分解理論 (木分解など) も提供する。グラフが木にどれだけ近いかを示す木幅というグラフのパラメータは、木分解から

定義される。木の木幅は1で、直並列グラフの木幅は2である。グラフマイナー理論の次の定理は「十分大きな木幅のグラフは、十分大きな正方格子グラフをマイナーとしてもつ」である。この定理は、量子コンピュータの測定ベース計算モデルの万能性と関係するなど、理学の他分野の問題を深く関わっており、グラフマイナー理論はそうした分野へ展開されている。





「重力N体シミュレーション」

吉田 直紀 (物理学専攻 教授)

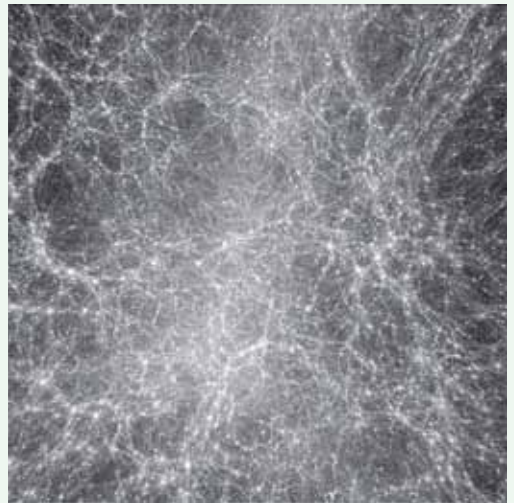
宇宙には大小さまざまな天体があり、それらが形成される過程でもっとも重要なのは重力である。宇宙の物質分布のほんの僅かな偏りに重力が働き、密度の高い部分に周りの物質がどんどん引き寄せられる。こうして天体を生み出す材料が揃うこととなる。この過程の理論研究、さらに観測結果との比較のために威力を発揮したのが「重力N体シミュレーション」とよばれる大規模な数値シミュレーションである。よく知られているように、重力相互作用をする3体以上の物体は一般に解析的に解けず、多体問題は計算機シミュレーションを行うことが多い。

膨張宇宙の中で物質分布がどのように進化するのかが数値計算によって明らかにできる。原理そのものは単純であり、物質分布を多数の質量粒子(“つぶつぶ”)の分布で表現することで初期条件が与えられる。計算に使用する質量粒子の数を一般にN個、N体などと表現するため、

N体シミュレーションとよばれるのだ。N個の粒子間の重力相互作用を計算し、運動方程式を時間積分すれば系の進化が得られることとなる。黎明期、1970年代には数百個の粒子を用いる規模だったが、最近ではN=100億、すなわち100億個(以上)の質量粒子を用いた計算も行われており、スーパーコンピューターを使用するアプリケーションのひとつでもある。宇宙論の分野では、N体シミュレーションにより宇宙の大規模構造が見事に再現され、標準モデルの確立に大きな役割を果たした(図)。国内では、重力、すなわち逆二乗則に従う力の計算に特化して回路を組んだ専用計算機も開発され、星団の進化や惑星系の形成の研究で威力を発揮している。

筆者の所属する物理学専攻宇

宙理論研究室では、超並列計算機を用いて大規模なN体シミュレーションを行い、宇宙の大規模構造から星やブラックホールといった個々の天体の形成にいたるまで幅広く研究をすすめている。



1億体の粒子を用いたコンピューターシミュレーションで得られた暗黒物質の分布。一辺がおよそ1億光年の領域の中での暗黒物質を表しており、図の明るい部分には暗黒物質が集中している。



「星震学」

高田 将郎 (天文学専攻 助教)

星震学とは一言で言うと星の地震学であり、星の表面の振動から内部を探る研究分野である。その源流は、脈動変光星の研究と日震学である。恒星の中には形を変えながら周期的に明るさの変化するものがあり、脈動変光星とよばれる。代表的なものはケフェウス座δ型変光星(セファイド)で、これは、20世紀初期から知られているように、距離が同じなら長周期のものほど明るいいため、変光の周期から距離を決定できるという重要な性質をもつ。20世紀中期以降になると、他の星(白色矮星やA型特異星など)でも脈動変光が多数検出されるようになったが、これらはセファイドと異なり、複数の周期をもち、非球対称な変形をする。いっぽうの日震学は太陽の場合の星

震学である。太陽表面で周期約5分の微弱な振動が発見されたのは、1960年頃であるが、その後この現象は深部にまで伝わる固有振動であることが確立したため、表面の振動から内部の構造を調べるといった逆問題の手法が可能になった。日震学は1980年代頃から大きく発展し、表面对流層の深さや自転角速度の分布といった貴重な情報が得られている。

日震学の成果を受け、他の星でも同じ成功をという機運が高まった結果、脈動変光星はもはや単なる距離指標ではなく、恒星の内部構造を探索し、星の進化理論を検証する場となった。20世紀末以降とくに太陽型の振動が続々と検出されるようになり、星震学の対象が急速に拡大した。背景には系外惑星探査に用いら

れる観測技術の応用がある。中でもフランスのCoRoTやアメリカのKeplerといった現在運用中の人工衛星計画では、高精度連続測光観測のおかげで、膨大かつ精密な観測結果が得られている。最近の大きな成果としては、赤色巨星の星震学(従来表面の観測量からはわからなかった中心構造の識別、内部微分回転の検出など)が挙げられる。

著者は最近星震学の基盤となる恒星振動の基礎理論、とくに固有振動モードの数学的に完全な分類方法について研究している。このほか天文学専攻の柴橋博資教授とその大学院生は、日震学や星震学、恒星振動の理論的研究を、松永典之助教は脈動変光星の観測的研究を遂行している。



「マテリアルデザイン」

神坂 英幸 (化学専攻 特任助教)

1920年代中頃に確立された量子力学は、物質のミクロな振る舞いを記述する基礎原理である。現在、さまざまな物質の性質・現象を、量子力学に基づいて統一かつ体系的に理解する営みが続けられている。いっぽうで、それらの知見を生かして新規な機能性材料を設計する試みも広がりつつある。この試みはマテリアルデザインともよばれている。

機能性材料には、複雑な有機化合物や、不純物添加（ドーピング）した半導体がある。それらの構成元素の同族原子置換もしくは不純物・格子欠陥の導入は、しばしば機能発現に決定的な役割を果たす。そのような機能の予測には、単純なモデル化や数理的な手法を適用しにくい場合が多い。基礎原理に基づいた機能性材料の設計には、計算機による物質の電子状態の数値計算が欠かせない。

物質の電子状態を精密に解く研究は、分子科学の分野で先行した。量子化学

として知られる研究領域では、経験によらず十分な信頼性をもって、数原子程度の小さな分子のさまざまな物性を正確に計算・予測できる段階に至っている。固体の場合は無限個の電子を扱う必要があるが、結晶構造がもつ周期性を利用し、1964年にW. コーン (W. Kohn) らが開発した密度汎関数法を併用すると、実用的な計算精度が得られる。密度汎関数法では、クーロン斥力で避け合う固体中の電子の運動を直接記述せずに、有効ポテンシャル関数で近似する。基礎物理定数からダイレクトに電子状態を求める手法は、第一原理計算とよばれる。これは現在も開発途上であるが、物質科学・材料科学において広く用いられている計算手法になっている。

近年では、データベース的な手法もよく用いられる。物質を構成するパラメーターである原子、結晶構造、および不純物（添加物）は広範にわたり、その組

み合わせは膨大な数に上る。限られた精度の第一原理計算を活用し、コンピュータを使った統計処理を用いて望みのパラメーターの組み合わせを絞り込む。

固体化学研究室では、希少元素代替・元素戦略をキーワードに、新規透明電極材料の開発を進めている。不純物添加した半導体は、無限系としての固体と有限系としての不純物（ドーパント）を考慮する必要があり、高度な計算を要する。これまで、ニオブ、タングステン、フッ素などの添加が二酸化チタンの電子状態や結晶構造に与える効果の微視的機構を明らかにした。現在では、軽元素で構成される新規材料設計を目標に、酸化物や酸窒化物の電子状態や結晶構造の計算を行っている。また、イオン伝導性材料やスピントロニクス材料などの設計指針の構築にも取り組んでいる。



「ナメクジウオ：脊索動物の生物学」

窪川 かおる
(臨海実験所 特任教授)

ナメクジウオは、脊索動物門に分類される体長が最長で6 cmほどの海産動物で、脊椎動物への進化の過程を知る上で重要な動物である。温帯から亜寒帯にかけて、砂質の沿岸域海底に生息し、*Branchiostoma*, *Epigonichthys*, *Asymmetron* の3属があり、日本では3属4種が報告されている。体の基本形はよく似ているが、属によっては生殖腺が片側だけ、といった違いがある。研究には*B. japonicum* (従来の*B. belcheri* から変更) が用いられる。この種は、房総半島以南の太平洋沿岸、瀬戸内海、玄界灘、有明海、中洲干潟などの砂質海底や干潟に多数生息している。夏季の産卵時には、海底から数m泳ぎ上がって放精・放卵する。幼生は浮遊しながら約1か月で変態を完了して海底に降りる。

ナメクジウオによく似た脊索動物の化

石として、5億3千万年前のカンブリア紀のバージェス頁岩化石生物群集で発見されたピカイアが知られている。ピカイアには脊索動物門の特徴、すなわち脊索がある。脊索動物は、一生のうち必ず脊索をもつ時期があり、胎児初期に脊索をもつ脊椎動物もこの門に含まれる。ナメクジウオは脊索動物の中で最も早く分岐した動物群で、脊椎動物の進化の大イベントである背骨と脳の獲得、あるいはさまざまな器官・組織の形成や生体機能の起源をナメクジウオから推察できる。

2008年にフロリダナメクジウオの全ゲノムが公開され、機能をもつ遺伝子約21,600個はヒトの個数と近く、配列の類似性も高いこと、さらにヒト染色体との比較では脊索動物の祖先の基本型が17本に表れていることが示され、脊椎動物の原型の解明が進んだ。ナメクジウ

オの段階では、脊椎動物と共通する遺伝子の多くが単一遺伝子であり、おそらく生体機能のネットワークも脊椎動物より単純である。しかし、脊椎動物は、すべてのゲノムが4倍になる進化を経ているため、類似した構造の遺伝子が複数存在し、それらが作る複雑なネットワークが発生・分化や生体機能を制御している。そのため、ナメクジウオから脊椎動物の原型を明らかにすれば、脊椎動物の生体機能の進化を解明することにつながると期待されている。

臨海実験所でも稀に採集されるが、筆者のナメクジウオ研究は、生息地探索と生態調査から始まり、現在は遠州灘で採集した個体を臨海実験所で飼育し、高次生体機能、とくに内分泌機構、の進化の解明を目的として研究を進めている。