講義アンケート SM2022-10（2022 年 12 月 20 日）コメントと回答

γ に名前はありますか？

次回の講義で説明しますが、（他の特異的な指数も併せて）臨界指数と呼ばれます。

先生はよく「研究ではボルツマン定数を 1 としてるので書き忘れてしまいます､､､」のように仰っていますが、自分は「k_B=1.380649×10^－23 J/K だと思うけれどどういうことだ､､､ ？」と思っていますので教えてほしいです。k_B が無次元量 1 になるように単位の取り方を変えるのですか？

ある種のジャーゴンなのですが、温度をエネルギーの単位で考えることをデフォルトにする、ということです。純粋に理論的な問題では、そう考えるのが便利なので。実際の現象との対応を考えるときには、温度はケルビンで議論しますが。相対論的量子論の世界では、光速を 1 として、プランク定数も 1 にする単位系がよく使われます。それも基準となる量が自明に了解できて、かつ、記号が煩雑にならないので、そうした方が便利だから、ということだと思います。

確認ですが、磁性体の個性は「磁化」と「熱容量」で与えられるということですよね？

はい、そうです。

T_c はキュリー温度、発散するのはキュリー・ワイスの法則というものですか？

キュリー・ワイスの法則とは $\gamma = 1$ を与えるある種の現象論で、ファンデルワールス状態方程式と同様な位置づけになっています。実際は $\gamma = 1$ からずれています。そのあたりは次回の講義で説明します。

T_c 以下で χ はどうなっているのでしょう？

来週説明しますが、転移温度に向けて発散します。ただし、低温の場合、磁化の振る舞いが違うので注意が必要です。

有効モデルの考え方は物理の他のところでも結構普遍的に見られるんじゃないかと思った。
数式が追いきれなかったので後でゆっくり見返そうと思います。

その通りです。「有効モデル」という考え方そのものを「理論として」定式化して広げていくこと、というのは統計物理が目指すひとつの方向です。

知恵袋に「有効模型」の説明でわかりやすいのがありました。以下コピペです。

「ある物理系があるとします。その系の、ある物理量を計算で求めたいとします。
現実の系には、ありとあらゆる効果が複雑に働きますが、それらの効果を全て計算式に反映することはできません。またあるいは、知りたい物理量が計算できそうもない難しい模型が与えられるかもしれません。
そこで、「現実の系や難しい模型そのものとは違うけど、この物理量を求めるためにはこんな模型で十分だろう」という、求めたい物理量に対して主要な影響を与えるであろう項が入っていて、影響が小さそうな項は入っていない、計算で知りたい物理量を求めることができる模型を考えます。ここで考えた模型が「有効模型」です。「有効理論」と言ったり、英語では""effective model (theory)""と言ったりします。」
https://detail.chiebukuro.yahoo.co.jp/qa/question_detail/q14231650864
講義メモにある「問が先」という言葉は、「発散やキュリー則が生じる条件は？」という問が先にあって、その問に答えられそうなモデルを作るということですね。

ありがとうございます。知恵袋の説明は的確だと思います。「問が先」とはそういうことですし、そもそも「問」がないままに、「モデル」や「記述」を考えるのは迷子になってしまいます。

問を先に設定して、磁気モーメントが入ったモデルを作ってしまえば量子電磁気学まで戻らなくてもいい、というような動機付けの話が聞けるので、講義がいつも楽しみです。

ありがとうございます。

気体・液体は古典的 EOM で記述できる領域があるからクオークとかまで戻らなくて良い、という話がピンとこなかったので詳しく説明していただけませんでしょうか。よろしくお願いいたします。

気体、液体の場合、古典力学による粒子の記述という基盤のしっかりした枠組みがある、という事実が確立しているから、といっていいかな。厳密にいえば、ニュートン力学の記述が原子スケールでいいかどうかは自明ではないのですが、その記述を前提にして議論をしましょう、とはじめることに反対する根拠はない。実際には、そこから諸量を計算して、実験と比べながら、その仮定も同時に裏どりをすることになるのですが・・。また熱容量のように、ニュートン力学による記述が破綻していることが後でわかる場合もあります。いずれにしても、「仮定としての出発点の任意性がない」ということかな。それに対して、磁性体の場合、原子の磁気モーメントの記述から始めましょう、といっても、それが何か分からないです。そのような場合、仮定としての出発点の任意性がないところまでいくと、(現代なら)、量子電磁気学になってしまいますが、それをそこまでもどらず、「出発点として、自明に受け入れるわけではないが、作業仮説として、簡単なモデルで有効的に記述されるとしよう」という論旨にたつ、ということです。

発散則の γ はいくつかの物質群にグルーピング出来るとのことですが、この原因を、量子電磁気学ではスピンや電荷の運動の観点から考察する。統計力学ではモデルの作り方によって γ の値が変わるから、そこから逆に物質の構造が分かるのかと思ったのですが違いますでしょうか。
もうすこし詳しく言えば、統計力学で、モデル 1 で計算すると $\gamma = \gamma\_1$ になりました、ということは測

定値が γ_1 の物質群はモデル1のような構造をしているのではないか、と予想できるのかと思ったのですが。
しかし「有効モデル」というのは「(現実の系とは少し違うかも知れないけれど)ある問に答えを与えるためのモデル」だと思うので、現実の系の構造を明らかにするものでは無いのかな？という混乱があります。

次回の講義で説明しますが、γの値は、基本的には、対称性と空間次元で決まります。物質の個性といっても、没個性化して、普遍的な値になるのです。

この欄を書くときいつも、「良い質問」というのはどうすればできるのだろうか、鋭い着眼点に気づく人の頭の使い方はどうなっているんだろう、と思います。
いつもご回答ありがとうございます。感謝いたします。

「よい質問」とは何か、とか考えない方がいいように思います。ただ、理解できないときに、理解できないことを理解できない、と表現できるのは、（計算が速いとか、理解力がはやいとか、と同じような）よい特性のひとつだと思いますので、分からないことを他人に伝えることは心がけて損はないように思います。余談ですが、研究者をする上での僕自身の最大の長所は、「分からないことを他人に伝えることができる」ことだと自分では思っています。学生時代もそうでしたし、研究者となった現在でも「これ、分からないなぁ」というところから研究が始まることが多いのでプラスに働いています。（反面、僕は、新しいことを理解するのに多くの人よりずっと時間がかかっていたし、今でも遅いです。単純計算（シンボルの計算）を暗算でするのは速い方だったので、理解する遅さは目立ってなかったかもしれませんが・・）

磁気モーメントと磁場の積がエネルギーの次元になるのが分からなかったので電磁気学をよく勉強しようと思った。

物質中の電磁気学は難しいですね。

→μ_i＝μ→s とした所で、大きさ×単位ベクトルに書き換えたんだなー、と思ったのですが、物理的な意味がよく分かりませんでした。→μ を使ったハミルトニアンの表記(これ自体は分かりました)を、→s を使って書き表したものをハイゼンベルクモデルと呼んでいて、モデルがどういう風に変わったのか分からなかったです。

講義メモでは、ベクトルSは入れてなかったのですが、標準的な記号にあわせた方がいいとおもって、ベクトルSをいれました。プラスマイナス1をとる変数に対するモデルが Ising model で、それに対応して、大きさ1の3次元ベクトルを変数とするモデルが Heisenberg model です。変数のタイプを併せた、というだけで物理的な内容は同じです。

今回のカノニカル分布が、どうして確率密度ではなく確率そのものなのかがわからなかった。

これまでの¥Gamm は実数の組に値をもつ連続変数なので、それを確率変数とする場合には、確率密度を通して、確率が定義されますが、今回の講義では、離散変数なので、直接確率が定義されます。

磁化をカノニカル分布の期待値で計算したことについて。(分布の種類が)カノニカル分布なのは、一定温度 T に制御された熱源に接している系を考えているから、と理解できます。質問は、「(カノニカル分布の)期待値で磁化が求められる」というのは仮定なのか？です。

与えられた設定で、カノニカル分布が使えることが理解されている場合、あとは、測定値はもっとも確からしい値になって、大数の法則によって、その値は期待値そのものです。　質問の意図を完全に理解できていない気もするので、講義後にでも声をかけてください。

等重率の原理は、「""孤立系での""マクロな変数の平衡状態での値は、ミクロカノニカル分布での平均値で与えられる」という内容で合ってますか？孤立系とミクロカノニカル分布のみに関する仮定か？というところが聞きたいです。

はい。その理解でよいです。

「""等温環境での""マクロな変数の平衡状態での値は、カノニカル分布での平均値で与えられる」という内容は、等重率の原理から導かれるものなのか、等重率の原理とは独立に仮定されたものなのか理解できていないので教えていただけませんでしょうか。
よろしくお願いいたします。

１１月１５日の講義で、「等温環境下の系はカノニカル分布に従う」ということを導いたことになっています。

Z(T,h)の式が簡単に計算できるかどうか分かるようにになりたいなあと思いました。

簡単な例題では、簡単に計算できますので、そういう場合には、何度か経験すればなれると思います。

研究でいつも μ=1 にしているとのことですが、どういうことですか？都合良く値を変えていいのか疑問に思いました。

上の質問でのボルツマン定数と同じで、磁気モーメントの次元を変えてしまっています。実験と比べるときには戻さないといけないのですが、理論的には記号がわずらわしくなるのを避けるために無次元化したものをつかってしまっています。

磁性体といえば常磁性体や反磁性体などがありますよね。今回モデル化したのはどの種類の磁性体なんですか？

今回のモデルは、常磁性から強磁性への転移を示す状況を念頭においています。磁気モーメント間の相互作用エネルギーを正にとったのがその状況に相当することを陰的に前提としていました。

最後のページの「キュリー則は普遍的に観測される」というのは、強磁性体だとか反磁性体だとかにかかわらず、あらゆる物質で観測されるという意味で普遍的、ということであっていますか？

はい。キュリー則の本質はスピン間相互作用が無視できるということなので、そういうこといなります。

前回の範囲になってしまうのですが、復元力 f が-<H_0 の x_N 偏微分>で与えられるのが何故か分からないです。

N 番目の質点に働く力の x 成分が、鎖としてはもとに戻ろうとする力とみなせる、ということです。

前回範囲の、部分積分で境界項が 0 になる理由ですが、アンケートの回答で「x_{N}の微分の境界項なので、x_{N} が無限大のときの値を x_{N} がマイナス無限のときの値が関わります。それらの値ではハミルトニアンは無限に大きくなって、」とあります。x_N が±∞で H_0 が無限大になるのは、バネの弾性エネルギーが無限大なるからであっていますか？
それから、別に H_0 が無限大にならなくとも、δ(x_N-X)がかけ算されているから、X_N=±∞では δ 関数が 0 になって境界項が落ちると思ったのですが違いますでしょうか。

あぁ・・。確かに。それでいいのか。

前回範囲、E を内部エネルギーと呼ぶのが間違いなのは、バネの内部では無い、外力ポテンシャルの寄与が含まれているからということですよね？

はい、そうです。

Z(T,h)の計算が計算機でも難しい問題とのことでしたが、それは配置のパターン数が多すぎて、並のアルゴリズムでは現実的な時間で計算できないということですか？

そうです。スピンの個数に対して、とりえるスピン配置は指数関数的に増えてしまい、そのまま計算するなら、計算機で扱える範囲が小さいNに限定されてしまい、熱力学極限の議論が可能なところまでいかないからです。そこで、これをNについて多項式程度の計算で済むようなアルゴリズムが多数知られています。そしてこのことが、（近年の人工知能の問題であらわれる）高速な情報処理の方法と関係してきます。実際に、α-GOのアルゴリズムにも統計力学の発展が生かされています。

前回範囲で、F と¥tilde F の設定の違い、外力とのつりあいで端を止めるか、拘束条件として固定して端を止めるかで、なぜ違いが現れてくるのかがなかなかピンとこないです。同じような設定なのに、と思っ

てしまいます。確かに計算するとそうなっているのですが、、、

例えば、外力固定の場合には、変位のゆらぎが議論できますが、変位を固定する場合には（当然のことながら）変位のゆらぎはゼロです。このように、熱力学量の期待値については、アンサンブルの等価性により互いに同じ情報をもつのですが、ゆらぎについては明示的に違いますね。このように、設定は確かに違うのですよ。

前回の鞍点法の補足ページ助かりました。ありがとうございます。
１点だけ、Gauss 積分+・・・・のところが o(N^-1/2)になるのは分かるのですが、それが最後の式変形で exp の肩の o(N)にかわったところが分かりませんでした。

指数関数の前の多項式は、x=exp log x で　exp の方にのせると、log 多項式になるので、log N 程度になります。

１２１３講義メモ１０ページの青枠内２行目の式、＋ではなく－ではないでしょうか？

あぁ。そのとおりですね。講義の黒板では間違ってなかったと思いますが・・。

前回の範囲ですが、exp[-β ¥tilde F]が∫dX exp[β(fexX-F)]になるのが分かりません。

１２１３講義メモ１０ページを参照してください。それでどこが分からないか、いってもらえればさらに説明します。

過去問題を見たのですが、等重率の原理のミクロカノニカル分布を、(確率密度では無く)確率で与えていますよね。確率密度か確率かは、理論の構成としてはどちらでも問題ないのでしょうか。確率で与えたとしても、期待値を取るために積分表記するときに、次元を合わせる因子が必要になる気がしますが。

あれ、もし連続変数に対してそう書いていたなら、単純な書き間違いだと思います。いつの試験問題でしょうか？

規格化因子Σや Z がいまいちつかみ所の無い感じがしています。ハミルトニアンはエネルギーだ、とすぐに分かるのに比べると。次元もぱっとは分からないです。

本来、規格化因子は全確率が１というところからでるだけで物理的な意味はないのですが、むしろ、統計力学という枠内では、そういう無味乾燥な規格化因子の対数をとることで、エントロピーや自由エネルギーなどの熱力学概念とむすびついている、ということになっています。物理的な意味は対数をとって与えられるので、規格化因子の次元は関係なくなってくるのですね。なぜ、規格化因子の対数が物理と関係するのか、という点をつきつめれば、（熱力学として測定可能な量が）エントロピーが情報論的な量で

ある、というとこにつながると思います。そういう全体像は色々な勉強（情報理論など）を積み重ねてみえてくるかと思います。

前々回アンケートで、「Zc の計算で、r から q に移行するとき、dr1・・・・drN が dq1・・・・dqN になるのが分かりません」と書いたのですが、ヤコビアンの寄与などでは無く、もっと単純に等しくなるのが分かっていません。リウビユの定理など関係あったりしますか？

積分変数の変数変換です。例えば、(x_1, x_2, x_3) 積分に対して、q_1=x_1, q_2=x_2-x_1, q_3=x_3-x_2 という変数を定義して、(q_1, q_2, q_3) 積分として書きましょう、ということをやっています。（ハミルトン系における体積要素の不変性を主張する）Liouville の定理は関係なく、単なる、積分変数の書き換えです。

ミクロカノニカル分布、カノニカル分布以外の分布も知りたいと思い始めました。
ある環境にある分布が対応するとのことなので、孤立系、等温環境以外の環境についても知りたいです。

温度一定で外力一定の系というのは、気体にあてはめると、等温等圧環境になっています。それゆえ、T-p 分布などともよばれます。粒子が出入りして、粒子数が変わりうる環境では、グランドカノニカル分布があります。量子系では圧倒的にグランドカノニカル分布が便利になります。統計力学 A でも最後に紹介しますが、考え方そのものは同じで、あとは必要なときに必要なアンサンブルをもちいて議論することができるようになればよいです。

T-p 分布は定圧環境に対応したアンサンブルだと理解していいですか？
端を拘束条件として固定したときのアンサンブルは定積環境に対応したりしませんか？

そうです。

バネの端 x_N を固定したモデルでは、カノニカル分布に拘束条件として δ(x_N-X)が入ってきたと思うのですが、反対の端はいつも原点に固定されているのに何故 δ(r_0) がついていないのか疑問に思いました。

r_0 は確率変数 Γ に最初から入っていないのです。アンサンブルの等価性の議論などをしない場合には x_N をはずしておけばいいのですが、記号が煩雑になるのと、今回の動機は、二つのアンサンブルの関係を議論することにあるので、確率変数にいれて固定しました。

第 9 回講義メモ１０ページ、1 , 2 行目の式での exp の肩の x_N が、3 行目のところで X に変わっているのが分かりません。

δ(x_N-X) が掛けられているので、x_N は X 以外ではゼロになるので置き換えていいのです。

過去問にある、「サンプルする」というのはどういう意味ですか？

分布にしたがって変数の値を選ぶ、ということです。

外力で引っ張って止めるモデルで、外力によるポテンシャル以外のハミルトニアンを H_0 と書いていますよね。こういう添字 0 はどういうときに使うのですかね？僕は真空の時に使うイメージがあります。透磁率など。

外力がないという意味をもたせるためにゼロとかきました。一般に何かがない参照状態を示すときに使われる記号だと思います。

前回の授業ノートの 3 ページ目の分配関数を求める過程でのエントロピーの式はどこから導かれたものなのかが分からなかった。

一般に与えられたハミルトニアンの設定で孤立化させた系を考えると、等重率の原理を前提にしてよいです。その場合には、エントロピーがボルツマン公式により、エネルギー面によって囲まれる相空間の体積によって決まります。それを使っています。

少し前の内容になりますが、希薄気体のとき粒子間相互作用を無視できるのは、相互作用の項が効くくらい粒子が近くなるような配位が、相互作用の項がほぼ効かないような配位に比べて少ないから、言い換えれば粒子が接近して相互作用が効く確率が小さく、期待値を取ったときに効いてこないから。むしろそれが効かない程度に希薄な気体を考えている、と言った方が正しいかもしれない。という理解でいいでしょうか。
ちなみにこの場合、「何と比べて」希薄と言えばいいんでしょうか？

その理解でよいです。粒子間相互作用の長さを d とすると、確率にしたがって粒子をばらまくと大体一様ランダムにばらまかれると期待されます。そのとき、相互作用する粒子対がないくらい希薄というのは、 N d^3 << V となります。