講義アンケート SM2022- 8 （2022 年 1 2 月 6 日）コメントと回答

最近、電磁場・ゲージ変換のラグランジアン・ハミルトニアンがレポートに出ました。熱力学・統計力学を解析力学の枠組みで扱う試みはあるのでしょうか？

解析力学が指すものによるのですが、例えば、最小作用の原理のような変分原理は熱力学の変分原理と似た構造になっています。その場合、統計力学に対応するのが量子力学になります。

ハミルトニアンの -f_ex*x_N の項が分からなかった。
授業の流れとして f_ex➘0 の時 X➘0 となることは事前に仮定して、後で近似計算を行ってそれが正しいことを確認したのかな、と思ってるんですがあってるでしょうか。

重力の位置エネルギーが mgh というのと同じです。一定の力をうみだすポテンシャルエネルギーを書きました。外力がゼロのときに X が 0 になるのを「仮定」したのでなく、それをまず確認したのですが、口だけで暗算しながら説明をしたので分かりにくかったかもしれません。外力が 0 の極限で 0 になることをみて、グラフの様子を推測して、fex に比例する項を抜き出す、ということをやりました。また、外力がゼロのときに X がゼロになる、というのは自然長がゼロになることに他ならないです。

終盤でおっしゃっていたミスのある論文の URL を教えていただくことはできますか？間違い探しをしてみたいですし、重力とエントロピーのつながりにも興味があります。

https://link.springer.com/article/10.1007/JHEP04(2011)029 です。エントロピー弾性の説明を正しく訂正するのはよい練習問題だと思います。

f_ex が必要な理由は、平衡状態における復元力を計算するために、外力を加えてつりあいの状態を作る必要があるからだ、と理解したのですが合っていますか？

次回説明しますが、もともとやりたいのは他方の端もとめて力を計算することなのですが、その計算は簡単ではないので、端を止めずに外力を加えてつり合い状態をつくった、ということです。

重力が実はエントロピー力ではないのかという説にはすごくワクワクさせられました。
ゴムのハミルトニアンの外力 fex を含む項（-fex*xN）は、地点 x=0 から地点 x=x0 まで外力 fex がした仕事に抗してした仕事が引かれているという解釈でよろしいいでしょうか。

はい。外力のポテンシャル項は、（高校物理の）重力の位置エネルギーの考え方と同じです。外力に抗してして x_N まで移動するときにする仕事ですね。（外力のする仕事と符号が反対。）一般相対論による重力の記述は感動的に凄いのですが、量子論との相性が極めて悪いことに何か理由があると考えたくなる

のはよくわかります。

剛体棒のモデルでありながら、バネを用いてハミルトニアンを考えたことが少し違和感を感じたのですが、実際に剛体棒を仮定してもうまく説明できるのか、そもそも剛体棒をハミルトニアンに組み込むことができるのかが気になりました。

力学の記述を剛体棒にして統計力学の計算を行っても同じ結果を得ます。ハミルトニアンでかくこともできます。しかしながら、講義で説明したとおり、「剛体」とは力学的には「かたい弾性体」なので、先に変位ゼロにするモデルは熱容量を考えるときには何をしているのか分からなくなると思います。そういう物理的な側面とハミルトニアンのモデルが簡単になる、という側面から、ばねでつなぐモデルで計算しました。

前回アンケート、孤立系でカノニカル分布になるような物理的状況が実際に作れるんですか？びっくりです。

例えば、ある力学系を用意して、熱浴と接触させて、カノニカル分布をつくったあとで、熱浴を切り離すことで、孤立した系においてカノニカル分布が実現できます。この場合、孤立しているので、時間発展はハミルトン系ですが、初期条件の分布がカノニカルということになります。

k0 や k1 が負になっている物質もありますか？

k_0+k_1T は正でないといけないですが、それぞれは負になってもいいです。k_0<0 となる「負のエネルギー弾性」に関する問題が https://twitter.com/sasa3341/status/1222006509179043842
にでています。また、その問題で言及した論文が出版されたときには、プレスリリースがでているので、負のエネルギー弾性で検索してみてください。

統計力学的なゴムのモデルで、剛体の「変形しない」というのがよく分からないのでバネでつなぐ、というお話が分かりませんでした。剛体とは任意の 2 点間の距離の変わらない物体だったと思いますから、普通にそう設定すればいいのでは？と思いました。そういうことでは無く統計力学のどういう概念が対応するのかが分からないとかそういった話ですか？剛体のことはよく分からないけれど、バネのことはよくわかっているのですか？

ばね定数を計算するだけなら、剛体切片がつながっているモデルを考えても構いません。ただ、そもそも「剛体」には内部自由度があるので、熱容量などを考えるときには、その自由度の寄与をどう考えるのか、という問題と、剛体切片がつながったときのハミルトニアンを書くのが面倒くさいとの両方でバネにしました。

エントロピー力は一般的な用語ですか？

そうですね。僕の造語ではなく、外で使ってもよいです。

かたいバネの条件が理解できていないので復習しないと、と思いました。そもそもかたいバネとは何を指していたかも分かっていません。

ばね定数は次元をもっているので、大きさを議論するときには、次元をそろえないといけないです。ひとつのばねのエネルギー　¥kappa a^2 が　等分配則で配分されるエネルギー　k_B T にくらべてずっと大きい、というのを堅いばね、としています。

バネのハミルトニアンの最後につく f_ex*x_N の符号がマイナスなのが分からなかったです。

高さ h の質点の重力の位置エネルギーが　mgh というのを思い出して、この場合　h は重力がかかっている向きと反対向きにはかりますよね？　それを同じです。外力に逆らってどんだけ仕事をするか、

x_n は Γ 積分の外には出せないですよね？

はい。

位置 X=x_N ではないか、と思ってしまいました。こうなるのは、運動方程式を全部解いて答えを出すスタンスのときで、EOM を全部解くことを放棄することから始まった統計力学では、X=<x_N>のように期待値になる、という理解でいいですかね。

X= x_N なのですが、N が十分大きいときの　x_N/N の値はほぼ確実にある値になります。その値は、x_N の期待値を計算することで求まります。（これは、コイン投げの場合と同じ。）期待値を考えるためには、確率分布が必要で、その確率分布が統計力学によって与えられている、ということです。

復元力がゆらいでいるなどというとき、「ゆらぎ」という言葉はどういう意味で使っていますか？マクロに見ると復元力は一定だが、ミクロな観点ではミクロな時間スケールで時間変動しているという感じですか？

熱力学極限をとる前だと、色々な値が確率的に出現します。復元力もおすです。その確率的な出現のことをゆらぎとよんでいます。時系列でみると、確率的に値をとりながら時間変化しています。熱力学極限をとると、X/N は一定の値をとります。

ゴムを連結した「１次元の」バネでモデル化したのは、計算の簡単のためですか？
バネが３次元的な網目状(ジャングルジムのイメージ)に連結したモデルのほうが納得できるのですが。
計算できる気はしません、、、

高分子の種類によりますが、例えば、網目状にひろがってネットワークを組んでいるゴムもあります。モデルとしてとりあげたのは鎖状高分子がつくるゴムです。もちろん、鎖状高分子だとしても、高分子間に相互作用はありますし、3次元的なひろがりがあります。エントロピー弾性を明示的に見せるために、極端な鎖状高分子のモデルで計算しましたが、実際は、もっと複雑です。そのとき、エントロピー弾性の寄与とエネルギー弾性の寄与がどれくらいあるか、とかが物質ごとに違ってきます。

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。

やこびあんの寄与を気にしていますか？1だと思います。（仮に、1でなくても定数であるのは間違いないので、定数としていれておいても、対数とって微分するときには効きません。）

q が a の周りで漸近展開するところで、q チルダ 0 付近が主要な寄与になるといえるのが何故か分からなかったです。板書で、q チルダが横軸で 0 付近が peak になったグラフが書かれていたと思いますが、どこから出てきたのか分からなかったです。このグラフの幅が 1/sqrt(βκa^2)というのも分からなかったです。それから、幅といったらふつう半値幅を指すと思っていいですか？

講義メモ 9 page に、被積分関数に exp(- ¥beta ¥kappa a^2 ¥tilde q^2 /2) という因子があることをみてください。このグラフを書いています。¥beta ¥kappa a^2 >>1 という「堅いばね」の条件から、¥tilde q の関数としてみるとき, ¥tilde q= 0 以外ではほとんどゼロになります。その結果、その因子以外のところでは、¥tilde q=0 とおけるのです。幅というのは、半値幅ですが、オーダー的な評価をみています。その幅をこえたら、ほぼゼロになります。

講義とあまり関係無いのですが、去年の熱力学の講義で先生が、「自分が学生の時は、単位を取ることは意味が無い、その学問が習得出来るかが肝心だと思っていた」(記憶がめちゃくちゃ不正確で違うかも知れない)のようなことを、学生時代にクラウジウスのエントロピーの論文まで遡った話と絡めて仰っていたような気がします。先生はこれを「化石のような考え方」と自分で言っていらっしゃったのですが、私は共感した思い出があります。全然関係無い話ですみません。

はい、まぁ、大体そういう話はあちこちでしているので、昨年の講義でもしたかもしれません。ちょっと極端すぎるエピソードですね。現実的には、バランスは大事だと思います。（学生時代の僕はバランス感覚なかったので、あまり言えないのですが・・）

要素レベルにない「復元力」が、集団レベルで現れるのは不思議ですね。本当にピンとこないです。
本当に要素レベルにはないのでしょうか。認識不足ではなく。

要素間の相互作用力としては復元力はないことはモデルの設定からそうなので、要素レベルではない、としかいいようがないですね。

ミクロなバネが連結した描像を考えてしまうと、エネルギー弾性の描像になってしまうので、回転できる剛体棒を繋いだ描像でエントロピー弾性の描像を考えたということですよね。そのあと統計力学の設定で、間をバネでつないでしまったら、エネルギー弾性の描像になってしまうのでは無いかと思ったのですがどういうことなのでしょうか？固いバネの条件が効いているんでしょうか？

間をばねでつないたのは、変形が小さい剛体的な振る舞いを力学から書いたためです。連結したばねが自由に回転できて、その回転に伴うエネルギーコストはゼロなので内部にエネルギーは蓄えられないです。また、外力を加えて、巨視的な変形があったとき、各々のミクロなバネののびはゼロのままです。つまり、そのばねにエネルギーが蓄えられないのです。

X の線形化のところで、β f_ex a<<1 がどこからでてきたか分からなかったです。

「小さい」外力の状況を考えることで、X が外力に対して線形部分をとりだそうとしているのですが、「小さい」条件を明示的にするために、 外力のもとで a だけ動く仕事とエネルギー k_B T を比べて、前者が小さい状況を考えました。物理的にはそうですが、物理は簡単ではないです。ここは、小さい外力を考えるときに、f_ex が入っている無次元量をみて、それを小さいとして展開する、という数理的な操作だと考えるのでよいと思います。

全体の流れをもう一回教えてほしいです。自分なりの理解では、「エントロピー力」を統計力学から具体的に計算しようという話で、f=-k_macro X が得られた。フックの法則の式が出てきてすごい、これは考えたモデルがマクロな 1 つのバネを再現できたことを示している(マクロなバネとしてのモデルの正当性が示された？）。ただし、ハミルトニアンにバネの弾性エネルギーの項が入っているので、議論の出発点に個々のミクロなバネのフックの法則は含まれていることには留意。それから k_macro が T に比例しているのも凄い、(熱力学で分かった)エントロピー弾性を統計力学で再現できた(エントロピー弾性をもったゴムのモデルとしてまともなものであることが分かった？）。あとは(統計力学で理論的に導いた(導けたことが統計力学の価値である))3k_B/Na^2 が(熱力学では測定するしか無かった)測定値 k_1 と一致するかを調べないといけないと思います。一致するんですか？

測定値 k_1 との関係ですが、簡単なモデルの範囲なのでぴったり一致とはいかないですが、程度は一致しないといけないですね。最近確認していないので、確認しましょう。

K_macro (Na)^2 ~ Nk_B T はどういう物理的意味を持っていますか？

巨視的な変位は Na の程度なので、左辺がばねの自由エネルギーの程度です。右辺は N 自由度に配分されるエネルギーの程度です。数因子は除いて、両者は同じ程度だと期待される、というのが物理的な議論です。その結果、「３」という因子はともかく、k_{macro} はどれくらいでないといけないか、というのが分かります。

温度目盛りの間隔に不定性があるのは、目盛り間隔を一意に決める必然性が(いま人間が知っている限りでは)自然の中に見当たらない(無いことが証明されたわけでは無い)、と理解しておいていいでしょうか、、、？

はい、そうですね。

熱力学で物質の個性がパラメタになっている感覚がなかなかしっくりこないです、、、。

自然現象の法則は、「原理」と「パラメータ」からなる、というのがひとつの見方だと理解しています。例えば、（解析）力学では、ハミルトニアンの関数形がパラメータであり運動方程式が原理です。熱力学の場合、物質の個性は物質ごとにいろいろあるけれど、熱力学関係式やカルノーの定理は、物質の種類に依存しない、つまり、パラメータに依存しないもにになっています。

揺らぎの世界の熱力学とは何ですか？面白そうです。

マクロ世界でない世界に対する熱力学です。生体内の分子機械が熱力学法則を満たすのかどうか、という素朴な疑問から始まって、ゆらぐ世界の熱力学を定式化することにより、マクロな熱力学以上に綺麗な法則があることが分かった、という話です。９０年代から始まって、現在も発展中です。

前回のアンケート、「物理未履修の方に聞かれたら「第２種永久機関となる物質があって、‥‥」とあって、第二種永久機関となる「物質」があるか、という話なんですね、自分はそういう仕組みの機械を「設計」できるかという話だとばかり思っていました。

あぁ、第２法則は、第２種永久機関となる「物質」と「仕組み」がない、ということをいっているので、第２種永久機関を考えるには、ある「物質」に対して、ある「設計」を考えることになります。２０世紀において、後者の候補を考えることで理解が発展してきましたが、例えば、知っている「物質」を使って、第２種永久機関ができるとその物質に対して確認されている熱力学関係式と矛盾してしまうので、そういう可能性はない、と考えています。論理的にありえるのは、知っている物質でも、人類が経験していない極限状況の振る舞いであったり、新規物質だったり、いまだに熱力学関係式が確認されていないものに対してでしか、第２種永久機関の可能性はない、というのが現時点での理解だと思います。

完全な熱力学関数から、熱力学的な量が「全部」出てくるというのは、熱力学的な量はこれで全部、というのがあらかじめ分かっているということですよね？他にはありません、と確信されていると。

新しい個性が加わると、熱力学関数の引数が増える、ということで記述できる、というところまで含めて完全なのです。

熱力学入門で、断熱過程以外の過程に関しては、可逆過程・不可逆過程の分類をしないのは何故ですか？

混乱するからです。例えば、キャレンなどの本では、等温過程においても、「系と熱浴を全部あわせた系」を考えて、その全体系での過程は断熱過程とみなせるので、そこで定義される可逆・不可逆から、「系の等温過程」においても可逆・不可逆をもちこんでいます。これは、間違いではないですが、そのように考えることによる利点はほぼないので、少なくとも最初に熱力学を学ぶときには、等温過程で可逆・不可逆を定義しないので十分だと思う、という判断からです。

適切なタイミングがあればで結構ですので、統計力学 BC にどう繋がっていくかのお話があると喜びます

少なくとも最終回では説明します。

先生の研究室は今も学生の募集されてるのですか？

僕はあと 6 年 3 ヶ月で退職なので、博士学位をとるまで 5 年間指導する学生を受け入れるのは来年が最後です。ただ、統計物理・動力学を研究する「統計物理・動力学分科」は来年度に新しい体制になりますので、 4 月に HP などをみてください。