

平成 21 年 6 月 8 日現在

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2006～2008

課題番号：18740240

研究課題名 (和文) 粗視化した軌道情報に基づく非平衡現象の有効記述

研究課題名 (英文) Toward effective description of nonequilibrium phenomena based on trajectory ensemble

研究代表者

小松 輝久 (KOMATSU TERUHISA)

学習院大学理学部物理学科講師

研究者番号：70348499

研究成果の概要：

熱が流れるといった典型的非平衡現象についての研究を行い、物理的基礎に関わる一連の成果を得た。具体的には、熱ラチェットモデルにおける熱輸送機構の単純な猫像、分子を分別するくらい小さいスケールでの一般的な統計的性質、分子集団という大きいスケールで大事になる物理量の候補を与えた。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,400,000	0	1,400,000
2007 年度	1,100,000	0	1,100,000
2008 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	300,000	3,800,000

研究分野：非平衡統計力学

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：非平衡・非線形物理学

## 1. 研究開始当初の背景

我々の身の周りの現象は一般に非平衡下で起こっている。とりわけ生命現象をはじめとした非平衡であることが本質的である現象は、これまでも各時代毎に様々な角度から多くの人々の興味を惹いてきた。近年、実験技術の進歩によって生体一分子レベルでの観測が可能となり、これまでは想像の世界であった領域での、まさに生き生きとした非平衡現象を我々は直接間近に見ることが出来るようになってきている。

## 2. 研究の目的

これらの華やかで真新しい観測によって吐き出される膨大な情報の山の中には、これまでの物理学が汲み出せていない自然現象の背景にある新たな“構造”の存在を予感させるものがある。我々は、この構造の同定と物理学の新たな進展を目指した研究を様々な角度から模索する。

### 3. 研究の方法

本研究では、計算機によって仮想実験室を構成し、モデル系の非平衡条件下での振る舞いを観測する。モデル系の利点、すなわちより早く徹底的な観測をより広範に行なうことが出来る利点、を活かして、非平衡現象に潜む関係式の探索を行なっていく。

我々は、非平衡系の記述には、粗視化した軌道情報が必要であると確信しており、この典型例を具体的なモデルで実際に探し出し、その一般的な記述を行っていくという方針をとる。

### 4. 研究成果

#### (1)

生体分子モータをイメージした柔らかいラチェットモデルを取扱った。この系を異なる温度の熱浴を同時に接触させることによって調べたい非平衡状態を維持することが出来る。この際に生じる一方向運動を典型的な非平衡現象を精査するプロトタイプという位置付けで研究した。計算機シミュレーションによって得られる個々の軌道と、その軌道に沿った熱流の計算を行ない、平均法として `conditioned ensemble` 法を用いることで、熱浴の温度差によってもたらされる一方向運動の方向と強さを、1ステップ当たりの熱移動量に関係付けることが出来、線形応答領域では、輸送係数の表式が1ステップ当たりの熱移動量と明確な対応をもって表現されることを示し、数値計算の結果によって、その結果を確認した。また、結果の一般性は、モデルの表式を、特定の特殊なモデルに限らない、より一般的な表式に改めても同一の議論が適用可能であることから確認された。出版論文には、この一般的なモデルの表式を反映した。

#### (2)

非平衡定常状態を統計力学的視点から研究した。特に、定常状態における微視的状態の定常分布の新しい表現として、(微視的状態に関連付けられた) エントロピー生成の組み合わせによって、理論的示唆に富む表現の構築に成功することが出来た。この成果の適用例としては、例えば温度が異なる熱浴が系に接した状況で、系内を流れる熱流によって非平衡へと駆動された非平衡定常状態や、電場によって電流が流れている定常状態など、非常に多くの非平衡定常状態を考えることが出来る。本研究によって得られた表式は、これまで既に良く知られた線形応答領域での分布表式を(当然ながら)包含しつつ、本質的な非平衡領域である非線形領域にまで

踏み込む画期的なものである。また、本研究で得られた表式の持つ特徴として、分布表式がモデルの詳細や恣意的な設定によらない一般性を持つこと、したがって広い適用範囲を持つこと、過剰エントロピー生成という熱を測定することによって原理的には観測可能な量と分布表式を結びつけるものであること、などが挙げられる。ここで出てくる過剰量の測定という視点は、昨年度までの具体的モデル研究の積み上げによって、その有用性を見出すことが出来たことも指摘しておきたい。物理系学術誌 PHYSICAL REVIEW LETTERS 誌において出版され公表された。

#### (3)

非平衡定常系における定常分布の新しい表式を梃子として、定常状態熱力学を形成する巨視的物理量の探索を行った。熱平衡状態において重要な状態量であるエントロピーは、クラウジウス関係式として知られる関係式をもって熱の測定量から決めることが出来る。我々は、このエントロピーの非平衡定常状態への拡張が、熱測定量の自然な拡張によって可能であることを発見した。この新しい関係式を拡張クラウジウス関係式と呼ぶ。実に興味深いことに、この拡張クラウジウス関係式によって非平衡定常領域にまで拡張されたエントロピー(以下、非平衡エントロピー)は、微視的な非平衡定常分布の規格化因子として登場することが判った。さらに、熱平衡状態におけるエントロピーにはシャノンエントロピーという微視的表式が存在していることが知られているが、これに対応する形で、我々の非平衡エントロピーには、対称化シャノンエントロピーという微視的表現が存在していることを発見した。面白いことには、系に特殊な条件が課されない場合、一般にこれら二つの微視的表現の差違は非平衡度の2次から明確に現れる。非平衡状態における新しい我々のエントロピーが、実際に有用であるか否かを吟味するには、まだ地道な研究が必要であるが、今後、この方向での発展があることを期待している。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 5 件)

#### (1)

Naoko Nakagawa and Teruhisa S. Komatsu,  
A heat pump at a molecular scale controlled by a mechanical force,  
Europhysics Letters 75: 22~28 (2006) 査読有

(2)

Teruhisa S. Komatsu and Naoko Nakagawa,  
Hidden heat transfer in equilibrium states  
implies directed motion in nonequilibrium  
states,  
Phys. Rev. E 73: 065107-1~4(R) (2006)  
査読有

(3)

Teruhisa S. Komatsu and Naoko Nakagawa,  
Expression for the Stationary  
Distribution in Nonequilibrium Steady  
States,  
Phys. Rev. Lett. 100: 030601-1~4 (2008)  
査読有

(4)

Teruhisa S. Komatsu, Naoko Nakagawa,  
Shin-ichi Sasa, and Hal Tasaki,  
Steady-State Thermodynamics for Heat  
Conduction: Microscopic Derivation,  
Phys. Rev. Lett. 100: 230602-1~4 (2008)  
査読有

(5)

Teruhisa S. Komatsu, Naoko Nakagawa,  
Shin-ichi Sasa, and Hal Tasaki,  
Representation of Nonequilibrium Steady  
States in Large Mechanical Systems,  
J. Stat. Phys. 134: 401-423 (2009) 査読  
有

[学会発表] (計 7 件)

(1)

T. S. Komatsu, N. Nakagawa  
2006年5月 (poster)  
Hidden heat transfer in equilibrium  
states implies directed motion in  
nonequilibrium states  
workshop Physics of Molecular Machines,  
Les Houches, France

(2)

T. S. Komatsu, N. Nakagawa  
2006年7月 (oral)  
A working mechanism of molecular heat  
engines and heat pumps  
workshop Finite Time Thermodynamics,  
UCSD, San Diego, USA

(3)

小松 輝久, 中川尚子  
化学機関における方向性運動とエネルギー  
流  
日本物理学会 2006年9月25日 千葉

大学

(4)

T. S. Komatsu, N. Nakagawa  
2007年5月 (oral)  
Nonequilibrium steady states maintained  
by multiple heat baths  
workshop "kT log2 Fluctuation Theorems  
and the Physics of Information"  
Segovia, Spain

(5)

小松輝久, 中川尚子  
非平衡定常状態の測度と過剰熱流  
日本物理学会 2007年9月21日 北海道  
大学

(6)

小松輝久, 中川尚子, 佐々真一, 田崎晴明  
非平衡定常状態の測度と過剰熱流2  
日本物理学会 2008年3月24日 近畿  
大学

(7)

小松輝久  
非平衡定常状態における定常分布から熱力  
学表現へ  
日本物理学会 2008年9月21日 岩手  
大学

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小松 輝久 (KOMATSU TERUHISA)  
学習院大学・理学部物理学科・講師  
研究者番号: 70348499

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者