

ファインマンラチェットの熱-仕事変換効率： 有効モデルに潜む罠

東北大学 工学部 応用物理学専攻 中山 洋平 *1

ファインマンラチェットを熱機関として動作させるような、熱ゆらぎが顕著なスケールで熱力学的な効率を議論する上で生じる問題について説明する。ファインマンラチェットの熱機関としての効率は、カルノー効率に達するかどうか、という一点に限っても議論が分かれている。その背後にあるのは、ファインマンラチェットの運動を異なる有効モデルで記述して、効率の議論を行ったことであることを見る。具体的には、あるモデルを出発点として、そのモデルに含まれる変数が遅く変化する変数と早く変化する変数に分けられる極限において、特異摂動による粗視化の手法で遅く変化する変数の有効モデルを導く。そして、元のモデルと有効モデルそれぞれで、熱浴で生じるエントロピーについて互いに異なる結論が得られることを示す。

1 有効モデルとは：平衡統計力学の場合

この節では、講義のサブタイトルにある**有効モデル**について説明する。

単にモデルと言ったときには、何らかの物理系の関心のある側面を数学で記述したものを指す。この節では、説明の都合で平衡統計力学を考えるので、系のハミルトニアン H と平衡状態の逆温度 β によってモデルが指定される*2。カノニカル分布の形式では、平衡状態において系の正準変数の組 (\mathbf{q}, \mathbf{p}) が特定の値を取る確率密度は、

$$P(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\exp(-\beta H(\mathbf{q}, \mathbf{p}))}{Z} \quad (1)$$

で与えられる。ここで、分配関数 Z は

$$Z := \int d\mathbf{q}d\mathbf{p} \exp(-\beta H(\mathbf{q}, \mathbf{p})) \quad (2)$$

であり、ヘルムホルツの自由エネルギーは

$$F = -\beta^{-1} \ln Z \quad (3)$$

*1 E-mail: r_nakayama@tohoku.ac.jp

*2 確率分布がどのように与えられるかをモデルに含めても良いが、いまはカノニカル分布以外の分布を使った場合との関係は考えないので、含めても含めなくてもどちらでも良い。

のように Z と結びつけられる。

次に、一部の正準変数 $(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}})$ を選ぶ。選ばれなかった正準変数をまとめて $(\mathbf{q}^{\text{comp}}, \mathbf{p}^{\text{comp}})$ と書く。 $(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}})$ が特定の値をとる確率密度を考えて、平衡統計力学のカノニカル分布と同じ形に書くと、 $P(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}}) = \int d\mathbf{q}^{\text{comp}} d\mathbf{p}^{\text{comp}} P(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ であることから、

$$g(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}}; \beta) := -\beta^{-1} \ln \int d\mathbf{q}^{\text{comp}} d\mathbf{p}^{\text{comp}} \exp(-\beta H(\mathbf{q}, \mathbf{p})) \quad (4)$$

という量^{*3}を使って、 $P(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}}) = \exp(-\beta g(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}}))/Z$ と表せる。また、このとき

$$Z = \int d\mathbf{q}^{\text{eff}} d\mathbf{p}^{\text{eff}} \exp(-\beta g(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}})) \quad (5)$$

であり、 $(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}}), g$ がそれぞれ式 (2) における $(\mathbf{q}, \mathbf{p}), H$ に対応しているので、 $g(\mathbf{q}^{\text{eff}}, \mathbf{p}^{\text{eff}})$ を知ってさえいれば、 $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ を知らなくとも、平衡統計力学の形式にしたがって F が求められる。つまり、 g は H と同様に β と合わせてモデルとみなすことができ、特に一部の変数だけで記述されていることを強調する場合に、有効モデルと呼ぶ。

重要な視点として、ほぼすべてのモデルは有効モデルに過ぎない、という見方がある。現実の系のあらゆる要素をモデルに取り入れるわけにはいかないことを考えれば、これは当たり前ではある。

2 Fokker-Planck 方程式と Langevin 方程式

次に、平衡状態から離れて非平衡状態まで扱えるようなモデルを考える。平衡状態の場合は、平衡統計力学があったために、ハミルトニアンやその相当物をモデルと考えれば良かったが、非平衡状態の場合には統計力学と呼べるほどの一般的な枠組みはいまだ確立されていないので、どのようなモデルを考えれば良いのかがそもそも不明である。そこで以下では、熱ゆらぎによって Brown 運動を示すような系を対象として、その時間発展を追うモデルを説明する^{*4}。

2.1 Fokker-Planck 方程式

Brown 運動をするような粒子の集団は、不規則な運動の結果拡散する。一様な空間中でのその拡散の様子は、拡散方程式

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \quad (6)$$

で記述される。拡散方程式は、一般には粒子密度場に関する微分方程式であるが、いまは粒子が互いに相互作用しない状況を考えて、粒子位置 x の確率密度 $P(x, t)$ についての式として書いた。 D は拡散係数である。

^{*3} この量は、有効ハミルトニアン、あるいは自由エネルギーランドスケープなどと呼ばれるが、慣習的によく使われる記号は特にない。今回は、 F と H の間ということで g にした。

^{*4} ここでは、3 節以降の内容を理解するために必要な事項に絞って説明をする。これらの話がもっと大きな体系の中でどのように位置付けられるかについては、[9] が良い文献である。

Brown 運動に加えて、外部から粒子に力がかかることによって方向性のある運動が生じる場合を考える。位置 x で、速度 $A(x)$ で粒子が流れているとすると、単位時間に x を流れる確率流は $A(x)P(x,t)$ となるので、そのとき $P(x,t)$ のしたがう偏微分方程式は

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(A(x)P(x,t) - D \frac{\partial P(x,t)}{\partial x} \right) \quad (7)$$

となる。式 (7) のような、確率密度に関する拡散型の偏微分方程式を Fokker-Planck 方程式と呼ぶ。速度 $A(x)$ が粒子に働いている力 $F(x)$ と、周囲の流体が粒子におよぼす粘性抵抗力が釣り合うことによって生じていると考え、粘性抵抗係数 γ に対して $A(x) = F(x)/\gamma$ となる。また、 $F(x)$ がポテンシャル $U(x)$ の勾配で与えられるとき、式 (7) は温度 T のカノニカル分布を定常解として持つはずなので、Einstein 関係式 $D = k_B T / \gamma$ がボルツマン定数 k_B に対して成り立つことが導かれる。ここで説明した論法は、Einstein によるオリジナル [1] と基本的には同じである。

2.2 Langevin 方程式

2.1 節で考えた粒子の運動は、Langevin 方程式でも記述することができる。Fokker-Planck 方程式が確率密度のしたがう偏微分方程式であるのに対して、Langevin 方程式は確率的な粒子の座標が満たす運動方程式である。Langevin 方程式と Fokker-Planck 方程式との関係は、力学における Newton の運動方程式と Liouville 方程式との関係に対応している。

式 (6) に対応する Langevin 方程式は、

$$\frac{dx(t)}{dt} = \sqrt{2D}\xi(t) \quad (8)$$

と書ける。ここで、 $\xi(t)$ は Brown 運動のランダム性を表すための確率変数で、ガウス分布にしたがい、平均と共分散は

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s) \quad (9)$$

を満たす。ただし、 $\langle \dots \rangle$ はアンサンブル平均を表す。共分散が δ 関数であることは、異なる時刻の Brown 運動に相関がないことを表している。式 (9) を使って、変位 $x(t) - x(0)$ の分散を計算すると、

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \left\langle \int_0^t dt' \sqrt{2D}\xi(t') \int_0^t dt'' \sqrt{2D}\xi(t'') \right\rangle = 2Dt \quad (10)$$

となり、たしかに式 (6) を解いて得られる振る舞いと一致していることがわかる*5。

Newton の運動方程式と Liouville 方程式の対応を思い出せば、式 (7) に対応する Langevin 方程式は、

$$\frac{dx(t)}{dt} = A(x(t)) + \sqrt{2D}\xi(t) \quad (11)$$

*5 確率密度が一致することを示すには、任意の次数のキュムラントを式 (6) と式 (8) から求めて等しくなることを確認すれば良い。

と書ける。Einstein 関係式を使って書き換えれば,

$$\gamma \frac{dx(t)}{dt} = F(x(t)) + \sqrt{2\gamma k_B T} \xi(t) \quad (12)$$

のように、粘性抵抗力・外部から働く力・熱揺動力の釣り合いを表す式の形に書ける。

2.3 エネルギーの平均値の時間変化

あとで系が熱浴とやりとりする熱を評価するために必要になるので、Fokker-Planck 方程式にしたがう時間発展でエネルギーの平均値がどのように変化するかを見ておく。外部から働くのはポテンシャル力であるとする、考えるべき Fokker-Planck 方程式は,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{1}{\gamma} \frac{dU(x)}{dx} P(x, t) - \frac{k_B T}{\gamma} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right) \quad (13)$$

である。エネルギーの平均値の時間微分は,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle U(x) \rangle &= \frac{d}{dt} \int dx U(x) P(x, t) = - \int dx U(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{1}{\gamma} \frac{dU(x)}{dx} P(x, t) - \frac{k_B T}{\gamma} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right) \\ &= \int dx \frac{1}{\gamma} \left[- \left(\frac{dU(x)}{dx} \right)^2 + k_B T \frac{d^2 U(x)}{dx^2} \right] P(x, t) = -\frac{1}{\gamma} \left\langle \left(\frac{dU(x)}{dx} \right)^2 - k_B T \frac{d^2 U(x)}{dx^2} \right\rangle \end{aligned} \quad (14)$$

となる。2行目に行くところでは、第1項を1回、第2項を2回部分積分した。

3 Potential switching model

準備が整ったので、あるモデルから有効モデルを得る**粗視化**の方法と、得られた有効モデルに潜んでいる罫 – **隠れたエントロピー生成**^{*6} – について説明する。ただし、ファインマンラチェットのモデルでこれらの計算を行うと、手数が多く本質的でない部分で煩雑になってしまうので、potential switching model[2] と呼ばれるおもちゃモデルで概念と計算のテクニックを説明する。

3.1 状況設定とモデル

Potential switching model では、調和ポテンシャル中にトラップされた Brown 運動する粒子を考える。もし、ポテンシャルが変化しなければ、この系は単に平衡状態へと緩和するだけであるので、ポテンシャルの中心位置が2つの値 0 あるいは L をとることができて、その位置がランダムに変化することで非平衡に駆動されている状態を考える。ちなみに、現代の実験技術であればこのような系は、実際に作ることができ、制御された実験が行える [3]。

ポテンシャルが中心位置が 0, L どちらにあるかを変数 $s = 0, 1$ で表して、粒子の運動をバネ定数 k の調和ポテンシャル中の Fokker-Planck 方程式で書く。ポテンシャルの中心位置は一定の遷移率

^{*6} 異常エントロピー生成とも呼ばれる [10]。

W で 2 点を往復するとすれば、粒子の位置 x と s の確率密度 $P(x, s, t)$ は

$$\frac{\partial P(x, s, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{k}{\gamma}(x - sL)P(x, s, t) - \frac{k_B T}{\gamma} \frac{\partial P(x, s, t)}{\partial x} \right) - WP(x, s, t) + WP(x, 1 - s, t) \quad (15)$$

という方程式にしたがう。 $-WP(x, s, t)$ は sL だったポテンシャルの中心位置が $(1 - s)L$ に変化することで $P(x, s, t)$ が減少する効果、 $WP(x, 1 - s, t)$ は中心位置が逆に変化することで $P(x, s, t)$ が増加する効果を表している。

3.2 特異摂動による粗視化

それでは、式 (15) を粗視化して有効モデルを導こう。有効モデルの変数としては x を選ぶ。注意が必要なのは、1 節で説明した平衡統計力学の場合とは異なり、残す変数を決めただけでは一般には有効モデルは得られないことである。例えば、素朴に式 (15) を s について和をとって $\partial P(x, t)/\partial t$ を求めようとすると、

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{k}{\gamma}[xP(x, t) - LP(x, s = 1, t)] - \frac{k_B T}{\gamma} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right) \quad (16)$$

となり、右辺に $P(x, s = 1, t)$ が残ってしまっていて、 $P(x, t)$ で閉じた方程式にならない。したがって、式 (16) の右辺が $P(x, t)$ で表せるような、何らかの特別な状況を考える必要がある。

よく使われるのが、時間スケール分離の条件である。式 (15) は、調和ポテンシャル中の運動の時定数 $\tau_x := \gamma/k$ と、中心位置の遷移の頻度に関する時定数 W^{-1} 、という 2 つの時間スケールを持っている。調和ポテンシャル中の運動がほとんど起こらないほどの短い時間の中に、中心位置の遷移が極めて多数回起これば、2 つのポテンシャルの効果は平均化されて、 s に関する情報がなくても時間発展が記述できることが期待できる。

この素朴な期待は、時間スケール分離の条件を使うことで、摂動論の枠組みで定式化できる。摂動的な取り扱いをするための微小パラメータを見やすくするために、無次元化した時間 $\mathcal{T} := Wt$ と位置座標 $\mathcal{X} := \sqrt{k/(k_B T)}x$ で式 (15) を書き直すと、

$$\frac{\partial P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})}{\partial \mathcal{T}} = -\frac{1}{W\tau_x} \frac{\partial}{\partial \mathcal{X}} \left(-(\mathcal{X} - s\mathcal{L})P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) - \frac{\partial P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})}{\partial \mathcal{X}} \right) - P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) + P(\mathcal{X}, 1 - s, \mathcal{T}) \quad (17)$$

となる。ただし、 $\mathcal{L} := \sqrt{k/(k_B T)}L$ 。時間スケール分離の条件は、 $\epsilon := (W\tau_x)^{-1} \ll 1$ であるので、この ϵ が摂動論の微小パラメータとなる。

粗視化の問題を、摂動的に取り扱う際に注意をしなければいけないのが、多くの場合に確率密度 $P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ を ϵ の級数で展開してはいけないということである。詳しい説明は付録 A で行うので、ここでは直観的な説明をすると、いま x の運動はゆっくりではあるが、時間をかけさえすれば初期位置から大きく動くことができる。そのため、 ϵ が小さくとも、十分大きな \mathcal{T} に対して $P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ のずれが小さいとは限らないことが問題になる。このような状況を扱う手法は、**特異摂動**と総称される。

実際の計算では、式 (17) を $P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ ではなく、別の量で表現し直してから、その量を ϵ で展開する。まず、 $P(\mathcal{X}, \mathcal{T})$ が変化することで $P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ に起こるゆっくりとした変化を表すために、 $S[P(\mathcal{X}', \mathcal{T}); \mathcal{X}, s, \mathcal{T}] = P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ を導入する。' 記号は、 S が \mathcal{X} の関数としての $P(\mathcal{X}, \mathcal{T})$ にだけ、汎関数的な依存性を持っていることを表す。また、 $\partial P(\mathcal{X}, \mathcal{T})/\partial \mathcal{T}$ を $P(\mathcal{X}, \mathcal{T})$ の汎関数とみなした $\Omega[P(\mathcal{X}', \mathcal{T}); \mathcal{X}, \mathcal{T}]$ も考える。この S と Ω を使うと、式 (17) の左辺は、

$$\frac{\partial P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})}{\partial \mathcal{T}} = \frac{\partial S[P(\mathcal{X}'', \mathcal{T}); \mathcal{X}, s, \mathcal{T}]}{\partial \mathcal{T}} + \int d\mathcal{X}'' \frac{\delta S[P(\mathcal{X}'', \mathcal{T}); \mathcal{X}, s, \mathcal{T}]}{\delta P(\mathcal{X}'', \mathcal{T})} \Omega[P(\mathcal{X}', \mathcal{T}); \mathcal{X}'', \mathcal{T}] \quad (18)$$

と書ける。あとは、 S と Ω を ϵ の級数で

$$S = S^{(0)} + \epsilon S^{(1)} + \dots, \quad \Omega = \Omega^{(0)} + \epsilon \Omega^{(1)} + \dots \quad (19)$$

と展開して、通常の摂動論を当てはめれば、 ϵ の 0 次のオーダーで得られる方程式は、

$$\frac{\partial S^{(0)}[P(\mathcal{X}', \mathcal{T}); \mathcal{X}, s, \mathcal{T}]}{\partial \mathcal{T}} = -S^{(0)}[P(\mathcal{X}', \mathcal{T}); \mathcal{X}, s, \mathcal{T}] + S^{(0)}[P(\mathcal{X}', \mathcal{T}); \mathcal{X}, 1-s, \mathcal{T}] \quad (20)$$

であり、 $\mathcal{T} \gg 1$ で

$$S^{(0)}[P(\mathcal{X}', \mathcal{T}); \mathcal{X}, s, \mathcal{T}] \rightarrow \frac{1}{2} P(\mathcal{X}, \mathcal{T}) \quad (21)$$

という、 $s=0$ と $s=1$ の確率は $1/2$ ずつという (当たり前の) 結果が得られる。 Ω への有限の寄与のうち ϵ についての最低次は、式 (21) を代入すれば、

$$\Omega^{(1)}[P(\mathcal{X}', \mathcal{T}); \mathcal{X}, \mathcal{T}] = -\frac{\partial}{\partial \mathcal{X}} \left[-\left(\mathcal{X} - \frac{\mathcal{L}}{2}\right) P(\mathcal{X}, \mathcal{T}) - \frac{\partial P(\mathcal{X}, \mathcal{T})}{\partial \mathcal{X}} \right] \quad (22)$$

と求められ、次元付きの $P(x, t)$ の方程式に戻すと、

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{k}{\gamma} \left(x - \frac{L}{2}\right) P(x, t) - \frac{k_B T}{\gamma} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right] \quad (23)$$

となる。ただし、いま $\mathcal{T} \gg 1$ という条件を式 (21) を導くときに使ったので、式 (23) は W^{-1} より十分長い時間での振る舞いを与える。

3.3 隠れたエントロピー生成

3.2 節で示したように、式 (15) のモデルは時間スケール分離の条件 $\epsilon \ll 1$ の下で式 (23) の有効モデルに粗視化することができる。この結果を踏まえると、有効モデルの性質を調べれば元のモデルを直接調べる必要はないのではないか、と期待したくなる。しかし、少なくとも熱浴で生じるエントロピーについては、粗視化の条件が満たされていたとしても、2つのモデルで異なる値が得られることを示す。

簡単のため、定常状態を考える。すると、式 (23) のモデルは、中心位置が $L/2$ に固定されているポテンシャル $U^{\text{eff}}(x) = (k/2)(x - L/2)^2$ 中の Brown 運動を記述しているので、熱浴でのエントロ

ピー生成は 0 になると考えられる。実際、Brown 運動によって生じるエネルギー平均値の変化率 [式 (14)] を、式 (23) の定常解、

$$P^{\text{st}}(x) \propto \exp\left(-\frac{U^{\text{eff}}(x)}{k_{\text{B}}T}\right) \quad (24)$$

を使って計算すれば、0 になっている。一方、式 (15) のモデルでは、 s の値にも依存するポテンシャル $U(x, s) = (k/2)(x - sL)^2$ を考えると、Brown 運動によって生じるエネルギー平均値の変化率は、

$$\left\langle \left(\frac{\partial U(x, s)}{\partial x} \right)^2 - k_{\text{B}}T \frac{\partial^2 U(x, s)}{\partial x^2} \right\rangle = \frac{k}{\gamma} \left\langle k(x - sL)^2 - k_{\text{B}}T \right\rangle \quad (25)$$

と書けて、式 (21) と式 (24) から求められる $\epsilon \rightarrow 0$ での定常分布

$$P^{\text{st}}(x, s) \propto \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{U^{\text{eff}}(x)}{k_{\text{B}}T}\right) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{k}{2k_{\text{B}}T} \left(x - \frac{L}{2}\right)^2\right) \quad (26)$$

について平均をとると、 $\frac{k^2 L^2}{4\gamma}$ となりこれは常に正である。つまり、potential switching model では、時間スケール分離の極限 $\epsilon \rightarrow 0$ でもエントロピー生成率は有限にとどまるが、同じ極限で粗視化を行って得られる有効モデルからはエントロピー生成率の値を正しく得ることができない。これが隠れたエントロピー生成の問題である。

3.4 なぜエントロピー生成を求めるのにモデルが必要か: 実験との関係

隠れたエントロピー生成の問題は、モデルを使ってエントロピー生成を求めようとする、どのようなモデルを使うかによって異なる値が得られてしまうことを意味している。このことを踏まえると、それならば、モデルを使わずに実験で直接エントロピー生成を求めれば良いのではないかと、という発想が浮かぶかもしれないが、そのようなアプローチは (少なくとも現在の実験技術では) 無理であることを以下で説明する。

まず一つ目に壁となるのが、実験でどのようにエントロピー生成を測定するか、ということである。Brown 運動が支配的な系では、熱浴に流れ込む熱は、系の典型的な時間スケールあたり $k_{\text{B}}T$ 程度でしかない。そのため、熱容量のわかっている系の温度上昇を測定することで、そこに流れ込んだ熱を定量する、という普通の方法では、極めて小さな温度上昇を検出しなくてはならないことになり、エントロピー生成を測定することは事実上不可能である。この理由により、既存の実験のほぼすべてにおいて、実験的に測定されるのはあくまで何らかの運動で、エントロピー生成はそこから作ったモデルを経由して求める、ということが行われている。

そして、もう一つの壁が、実験では余分な内部自由度が存在しうる、ということである。例えば、[3] の実験では、光ピンセットの技術によって Brown 運動する粒子にバネ的な力を加えているが、力が発生するためには、レーザー光を照射することによって粒子内部に電気双極子が生じる必要がある。その結果、電気双極子がレーザーの電場によって振動させられることによっても熱が発生して、仮に熱浴に流れ込む熱を直接測定できたとしても、本来興味があった粒子の重心運動に関するエン

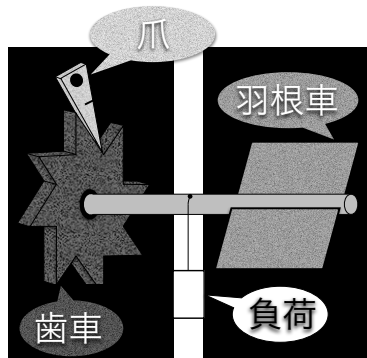


図1 ファインマンラチェットの模式図

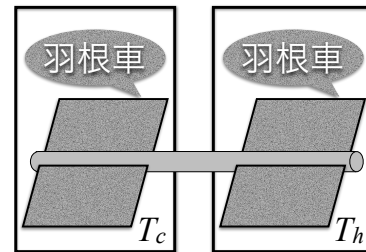


図2 [5] で高温熱浴から低温熱浴へ熱が不可逆的に流れることを示すために考察されたモデルの模式図

トロピー生成だけを求めることはできない。また、次の節で説明するファインマンラチェットの場合にも、ラチェットを構成するパーツが内部自由度を持っていると、それらの運動を通じて熱伝導が生じてしまう、という意味で同じ問題がある。

4 ファインマンラチェットにおける粗視化、有効モデル、隠れたエントロピー生成

4.1 大ざっぱな歴史的経緯

ファインマンラチェットは、非対称な形状の歯車、歯車と噛み合う爪、歯車に軸でつながれた羽根車からなる装置である(図1)。歯車と爪からなる部分は、日常的なスケールではラチェットとして働き、回転軸が一方(図1だと、羽根車側から見て時計回り)には回転できるが、逆方向の回転は妨げる機構として働く。

最初に問題となるのは、このような装置を熱ゆらぎが顕著なスケールまで小さくした場合に、単一の熱浴の熱ゆらぎだけから方向性のある仕事を取り出せるのではないか、ということである。もしこのようなことが起こるのであれば、熱ゆらぎが顕著なスケールでは熱力学第二法則が破れていることになる。しかし、実際には熱ゆらぎの顕著なスケールでは、歯車が逆方向に回転するのを抑えている爪も同じ温度でゆらぐようになるため、ラチェットの機構が期待通りに働かなくなることで、方向性のある回転は起こらなくなる。

次に議論されたのは、ファインマンラチェットを異なる温度の熱浴に接触させて、熱機関として動作させた場合の効率である。その中でも有名な Feynman がその講義 [4] で行った議論は、以下のようである。

羽根車が温度 T_h 、爪が温度 $T_c < T_h$ の熱浴に接触しているとする。まず、ラチェットが順方向に動くときには、爪を押し上げるために必要なエネルギー ϵ と負荷に対してする仕事 $L\Delta\theta$ の和に等しい熱を温度 T_h の熱浴から吸収して、歯を乗り越えたあとで余ったエネルギー ϵ を

温度 T_c の熱浴に捨てる, と考える。また, 逆方向に回転するときは, 温度 T_c の熱浴から ϵ の熱を吸収して, $\epsilon + L\Delta\theta$ の熱を温度 T_h の熱浴に捨てるものとする。ここで, ラチェットが順・逆方向に歯車の歯 1 つ動く単位時間の確率を考えると, 温度 T_h, T_c の熱ゆらぎによって歯の一番高いところまで回る確率は, それぞれ $\exp\left(-\frac{\epsilon + L\Delta\theta}{k_B T_h}\right), \exp\left(-\frac{\epsilon}{k_B T_c}\right)$ に比例する (k_B はボルツマン定数)。したがって, 平均回転速度が 0 になる極限で,

$$\frac{\epsilon + L\Delta\theta}{k_B T_h} = \frac{\epsilon}{k_B T_c} \quad (27)$$

であるので, このとき温度 T_h の熱浴から吸収した熱と負荷に対してした仕事の比で定義される効率は

$$\eta := \frac{L\Delta\theta}{\epsilon + L\Delta\theta} = 1 - \frac{T_c}{T_h} \quad (28)$$

となり, カルノー効率が達成される。

これに対して, Parrondo と Español は, 異なる温度の熱浴に同時に接触している系は非平衡状態にあるため, 高温熱浴から低温熱浴へ不可逆的に熱が流れ, カルノー効率は達成されなくなると主張した [5]。また, 彼らはファインマンラチェットそのものではないが, 回転軸でつながれた 2 つの羽根車が異なる温度の熱浴に接している系を解析して, 確かに熱が不可逆的に流れることを示した (図 2)。

4.2 粗視化によって結び付けられる有効モデルの一群

Feynman の議論では, 歯車の歯 1 つ分の回転に着目する, という点で有効モデルを考えていることになる。そのため, その有効モデルがどのように導けるかをまず明らかにする必要がある。以下では, [6] で示した結果だけをまとめる。

粗視化の出発点となるモデルでは, 軸の角度 θ , 爪の高さ x , それらに共役な運動量 P, p を変数にとる。軸の羽根車と爪が異なる熱浴に接していることを, 熱浴の温度 T_h, T_c と粘性摩擦係数 Γ, γ を使ってモデル化すると, Langevin 方程式の形で

$$\begin{aligned} \frac{d\theta(t)}{dt} &= \frac{P(t)}{M}, & \frac{dP(t)}{dt} &= -\frac{\Gamma}{M}P(t) - \frac{\partial U(\theta(t), x(t))}{\partial \theta(t)} + f + \sqrt{2\Gamma k_B T_h} \xi(t) \\ \frac{dx(t)}{dt} &= \frac{p(t)}{m}, & \frac{dp(t)}{dt} &= -\frac{\gamma}{m}p(t) - \frac{\partial U(\theta(t), x(t))}{\partial x(t)} + \sqrt{2\gamma k_B T_c} \zeta(t) \end{aligned} \quad (29)$$

のように書くことができる。 M は軸の回転に関する慣性モーメント, m は爪の質量, f は負荷が加える外部トルクである。 $\xi(t), \zeta(t)$ は互いに独立な平均 0 のガウス分布にしたがう確率変数で,

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t-t'), \quad \langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \delta(t-t'), \quad \langle \xi(t)\zeta(t') \rangle = 0 \quad (30)$$

を満たす。ポテンシャルエネルギー $U(\theta, x)$ は, 爪を抑えるバネのポテンシャルエネルギー $kx^2/2$ と, 歯車の形状 $\phi(\theta)$ に依存した歯車と爪の相互作用エネルギー $\kappa(x - \phi(\theta))^2/2$ からなると考える。

まず, m/γ が他の時間スケールに比べて短い極限において, 式 (29) は,

$$\begin{aligned}\frac{d\theta(t)}{dt} &= \frac{P(t)}{M}, & \frac{dP(t)}{dt} &= -\frac{\Gamma}{M}P(t) - \frac{\partial U(\theta(t), x(t))}{\partial \theta(t)} + f + \sqrt{2\Gamma k_B T_h} \xi(t) \\ \gamma \frac{dx(t)}{dt} &= -\frac{\partial U(\theta(t), x(t))}{\partial x(t)} + \sqrt{2\gamma k_B T_c} \zeta(t)\end{aligned}\quad (31)$$

と粗視化できる。さらに, x の時定数 $\gamma/(k + \kappa)$ が残りの他の時間スケールに比べて短い極限で,

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = \frac{P(t)}{M}, \quad \frac{dP(t)}{dt} = -\frac{G^{\text{eff}}(\theta(t))}{M}P(t) - \frac{\partial U^{\text{eff}}(\theta(t))}{\partial \theta(t)} + f + \sqrt{2G^{\text{eff}}(\theta(t))k_B T^{\text{eff}}(\theta(t))}\xi(t)\quad (32)$$

と粗視化できる。ただしここで, 有効モデルにおける粘性摩擦係数, ポテンシャル, 温度を

$$G^{\text{eff}}(\theta) := \Gamma + \gamma\phi'(\theta)^2, \quad U^{\text{eff}}(\theta) := \frac{k}{2}\phi(\theta)^2, \quad T^{\text{eff}}(\theta) := \frac{\Gamma T_h + \gamma\phi'(\theta)^2 T_c}{\Gamma + \gamma\phi'(\theta)^2}\quad (33)$$

と定義した。式 (32) は, ポテンシャルと非一様な温度の下で動作する Büttiker-Landauer モーターと呼ばれるブラウニアンラチェット [8] と同じ形のモデルになっている。式 (32) は, $M/G^{\text{eff}}(\theta)$ (あるいはその上限値 M/Γ) が残りの他の時間スケールに比べて短い極限において, $G^{\text{eff}}(\theta), U^{\text{eff}}(\theta), T^{\text{eff}}(\theta)$ で特徴付けられる θ の Langevin 方程式に粗視化することができる。そして最後に, θ がゆらぐ時間スケールが歯車の歯 1 つ分回転する時間スケールに比べて短いとき, Feynman が議論したような有効モデルを導くことができ, 順・逆方向の回転が単位時間に起こる確率はそれぞれ

$$R^{\text{F}} = \frac{1}{\tau_s} \exp \left[\int_{\theta_{\text{bottom}}}^{\theta_{\text{top}}^+} \frac{-U^{\text{eff}}'(\theta) + f}{T^{\text{eff}}(\theta)} d\theta \right], \quad R^{\text{B}} = \frac{1}{\tau_s} \exp \left[\int_{\theta_{\text{bottom}}}^{\theta_{\text{top}}^-} \frac{-U^{\text{eff}}'(\theta) + f}{T^{\text{eff}}(\theta)} d\theta \right]\quad (34)$$

と書ける。ここで, τ_s は共通の時定数で, $\theta_{\text{bottom}}, \theta_{\text{top}}^{\pm}$ はそれぞれ U^{eff} が極小になる角度, U^{eff} が極大になる角度のうち θ_{bottom} の順・逆方向で一番近い角度である。式 (34) を使うことによって, 負荷に対する回転速度の依存性, 熱浴のエントロピー生成, 熱-仕事変換効率といった様々な性質を具体的に計算することができる*7。

4.3 ファインマンラチェットにおける隠れたエントロピー生成

3.3 節で説明した隠れたエントロピー生成の概念をふまえると, Feynman が使った有効モデルが導かれたからといって, 熱機関としての効率の議論が正当化されるとは限らないことがわかる。実際, 4.2 節で説明した一連の粗視化で同じように計算すると, 変数を θ, P, x から θ, P に減らす際と, θ, P から θ に減らす際の 2 回, 隠れたエントロピー生成が現れ, ファインマンラチェットが熱機関として働くような条件では, それらは常に正の値をとることが示せる*8 [6]。つまり, 有効モデルの

*7 ただし, いま $T^{\text{eff}}(\theta)$ は連続的な値をとり得るので, 効率を議論するためには, $T^{\text{eff}}(\theta)$ が二値しかとらないような状況を考える, あるいは熱浴の温度が連続的に変化している場合に効率の定義を拡張する [11], などのことが必要になる。

*8 ここで隠れたエントロピー生成の符号がいずれも正になることは単なる偶然ではない。隠れたエントロピー生成は, 一定の条件の下で積分型ゆらぎの定理と呼ばれる等式を満たし, 積分型ゆらぎの定理から隠れたエントロピー生成 (の平

範囲でファインマンラチェットが可逆的に動作しているように見えたとしても、元のモデルの立場で見ると定常的に高温熱浴から低温熱浴へと熱が流れていて不可逆性を生じさせている。その結果、カルノー効率は達成することができなくなる。加えて、Feynman の有効モデルが導かれる極限において、熱浴のエントロピー生成に対して隠れたエントロピー生成が占める割合は 100% となるので、有効モデルでエントロピー生成を求めることには、定性的な意味すらないということになる。

付録 A 摂動論が破綻すること

この節では、 $P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ を ϵ の級数で展開して式 (17) に摂動論を適用すると、なにがうまくいかなくなるか見る。 $P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ が

$$P(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) = P^{(0)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) + \epsilon P^{(1)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) + \epsilon^2 P^{(2)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) + \dots \quad (35)$$

と展開できるとすると、摂動論の最低次で解くべき式は、式 (35) を式 (17) に代入して $O(\epsilon^0)$ の項を集めた

$$\frac{\partial P^{(0)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})}{\partial \mathcal{T}} = -P^{(0)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) + P^{(0)}(\mathcal{X}, 1-s, \mathcal{T}) \quad (36)$$

となり、その解は

$$P^{(0)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) = \varphi(\mathcal{X}) + \left(P^{(0)}(\mathcal{X}, s, 0) - \varphi(\mathcal{X}) \right) \exp(-\mathcal{T}) \quad (37)$$

と書ける。ここで、 $\varphi(\mathcal{X})$ は s, \mathcal{T} に依存しない関数なので、いま興味がある $\mathcal{T} \sim \epsilon^{-1}$ の範囲では $P^{(0)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ は変化しない。そこで、摂動論の次の次数を考えると、解くべき式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial P^{(1)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})}{\partial \mathcal{T}} = & -\frac{\partial}{\partial \mathcal{X}} \left(-(\mathcal{X} - s\mathcal{L})P^{(0)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) - \frac{\partial P^{(0)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})}{\partial \mathcal{X}} \right) \\ & - P^{(1)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) + P^{(1)}(\mathcal{X}, 1-s, \mathcal{T}) \end{aligned} \quad (38)$$

となる。しかし、式 (38) の右辺には $-\frac{\partial}{\partial \mathcal{X}} \left(-(\mathcal{X} - s\mathcal{L})\phi(\mathcal{X}) - \frac{\partial \phi(\mathcal{X})}{\partial \mathcal{X}} \right)$ という \mathcal{T} に依存しない項が含まれているため、 $\mathcal{T} \sim \epsilon^{-1}$ の範囲では、 $P^{(1)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ は $O(\epsilon^{-1})$ まで大きくなってしまう。式 (35) のように展開できると言うときには、各次数の係数 $P^{(n)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T})$ は ϵ に依存しないことが必要であるので、 $P^{(1)}(\mathcal{X}, s, \mathcal{T}) = O(\epsilon^{-1})$ となることは、式 (35) のような展開はできず、したがって摂動論的取り扱いがうまくいかないことを意味している。

均値) が非負であることが導かれる。Potential switching model で隠れたエントロピー生成が正であったことも、この積分型ゆらぎの定理の帰結である。一方、隠れたエントロピー生成が負になる、すなわち元のモデルより、有効モデルで求めた方がエントロピー生成が大きくなる、という今回見た 3 つの例とは逆の場合もある。例えば、可逆なモデルを粗視化することによって不可逆な有効モデルが導出される、という不可逆性の起源とも関係する問題は、隠れたエントロピー生成が負になる状況である。隠れたエントロピー生成が負になるときは、速度のような時間を反転したときに符号が反転する (時間反転反対称な) 変数が本質的な役割を果たすことがわかっている [7]。

謝辞

[6] の共同研究者でもある、川口喬吾さんと中川尚子さんには、この講義ノートの構成を考える上で本質的なアドバイスをいただいたことを深く感謝します。また、3.4 節、脚注*8、付録 A は講義中に出た質問を踏まえて加筆したものです。講義の参加者の方々に感謝します。

参考文献

- [1] A. Einstein, *Annalen der Physik* **17**, 549-560 (1905).
- [2] S.-W. Wang, K. Kawaguchi, S. Sasa, and L.-H. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 070601 (2016).
- [3] S. Toyabe, H.-R. Jiang, T. Nakamura, Y. Murayama, and M. Sano, *Phys. Rev. E* **75**, 011122 (2007).
- [4] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics* (Basic Books, New York, 2010).
- [5] J. M. R. Parrondo and P. Español, *Am. J. Phys.* **64**, 1125 (1996).
- [6] Y. Nakayama, K. Kawaguchi, and N. Nakagawa, *Phys. Rev. E* **98**, 022102 (2018).
- [7] K. Kawaguchi and Y. Nakayama, *Phys. Rev. E* **88**, 022147 (2013).
- [8] M. Büttiker, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **68**, 161 (1987).
- [9] K. Sekimoto, *Stochastic Energetics*, Lecture Notes in Physics Vol. 799 (Springer, Berlin, 2010).
- [10] A. Celani, S. Bo, R. Eichhorn, and E. Aurell, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 260603 (2012).
- [11] S. Bo and A. Celani, *Phys. Rev. E* **87**, 050102 (2013).