

鎖状系のエネルギー分配と遅い緩和： Boltzmann-Jeans 則

小西 哲郎 〈中部大学工学部共通教育科 tkonishi@isc.chubu.ac.jp〉

柳田 達雄 〈大阪電気通信大学工学部基礎理工学科 yanagita@osakac.ac.jp〉

自然界に存在する多体系には固体や液体、気体など様々なものがある。そのなかで、高分子やタンパク質、DNA のような、要素が鎖状に繋がった系を「鎖状系」と呼ぶ。メガフロートや宇宙ステーションの操作アームのような、剛性の高い部品が接続された人工構造物も、広い意味で鎖状系といえる。このように、多くの系が鎖状系とみなせ、これらの運動の理論的解明と機能の理解は応用上も重要である。本稿では、これら鎖状系をハミルトン力学系で記述し、その運動様式、特にエネルギー分配を考える。

鎖状系の最も単純なモデルとして、質量の等しい質点が一列につながった系を考える。要素間の相互作用ポテンシャルが急峻であると考え、生物物理や化学物理の分野でよく行われるように、質点間の結合を軽い剛体棒で置き換える。この系は *freely jointed chain* と呼ばれ、隣合う質点間の距離が一定という拘束がある。

はじめに、鎖状系の熱平衡状態を考える。*Freely jointed chain* は、熱平衡状態において、各質点の平均運動エネルギーは等しくないこと、特に、末端部でそれは過剰になることを、数値計算および解析計算により示した。末端部が大きく動くことは直感的に明らかに思えるが、運動エネルギーの意味でも末端部で激しい運動が起きているのである。

拘束がある系は、よく知られた形式のエネルギー等分配則ではなく、一般化された等分配則に従う。逆に言えば、熱平衡状態では一般化された等分配則の帰結として平均運動エネルギーが末端部で過剰になるという系統的な不均一性が生じる。

次に、質点が剛体ではなくバネでつな

がった鎖状系 *bead-spring model* を考える。この系では熱平衡状態において通常のエネルギー等分配則が成立する。我々は数値計算により (i) 末端部の運動エネルギーが過剰となる状態が過渡的に発生すること、(ii) 過渡状態から等分配状態への緩和時間 τ が、バネ定数 k が大きい時 $\tau \propto \exp(c\sqrt{k})$ ($c > 0$ は定数) でよく表され非常に長くなることを示した。

バネが固い時に緩和が遅いということは、速い運動をする自由度、つまり高振動数の自由度 (この場合はバネの振動) にエネルギーが行き渡るのに時間がかかることを意味している。これは、量子力学の発見以前に、Boltzmann と Jeans が古典力学の範囲内で考察したことである。もちろん、この高振動数自由度の凍結という問題は量子力学の発見によって決着が付けられたが、それとは独立に、Benettin らはこのアイデアを精密化し、この凍結問題を古典力学の範囲内で解決した。これを鎖状系に適用したのが $\tau \propto \exp(c\sqrt{k})$ なる表式である。この意味で、この遅い緩和過程を“Boltzmann-Jeans 的緩和”と呼び、この指数関数型の表式を“Boltzmann-Jeans 則”と呼ぶ。バネ定数 k が大きくなると Boltzmann-Jeans 則により緩和時間が非常に長くなることで、運動エネルギーの不均一性を実際に観測できる可能性がある。

ここで示された鎖状系のエネルギー分配の不均一性と遅い緩和は、局所温度の概念や天然変性蛋白質の運動形態とも関連し、自然界および人工物における鎖状系および拘束がある系の運動形態について新たな見方をもたらすことを期待したい。

—Keywords—

鎖状系とそのモデル：

要素が鎖状、すなわち一次的に接合された系。ここではそのモデルとして *freely jointed chain* および *bead-spring model* を扱う。*Freely jointed chain* とは、質点が軽い剛体棒で一次的に結合されたモデル。質点間の距離が一定という拘束があり、一般化されたエネルギー等分配則に従う。*Bead-spring model* とは、質点がバネで一次的に結合されたモデル。通常のエネルギー等分配則に従う。

エネルギー等分配則：

温度 T の熱平衡状態にある古典力学系を考える。通常のエネルギー等分配則とは、自由度あたりの運動エネルギーの平均値が自由度によらず $(1/2)k_B T$ (k_B はボルツマン定数) となること。一般化されたエネルギー等分配則とは、全運動エネルギー K 、自由度 i の正準運動量 p_i ($i=1, 2, \dots, N$) を用いて作られる量 $(1/2)p_i(\partial K/\partial p_i)$ の平均値が自由度 i によらず $(1/2)k_B T$ となること。拘束のある系や相対論的な系のように、 K が p_i と質量 m_i を用いて $(1/(2m_i))p_i^2$ の和の形には書けない場合にも適用することができる。

Boltzmann-Jeans 則：

硬いバネを含む系のように、ある古典力学系が、速く運動する部分系と遅く運動する部分系との結合形に表されている場合を考える。2つの部分系の持つ時間スケールの比が大きい場合に、これらの部分系間のエネルギー交換率が、この比について指数的に小さくなること。“Boltzmann-Jeans conjecture”とも呼ばれる。