2018 年度 統計物理学 III(3. と 4.) 授業ノート

吉森 明

2018 年 7 月 4 日

宿題の締め切り: T1 で一端宿題を提出していただきます。単位の必要な人は宿題を

6 月 7 日 (木) 午後 4:00

までに提出して下さい。

目次

3 ブラウン運動

3.1 ブラウン運動とランダム力 (5 月 17 日)

(シラバスから名前を変更)

目標 不規則な運動の特徴をわかり、ランダム力が何かについてイメージをつかんで、仮定 (下記 **「仮定」** 参照) を分かる。

目次 (1) 不規則な運動
(2) ブラウン運動のモデルとランダム力
(3) まとめ

仮定 t を時間、V をブラウン運動する微粒子の速度とした時、ブラウン運動を次の式で表す。

$$m\dot{V}(t) = -\lambda V(t) + R(t) \tag{3.1.1}$$

ただし、m は微粒子の質量、λ は抵抗係数、を表す。また、$R(t)$ はランダム力で

$$\langle R(t)\rangle = 0 \tag{3.1.2}$$

$$\langle R(t_1)R(t_2)\rangle = D\delta(t_1 - t_2) \tag{3.1.3}$$

(D は正の定数) を満たす。

結論 (3.1.1) 式は、不規則な運動を再現する **モデルとして有効**。

例題 (この subsection が終わった段階で解けるようになる問題。宿題ではない。) 水の中でブラウン運動する微粒子の複雑な運動を (3.1.1) 式で表すとき、「ランダム力」が持たなければいけない性質は何か。

(1) 不規則な運動

○ 不規則な運動の代表例としてブラウン運動がある。ブラウン運動とは、花粉を水に溶かすとそこから出てくる微粒子が水の中で行う非常に細かい運動をいう。花粉の微粒子の他、牛乳、墨汁、線香等でも観察できる。この現象は、ブラウンの研究より以前から知られていたが、ブラウンが系統的な研究をしたので、この名前がついている。ブラウンの主な発見は、ブラウン運動が生命活動とは関係ないと言う事だ。

○ www にあるブラウン運動のページ

　ブラウン運動のページは www にたくさんある。実際に動いている様子を見る事の出来る動画は、

http://www.phys.u-ryukyu.ac.jp/WYP2005/brown.html

シミュレーションは、

http://www.geocities.co.jp/Hollywood/5174/indexb.html

「4. ブラウン運動のシミュレーション」で、粘性抵抗と温度を選んで開始ボタンを押すと粒子が動き出す。軌跡も書ける。

○ どういう運動を不規則と感じるのか。

*規則的な運動:

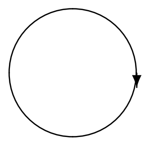


図 3.1.1

(2) ブラウン運動のモデル

○ 1908 年、ランジュンバンは、ブラウン運動を表す数式をつくった。

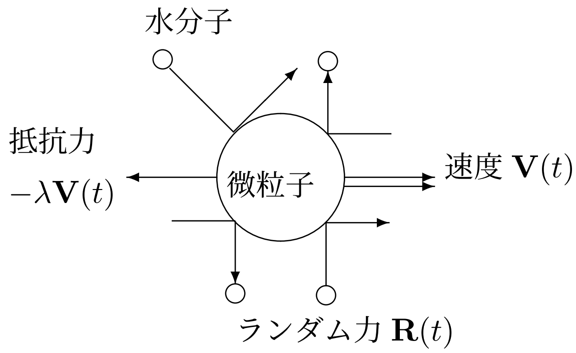


図 3.1.2

微粒子は、水分子から 2 種類の力を受ける。時刻を t とすると、

1. 止まっていても受ける力 (**ランダム力**): $\mathbf{R}(t)$

2. 動きを止めようとする力 (抵抗力): $-\lambda\mathbf{V}(t)$

運動方程式は、m を微粒子の質量とすると、

$$m\dot{\mathbf{V}}(t) = -\lambda\mathbf{V}(t) + \mathbf{R}(t) \tag{3.1.4}$$

○ ランダム力 $\mathbf{R}(t)$ の性質

①$\mathbf{R}(t) \propto \delta(t-t_0)$: デルタ関数 ($t_0$ は力の働く時刻)

②$\mathbf{R}(t)$ は確率変数。

■もし、毎回同じ力が働くとすると、100 発 100 中で必ず予想出来る。 たとえば、フィギュアスケートではストレートラインステップという技があるが、これはとても複雑な動きをする。しかし、試合のたびにまったく同じ動きを示すので、不規則な運動ではない。

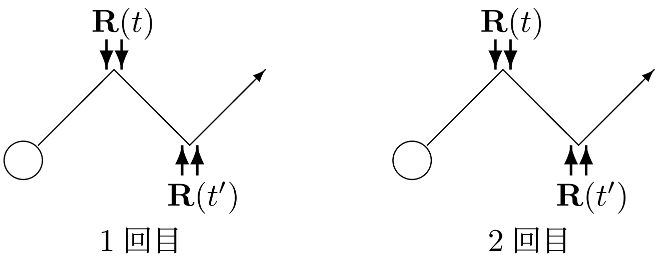


図 3.1.3

■不規則な運動は測るたびに R(t) がちがう。 100 発 100 中では予想出来ない。つまり、$\mathbf{R}(t)$ **は確率変数**。

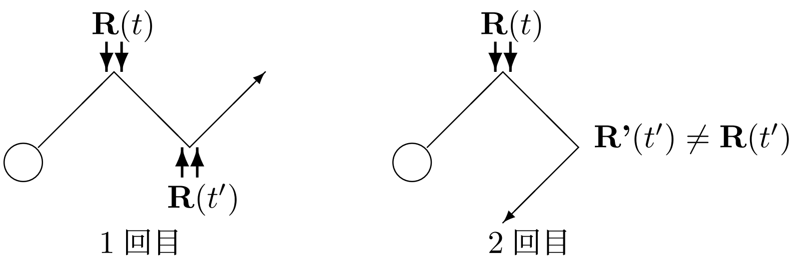


図 3.1.4

■ 確率変数なので、平均 $\langle \mathbf{R}(t) \rangle$ や相関 $\langle \mathbf{R}(t_1)\mathbf{R}(t_2) \rangle$ が定義できる。 また、もっと一般的に $f(x_1, x_2, \dots)$ を任意の多変数関数とする時、$\langle f(\mathbf{R}(t_1), \mathbf{R}(t_2), \dots) \rangle$ も定義できる

(宿題 16 参照)。今、i 番目の測定で得られた $\mathbf{R}(t)$ を $\mathbf{R}_i(t)$ と書くと、次の関係が成り立つ。

$$\langle \mathbf{R}(t) \rangle = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{R}_i(t) \tag{3.1.5}$$

$$\langle \mathbf{R}(t)\mathbf{R}(t') \rangle = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{R}_i(t)\mathbf{R}_i(t') \tag{3.1.6}$$

$$\langle f(\mathbf{R}(t), \mathbf{R}(t'), \dots) \rangle = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f(\mathbf{R}_i(t), \mathbf{R}_i(t'), \dots) \tag{3.1.7}$$

n は測定回数。これらの平均は**時間平均では無い**ことに注意しなさい。

○ $R(t)$ の 2 つの性質①②を満たす最も簡単なモデル (他にもあるかもしれない) として (3.1.2) 式と (3.1.3) 式を仮定する。(3.1.2) 式は全ての時刻で平均が 0 を表す。(3.1.3) 式は、他の時刻との相関が無い事を表す。

宿題:

13 (10 点) 講義では不規則な運動として、次の 2 点の性質を挙げた。

(a) 軌道がガタガタしている。(いたるところ微分不能)

(b) 同じ初期条件から始めても違う運動。つまり予測できない。

上の 2 つの性質を同時に満たすのに、規則的な感じがしてしまう例を挙げなさい。

14 (8 点) 1 次元の微粒子のブラウン運動が

$$m\dot{V}(t) = -\lambda V(t) + R(t) \tag{3.1.8}$$

で表されているとする。ただし、$V(t)$ は微粒子の速度を表す。$R(t)$ はランダム力で、(3.1.2)、(3.1.3) を満たす。$t=0$ で、$V(0) = V_0$ が分かっているときに、$\langle V(t) \rangle$ を求めなさい。

15 (20 点) 宿題 14 で、$t=0$ で、$V(0)=0$ のときに、$\langle V(t)V(t') \rangle$ を $t<t'$ と $t>t'$ の場合に分けて計算しなさい。

16 (15 点) $R(t) \propto \delta(t-t_0)$ という性質から、$R(t)$ は一般に $R(t) = \sum_i d_i \delta(t-t_i)$ と書くことが出来る。この場合、$R(t)$ が確率変数という事は、$\{d_1, d_2, \dots\}$ と $\{t_1, t_2, \dots\}$ が確率変数となることと等価になっている。$\{d_1, d_2, \dots\}$ と $\{t_1, t_2, \dots\}$ に対してどのような確率分布 $\rho(d_1, d_2, \dots, t_1, t_2, \dots)$ を考えれば、

(3.1.2) 式と (3.1.3) 式を満たすか、具体的な $\rho(d_1, d_2, \ldots, t_1, t_2, \ldots)$ の式の形を 1 つ以上書きなさい。

宿題の訂正: 宿題 5 は、$g(\epsilon) > 0$ を使わずに解答して下さい。
また、**宿題** 10. は、BEC のときの式を解いて下さい。つまり、$T < T_c$ です。
謹んでお詫びするとともに訂正致します。

3.2 ランジュバン方程式 (5 月 24 日)

目標 ランジュバン方程式の形を覚え、**ブラウン運動以外にも不規則な時間変化に応用できる**ことを理解する。

目次 (1) はじめに
(2) ランジュバン方程式
(3) 具体例
(4) まとめ

仮定 t を時間、$X(t)$ を不規則に時間変化する変数とすると、次の式をランジュバン方程式と呼ぶ。

$$\text{線形}: \qquad \dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t) \tag{3.2.1}$$

$$\text{非線形}: \qquad \dot{X}(t) = F(X(t)) + R(t) \tag{3.2.2}$$

ただし、γ は定数、$F(X(t))$ は $X(t)$ の関数を表す。また、$R(t)$ はランダム力で

$$\langle R(t) \rangle = 0 \tag{3.2.3}$$

$$\langle R(t_1) R(t_2) \rangle = D\delta(t_1 - t_2) \tag{3.2.4}$$

(D は正の定数) を満たす。さらに、$t = 0$ の $X(0)$ の値も分布して、

$$\text{線形}: \qquad \langle X(0) R(t) \rangle = 0 \qquad t \geq 0 \tag{3.2.5}$$

$$\text{非線形}: \qquad \langle g(X(0)) R(t) \rangle = 0 \qquad t \geq 0 \tag{3.2.6}$$

ここで、 $g(X)$ は X の任意関数

結論 ランジュバン方程式は、不規則な運動を再現する**モデルとして有効**。

例題 (この subsection が終わった段階で解けるようになる問題。宿題ではない。) 回路に電源をつながなくても、微小な電流が流れることがある。電気容量が C のコンデンサーと値が R の抵抗をつないで、コンデンサーにたまる電荷 $Q(t)$ の時間変化を記述する式を導け。

(2) ランジュバン方程式

○ 微粒子の運動では、注目している物理量は、微粒子の速度 V だった。一般に、不規則な時間変化をする量 $X(t)$ に対して、ランジュバン方程式を考える事ができる。

○ (3.2.5) 式の条件: $t > 0$ で

- $R(0)$ は $X(t)$ に影響するので、$\langle R(0)X(t)\rangle = 0$ とは限らない。
- 一方、$X(0)$ は未来のランダム力 $R(t)$ に影響しないと仮定する。つまり、独立なので、

$$\langle R(t)X(0)\rangle = \langle R(t)\rangle \langle X(0)\rangle = 0 \tag{3.2.7}$$

(3) 具体例

①水中の微粒子 (1 次元)

(3.1.1) 式の両辺を微粒子の質量 m で割ると、

$$\dot{V}(t) = -\gamma V(t) + \frac{R(t)}{m}, \qquad \gamma = \frac{\lambda}{m} \tag{3.2.8}$$

$X(t) = V(t)$ すれば、線形ランジュバン方程式を表す (3.2.1) 式に対応する。

②熱雑音の回路 (例題)

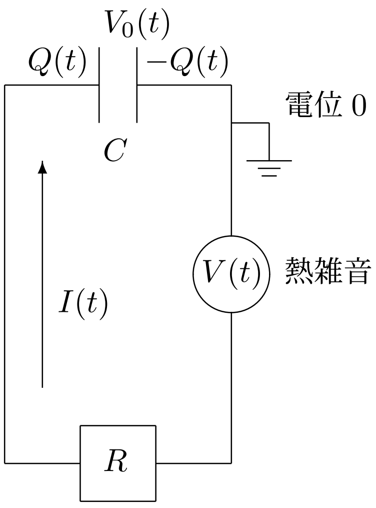


図 3.2.1

今、電流 $I(t)$ の向きを図の様に取ると、熱雑音の電圧 $V(t) = 0$ のとき、コンデンサーにかかる電圧 $V_0(t) > 0$ ならば $I(t) < 0$ なので、

$$-V_0(t) = RI(t) \tag{3.2.9}$$

$V(t) = 0$ でなければ、抵抗にかかる電圧は $-V_0(t)+V(t)$ だから、

$$-V_0(t) + V(t) = RI(t) \tag{3.2.10}$$

一方、コンデンサーの電気容量の定義から、

$$V_0(t) = \frac{Q(t)}{C} \tag{3.2.11}$$

および、$I(t) = \dot{Q}(t)$ を (3.2.10) 式に代入して

$$R\dot{Q}(t) = -\frac{Q(t)}{C} + V(t) \tag{3.2.12}$$

$\gamma = 1/(RC)$、$R(t) = V(t)/R$ とすれば線形ランジュバン方程式に対応する。

③レーザーにトラップされたコロイド粒子

水中のコロイド粒子は、放っておけばブラウン運動して、動き回る。しかし、レーザーによってある程度、位置を束縛する事ができる。

今、コロイドの 3 次元の位置を $\mathbf{X}(t)$、レーザーが作るポテンシャルを $u(\mathbf{X})$、コロイドの質量を m とすると、運動方程式は、

$$m\ddot{\mathbf{X}}(t) = -\lambda\dot{\mathbf{X}}(t) - \nabla u(\mathbf{X}) + \mathbf{R}'(t) \tag{3.2.13}$$

ここで、$-\lambda\dot{\mathbf{X}}(t)$ は水分子からの抵抗、$\mathbf{R}'(t)$ はランダム力を表す。m が充分小さい極限で加速度の項は無視できるので、

$$\dot{\mathbf{X}}(t) = -\frac{1}{\lambda}\nabla u(\mathbf{X}) + \frac{\mathbf{R}'(t)}{\lambda} \tag{3.2.14}$$

つまり、コロイド粒子は多変数の非線形ランジュバン方程式にしたがう事がわかる。

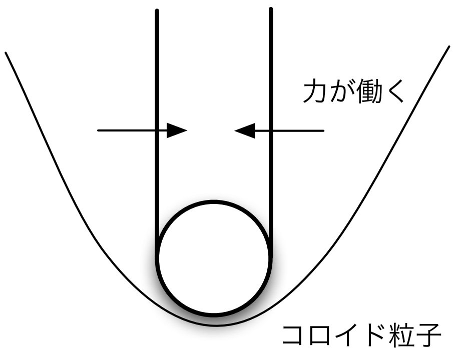


図 3.2.2

④ スチルベンの異性化反応

クラマースは 1940 年に化学反応をランジュバン方程式で考えた。ここでは、スチルベンの異性化反応を例に説明する。スチルベンは C6H5CH=CHC6H5 で表される炭化水素の 1 種で、クラマースの理論を実験的に検証するためにその異性化反応が多く研究された。炭素の 2 重結合は 1 重結合に比べ回転しにくいが、安定な位置が 2 つあることが知られている。溶液中では、液体分子がぶつかってエネルギーを得ることができるので、片方の安定な所からもう片方の安定な所に回転する。これが異性化反応と考えられる。クラマースの理論にしたがえば、2 重結合のまわりの回転角を時刻 t の関数として $\Theta = \Theta(t)$ と書くと、

$$\dot{\Theta}(t) = -\gamma\frac{du(\Theta(t))}{d\Theta(t)} + R(t) \tag{3.2.15}$$

のような非線形ランジュバン方程式が書ける。ここで、γ は正の定数、$u(\Theta)$ は Θ についてのポテンシャルを表し、$\Theta = 0°$ と $180°$ に極小が、その間に極大がある。$R(t)$ は液体分子から受けるランダム力を表す。

(4) まとめ

○ 不規則に変化する物理量 $X(t)$ をランジュバン方程式でモデル化

$$\boxed{\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t)} : \qquad \text{線形ランジュバン方程式} \tag{3.2.16}$$

$$\boxed{\dot{X}(t) = F(X(t)) + R(t)} : \qquad \text{非線形ランジュバン方程式} \tag{3.2.17}$$

ブラウン運動だけでなくいろいろ使える。

○ 上の $X(t)$ のように確率変数が時間変化するものを確率過程という。それに対して、初期値から一意的に決まるものを決定論という。

○ (3.2.4) 式の条件

(3.2.4) 式をフーリエ変換すると、デルタ関数は定数になる。これは色に例えると白なので、白色雑音ということがある。

宿題:

17 **(8 点)** ランダム力 $R(t)$ がデルタ関数になぜ比例するか、その理由を不規則な運動の性質からまとめなさい。

18 **(8 点)** (3.2.1) 式と (3.2.3)-(3.2.5) 式で計算される $X(t)$ が不規則な時間変化をすることを数値的に確かめよ。ただし、時刻 t を $t_i (i = 1, \ldots, n)$ のように離散化し、(3.2.1) 式を

$$X(t_{i+1}) - X(t_i) = -\gamma X(t_i)\Delta t + W(t_i) \tag{3.2.18}$$

のように差分化しなさい。$W(t_i)$ は、それぞれの時間で独立なガウス分布 (平均 0、分散 $D\Delta t$) になるように乱数を使って値を決めよ。適当な初期条件 $X(t_1)$ を与えて、実際に計算機で計算して、横軸 t、縦軸 $X(t)$ のグラフを書け。γ や D も適当に与えて良い。ただし、γ の大きさを 10 倍以上変え、グラフの形がどう変るか調べよ。

19 **(20 点)** 線形ランジュバン方程式 (3.2.1) 式で、(3.2.3) 式、(3.2.4) が成り立っているとき、(3.2.5) 式が成り立てば、$\langle X(t)R(t')\rangle = 0$ $(t < t')$ となることを式変形で示しなさい。ただし、$X(0)$ も分布する。

20 **(8 点)** 1 次元の微粒子のブラウン運動が (3.1.1) 式で表される場合を考える。微粒子の質量が十分小さければ、$m = 0$ にすることができ、このとき、(3.1.1) 式から微粒子の位置 $X(t)$ についてのランジュバン方程式を導け。

21 **(15 点)** 授業と宿題 20 で扱った例以外に、ランジュバン方程式で記述できる現象を探し、ランジュバン方程式を書いて説明しなさい。どの式がランジュバン方程式かがはっきり分るようにし、$F(x)$ のあらわな形を書きなさい。使った記号はすべて説明すること。ランジュバン方程式の各項を説明し、特にそれぞれの場合にランダム力に相当するのが何か、その実体を詳しく説明しなさい。さらに、P7 の**仮定** (3.2.3)、(3.2.4) 式をなぜ満たしていると考えられるか述べなさい。ただし、ここで言うランジュンバン方程式は、P7 の**仮定**に書いてある式を指す。配点は、例 1 つに付き 15 点とし、いくつ答えても良い。その場合は、15 点を超えて採点される。

3.3 フォッカー・プランク (FP) 方程式 (5 月 31 日)

目標 分布関数とその時間変化がイメージできるようになり、ランジュバン方程式からFP 方程式を自分でつくれるようにする。具体的には以下のことを分かる。

- 分布関数 $P(x,t)$ は時刻 t に不規則な変数 X が x から $x+dx$ にある確率と関係し、FP 方程式は、その時間変化を表す。
- FP 方程式は連続の式と確率の流れで導ける。確率の流れの各項の物理的な意味を分かる。
- ランジュバン方程式が与えられた時の FP 方程式の形。

目次 (1) 分布関数と FP 方程式
(2) FP 方程式の導出
(3) 具体例
(4) まとめ

仮定 **1** $P(x,t)$ は確率の生成消滅がない。
2 確率の流れ $J(x,t)$ は、以下で与えられる。

$$J(x,t) = \left\{ F(x) - \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x} \right\} P(x,t) \tag{3.3.1}$$

ただし、$F(x)$ は x の関数で、D は正の定数。

結論 分布関数 $P(x,t)$ の時間変化を表す FP 方程式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \{-\frac{\partial}{\partial x}F(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{D}{2}\}P(x,t) \tag{3.3.2}$$

が成り立つ。

例題 (宿題 24 参照) ブラウン運動で、微粒子の位置の分布の時間変化を表す式をたてなさい。

(1) 分布関数と FP 方程式

○ 例えばブラウン運動を考える時、微粒子の位置を $\mathbf{X} = \mathbf{X}(t)$ とすると、$\mathbf{X}(0)$ が同じであっても、$\mathbf{X}(t)$ は分布する。1 回目の測定で、ある位置にあっても、2 回目、3 回目の測定では微粒子は全然別の場所に行く可能性がある。

一般に、不規則に変化する変数 X に対して、分布関数 $P(x,t)$ が定義出来る。

分布関数 $P(x,t)$:
時刻 t に X が x から $x+dx$ にある確率 $=P(x,t)dx$

○ 分布関数は時間変化する。

ブラウン運動の場合、$t=0$ で微粒子に位置がはっきり決まっていれば、分布はない。しかし、時間が経てば、分布ができ、時間とともに分布は広がっていく。これを $P(x,t)$ で考えると、$t=0$ では $P(x,t)$ は幅の無いデルタ関数だが、時間が経つと幅が出来て、時間とともに幅が広がっていく。

この $P(x,t)$ の時間変化は FP 方程式によって表せる。

○ 平均

任意関数 $f(X)$ の平均 $\langle f(X)\rangle$ は、

$$\langle f(X)\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}f(x)P(x,t)dx \tag{3.3.3}$$

(3) 具体例

① ブラウン粒子

$x=v$ で、$F(v)=-\gamma v$ となる。ここで、$\gamma=\lambda/m$ で、λ は抵抗係数、m は微粒子の質量を表す。この時、FP 方程式は、

$$\frac{\partial P(v,t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial v}\{\gamma vP(v,t)\}+\frac{D'}{2}\frac{\partial^2P(v,t)}{\partial v^2} \tag{3.3.4}$$

ここで、D' は正の定数。

② 熱雑音の回路

$x=q$ で、$F(q)=-q/CR$ となる。FP 方程式は、

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial q}\left\{\frac{q}{CR}P(q,t)\right\}+\frac{D}{2}\frac{\partial^2P(q,t)}{\partial q^2} \tag{3.3.5}$$

ここで、D は正の定数。

③ レーザーにトラップされたコロイド粒子 (1 次元)

簡単のため 1 次元を考える。x をコロイド粒子の 1 次元の位置とすると、$F(x) = -u'(x)/\lambda$ で

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{u'(x)}{\lambda}P(x,t)\right\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \tag{3.3.6}$$

ただし、 $u'(x)$ は、レーザーがつくるポテンシャル $u(x)$ を x で微分したもの、λ は抵抗係数、D は正の定数。

④ 高分子

簡単のため 1 次元を考える。X_i を端から i 番目の原子の 1 次元の位置として、ΔW をボンド長とすると、

$$X_{i+1} - X_i = \Delta W \tag{3.3.7}$$

$t = i\Delta t$、$X(t) = X_i$ とすると、$X(t+\Delta t) = X_{i+1}$ だから、$X(t+\Delta t) - X(t) = \Delta W$ と書ける。この式は、ΔW の分布が i によらず独立とすれば、$\Delta t \to 0$ で $F(X) = 0$ のランジュバン方程式と一致する。また、$\Delta t \to 0$ の極限で、分布関数 $P(x,t)$ は、

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \tag{3.3.8}$$

にしたがう。ここで、D は $\left\langle \Delta W^2 \right\rangle = D\Delta t$ で定義されているとする。また、t は時刻ではなく、高分子の端からの長さを表す。(3.3.8) 式を $t = 0$ で $P(x,0) = \delta(x)$ の初期条件で解けば、$P(x,t)$ を求める事ができる (宿題 24 参照)。

⑤ スチルベンの異性化反応

分布関数 $P(\theta,t)$ が周期的な境界条件 $P(\theta+2\pi,t) = P(\theta,t)$ であれば、$x = \theta$、$F(\theta) = \gamma du(\theta)/d\theta$ で、FP 方程式

$$\frac{\partial P(\theta,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \theta}\left\{\gamma\frac{u(\theta)}{d\theta}P(\theta,t)\right\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial \theta^2} \tag{3.3.9}$$

が成り立つ。

(3) まとめ

○ ランジュバン方程式と FP 方程式の対応

$$\dot{X}(t) = \boxed{\mathrm{F(X(t))}} + R(t), \qquad \langle R(t)R(t')\rangle = \boxed{\mathrm{D}}\,\delta(t-t') \tag{3.3.10}$$

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \{-\frac{\partial}{\partial x}\boxed{\mathrm{F(x)}} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\boxed{\mathrm{D}}}{2}\}P(x,t) \tag{3.3.11}$$

宿題:

22 (15 点) P12 の**仮定** 1、2 から**結論**の導出を授業の説明に沿ってまとめなさい。

23 (5 点) 自分で適当にランジュバン方程式をつくり、それに対応した FP 方程式を書き下せ。ランジュバン方程式は宿題 21 で挙げたものでも、それ以外でも良いが、授業で扱ったものと、このノートに載せてあるものは除く。FP 方程式 1 つに付き 5 点とし、いくつ答えても良い。n 個答えれば、$5n$ 点となる。

24 (10 点) $\gamma = \lambda/m$ が充分に大きい **3 次元の**ブラウン運動は、

$$\dot{\mathbf{X}}(t) = \mathbf{R}(t) \tag{3.3.12}$$

のように書ける。ここで、$\mathbf{X}(t)$ は、ブラウン粒子の位置ベクトルを表す。これに対応する FP 方程式を答えよ。導出仮定は必要ない。また、答えた FP 方程式の解を、$t = 0$ で $P(\mathbf{X}, 0) = \delta(\mathbf{X})$ の初期条件で求めなさい。それを使って、時刻 t に微粒子が r から $r + \Delta r$ にある確率を求めなさい。ただし、$r = |\mathbf{X}|$ で、Δr は充分小さいとする。

25 (20 点) ランジュバン方程式から FP 方程式の導出を文献で調べてレポートしなさい。

宿題の補足: 宿題 9 は ξ 関数を使わずに解いて下さい。(3) 式の被積分関数は積分の下限で発散しますが、積分の値は収束するのは何故か説明して下さい。

3.4 第 2 種揺動散逸定理の導出 (6 月 14 日)

目標 第 2 種揺動散逸定理 (2nd FDT) の概略を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 物理 (化学) 系の研究の特徴
- 第 2 種揺動散逸定理 (2nd FDT) は、平衡分布とランジュバン方程式の $F(x)$ とランダム力の大きさ D の 3 つの量の関係を与える。
- 2nd FDT の導出。

目次 (1) はじめに
(2) 第 2 種揺動散逸定理 (2nd FDT) の導出
(3) まとめ

仮定 X を不規則に変化する変数として、$X = X(t)$ がランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = F(X(t)) + R(t) \tag{3.4.1}$$

$$\langle R(t) \rangle = 0 \tag{3.4.2}$$

$$\langle R(t)R(t') \rangle = D\delta(t - t') \tag{3.4.3}$$

にしたがっている。さらに、FP 方程式と等価である条件を満たしていて、かつ、**FP 方程式の平衡解** $P_{\mathrm{eq}}(x)$ が存在する。ここで、$P_{\mathrm{eq}}(x)$ は、

$$\{-\frac{\partial}{\partial x}F(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{D}{2}\}P_{\mathrm{eq}}(x) = 0 \tag{3.4.4}$$

を満たすだけでなく、

$$J_{\mathrm{eq}}(x) = \left\{F(x) - \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x}\right\}P_{\mathrm{eq}}(x) \tag{3.4.5}$$

とすると、系が閉じているという条件

$$x \to \pm\infty \qquad J_{\mathrm{eq}}(x) = 0 \tag{3.4.6}$$

も成り立つ。

結論

$$P_{\rm eq}(x) = e^{S(x)} \tag{3.4.7}$$

とすると、

$$F(x) = \frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx} \tag{3.4.8}$$

特に $F(x) = LdS(x)/dx$ と書ける時、

$$L = \frac{D}{2} \tag{3.4.9}$$

例題　(3.4 が終わった段階で解ける様になる問題。宿題ではない。) ブラウン粒子の運動から (3.1.4) 式の λ とランダム力の大きさ D を測って、アボガドロ数 N_A を求める方法を考えなさい。気体定数 R と温度 T を使っても良い。

(1) はじめに

○ 緩和過程を表す式をつくりたい。ここで緩和過程とは、

$$\text{非平衡状態} \xrightarrow[\text{緩和}]{t\to\infty} \text{平衡状態} \tag{3.4.10}$$

これまで、説明したランジュバン方程式や FP 方程式は使えそうだ。しかし、$F(x)$ や D はどうしたら良いのだろうか。

○ 物理系の研究の特徴

物理 (化学) 系: ブラウン運動、熱雑音、レーザートラップのコロイド粒子、スチルベン

$\updownarrow$

それ以外: 株価の変動、生物集団の個体数

物理 (化学) 系の研究とそれ以外の研究で大きく違う特徴は何か?
ヒント: ブラウン運動

m を微粒子の質量、T を温度、$k_{\rm B}$ ボルツマン定数、とすると、微粒子の速度 v の分布関数は $t \to \infty$ でマクスウェル分布になる。

$$P_{\rm eq}(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_{\rm B}T}}\exp[-\frac{m}{2k_{\rm B}T}v^2] \tag{3.4.11}$$

○ $F(x)$ や D を決めるのに平衡状態の情報を使う。

2nd FDT: $\boxed{F(x)\text{、}D\text{、}P_{\rm eq}(x)\ \text{の関係を与える}}$

2nd FDT とは、

2nd Fluctuation Dissipation Theorem (第 2 種揺動散逸定理)

どれか 2 つ分っていれば、残りが分る。

例 $F(x)$、$P_{\rm eq}(x)$ が分っている。— D がわかる。
D、$P_{\rm eq}(x)$ が分っている。— $F(x)$ がわかる。

(2) 第 2 種揺動散逸定理の導出

$P(x,t)$ は分布関数なので、確率が保存することから、連続の式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x,t)}{\partial x} \tag{3.4.12}$$

を満たす。ここで流れ $J(x,t)$ は単位時間あたりに x を横切る量で、(3.4.12) 式は、x から $x+dx$ の中の増減が流れ $J(x,t)$ と $J(x+dx,t)$ で決まることから導ける。$J(x)$ は

$$J(x,t) = \left\{ F(x) - \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x} \right\} P(x,t) \tag{3.4.13}$$

で与えられる。また、この流れという考えで、「系が閉じていると言う条件」(3.4.6) 式を説明すると、両端に流れが無いということになる。

今、**仮定**から平衡解 $P_{\rm eq}(x)$ が存在して、(3.4.4) 式を (3.4.5) 式で与えられる $J_{\rm eq}(x)$ で書き換えると、

$$-\frac{\partial J_{\rm eq}(x)}{\partial x} = 0 \tag{3.4.14}$$

(3.4.14) 式を積分すると、

$$J_{\rm eq}(x) = C \qquad : x \text{ によらない定数} \tag{3.4.15}$$

ところが、$x \to \pm\infty$ で、$J_{\rm eq}(x) = 0$ だから $C = 0$。つまり、平衡分布では

$$J_{\rm eq}(x) = 0 \tag{3.4.16}$$

(3.4.13) 式から

$$J_{\rm eq}(x) = \left\{ F(x) - \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x} \right\} P_{\rm eq}(x) \tag{3.4.17}$$

$$= F(x)P_{\rm eq}(x) - \frac{D}{2}\frac{\partial P_{\rm eq}(x)}{\partial x} \tag{3.4.18}$$

ここで、後の式変形を簡単にするために、$P_{\rm eq}(x) = e^{S(x)}$ とする。$S(x) \equiv \ln P_{\rm eq}(x)$ だから、これを、(3.4.18) 式に代入する。2 項目は、

$$\frac{D}{2}\frac{\partial P_{\rm eq}(x)}{\partial x} = \frac{D}{2}\frac{d}{dx}e^{S(x)} = \frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx}e^{S(x)} = \frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx}P_{\rm eq}(x) \tag{3.4.19}$$

だから、

$$J_{\rm eq}(x) = F(x)P_{\rm eq}(x) - \frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx}P_{\rm eq}(x) = \left\{F(x) - \frac{D}{2}\frac{dS(x)}{dx}\right\}P_{\rm eq}(x) = 0 \tag{3.4.20}$$

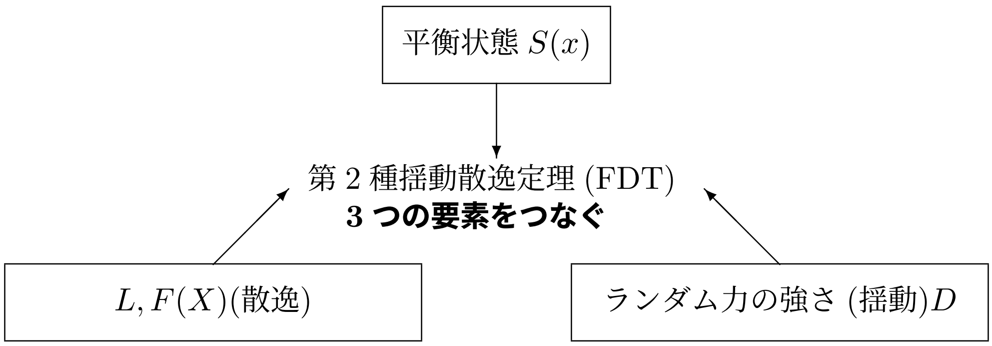
$P_{\rm eq}(x) > 0$ だから、(3.4.8) 式が導ける。 $F(x)$ **の形が** $S(x)$ **により、完全に決まる。**

特に $F(x) = LdS(x)/dx$ と書ける時、つまり、$\dot{X} = LdS(X)/dx + R(t)$ の時、(3.4.9) 式が導ける。 これが、第 2 種揺動散逸定理 (FDT) だ。

(4) まとめと補足

○ 今回、新しい仮定として $P_{\bf eq}(x)$ **の存在**を仮定したが、$P_{\rm eq}(x)$ が存在しない場合もある (宿題 27 参照)。

○ まとめ



3 つのうち 2 つが分れば、残りも分る。物理系の場合、**平衡状態が分っている事が多い**。

宿題:

26 (15 点) 物理系や化学系以外の系、つまり、平衡系の統計力学が使えない系における「平衡分布」の例を挙げなさい。ただし、ここでいう「平衡分布」は P. 16 の**仮定**を満たすものとする。

27 (20 点) FP 方程式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left\{L\frac{dU(x)}{dx} - f(x) + \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial x}\right\}P(x,t) \tag{3.4.21}$$

で、分布関数 $P(x,t)$ と $U(x)$ が周期的境界条件 $P(x,t) = P(x+L,t)$、$U(x) = U(x+L)$ を満たしている時、平衡解があるための $f(x)$ の条件を求めなさい。ただし、$P(x,t)$ は $0 < x \leq L$ で定義されている。ここで、平衡解とは、(3.3.1) 式に $F(x) = LdU(x)/dx + f$ を代入して定義される $J(x)$ が 0 になる分布関数の解のことをいう。さらに、$f(x)$ が x によらない定数 $f(\neq 0)$ のとき、平衡でない定常解 $P_{\mathrm{st}}(x)$ を

$$\int_0^L P_{\mathrm{st}}(x)dx = 1 \tag{3.4.22}$$

という条件で求めなさい。

28 **(8 点)** 2nd FDT(3.4.8) 式の導出について、① 授業の説明に沿ってまとめ、② 仮定をどこに使っているかを明らかにして、③ (3.4.9) 式も導出しなさい。

29 **(10 点)** 1 次元のブラウン運動に対し、授業では微粒子の速度 $V(t)$ しか考えなかったが、位置 $X(t)$ を考えた次のランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = V(t) \tag{3.4.23}$$

$$m\dot{V}(t) = -\lambda V - \frac{dU(X(t))}{dX(t)} + R(t) \tag{3.4.24}$$

を考える。m、$-\lambda V$、$U(X)$、$R(t)$ は、それぞれ微粒子の質量、抵抗力、ポテンシャル、ランダム力を表す。分布関数 $P(x,v,t)$ がしたがう FP 方程式を求めなさい。ただし、導出の過程は書かなくて良い。また、求めた FP 方程式を使って、D、m、λ、T の関係式を導きなさい。3.4 と同じように、まず $P_{\mathrm{eq}}(x,v)$ を求め、それから導きなさい。ここで、T は温度を表す。この問題では変数が 2 つあるので、(3.4.8) 式は使えない。

お知らせ: 授業のホームページをつくりました。

http://bussei.gs.niigata-u.ac.jp//~yoshimori/tk318.html

連絡を載せたり、授業ノートを pdf でおいておきますので、ご覧ください。

3.5　第 2 種揺動散逸定理の応用 (6 月 21 日)

目標　第 2 種揺動散逸定理 (2nd FDT) の応用を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 2nd FDT をブラウン運動に応用して関係式を導くこと、それを使って原子の実在が証明できること。
- 熱雑音の回路に応用してナイキストの定理が得られること。

目次　(1) はじめに
(2) ブラウン運動への応用
(3) 熱雑音の回路への応用
(4) まとめと補足

仮定　**1**　ブラウン運動で微粒子の速度 v の平衡分布がマクスウェル分布

$$P_{\rm eq}(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_{\rm B}T}}\exp[-\frac{m}{2k_{\rm B}T}v^2] \tag{3.5.1}$$

で与えられる。ここで、m を微粒子の質量、T を温度、$k_{\rm B}$ ボルツマン定数とするまた、ランジュバン方程式 (3.2.8) 式から

$$\dot{V}(t) = -\gamma V(t) + R'(t) \tag{3.5.2}$$

にしたがっている。ここで、

$$\gamma = \frac{\lambda}{m}, \tag{3.5.3}$$

$$R'(t) = \frac{R(t)}{m}, \qquad \langle R'(t)R'(t')\rangle = D'\delta(t-t'), \qquad D' = \frac{D}{m^2} \tag{3.5.4}$$

2　熱雑音の回路で、コンデンサーにたまる電荷 q の平衡分布は、

$$P_{\rm eq}(q) \propto \exp[-\frac{q^2}{2Ck_{\rm B}T}v^2] \tag{3.5.5}$$

ここで、C はコンデンサーの容量を表す。ランジュバン方程式は、(3.2.12) 式の両辺を抵抗 R で割って

$$\dot{Q}(t) = -\frac{Q(t)}{CR} + R(t), \tag{3.5.6}$$

ここで、

$$R(t) = \frac{V(t)}{R}, \qquad \langle V(t)V(t')\rangle = D_V\delta(t-t') \tag{3.5.7}$$

D_V は正の定数。

結論 1

$$\boxed{\lambda k_{\mathrm{B}}T = \frac{D}{2}} \tag{3.5.8}$$

これから原子の実在が証明できる。

2 ナイキストの定理

$$\boxed{2Rk_{\mathrm{B}}T = D_V} \tag{3.5.9}$$

(2) ブラウン運動への応用

(3.5.1) 式から、$S(v) = \ln P_{\mathrm{eq}}(v)$ として、

$$S(v) = -\frac{m}{2k_{\mathrm{B}}T}v^2 + \ln\sqrt{\frac{m}{2\pi k_{\mathrm{B}}T}} \tag{3.5.10}$$

と書ける。微分すると、

$$\frac{dS(v)}{dv} = -\frac{m}{k_{\mathrm{B}}T}v \tag{3.5.11}$$

一方、ランジュバン方程式は、(3.5.2) 式なので、第 2 種揺動散逸定理 (3.4.8) 式から

$$-\gamma v = \frac{D'}{2}\left(-\frac{m}{k_{\mathrm{B}}T}v\right) \tag{3.5.12}$$

D' に (3.5.4) 式を代入すると、

$$= \frac{D}{2m^2}\left(-\frac{m}{k_{\mathrm{B}}T}v\right) \tag{3.5.13}$$

両辺を $-v$ でわって、γ に (3.5.3) 式を代入すると

$$\frac{\lambda}{m} = \frac{D}{2mk_{\mathrm{B}}T} \tag{3.5.14}$$

これから、(3.5.8) 式が導ける。(3.5.8) 式を使うと、**アインシュタインの関係式**と呼ばれる有名な式を導けが、ここでの D はいわゆる「拡散係数」とは違う事に注意しなさい。多くの文献では λ と $k_\mathrm{B}T$ と拡散係数の関係をアインシュタインの関係式という。

ここで、λ は抵抗、つまり**散逸**を表し、$k_\mathrm{B}T$ は**平衡分布**から来ている。さらに、D はゆらぎの大きさなので、**揺動**と関係している。したがって、(3.5.8) 式は**平衡**を保つために、**揺動**と**散逸**がつり合っていることを表している。

(3) 熱雑音の回路への応用

(3.5.5) 式から、$S(q) = \ln P_\mathrm{eq}(q)$ とすると、

$$S(q) = -\frac{\beta q^2}{2C} + 定数, \tag{3.5.15}$$

$$\frac{dS(q)}{dq} = -\frac{\beta}{C}q \tag{3.5.16}$$

一方ランジュバン方程式は、(3.5.6) 式だから、$F(q) = -q/(CR)$ で、第 2 種揺動散逸定理 (3.4.8) 式にこの式と (3.5.16) 式を代入すると、$\langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t')$ として、

$$\frac{-q}{CR} = \frac{D}{2}\left\{-\frac{\beta}{C}q\right\} \tag{3.5.17}$$

両辺を $-q$ で割って、

$$\frac{1}{CR} = \frac{D\beta}{2C} \tag{3.5.18}$$

$\beta = 1/(k_\mathrm{B}T)$ だから

$$\frac{1}{CR} = \frac{D}{2Ck_\mathrm{B}T} \tag{3.5.19}$$

両辺に $Ck_\mathrm{B}T$ をかけると、

$$\frac{k_\mathrm{B}T}{R} = \frac{D}{2} \tag{3.5.20}$$

(3.5.7) 式から、

$$D = \frac{D_V}{R^2} \tag{3.5.21}$$

だから、

$$\frac{k_\mathrm{B}T}{R} = \frac{D_V}{2R^2} \tag{3.5.22}$$

両辺に $2R^2$ をかけると (3.5.9) 式が導ける。

この場合も、R は電気抵抗なので**散逸**、$k_\mathrm{B}T$ は**平衡分布**、D_V は電圧のゆらぎなので**揺動**に対応し、(3.5.9) 式は**揺動**と**散逸**と**平衡分布**の関係を表す。

宿題:

30 (30 点) 変数が 2 個以上ある線形ランジュバン方程式

$$\dot{X}_\alpha = \sum_{\beta}^{n} \gamma_{\alpha\beta} X_\beta + R_\alpha(t) \tag{3.5.23}$$

を考える。ここで、ランダム力は、$\langle R_\alpha(t)\rangle = 0$、$\langle R_\alpha(t) R_\beta(t')\rangle = D_{\alpha\beta}\delta(t-t')$、$\langle X_\alpha(0) R_\beta(t)\rangle = 0 (t \geq 0)$ をみたす。(3.5.23) 式を直交化して、

$$\dot{X}'_\mu = -\lambda_\mu X'_\mu + R'_\mu(t) \tag{3.5.24}$$

とする時、$t = 0$ で $X'_\mu = 0$ という条件で $\left\langle X'_\mu(t) X'_\nu(t)\right\rangle$ を求めなさい。ただし、$\lambda_\mu > 0$、$\left\langle R'_\mu(t) R'_\nu(t')\right\rangle = D'_{\mu\nu}\delta(t-t')$ としなさい。また、$t \to \infty$ で $\left\langle X'_\mu(t) X'_\nu(t)\right\rangle = \left\langle X'_\mu X'_\nu\right\rangle_{\mathrm{eq}}$ を仮定して、

$$\left\langle X'_\mu X'_\nu\right\rangle_{\mathrm{eq}} (\lambda_\mu + \lambda_\nu) = D'_{\mu\nu} \tag{3.5.25}$$

を証明しなさい。

これらの結果から、$t = 0$ で $X_\mu = 0$ の時の $\langle X_\alpha(t) X_\beta(t)\rangle$ を求め、

$$\sum_\gamma \{\gamma_{\alpha\gamma} \langle X_\gamma X_\beta\rangle_{\mathrm{eq}} + \gamma_{\beta\gamma} \langle X_\gamma X_\alpha\rangle_{\mathrm{eq}}\} = D_{\alpha\beta} \tag{3.5.26}$$

となる事を示せ。

31 (45 点) 変数が 2 つ以上ある時、$\{X_1, X_2, \ldots, X_n\} = \{X_\alpha\}$ として、

$$\dot{X}_\alpha(t) = F(\{X_\alpha\}) + R_\alpha(t) \tag{3.5.27}$$

$$\langle R_\alpha(t)\rangle = 0 \tag{3.5.28}$$

$$\left\langle R_\alpha(t) R_{\beta(t')}\right\rangle = D_{\alpha\beta}\delta(t-t') \tag{3.5.29}$$

で表される多変数のランジュバン方程式で、$F_\mu(\{x_\mu\}) = \sum_\nu^n L_{\mu\nu}\partial S(\{x_\mu\})/\partial x_\nu$ の時、次の詳細釣合の条件

$$P_{\mathrm{eq}}(\{x_\mu\}) T(\{x_\mu\}, \{x'_\mu\}; t) = P_{\mathrm{eq}}(\{x'_\mu\}) T(\{x'_\mu\}, \{x_\mu\}; t) \tag{3.5.30}$$

が成り立てば、

$$L_{\mu\nu} = \frac{D_{\mu\nu}}{2} \tag{3.5.31}$$

となることが知られている。ただし、$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t)$ は多変数の遷移確率で、初期条件

$$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};0)=\prod_\mu^n \delta(x_\mu-x'_\mu) \tag{3.5.32}$$

を満たす FP 方程式の解になっている。ここでは、

$$S(\{x_\mu\})=-\sum_\mu^n \frac{k_\mu}{2}x_\mu^2 \tag{3.5.33}$$

で、$\sum_{\mu'}^n L_{\mu\mu'}k_{\mu'}$ が対角化出来る時に、(3.5.31) 式を証明しなさい。この場合は、

$$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t)=C(t)\exp[-\sum_{\mu\nu}^n \frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu}(t)(x_\mu-x_\mu(t))(x_\nu-x_\nu(t))] \tag{3.5.34}$$

となることを使っても良い。ここで、$C(t)$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\prod_\mu^n dx_\mu T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t)=1 \tag{3.5.35}$$

となる様決められた規格化定数、$x_\mu(t)$ は、$x_\mu(0)=x'_\mu$ を満たす平均値、$\sigma_{\mu\nu}(t)$ は、宿題 30 で計算した $t=0$ で 0 になる分散と $\sum_{\mu'}^n \langle X_\mu(t)X_{\mu'}(t)\rangle \sigma_{\mu'\nu}(t)=\delta_{\mu\nu}$ の関係にある。

32 (8 点) P.9 のスチルベンの異性化反応で、FP 方程式が (3.3.9) 式

$$\frac{\partial P(\theta,t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial\theta}\left\{d\gamma\frac{u(\theta)}{d\theta}P(\theta,t)\right\}+\frac{D}{2}\frac{\partial^2P(\theta,t)}{\partial\theta^2} \tag{3.5.36}$$

で与えられている時、その平衡分布が $P_{eq}(\theta)\propto e^{-u(\theta)/(k_\mathrm{B}T)}$ となることを使って、2ndFDT を議論しなさい。記号は、P.9 の説明に従い、k_B はボルツマン定数で、T は絶対温度を表す。

33 (30 点) 授業やプリント、宿題で扱った例以外で、第 2 種揺動散逸定理の例を挙げなさい。第 2 種揺動散逸定理を表す式を書き、何の量に対する関係かを説明しなさい。

4 線形応答理論

4.1 時間相関関数の物理的な意味と定義 (6 月 28 日)

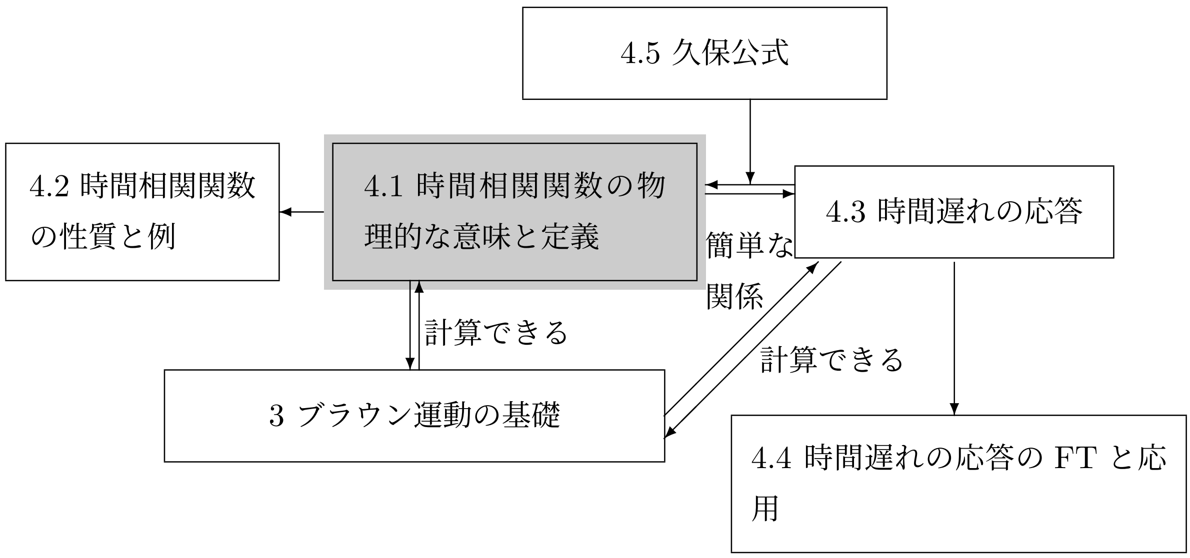
目標 時間相関関数 (Time Correlation Function: TCF) を何となくイメージできるようにする。具体的には以下のことを分かる。

- TCF は不規則な運動を特徴付けるのに便利。
- TCF の定義はこれまでの平均の定義の他に時間平均によるものがある。時間相関関数 (TCF) は指数関数になる。

目次 (1) 4 章全体の流れ
(2) 物理的な意味
(3) 定義 (4) まとめ

例題 不規則に時間変化する変数 $X(t)$ を特徴づける物理量を求めなさい。

(1) 4 章全体の流れ



(2) 物理的な意味

○ 液体 A に微粒子を溶かす。$V(t)$ = 微粒子の速度 (1 次元)、t: 時刻

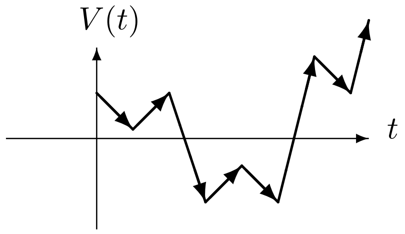


図 4.1.1a: 1 回目の測定

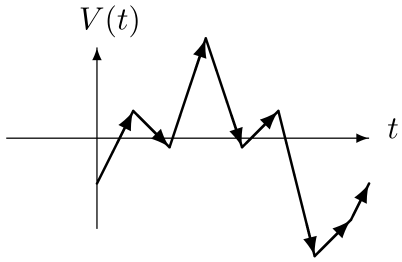


図 4.1.1b: 2 回目 (1 回目と似ている。)

ところが別の液体 B に微粒子を溶かして測ると、

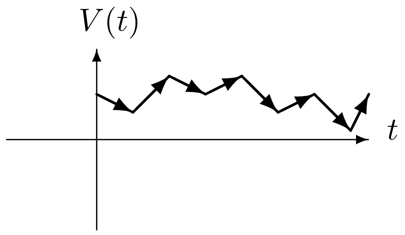


図 4.1.2a: 1 回目

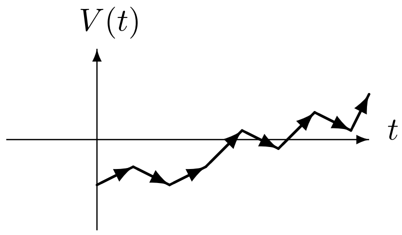


図 4.1.2b: 2 回目 (1 回目と似ている。)

A と B はかなり違う。液体によって違う感じがする。もちろん、**軌道そのものは測る度に違う**が、同じ液体ならば、似ていると感じる。しかし、違う液体は違うと感じる。2 つの液体は平均も分散も同じなので、他に**液体 A と B の違いを定量化する方法はないのか?**

(3) 定義

平均の定義の仕方で **2 種類ある。**

①これまでの平均による定義

不規則に変動する変数 $X(t)$ をそれぞれの時刻 t で確率変数と見なして平均を定義する。これは、ランダム力の平均の定義と同じ ((3.1.6) 式参照)。概念的には、何回も測定して平均を取るのと同じだと考えて良い。つまり、i 番目の測定で得られた値を $X_i(t)$ とすると、

$$\langle X(t)X(t')\rangle \equiv \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i}^{N} X_i(t)X_i(t') \tag{4.1.1}$$

ここで、N は測定回数を表す。これは、$\langle R(t)R(t')\rangle$ と同じ定義。

②時間平均による定義

定常過程 (後述) の時だけ使える定義

$$\langle X(t)X(t')\rangle \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T X(t+\tau)X(t'+\tau)d\tau \tag{4.1.2}$$

この定義では、平均は 1 回の測定で得られる。つまり、1 つのサンプル $X(t)$ について、(4.1.2) 式を計算することで得られる。

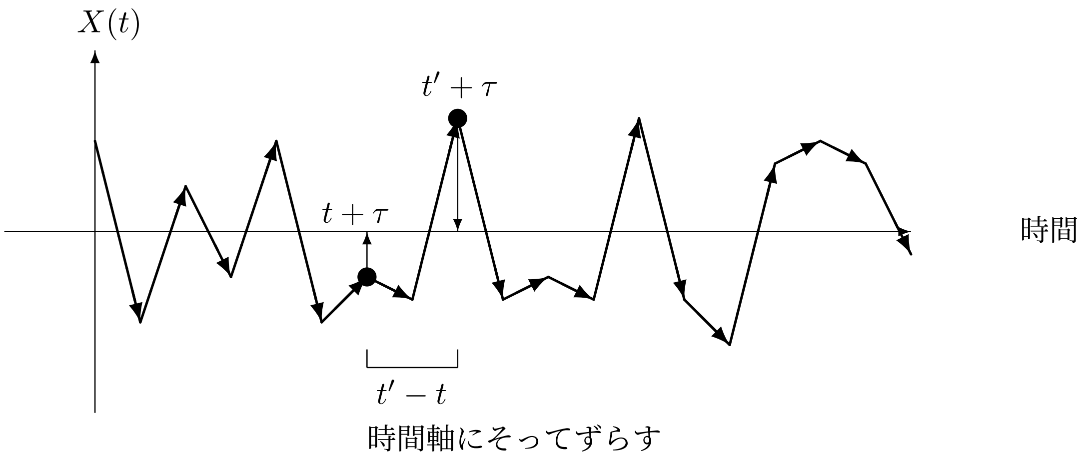


図 4.1.3:

定常過程であっても、①と②が何時も同じになるとは限らない。(宿題 38 参照)

(4) まとめ

○ 時間相関関数の定義

1 確率による平均 (集団平均)

2 時間平均

宿題:

34 (30 点) 中性大気組成の組成分布について、ランジュバン方程式を考えよう。105 km 以上の高度では、粒子の高度分布は直線になり、軽いものほど上に上がる。例えば、105 km の高さでは、各成分あまり変わらないが、1000 km ほど上昇する

と、N_2 が多くなる。式で書けば、平衡状態にあるとき、質量 m の粒子が z にある確率は、

$$P_{\mathrm{eq}}(z) \propto \exp[-\beta mgz] \tag{4.1.3}$$

で与えられる。ここで、$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$、$g$ は重力加速度を示す。ランジュバン方程式を自分で考え、第 2 種揺動散逸定理を議論しなさい。

35 (8 点) 時間相関関数によりなぜ不規則に時間変化する変数を特徴づけることができるのか、授業の説明に沿ってまとめなさい。

36 (35 点) 時間相関関数と次で扱うフーリエ変換以外に、不規則に時間変化する変数を特徴づける方法を考えなさい。

37 (10 点) 不規則な時間変化ではないが、$X(t) = x_0 \cos \omega t$ としたとき、時間相関関数を計算しなさい。ただし、時間平均による定義 (4.1.2) 式を少し変えた

$$\langle X(t)X(t')\rangle \equiv \frac{1}{T}\int_0^T X(t+\tau)X(t'+\tau)d\tau \tag{4.1.4}$$

を使え。ここで、$T = 2\pi/\omega$ とする。

38 (30 点) P.27 にある時間相関関数の 2 つの定義の片方だけを満たして、もう片方を満たさない定常過程の例を挙げなさい。

宿題の締め切り: 単位の必要な人は宿題を

8 月 9 日 (木) 午後 4:00

までに直接持って来られるか、物理事務室に出して下さい。範囲は T1 に出題したものも含め、これまで出題した宿題すべてです。T1 に提出したもので、50 点以上のものも含めることが出来ますので、採点して欲しい方は、申し出て下さい。

宿題の訂正: 宿題 32 で

$$\frac{\partial P(\theta,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial\theta}\left\{d\gamma\frac{u(\theta)}{d\theta}P(\theta,t)\right\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(\theta,t)}{\partial\theta^2} \tag{4.1.5}$$

となっていますが、

$$\frac{\partial P(\theta,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial\theta}\left\{\gamma\frac{du(\theta)}{d\theta}P(\theta,t)\right\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(\theta,t)}{\partial\theta^2} \tag{4.1.6}$$

の間違えです。謹んでお詫びするとともに訂正致します。

4.2 時間相関関数の性質と例 (7 月 5 日)

目標 時間相関関数 (Time Correlation Function: TCF) の性質を仮定とともにきちんと覚える。具体的には以下のことを分かる。

- 定常過程の概念的な理解
- 2 つの数学的な性質 (**結論** 1a、1b) は定常過程から導ける。
- 線形ランジュバン方程式が成り立つ時、時間相関関数 (TCF) は指数関数になる。

目次 (1) 定常過程
(2) 基本的な性質
(3) 線型ランジュバン方程式の例
(4) まとめ

仮定 1 $X_\mu = X_\mu(t)(\mu = 1, \ldots, n)$ は、不規則に時間変化する**定常過程** (時間の原点をずらしても、**平均量**は変らない)。

2　$X(t)$ を不規則に変動する変数として、線形ランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t) \tag{4.2.1}$$

が成り立つ。γ は正の定数、$R(t)$ はランダム力で $\langle X(0)R(t)\rangle = 0, t \geq 0$ とする。

結論　**1** (a)　$\varphi_{\mu\nu}(t) \equiv \langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle$ として、$\varphi_{\mu\nu}(t) = \varphi_{\nu\mu}(-t)$。特に $\mu = \nu$ の時、時間相関関数は、偶関数。

(b)　$\left\langle \dot{X}_\mu(t)X_\nu(0)\right\rangle = -\left\langle X_\mu(t)\dot{X}_\nu(0)\right\rangle$。特に $\mu = \nu$ の時、$\dot{\varphi}_{\mu\mu}(0) = 0$。ここで、$\dot{}$ は時間微分を表す。

2

$$\boxed{\langle X(t)X(0)\rangle = \left\langle X^2\right\rangle e^{-\gamma t}} \qquad t \geq 0 \tag{4.2.2}$$

例題　ブラウン運動で、微粒子の速度を $V(t)$、加速度 $A(t) = \dot{V}(t)$ としたとき、$\langle A(t)A(0)\rangle$ を求めなさい。

(1) 定常過程

○ 時間変化する外場がある場合や、初期値が決まっている場合は、定常過程ではない。たとえば、コロイドにレーザーをかけるとき、レーザーを動かすと時間の原点を変えられないので、定常過程ではない。

定常過程の場合、以下のことが成り立つ。

- 1 つの時刻にしかよらない平均量 $\langle X(t)\rangle$
  定常過程ならば、t を $t+a$ に置き換えても値が変わらないので、
  $$\langle X(t)\rangle = \langle X(t+a)\rangle \tag{4.2.3}$$
  が成り立つ。したがって、$\langle X(t)\rangle =$ 定数となり、t によらない。
- 2 つの時刻による平均量 $\langle X(t)X(t')\rangle$: t と t' による。
  定常過程ならば、t と t' をそれぞれ $t+a$ と $t'+a$ に置き換えても値が変わらないので、
  $$\langle X(t)X(t')\rangle = \langle X(t+a)X(t'+a)\rangle \tag{4.2.4}$$
  $a = -t'$ とすると、
  $$\langle X(t)X(t')\rangle = \langle X(t-t')X(0)\rangle \tag{4.2.5}$$

右辺は $t-t'$ にしかよらないので、

$$\varphi(t-t') \equiv \langle X(t-t')X(0)\rangle = \langle X(t)X(t')\rangle \tag{4.2.6}$$

○ $X(t)$ を複数考える。$\{X_1(t), X_2(t), \cdots\} = \{X_\mu(t)\}$ ここで、添え字は、測定を表すのではないことに注意。

$$\boxed{\varphi_{\mu\nu}(t) \equiv \langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle} \tag{4.2.7}$$

例 3 次元のブラウン運動 $\boldsymbol{V}(t) = (V_x(t), V_y(t), V_z(t))$

$$\varphi_{11}(t) = \langle V_x(t)V_x(0)\rangle \tag{4.2.8}$$

$$\varphi_{12}(t) = \langle V_x(t)V_y(0)\rangle \tag{4.2.9}$$

$$\varphi_{31}(t) = \langle V_z(t)V_x(0)\rangle \tag{4.2.10}$$

(2) 基本的な性質

○ $\varphi_{\mu\nu}(t)$ の基本的な性質

● **定常過程から**

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(t')\rangle = \langle X_\mu(t-t')X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(0)X_\nu(t'-t)\rangle \tag{4.2.11}$$

$t'=0$ にすると、

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(0)X_\nu(-t)\rangle \tag{4.2.12}$$

$$= \langle X_\nu(-t)X_\mu(0)\rangle \tag{4.2.13}$$

したがって、

$$\boxed{\varphi_{\mu\nu}(t) = \varphi_{\nu\mu}(-t)} \tag{4.2.14}$$

● 特に $\mu=\nu$ の時

$$\boxed{\varphi_{\mu\mu}(t) = \varphi_{\mu\mu}(-t)} : \varphi_{\mu\mu}(t) \text{ は偶関数} \tag{4.2.15}$$

● (4.2.12) 式を t で微分

$$\left\langle \dot{X}_\mu(t)X_\nu(0)\right\rangle = -\left\langle X_\mu(0)\dot{X}_\nu(-t)\right\rangle \tag{4.2.16}$$

右辺の時間の原点を t だけずらす

$$\boxed{\left\langle \dot{X}_\mu(t)X_\nu(0)\right\rangle = -\left\langle X_\mu(t)\dot{X}_\nu(0)\right\rangle} \tag{4.2.17}$$

● 特に $\mu = \nu$ の時

$$\boxed{\dot{\varphi}_{\mu\mu}(0) = \left\langle \dot{X}_\mu(0) X_\mu(0) \right\rangle = 0} \tag{4.2.18}$$

○ 具体例

水等の液体中の液体粒子 1 つを考える (3 次元)。液体粒子に働くすべての力の合力の x 成分 F_x と液体粒子の位置ベクトルの x 成分 X を $X_1(t)$、$X_2(t)$ と対応させる。この場合もまわりの粒子とぶつかるので、粒子の位置も合力も不規則にゆらぐ。時間相関関数は、

$$\varphi_{11}(t) = \langle F_x(t) F_x(0) \rangle \tag{4.2.19}$$

$$\varphi_{12}(t) = \langle F_x(t) X(0) \rangle \tag{4.2.20}$$

等等。(4.2.13) 式は、

$$\langle F_x(t) X(0) \rangle = \langle X(-t) F_x(0) \rangle \tag{4.2.21}$$

(4.2.15) 式は、

$$\langle F_x(t) F_x(0) \rangle = \langle F_x(-t) F_x(0) \rangle \tag{4.2.22}$$

となり、偶関数を表す。

また、 $\ddot{X} = F_x/m$ だから、(4.2.17) 式を使うと、

$$\langle F_x(t) X(0) \rangle = m \left\langle \ddot{X}(t) X(0) \right\rangle = -m \left\langle \dot{X}(t) \dot{X}(0) \right\rangle \tag{4.2.23}$$

$\dot{X}$ は速度を表すので、力と位置の相関関数は速度相関関数に m をかけたものと符号が違うだけという事が分る。特に同時刻の場合は、速度が温度 T のマクスウェル分布していると、$\langle F_x(0) X(0) \rangle = -m \left\langle \dot{X}(0) \dot{X}(0) \right\rangle = -k_{\mathrm{B}} T$ と計算できる。ただし、m は液体粒子の質量、k_{B} はボルツマン定数を表す。

最後に (4.2.18) 式を使うと、

$$\left\langle F_x(0) \dot{X}(0) \right\rangle = m \left\langle \ddot{X}(0) \dot{X}(0) \right\rangle = 0 \tag{4.2.24}$$

つまり、加速度 (力) と速度の同時刻の相関は無い。

(3) 線型ランジュバン方程式の例

(4.2.1) 式の両辺に $X(0)$ をかけて平均する。$t \geq 0$ の時、

$$\left\langle \dot{X}(t) X(0) \right\rangle = -\gamma \langle X(t) X(0) \rangle \tag{4.2.25}$$

$\varphi(t) \equiv \langle X(t)X(0)\rangle$ とすると、

$$\dot{\varphi}(t) = -\gamma\varphi(t) \tag{4.2.26}$$

この解は指数関数になり、

$$\varphi(t) = \varphi(0)e^{-\gamma t} \tag{4.2.27}$$

$\varphi(0) = \left\langle X^2 \right\rangle$ だから、

$$\boxed{\varphi(t) = \left\langle X^2 \right\rangle e^{-\gamma t}} \qquad t \geq 0 \tag{4.2.28}$$

つまり、$X(t)$ **が線形ランジュバン方程式にしたがう場合は、時間相関関数は指数関数**になる。

例 1．ブラウン運動

　ブラウン粒子の速度を $V(t)$ とすると、ランジュバン方程式は、

$$\dot{V}(t) = -\gamma V(t) + R(t) \tag{4.2.29}$$

ここで、$\gamma = \lambda/m$((3.2.8) 式参照)。(4.2.28) 式から

$$\langle V(t)V(0)\rangle = \left\langle V^2 \right\rangle e^{-\gamma t} \tag{4.2.30}$$

$\left\langle V^2 \right\rangle = k_{\mathrm{B}}T/m$($k_{\mathrm{B}}$: ボルツマン定数、$T$: 温度) だから、

$$\langle V(t)V(0)\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}e^{-\gamma t} \tag{4.2.31}$$

■例題の答え　$A(t) = \dot{V}(t)$ なので、

$$\langle A(t)A(0)\rangle = \left\langle \dot{V}(t)\dot{V}(0) \right\rangle \tag{4.2.32}$$

(4.2.17) 式より

$$= -\left\langle \ddot{V}(t)V(0) \right\rangle \tag{4.2.33}$$

$\varphi(t) \equiv \langle V(t)V(0)\rangle$ とすると、

$$= -\ddot{\varphi}(t) \tag{4.2.34}$$

(4.2.31) 式から、

$$= -\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\gamma^2 e^{-\gamma t} \tag{4.2.35}$$

例 2. 熱雑音の回路

　コンデンサーにたまる電荷を $Q(t)$ とすると、

$$\dot{Q}(t) = -\frac{Q(t)}{CR} + R(t) \tag{4.2.36}$$

ここで、C はコンデンサーの容量、R は抵抗を表す。ランダム力 $R(t)$ は熱雑音による電圧を $V(t)$ とすると、$R(t) = V(t)/R$ という関係がある。(4.2.28) 式から

$$\langle Q(t)Q(0)\rangle = \left\langle Q^2\right\rangle \exp[-\frac{t}{CR}] \tag{4.2.37}$$

$\left\langle Q^2\right\rangle$ を計算するために平衡分布を考える。

$$P_{\mathrm{eq}}(q) = A\exp[-\beta\frac{q^2}{2C}] \tag{4.2.38}$$

ここで、A は規格化定数で、$\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$ とした。したがって、

$$\left\langle Q^2\right\rangle = \int q^2 A\exp[-\beta\frac{q^2}{2C}]dq = Ck_{\mathrm{B}}T \tag{4.2.39}$$

となる。これを代入すると、

$$\langle Q(t)Q(0)\rangle = Ck_{\mathrm{B}}T\exp[-\frac{t}{CR}] \tag{4.2.40}$$

(4) まとめ

○ 時間相関関数の 4 つの性質

1 $\varphi_{\mu\nu}(t) = \varphi_{\nu\mu}(-t)$: (4.2.14) 式

2 $\varphi_{\mu\mu}(t) = \varphi_{\mu\mu}(-t)$: (4.2.15) 式

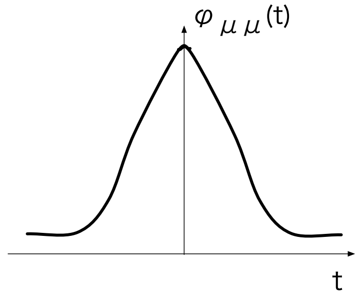


図 4.2.4

3 $\left\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \right\rangle = -\left\langle X_\mu(t) \dot{X}_\nu(0) \right\rangle$: (4.2.17) 式
4 $\varphi_{\mu\mu}(0) = 0$

これらは全て**定常過程**から導ける。

○ $X(t)$ が線形ランジュバン方程式にしたがう時、時間相関関数は指数関数で表される: (4.2.28) 式。

宿題:

39 (10 点) 3 つの時刻を含む平均 $\langle X(t_1)X(t_2)X(t_3)\rangle$ について、時間平均による定義を考えなさい。

40 (8 点) 次の二つの問題をどちらか選べ。両方解答しても 8 点にしかならない。
(a) 定常過程とは何かを授業の説明に沿ってまとめなさい。
(b) P.31 の**結論**の導出について、① 授業の説明に沿ってまとめ、② 仮定をどこに使っているかを明らかにしなさい。

41 (20 点) 3 つの時刻を含む平均 $\langle X(t_1)X(t_2)X(t_3)\rangle$ について、定常過程なら成り立つ性質を導きなさい。

42 (10 点) 線形ランジュバン方程式 (4.2.1) 式が成り立っているとき、$\left\langle (X(t))^3 X(0) \right\rangle$ を計算しなさい。ただし、ここでも $\langle X(0)R(t)\rangle = 0, t \geq 0$ を仮定する。

43 (20 点) (3.4.23) 式、(3.4.24) 式で、$U(X) = kX^2/2$ とした時の $\langle X(t)X(0)\rangle$ を計算しなさい。過減衰の場合だけで良い。また、$\left\langle (X(0))^2 \right\rangle$ はカノニカル分布で計算しなさい。

44 (30 点) (4.2.28) 式は (4.2.18) 式を満たしていないように見える。これは、(4.2.18) 式を導く時に暗にした仮定が、成り立たないためだが、その仮定を答えなさい。ただし、線形ランジュバン方程式 (4.2.1) 式は、$\langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t')$ とする時、$D = 2\gamma \left\langle (X(0))^2 \right\rangle$ が成り立っていて、$X(t)$ は定常過程とする。

45 (15 点) 線形ランジュバン方程式 (4.2.1) 式が成り立っているとき、$\psi(t-t') = \langle X(t)X(t')\rangle\,(t>0, t'>0)$ を実際に計算して、$\psi(t-t') = \psi(t'-t)$ を示せ。ただし、$t=0$ で $X(0) = X_0$(X_0 も確率変数) として、$D = 2\gamma \left\langle X_0^2 \right\rangle$ とする。