

1

物質概論 こうぞう科学

しけたい4 (お)

1 謝辞

無断転載禁止です



- ・アイコンは夏蛸様のものを転載しています
 - ・レポート問題の答えどこが違うんだと尋ねられると答えに困ります
 - ・間違いを見つけましたらご連絡ください
 - ・あくまで参考資料として扱ってください。レポートは自力で解くのをお勧めします
 - ・特に画像はしけたい4がレポートで使うので wiki から直接引用したもの以外は使用を勧めません
- 「こうぞう」を漢字で書こうとしてはいけません

2 揺雅に咲かせ、墨染の桜 ~ Border of Equilibrium



ふらふら～



あ、待ってください。どこへ行かれるのです？

・・・全くもう。こうもふらふらされては付いて行くのが大変じゃないですか。



そんな貴方に！

お勧めなのが此方のブラウン運動！

非平衡方程式や非平衡科学を覚えることで、ふらふらするお嬢様の行方も数学的に解っちゃいます YO ！



・・・斬りたい。

ま、まあ話しくらいは聞きましょうか。。

3 面倒なのでレポートの問題と解答



これが最近のお嬢様の行動パターンです。ランダムな力を f' としています。行動パターンを微分方程式に直すこうなっています。

$$\zeta \frac{dx(t)}{dt} = F' - ax(t) + f', \quad F' = qRe(\hat{E}e^{i\omega t})$$

そもそも、 x の時間微分なのにバネの力なのですか。。何か釈然としません。



あと、 $\mu = qx, \hat{\mu} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \mu(t) dt$ とすると、隙間妖怪曰く、解は

$$\alpha \equiv \frac{\langle \hat{\mu} \rangle}{\hat{E}} = \frac{1}{k_B T} \langle \mu^2 \rangle - \frac{i\omega}{k_B T} \int_0^{\infty} e^{-i\omega t'} \langle \mu(t') \mu(0) \rangle dt'$$

とのことなのですが、それがちょっと解らなくて。



なるほど。運動方程式かどうかはオマケで言及すればいいでしょう。まずは一番大事なレポートの答えから揃えちゃいましょう。

まず、四の五の言わずに微分方程式の両辺をフーリエ変換しましょう。複雑な式が苦手な人は

$$\mu(t) = \sum_{\omega} \hat{\mu}(\omega) Re(e^{i\omega t}) \text{ とでもして } C_{\omega} \text{ について考えれば良いでしょう。}$$



フーリエ変換した結果

$$\zeta Re(i\omega \frac{1}{q} \hat{\mu} e^{i\omega t}) = qRe(\hat{E} e^{i\omega t}) - aRe(\frac{1}{q} \hat{\mu} e^{i\omega t}) + \hat{f}$$

$\hat{f}$ はランダム力のフーリエ変換です。ま、平均すれば消えるので気にしない。



辺を移行し、期待値をとると

$$\langle \hat{\mu} \rangle = \frac{q^2 \hat{E}}{i\omega \zeta + a} Re(\hat{E})$$

よって、求めたい α は

$$\frac{q^2}{\zeta} \left(\frac{1}{i\omega + \frac{a}{\zeta}} \right) \text{ となります。先程の式がこれと同じであることを今から示しましょう。}$$



まず、等分配則より $\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{a}$ (なぜこうなるかはオマケ参照)

となります。次に講義プリントでもあった手法で $\int_0^{\infty} e^{-i\omega t'} \langle \mu(t') \mu(0) \rangle dt'$ を見積もりましょう。

此处で再び外力がない場合の微分方程式に戻ります*1。

$$\zeta \frac{dx(t)}{dt} = -ax(t) + f'$$

この両辺に $x(0)$ をかけ、期待値をとります。すると

$$\zeta \frac{d}{dt} \langle x(t)x(0) \rangle = -a \langle x(t)x(0) \rangle$$

となります。更に両辺に $e^{i\omega t}$ をかけ、 t について積分することで*2

$$\begin{aligned} & -a \int_0^{\infty} e^{-i\omega t'} \langle x(t)x(0) \rangle dt \\ & = \zeta \left[\int_0^{\infty} \frac{d}{dt} (e^{-i\omega t} \langle x(t)x(0) \rangle) + i\omega e^{-i\omega t} \langle x(t)x(0) \rangle dt \right] \\ & \rightarrow a + \zeta i\omega \int_0^{\infty} e^{-i\omega t'} \langle x(t)x(0) \rangle dt = \zeta [e^{-i\omega t} \langle x(t)x(0) \rangle]_0^{\infty} = \zeta \langle x(0)^2 \rangle \end{aligned}$$

*1 問題文には「外力がない場合の時間相関関数」とは書かれていなかったが、実際そのような指定があると思われる。今回の問題のように外力がある場合の相関関数は外力の項が加わってしまい式が成り立たない。



$$\langle x(0)^2 \rangle = \frac{k_B T}{a} \text{ より、} \\ \int_0^\infty e^{-i\omega t'} \langle \mu(t) \mu(0) \rangle dt = \frac{q^2 \zeta}{a + \zeta i \omega}$$



以上より

$$\frac{1}{k_B T} \langle \mu^2 \rangle = \frac{q^2}{a} \\ -i\omega \frac{1}{k_B T} \int_0^\infty e^{-i\omega t'} \langle \mu(t) \mu(0) \rangle dt = \frac{-i\omega q^2 \zeta}{a + \zeta i \omega} \\ \alpha = \frac{q^2}{\zeta} \left(\frac{1}{i\omega + \frac{\zeta}{a}} \right) = \frac{1}{k_B T} \langle \mu^2 \rangle - i\omega \frac{1}{k_B T} \int_0^\infty e^{-i\omega t'} \langle \mu(t) \mu(0) \rangle dt \\ \text{となり、題意が示せます。}$$



おお、素晴らしい！

って、それが解って何になるかー！

せめて、お嬢様がどこにどれくらいの確率で居るかじゃないと意味がないですし、そもそも確率論に従って考えるような関係じゃありません！



あらら、朝からそんな大きな声出したらお腹がすくわよ？

ほらほら、お饅頭あげるから寝ぼすけさんたちを驚かしちゃだめよ。



あ、このお饅頭、私が大好きな奴だ・・・

まさか、いつにも増してふらふらしてたのって・・・



くすん。。

4 オマケ 1：レポートの問題が運動方程式から出せない気がする件について



え、えっと。とても喋りにくい雰囲気ですがオマケの解説は私がやらさせていただきます。変な禪男は通報され、今は柏某所で服役中とのことなので。

*2 $t \rightarrow \infty e^{-i\omega t} \langle x(t)x(0) \rangle = 0$ としているが、フーリエ変換に於いて $t \rightarrow \infty e^{i\omega t} \rightarrow 0$ とする例は度々見られる。もうちょっと納得のいきやすい式としては、極めて微小な η を用いて $\omega \rightarrow \omega + i\eta$ とし、積分計算を $\eta \rightarrow 0$ の極限で表現している場合もある。兎にも角にも良く出るネタなので若干抵抗があっても受け入れてあげよう。



考え込むと難しいですが、仮定としては実は非常にシンプルです。摩擦が非常に強く、系の加速度を無視できるとすれば

$$\ddot{x} - \gamma \dot{x} - ax + f = 0$$

$$\gamma \dot{x} = -ax + f$$

となります。詳しくはオルンシュタイン＝ウーレンバックで調べると解りますよ。

5 オマケ 2：等分配則の考え方



幼女一人ってのもアグネスが怒りそうなので 5 ボス同盟でどうにかしましょう。



最近リバーシにはまってしまい、予定が空くとつい徹夜してしまうのでサクッと終わらせましょう。



一言でいえばある自由度 x がもたらすエネルギーが ax^2 で表されれば $\langle ax^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$ というお話です。ちょっと導出してみましょう。



分配関数 Z は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\beta ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi a}{\beta}}$$

$$\langle ax^2 \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(-\frac{1}{2} \ln \beta \right) = \frac{1}{2\beta} = \frac{1}{2} k_B T$$

先程の問題でいえば、バネ近似でしたのでエネルギーは $\frac{1}{2}ax^2$ で表されるので、 $\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{a}$ となります。

6 オマケ 3：ランジュバン方程式の解き方



$$\frac{dx(t)}{dt} = F' - \gamma x(t) + f' \text{ と表せるとき}$$

$$x(t) = x(0)e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} (F' + f') dt'$$

と表せることを利用します。まあ、この解の形を覚えていれば後は解くだけです。



レポート問題について考えてみましょう。問題で出てくる変数を以下のように定義し直します。 $\gamma \equiv \frac{\gamma}{\zeta}$ 、 $F = qE \cos \omega t$ 、 $\langle f(t)f(t') \rangle = 2\xi k_B T \delta(t' - t)$

$$\langle x(t) \rangle = \langle x(0)e^{-\gamma t} \rangle + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \langle F' + f' \rangle dt'$$

$$\langle f' \rangle = 0 \text{ より}$$

$$= x(0)e^{-\gamma t} + qE \left[\frac{1}{\omega} \sin \omega t + \frac{\gamma}{\omega^2} [\cos \omega t - e^{-\gamma t}] \right] (1 + \frac{\gamma^2}{\omega^2})^{-1} \equiv x(0)e^{-\gamma t} + A(t)$$



更に分散も考えると

$$\langle x(t)^2 \rangle = (x(0)e^{-\gamma t})^2 + 2x(0)e^{-\gamma t}A(t) + (A(t))^2 + \frac{1}{\gamma}\xi k_B T[1 - e^{-2\gamma t}]$$

となります。(計算ミスってるかもしれませんが。文献とかで調べたわけではないので)

7 オマケ 4：フォッカープランク方程式



フォッカープランク方程式は対象が

$$\frac{dx}{dt} = A(x) + f'$$

と、ランジュバン方程式より幅広い形で使うだけなら可能な方程式です。具体的なメソッドを紹介します。



上記の式を満たす物理量に対し、ある時刻 t で物理量が x である確率を $f(t, x)$ とします。このとき、微小時間 δt を用いて f の時間発展を以下のように書きなおします。

$$f(x, t + \delta t) = \int f(x - x', t) P(x - x'; x'; t, \delta t) dx'$$

$P(x - x'; x'; t, \delta t)$ は時刻 t に於いて $x - x'$ だった物理量が δt 後に x' の変化を受ける確率です



次に、この P をテイラー展開します。

$$f(x, t + \delta t) = \int [f(x, t) P(x; 0; t, \delta t) - x' \frac{\partial}{\partial x} (f(x, t) P(x; x'; t, \delta t)) + \frac{1}{2} x'^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (f(x, t) P(x; x'; t, \delta t))] dx'$$

今回は二次で打ち切りました。此处でいよいよ x の方程式の出番です。



δt が短く、その間是一定の速度で x が変化すると仮定すれば変化の期待値は

$$\delta t \langle x'(x, t) \rangle = \delta t \int x' P(x; x'; t, \delta t) dx' = \delta t \langle \dot{x}(x, t) \rangle$$

$$\delta t \langle (x'(x, t))^2 \rangle = \delta t \int (x')^2 P(x; x'; t, \delta t) dx' = \delta t \langle \dot{x}(x, t)^2 \rangle$$

となります。



x' についての積分を先に済ませてしまえば、何のことはなく、

$$f(x, t + \delta t) = f(x, t) \delta t - \left[\frac{\partial}{\partial x} (f(x, t) \langle \dot{x}(x, t) \rangle) + \frac{1}{2} x'^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (f(x, t) \langle \dot{x}(x, t)^2 \rangle) \right]$$

積分の第一項は外力が全く働かない場合に整合性を取れることを要請すると簡単です。



$\frac{f(x, t + \delta t) - f(x, t)}{\delta t} \sim \frac{\partial}{\partial t} f(x, t)$ とすれば、フォッカープランク方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = - \left[\frac{\partial}{\partial x} (f(x, t) \langle \dot{x}(x, t) \rangle) + \frac{1}{2} x'^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (f(x, t) \langle \dot{x}(x, t)^2 \rangle) \right]$$

が得られます。この確率微分方程式を解くことで、ブラウン運動の確率分布なども解りますよ！

8 参考文献



終盤は 5 ボス同盟の皆様のご協力を頂きました。ありがとうございます。さて、私はお嬢様が買ってくれたおまんじゅうを食べて休むとしま・・



・・・・食べられてる。



くすん。。



統計力学ハンドブック（朝倉書店）