2004 年度非平衡物理学 授業ノート 10

2004.12.21 担当 吉森 明

3-3. 久保公式

仮定 0. $X = X(t)$ は、不規則に時間変化する物理量。その分布は、フォッカー・プランク (FP) 方程式に従う。

(1) はじめに

○ 証明の流れ

① 数学的な準備 – 遷移確率 $T(x, x'; t)$

② $T(x, x'; t)$ で $\langle X(t) \rangle$ と $\psi(t)$ を表す。

③ $T(x, x'; t)$ を $f(t) = f_0$ 定数で展開。$\alpha(t)$ を求める。別の外場でも OK。

④ 久保公式の証明。

(3) 久保公式の導出

③ 遷移確率の摂動展開

問題設定補足: 授業ノート 9 の (16) 式は、$\alpha(t)$ の定義から、

$$x(t) = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t') f(t') dt' + a_2 f_0^2 + a_3 f_0^3 + \cdots \tag{1}$$

で、授業ノート 9 の (15) 式を代入すると、

$$= \int_{0}^{t} \alpha(t-t') f_0 dt' + a_2 f_0^2 + a_3 f_0^3 + \cdots \tag{2}$$

$\tau = t - t'$ に変数変換

$$= \int_{0}^{t} \alpha(\tau) d\tau f_0 + a_2 f_0^2 + a_3 f_0^3 + \cdots \tag{3}$$

ここで、

$$\Psi(t) = \int_{0}^{\infty} \alpha(\tau) d\tau \tag{4}$$

とすれば、授業ノート 9 の (16) 式になる。

便利な関係式の導出: $f(t)=f_0$ のもとで平衡分布は、f_0 の関数だから、$P_{\rm eq}(x,f_0)$ と書くことにする。遷移確率の性質から

$$\int_{-\infty}^{\infty} T(x,x';t,f_0)P_{\rm eq}(x',f_0)dx' = P_{\rm eq}(x,f_0) \tag{5}$$

これを使って、遷移確率の展開係数を求める。

$$T(x,x';t,f_0) = T(x,x';t,0) + \Delta T(x,x';t)f_0 + T_2 f_0^2 + T_3 f_0^3 + \cdots \tag{6}$$

$$P_{\rm eq}(x,f_0) = P_{\rm eq}(x,0) + \Delta P(x)f_0 + P_2 f_0^2 + P_3 f_0^3 + \cdots \tag{7}$$

とすると、(5) 式に代入して、f_0 の 1 次のオーダーで

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Delta T(x,x';t)P_{\rm eq}(x',0)dx' + \int_{-\infty}^{\infty} T(x,x';t,0)\Delta P(x')dx' = \Delta P(x) \tag{8}$$

が成り立つ事が分かる (宿題 39 参照)。

$\Delta P(x)$ は、仮定 2 と 3 から、計算できる。**仮定 2** から、

$$P_{\rm eq}(x,f_0) \propto \exp[-\beta E(x)] \tag{9}$$

仮定 3 を使うと、$f(t)=f_0$ だから、

$$P_{\rm eq}(x,f_0) \propto \exp[-\beta(E_0(x) - xf_0)] \tag{10}$$

したがって、

$$\Delta P(x) = P_{\rm eq}(x,0)\beta x \tag{11}$$

となることがわかる (宿題参照 39)。(11) 式を (8) 式に代入すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Delta T(x,x';t)P_{\rm eq}(x',0)dx' + \int_{-\infty}^{\infty} T(x,x';t,0)P_{\rm eq}(x',0)\beta x' dx' = P_{\rm eq}(x,0)\beta x \tag{12}$$

④ 平均 $\langle X(t)\rangle$ の計算

授業ノート 9 の (17) 式にこのノートの (6) 式を代入すると、

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x \int_{-\infty}^{\infty} T(x,x';t,0)P_{\rm eq}(x')dxdx' + \int_{-\infty}^{\infty} x \int_{-\infty}^{\infty} \Delta T(x,x';t)f_0 P_{\rm eq}(x')dxdx' + \cdots \tag{13}$$

1 項目は、$f_0=0$ の時の $x(t)$ だから、0 になる。2 項目は、授業ノート 9 の (16) 式から $\Psi(t)$ に比例する。

$$\Psi(t)=\int_{-\infty}^{\infty}x\int_{-\infty}^{\infty}\Delta T(x,x';t)P_{\mathrm{eq}}(x')dxdx' \tag{14}$$

(12) 式を変形すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Delta T(x,x';t)P_{\mathrm{eq}}(x',0)dx'=-\int_{-\infty}^{\infty}T(x,x';t,0)P_{\mathrm{eq}}(x',0)\beta x'dx'+P_{\mathrm{eq}}(x,0)\beta x \tag{15}$$

(14) 式に代入すると、

$$\Psi(t)=\int_{-\infty}^{\infty}x\{-\int_{-\infty}^{\infty}T(x,x';t,0)P_{\mathrm{eq}}(x',0)\beta x'dx'+P_{\mathrm{eq}}(x,0)\beta x\}dx \tag{16}$$

$$=-\int_{-\infty}^{\infty}x\int_{-\infty}^{\infty}T(x,x';t,0)P_{\mathrm{eq}}(x',0)\beta x'dxdx'+\int_{-\infty}^{\infty}xP_{\mathrm{eq}}(x,0)\beta xdx \tag{17}$$

1 項目は、授業ノート 9 の (14) 式から $\langle X(t)X(0)\rangle$ に比例し、2 項目は $\langle X^2\rangle$ に比例する。

$$\Psi(t)=-\beta\langle X(t)X(0)\rangle+\beta\langle X^2\rangle \tag{18}$$

$\alpha(t)=\dot{\Psi}(t)$ だから、

$$\alpha(t)=-\beta\langle\dot{X}(t)X(0)\rangle \tag{19}$$

(4) 具体例

液体に外場をかける (多変数の場合 → 宿題 40 参照)。

$$X_1=\sum_i^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \tag{20}$$

ここで、$\mathbf{r}_i$ は、i 番目の粒子の位置、N は、粒子数を表す。

仮定 3 は、エネルギーが

$$E=E_0+\sum_i^N\phi(\mathbf{r}_i) \tag{21}$$

と書けることから確かめられる。ただし、$\phi(\mathbf{r})$ は、外場のポテンシャルで、例えば、荷電粒子ならば、$V(\mathbf{r})$ を電位として、$\phi(\mathbf{r})=-qV(\mathbf{r})$ となる。(21) 式の 2 項目は

$$\sum_i^N\phi(\mathbf{r}_i)=\sum_i^N\int d\mathbf{k}\tilde{\phi}_k e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}=\int d\mathbf{k}\tilde{\phi}_k X_1^* \tag{22}$$

ここで、$\tilde{\phi}_k$ は、$\phi(\mathbf{r}_i)$ のフーリエ変換。ゆえに、

$$E = E_0 + \int d\mathbf{k}\tilde{\phi}_k X_1^* \tag{23}$$

したがって、$\boxed{X_2 = X_1^*}$ とすれば、宿題 40 の意味での**仮定 3** を満たせる。ただし、**符号が違う**事に注意。

特定の波数 $\tilde{\phi}_k$ に対する応答を考える。

$$\langle X_1(t)\rangle = \int_{-\infty}^{t} \alpha_{12}(t-t')\tilde{\phi}_k(t')dt' \tag{24}$$

久保公式は、

$$\alpha_{12}(t) = \beta\langle \dot{X}_1(t)X_2(0)\rangle \tag{25}$$

となる。(19) 式と符号が違うのは、(23) 式の符号が**仮定 3** と違うため。(25) は、

$$\alpha_{12}(t) = \beta\frac{d}{dt}F(k,t) \tag{26}$$

と書かれる。ここで、

$$F(k,t) = \langle X_1(t)X_2(0)\rangle = \langle X_1(t)X_1^*(0)\rangle \tag{27}$$

$$= \sum_{ij}^{N}\langle e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i(t) - i\mathbf{k}\mathbf{r}_j(0)}\rangle \tag{28}$$

これは、**中間散乱関数**と呼ばれる。

(25) 式を時間についてフーリエ変換すると、第 1 種揺動散逸定理が得られる (宿題 41 参照)。

$$\alpha''_\omega = -\frac{\omega\beta}{2}S(k,\omega) \tag{29}$$

ここで、α''_ω は、(39) 式で定義される α_ω の虚部、$S(k,\omega)$ は、**動的構造因子**と呼ばれ、

$$S(k,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(k,t)e^{i\omega t} \tag{30}$$

で表される。

宿題:

39 (10 点) (8) 式と (11) 式を示しなさい。

40 (20 点) N 個の変数 ($\{X_\mu(t)\} = X_1(t), X_2(t), \ldots, X_N(t)$) と外場 ($\{f_\mu(t)\} = f_1(t), f_2(t), \ldots, f_N(t)$) があるとき、久保公式を考えよう。1 個の変数の時と同様、N 個の変数の分布は、FP 方程式に従い、その他の仮定も 1. から 3. まで、同様に成り立っている。ただし、エネルギーは、

$$E(\{x_\mu\}) = E_0(\{x_\mu\}) - \sum_\mu^N x_\mu f_\mu(t) \tag{31}$$

と表される。このとき、多変数の久保公式

$$\alpha_{\mu,\nu}(t) = -\beta\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0)\rangle \tag{32}$$

を遷移確率を使って証明しなさい。ただし、$\alpha_{\mu,\nu}(t)$ は、

$$\langle X_\mu(t)\rangle = \sum_\nu^N \int_{-\infty}^t \alpha_{\mu,\nu}(t-t') f_\nu(t') dt' \tag{33}$$

で、定義されている。

41 (30 点) 第 1 種揺動散逸定理

久保公式

$$\alpha(t) = -\beta\langle \dot{X}(t) X(0)\rangle \tag{34}$$

のフーリエ変換を考える。ところが、$\alpha(t)$ は $t \geq 0$ でしか定義されていない。**つまり上式は、$t \geq 0$ でしか成り立たない。** したがって、単にフーリエ変換する事ができない。そこで、次の手順で第 1 種揺動散逸定理を証明しなさい。

(a) 次で定義されるフーリエ変換とラプラス変換

$$\tilde{\psi}(s) = \int_0^\infty \psi(t) e^{-st} dt \qquad : \text{ラプラス変換} \tag{35}$$

$$\psi(\omega) = \int_{-\infty}^\infty \psi(t) e^{i\omega t} dt \qquad : \text{フーリエ変換} \tag{36}$$

の間に、

$$\psi(z) = 2 \lim_{\epsilon \to +0} \Re\tilde{\psi}(-iz + \epsilon) \tag{37}$$

が成り立つことを示しなさい。ただし、$\psi(t)$ は偶関数である。

(b) 久保公式が $t \geq 0$ で成り立つことを使って、久保公式をラプラス変換をし、それから (37) 式により、第 1 種揺動散逸定理

$$\alpha''_\omega = \frac{\omega\beta}{2}\psi_\omega \tag{38}$$

を導け。ただし、

$$\alpha_\omega = \int_0^\infty \alpha(t)e^{i\omega t}dt \tag{39}$$

$$\psi(\omega) = \int_{-\infty}^\infty \langle X(t)X\rangle e^{i\omega t}dt \tag{40}$$

で、α''_ω は、α_ω の虚部を表す。

42 (30 点) 久保公式や揺動散逸定理を使った例をまとめ、レポートにしなさい。外場や応答する変数を具体的に説明し、それに対応する久保公式や揺動散逸定理を書き説明しなさい。また、授業でやった仮定を満たしているかどうかを論じなさい。満たしていないものを挙げても良い。ただし、授業でやったものと 36 の問題で挙げたものを除く。参照した文献は名前を明らかにすること。