2005 年度非平衡物理学 授業ノート 11

2006.1.19 担当 吉森 明

宿題と質問の締め切り: 宿題の締め切りを

2 月 2 日 (木)

にします。単位の必要は人は出して下さい。必ず手渡しにして下さい。質問については、次の授業までが締め切りですが、上記の締め切りまでに出してもらえると、60 点満点で採点します。締め切りを過ぎたら採点しません。

宿題のレポートと質問については、

http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/hguidan05.pdf

に PDF ファイルを載せています。

4-2. 時間反転対称性

目標 時間反転対称性から時間相関関数の新しい性質を導く。少なくとも、仮定を覚える。具体的には以下のことを分かる。

- 孤立系では初期値が分布すると考えると便利。
- 時間反転対称性はある変数変換についての方程式の性質。
- 時間反転対称性を持っている方程式は、時間反転をしたものも解に含まれる。
- 孤立系の時間反転対称性から、時間相関関数の新しい性質が導ける。

目次 (1) 位置付けと流れ

(2) 孤立系の平均

(3) 時間反転対称性

(4) 時間相関関数の性質

(5) まとめと注意

仮定 1. 時間相関関数を**時間反転対称性を満たす**孤立系で定義する。(定常過程)

2. ある複数の量 $\{X_\mu\} = \{X_1, X_2, \ldots\}$ を考え、これは q_l, p_l の関数とする。$X_\mu = X_\mu(\{q_l, p_l\})$。

$$X_\mu(\{q_l, -p_l\}) = \epsilon_\mu X_\mu(\{q_l, p_l\}) \qquad ;\epsilon_\mu = \pm 1 \tag{1}$$

結論　時間相関関数について、次の事が成り立つ。

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \epsilon_\mu\epsilon_\nu\langle X_\mu(-t)X_\nu(0)\rangle \tag{2}$$

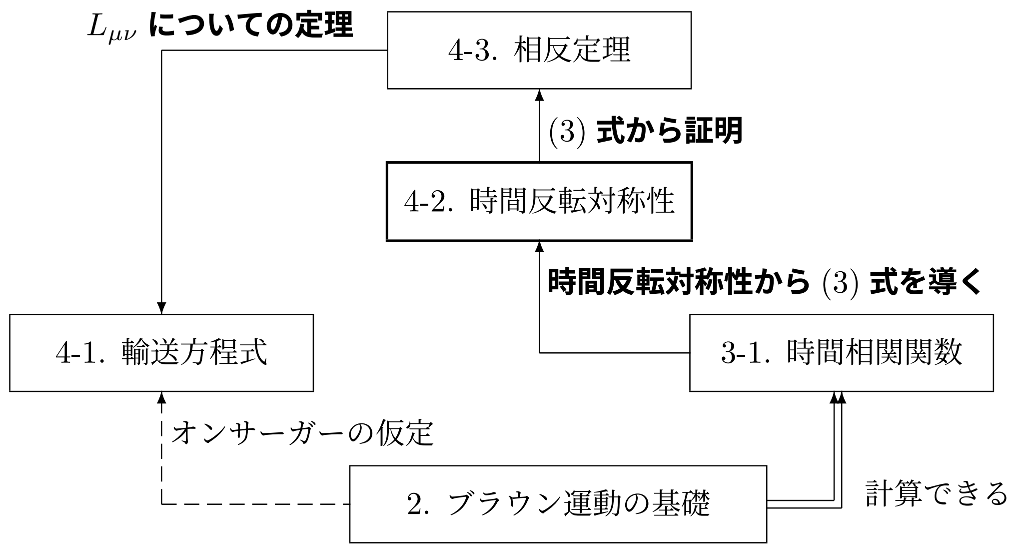
あるいは、定常過程から $\langle X_\mu(-t)X_\nu(0)\rangle = \langle X_\nu(t)X_\mu(0)\rangle$ なので、

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \epsilon_\mu\epsilon_\nu\langle X_\nu(t)X_\mu(0)\rangle \tag{3}$$

例題　レーザーに束縛された 1 次元のコロイド粒子を考える。まわりの液体を含めた孤立系が時間反転対称性を満たしている時に、$\langle X(t)V(0)\rangle$ と $\langle V(t)X(0)\rangle$ の関係を求めなさい。ただし、$X(t)$ と $V(t)$ は、コロイド粒子の位置と速度を表す。

(1) 位置付けと流れ

4-2. の位置付け



(2) 孤立系の平均

○ 平均と時間相関関数

今、ある量 X(t) が考えている系の全ての粒子の位置と運動量 $\{q_l(t), p_l(t)\}$ の関数とする。

$$X(t) = X(\{q_l(t), p_l(t)\}) \tag{4}$$

孤立系を考えているので、$q_l(t), p_l(t)$ は初期値 $q_l(0), p_l(0)$ を与えれば、ニュートン方程式により**完全に決まる。**つまり、$X(t)$ は $q_l(0), p_l(0)$ **と** t **の関数**である。

$$X(t) = X(\{q_l(t), p_l(t)\}) = f(t, \{q_l(0), p_l(0)\}) \tag{5}$$

$q_l(0), p_l(0)$ が分かれば、$q_l(t), p_l(t)$ が完全に分かって、$X(t)$ も分かる。しかしながら、$q_l(0), p_l(0)$ は完全には分からないので、分布を考える。今、$\rho(\{q_l, p_l\})$ を孤立系の分布関数とすると、平均値は、

$$\langle X(t)\rangle = \int d\Gamma f(t, \{q_l, p_l\})\rho(\{q_l, p_l\}) \tag{6}$$

とかける。ここで、$q_l(0) = q_l$、$p_l(0) = p_l$ で、$d\Gamma = \prod_l dq_l dp_l$。

平衡分布 $\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\})$ を使って、時間相関関数を次の様に表すことが出来る。

$$\langle X(t)X(0)\rangle = \int d\Gamma \underset{\substack{\uparrow \\ X(t)}}{f(t, \{q_l, p_l\})} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{初期} \\ (\text{t=0}) \\ \text{の X}}}{X(\{q_l, p_l\})} \underset{\substack{\uparrow \\ \boxed{\text{初期値で平均}}}}{\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\})} \tag{7}$$

X が 2 個以上ある時も同様に

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \int d\Gamma f_\mu(t, \{q_l, p_l\})X_\nu(\{q_l, p_l\})\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\}) \tag{8}$$

(3) 時間反転対称性

○ 微分方程式の一般的な関係

n 個の変数 $\{X_1, X_2, \ldots, X_n\} = \{X_\mu\}$ に対する常微分方程式を考える。

$$\dot{X}_\mu(t) = F(\{X_\mu(t)\}), \qquad \mu = 1, \ldots, n \tag{9}$$

一般に次の定理が証明できる (宿題 46)。

定理　ある変数変換 $X_\mu \to X'_\mu = g_\mu(\{X_\mu\}), t \to t' = h(t)$ を考える。逆に解いて X_μ, t を X'_μ, t' で表し、(9) 式に代入すると、

$$\dot{X}'_\mu(t') = F(\{X'_\mu(t')\}), \qquad \mu = 1, \ldots, n \tag{10}$$

が得られる時、

1. $X_\mu(t)$ が (9) 式の解であれば、$X'_\mu(t')$ も (9) 式の解。
2. 初期条件を X^0_μ として、(9) 式の解を $X_\mu(t) = f_\mu(t, \{X^0_\mu\})$ と書くと、

$$X'_\mu(t') = f_\mu(t, \{X'^0_\mu\}) \tag{11}$$

となる。ただし、$X'^0_\mu = g_\mu(X^0_\mu)$ とした。

例: 孤立系でのニュートン方程式

$$\dot{q}_l(t) = \frac{p_l(t)}{m} \tag{12}$$

$$\dot{p}_l(t) = -\frac{\partial V(\{q_l(t)\})}{\partial q_l(t)} \tag{13}$$

は、次の変数変換 (時間反転) に対して不変。

$$t \to t' = -t, \tag{14}$$

$$q_l \to q'_l(t') = q_l(t), \qquad p_l \to p'_l(t') = -p_l(t) \tag{15}$$

なぜなら、(15) 式の両辺を t で微分すると、$\boxed{dt'/dt = -1}$ だから、

$$-\dot{q}'_l(t') = \dot{q}_l(t), \qquad -\dot{p}'_l(t') = -\dot{p}_l(t) \tag{16}$$

(15) 式と (16) 式を (12) 式と (13) 式に代入

$$-\dot{q}'_l(t') = \frac{-p'_l(t')}{m} \tag{17}$$

$$\dot{p}'_l(t') = -\frac{\partial V(\{q'_l(t')\})}{\partial q'_l(t')} \tag{18}$$

これらは、(12) 式と (13) 式と同じ形をしている。

○ 孤立系の関係式

(12) 式と (13) 式の解を、初期条件 $q_l(0) = q_l^0, p_l(0) = p_l^0$ として、$q_l(t) = q_l(t, \{q_l^0, p_l^0\})$、$p_l(t) = p_l(t, \{q_l^0, p_l^0\})$ と書くと、

$$q'_l(t') = q_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\}) \tag{19}$$

$$p'_l(t') = p_l(t, \{q_l^0, -p_l^0\}) \tag{20}$$

例: 自由粒子 (1 次元)

$$\dot{q}(t) = \frac{p(t)}{m} \tag{21}$$

$$\dot{p}(t) = 0 \tag{22}$$

は、

$$q(t, q^0, p^0) = \frac{p^0}{m}t + q^0 \tag{23}$$

$$p(t, q^0, p^0) = p^0 \tag{24}$$

と解ける。この場合、(19) 式と (20) 式の左辺は、

$$q'(t') = \frac{p^0}{m}(-t) + q^0 \tag{25}$$

$$p'(t') = -p^0 \tag{26}$$

右辺は、

$$q(t, q^0, -p^0) = \frac{-p^0}{m}t + q^0 \tag{27}$$

$$p(t, q^0, -p^0) = -p^0 \tag{28}$$

で同じになる。

宿題:

43 (20 点) cirtical slowing down で、輸送方程式から導かれた次の方程式を解きなさい。

(a) 臨界点 T_c より上の温度で $(T > T_c)$、

$$\dot{x} = -2L'a(T - T_c)x \tag{29}$$

(b) ちょうど臨界点 T_c の温度で $(T = T_c)$、

$$\dot{x} = -4L'bx^3 \tag{30}$$

ただし、x は磁化などのオーダーパラメータを表す。

44 (20 点) 孤立系の平均 (6) 式と時間相関関数 (7) 式は、3-4 で説明したように遷移確率で表すことも出来る。孤立した位相空間上の遷移確率を $T(\{q_l, p_l\}, \{q_l^0, p_l^0\}, t)$ と書いた時に、$\langle X(t) \rangle$ と $\langle X(t)X(0) \rangle$ を $T(\{q_l, p_l\}, \{q_l^0, p_l^0\}, t)$ を使って表しなさい。また、

$$\hat{U}X(\{q_l^0, p_l^0\}) \equiv \int U(\{q_l^0, p_l^0\}, \{q_l, p_l\}, t)X(\{q_l, p_l\})d\Gamma \tag{31}$$

とした時、$f(t,\{q_l^0,p_l^0\}) = \hat{U}X(\{q_l^0,p_l^0\})$ となるように $U(\{q_l^0,p_l^0\},\{q_l,p_l\},t)$ を定義する。この場合、$U(\{q_l^0,p_l^0\},\{q_l,p_l\},t) = T(\{q_l,p_l\},\{q_l^0,p_l^0\},t)$ とすれば、遷移確率を使った平均と時間相関関数の式が (6) 式と (7) 式に等しくなることを示しなさい。$\hat{U}$ は時間推進演算子と呼ばれる。

45 (20 点) 前問の問いで文献を調べて $U(\{q_l^0,p_l^0\},\{q_l,p_l\},t) = T(\{q_l,p_l\},\{q_l^0,p_l^0\},t)$ を証明しなさい。調べた文献は、明記すること。

ヒント: リュービル演算子を使う。

46 (20 点) 3 ページの**定理**を証明しなさい。