2005 年度非平衡物理学 授業ノート 8

2005.12.15 担当 吉森 明

3-3. 時間遅れの応答

(3) 線形ランジュバン方程式による例

○ 線形ランジュバン方程式に外場 $f(t)$ を加える。

$$\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t) + f(t) \tag{1}$$

$\boxed{x(t) = \langle X(t) \rangle}$ と考える。両辺平均をとると、$\langle R(t) \rangle = 0$、$\langle f(t) \rangle = f(t)$ だから、

$$\langle \dot{X}(t) \rangle = -\gamma \langle X(t) \rangle + f(t) \tag{2}$$

$\langle \dot{X}(t) \rangle = d\langle X(t) \rangle / dt = \dot{x}(t)$ だから、

$$\dot{x}(t) = -\gamma x(t) + f(t) \tag{3}$$

(3) 式は係数変化法で解くことが出来る (**付録**参照)。$t = t_0$ のとき $x = x(t_0)$ とすると、

$$x(t) = \mathrm{e}^{-\gamma(t-t_0)} x(t_0) + \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{-\gamma(t-t')} f(t') dt' \tag{4}$$

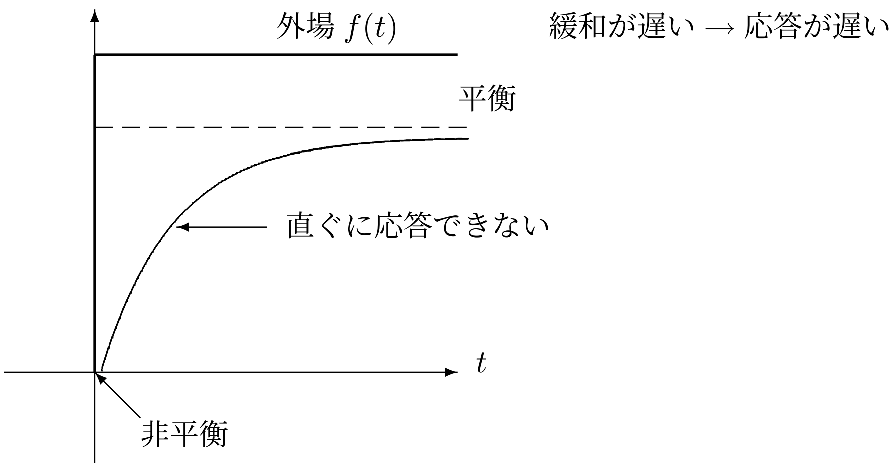
$x(t_0) = 0$ を仮定して、$t_0 \to -\infty$ とする。

$$x(t) = \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{-\gamma(t-t')} f(t') dt' \tag{5}$$

つまり、$\alpha(t) = \exp[-\gamma t]$

(4) まとめと補足

○ 緩和が遅いと応答に時間遅れが起こること



問題の答え

ランジュバン方程式は、

$$\dot{X}(t) = -\gamma u'(t) + R(t) \tag{6}$$
$$= -\gamma k(X - x_0(t)) + R(t) \tag{7}$$

これは、(3) 式で、$\begin{cases} \gamma \to \gamma k \\ f \to \gamma k x_0(t) \end{cases}$ としたものと同じだから、

$$x(t) = \langle X(t) \rangle = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')\gamma k x_0(t')dt' \tag{8}$$

で、

$$\alpha(t) = e^{-\gamma k t} \tag{9}$$

$x_0(t) = A\cos\omega t = \Re A e^{i\omega t}$ ($\Re$ は実部を表す記号) だから、

$$x(t) = \Re \int_{-\infty}^{t} e^{-\gamma k(t-t')}\gamma k A e^{i\omega t'}dt' \tag{10}$$
$$= \Re e^{-\gamma k t}\int_{-\infty}^{t} \gamma k A e^{\gamma k t' + i\omega t'}dt' \tag{11}$$
$$= \Re e^{-\gamma k t}\left[\gamma k A \frac{e^{\gamma k t' + i\omega t'}}{\gamma k + i\omega}\right]_{-\infty}^{t} \tag{12}$$
$$= \Re \gamma k A \frac{e^{i\omega t}}{\gamma k + i\omega} \tag{13}$$
$$= \gamma k A \frac{\gamma k}{\gamma^2 k^2 + \omega^2}\cos\omega t + \gamma k A \frac{\omega}{\gamma^2 k^2 + \omega^2}\sin\omega t \tag{14}$$

$\sin\omega t$ に比例する項は、レーザーの動きから位相がずれていることを表している。

付録: (4) 式を (3) 式を解いて導く。

まず、$f(t) = 0$ の方程式 $\dot{x}(t) = -\gamma x(t)$ を考えて、この方程式を解くと、

$$x(t) = Ce^{-\gamma t} \tag{15}$$

C は、時間によらない定数だが、本当に解きたいのは、(3) 式だから、$C = C(t)$ としてみる。$x(t) = C(t)\exp[-\gamma t]$ を (3) 式に代入すると、$\dot{x}(t) = \dot{C}(t)\exp[-\gamma t] - \gamma C(t)\exp[-\gamma t]$ だから、

$$\dot{C}(t)e^{-\gamma t} = f(t) \tag{16}$$

$$\dot{C}(t) = f(t)e^{\gamma t} \tag{17}$$

$$C(t) = \int^{t} f(t')e^{\gamma t'}dt' \tag{18}$$

積分は不定積分で、これから

$$x(t) = e^{-\gamma t}\int^{t} f(t')e^{\gamma t'}dt' \tag{19}$$

(19) 式は、特殊解で一般解は

$$x(t) = Ae^{-\gamma t} + \int^{t} e^{-\gamma(t-t')}f(t')dt' \tag{20}$$

A は、$t = t_0$ の $x(t)$ の値から決まる定数で、$t = t_0$ のとき $x = x(t_0)$ としたから、(4) 式が求まる。

3-4. 久保公式

目標 久保公式の導出とその仮定を理解する。さらに、導出に使う遷移確率の意味と使い方も理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 久保公式は線形応答の $\alpha(t)$ と時間相関関数を結ぶ。
- 久保公式は遷移確率を使って証明出来る。
- 遷移確率は、時刻 t' に x' という条件のもので、時刻 t に x に遷移する確率を表す。
- 遷移確率で非平衡の平均と時間相関関数が表せる。
- 遷移確率を外場で展開し、久保公式を証明する。
- 久保公式には主な仮定が 3 つあり、その 3 つは重要。
- 動的構造因子は、線形応答と関係がある。

目次

(1) はじめに

(2) 準備 (遷移確率)

(3) 久保公式の導出

(4) 具体例

(5) まとめと仮定について

仮定

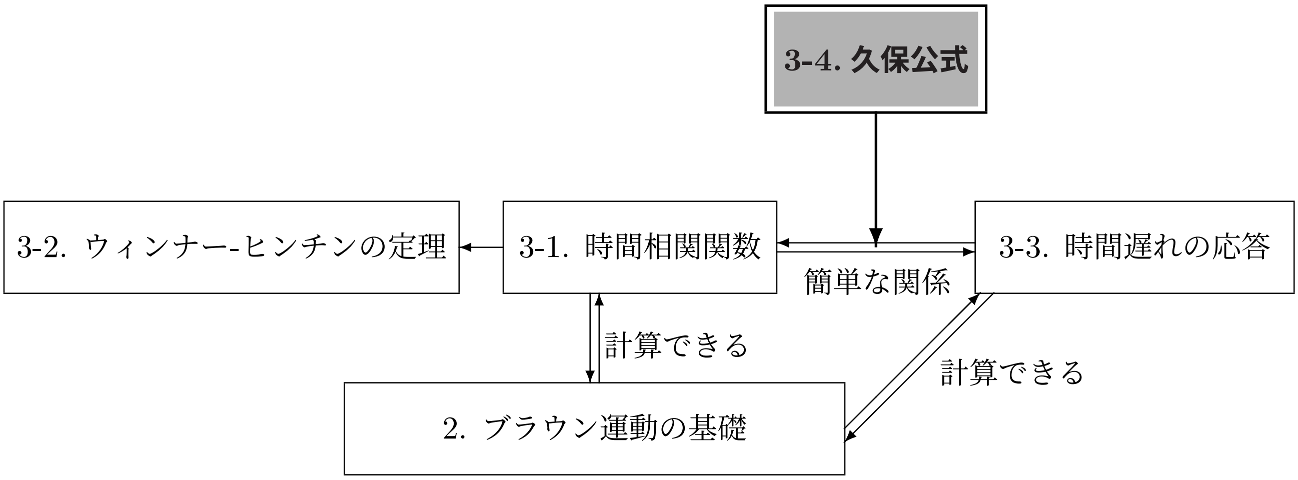
0. $X = X(t)$ は、不規則に時間変化する変数。その分布は、フォッカー・プランク (FP) 方程式に従う。
1. X の分布は、外場をかける前は、**外場 0** の平衡状態。
2. 外場が時間変化しない時、平衡状態はカノニカル分布になる。つまり、$E(x)$ をエネルギーとすると、平衡分布は $\exp[-\beta E(x)]$ に比例する。
3. $f(t)$ を外場とすると、$E(x) = E_0(x) - xf(t)$

結論

$$\text{久保公式} \qquad \alpha(t) = -\beta\langle \dot{X}(t)X(0)\rangle \tag{21}$$

(1) はじめに

○ 流れ:



○ 例: 熱雑音の回路

電圧が時間変化する電源 $E(t)$ を考えると、コンデンサーにかかる電圧は、$Q(r)/C$ だから、

$$\frac{Q(t)}{C} + RI = V(t) + E(t) \tag{22}$$

$I = \dot{Q}(t)$ で、

$$\dot{Q}(t) = -\frac{Q(t)}{RC} + \frac{V(t)}{R} + \frac{E(t)}{R} \tag{23}$$

これは、(1) 式で

$$\gamma = \frac{1}{RC}, \qquad f(t) = \frac{E(t)}{R} \tag{24}$$

とおくのと同じ。したがって、

$$q(t) = \langle Q(t) \rangle_{\mathrm{neq}} = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')E(t')dt' \tag{25}$$

とすると、(5) から

$$\langle Q(t) \rangle_{\mathrm{neq}} = \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{-\frac{(t-t')}{CR}} \frac{E(t')}{R} dt' \tag{26}$$

だから、

$$\alpha(t) = \frac{1}{R} \exp[-\frac{t}{CR}] \tag{27}$$

ただし、$\langle \ldots \rangle_{\mathrm{neq}}$ は、外場がある時の平均を表す。

一方、相関関数は、$E(t)=0$ で計算、

$$\dot{Q}(t) = -\frac{Q(t)}{RC} + \frac{V(t)}{R} \tag{28}$$

だから、

$$\langle Q(t)Q(0)\rangle = Ck_{\mathrm{B}}Te^{-\frac{(t-t')}{CR}} \tag{29}$$

(宿題 31 参照)。ここで、$\langle\ldots\rangle$ は、外場がない時の平均を表す。

(2) 準備 (遷移確率)

①遷移確率の定義と物理的な意味

○ 定義: $X = X(t)$ は、不規則に時間変化する変数で、その分布が、フォッカー・プランク (FP) 方程式に従う時、(**仮定 0**)

遷移確率 $T(x, x', t, t')$: 時刻 t' で $X = x'$ という条件のもとで、時刻 t に $X = x$ となる確率

つまり、x' から x に遷移する確率を表す。

○ $T(x, x', t, t')$ は、FP 方程式を満たす。

$$\frac{\partial T(x, x', t, t')}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)T(x, x', t, t')\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 T(x, x', t, t')}{\partial x^2} \tag{30}$$

ただし、$t = t'$ は確定で $T(x, x', t, t) = \delta(x - x')$: 初期条件

○ 定常過程: $T(x, x', t, t') = T(x, x', t - t') \leftarrow$ 時間の差だけによる。

○ 任意の初期条件の分布関数 $P(x, t)$ は、$T(x, x', t)$ で表せる。$t = 0$ の分布を $P_0(x)$ とすると、

$$\boxed{P(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} T(x, x', t)P_0(x')dx'} \tag{31}$$

は、FP 方程式も初期条件も満たす (宿題 32 参照)。

(31) 式は、$P(x, t)$ が **2 つの分布の要因がある**ことを示している。

1. $t = 0$ で $X(0) = x'$ と確定しても、時刻 t では分布する: $T(x, x', t)$ (**ランダム力による分布**)

2. $t=0$ ですでに分布: $P_0(x')$ (**初期値による分布**)

特に平衡分布 $P_{\rm eq}(x)$ は時間変化しないから、

$$\boxed{P_{\rm eq}(x)=\int_{-\infty}^{\infty}T(x,x',t)P_{\rm eq}(x')dx'} \tag{32}$$

②平均値と時間相関関数を遷移確率で表す。

○ $\langle X(t)\rangle_{\rm neq}$ を $T(x,x',t)$ で表す。(31) 式から

$$\langle X(t)\rangle_{\rm neq}=\int_{-\infty}^{\infty}xP(x,t)dx=\int_{-\infty}^{\infty}x\int_{-\infty}^{\infty}T(x,x',t)P_0(x')dxdx' \tag{33}$$

○ 時間相関関数 $\varphi(t)\equiv\langle X(t)X(0)\rangle$

平均を 2 つに分ける。

1. $t=0$ で $X(0)=x'$ に確定しておいて (条件付き)、時刻 t で平均: $\langle X(t)\rangle_{x'}$ (**ランダム力による平均**)
2. x' で平均 (**初期値による平均**)

このように平均を 2 つに分ければ、時間相関関数を遷移確率で表すことができる。まず、1. の平均は、$t=0$ で x' に確定していると言う条件の下での平均なので、遷移確率 $T(x,x',t)$ を使えば良い。

$$\langle X(t)\rangle_{x'}=\int_{-\infty}^{\infty}xT(x,x',t)dx \tag{34}$$

これは、遷移確率 $T(x,x',t)$ が $X(0)=x'$ の条件の下での確率分布になっていることから分かる。

2. の平均は、x' の平均だから、初期値が平衡分布の時、

$$\langle X(t)X(0)\rangle=\langle\langle X(t)\rangle_{x'}x'\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}xT(x,x',t)dxx'P_{\rm eq}(x')dx' \tag{35}$$

宿題:

29 (20 点) 問題 25 でレーザーにトラップされたコロイド粒子に外場をかけると、

$$m\ddot{X}(T) = -\gamma\dot{X}(t) - kX(t) + f(t) + R(t) \tag{36}$$

と書ける。この場合も、$x(t) = \langle X(t)\rangle$ とすれば、時間遅れの応答の式 (**??**) 式が成り立つことを示し、$\alpha(t)$ を求めなさい。ただし、$\langle R(t)\rangle = 0$ とする。

30 (40 点) 授業で説明した例以外に、線形応答の具体例を次の点にしたがって、挙げなさい。① どういう状況で、② 何の外場をかけると、③ どういう変数が、④ どう応答するか、⑤ 線形応答の式を書いて具体的に説明しなさい。また、応答に時間後れがある場合、その原因を論じなさい。

31 (5 点) (29) 式を示しなさい。

32 (10 点) 遷移確率 $T(x,x',t,t')$ が (30) 式を満たし、$t = t'$ で $T(x,x',t',t') = \delta(x-x')$ となる時、(31) 式で表される $P(x,t)$ が、FP 方程式を満たし、$t = t'$ で $P(x,t) = P_0(x)$ となることを示しなさい。

33 (20 点) 単位時間あたり $S(t)$ の割合で粒子が増える系を考える。系の中ではランジュバン方程式にしたがい、§2-2 で説明した仮定が全て成り立っているとすると、粒子の位置 x についての分布関数は、

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\{F(x)P(x,t)\} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} + S(t) \tag{37}$$

にしたがって時間変化する。$t = 0$ で $P(x,0) = 0$ の時、$P(x,t)$ を遷移確率 $T(x,x',t,t')$ で表せ。ただし、$T(x,x',t,t')$ は、(30) 式を満たし、$t = t'$ で $T(x,x',t',t') = \delta(x-x')$ となる。