2003年度非平衡物理学 授業ノート 4

2002.5.15 担当 吉森 明

§3. ブラウン運動の基礎III (第２種揺動散逸定理) (続き)

(4) まとめ

○ 1変数の時

平衡状態 $S(x)$

↓

第２種揺動散逸定理 (FDT)

↗ ↖

$L, F(X)$(散逸)　　ランダム力の強さ (揺動)D

○ 多変数の場合 (宿題17参照): $\{X_\mu\} = \{X_1, X_2, \ldots\}$

$$\dot{X}_\mu = \sum_{\nu}^{n} L_{\mu\nu} \frac{\partial S(\{X_\mu\})}{\partial X_\nu} + R_\mu(t) \qquad \langle R_\mu(t) R_\nu(t) \rangle = D_{\mu\nu}\delta(t - t') \tag{1}$$

$e^{S(\{x_\mu\})}$が平衡解という仮定の他に+**詳細釣り合い**で、

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

§4. 時間相関関数

§4-1. 定義と性質

目標 定義と性質を理解する。何に使えるか。性質は何から導けるか。具体的には以下のことを分かる。

- 時間相関関数 (TCF) の定義はサンプルの平均と時間平均がある。
- 時間相関関数 (TCF) は不規則な運動を特徴付けるのに便利。
- 時間相関関数 (TCF) は未来の予想しやすさと関係。
- 定常過程は時間の原点をずらしても平均量は変わらない。
- 結論は定常過程から導ける。
- 時間相関関数 (TCF) は線形ランジュバン方程式から簡単に導ける。

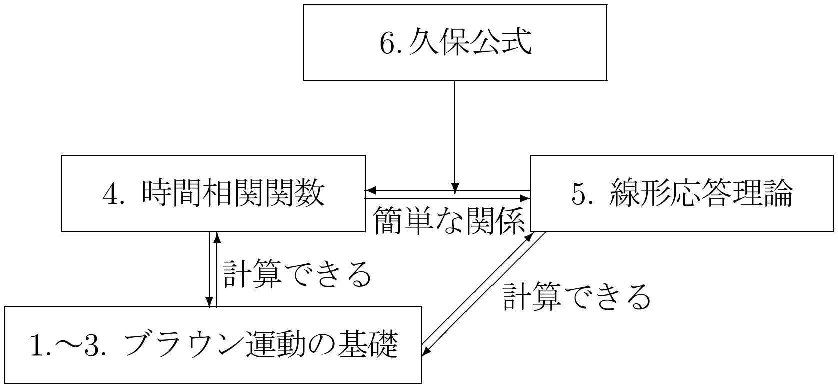
目次 (1) §4から§6までの流れ
(2) 定義と物理的な意味
(3) 基本的な性質
(4) ランジュバン方程式からの計算

仮定 定常過程 (時間の原点をずらしても、**平均量**は変らない)。

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

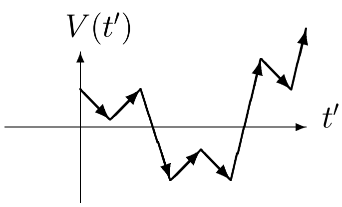
さらに、$\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(t) \dot{X}_\nu(0) \rangle$。特に$\mu = \nu$の時、$\dot{\psi}_{\mu\mu}(0) = 0$。

(1) §4から§6までの流れ

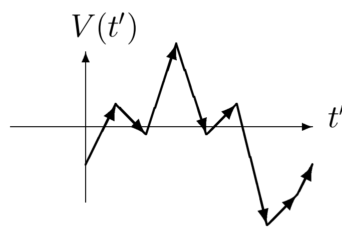


(2) 定義と物理的な意味

○ 液体Aに微粒子を溶かす。$V(t)$ =微粒子の速度

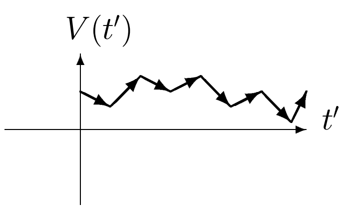


1回目

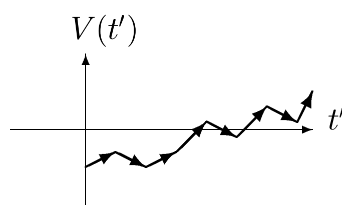


2回目 (1回目と似ている。)

ところが別の液体Bに微粒子を溶かして測ると、



1回目



2回目 (1回目と似ている。)

Aとはかなり違う。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を定量化する方法はないのか?**

①サンプル平均による定義

不規則に変動する$X(t)$に対して

$$\langle X(t) X(t') \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} X_i(t) X_i(t') \tag{3}$$

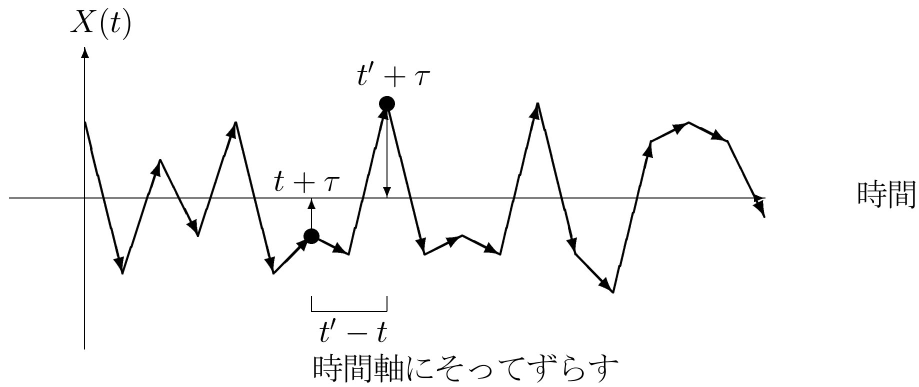
$\langle R(t) R(t') \rangle$と同じ。

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つのサンプル $X(t)$ について、



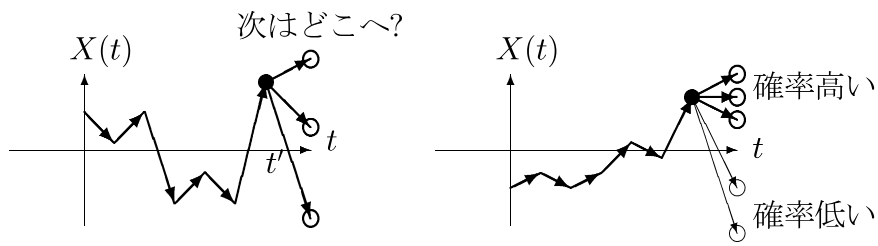
定常過程であっても、①と②が何時も同じになるとは限らない。等価な時をエルゴード性が成り立つという。

○ 時間相関関数は不規則な運動を特徴づける。

液体 AB の場合、

$$\left.\begin{array}{l} \mathrm{A} \longrightarrow \langle V(t)V(t')\rangle \sim 0 \\ \mathrm{B} \longrightarrow \langle V(t)V(t')\rangle > 0 \end{array}\right\} \boxed{\text{区別できる}} \tag{5}$$

○ 時間相関関数は未来の予測に関係。



$\langle X(t)X(t')\rangle = 0$ $\qquad$ $\langle X(t)X(t')\rangle > 0$

B は次にどの値を取るか予想できるが、A は出来ない。

(3) 基本的な性質

○定常過程

時間の原点をずらしても $\boxed{\text{平均量}\langle\cdots\rangle}$ は、変わらない。

↑

1つ1つの時系列 (サンプル) $X(t)$ は変わる。

時間の原点をずらす: $t \to t+a$

例 • 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、$\langle X(t)\rangle = \langle X(t+a)\rangle$。したがって、$\langle X(t)\rangle =$定数、$t$ によらない。

2つの時刻の平均量 $\langle X(t)X(t')\rangle$ の場合、定常過程ならば、$\langle X(t)X(t')\rangle = \langle X(t+a)X(t'+a)\rangle$。$a=-t'$とすると、

$$\langle X(t)X(t')\rangle = \langle X(t-t')X(0)\rangle : 2\text{つの時刻差}\, t-t'\text{にしかよらない} \tag{6}$$

そこで、

$$\psi(t-t') \equiv \langle X(t-t')X(0)\rangle = \langle X(t)X(t')\rangle \tag{7}$$

○ 基本的な性質
● 定常過程から(**仮定**)

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(t')\rangle = \langle X_\mu(t-t')X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(0)X_\nu(t'-t)\rangle \tag{8}$$

$t'=0$にすると、

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(0)X_\nu(-t)\rangle \tag{9}$$

したがって、

$$\boxed{\psi_{\mu\nu}(t) = \psi_{\nu\mu}(-t)} \tag{10}$$

● 特に$\mu=\nu$の時

$$\boxed{\psi_{\mu\mu}(t) = \psi_{\mu\mu}(-t)} : \psi_{\mu\mu}(t)\,\text{は偶関数} \tag{11}$$

● (9)式をtで微分

$$\langle \dot{X}_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = -\langle X_\mu(0)\dot{X}_\nu(-t)\rangle \tag{12}$$

右辺の時間の原点をtだけずらす

$$\boxed{\langle \dot{X}_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = -\langle X_\mu(t)\dot{X}_\nu(0)\rangle} \tag{13}$$

● 特に$\mu=\nu$の時

$$\boxed{\dot{\psi}_{\mu\mu}(0) = \langle \dot{X}_\mu(0)X_\mu(0)\rangle = 0} \tag{14}$$

宿題の訂正: 問題9を授業中に説明しましたが、やっぱり間違えていました。sの微分が必要です。申し分けありません。
それから、問題10も条件が足りませんでした[1]。お詫び致します。

9(20点) 誤 (36)式

$$\frac{\partial P(\mathbf{s},t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\partial}{\partial \mathbf{s}}\gamma \mathbf{s}\times\mathbf{H} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{s}}\mathbf{\Gamma}(\mathbf{s}-\mathbf{S}_0) + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{s}^2}\frac{D}{2} \right\} P(\mathbf{s},t) \tag{15}$$

正

$$\frac{\partial P(\mathbf{s},t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\partial}{\partial \mathbf{s}}\cdot[\gamma \mathbf{s}\times\mathbf{H}] + \frac{\partial}{\partial \mathbf{s}}\cdot\mathbf{\Gamma}(\mathbf{s}-\mathbf{S}_0) + \frac{\partial}{\partial s}[\mathbf{\Gamma}(\mathbf{s}-\mathbf{S}_0)]_r + \frac{\partial^2}{\partial s^2}\frac{D}{2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{s}^2}\frac{D}{2} \right\} P(\mathbf{s},t) \tag{16}$$

ここで、$[\mathbf{\Gamma}(\mathbf{s}-\mathbf{S}_0)]_r$は、$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{s}-\mathbf{S}_0)$の$\mathbf{e}_r$成分。

[1] これは、凝縮系科学専攻の大久保毅さんの指摘です。有り難う御座いました。

10(20点) $D > 0$を加えて下さい。

宿題:

13(20点) 磁場中のスピンの分布は

$$P_{\rm eq}(\mathbf{s}) \propto e^{\beta \mathbf{s}\cdot\mathbf{H}} \tag{17}$$

となる事が知られている。(16)式でDがどんな値を取っても、$P_{\rm eq}(\mathbf{s})$が(16)式の閉じた定常解にならないことを示しなさい。

14(20点) 正しいスピン緩和を表すランジュバン方程式は、(宮崎・関1998)

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{S}}{dt} &= \gamma\mathbf{S}\times(\mathbf{H}+\mathbf{\Delta H}) && (18)\\ \frac{d\mathbf{\Delta H}}{dt} &= -\frac{1}{\tau_c}(\mathbf{\Delta H}-\chi\mathbf{S})+\mathbf{R}(t) && (19)\end{aligned}$$

$\mathbf{\Delta H}$はスピンにかかるまわりからの磁場で、これ自身も確率変数としてゆらぐ。問題9とまったく同じ条件で、

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{s},\mathbf{\Delta h},t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{s}}\cdot\{\gamma\mathbf{S}\times(\mathbf{H}+\mathbf{\Delta h})\}P(\mathbf{s},\mathbf{\Delta h},t)\\ &\quad+\left\{\frac{\partial}{\partial\mathbf{\Delta h}}\cdot\frac{1}{\tau_c}(\mathbf{\Delta h}-\chi\mathbf{S})+\frac{D}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\mathbf{\Delta h}}\right)^2\right\}P(\mathbf{s},\mathbf{\Delta h},t) \qquad (20)\end{aligned}$$

を導きなさい。

また、この場合の平衡解$P_{\rm eq}(\mathbf{s},\mathbf{\Delta h}) = \exp[S(\mathbf{s},\mathbf{\Delta h})]$は、

$$S(\mathbf{s},\mathbf{\Delta h}) = \frac{\beta}{2\chi}\mathbf{\Delta h}^2 - \beta(\mathbf{H}+\mathbf{\Delta h})\cdot\mathbf{s} + \text{定数} \tag{21}$$

これを満たすためには、

$$\frac{D}{2}\frac{\beta}{\chi} = \frac{1}{\tau_c} \tag{22}$$

で良い事を示せ。

*$P_{\rm eq}(\mathbf{s}) = \int d\mathbf{\Delta h} P_{\rm eq}(\mathbf{s},\mathbf{\Delta h})$ となっている。

15(20点) 変数が2個以上ある時($\{x_1, x_2, \ldots, x_n\} = \{x_\alpha\}$)、ランジュバン方程式

$$\dot{X}_\alpha = \sum_\beta^n \gamma_{\alpha\beta}X_\beta + R_\alpha(t) \tag{23}$$

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。(23)式を直交化して、

$$\dot{X}'_\mu = \lambda_\mu X'_\mu + R'_\mu(t) \tag{24}$$

とする時、$t = 0$で$X'_\mu = 0$という条件で$\langle X'_\mu(t)X'_\nu(t)\rangle$を求めなさい。ここで、$\langle R'_\mu(t)R'_\nu(t')\rangle = D'_{\mu\nu}\delta(t-t')$。また、$t\to\infty$で$\langle X'_\mu(t)X'_\nu(t)\rangle = \langle X'_\mu X'_\nu\rangle_{\rm eq}$を仮定して、

$$\langle X'_\mu X'_\nu\rangle_{\rm eq}(\lambda_\mu+\lambda_\nu) = -D'_{\mu\nu} \tag{25}$$

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、

$$\sum_\gamma\{\gamma_{\alpha\gamma}\langle X_\gamma X_\beta\rangle_{\rm eq}+\gamma_{\beta\gamma}\langle X_\gamma X_\alpha\rangle_{\rm eq}\}=-D_{\alpha\beta} \tag{26}$$

となる事を示せ。

16(30 点) 変数が2個以上ある時($\{x_1,x_2,\ldots,x_n\}=\{x_\mu\}$)、フォッカー・プランク方程式が次の様に書けるとする。

$$\frac{\partial P(\{x_\mu\},t)}{\partial t} = -\sum_\mu^n\frac{\partial J_\mu(\{x_\mu\},t)}{\partial x_\mu} \tag{27}$$

$$J_\mu(\{x_\mu\},t) = -\{-F_\mu(\{x_\mu\})+\sum_\nu^n\frac{D_{\mu\nu}}{2}\frac{\partial}{\partial x_\nu}\}P(\{x_\mu\},t) \tag{28}$$

$P_{\rm eq}(\{x_\mu\})=e^{S(\{x_\mu\})}$の時、$S(\{x_\mu\})$ と $F_\mu(\{x_\mu\})$ の関係を求めなさい。ただし、$P_{\rm eq}(\{x_\mu\})$ は、フォッカー・プランク方程式の平衡解で、(28) 式に代入すると、$\sum_\mu^n\partial J(\{x_\mu\})/\partial x_\mu=0$、$x_\mu\to\pm\infty$ で $J(\{x_\mu\})=0$ を満たす。

また、$F_\mu(\{x_\mu\})=\sum_\nu^n L_{\mu\nu}\partial S(\{x_\mu\})/\partial x_\nu$の場合に、任意の $S(\{x_\mu\})$ で成り立つためには、$L_{\mu\nu}$と $D_{\mu\nu}$の間にどんな関係が必要か導きなさい。

17(30 点) 前問の多変数のフォッカー・プランク方程式で、$F_\mu(\{x_\mu\})=\sum_\nu^n L_{\mu\nu}\partial S(\{x_\mu\})/\partial x_\nu$ の時、次の詳細釣合の条件

$$P_{\rm eq}(\{x_\mu\})T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t)=P_{\rm eq}(\{x'_\mu\})T(\{x'_\mu\},\{x_\mu\};t) \tag{29}$$

が成り立てば、$L_{\mu\nu}=D_{\mu\nu}/2$ となることが知られている。ただし、$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t)$ は遷移確率と呼ばれるもので、$t=0$ で $T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};0)=\Pi_\mu^n\delta(x_\mu-x'_\mu)$ を満たす (27) 式の解である。ここでは、$S(\{x_\mu\})=-\sum_\mu^n k_\mu x_\mu^2/2$ で、$\sum_{\mu'}^n L_{\mu\mu'}k_{\mu'\nu}$が対角化出来る時に、$L_{\mu\nu}=D_{\mu\nu}/2$ を証明しなさい。この場合は、

$$T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t)=C(t)\exp[-\sum_{\mu\nu}^n\frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu}(t)(x_\mu-x_\mu(t))(x_\nu-x_\nu(t))] \tag{30}$$

となることを使っても良い。ここで、$C(t)$ は $(\Pi_\mu^n\int_{-\infty}^\infty dx_\mu)T(\{x_\mu\},\{x'_\mu\};t)=1$ 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、問題11 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。

18(20 点) 量子力学における時間相関関数の定義
ハイゼンベルグ表示を使って$\hat X_\mu(t)\equiv e^{i\hat Ht/\hbar}\hat Xe^{-i\hat Ht/\hbar}$とする。ただし、$\hat X$、$\hat H$は演算子を表す。これを使って、$\psi_{\mu\nu}(t)=\langle\hat X_\mu(t)\hat X_\nu\rangle$ と定義すると、不都合。なぜなら、これは実数ではない。そこで次の2つの定義が通常使われる。

1. 対称化積

$$\psi_{\mu\nu}^{対}(t)\equiv\frac{1}{2}\langle\hat X_\mu(t)\hat X_\nu+\hat X_\nu\hat X_\mu(t)\rangle=\frac{1}{2}{\rm Tr}\{\hat\rho_{eq}[\hat X_\mu(t)\hat X_\nu+\hat X_\nu\hat X_\mu(t)]\} \tag{31}$$

2. カノニカル相関

$$\psi_{\mu\nu}^{カノ}(t)\equiv\langle\hat X_\mu(t);\hat X_\nu\rangle\equiv\int_0^\beta\frac{d\lambda}{\beta}{\rm Tr}\{\hat\rho_{eq}e^{\lambda\hat H}\hat X_\mu(t){\rm e}^{-\lambda\hat H}\hat X_\nu\} \tag{32}$$

ただし、$\hat{\rho}_{eq} = e^{-\beta \hat{H}} / \mathrm{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}]$

それぞれについて、以下の事を示せ。

(1) 演算子がすべて可換になると、古典力学における定義と一致する事。ただし、$\hat{X}(t)$ は $X(t)$ と考える。

(2) 実数である事。

(3) 定常性を仮定して、$\psi_{\mu\nu}(t) = \psi_{\nu\mu}(-t)$ となる事。