2003.6.5 担当 吉森 明

§4-2. Wiener-Khinchinの定理(訂正)

(1) 時系列のフーリエ変換

いくつか訂正します。申し訳ありません。

訂正1.(5月15日) 不規則に変動する時系列$X(t)$を特徴づけるものとして、フーリエ変換

$$X_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} X(t)e^{i\omega t}dt \tag{1}$$

を考えました。このX_ωについて、授業中に

「$X(t)$に周期的な変動があるとそれを取り出す」

と板書をしましたが、間違っているとは言えないまでも適当な表現ではありませんでした。なぜなら、

- $X(t)$が$\sin\omega_0 t$の様な周期関数ならば、確かに$|X_\omega|^2$は、ω_0にピークを持ちますが、
- 液体Aに落とした微粒子の場合のように、$X(t)$がまったくランダムな場合、$X(t)$に

  「すべての周期が等分に含まれる」

  というのは間違っています。

質問にもあったようにすべての周期を等分に含んでいる関数は、デルタ関数です。この場合、デルタ関数になるのは、$X(t)$ではなく、むしろ時間相関関数$\langle X(t)X(0)\rangle$です。正確には、$|X_\omega|^2$からI_ωを計算して、

$$\boxed{I_\omega\text{のフーリエ変換は}X(t)\text{ではなく}\langle X(t)X(0)\rangle}$$

これは、WK定理そのものです。

訂正2.(5月22日) I_ωのTが有限の量$|X_\omega|^2/T$のグラフを書きましたが、やはり間違っていました。つまり、$\omega < 2\pi/T$で0に落ちるように書きましたが、必ずしも0になりません。正しくは、液体Aの場合、$\omega \gg 2\pi/T$で、定数になりサンプル依存性もないのに対し、$\omega \leq 2\pi/T$のところでグラフは定数からずれ、サンプルに大きく依存します。

§5-1. 時間遅れの式、物理的な意味

(3) 線形ランジュバン方程式による例

③ 分極ベクトル

双極子モーメントを持った分子を持っていない液体に溶かし、電場$E(t)$をかける。$E(t)=0$の時は、分子の配向は乱雑なので、分極ベクトル$P(t)$(外場の方向の成分)の平均$\langle P(t)\rangle$は0。電場をかけると、配向が揃うので、$\langle P(t)\rangle \neq 0$。$P(t)$が線形ランジュバン方程式に従がうとすると、

$$\dot{P}(t) = -\frac{P(t)}{\tau_D} + R(t) + cE(t) \tag{2}$$

(**デバイモデル**)。ここで、抵抗力やランダム力は他の双極子モーメントを持っていない分子からの影響による。

線形ランジュバン方程式の一般論(授業ノート6の(6)式)から

$$\langle P(t)\rangle = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')E(t')dt' \tag{3}$$

$$\alpha(t) = c\exp[-\frac{t}{\tau_D}] \tag{4}$$

また、cは誘電率と関係している。つまり、$E(t)=E$: 定数の時、

$$\langle P(t)\rangle = E\int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')dt' \tag{5}$$

$\tau = t-t'$に変数変換すると、$d\tau = -dt'$で、

$$\langle P(t)\rangle = E\int_{\infty}^{0} \alpha(\tau)(-d\tau) = E\int_{0}^{\infty} \alpha(\tau)d\tau \tag{6}$$

(4)式を代入して、

$$\langle P(t)\rangle = E\int_{0}^{\infty} c\exp[-\frac{t}{\tau_D}]d\tau = Ec\tau_D \tag{7}$$

一方、ϵを誘電率とすると、$D = \epsilon_0 E + \langle P\rangle = \epsilon E$ だから、$\langle P\rangle$に(7)式を代入し、両辺をEで割ると、

$$\epsilon_0 + c\tau_D = \epsilon \text{ で、} \qquad \boxed{c = \frac{\epsilon-\epsilon_0}{\tau_D}} \tag{8}$$

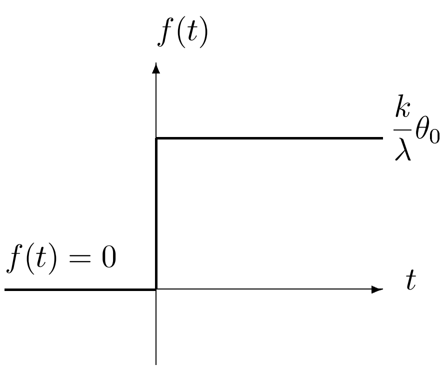
④ 分子モーター

ATPが分解されると平衡位置が変わる。

$$\text{ATPが分解前} \qquad \dot\theta(t) = -\frac{k}{\lambda}\theta(t) + R(t) \tag{9}$$

$$\text{ATPが分解後} \qquad \dot\theta(t) = -\frac{k}{\lambda}(\theta(t)-\theta_0) + R(t) \tag{10}$$

$$\text{両方併せて} \qquad \dot\theta(t) = -\frac{k}{\lambda}\theta(t) + f(t) + R(t) \tag{11}$$



授業ノート6の(6)式から

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')f(t')dt' \tag{12}$$

$$\alpha(t) = \exp[-\frac{k}{\lambda}t] \tag{13}$$

$f(t)$を代入

$$\theta(t) = \int_{0}^{t} \alpha(t-t')\frac{k}{\lambda}\theta_0 dt' \tag{14}$$

$\tau = t-t'$に変数変換すると、(6)式と同様に

$$\theta(t) = \frac{k}{\lambda}\theta_0\int_0^t \alpha(\tau)d\tau = \frac{k}{\lambda}\theta_0\left[-\frac{\lambda}{k}\exp[-\frac{k}{\lambda}\tau]\right]_0^t = -\theta_0\left(\exp[-\frac{k}{\lambda}t]-1\right) \tag{15}$$

§5-2. パワーロスとクラマース・クローニッヒの関係式

目標 パワーロスとクラマース・クローニッヒの関係式を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 線形応答のフーリエ変換は代数式になる。
- 線形応答で仕事が計算できる。
- 仕事は α_ω の虚部にしかよらない。
- クラマース・クローニッヒの関係式は因果律が重要。

目次 (1) フーリエ変換
(2) パワーロス
(3) クラマース・クローニッヒの関係式
(4) まとめ

仮定
1. 未来の時刻の外場は、現在の応答に影響しない。(因果律)
2. 外場が系にする仕事は、

$$W = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \left(\frac{\partial H}{\partial f} \right)_X \rangle \dot{f}(t) dt = -\int_{-\infty}^{\infty} x(t) \dot{f}(t) dt \tag{16}$$

で表される。

結論
- 外場が系にする仕事は感受率 α_ω ($\alpha(t)$ をフーリエ変換したもの) の虚部が関係する。
- 感受率の実部を α'_ω、虚部を α''_ω とすると、α_∞ が実数ならば、

$$\alpha'_\omega = \alpha_\infty + \frac{1}{\pi} \fint \frac{\alpha''_x}{x - \omega_0} dx \tag{17}$$

$$\alpha''_\omega = -\frac{1}{\pi} \fint \frac{\alpha'_x - \alpha_\infty}{x - \omega_0} dx \tag{18}$$

(1) フーリエ変換

時間おくれのある線形応答の式

$$x(t) = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t - t') f(t') dt' \tag{19}$$

をフーリエ変換すると、(宿題28)

$$\boxed{x_\omega = \alpha_\omega f_\omega} \tag{20}$$

ただし、

$$x_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{i\omega t}, \qquad f_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t}, \qquad \boxed{\alpha_\omega = \int_0^{\infty} \alpha(t) e^{i\omega t}} \tag{21}$$

α_ω の積分の下限が 0 になっているのは、**因果律**のため。

α_ω は複素数。$\alpha(t)$ は実数なので、$\boxed{\alpha^*_\omega = \alpha_{-\omega}}$

$\alpha_\omega = \alpha'_\omega + i\alpha''_\omega$ とすると、$\alpha^*_\omega = \alpha'_\omega - i\alpha''_\omega$ だから、
実部 虚部

$$\alpha'_{-\omega} = \alpha'_\omega \quad \text{偶関数} \tag{22}$$

$$\alpha''_{-\omega} = -\alpha''_\omega \quad \text{奇関数} \tag{23}$$

(2) パワーロス

エネルギー$H = H_0(X) - Xf(t)$を考える。今、$t = \pm\infty$で、$f(t) = 0$として、tが$-\infty$から∞まで経った時の外場が系にした仕事を計算する。

$$\begin{aligned} W &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \left(\frac{\partial H}{\partial f}\right)_X \rangle \dot{f}(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \langle -X \rangle \dot{f}(t) dt = -\int_{-\infty}^{\infty} x(t) \dot{f}(t) dt & (24) \\ &= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega x_\omega f_\omega^* d\omega & (25) \end{aligned}$$

(宿題29) また、$x_\omega = \alpha_\omega f_\omega$だから、

$$W = \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega \alpha_\omega f_\omega f_\omega^* d\omega = \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i\omega \alpha_\omega |f_\omega|^2 d\omega \tag{26}$$

$\alpha_\omega = \alpha'_\omega + i\alpha''_\omega$として、

$$W = \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i\omega \alpha'_\omega |f_\omega|^2 d\omega + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega \alpha''_\omega |f_\omega|^2 d\omega \tag{27}$$

α'_ωは偶関数で、$f_\omega^* = f_{-\omega}$を使えば、**1項目は0**になるのが分かる。したがって、

$$W = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega \alpha''_\omega |f_\omega|^2 d\omega \tag{28}$$

宿題:

27(20点) 分子モーターの別のモデルとして、

$$\dot{\theta}(t) = -\frac{k}{\lambda}(\theta(t) - \theta_0(t)) + R(t) \tag{29}$$

を考える。ただし、$\theta_0(t)$は平衡の角度で、授業で扱ったモデルと違い、ATPの分解と結合していて時間的に変動する。ATPの濃度を$A(t)$とすると、

$$\dot{A}(t) = -\kappa A(t) + R'(t) + f(t) \tag{30}$$

に従って$A(t)$は時間変化する。ここで、$\kappa A(t) - R'(t)$は単位時間あたりに分解する量で、それがゆらぐ効果を$R'(t)$で考慮している。ただし、$\langle R'(t) \rangle = 0$。平衡の角度とは、$\dot{\theta}_0(t) = c(\kappa A(t) - R'(t))$で結ばれている。$c$は時間によらない比例係数。$f(t)$は外部から単位時間あたりに加えられるATPの量で、これを外場と考える。$\theta(t)$の$f(t)$に対する線形応答の式を導き、$\alpha(t)$を求めなさい。

28(5点) (20)式を導きなさい。

29(10点) (25)式を導きなさい。

30(20点) エネルギーが$H = H_0(X) - Xf(t)$と書け、外場が$f(t) = \Re f_0 e^{i\omega t}$の様に時間変化する時、$t$が0から$2\pi/\omega$まで経った時の外場が系にした仕事を$\omega$、$\alpha''_\omega$と$f_0$で表しなさい。ただし、$\Re$は実部を表し、

$$\langle X(t) \rangle = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t - t') f(t') dt' \tag{31}$$

が成り立ち、α''_ωは、$\alpha(t)$のフーリエ変換の虚部を表す。

31(20点) 授業で扱った分子モーターのモデル(11)式で、ATPがした仕事(パワーロス)を求めなさい。ただし、ハミルトニアンは、$H = H_0 + k(\Theta - \theta_0(t))^2/2$で、$\theta_0(t)$は、$t = 0$で0から$\theta_0$に変る階段関数とする。