2003.6.12 担当 吉森 明

お知らせ:アンケート集計しました。以下のwwwに載せていますので、ご覧ください。
http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/h03ank.htm

§5-2. パワーロスとクラマース・クローニッヒの関係式(続き)

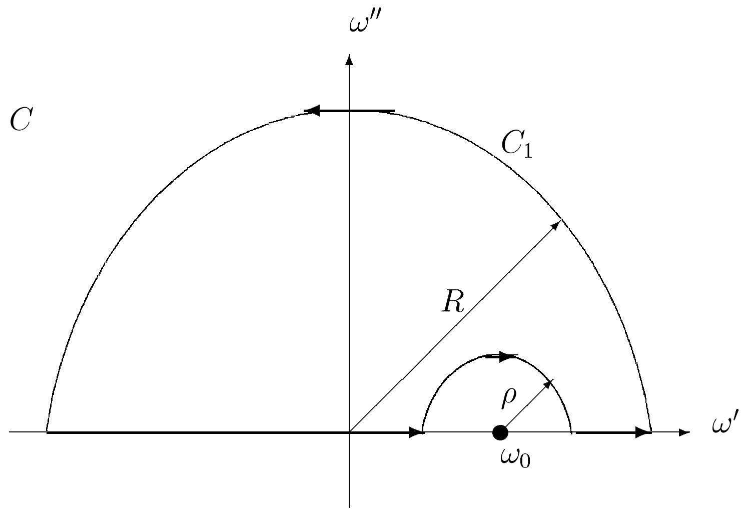
(3) クラマース・クローニッヒの関係式

α_ωのωを複素平面に拡張。$\omega = \omega' + i\omega''$とすると、$e^{i\omega} = e^{i(\omega'+i\omega'')}$だから、

$$\alpha_\omega = \int_0^\infty \alpha(t) e^{i\omega' t - \omega'' t} dt \tag{1}$$

$t > 0$(因果律、**仮定2**) だから、$\omega'' > 0$で積分は必ず収束する。これは、α_ω**は**$\omega'' > 0$**で解析的**である事を示す。

積分路Cを下図の様に取ると、



上半面($\omega'' > 0$)で解析的だからコーシーの定理が使えて、

$$\int_C \frac{\alpha_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega = 0 \tag{2}$$

Cのうち半径Rの円弧に沿っての積分は、$R \to \infty$で0。つまり、

$$\int_{C_1} \frac{\alpha_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega \xrightarrow{R\to\infty} 0 \tag{3}$$

(宿題33)。したがって、

$$\lim_{\rho\to 0}\{\int_{-\infty}^{\omega_0-\rho} \frac{\alpha_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega + \int_{|\omega-\omega_0|=\rho} \frac{\alpha_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega + \int_{\omega_0+\rho}^{\infty} \frac{\alpha_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega\} = 0 \tag{4}$$

左辺の2項目は、$\omega = \rho e^{i\theta} + \omega_0$と変数変換すると、

$$\int_{|\omega-\omega_0|=\rho} \frac{\alpha_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega \xrightarrow{\rho\to 0} -i\pi(\alpha_{\omega_0} - \alpha_\infty) \tag{5}$$

が示せる(宿題33)。結局

$$i\pi(\alpha_{\omega_0} - \alpha_\infty) = \fint \frac{\alpha_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega \tag{6}$$

ただし、

$$\fint \equiv \lim_{\rho\to 0}\{\int_{-\infty}^{\omega_0-\rho} + \int_{\omega_0+\rho}^{\infty}\} \tag{7}$$

で、これは、コーシーの主値(principal value)と呼ばれる。

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

$$i\pi(\alpha'_{\omega_0} + i\alpha''_{\omega_0} - \alpha_\infty) = \fint \frac{\alpha'_\omega + i\alpha''_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega \tag{8}$$

$$i\pi\alpha'_{\omega_0} - \pi\alpha''_{\omega_0} - i\pi\alpha_\infty = \fint \frac{\alpha'_\omega + i\alpha''_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega \tag{9}$$

α_∞を実数と仮定して、(9)式の両辺の虚部を取ると、

$$\pi\alpha'_{\omega_0} - \pi\alpha_\infty = \fint \frac{\alpha''_\omega}{\omega - \omega_0} d\omega \tag{10}$$

(9)式の両辺の実部は、

$$-\pi\alpha''_{\omega_0} = \fint \frac{\alpha'_\omega - \alpha_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega \tag{11}$$

これらから、授業ノート7結論の(17)、(18)式が得られる。

§6. 久保公式と揺動散逸定理

目標 久保公式を中心にその仮定を理解する。具体的には以下のことを分かる。

- 久保公式は1変数の線形ランジュバン方程式から導ける。
- その時の仮定は4つある。
- 久保公式は多くの現象に適応できる普遍的な関係。
- 久保公式がもし成り立たなければ、仮定のどれかが成り立っていない。

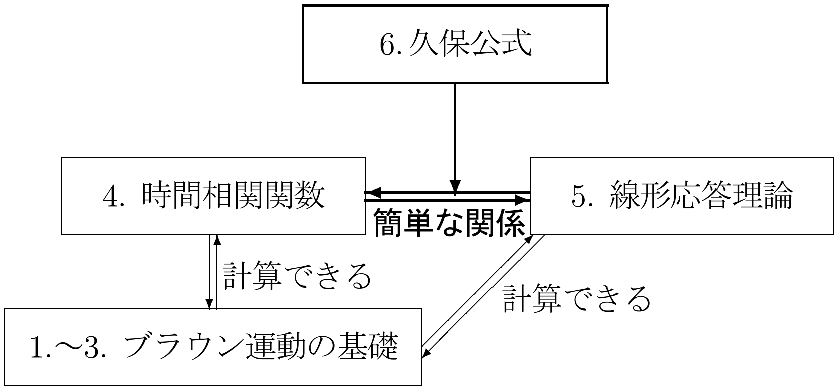
目次 (1) はじめに
(2) 久保公式
(3) 具体例
((4) フーリエ変換(第1種揺動散逸定理))
(5) 物理的な意味

仮定
1. Xの分布は、$t = t_0$で外場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

$$\text{久保公式} \qquad \alpha(t) = -\beta\langle \dot{X}(t) X(0)\rangle \tag{12}$$

(1) はじめに



(2) 久保公式

①線形ランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t) + af(t) \tag{13}$$

ここで、通常の線形ランジュバン方程式に対する仮定はすべて満たされているとする。また、a は定数で、一般には必要。

例 荷電微粒子	：外場を電場 $E(t)$ とすると、	$a = q/m$
分極ベクトル	：外場を電場 $E(t)$ とすると、	$a = c = (\epsilon - \epsilon_0)/\tau_D$
熱雑音の回路	：外場を交流電圧 $E(t)$ とすると、	$a = 1/R$
分子モーター	：外場を $k\theta_0(t)$ とすると、	$a = 1/\lambda$

② (13) 式の両辺を非平衡分布で平均をとる。非平衡分布なので、平均を $\langle\cdots\rangle_{\mathrm{neq}}$ と書く。$\langle R(t)\rangle_{\mathrm{neq}} = 0$ とする。一方外場がない時の平衡分布による平均は、$\langle\cdots\rangle$ と書く。

$$\langle\dot{X}(t)\rangle_{\mathrm{neq}} = -\gamma\langle X(t)\rangle_{\mathrm{neq}} + af(t) \tag{14}$$

$x(t) \equiv \langle X(t)\rangle_{\mathrm{neq}}$ として、(授業ノート 6(5) 式参照)

$$x(t) = \mathrm{e}^{-\gamma(t-t_0)}\langle X(t_0)\rangle_{\mathrm{neq}} + \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{-\gamma(t-t')} af(t')dt' \tag{15}$$

t_0 は外場をかけ始める時刻。

* $x(t)$ が $f(t')$ に比例するのは、線形ランジュバン方程式の時だけ厳密。非線型ランジュバン方程式 $\dot{X}(t) = F(X) + R(t) + af(t)$ では成り立たない。**非線型ランジュバン方程式の時は、$f(t')$ が充分小さい時に近似的に成り立つ。**

仮定 1 から、$\langle X(t_0)\rangle_{\mathrm{neq}} = \langle X(t_0)\rangle = 0$。したがって、

$$\alpha(t) = a\mathrm{e}^{-\gamma t} \tag{16}$$

一方、外場 0 の平衡分布で時間相関関数を計算。今度は、平衡分布 (定常状態) で平均をとるから、

$$\langle X(t)X(0)\rangle = \langle X^2\rangle \mathrm{e}^{-\gamma t} \text{ だから、} \qquad \langle\dot{X}(t)X(0)\rangle = -\gamma\langle X^2\rangle\mathrm{e}^{-\gamma t} \tag{17}$$

ここで、$\langle X(0)^2\rangle = \langle X^2\rangle$ とおいた (定常状態なので、時間に依らない)。ゆえに

$$\alpha(t) = -\frac{a}{\gamma\langle X^2\rangle}\langle\dot{X}(t)X(0)\rangle \tag{18}$$

③ ここで、$f(t)=0$ の時の第2種揺動散逸定理(FDT)を使う。

$$P_{\rm eq}(x)\propto \exp[-\frac{x^2}{2\langle X^2\rangle}] \text{ と考えると} \qquad S(x)=-\frac{x^2}{2\langle X^2\rangle}+\text{定数} \qquad \frac{dS(x)}{dx}=-\frac{x}{\langle X^2\rangle} \tag{19}$$

したがって、(13)式と比べると

$$-\gamma=\frac{-L}{\langle X^2\rangle} \text{ だから、} \qquad L=\gamma\langle X^2\rangle=\frac{D}{2} \tag{20}$$

これを使うと、

$$\boxed{\alpha(t)=-a\left(\frac{D}{2}\right)^{-1}\langle \dot{X}(t)X(0)\rangle} \tag{21}$$

④ さらに、aを決めるために$f(t)=f$:定数の場合を考える。このばあいは$f\neq 0$でも定常状態があるので、第2種FDTから、

$$-\gamma x+af=\frac{D}{2}\frac{dS_f(x)}{dx} \tag{22}$$

ここで、$S_f(x)$は$S_f(x) = \ln P_{\rm eq}^f(x)$。$P_{\rm eq}^f(x)$は$f$(定数)を含む定常分布。**仮定**2と**仮定**3から$S_f(x)=-\beta E(x)+\text{定数}=-\beta\{E_0(x)-xf\}+\text{定数}$。これより

$$\frac{dS_f(x)}{dx}=-\beta\frac{dE_0(x)}{dx}+\beta f \tag{23}$$

したがって、

$$\frac{D}{2}\frac{dS_f(x)}{dx}=-\beta\frac{D}{2}\frac{dE_0(x)}{dx}+\beta\frac{D}{2}f \tag{24}$$

(22)式と比べて、

$$-\gamma x=-\beta\frac{D}{2}\frac{dE_0(x)}{dx}, \qquad \boxed{a=\beta\frac{D}{2}} \tag{25}$$

このaを(21)に代入すると、久保公式$\alpha(t)=-\beta\langle\dot{X}(t)X\rangle$が得られる。

(3) 具体例

① 電荷を持ったブラウン粒子

エネルギー$H=H_0-qRE(t)$。ただし、Rはブラウン粒子の位置、qはブラウン粒子の持っている電荷、$E(t)$は電場を表す。$X=V$: ブラウン粒子の速度とすると、仮定3を満たさない。したがって、公式の拡張が必要(宿題36参照)。

$$v(t) = \langle V(t)\rangle=\int_{-\infty}^{t}\alpha_{V,R}(t-t')qE(t')dt' \tag{26}$$

$$\alpha_{V,R}(t) = -\beta\langle\dot{V}(t)R(0)\rangle=\beta\langle V(t)V(0)\rangle \tag{27}$$

最後の等号は、定常過程による時間相関関数の性質と、$\dot{R}(t)=V(t)$を使った。

もし、線形ランジュバン方程式が成り立っているとすると、

$$\langle V(t)V(0)\rangle=\langle V^2\rangle e^{-\gamma t}=\frac{k_BT}{m}e^{-\gamma t} \tag{28}$$

一方、

$$\alpha_{V,R}(t)=\frac{1}{m}e^{-\gamma t} \tag{29}$$

だから(§5-1.(3)①参照)、(27)式が成り立っているのが分かる。

宿題の訂正: 前回授業でも言いましたように、宿題31を次のように訂正します。毎回訂正が多くてすみません。

31(20点) 授業で扱った分子モーターのモデル(11)式で、ATPが分解した後、時間t_0経ったところで、外部からタンパク質を動かして、モーターを逆回転させて元に戻す。逆回転する時は、ADPは結合せず、ATPは合成されない。この時、エネルギーは、$H = H_0 + k\{\Theta - \theta_0(t)\}^2/2$で表される。ただし、

$$\theta_0(t) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ \theta_0 & 0 < t \leq t_0 \\ 0 & t > t_0 \end{cases} \tag{30}$$

ATPとタンパク質がした仕事(パワーロス)を求めなさい。$t_0 \to \infty$と$t_0 = 0$の極端な場合に仕事はどうなるか計算し、物理的な意味を議論しなさい。

宿題:

32(20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従って、挙げなさい。

- どういう状況で
- 何の外場をかけると、
- どういう変数が
- どう応答するか、
- 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。

33(10点) (3)式と(5)式を導きなさい。

34(30点) もし、さかさまの世界があり、未来の外場だけが現在に影響してくる、つまり、

$$x(t) = \int_t^\infty \alpha(t-t')f(t')dt' \tag{31}$$

が成り立つ時、クラマース・クローニッヒの関係式(10)と(11)が、どうなるか論じなさい。

35(30点) パワーロスの公式とクラマース・クローニッヒの関係式を使って、散逸が無い時、応答に時間おくれも無い事を示しなさい。

36(40点) N個の変数$(X_1(t), X_2(t), \ldots, X_N(t))$と外場$(f_1(t), f_2(t), \ldots, f_N(t))$からなる多次元のランジュバン方程式

$$\dot{X}_\mu(t) = -\sum_\nu^N \Gamma_{\mu,\nu} X_\nu(t) + R_\mu(t) + \sum_\nu^N a_{\mu,\nu} f_\nu(t) \tag{32}$$

を考える。ここで、ランダム力$R_\mu(t)$は、

$$\langle R_\mu(t)\rangle = 0 \qquad \langle R_\mu(t) R_\nu(t')\rangle = D_{\mu\nu}\delta(t-t') \qquad \langle R_\mu(t) X_\nu(t')\rangle = 0 \tag{33}$$

を満たす。第2種FDT: $-\sum_\nu^N \Gamma_{\mu,\nu} X_\nu(t) + \sum_\nu^N a_{\mu,\nu} f_\nu(t) = \sum_\nu^N (D_{\mu,\nu}/2)\partial S/\partial X_\nu$が成り立っていて、2ページの**仮定**1〜3をすべて満たしている時、久保公式$\alpha_{\mu,\nu}(t) = -\beta\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0)\rangle$

を証明しなさい。ただし、**仮定**3は、$E(\{x_\mu\}) = E_0(\{x_\mu\}) - \sum_\nu^N x_\nu f_\nu(t)$ で与えられ、$\alpha_{\mu,\nu}(t)$ は、

$$\langle X_\mu(t)\rangle = \sum_\nu^N \int_{-\infty}^t \alpha_{\mu,\nu}(t-t')f_\nu(t')dt' \tag{34}$$

で、定義されている。

37(60 点) 非線型ランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = F(X) + R(t) + af(t) \tag{35}$$

について、2ページの仮定をすべて満たしている時、久保公式を次の手順で証明しなさい。

(a) 必要な条件をすべて満たしていて、対応するFP方程式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = (-\frac{\partial}{\partial x}F(x) - \frac{\partial}{\partial x}af(t) + \frac{D}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2})P(x,t) \tag{36}$$

が成り立っているとする。この時、外場のかかっている時の分布関数 $P(x,t)$ は、

$$\begin{aligned} P(x,t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 P(xt;x_0t_0)P(x_0,t_0) \\ &\quad + \int_{t_0}^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 P(xt;x_0t')\{-\frac{\partial}{\partial x_0}af(t')P(x_0,t')\} \end{aligned} \tag{37}$$

と書けることを示しなさい。ただし、$P(xt;x_0t_0)$ は、$f(t) = 0$ の時の遷移確率で、(36) 式の $f(t) = 0$ とおいた時の解で、$P(xt_0;x_0t_0) = \delta(x-x_0)$ を満たす。

(b) 今 $f(t)$ が小さい時の線形応答を調べたいので、$P(x,t)$ を $f(t)$ で展開して1次までとると、

$$P(x,t) \cong P_0(x,t) + \int_{t_0}^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 P(xt;x_0t')\{-\frac{\partial}{\partial x_0}af(t')P_0(x_0,t')\} \tag{38}$$

となることを示しなさい。ただし、

$$P_0(x,t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 P(xt;x_0t_0)P(x_0,t_0) \tag{39}$$

(c) **仮定**1から、$P_0(x,t)$ が外場の無い状態の平衡分布 $P_{\mathrm{eq}}(x)$ なることを導きなさい。

(d) $\int_{-\infty}^{\infty} xP_{\mathrm{eq}}(x)dx = 0$ を仮定し、$t_0 \to -\infty$ とした時、遷移確率 $P(xt;x_0t')$ は $t-t'$ にしかよらない事 ($P(xt;x_0t') = P(x,x_0;t-t')$) を使い、

$$\alpha(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dxx \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 P(x,x_0;t)\{-\frac{\partial}{\partial x_0}aP_{\mathrm{eq}}(x_0)\} \tag{40}$$

を示しなさい。

(e) 遷移確率に付いて、

$$\frac{\partial P(xt;x_0t_0)}{\partial t} = (F(x_0)\frac{\partial}{\partial x_0} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_0^2})P(xt;x_0t_0) \tag{41}$$

を示しなさい。ただし、$x \to \pm\infty$ で、$J(x,t) = \{-F(x) + (D/2)(\partial/\partial x)\}P(xt;x_0t_0) = 0$。これを使い、

$$\langle \dot{X}(t)X\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} dxx\frac{\partial P(x,x_0;t)}{\partial t}x_0P_{\mathrm{eq}}(x_0) \tag{42}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} dxxP(x,x_0;t)\frac{\partial}{\partial x_0}\frac{D}{2}P_{\mathrm{eq}}(x_0) \tag{43}$$

を導き、(21) 式を示しなさい。