2006 年度非平衡物理学 授業ノート 14

2007.1.24 担当 吉森 明

訂正: 授業ノート 12P3(7) 式は、

$$Q_B - Q_A = \Pi_{AB}(-I) \tag{1}$$

に訂正して下さい。申し訳ありません。ここでは、電流の向きを金属 A から B に流れる方向を正に取って定義します。(文献によっては、逆の定義もあるようです。) 今の回路では、B から A に流れているので、マイナスが必要です。

授業ノート 13P1(1) 式も

$$\phi_1 - \phi_2 = \frac{L_{21}}{TL_{22}}(T_2 - T_1) = L_{21}R\frac{T_2 - T_1}{T^2} \tag{2}$$

が正しいです。(2) 式は、V を左の方が高いとき正にすれば、今のままで正しいので、訂正する必要がありません。また、最初の訂正により、Π_{AB} の定義を変えたので、(9) 式も訂正の必要はありません。

5. ブラウン運動の微視的導出 (森理論) その二

目標 孤立系の微視的な方程式から線形ランジュバン方程式を導くことにより、射影演算子の方法を体験する。どういう場合に射影演算子の方法を勉強すれば良いかをわかる。具体的には以下のことを分かる。

- 射影演算子の方法を使えば、水分子をあらわに考えた孤立系のニュートン方程式から、微粒子の速度についてのランジュバン方程式が導ける。
- 微粒子が水分子から受ける力には、微粒子からの影響による遅い運動とそれ以外の速い運動が混ざっていて、射影演算子の方法でそれらを分けることが出来る (一般化されたランジュバン方程式)。
- 射影演算子はベクトルを別のベクトルに射影する演算子。
- 一般化されたランジュバン方程式を射影演算子の方法で導く時は、森の公式を使う。
- 一般化されたランジュバン方程式はマルコフ近似でランジュバン方程式になる。

目次 (1) 問題設定

(2) 導出の方針

(3) 射影演算子

(4) 一般化されたランジュバン方程式の導出

(5) マルコフ近似

仮定 1. 水中のブラウン粒子 (1 次元) の速度を V、全ての水分子の位置と運動量 $\{q_l^w, p_l^w\}$(分子の内部自由度は無視する) とすると、微視的な方程式として、

$$m\dot{V}(t) = F(\{q_l^w(t)\}, X(t)) \tag{3}$$

$$\dot{q}_l^w(t) = \frac{p_l^w(t)}{m_w} \qquad \dot{p}_l^w(t) = -\frac{\partial V(\{q_l^w(t)\}, X(t))}{\partial q_l^w(t)} \tag{4}$$

が成り立つ。ここで、m と m_w はブラウン粒子と水分子の質量、$F(\{q_l^w(t)\}, X)$ はブラウン粒子が水分子から受ける力、X はブラウン粒子の位置、$V(\{q_l^w(t)\}, X(t))$ は水分子が感じるポテンシャル (ブラウン粒子からのも含む) を表す。

2. **マルコフ近似**

(a) $V(t)$ の時間変化が充分遅い。

(b) 充分時間がたっている。

結論 1. **仮定** 1 から、一般化されたランジュバン方程式

$$m\dot{V}(t) = -\int_0^t M(t-t')V(t')dt' + R(t) \tag{5}$$

が**厳密に**導出できる。ここで、$M(t)$ は記憶項と呼ばれる時間の関数を表す。

2. **仮定** 2 から、線形ランジュバン方程式

$$m\dot{V}(t) = -\lambda V(t) + R(t) \tag{6}$$

が**近似的に**導出できる。

(2) 導出の方針

○ 流れ

閉じた系での時間発展を表すニュートン方程式 (3)(4) 式 **(決定論)**

$\downarrow$ $\boxed{\text{厳密}}$

一般化されたランジュバン方程式 (5) 式 (時間おくれの項=記憶項)

$\downarrow$ マルコフ $\boxed{\text{近似}}$

ランジュバン方程式 (6) 式 **(確率過程)**

決定論から確率過程という数学的にまったく違うものが導ける不思議を味わって欲しい。

(3) 射影演算子

射影演算子は、ヒルベルト (関数) 空間の任意のベクトルを、**別のベクトルに比例する部分とそれ以外に分ける**演算子。

○ ヒルベルト (関数) 空間

次元が無限あるだけで、普通のベクトル空間と同じ。言葉が少しずつ違う。ブラウン粒子も水分子もすべて含めた位置と運動量を $\{q_l, p_l\}$ と書く ($\{q_l, p_l\} = \{X, V, q_l^w, p_l^w; l = 1 \ldots, \}$) と、

	有限次元のベクトル空間	関数空間
●	ベクトル $\mathbf{A}$	関数 $A(\{q_l, p_l\})$
●	行列 P	演算子 P
●	ベクトル $\mathbf{A}$ を別のベクトル $\mathbf{V}$ に射影する。	ある関数 $A(\{q_l, p_l\})$ を別の関数 $V(\{q_l, p_l\})$ に射影する。

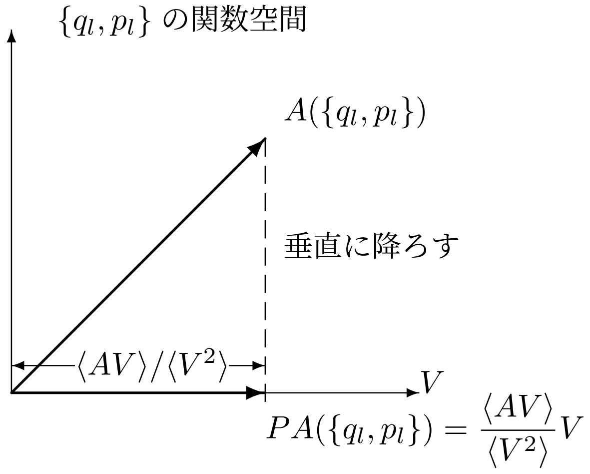
○ 射影演算子 P の定義: V をブラウン粒子の速度とすると、位相空間の任意の関数 $A = A(\{q_l, p_l\})$ に対して、

$$\boxed{PA \equiv \frac{\langle AV \rangle}{\langle V^2 \rangle} V} \tag{7}$$

ただし、

$$\langle \cdots \rangle \equiv \langle \cdots \rangle_{eq} = \int \cdots \rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\}) \prod_l dq_l dp_l \tag{8}$$

$\rho_{\mathrm{eq}}(\{q_l, p_l\})$ は平衡分布を表す。この射影演算子は、宿題 81 の様な性質を持っている。



○ $Q \equiv 1-P$ として、$P+Q=1$ だから、位相空間の任意の関数 $A=A(\{q_l,p_l\})$ に対して、

$$\boxed{A = \underbrace{PA}_{V\text{ に比例する項}} + \underbrace{QA}_{\text{それ以外の項}}} \tag{9}$$

(4) 一般化されたランジュバン方程式の導出

○ リウヴィル演算子

ブラウン粒子も水分子もすべて含めた位置と運動量を $\{q_l,p_l\}$ と書く ($\{q_l,p_l\} = \{X,V,q_l^w,p_l^w; l = 1\ldots,\}$)。$\{q_l,p_l\}$ の関数で表される任意の物理量 $X(t) = X(\{q_l(t),p_l(t)\})$ の時間発展を (3) 式と (4) 式のもとで考える。チェーンルールから、

$$\frac{dX(\{q_l(t),p_l(t)\})}{dt} = \sum_l \left\{ \dot{q}_l(t)\frac{\partial X(\{q_l(t),p_l(t)\})}{\partial q_l(t)} + \dot{p}_l(t)\frac{\partial X(\{q_l(t),p_l(t)\})}{\partial p_l(t)} \right\} \tag{10}$$

右辺は、長くて面倒なので、

$$iL \equiv \sum_l \left\{ \dot{q}_l(t)\frac{\partial}{\partial q_l(t)} + \dot{p}_l(t)\frac{\partial}{\partial p_l(t)} \right\} \tag{11}$$

という記号を定義すると、

$$\frac{dX(t)}{dt} = iLX(t) \tag{12}$$

と書ける。

iL は、リウヴィル演算子と呼ばれる演算子を表す。(12) 式は、形式的に解くことができ、

$$X(t) = e^{iLt}X(0) \tag{13}$$

(宿題 82)。また、これ以後面倒なので、$X(0)$ を X と書く。

今、X として、ブラウン粒子が水分子から受ける力 $F(t) = F(\{q_l^w(t)\},X(t)) = F(\{q_l(t)\})$ とすると、

$$F(t) = e^{iLt}F \tag{14}$$

この式が出発点になる。

○ 導出の詳細

iL を V に比例する部分とそれ以外に分ける。(9) 式と同様に

$$iL = \underbrace{PiL}_{\text{ゆっくりした時間変化}} + \underbrace{QiL}_{\text{速い時間変化}} \tag{15}$$

同じ様に e^{tiL} も分けたい。ところが、PiL と QiL は交換しないから、単純に、$e^{iLt} = e^{QiLt}e^{PiL}$ **とはならない**。正しくは、

$$e^{tiL} = \int_0^t e^{t'iL} PiLe^{(t-t')QiL} dt' + e^{tQiL} \tag{16}$$

(宿題 83 参照)。ここでは、これを**森公式**と呼ぶ。

　これを使って、

$$e^{tiL}F = \underbrace{\int_0^t e^{t'iL} PiLe^{(t-t')QiL} F dt'}_{①} + \underbrace{e^{tQiL}F}_{②} \tag{17}$$

② 今、

$$\boxed{R(t) \equiv e^{tQiL}F} \tag{18}$$

とすると、(17) 式の右辺 2 項目は、$R(t)$ となる。

①

　1 項目は、計算すると

$$\int_0^t e^{t'iL} PiLe^{(t-t')QiL} F dt' = \int_0^t e^{t'iL} PiLR(t-t') dt' \tag{19}$$

P の定義 (7) 式から

$$= \int_0^t e^{t'iL} \frac{\langle [iLR(t-t')]V \rangle}{\langle V^2 \rangle} V dt' \tag{20}$$

$e^{t'iL}$ は、最後の V にしかかからないから、

$$= \int_0^t \frac{\langle [iLR(t-t')]V \rangle}{\langle V^2 \rangle} V(t') dt' \tag{21}$$

ここで、(宿題 84)

$$\langle [iLR(t)]V \rangle = -\langle R(t)[iLV] \rangle = -\frac{\langle R(t)R \rangle}{m} \tag{22}$$

　結局、

$$\int_0^t e^{t'iL} PiLe^{(t-t')QiL} F dt' = -\int_0^t M(t-t')V(t') dt' \tag{23}$$

ここで

$$M(t) = \frac{\langle R(t)R \rangle}{m\langle V^2 \rangle} \tag{24}$$

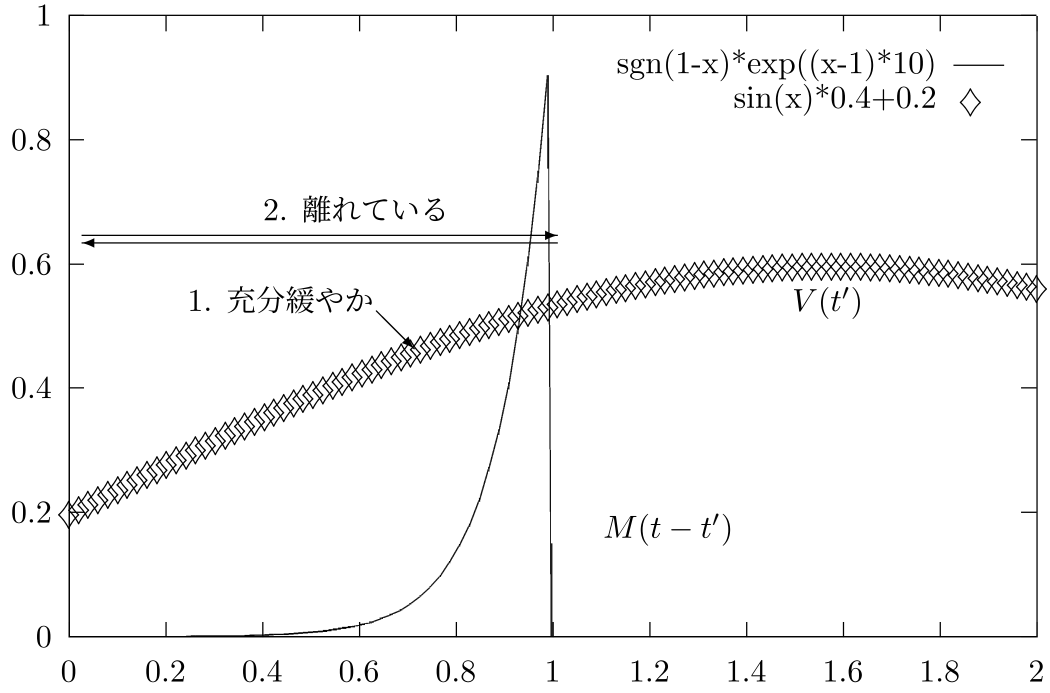


図 1　マルコフ近似:記憶関数 $M(t)$ と、$V(t)$

まとめると、(5) 式が求まる。

(5) マルコフ近似

もし、**仮定** 2a を満たしていると、

$$\int_0^t M(t-t')V(t')dt' \simeq V(t)\int_0^t M(t-t')dt' \tag{25}$$

つまり、**仮定** 2a は、$V(t)$ **の時間変化は、**$M(t)$ **に比べて遅い**事を示している。$\tau = t - t'$ として、

$$= V(t)\int_0^t M(\tau)d\tau \tag{26}$$

仮定 2b から

$$\simeq V(t)\int_0^\infty M(\tau)d\tau = \lambda V(t) \tag{27}$$

ここで、

$$\lambda = \int_0^\infty M(\tau)d\tau \tag{28}$$

つまり、ランジュバン方程式 (6) が導けた。

また、この λ の形から 第 2 種揺動散逸定理 (2ndFDT) も証明できる。マクスェル分布を仮定すると、$\langle V^2\rangle = k_\mathrm{B}T/m$ で、$\langle R(t)R\rangle = D\delta(t)$ とすると、(27) 式に (23) 式を代入

して

$$\lambda = \int_0^\infty \frac{\langle R(t)R\rangle}{m\langle V^2\rangle}dt = \frac{D}{2k_{\rm B}T} \tag{29}$$

これはアインシュタインの関係式を表す。

宿題: 授業に出席しなくても答えられる様にしたつもりですが、プリントは読んで下さい。

81 (10 点) $PA = (\langle AV\rangle/\langle V^2\rangle)V$ の時、

(a) $P^2 = P$

(b) $A = A(\{q_l, p_l\})$、$B = B(\{q_l, p_l\})$ の時、$P(A+B) = PA + PB$ (線形)

(c) $P^\dagger = P$ (自己共役)

となる事を示せ。ただし、一般の演算子 O の共役 $O^\dagger$ とは、

$$\langle (OA)B\rangle = \langle A(O^\dagger B)\rangle \tag{30}$$

で、定義される。

82 (25 点) (12) 式が、$X(t) = e^{iLt}X(0)$ の様な形式解を持つことは、自明ではない。なぜなら、(12) 式の iL は、$\{q_l(t), p_l(t)\}$ に作用するが、$X(t) = e^{iLt}X(0)$ は、$\{q_l(0), p_l(0)\}$ に作用するからである。$X(t) = e^{iLt}X(0)$ が形式解であることを証明せよ。また、時間変化する外場が加わっているときはどうなるか議論しなさい。

83 (20 点) (16) 式を導きなさい。

84 (20 点) iL と Q の定義から (21) 式を示しなさい。ただし、$q_l \to \pm\infty$、$p_l \to \pm\infty$ で、$\rho_{\rm eq}(\{q_l, p_l\}) \to 0$ が仮定されているとする。

85 (30 点) 射影演算子法を使っている論文を 1 つ探して読み、レポートしなさい。