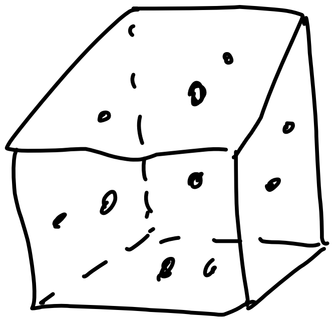
講義メモ

22/10/11

統計力学 A Ⅱ

§ 古典力学の記述



$$\Gamma = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_N) \in \mathbb{R}^{6N}$$

$$H(\Gamma) \equiv \sum_{i=1}^{N} \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m} + \underbrace{\sum_{i<j} V_{int}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}_{\text{粒子間相互作用}} + \underbrace{\sum_i V_{wall}(\mathbf{r}_i)}_{\text{壁によって粒子を閉じ込める}}$$

運動方程式

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}}_i = \dfrac{\mathbf{p}_i}{m} = \dfrac{\partial H(\Gamma)}{\partial \mathbf{p}_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i = -\dfrac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}\left[\displaystyle\sum_{j \neq i} V_{int}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + V_{wall}(\mathbf{r}_i)\right] \end{cases}$$

$$= -\frac{\partial H(\Gamma)}{\partial \mathbf{r}_i}$$

§ エネルギー保存則

初期条件 $\Gamma(0) = (r_1^0, r_2^0, \cdots, r_N^0, p_1^0, \cdots, p_N^0)$

与える

$\Rightarrow$ 運動方程式の解 $\Gamma(t)$ 決まる

エネルギーの時間変化 $H(\Gamma(t))$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} H(\Gamma(t)) = \sum_i \left[\frac{\partial H}{\partial r_i} \dot{r}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i \right]$$

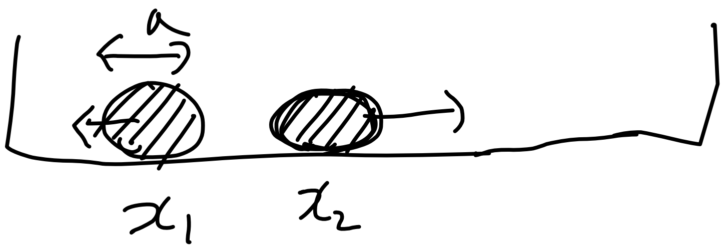
$$= \sum_i \left[\frac{\partial H}{\partial r_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial r_i} \right]$$

$$= 0$$

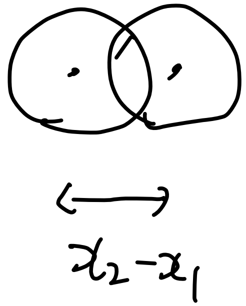
よって $H(\Gamma(t)) = H(\Gamma(0))$ for any t //

§ 運動の様子

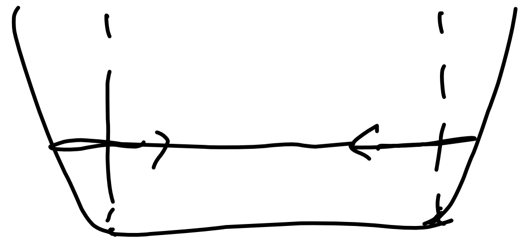
例: 1次元空間, 2粒子



・$V_{int}(x_2 - x_1) = \begin{cases} \frac{k}{2}\left(a - (x_2 - x_1)\right)^2 & \text{if } x_2 - x_1 < a \\ 0 & \text{othewise} \end{cases}$



・$V_{wall}(x) = \begin{cases} \frac{k}{2} x^2 & \text{if } x < 0 \\ \frac{k}{2}(L - x)^2 & \text{if } x > L \\ 0 & \text{othewise} \end{cases}$

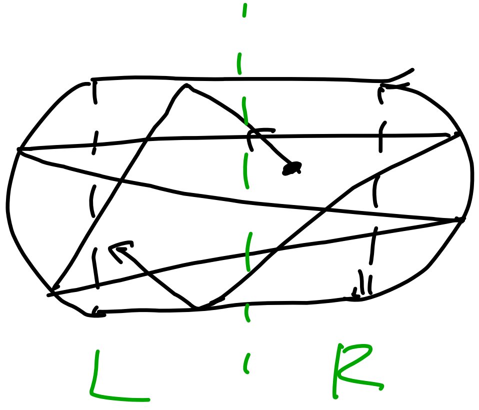


・解?

・計算機で
簡単に解ける

§ カオス

例: 2次元, 1粒子, スタジアム, 完全反射壁



運動の軌跡: 作図できる

L L R L R L ----

(衝突点がLかRを記録)

初期条件 $r(0)$ が決まれば決まる

<u>命題</u>: ほとんど全ての初期条件に対して LとRの系列は "ランダム" である.

正確に定義するには, "数学"の言葉が必要

§ 問題設定の転換

- $\Gamma(0)$ に対する 解 $\Gamma(t)$ の 追求は しない.

- マクロ な 熱力学量 "A" の
  "平衡状態" における 値を 決めたい.

力学の世界で定義する必要

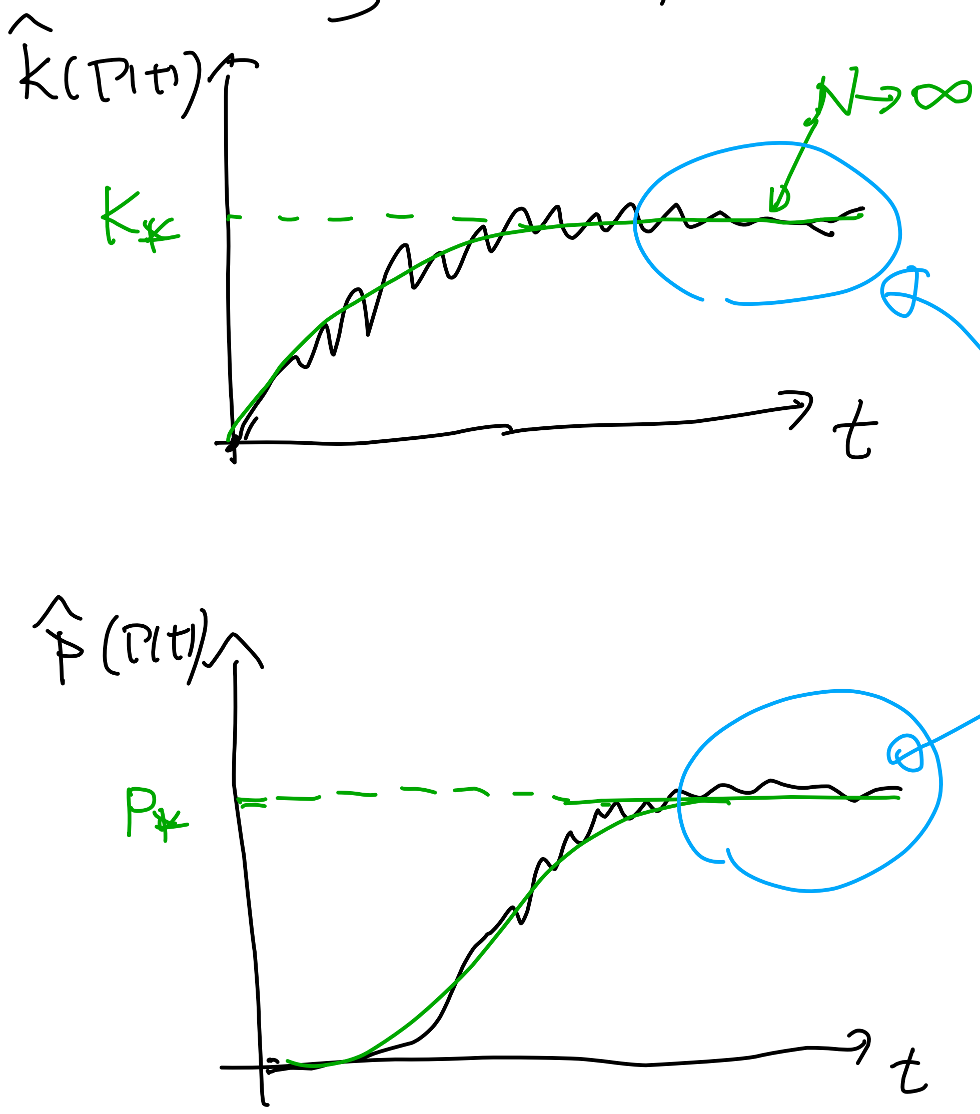
Aの例：

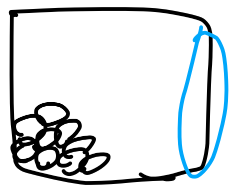
✓ $\hat{K}(\Gamma) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{|\boldsymbol{p}_j|^2}{2m}$ 　1粒子あたりの運動エネルギー

✓ $\hat{p}(\Gamma) = \cdots$ 　$\underbrace{\text{壁が粒子に及ぼす力}}_{\text{単位面積あたりに}}$

後で考える

§ 例





$P\,|\,0)$: ぎゅうぎゅうにつめてpack

$\hat{k}(P\,|\,0)=0$

$\hat{p}(P\,|\,0)=0$

平衡状態

• 十分に時間がたったら一定の値に近づく

• Nが大きくなるとゆらぎは小さくなる

§ K_* の値？

$$K_* = \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\ \hat{K}(\Gamma(t))$$

6N次元空間の

デルタ関数　補足ページへ

$$\int d\Gamma\ \delta(\Gamma - \Gamma(t)) = 1$$

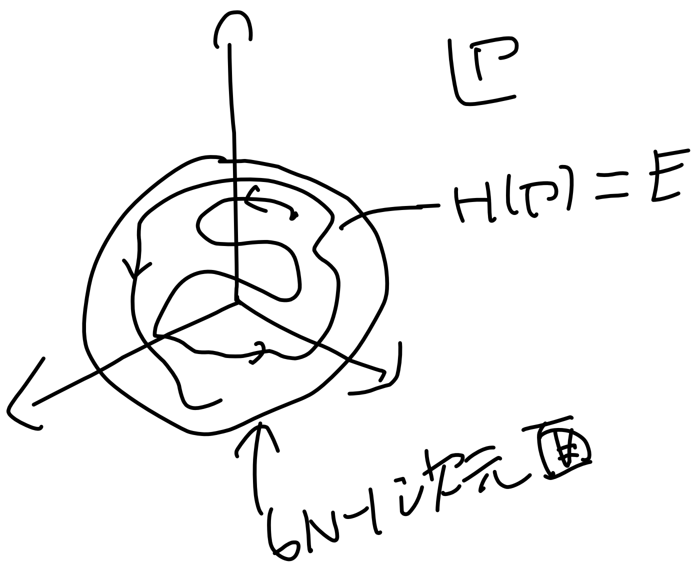
$$K_* = \int d\Gamma\ \hat{K}(\Gamma)\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\ \delta(\Gamma-\Gamma(t))$$

$$= \int d\Gamma\ \hat{K}(\Gamma)\,\underline{\rho_E^{mc}(\Gamma)}$$

確率密度　補足ページへ

長時間平均を Γ平均で置き換える

§ 確率密度 $\rho^{mc}_E(\Gamma)$



▷ エネルギー面上をくまなく運動する

（▷ 時間発展で不変な集合で有限体積なのはエネルギー面全体）

〈エルゴード性〉

$$\Rightarrow \quad \rho^{mc}_E(\Gamma) = \frac{\delta(H(\Gamma)-E)}{\Sigma(E)}$$

ミクロカノニカル分布

等重率の原理：（孤立した）古典力学系の平衡状態の物理量はミクロカノニカル分布で決定される

補足：確率密度

1変数の場合： $x \in \mathbb{R}^+$ に対して

・正の値をとる確率変数 X が $[0, x]$ に値をとる確率 $P(x)$

$$P(0) = 0 \; ; \; P(\infty) = 1$$

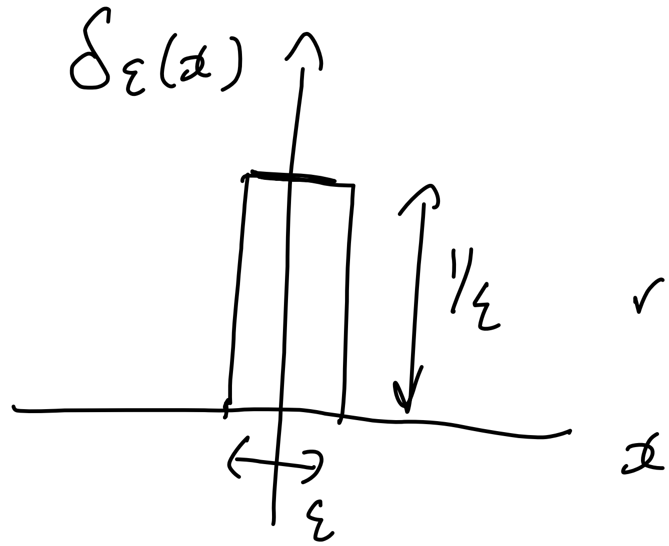
$$\rho(x) \equiv \frac{dP(x)}{dx} \; ; \; \int_0^\infty dx\, \rho(x) = 1$$

$\rightarrow$ $[x, x+\underbrace{dx}_{\text{small}}]$ に値をとる確率 $\rho(x)dx$

⇒ 高次元に一般化

$\rho(\Gamma)\underbrace{d\Gamma}_{\text{6N次元体積要素}}$ ： 確率

補足：デルタ関数

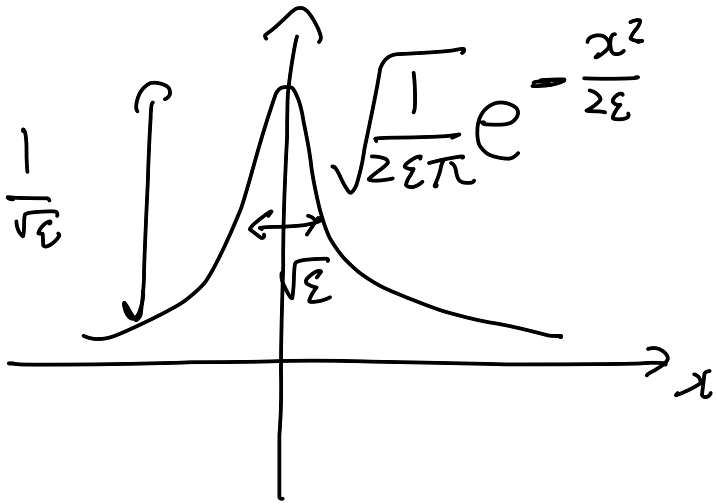


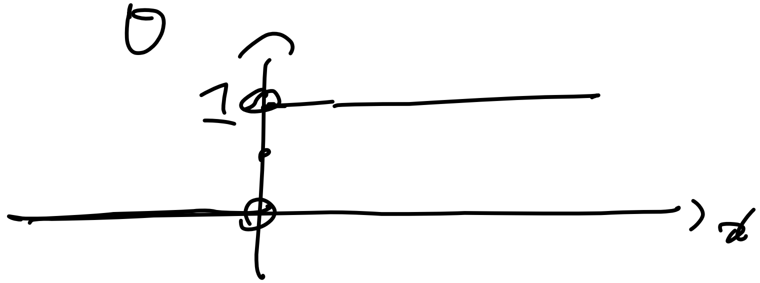
$$\delta_\varepsilon(x) \longrightarrow \delta(x) \quad \varepsilon \to 0$$

✓ $\lim_{\varepsilon \to 0} \int dx\, f(x)\, \delta_\varepsilon(x) = \int dx\, f(x)\, \delta(x)$

$= f(0)$

✓ $\delta(x) = \frac{d}{dx}\theta(x)$





✓ 公式 $\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}$

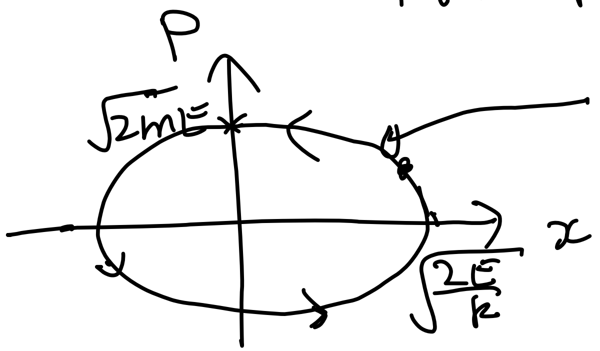
$$\delta(f(x)) = \frac{\delta(x - x_*)}{|f'(x_*)|}$$

$f(x_*) = 0$

unique

§ 参考：1次元調和振動子

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$



$H(x,p) = E$ $\quad$ $\Gamma = (x,p)$

$\Gamma(t)$：解 $\quad \Gamma(0) = (x^0, p^0)$

τ：周期

$H(\Gamma) = E$

$$\frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\, \delta(\Gamma - \Gamma(t)) = \frac{1}{\tau}\frac{1}{|\dot{\Gamma}(t_0)|} \quad ; \ \Gamma(t_0) = \Gamma, \ 0 \le t_0 < \tau$$

$$= \frac{1}{\tau}\frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial x}\right)^2}}$$

$$= \frac{1}{\tau}\delta(H(\Gamma) - E)$$

デルタ関数の公式

よって $\rho_E^{mc}(\Gamma) = \frac{1}{\tau}\delta(H(\Gamma) - E)$