物性研究 38 − 3（1982 − 6）

エネルギー等分配則と拡散粒子の位置に対する重力場の影響

宮崎大・工・応物　餌 取 寛 次

（1982年5月10日受理）

摘　要

Brown 運動をする粒子の Langevin 方程式から，重力場の影響を考慮した粒子速度の自己相関関数が求められる。これによって，粒子のエネルギー等分配則と位置の２乗平均を示す式が与えられる。これらは，従来の表示からの重力場による“ずれ”として示される。

§ 1.　序

重力場での拡散方程式の解に関連した前回の報告[1)] とその拡散係数に対する補足[2)] について，共に Langevin 方程式による粒子速度のゆらぎの扱い方が問題とされている。

今回の解析では，重力に関する項を含む Langevin 方程式から粒子速度の自己相関関数が求められる。この相関関数から二乗速度の集団平均とエネルギー等分配列が導かれ，従来における無重力場での拡散粒子に対する表示[3−5)] からの“ずれ”が，粒子の初速度と重力加速度に関係して示される。

§ 2.　速度相関関数

質量 m の粒子に対する任意時刻 t で速度 $v(t)$ を有する Langevin 方程式は，重力場（ g ：重力加速度 ）を考慮すると次の式によって示される[1)]。

$$\frac{dv(t)}{dt} = -\beta v(t) - g + R(t)/m, \quad \beta = \gamma/m \quad , \tag{1}$$

ただし，γ 及び $R(t)$ はそれぞれまさつ係数及び周囲媒体分子の熱運動に基づくランダムな力を示す関数とする。

(1)式の解は，$v(0) = v_0$（一定）として

$$v(t) = v_0 \exp(-\beta t) - (g/\beta)\left[1 - \exp(-\beta t)\right] + (1/m)\int_0^t R(t')\exp\left[\beta(t'-t)\right]dt' \tag{2}$$

ETORI, Kanji

$R(t)$の集団平均$<R(t)>=0$によって、重力場を考慮した場合($g>0$)に，τを相関時間とした粒子の速度相関関数$<v(t)v(t+\tau)>_g$は(2)式から求められる。

$$<v(t)v(t+\tau)>_g = \text{非ランダム項}$$
$$+(1/m^2)\iint <R(\mu)R(\lambda)> \exp[\beta(\mu+\lambda-2t-|\tau|)]\,d\lambda d\mu$$
$$0<\mu<t,\quad 0<\lambda<t+|\tau|\ . \tag{3}$$

ランダラ相関に対しては，白色雑音としての性質[6]を有するものとすると

$$<R(\mu)R(\lambda)>=\alpha\delta(\mu-\lambda),\quad \alpha:\text{任意定数} \tag{4}$$

さらにまた，重力場を考慮しない場合($g=0$)における従来のエネルギー等分配則[1]を用いると

$$\lim_{\substack{t\to\infty\\ \tau\to 0}} <v(t)v(t+\tau)>_0 = <v^2(\infty)>$$
$$= k_B T/m\ , \tag{5}$$

ただし，k_B は Boltzmann 定数であり，Tは絶対温度を示す。
上記(4)及び(5)式を用いて(3)式の計算を遂行すると，次のようにαが定められる

$$\alpha = 2\gamma k_B T\ . \tag{6}$$

したがって, Brown 運動をする粒子の重力場における速度相関関数は

$$<v(t)v(t+\tau)>_g$$
$$=(k_B T/m)\exp(-\beta|\tau|)+(v_0^2-k_B T/m)\exp[-\beta(2t+|\tau|)]$$
$$-(v_0 g/\beta)\{1+[1-2\exp(-\beta t)]\exp(-\beta|\tau|)\}$$
$$+(g/\beta)^2\{1-\exp[-\beta(t+|\tau|]\}[1-\exp(-\beta t)]\ . \tag{7}$$

重力場を考慮しない場合には

$$<v(t)v(t+\tau)>_0$$
$$=(k_B T/m)\exp(-\beta|\tau|)+(v_0^2-k_B T/m)\exp[-\beta(2t+|\tau|)] \tag{8}$$

であることが示される。

比較的長い時刻での相関は

$$< v(t)v(t+\tau)>_g = (k_B T/m)\exp(-\beta|\tau|) + (g/\beta)^2 \;, \quad \beta t \gg 1 \tag{9}$$

となる。

§3. エネルギー等分配則

(7)式から速度の2乗平均を求めると

$$\begin{aligned} < v^2(t)>_g = & (k_B T/m)\,[1-\exp(-2\beta t)] + v_0^2\exp(-2\beta t) \\ & -2(v_0 g/\beta)\,[1-\exp(-\beta t)]\exp(-\beta t) \\ & +(g/\beta)^2\,[1-\exp(-\beta t)]^2 . \end{aligned} \tag{10}$$

$$< v^2(t)>_0 = (k_B T/m)\,[1-\exp(-2\beta t)] + v_0^2\exp(-2\beta t) \;, \tag{11}$$

$$\lim_{t\to\infty} < v^2(t)>_0 = k_B T/m \;. \tag{12}$$

(10)式は重力場を考慮した場合の過渡的な関係式であって，(11)及び(12)式はそれぞれ従来からの過渡的な表示[3] 及び平衡分布での Maxwell 粒子に対する表示[4] を示す。

したがって，エネルギー等分配則に対する平衡分布での重力場による "ずれ" は，(2)，(10)及び(12)式から次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \lim_{t\to\infty} <\frac{1}{2}mv^2(t)>_g &= \frac{1}{2}k_B T + \frac{1}{2}m(mg/\gamma)^2 \\ &= \lim_{t\to\infty} <\frac{1}{2}mv^2(t)>_0 + \lim_{t\to\infty}\frac{1}{2}mv^2(t) \end{aligned} \tag{13}$$

即ち重力場での "ずれ" は，重力とまさつ抵抗との釣合による定常速度に関係した項という常識的な答が得られる。

§4. 拡散係数

重力場を考慮した Langevin 方程式から，任意時刻における粒子の位置 $z(t)$ の集団平均 $< z(t) >$ を含む関係式は

$$\frac{d}{dt}<z(t)\,\dot{z}(t)>+\beta<z(t)\,\dot{z}(t)>=<\dot{z}^2(t)>-g<z(t)> \tag{14}$$

によって与えられる。[2] この前回における報告では，エルゴード的立場を考慮して，$<\dot{z}^2(t)>$ には平衡分布による関係式(12)を対応させた。

今回は，この項には重力場での過渡的な影響が含まれるとして(10)式を対応させる。

従来の重力場が考慮されない場合では，Brown 運動をする粒子について

$$<z^2(t)>_0=2Dt\{1-[1-\exp(-\beta t)]/(\beta t)\} \tag{15}$$

$$=2Dt \quad , \qquad \beta t\gg 1 \tag{16}$$

ただし，Dは Einstein の関係式によって表わされる拡散係数であって，$D=k_B T/(m\beta)$ によって与えられる。[3,7]

この(16)式は，自由粒子に対する拡散方程式のインパルス源による Gauss 分布解から得られるものと一致している。

さて，(2)式から得られる$<z(t)>_g$と(10)式を(14)式に代入して$<z(t)\dot{z}(t)>$が求められる。 したがって

$$\begin{aligned}<z^2(t)>_g &= 2\int_0^t<z(t')\dot{z}(t')>dt' \\ &= 2Dt\{1-[3-4\exp(-\beta t)+\exp(-2\beta t)]/(2\beta t)\} \\ &\quad +(1/\beta)^2[v_0^2+2v_0 g/\beta+(g/\beta)^2][1-2\exp(-\beta t)+\exp(-2\beta t)] \\ &\quad -2(1/\beta)[v_0 g/\beta+(g/\beta)^2]t+(g/\beta)^2t^2 \\ &\quad +2(g/\beta)(v_0+g/\beta)t\exp(-\beta t)\end{aligned} \tag{17}$$

$$\begin{aligned}&=2Dt\{1-(1/D\beta)[v_0 g/\beta+(g/\beta)^2]\} \\ &\quad +(1/\beta)^2[v_0^2+2v_0 g/\beta+(g/\beta)^2]+(g/\beta)^2t^2 \quad , \quad \beta t\gg 1,\end{aligned} \tag{18}$$

$$=2Dt \quad , \qquad v_0=0 \quad , \qquad g/\beta\ll 1 \quad . \tag{19}$$

(16)と(18)の両式による比較から，重力場での“ずれ”が示される。さらにまた(19)式によって(16)式への近似条件が与えられる。

この(17)式を用いて位置の分散（２次のゆらぎ）を求めると

$$\langle (\varDelta z(t))^2 \rangle_g = \langle z^2(t) \rangle_g - (\langle z(t) \rangle_g)^2$$

$$= 2Dt\{1-(1/2\beta t)[3-4\exp(-\beta t)+\exp(-2\beta t)]\} \tag{20}$$

となる。

この(20)式に拡散係数の古典的定義[8)]を適用すると

$$\lim_{t\to\infty} \langle (\varDelta z(t))^2 \rangle / (2t) = D \quad . \tag{21}$$

以上の結果から，$\langle \dot{z}^2(t) \rangle$ に重力場の過渡的影響を含ませると従来の表示と一致してくることが確かめられる。

参 考 文 献

1) 餌取：物性研究 vol. **36** (1981) 209, 347.

2) 同上：物性研究 vol. **36** (1981) 295.

3) G. E. Uhlenbeck and L. S. Ornstein : Phys. Rev. **36** (1930) 823.

4) R. Balescu : *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mcehanics* (John Wiley and Sons, New York, 1975) Chap. 11, pp. 371-377.

5) A. Manoliu and C. Kittel : Amer. J. Phys. **47** (1979) 678.

6) D. Jasnow and E. Gerjuoy : Phys. Rev. **A11** (1975) 340.

7) H. Unrüh, Jr. : Amer. J. Phys. **48** (1980) 818.

8) A. Widom : Phys. Rev. **A3** (1971) 1394.