热力学与统计物理-第一周第一次作业

吴远清-2018300001031

2020 年 2 月 18 日

1.三维空间中一个粒子做随机行走，步长为l，走N步后，其距离出发点距离r^2与步数N关系如何，试推导。

解：

1).On Lattice:

先考虑粒子沿X,Y,Z方向中某一个方向行走的情况,此处以X方向为例。记粒子沿X正向行走为$X = l$,沿X负向行走为$X = -l$，显然的，粒子的自由行走符合二项分布,且：

$$P(X = l) = P(X = -l) = 0.5 \tag{1.1}$$

设在N次行走中，沿$X = l$发生了n次，则行走距离为:

$$r = l \times n + (-l) \times (N - n) = l \times (2n - N) \tag{1.2}$$

此情况发生的概率为:

$$P(n) = \frac{N!}{2^N n!(N-n)!} \tag{1.3}$$

则：

$$\overline{r^2} = \sum_{n=0}^{N} l^2 \times (2n-N)^2 \frac{N!}{2^N n!(N-n)!} = l^2 \frac{N!}{2^N} \sum_{n=0}^{N} \frac{(2n-N)^2}{n!(N-n)!} \tag{1.4}$$

其中:

$$\sum_{n=0}^{N} \frac{(2n-N)^2}{n!(N-n)!} = \frac{2^N}{(N-1)!} \tag{1.5}$$

将(1.5)式代入(1.4)式中：

$$\overline{r^2} = N \times l^2 \tag{1.6}$$

由于粒子做随机行走,因此粒子在X,Y,Z方向的行走相互独立

$$\overline{r^2} = \overline{r_x^2 + r_y^2 + r_z^2} = \overline{r_x^2} + \overline{r_y^2} + \overline{r_z^2} \tag{1.7}$$

假设在N次行走中，粒子在X方向上行走N_1次，在Y方向行走N_2次，在Z方向上行走$N - N_1 - N_2$次，利用(1.6),(1.7)式结果，可得:

$$\overline{r^2} = \overline{r_x^2} + \overline{r_y^2} + \overline{r_z^2} = N_1 \times l^2 + N_2 \times l^2 + (N - N_1 - N_2) \times l^2 \tag{1.8}$$

$$\overline{r^2} = N \times l^2 \tag{1.9}$$

2).Off Latice:
对于每次行走，总有固定的长度l以及随机的方向θ, ϕ, θ取为方向矢量在XY平面内的投影与X正向的夹角,ϕ取为方向矢量与XY平面的夹角。对于N次行走，有:

$$\{\theta_1, \theta_2, ..., \theta_N, \phi_1, \phi_2, ..., \phi_N\} \tag{1.10}$$

分别有:

$$\begin{cases} \overline{r_x^2} = \overline{l^2 \times \sum_{i=1}^{N} (cos^2\phi_i cos^2\theta_i)} = l^2 \times N \times \overline{cos^2\phi cos^2\theta} \\ \overline{r_x^2} = \overline{l^2 \times \sum_{i=1}^{N} (cos^2\phi_i sin^2\theta_i)} = l^2 \times N \times \overline{cos^2\phi sin^2\theta} \\ \overline{r_z^2} = \overline{l^2 \times \sum_{i=1}^{N} (sin^2\phi_i)} = l^2 \times N \times \overline{sin^2\phi} \end{cases} \tag{1.11}$$

由三角函数的周期性可得:

$$\begin{cases} \overline{cos^2\theta} = \int_0^{2\pi} cos^2\theta d\theta = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} cos(2\theta) d\theta = \frac{1}{2} \\ \overline{sin^2\theta} = \int_0^{2\pi} sin^2\theta d\theta = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} cos(2\theta) d\theta = \frac{1}{2} \end{cases} \tag{1.12}$$

ϕ同理，又因为ϕ与θ是独立变量，因此

$$\begin{cases} \overline{cos^2\phi cos^2\theta} = \overline{cos^2\phi} \times \overline{cos^2\theta} \\ \overline{cos^2\phi sin^2\theta} = \overline{cos^2\phi} \times \overline{sin^2\theta} \end{cases} \tag{1.13}$$

将式 (1.13),(1.12)代入(1.11)中

$$
\begin{cases}
\overline{r_x^2} = \dfrac{N}{4} l^2 \\
\overline{r_y^2} = \dfrac{N}{4} l^2 \\
\overline{r_z^2} = \dfrac{N}{2} l^2
\end{cases}
\tag{1.14}
$$

最终得到

$$
\overline{r^2} \ = \overline{r_x^2} + \overline{r_y^2} + \overline{r_z^2} = N \times l^2 \tag{1.15}
$$

将(1.15)与式(1.6)比较可发现，有无网格情况下结果均相同