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

1.一个粒子做随机行走，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).一维情况：

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：

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

2).二维情况：

2.1) On Lattice:

与一维情况相似的，我们独立考虑X方向与Y方向的行走:
假设在N次行走中，有N_1次发生在X方向上，有$N-N_1$次发生在Y方向上，由(1.6)式可知:

$$\begin{cases} \overline{r_x^2} \ = \ N_1 \times l^2 \\ \overline{r_y^2} \ = \ (N-N_1) \times l^2 \end{cases} \tag{1.7}$$

并且:

$$\overline{r^2} \ = \ \overline{r_x^2} + \overline{r_y^2} \tag{1.8}$$

将(1.7)代入式(1.8)中得:

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

2).Off Lattice:
对于每一次行走，总具有固定的长度l以及随机的方向θ, θ取为与X正向的夹角,对于N次行走，则有:

$$\{\theta_1, \theta_2 .... \theta_N\} \tag{1.10}$$

分别有:

$$\begin{cases} \overline{r_x^2} \ = \ l^2 \times (Cos^2\theta_1 + Cos^2\theta_2 + ... + Cos^2\theta_N) \ = \ l^2 \times \overline{Cos^2\theta} \\ \overline{r_y^2} \ = \ l^2 \times (Sin^2\theta_1 + Sin^2\theta_2 + ... + Sin^2\theta_N) \ = \ l^2 \times \overline{Sin^2\theta} \end{cases} \tag{1.11}$$

由三角函数的周期性可得:

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

即:

$$\begin{cases} \overline{r_x^2} \ = \ \frac{N}{2} l^2 \\ \overline{r_y^2} \ = \ \frac{N}{2} l^2 \end{cases} \tag{1.13}$$

最终得到:

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

3).三维情况: 对于三维情况下，有无网格均与二维解法相似，不再重复证明(Off Lattice情况下取两个角来确定方向，即可相似的证明)