2008.11.19

物性物理学 C　レポート略解

1. 講義中に説明した気体の自由膨張におけるエントロピー増加は $Nk_{\mathrm{B}}\ln 2$ であった。今、気体 A 、気体 B それぞれで考えると自由膨張と同じである。A 、B は相互作用しない（理想気体）ので、エントロピー変化はそれぞれ $Nk_{\mathrm{B}}\ln 2$ で、合計 $2Nk_{\mathrm{B}}\ln 2$ となる。
（壁の左側に気体 A が、右側に気体 B が入っていたとする。気体 A のみを通す壁、気体 B のみを通す壁の 2 枚の仮想的な壁を中央に差し込み、熱浴をつなげたあと、気体 A のみを通す壁は左側に、気体 B のみを通す壁は右側に準静的に動かしていくときの熱の出入りを計算してもよい）
このエントロピーのことを混合エントロピーと呼びます。

2. $$P(x,i+1)=\frac{1+a}{2}P(x-1,i)+\frac{1-a}{2}P(x+1,i)$$
(正の方向に動く確率が $(1+a)/2$ であるため、$x-1$ から来る確率が $(1+a)/2$ であることに注意)
$$P(x,i+1)-P(x,i)=\frac{1+a}{2}P(x-1,i)+\frac{1-a}{2}P(x+1,i)-P(x,i)$$
より、
$$\frac{P(x,i+1)-P(x,i)}{\Delta t}=\frac{2\Delta x^2}{\Delta t}\frac{P(x-1,i)+P(x+1,i)-2P(x,i)}{\Delta x^2}-\frac{a\Delta x}{2\Delta t}\frac{P(x+1,i)-P(x-1,i)}{\Delta x}$$
$\Delta t/\Delta x^2=C$、$a\Delta x/\Delta t=A$ より
$$\frac{P(x,i+1)-P(x,i)}{\Delta t}=\frac{2}{C}\frac{P(x-1,i)+P(x+1,i)-2P(x,i)}{\Delta x^2}-A\frac{P(x+1,i)-P(x-1,i)}{2\Delta x}$$
極限をとって
$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{2}{C}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}-A\frac{\partial P}{\partial x}$$
問題が不十分ですみませんでした。講義中に少し紹介したフォッカー・プランク方程式の 1 階微分の項（ドリフト項）はこのように導くこともできます。

3. (i) 1 次元の場合、$\partial u/\partial t = 0$ とすると、

$$D\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} = 0$$

一般解を求めると、$u = ax + b$ となる。$u(x_1) = u_1$、$u(x_2) = u_2$ を代入して、a、b を求めると

$$u(x) = \frac{u_2 - u_1}{x_2 - x_1}x + \frac{u_1 x_2 - u_2 x_1}{x_2 - x_1}$$

(ii) 2 次元の場合、$\partial u/\partial t = 0$ とし、軸対称であることを考慮すると、円筒座標でのラプラシアンを用いて

$$D\left(\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} + \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r}\right) = 0$$

この一般解は $u = a \ln r + b$ となる。$u(r_1) = u_1$、$u(r_2) = u_2$ を代入して、a、b を求めると

$$u(r) = \frac{u_2 - u_1}{\ln r_2 - \ln r_1}\ln r + \frac{u_1 \ln r_2 - u_2 \ln r_1}{\ln r_2 - \ln r_1}$$

1 次元系で高温熱源と低温熱源に接触させると温度分布は線形になります。それに対して、2 次元系では、log 型のプロファイルです。ちなみに 3 次元では、$1/r$ になります。点電荷、線電荷、面電荷をおいたときの電位の依存性と同じですね。これは、定常解だとラプラス方程式になるので、電位についての方程式と同じ形になるためです。

4. 与えられた式より、

$$x(t) = x(0) + \frac{1}{\gamma}\int_0^t \xi(\tau)d\tau$$

であるため

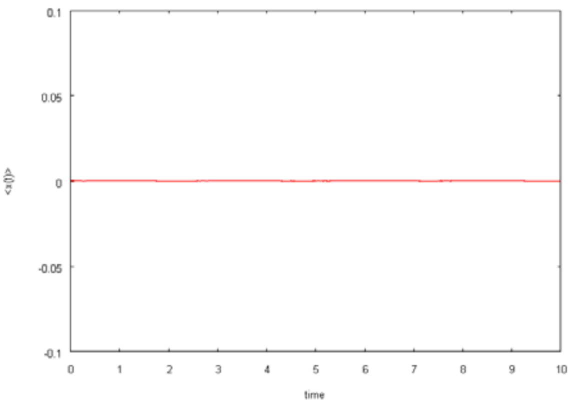
$$\langle x(t)\rangle = x(0) + \frac{1}{\gamma}\int_0^t \langle \xi(\tau)\rangle d\tau = x(0)$$

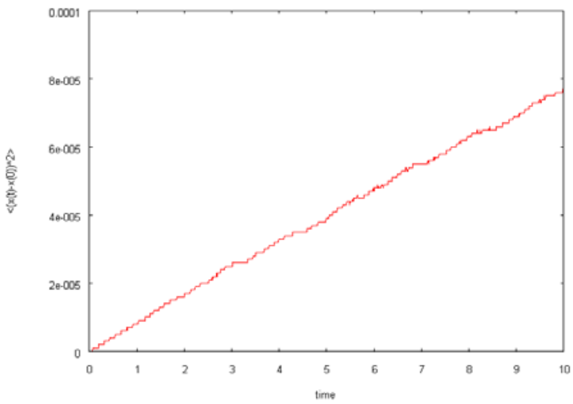
$$\left\langle (x(t) - x(0))^2 \right\rangle = \left\langle \left(\frac{1}{\gamma}\int_0^t \xi(\tau)d\tau\right)^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\gamma^2}\int_0^t\int_0^t \xi(\sigma)\xi(\tau)d\sigma d\tau \right\rangle$$

$$= \int_0^t\int_0^t \left\langle \frac{1}{\gamma^2}\xi(\sigma)\xi(\tau) \right\rangle d\sigma d\tau = \int_0^t\int_0^t \frac{2M}{\gamma^2}\delta(\tau - \sigma)d\sigma d\tau = \frac{2M}{\gamma^2}\int_0^t d\tau = \frac{2Mt}{\gamma^2}$$

この方程式でも、講義中に計算した Langevin 方程式からと同じ式が得られます。

5. 数値計算結果を下に示します（1000 回の試行の結果）。





4 の結果が確認できるとおもいます。

6. 定常解なので、$\partial P/\partial t = 0$ とすると、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(F(x)P(x) + k_{\mathrm{B}}T\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P(x) \right) = 0$$

よって、

$$F(x)P(x) + k_{\mathrm{B}}T\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P(x) = C$$

$x \to \pm\infty$ で $\Phi \to \infty$、$F \to 0$ であることを考慮すると $C = 0$ とできる。よって、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P(x) = -\frac{F(x)}{k_{\mathrm{B}}T}P(x)$$

これを解いて、規格化すると、

$$P(x) = \exp\left(-\frac{\Phi(x)}{k_{\mathrm{B}}T} \right) \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\Phi(x')}{k_{\mathrm{B}}T} \right) \mathrm{d}x'$$

境界条件を明記しておらず、申し訳ありませんでした。1 次元だと必ずポテンシャルが書けるので、簡単なのですが、2 次元以上でポテンシャルとして書けない場合があり、その時はかなり難しくなります。

7. 講義中に求めた拡散方程式の Green 関数は

$$u(x)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

であった。問題にある式より、拡散係数 D に対応する値が、$a\varepsilon$となる。これを代入すると、

$$\begin{aligned}
F\{u(x)\} &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\varepsilon}{2}\left|\nabla u\right|^2 \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\varepsilon}{2}\left[\frac{1}{\sqrt{4\pi a\varepsilon t}}\left(-\frac{x}{2a\varepsilon t}\right)\exp\left(-\frac{x^2}{4a\varepsilon t}\right)\right]^2 \mathrm{d}x \\
&= \frac{\varepsilon}{2}\frac{1}{16\pi a^3\varepsilon^3 t^3}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\exp\left(-\frac{2x^2}{4a\varepsilon t}\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{\varepsilon}{2}\frac{1}{16\pi a^3\varepsilon^3 t^3}\frac{\sqrt{\pi(2a\varepsilon t)^3}}{2} \\
&= \frac{1}{16\sqrt{2\pi}}a^{-3/2}\varepsilon^{-1/2}t^{-3/2}
\end{aligned}$$

このようにエネルギーが減衰していく系は必ず最終的には平衡状態に達します。この場合は、一様状態です。