2009.12.2

物性物理学C 第1回レポート 略解

I. (a) 3次元で計算することにする。気体分子の質量を m、気体の粒子数 N とすると、エネルギーが E から $E+\mathrm{d}E$ となる状態数は

$$W\mathrm{d}E = \frac{1}{N!h^{3N}}\int\cdots\int \mathrm{d}\mathbf{r}_1\cdots\mathrm{d}\mathbf{r}_N \int\cdots\int_{E\le\frac{|\mathbf{p}_1|^2+\cdots+|\mathbf{p}_N|^2}{2m}\le E+\mathrm{d}E}\mathrm{d}\mathbf{p}_1\cdots\mathrm{d}\mathbf{p}_N$$

となる。$N!$ の項は、粒子の入れ替えの重複を考慮するために必要な項である。$\mathbf{r}_k$ に関する積分は V^N になり、$\mathbf{p}_k$ に関する積分は半径が $\sqrt{2m(E+\mathrm{d}E)}$ の $3N$ 次元球の体積から半径が $\sqrt{2mE}$ の $3N$ 次元球の体積を引いたものとなる (あるいは半径が $2mE$ の $3N$ 次元球の表面積に $\mathrm{d}E$ を乗じたものと考えても良い)。半径 r の n 次元の球の体積は $\dfrac{\pi^{\frac{n}{2}}r^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)}$ と表わされるので、

$$W\mathrm{d}E = \frac{V^N}{N!h^{3N}}\left[\frac{\pi^{\frac{3N}{2}}(2m(E+\mathrm{d}E))^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}+1\right)} - \frac{\pi^{\frac{3N}{2}}(2mE)^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}+1\right)}\right] = \frac{V^N(2\pi mE)^{\frac{3N}{2}}}{N!h^{3N}\Gamma\left(\frac{3N}{2}+1\right)}\frac{3N}{2}\frac{\mathrm{d}E}{E}$$

(b) $S=k_\mathrm{B}\ln W$ で、V に関係する項だけを考えればよい。他の項は V によらない。

$$\Delta S = k_\mathrm{B}\ln(\alpha V)^N - k_\mathrm{B}\ln V^N = k_\mathrm{B}N\ln\alpha$$

となる。

II. $x_0=0$ とすると講義中に示したのと同様にして

$$\langle x_n\rangle = \left\langle\sum_{i=0}^{n-1}\xi_i\right\rangle = \sum_{i=0}^{n-1}\langle\xi_i\rangle$$

$$\left\langle x_n^2\right\rangle = \left\langle\left(\sum_{i=0}^{n-1}\xi_i\right)^2\right\rangle = \left\langle\sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\xi_i\xi_j\right\rangle = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\langle\xi_i\xi_j\rangle$$

本問題の条件下で、$\langle\xi_i\rangle$、$\langle\xi_i\xi_j\rangle$ を求めると

$$\langle\xi_i\rangle = 1\times p + (-1)\times(1-p) = 2p-1$$

$$\langle\xi_i\xi_j\rangle = \begin{cases} 1\times1\times p + (-1)\times(-1)\times(1-p) = 1 & \text{if}\quad i=j \\ 1\times1\times p^2 + 1\times(-1)\times 2p(1-p) + (-1)\times(-1)\times(1-p)^2 = (2p-1)^2 & \text{if}\quad i\ne j\end{cases}$$

これより、

$$\langle x_n\rangle = (2p-1)n$$

$$\left\langle x_n^2\right\rangle = (2p-1)^2n(n-1)+n = (2p-1)^2n^2+4n(1-p)p$$

ちなみに平均値のまわりの分散 $\left\langle(x_n-\langle x_n\rangle)^2\right\rangle$ は

$$\left\langle(x_n-\langle x_n\rangle)^2\right\rangle = \left\langle x_n^2\right\rangle - \langle x_n\rangle^2 = 4p(1-p)n$$

となる。

III. 1 次元系での拡散方程式の Green 関数を用いて解く。

$$\begin{aligned}
u(x,t) &= \int \mathrm{d}x' G(x-x',t)u(x',t=0) \\
&= \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right) \mathrm{d}x' \\
&= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \sqrt{4Dt} \int_{-\frac{x}{\sqrt{4Dt}}}^{\infty} \exp\left(-X^2\right) \mathrm{d}X \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}} \exp\left(-X'^2\right) \mathrm{d}X' \\
&= F\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right)
\end{aligned}$$

ただし、$F(y)$ は誤差関数（Error function）と呼ばれる関数で

$$F(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{y} \exp(-x^2)\mathrm{d}x$$

で定義される。

IV. フーリエ変換を用いて解を求める。

$$\frac{\partial G(x,y,t)}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 G(x,y,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 G(x,y,t)}{\partial y^2}\right)$$

$$G(x,y,t=0) = \delta(x)\delta(y)$$

を解くため、まずは、$G(x,y,t)$ の空間に関するフーリエ変換を考える。つまり、

$$\tilde{G}(k_x,k_y,t) = \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y G(x,y,t)\exp(ik_x x)\exp(ik_y y)$$

このとき、初期条件は、

$$\tilde{G}(k_x,k_y,t=0) = \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y \delta(x)\delta(y)\exp(ik_x x + ik_y y) = 1$$

となる。また、

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \tilde{G}(k_x,k_y,t)}{\partial t} \\
&= \frac{\partial}{\partial t} \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y \exp(ik_x x + ik_y y) G(x,y,t) \\
&= \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y \exp(ik_x x + ik_y y) D\left(\frac{\partial^2 G(x,y,t)}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 G(x,y,t)}{\partial^2 y}\right) \\
&= \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y \exp(ik_x x + ik_y y) \\
&\quad D\left(\frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2}{\partial^2 y}\right)\left[\left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int \mathrm{d}k_x' \int \mathrm{d}k_y' \exp(-ik_x' x - ik_y' y)\tilde{G}(k_x',k_y',t)\right]
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y \exp(ik_x x + ik_y y) \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \iint \mathrm{d}k_x{}'\mathrm{d}k_y{}'(-k_x{}'^2 - k_y{}'^2)\exp(-ik_x{}'x - ik_y{}'x)\tilde{G}(k_x{}', k_y{}', t) \\
&= -\frac{D}{(2\pi)^2} \iiiint \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}k_x{}'\mathrm{d}k_y{}' \left(k_x{}'^2 + k_y{}'^2\right) \exp(i(k_x - k_x{}')x)\exp(i(k_y - k_y{}')y)\tilde{G}(k_x{}', k_y{}', t) \\
&= -D \iint \mathrm{d}k_x{}'\mathrm{d}k_y{}' \left(k_x{}'^2 + k_y{}'^2\right) \tilde{G}(k_x{}', k_y{}', t)\delta(k_x{}' - k_x)\delta(k_y{}' - k_y) \\
&= -D\left(k_x{}^2 + k_y{}^2\right)\tilde{G}(k_x, k_y, t)
\end{aligned}
$$

ただし、

$$
\delta(k_x) = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}x \exp(-ik_x x)
$$

$$
\delta(k_y) = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}y \exp(-ik_y y)
$$

を用いた。t に関する常微分方程式になるので、これを先に求めた初期条件のもとで解くと、

$$
\tilde{G}(k_x, k_y, t) = \exp(-D(k_x^2 + k_y^2)t)
$$

が得られる。よって、$G(x, t)$ は逆フーリエ変換することにより

$$
\begin{aligned}
G(x, y, t) &= \frac{1}{(2\pi)^2}\iint \mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y \exp(-ik_x x - ik_y y)\exp(-D(k_x^2 + k_y^2)t) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\iint \mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y \exp\left[-Dt\left(k_x + \frac{ix}{2Dt}\right)^2 - Dt\left(k_y + \frac{iy}{2Dt}\right)^2 - \frac{x^2}{4Dt} - \frac{y^2}{4Dt}\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4Dt}\right)\iint \mathrm{d}k_x\mathrm{d}k_y \exp\left[-Dt\left(k_x + \frac{ix}{2Dt}\right)^2 - Dt\left(k_y + \frac{iy}{2Dt}\right)^2\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4Dt}\right)\left(\sqrt{\frac{\pi}{Dt}}\right)^2 \\
&= \frac{1}{4\pi Dt}\exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4Dt}\right)
\end{aligned}
$$

ただし、ここでガウス積分

$$
\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \exp(-ax^2) = \sqrt{\frac{\pi}{a}}
$$

を用いた。一般に N 次元の拡散方程式の Green 関数は

$$
G(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{N/2}}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|^2}{4Dt}\right)
$$

となる。

V. 粒子の質量が十分に小さいとき (粘性極限) のランジュバン方程式

$$
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\gamma}\xi(t)
$$

より、

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

これより、

$$\langle x(t)\rangle = x(0)+\frac{1}{\gamma}\int_0^t \langle \xi(t')\rangle \,\mathrm{d}t' = x(0)$$

$$\begin{aligned}
\langle x(t_1)x(t_2)\rangle &= \left\langle \left(x(0)+\frac{1}{\gamma}\int_0^{t_1}\xi(t')\mathrm{d}t'\right)\left(x(0)+\frac{1}{\gamma}\int_0^{t_2}\xi(t'')\mathrm{d}t''\right)\right\rangle \\
&= x(0)^2+\frac{1}{\gamma^2}\int_0^{t_1}\mathrm{d}t'\int_0^{t_2}\mathrm{d}t''\,\langle\xi(t')\xi(t'')\rangle \\
&= x(0)^2+\frac{1}{\gamma^2}\int_0^{t_1}\mathrm{d}t'\int_0^{t_2}\mathrm{d}t''2M\delta(t'-t'') \\
&= x(0)^2+\frac{2M}{\gamma^2}\int_0^{\min(t_1,t_2)}\mathrm{d}t' \\
&= x(0)^2+\frac{2M}{\gamma^2}\min(t_1,t_2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle (x(t)-x(0))^2\right\rangle &= \left\langle \frac{1}{\gamma^2}\int_0^t\xi(t')\mathrm{d}t'\int_0^t\xi(t'')\mathrm{d}t''\right\rangle \\
&= \frac{1}{\gamma^2}\int_0^t\mathrm{d}t'\int_0^t\mathrm{d}t''\,\langle\xi(t')\xi(t'')\rangle \\
&= \frac{1}{\gamma^2}\int_0^t\mathrm{d}t'\int_0^t\mathrm{d}t''2M\delta(t'-t'') \\
&= \frac{2M}{\gamma^2}\int_0^t\mathrm{d}t' \\
&= \frac{2M}{\gamma^2}t
\end{aligned}$$

となる。

VI. VII. 略

講義のシラバス・資料など： http://cu.phys.s.chiba-u.ac.jp/lecture/busseiC/

北畑の連絡先：kitahata@physics.s.chiba-u.ac.jp, TEL:043-290-3723