2011.12.6

物性物理学C 第1回レポート 略解

I. **(a)** 理想気体においては $U = nC_{\mathrm{V}}T$ と書け、二つの気体の間での仕事および、それ以外の系とのエネルギーや仕事のやりとりはないので、$nC_{\mathrm{V}}T_{\mathrm{A}} + nC_{\mathrm{V}}T_{\mathrm{B}} = 2nC_{\mathrm{V}}T_0$ から $T_0 = \dfrac{T_{\mathrm{A}} + T_{\mathrm{B}}}{2}$

(b) A から B に流れた熱量は A の内部エネルギーの変化と等しいため
$Q = nC_{\mathrm{V}}T_{\mathrm{A}} - nC_{\mathrm{V}}T_0 = nC_{\mathrm{V}}\dfrac{T_{\mathrm{A}} - T_{\mathrm{B}}}{2}$

(c) エントロピーは純静的な変化に沿って考えないといけない。そこで、A に関して T_{A} から T_0 まで変化させるときに、仮に $T_0 > T_{\mathrm{A}}$ であるとすると気体の温度よりもわずかに高い熱浴を接触させて温度を上げることを繰り返す必要がある。そのときの温度を T とすると、エントロピーは $\mathrm{d}S = \dfrac{1}{T}nC_{\mathrm{V}}\mathrm{d}T$ だけ増加することになる。よって $\Delta S_{\mathrm{A}} = \displaystyle\int_{T_{\mathrm{A}}}^{T_0} \frac{nC_{\mathrm{V}}}{T}\mathrm{d}T = nC_{\mathrm{V}} \ln \frac{T_{\mathrm{A}} + T_{\mathrm{B}}}{2T_{\mathrm{A}}}$
となる。同様に計算すると $\Delta S_{\mathrm{B}} = \displaystyle\int_{T_{\mathrm{B}}}^{T_0} \frac{nC_{\mathrm{V}}}{T}\mathrm{d}T = nC_{\mathrm{V}} \ln \frac{T_{\mathrm{A}} + T_{\mathrm{B}}}{2T_{\mathrm{B}}}$

(d) (c) の答えより、
$\Delta S = \Delta S_{\mathrm{A}} + \Delta S_{\mathrm{B}} = nC_{\mathrm{V}} \ln \dfrac{(T_{\mathrm{A}} + T_{\mathrm{B}})^2}{4T_{\mathrm{A}}T_{\mathrm{B}}}$
相加相乗平均の関係より $\dfrac{T_{\mathrm{A}} + T_{\mathrm{B}}}{2} \geq \sqrt{T_{\mathrm{A}}T_{\mathrm{B}}}$。これを用いると、$\Delta S \geq 0$ が言える。

II. $x_0 = 0$ より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

$$\langle \xi_i \rangle = \frac{\sum_{k=1}^m a_k p_k}{\sum_{k=1}^m p_k} = \sum_{k=1}^m a_k p_k \equiv \Xi$$

$$\langle \xi_i \xi_j \rangle = \begin{cases} \dfrac{\sum_{k=1}^m {a_k}^2 p_k}{\sum_{k=1}^m p_k} = \sum_{k=1}^m {a_k}^2 p_k \equiv M & \text{if} \quad i = j \\ \langle \xi_i \rangle \langle \xi_j \rangle = \Xi^2 & \text{if} \quad i \neq j \end{cases}$$

（何人かの方が質問に来てもらった時に勘違いして間違えて答えてしまい、すみませんでした。ただしくはこうです[1]。）これより、

$$\langle x_n \rangle = n\Xi$$

$$\left\langle (x_n - \langle x_n \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle {x_n}^2 \right\rangle - \langle x_n \rangle^2 = Mn + n(n-1)\Xi^2 - \Xi^2 n^2 = n\left(M - \Xi^2\right)$$

ただし、ここでは、$\langle x_n^2 \rangle = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} \langle \xi_i \xi_j \rangle$ の n^2 の項の中で、$i = j$ なるものが n 個、$i \neq j$ なるものが $n(n-1)$ 個あることを用いた。

---

[1] $i = j$ のとき、$\langle \xi_i \xi_j \rangle = \left\langle {\xi_i}^2 \right\rangle = \sum_{k=0}^m {a_k}^2 p_k$。
また、$i \neq j$ のとき、$\langle \xi_i \xi_j \rangle = \sum_{k=0}^m \sum_{\ell=0}^m a_k a_\ell p_k p_\ell = \left(\sum_{k=0}^m a_k p_k\right)\left(\sum_{\ell=0}^m a_\ell p_\ell\right) = \left(\sum_{k=0}^m a_k p_k\right)^2$

III. **(a)** 時間微分に関しては

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

となる。また、空間微分に関しては

$$\frac{\partial^2}{\partial {x_i}^2}G(\mathbf{r},t)=\frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{N}{2}}}\left[-\frac{1}{2Dt}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|^2}{4Dt}\right)+\frac{{x_i}^2}{4D^2t^2}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|^2}{4Dt}\right)\right]$$

となる。すなわち

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

これらを比較すると、$G(\mathbf{r},t)$ が拡散方程式を満たすことがわかる。

また、$\mathbf{r}\neq 0$ の時には、

$$\lim_{t\to+0}\frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{N}{2}}}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|^2}{4Dt}\right)=\lim_{s\to\infty}\frac{s^{\frac{N}{2}}}{(4\pi D)^{\frac{N}{2}}}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|^2 s}{4D}\right)$$

となる。M を $N/2$ より大きい自然数として、指数関数の Taylor 展開を考えると、$A>0$ かつ s について

$$\exp(-As)=\frac{1}{\exp(As)}=\frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^ns^n}{n!}}<\frac{1}{\sum_{n=0}^{M}\frac{A^ns^n}{n!}}$$

よって、$\displaystyle\lim_{t\to+0}\frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{N}{2}}}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|^2}{4Dt}\right)<\lim_{s\to\infty}\frac{s^{\frac{N}{2}}}{(4\pi D)^{\frac{N}{2}}}\frac{1}{\sum_{n=0}^{M}\frac{1}{n!}\frac{|\mathbf{r}|^{2n}s^n}{(4D)^n}}=0$

全空間での積分に関しては

$$\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}G(\mathbf{r},t)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_N=\frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{N}{2}}}\prod_{i=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{{x_i}^2}{4Dt}\right)\mathrm{d}x_i=\frac{\left(\sqrt{4Dt\pi}\right)^N}{(4\pi Dt)^{\frac{N}{2}}}=1$$

ただし、最後の式変形は $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-ax^2\right)\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ を用いた。

(b) $\displaystyle\left\langle|\mathbf{r}|^2\right\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{i=1}^{N}{x_i}^2G(\mathbf{r},t)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_N$

$$=\sum_{i=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}{x_i}^2\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{{x_i}^2}{4Dt}\right)\mathrm{d}x_i=2NDt$$

ただし、最後の式変形は $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}x^2\exp\left(-ax^2\right)\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$ を用いた。

IV. **(a)** $x=x_0$ において微分が 0 であるので、

$\tilde{f}(x)=\begin{cases}f(x) & (x\leq x_0)\\ f(2x_0-x) & (x>x_0)\end{cases}$ という関数を用い、初期条件として全空間で $T(x,t=0)=\tilde{f}(x)$ を与えればよい。つまり解としては 1 次元の Green 関数を用いて

$\displaystyle T(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}G(x-x',t)\tilde{f}(x')\mathrm{d}x'$ と書ける。このとき、この $T(x,t)$ は熱拡散方程式を満たし、かつ初期条件を満たすことは自明である。また境界条件に関しては、

$$\left.\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_0}=\int_{-\infty}^{\infty}\left.\frac{\mathrm{d}G(x-x',t)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_0}\tilde{f}(x')\mathrm{d}x'=0$$

となる。ただし、最後の積分は、$x=x_0$ を中心とするグリーン関数は $x=x_0$ について対称（つまり微分は反対称）であり、$\tilde{f}(x)$ も $x=x_0$ について対称であることから 0 となる。

(b) $x=x_0$ において値が 0 であるので、

$\tilde{f}(x)=\begin{cases}f(x) & (x\leq x_0)\\ -f(2x_0-x) & (x>x_0)\end{cases}$ という関数を用い、初期条件として全空間で $T(x,t=0)=\tilde{f}(x)$

を与えればよい。つまり解としては1次元のGreen関数を用いて
$T(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}G(x-x',t)\tilde{f}(x')\mathrm{d}x'$ と書ける。このとき、この $T(x,t)$ は熱拡散方程式を満たし、かつ初期条件を満たすことは自明である。また境界条件に関しては、
$T(x_0,t)=\int_{-\infty}^{\infty}G(x_0-x,t)\tilde{f}(x')\mathrm{d}x'=0$
となる。ただし、最後の積分は、$x=x_0$ を中心とするグリーン関数は $x=x_0$ について対称であり、$\tilde{f}(x)$ は $x=x_0$ について反対称であることから0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

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

を形式的に解くと

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

これより、

$$\langle x(t_2)-x(t_1)\rangle=\left(x(0)+\frac{1}{\gamma}\int_0^{t_2}\langle\xi(t')\rangle\,\mathrm{d}t'\right)-\left(x(0)+\frac{1}{\gamma}\int_0^{t_1}\langle\xi(t')\rangle\,\mathrm{d}t'\right)=0$$

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

これを使うと

$$\begin{aligned}\left\langle(x(t_2)-x(t_1))^2\right\rangle &= \left\langle x(t_2)^2\right\rangle-2\langle x(t_2)x(t_1)\rangle+\left\langle x(t_1)^2\right\rangle\\ &= x(0)^2+\frac{2M}{\gamma^2}t_2-2\left(x(0)^2+\frac{2M}{\gamma^2}\min(t_1,t_2)\right)+x(0)^2+\frac{2M}{\gamma^2}t_1\\ &= \frac{2M}{\gamma^2}\left(t_2-2\min(t_1,t_2)+t_1\right)\\ &= \frac{2M}{\gamma^2}|t_2-t_1|\end{aligned}$$

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