2012.12.11

物性物理学C 第1回レポート 略解

I. **(a)** それぞれの過程について計算する。状態 A の体積 V_{A}、状態 B の体積を $V_{\mathrm{B}} = \alpha V_{\mathrm{A}}$ としておくと、過程 I において系がした仕事 W_{I} は

$$W_{\mathrm{I}} = \int_{V_{\mathrm{A}}}^{V_{\mathrm{B}}} p\,\mathrm{d}V = \int_{V_{\mathrm{A}}}^{V_{\mathrm{B}}} \frac{Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{H}}}{V}\mathrm{d}V = Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{H}} \ln\frac{V_{\mathrm{B}}}{V_{\mathrm{A}}} = Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{H}}\ln\alpha$$

となる。過程 II において系がした仕事 W_{II} は、熱力学第一法則より、内部エネルギーの変化量に等しいので、

$$W_{\mathrm{II}} = NC_{\mathrm{V}}\left(T_{\mathrm{H}} - T_{\mathrm{L}}\right)$$

過程 III、過程 IV に関しては、それぞれ過程 I、過程 II と同様に計算ができる。断熱変化に沿っては $\gamma = \frac{C_{\mathrm{P}}}{C_{\mathrm{V}}} = \frac{C_{\mathrm{V}} + k_{\mathrm{B}}}{C_{\mathrm{V}}}$ を用いて、$pV^{\gamma} = $ 一定 とできるので、$V^{\gamma-1}T = $ 一定 となる。よって、

$$V_{\mathrm{A}}{}^{\gamma-1}T_{\mathrm{H}} = V_{\mathrm{D}}{}^{\gamma-1}T_{\mathrm{L}}$$

$$V_{\mathrm{B}}{}^{\gamma-1}T_{\mathrm{H}} = V_{\mathrm{C}}{}^{\gamma-1}T_{\mathrm{L}}$$

これより、

$$\frac{V_{\mathrm{A}}}{V_{\mathrm{D}}} = \frac{V_{\mathrm{B}}}{V_{\mathrm{C}}} = \left(\frac{T_{\mathrm{L}}}{T_{\mathrm{H}}}\right)^{\frac{1}{\gamma-1}}$$

となるので、$\frac{V_{\mathrm{B}}}{V_{\mathrm{A}}} = \frac{V_{\mathrm{C}}}{V_{\mathrm{D}}} = \alpha$ が言える。
C での体積を V_{C}、D での体積を V_{D} とすると

$$W_{\mathrm{III}} = \int_{V_{\mathrm{C}}}^{V_{\mathrm{D}}} p\,\mathrm{d}V = \int_{V_{\mathrm{C}}}^{V_{\mathrm{D}}} \frac{Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{L}}}{V}\mathrm{d}V = Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{L}}\ln\frac{V_{\mathrm{D}}}{V_{\mathrm{C}}} = -Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{L}}\ln\alpha$$

$$W_{\mathrm{IV}} = -NC_{\mathrm{V}}\left(T_{\mathrm{H}} - T_{\mathrm{L}}\right)$$

これより、

$$W = W_{\mathrm{I}} + W_{\mathrm{II}} + W_{\mathrm{III}} + W_{\mathrm{IV}} = Nk_{\mathrm{B}}\left(T_{\mathrm{H}} - T_{\mathrm{L}}\right)\ln\alpha$$

となる。

(b) 外部から熱が入ってくる過程は過程 I のみである。過程 I は等温過程なので、内部エネルギーは変化しない。そのため、入った熱 Q_{I} は系が外部にした仕事に等しい。つまり、

$$Q_{\mathrm{I}} = W_{\mathrm{I}} = Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{H}}\ln\alpha$$

である。

(c) これまでの計算より、$\eta = \frac{W}{Q_{\mathrm{in}}} = \frac{T_{\mathrm{H}} - T_{\mathrm{L}}}{T_{\mathrm{H}}}$

(d) 過程 I に関しては等温変化なので、$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S - p\mathrm{d}V$ において、内部エネルギーの変化は 0 である。よって、

$$\Delta S_{\mathrm{I}} = \int_{\mathrm{V_A}}^{\mathrm{V}_B} \frac{p}{T_{\mathrm{H}}}\mathrm{d}V = \int_{\mathrm{V_A}}^{\mathrm{V}_B} \frac{Nk_{\mathrm{B}}}{V}\mathrm{d}V = Nk_{\mathrm{B}}\ln\frac{V_{\mathrm{B}}}{V_{\mathrm{A}}} = Nk_{\mathrm{B}}\ln\alpha$$

一方、過程 II では、断熱変化なので、エントロピーの変化はない。つまり、$\Delta S_{\mathrm{II}} = 0$
過程 III では、過程 I と同様にして

$$\Delta S_{\mathrm{III}} = \int_{\mathrm{V_C}}^{\mathrm{V}_D} \frac{p}{T_{\mathrm{L}}}\mathrm{d}V = \int_{\mathrm{V_C}}^{\mathrm{V}_D} \frac{Nk_{\mathrm{B}}}{V}\mathrm{d}V = Nk_{\mathrm{B}}\ln\frac{V_{\mathrm{D}}}{V_{\mathrm{C}}} = -Nk_{\mathrm{B}}\ln\alpha$$

過程 IV では、断熱変化なので、エントロピーの変化はない。つまり、$\Delta S_{\mathrm{IV}} = 0$

(e) 1 サイクルでのエントロピー変化は、上の計算より 0 となる。

II. $\mathbf{x}_0 = 0$ より

$$\mathbf{x}_n = \sum_{i=0}^{n-1} \xi_i$$

と書ける。定義より $\langle \xi_i \rangle = 0$、$\langle \xi_i \cdot \xi_j \rangle = a^2\delta_{ij}$ となるので、

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

$$\left\langle |\mathbf{x}_n|^2 \right\rangle = \left\langle \left| \sum_{i=0}^{n-1} \xi_i \right|^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} \xi_i \cdot \xi_j \right\rangle = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} \langle \xi_i \cdot \xi_j \rangle = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} a^2\delta_{ij} = na^2$$

III. **(a)** 時間微分に関しては

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

となる。また、空間微分に関しては

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

となる。すなわち

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

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。

(b) $G(\mathbf{r},t)$ を全空間で積分すると

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

ただし、最後の式変形は $\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-ax^2\right)\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ を用いた。全空間で積分して 1 なので、A を求めると、

$$A = (4\pi D)^{-\frac{N}{2}}$$

となる。

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

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

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

IV. **(a)** $x = -x_0$ においての微分は

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial \tilde{G}(x,t)}{\partial x}\right|_{x=-x_0} &= \left.\frac{\partial G(x,t)}{\partial x}\right|_{x=-x_0} + \left.\frac{\partial G(-x-2x_0,t)}{\partial x}\right|_{x=-x_0} \\ &= \left.\frac{\partial G(x,t)}{\partial x}\right|_{x=-x_0} - \left.\frac{\partial G(x,t)}{\partial x}\right|_{x=-x_0} = 0 \end{aligned}$$

となり、条件を満たす。この関数を拡散方程式を代入すると

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{G}(x,t) - D_{\mathrm{T}}\nabla^2\tilde{G}(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}G(x,t) - D_{\mathrm{T}}\nabla^2 G(x,t) + \frac{\partial}{\partial t}G(-x-2x_0,t) - D_{\mathrm{T}}\nabla^2 G(-x-2x_0,t) = 0$$

より、拡散方程式を満たすことがわかる。

(b) $x = -x_0$ においての値は $\tilde{G}(-x_0,t) = G(-x_0,t) - G(x_0 - 2x_0, t) = 0$ となり、条件を満たす。この関数を拡散方程式を代入すると

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{G}(x,t) - D_{\mathrm{T}}\nabla^2\tilde{G}(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}G(x,t) - D_{\mathrm{T}}\nabla^2 G(x,t) - \frac{\partial}{\partial t}G(-x-2x_0,t) + D_{\mathrm{T}}\nabla^2 G(-x-2x_0,t) = 0$$

より、拡散方程式を満たすことがわかる。

V. 問題で与えられたランジュバン方程式

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

を形式的に解くと

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

これより、

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

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

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