2013.12.3

物性物理学C 第1回レポート 略解

I. **(a)** 内部エネルギーは状態に依存し、変化前後の温度差のみによる。ここでは、等温なので、$\Delta U = 0$。外部にする仕事は、

$$W = \int_V^{2V} p\mathrm{d}V = \int_V^{2V} \frac{Nk_\mathrm{B}T}{V}\mathrm{d}V = Nk_\mathrm{B}T\ln 2$$

となる。熱力学の第一法則を考えると、外部にした仕事と気体に流れ込んだ熱量は等しいので、$Q = Nk_\mathrm{B}T\ln 2$ となる。初期状態と終状態のエントロピーの変化を考える。熱が流入するとき、温度 T の熱浴と接しており、準静的な過程なので、$\mathrm{d}'Q = T\mathrm{d}S$ と書けるはずである。よって、$T\Delta S = Nk_\mathrm{B}T\ln 2$ より、$\Delta S = Nk_\mathrm{B}\ln 2$。

(b) 内部エネルギーは状態に依存し、変化前後の温度差のみによる。しかし、断熱自由膨張では、温度は変化しない。よって、$\Delta U = 0$。気体は真空中に出ていくので、気体は外部に仕事をしない。よって、$W = 0$。また、断熱されているので、気体は熱を得ない。つまり $Q = 0$。エントロピーは状態量なので、初期状態と終状態のみによる。よって、**(a)** の場合と同じなので $\Delta S = NK_\mathrm{B}\ln 2$ となる。

(c) **(a)** においては、エントロピーを求めるときに用いたように、$\mathrm{d}'Q = T\mathrm{d}S$ は成り立っている。ところが、**(b)** においては、S は変化しているのに、気体には熱は流入しておらず、式は成り立たない。これは、**(a)** の過程は準静的過程、つまり、可逆であるのに対し、**(b)** の過程は非可逆過程であることに由来する。

II. $x_0 = 0$ より

$$x_n = \sum_{i=0}^{n-1}\xi_i$$

と書ける。定義より

$\langle\xi_i\rangle = \dfrac{1+a}{2} - \dfrac{1-a}{2} = a$、

$i \neq j$ のとき、$\langle\xi_i\xi_j\rangle = \left(\dfrac{1+a}{2}\right)^2 + \left(\dfrac{1-a}{2}\right)^2 - 2\dfrac{1+a}{2}\dfrac{1-a}{2} = a^2$、

$i = j$ のとき、$\langle\xi_i\xi_j\rangle = \dfrac{1+a}{2} + \dfrac{1-a}{2} = 1$ となるので、$\langle\xi_i\xi_j\rangle = (1-a^2)\delta_{ij} + a^2$ となる。

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

$$\left\langle(x_n - \langle x_n\rangle)^2\right\rangle = \left\langle {x_n}^2\right\rangle - \langle x_n\rangle^2$$

ここで、

$$\left\langle {x_n}^2\right\rangle = \left\langle\left(\sum_{i=0}^{n-1}\xi_i\right)^2\right\rangle = \left\langle\sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\xi_i\xi_j\right\rangle = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\langle\xi_i\xi_j\rangle = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\left[(1-a^2)\delta_{ij} + a^2\right] = n^2a^2 + n(1-a^2)$$

これより、

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

以降、$a=0$ とする。つまり、$\langle\xi_i\rangle=0$、$\langle\xi_i\xi_j\rangle=\delta_{ij}$ である。3 次、4 次のモーメントを求めるには $\langle\xi_i\xi_j\xi_k\rangle$ や $\langle\xi_i\xi_j\xi_k\xi_\ell\rangle$ を計算しなければならない。
$\langle\xi_i\xi_j\xi_k\rangle=0$ となる。（すべてが同じでないと独立なので 0、すべてが同じ時も確率 $\dfrac{1}{2}$ で 1、確率 $\dfrac{1}{2}$ で-1 なので、0）
一方、$\langle\xi_i\xi_j\xi_k\xi_\ell\rangle$ はきちんと考えなければならず、$\langle\xi_i\xi_j\xi_k\xi_\ell\rangle=\delta_{ij}\delta_{k\ell}+\delta_{ik}\delta_{j\ell}+\delta_{i\ell}\delta_{jk}-2\delta_{ij}\delta_{jk}\delta_{k\ell}$ となる。2 つずつの組で同じ時には、1 になる。ただし、すべてが同じ時も 1 なので、重複分を引かなければならない。

これより、

$$\left\langle {x_n}^3\right\rangle=\left\langle\left(\sum_{i=0}^{n-1}\xi_i\right)^3\right\rangle=\sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1}\langle\xi_i\xi_j\xi_k\rangle=\sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1}0=0$$

$$\begin{aligned}\left\langle {x_n}^4\right\rangle &= \left\langle\left(\sum_{i=0}^{n-1}\xi_i\right)^4\right\rangle=\sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1}\sum_{\ell=0}^{n-1}\langle\xi_i\xi_j\xi_k\xi_\ell\rangle\\ &= \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1}\sum_{\ell=0}^{n-1}\left(\delta_{ij}\delta_{k\ell}+\delta_{ik}\delta_{j\ell}+\delta_{i\ell}\delta_{jk}-2\delta_{ij}\delta_{jk}\delta_{k\ell}\right)\\ &= 3n^2-2n\end{aligned}$$

III. **(a)** 1 ステップでの変化を考えると

$$P(n,i+1)=P(n,i-1)\frac{1+a}{2}+P(n,i+1)\frac{1-a}{2}$$

となる。

(b) **(a)** で得られた式より変形すると

$$\frac{P(n,i+1)-P(n,i+1)}{\Delta t}=\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}\frac{1}{\Delta x}\left(\frac{P(n+1,i)-P(n,i)}{\Delta x}-\frac{P(n,i)-P(n-1,i)}{\Delta x}\right)$$
$$-\frac{a\Delta x}{\Delta t}\frac{P(n+1,i)-P(n-1,i)}{2\Delta x}$$

ここで、$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}=C$、$\frac{a\Delta t}{\Delta x}=V$ とおいて、$\Delta t\to 0$、$\Delta x\to 0$ の極限を取ると

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{1}{2C}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}-\frac{a^2}{V}\frac{\partial P}{\partial x}$$

となる。これは、拡散方程式に移流項がついたものと、考えることができる。
本当は、問題を書き間違えていて、$\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}=C$、$\frac{a\Delta x}{\Delta t}=V$ とおいてもらうつもりでした。そうすると、

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{C}{2}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}-V\frac{\partial P}{\partial x}$$

ときれいになるはずでした。すみません。

IV. **(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) $\left\langle |\mathbf{r}|^2\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{i=1}^{N}{x_i}^2 G(\mathbf{r},t)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_N$
$$= \sum_{i=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}{x_i}^2\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{{x_i}^2}{4Dt}\right)\mathrm{d}x_i = 2NDt$$
$$\left\langle |\mathbf{r}|^4\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{i=1}^{N}{x_i}^2\sum_{j=1}^{N}{x_j}^2 G(\mathbf{r},t)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_N$$
$$= \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}{x_i}^2{x_j}^2\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{{x_i}^2}{4Dt}\right)\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{{x_j}^2}{4Dt}\right)\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_j$$
$= N(N-1)(2Dt)^2 + N\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\frac{3}{4}\sqrt{\pi(4Dt)^5} = 4N(N+2)(Dt)^2$ となる。
ただし、最後の式変形は $\int_{-\infty}^{\infty}x^2\exp\left(-ax^2\right)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$、$\int_{-\infty}^{\infty}x^2\exp\left(-ax^4\right)\mathrm{d}x = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$ を用いた。

V. 与えられたランジュバン方程式を v で表すと
$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -\frac{\gamma}{m}v + \frac{F}{m} + \frac{1}{m}\xi(t)$$
を形式的に解くと
$$v = v(0)\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right) + \frac{1}{m}\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)\int_0^t\left[F+\xi(t')\right]\exp\left(\frac{\gamma}{m}t'\right)\mathrm{d}t'$$
これより、$v(0)=0$、$\langle\xi(t)\rangle = 0$ を考えて、
$$\langle v(t)\rangle = \frac{F}{m}\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)\frac{m}{\gamma}\left(\exp\left(\frac{\gamma}{m}t\right)-1\right) = \frac{F}{\gamma}\left(1-\exp\left(-\frac{\gamma}{m}t\right)\right)$$
$$\langle x(t)\rangle = \left\langle\int_0^t v(t')\mathrm{d}t\right\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_0^t \langle v(t') \rangle \, \mathrm{d}t' \\
&= \int_0^t \frac{F}{\gamma} \left(1 - \exp\left(-\frac{\gamma}{m} t' \right) \right) \mathrm{d}t' \\
&= \frac{F}{\gamma} \left[t + \frac{m}{\gamma} \left(\exp\left(-\frac{\gamma}{m} t \right) - 1 \right) \right]
\end{aligned}
$$

また、$\left\langle (v(t) - \langle v(t) \rangle)^2 \right\rangle$ は

$$
v(t) - \langle v(t) \rangle = \frac{1}{m} \exp\left(-\frac{\gamma}{m} t \right) \int_0^t \xi(t') \exp\left(\frac{\gamma}{m} t' \right) \mathrm{d}t'
$$

であるので、

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

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