2014.12.3

物性物理学C 第1回レポート 略解

I. **(a)** 系 i のエントロピー S_i（$i=1,2$）に関して

$\mathrm{d}S_i = \dfrac{\mathrm{d}U_i + p_i \mathrm{d}V_i}{T_i}$

と書ける。ただし、p_i は圧力、V_i は体積、T_i は温度、U_i は内部エネルギーである。

系全体は断熱されており、体積も一定なので $\mathrm{d}U_1 = -\mathrm{d}U_2$，$\mathrm{d}V_1 = -\mathrm{d}V_2$ である。よって、系全体のエントロピー S の変化は $\mathrm{d}S = \mathrm{d}S_1 + \mathrm{d}S_2$ となる。これより

$\mathrm{d}S = \left(\dfrac{1}{T_1} - \dfrac{1}{T_2}\right)\mathrm{d}U_1 + \left(\dfrac{P_1}{T_1} - \dfrac{P_2}{T_2}\right)\mathrm{d}V_1$ である。平衡状態では、任意の $\mathrm{d}U_1$、$\mathrm{d}V_1$ の変化に対して $\mathrm{d}S = 0$ とならないといけないので、$T_1 = T_2$、$p_1 = p_2$ である。

(b) **(a)** で $T_1 = T_2$ なので、温度を T とすると

$\mathrm{d}S = \left(\dfrac{p_1}{T} - \dfrac{p_2}{T}\right)\mathrm{d}V_1$

$\mathrm{d}S > 0$ より、$p_1 > p_2$ なら $\mathrm{d}V_1 > 0$ である。つまり、系 1 の体積が増加する方向に壁が動く。

II. $x_0 = 0$ より $x_n = \displaystyle\sum_{i=0}^{n-1} \xi_i$ と書ける。定義より

$\langle \xi_i \rangle = 1 \times \dfrac{a}{2} + 0 \times (1-a) + (-1) \times \dfrac{a}{2} = 0$、

$i \neq j$ のとき、

$\langle \xi_i \xi_j \rangle = (1 \times 1) \times \left(\dfrac{a}{2}\right)^2 + (-1 \times 1) \times \left(\dfrac{a}{2}\right)^2 + (1 \times (-1)) \times \left(\dfrac{a}{2}\right)^2 + ((-1) \times (-1)) \times \left(\dfrac{a}{2}\right)^2 = 0$、

$i = j$ のとき、

$\langle \xi_i \xi_j \rangle = (1 \times 1) \times \dfrac{a}{2} + (0 \times 0) \times (1-a) + ((-1) \times (-1)) \times \dfrac{a}{2} = a$

となる。まとめると $\langle \xi_i \xi_j \rangle = a\delta_{ij}$ これより

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

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

III. **(a)** 1 ステップでの変化を考えると

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

となる。

(b) **(a)** で得られた式より変形すると

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

ここで、$\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} = C$ とおくと

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

よって、$\Delta t \to 0$、$\Delta x \to 0$ の極限を取ると

$\dfrac{\partial P}{\partial t} = \dfrac{Ca}{2}\dfrac{\partial^2 P}{\partial x^2}$ となる。これは、拡散係数が $\dfrac{Ca}{2}$ の拡散方程式である。

IV. Green 関数を用いて解は $u(x,t)=\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} G(x-x',t)u(x',0)\mathrm{d}x'$ と書ける。これを用いてそれぞれ計算する。

(a) $u(x,t)=\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} u_0\exp(-ax'^2)\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right)\mathrm{d}x'$

$=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} u_0\exp\left(-ax'^2-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right)\mathrm{d}x'$

ここで、

$ax'^2+\dfrac{(x-x')^2}{4Dt}=\dfrac{1}{4Dt}\left[(1+4aDt)\left(x'-\dfrac{x}{1+4aDt}\right)^2+\left(1-\dfrac{1}{1+4aDt}\right)x^2\right]$

と書けるので

$u(x,t)=\dfrac{u_0}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\dfrac{a}{1+4aDt}x^2\right)\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{1+4aDt}{4Dt}\left(x'-\frac{x}{1+4aDt}\right)^2\right)\mathrm{d}x'$

Gauss 積分により

$u(x,t)=\dfrac{u_0}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\dfrac{a}{1+4aDt}x^2\right)\sqrt{\dfrac{4\pi Dt}{1+4aDt}}=\dfrac{u_0}{\sqrt{1+4aDt}}\exp\left(-\dfrac{a}{1+4aDt}x^2\right)$

(b) $u(x,t)=\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} u_0\cos x'\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right)\mathrm{d}x'$

$=\dfrac{u_0}{2\sqrt{4\pi Dt}}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\exp\left(\frac{(x-x')^2}{4Dt}+ix'\right)+\exp\left(\frac{(x-x')^2}{4Dt}-ix'\right)\right\}\mathrm{d}x'$

ここで

$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\pm ix'\right)\mathrm{d}x'=\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{(x-x'\pm 2iDt)^2}{4Dt}-\pm ix-Dt\right)\mathrm{d}x'$

$=\sqrt{4\pi Dt}\exp\left(\pm ix-Dt\right)$

ただし、実軸からずれた実軸に平行な積分に関しては、複素関数を用いた一周積分を考えて、実軸上の Gauss 積分に直して計算した。これより

$u(x,t)=\dfrac{u_0}{2\sqrt{4\pi Dt}}\left(\sqrt{4\pi Dt}\exp\left(ix-Dt\right)+\sqrt{4\pi Dt}\exp\left(-ix-Dt\right)\right)=u_0\exp(-Dt)\cos x$

V. 与えられたランジュバン方程式 $\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=-\dfrac{a}{\gamma}x+\dfrac{1}{\gamma}\xi(t)$ を形式的に解くと

$x(t)=x(0)\exp\left(-\dfrac{a}{\gamma}t\right)+\dfrac{1}{\gamma}\exp\left(-\dfrac{a}{\gamma}t\right)\displaystyle\int_0^t\xi(t')\exp\left(\frac{a}{\gamma}t'\right)\mathrm{d}t'=\frac{1}{\gamma}\exp\left(-\frac{a}{\gamma}t\right)\int_0^t\xi(t')\exp\left(\frac{a}{\gamma}t'\right)\mathrm{d}t'$

ただし、$x(0)=0$ とした。ここで、$\langle\xi(t)\rangle=0$ を考えて、$\langle x(t)\rangle=0$

よって、

$\left\langle(x(t)-\langle x(t)\rangle)^2\right\rangle=\left\langle x(t)^2\right\rangle=\dfrac{1}{\gamma^2}\exp\left(-\dfrac{2a}{\gamma}t\right)\displaystyle\int_0^t\int_0^t\xi(t')\exp\left(\frac{a}{\gamma}t'\right)\xi(t'')\exp\left(\frac{a}{\gamma}t''\right)\mathrm{d}t'\mathrm{d}t''$

$=\dfrac{1}{\gamma^2}\exp\left(-\dfrac{2a}{\gamma}t\right)\displaystyle\int_0^t\int_0^t 2M\delta(t'-t'')\exp\left(\frac{a}{\gamma}(t'+t'')\right)\mathrm{d}t'\mathrm{d}t''=\frac{2M}{\gamma^2}\exp\left(-\frac{2a}{\gamma}t\right)\int_0^t\exp\left(\frac{2at'}{\gamma}\right)\mathrm{d}t'$

$=\dfrac{M}{\gamma a}\left(1-\exp\left(-\dfrac{2a}{\gamma}t\right)\right)$

VI. 略

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