2023年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一) 第1回 解答例

担当; 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部9号館 325 号室)

提出日; 5/8 13:00 (前半クラス), 5/1 13:00 (後半クラス)

I　確率分布

(1) 確率 p で表、確率 $1-p$ で裏が出るコイン N 枚を一斉に投げる。ちょうど n 枚のコインが表である確率 $P_N(n)$ を求めよ。ただし、各々のコインの運動は互いに独立であるとする。

解答.— ある特定の順序で表が n 枚, 裏が $N-n$ 枚となる確率は $p^n(1-p)^{N-n}$ である。可能な順序は ${}_NC_n$ 通りあるので、

$$P_N(n) = {}_N C_n p^n (1-p)^{N-n} = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n}$$

である。

(2) (1) で求めた確率分布において、 n と n^2 の期待値 $\langle n \rangle = \sum_n P_N(n) n$, $\langle n^2 \rangle = \sum_n P_N(n) n^2$ および、分散 $\sigma^2 = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle$ を求めよ。

解答.—

$$\begin{aligned}
\langle n \rangle &= \sum_{n=0}^{N} n P_N(n) \\
&= \sum_{n=1}^{N} \frac{N!}{(n-1)!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \\
&= Np \sum_{n=1}^{N} \frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!} p^{n-1} (1-p)^{N-n} \\
&= Np.
\end{aligned}$$

ただし、最後の等号では 2 項定理

$$\sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} a^n b^{N-n} = (a+b)^N$$

を用いた。確率 p で表が出るものを N 回投げれば、期待値として Np 回表が出るというのは直感的

にも自然な帰結である。$\langle n^2 \rangle$ についても同様に、

$$\begin{aligned}\langle n^2 \rangle &= \sum_{n=0}^{N} n^2 P_N(n) \\ &= \sum_{n=1}^{N} n \frac{N!}{(n-1)!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \\ &= \sum_{n=1}^{N} \{(n-1)+1\} \frac{N!}{(n-1)!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \\ &= N(N-1)p^2 \sum_{n=2}^{N} \frac{(N-2)!}{(n-2)!(N-n)!} p^{n-2} (1-p)^{N-n} + Np \\ &= (Np)^2 + Np(1-p)\end{aligned}$$

となる。

分散 σ^2 については、

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle \\ &= \langle n^2 - 2\langle n \rangle n + \langle n \rangle^2 \rangle \\ &= \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 \\ &= Np(1-p)\end{aligned}$$

となる。

(3) $p = 1/2$ とする。$x = (2n-N)/\sqrt{N}$ により新しい変数 x を定義すると、この x が区間 $[x, x+\Delta x]$ 内の値を取る確率 $p(x)\Delta x$ が $N \to \infty$ で標準正規分布

$$p(x)\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \Delta x$$

で与えられることを示せ。ただし、Stiring の公式 $n! \sim \sqrt{2\pi n}(n/e)^n$ を用いて良い。

解答.— $x = (2n-N)/\sqrt{N}$ で定義されるとき、$n = N/2(1+x/\sqrt{N})$ であるので、この n と $p = 1/2$ の下において、

$$P_N(n) = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}(1+x/\sqrt{N})\right)! \left(\frac{N}{2}(1-x/\sqrt{N})\right)!} 2^{-N}$$

である。ここで、x を固定したまま N を十分大きく取る極限を考えると、分母・分子ともに Stiring の公式が適用可能である。この時、

$$\begin{aligned}P_N(n) &\sim \frac{\sqrt{2\pi N}(N/e)^N}{\pi N \sqrt{1-x^2/N}(N/e)^N (1+x/\sqrt{N})^{N(1+x/\sqrt{N})/2} (1-x/\sqrt{N})^{N(1-x/\sqrt{N})/2}} \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi N}} (1-x^2/N)^{-(N+1)/2} \left(\frac{1-x/\sqrt{N}}{1+x/\sqrt{N}}\right)^{x\sqrt{N}/2} \\ &\sim \sqrt{\frac{2}{\pi N}} e^{-x^2/2}\end{aligned}$$

である。微小幅 Δx に対する幅 Δn は $\Delta n = \sqrt{N}\Delta x/2$ である。区間 $[x, x+\Delta x]$ に x を見出す確率

は 区間 $[n, n+\Delta n]$ に n を見出す確率に等しいので、

$$
\begin{aligned}
p(x)\Delta x &= P_N(n)\Delta n \\
&\sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \Delta x
\end{aligned}
$$

である。

注釈.— 変数 x は $x = (n - \langle n \rangle)/\sigma$ によって、期待値 0, 分散 1 となるように規格化されている。この結果は中心極限定理の帰結そのものである。

(4) λ を正の定数とする。$pN = \lambda$ を保ちながら $N \to \infty$ を大きくする極限を取るとき、

$$
\lim_{N \to \infty} P_N(n) = e^{-\lambda} \left(\frac{\lambda^n}{n!} \right)
$$

となることを示せ。

解答 1.—

$$
\begin{aligned}
P_N(n) &= \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \\
&= \frac{1}{n!} N(N-1)\ldots(N-n+1) \frac{(Np)^n}{N^n} (1 - Np/N)^{N-n} \\
&= \frac{\lambda^n}{n!} \left(\prod_{i=1}^{n} (1 - i/N + 1/N) \right) (1 - \lambda/N)^N (1 - \lambda/N)^{-n} \\
&= \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda}
\end{aligned}
$$

である。

解答 2.— n および $pN = \lambda$ を定数とみなして $N \to \infty$ の極限を取る時、$P_N(n)$ の式中の $N!$, $(N-n)!$ に対して Stiring の公式を適用できる。この下では、

$$
\begin{aligned}
P_N(n) &\sim \frac{\sqrt{2\pi N}(N/e)^N}{n!\sqrt{2\pi(N-n)}((N-n)/e)^{N-n}} p^n (1-p)^{N-n} \\
&= \frac{1}{n!} e^n (Np)^n \left(\frac{1-p}{1-n/N} \right)^{N-n} (1 - n/N)^{-1/2} \\
&\sim \frac{1}{n!} e^n \lambda^n e^{-\lambda} e^{-n} \\
&= e^{-\lambda} \left(\frac{\lambda^n}{n!} \right)
\end{aligned}
$$

である。$N \to \infty$ では Stiring の公式に漸近するので、目的の極限が証明される。

注釈.— これは、Poisson 分布である。

(5) 任意の確率分布 P に従う (離散的な) 確率変数 X に対し、X が期待値から ϵ 以上ずれた値を取る確率に対する不等式

$$\mathrm{Prob}\Big(|X-\langle X\rangle|\geq\epsilon\Big)\leq\left(\frac{\sigma(X)}{\epsilon}\right)^2$$

を示せ。ただし、$\sigma(X)^2$ は X の分散である。

解答.—

$$\begin{aligned}(\sigma(X))^2 &= \sum_X (X-\langle X\rangle)^2 P(X)\\ &\geq \sum_{X;|X-\langle X\rangle|\geq\epsilon}(X-\langle X\rangle)^2P(X)\\ &\geq \sum_{X;|X-\langle X\rangle|\geq\epsilon}\epsilon^2 P(X)\\ &= \epsilon^2\mathrm{Prob}\Big(|X-\langle X\rangle|\geq\epsilon\Big)\end{aligned}$$

である。

注釈.— これは Chebyshev の不等式である。

II 調和振動子

(1) 古典一次元調和振動子系の Lagrangian

$$\mathcal{L}\left(\dot{q}(t),q(t)\right)=\frac{m}{2}(\dot{q}(t))^2-\frac{m\omega^2}{2}(q(t))^2$$

について、対応する Euler-Lagrange 方程式を書き下し、初期条件 $(\dot{q}(0),q(0))=(\dot{q}_0,q_0)$ を満たす解を求めよ。

解答.— Euler-Lagrange 方程式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}}\right)-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q}=0$$

これを計算すると、

$$m\ddot{q}(t)+m\omega^2q(t)=0$$

である。また、この 2 階の線形常微分方程式は $\cos\omega t, \sin\omega t$ を基本解とするので、一般解は

$$q(t)=A\cos\omega t+B\sin\omega t,\quad A,\,B \text{ は定数}$$

で与えられる。初期条件 $(\dot{q}(0),q(0))=(\dot{q}_0,q_0)$ を満たす時 $A=q_0$, $B=\dot{q}_0/\omega$ より、

$$q(t)=q_0\cos\omega t+\dot{q}_0/\omega\sin\omega t \tag{1}$$

である。

(2) (1) で考えた系について $q(t)$ に共役な運動量 $p(t)$ と系の Hamiltonian $H(p(t), q(t))$ を求め、Hamilton 方程式を書き下せ。

解答.— 共役な運動量 $p(t)$ は

$$p(t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}(t)} = m\dot{q}(t)$$

である。また、この時の古典調和振動子系における Hamiltonian は

$$H(p, q) = p\dot{q} - \mathcal{L} = \frac{1}{2m}(p(t))^2 + \frac{m\omega^2}{2}(q(t))^2$$

で与えられる。よって、Hamilton の運動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p} \\ -\frac{\partial H}{\partial q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(t)/m \\ -m\omega^2 q(t) \end{pmatrix}$$

で与えられる。

(3) Hamilton 方程式の解軌道 (例えば $(p(0), q(0)) = (0, q_0)$ を通るもの) を qp 空間上にプロットせよ。また、その解軌道における断熱不変量

$$I = \oint_{\text{軌道の一周期}} p\mathrm{d}q$$

を求め、エネルギー E との関係を示せ。

連立微分方程式から $p(t)$ を消去すると、

$$\begin{aligned} \ddot{q}(t) &= \dot{p}(t)/m \\ &= -\omega^2 q(t) \end{aligned}$$

より、(1) と同じ方程式に帰着される。初期条件 $(p(0), q(0)) = (0, q_0)$ の時は、

$$q(t) = q_0 \cos \omega t$$
$$p(t) = m\dot{q}(t) = -m\omega q_0 \sin \omega t$$

である。

解の軌道は

$$(q(t))^2 + \left(\frac{p(t)}{m\omega}\right)^2 = q_0^2$$

の楕円形を描く。これは qp 空間で時間 t に伴って時計回りに回転する。

また、この時の断熱不変量 I は

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{2\pi/\omega} p(t)\dot{q}(t)\mathrm{d}t \\ &= \int_0^{2\pi/\omega} m\omega^2 q_0^2 \sin^2 \omega t \\ &= \pi m\omega q_0^2 \end{aligned}$$

となる。全エネルギー $E = p(t)^2/(2m) + (m\omega^2/2)(q(t))^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 q_0^2$ より

$$E = \frac{I}{2\pi}\omega$$

である。

(4) (2) で求めた Hamiltonian に対して交換関係 $[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar$ を課すことで正準量子化を行う。($\hat{A}$ は A の演算子であることを指す。) このとき、

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right),\quad \hat{a}^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

で定義される消滅 (生成) 演算子 $\hat{a}$ ($\hat{a}^\dagger$) を用いて量子調和振動子系における Hamiltonian $\hat{H}$ を書き下せ。

解答.—

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger\hat{a} &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{q}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\left(\hat{q}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{q}^2+\frac{\hat{p}^2}{(m\omega)^2}+\frac{i}{m\omega}[\hat{q},\hat{p}]\right)\\ &= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2+\frac{1}{2m}\hat{p}^2\right)-\frac{1}{2}\end{aligned}$$

である。従って、量子調和振動子系における Hamiltonian $\hat{H}$ は、

$$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)$$

となる。

(5) 数演算子 $\hat{N}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有状態を $|n\rangle$ とおく。固有値 n が非負の整数であることを示せ。また、規格化因子 c_n を用いて $|n\rangle=c_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ で与えられることを示せ。

解答.— $\hat{N}|n\rangle=n|n\rangle$ に左から $\langle n|$ を作用させると、$|n\rangle\neq 0$ ならば

$$n=\frac{\langle n|\hat{N}|n\rangle}{\langle n|n\rangle}=\frac{\|\hat{a}|n\rangle\|^2}{\||n\rangle\|^2}\geq 0$$

が得られる。よって、$\hat{N}$ の固有値 n は非負である。

また、交換子 $[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1$ より、$[\hat{a},\hat{N}]=[\hat{a},\hat{a}^\dagger]\hat{a}=\hat{a}$ である。これを利用すると、

$$\hat{N}(\hat{a}|n\rangle)=(\hat{a}\hat{N}-\hat{a})|n\rangle=(n-1)\hat{a}|n\rangle$$

より、$\hat{a}|n\rangle=0$ (すなわち、$n=0$) でない限り $\hat{N}$ は $n-1$ も固有値にもつ。仮に、固有値 n が整数でないとすると、この操作を繰り返して $n-1,n-2,\dots$ と無限に小さい値も $\hat{N}$ の固有値となる。これは、$\hat{N}$ の固有値の非負であることに反する。故に、$\hat{N}$ の固有値は非負の整数である。

また、$[\hat{N},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger$ より、

$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger|n\rangle)=(\hat{a}^\dagger\hat{N}+\hat{a}^\dagger)|n\rangle=(n+1)\hat{a}|n\rangle$$

より、固有状態 $|n\rangle$ が与えられた時、$\hat{a}$ を作用させることで固有値 $n+1$ の固有状態を構成できる。真空状態 $|0\rangle$ に n 回作用させれば、固有値 n を持つ状態となる。$|n\rangle$ とは規格化因子の分だけ異なる可能性があるので、

$$|n\rangle=c_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$$

と書ける。

(6) Hamiltonian $\hat{H}$ の固有値 (エネルギー固有値) を書き下し、(3) において $I = nh$ とした時の式と比べよ。また、この差により生じる物理現象を 1 つ以上挙げ、簡単に説明せよ。

解答.—

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle$$

より、$\hat{H}$ は固有値 $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ を持つ。

古典の結果、$E = \frac{I}{2\pi}\omega$ において $I = nh$ とすると $E = n\hbar\omega$ となり、量子の場合と $\hbar\omega/2$ だけ異なる (ゼロ点振動)。この効果は、カシミール効果, ヘリウムの絶対零度, 常圧化での液化など。