統計力学演習 第１回(2004/04/13) 解答

最終更新：2005/07/21(Thu)

田中 宗*

解答 1 (Gauss 積分)

(a)

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}dx=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}dy$$

とおくと，

$$I^2=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\,e^{-\left(x^2+y^2\right)}$$

となる．ここで $x=r\cos\theta$,$y=r\sin\theta$ とおけば，$\frac{\partial(x,y)}{\partial(r,\theta)}=r$ より，

$$I^2=\int_0^{2\pi}d\theta\int_0^{\infty}dr\,re^{-r^2}=\pi$$

ゆえに，$I=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}dx=\sqrt{\pi}$ となる．

証明終

以降の問題では $a>0$,$\alpha<0$ とする (このとき以外は発散).

(b) 前問の結果，すなわち

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-t^2}dt=\sqrt{\pi}$$

において，$t=\sqrt{a}x$ と変換すれば，

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

となる．

(c)

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{\alpha x^2+\beta x}dx=e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\alpha\left(x+\frac{\beta}{2\alpha}\right)^2}dx$$

である．ここで，$y=x+\frac{\beta}{2\alpha}$ と変換すると，

$$=e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha y^2}dy=e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}\sqrt{-\frac{\pi}{\alpha}}$$

となる．

(d) 被積分関数が奇関数だから，

$$\int_{-\infty}^{\infty}x^{2n-1}e^{-ax^2}dx=0$$

一方，

$$\int_{-\infty}^{\infty}x^{2n}e^{-ax^2}dx=(-1)^n\frac{d^n}{da^n}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2}dx$$

また，

$$\frac{d^n}{da^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}=(-1)^n\frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}}$$

であるから，

$$\int_{-\infty}^{\infty}x^{2n}e^{-ax^2}dx=\frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}}$$

である．

*居室：理学部１号館 938 号室　　shu-t@spin.phys.s.u-tokyo.ac.jp
統計力学演習の問題は次の WEB ページに掲載します。
http://spin.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ ~shu-t/enshu/enshu.html

comment

ここで練習した計算は物理学の様々な場面で出てくるので，できなかった人は解答を見て復習してください．(d) のような問題は漸化式を立てて解いても良いですが，ぜひ解答のような方法も習得してください．

解答 2 (Γ 関数)

(a) 部分積分により簡単に示せる．

$$\Gamma(z+1)=\int_0^\infty e^{-t}t^z dt=-\left[t^z e^{-t}\right]_0^\infty+z\int_0^\infty e^{-t}t^{z-1}=0+z\Gamma(z)$$

証明終

(b)

$$\Gamma(n+1)=n\Gamma(n)=n(n-1)\Gamma(n-1)=\cdots=n!\Gamma(1)=n!$$

である．ただし，

$$\Gamma(1)=\int_0^\infty e^{-t}dt=1$$

を利用した．

証明終

(c) $t=x^{\frac{1}{z}}$ なる変数変換を行うと，

$$\Gamma(z)=\int_0^\infty \frac{1}{z}e^{-x^{\frac{1}{z}}}dx$$

となる．ここで $z=\frac{1}{2}$ とおけば，

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=2\int_0^\infty e^{-x^2}dx=\pi$$

となる．また，$\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$ より，

$$\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)=\frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi}$$

である．

(d) 半径 R の n 次元球の体積 $V_n(R)$ は，長さの n 乗の次元を持つから，

$$V_n(R)=a_nR^n \tag{A-1}$$

とおく．一方で，

$$I=\int_{-\infty}^\infty\cdots\int_{-\infty}^\infty e^{-\left(x_1^2+\cdots x_n^2\right)}dx_1\cdots dx_n=\pi^{\frac{n}{2}}$$

である．ここで，$r^2=\sum_{i=1}^n$ とおく．$r\sim r+dr$ の球殻の体積は，式 (A-1) より，$na_nr^{n-1}dr$ であるから，

$$\begin{aligned}I &= na_n\int_0^\infty e^{-r^2}r^{n-1}dr\\ &= \frac{1}{2}na_n\int_0^\infty t^{\frac{n}{2}-1}e^{-t}dt\\ &= \frac{1}{2}na_n\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)=\pi^{\frac{n}{2}}\end{aligned}$$

ゆえに，$a_n=\frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{n\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}$ であるから，

$$V_n(R)=\frac{2\pi^{\frac{n}{2}}}{n\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}R^n$$

である．

(別解) 正統的な方法

半径 R の n 次元球の体積 $V_n(R)$ は,

$$V_n(R) = \int \cdots \int_{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \leq R^2} dx_1 \cdots dx_n$$

ここで,

$$\begin{cases} x_1 = r\cos\theta_1 \\ x_2 = r\sin\theta_1\cos\theta_2 \\ \qquad\vdots \\ x_{n-1} = r\sin\theta_1\sin\theta_2\cdots\sin\theta_{n-2}\cos\theta_{n-1} \\ x_n = r\sin\theta_1\sin\theta_2\cdots\sin\theta_{n-2}\sin\theta_{n-1} \end{cases}$$

と変換すれば,

$$\begin{aligned}
&= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\cdots\int_0^{\pi}\int_0^{R} r^{n-1}\sin^{n-2}\theta_1\cdots\sin\theta_{n-1}drd\theta_1\cdots d\theta_{n-1} \\
&= \frac{2\pi\cdot 2^{n-2}\cdot R^n}{n}\prod_{m=1}^{n-2}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin^m\theta d\theta \\
&= \frac{2\pi\cdot 2^{n-2}\cdot R^n}{n}\frac{\Gamma(1)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{4}{2}\right)}\cdot\cdots\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \qquad \text{(A-2)} \\
&= \frac{2\pi R^n\pi^{\frac{n-2}{2}}}{n\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \\
&= \frac{\pi^{\frac{n}{2}}R^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)}
\end{aligned}$$

となる．ただし，式 (A-2) は，以下による．

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin^n\theta d\theta = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{2\cdot\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)}$$

である．これの証明については，解析のテキストを参照のこと．

comment

ガンマ関数に関する問です．解析のテキストを参照すればできると思います．ガンマ関数とベータ関数は色々な関係式があります．時間があればウェブページに掲載します．

解答 3 (スターリングの公式)

(a) 示すべき等式の左辺は，$\log(N!) = \sum_{n=1}^{N}\log n$ である．また，次の不等式が成立する．

$$\int_1^N \log x dx < \sum_{n=1}^{N}\log n < \int_1^N \log x dx + \log N$$

ここで，$\int_1^N \log x dx = N(\log N - 1) + 1$ であるから，等式が成立する．

証明終

(b)

$$\frac{df(t)}{dt} = t^{N-1}e^{-t}(N-t)$$

であり，かつ $f(t)$ は上に凸であるから，極大値は $t = N$ のとき $N^N e^{-N}$ である．

(c) $t^N e^{-t} = N^N e^{-N} e^{-\frac{Nx^2}{2}}$ の左辺の t を $t = n(1+z)$ で置き換えて変形すると，

$$(1+z)\,e^{-z} = e^{-\frac{x^2}{2}} \tag{A-3}$$

となる．両辺を x で微分すると，

$$ze^{-z}\frac{dz}{dx} = xe^{-\frac{x^2}{2}} \tag{A-4}$$

$$z\frac{dz}{dx} = x(1+z) \tag{A-5}$$

である．式 (A-4) から式 (A-5) への変形には式 (A-3) を用いた．

証明終

(d) 式 (Q-4) で $t = 0$ とおけば，$x = n$ であり，すなわち $z = 0$ だから，式 (Q-7) より $C_0 = 0$ である．これを踏まえて式 (A-5) に式 (Q-7) を代入すると，

$$\left(\sum_{k=1} \frac{C_k}{k!} x^k\right)\left(\sum_{l=1} \frac{C_l}{(l-1)!} x^{l-1}\right) = t\left(1 + \sum_{m=1} \frac{C_m}{m!} x^m\right)$$

である．この式の両辺の x の同じ巾の係数を比較して計算すると，

$$C_1 = 1, \quad C_2 = \frac{2}{3}, \quad C_3 = \frac{1}{6}, \quad C_4 = -\frac{4}{45}, \quad C_5 = \frac{1}{36}, \quad \cdots$$

となる．先の置き換えとこの結果より，

$$\begin{aligned}
\Gamma(N+1) &= N^{N+1}e^{-N}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{nx^2}{2}}\frac{dz}{dx}dx \\
&= N^{N+1}e^{-N}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{nx^2}{2}}\left(\sum_{k=1}\frac{C_k}{(k-1)!}x^k dx\right) \\
&= N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}\left(C_1 + \frac{1}{2}\frac{2}{N}\frac{C_3}{2!} + \frac{1\cdot 3}{2^2}\left(\frac{2}{N}\right)^2\frac{C_5}{4!} + \cdots\right) \\
&= N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}\left(1 + \frac{1}{12}\frac{1}{N} + \frac{1}{288}\frac{1}{N^2}\right)
\end{aligned}$$

となる．この対数を取ると，

$$\log\Gamma(N+1) = \log N! = N\log N - N + \frac{1}{2}\log(2\pi N) + \log\left(1 + \frac{1}{12N} + \frac{1}{288N^2}\right)$$

となる．式 (Q-2) の精密化がはかれた．

comment

スターリングの公式はミクロカノニカル分布の計算などでよく使われます．尚，ここで出て来た手法 (b)〜(d) は鞍点法という方法を使っています．鞍点法について良く分からない人は４月 27 日に出題した問題２を参照してください．
また，この問題は寺沢寛一著「自然科学者のための数学概論」を参考にしました．

解答 4 (種々の確率分布)

(a)

$$E(\epsilon) = 0\cdot(1-p) + 1\cdot p = p$$

である．また，

$$E(\epsilon^2) = 0^2\cdot(1-p) + 1^2\cdot(1-p) = p$$

より，

$$V(\epsilon) = E(\epsilon^2) - [E(\epsilon)]^2 = p - p^2 = p(1-p)$$

である．

(b)

$$\begin{aligned} E(X) &= \sum_{x=0}^{n} x_n C_x p^x (1-p)^{n-x} \\ &= n \sum_{x=1}^{n} {}_{n-1}C_{x-1} p^x (1-p)^{n-x} \\ &= n \cdot p \sum_{y=0}^{n-1} {}_{n-1}C_y p^y (1-p)^{n-1-y} = np \end{aligned}$$

である．また，

$$\begin{aligned} E\left(X^2\right) &= x^2{}_n C_x p^x (1-p)^{n-x} \\ &= np + n(n-1)p^2 \end{aligned}$$

より，

$$V(X) = np(1-p)$$

である．

(別解)

ここでの試行は (a) で扱ったベルヌーイ試行を n 回独立で行うものだから，(a) の答えを n 倍すれば良い．

(c)

$$f(x|p) = p^x (1-p)^{n-x} \frac{n!}{x!(n-x)!}$$

である．いま，$n \gg 1$ より，スターリングの公式を用いて，

$$\begin{aligned} \log f(x|p) &= x \log p + (n-x)\log(1-p) + \log n! - \log x! - \log(n-x)! \\ &\simeq x \log p + (n-x)\log(1-p) + n\log n - x\log x - (n-x)\log(n-x) \\ &= -n\left[\left(\frac{x}{n} - 1\right)\log(1-p) - \frac{x}{n}\log p + \frac{n-x}{n}\log\frac{n-x}{n} + \frac{x}{n}\log\frac{x}{n}\right] \end{aligned}$$

となる．ここで，$\frac{x}{n}$ は先に求めた p に漸近すると考えられるから，$z = \frac{x}{n} - p$ とし，$z \ll 1$ として $z = 0$ のまわりで z の 2 次までテーラー展開すると，

$$\log f(x|p) \simeq \frac{-n}{2}\left(\frac{1}{1-p} + \frac{1}{p}\right) z^2$$

となるから，$n \gg 1$ のとき確率分布は

$$f(x|p) \simeq \exp\left(\frac{-n}{2}\left(\frac{1}{1-p} + \frac{1}{p}\right) z^2\right)$$

と正規分布になることが示せた．ただし規格化因子は，

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{n}{2}\left(\frac{1}{1-p} + \frac{1}{p}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

である．

証明終

また平均値は，

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{n}{2}\left(\frac{1}{1-p}+\frac{1}{p}\right)\right]^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty} z\exp\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{1-p}+\frac{1}{p}\right)z^2\right)=0$$

より，$E(X)=np$，分散は

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{n}{2}\left(\frac{1}{1-p}+\frac{1}{p}\right)\right]^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty} z^2\exp\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{1-p}+\frac{1}{p}\right)z^2\right)=\frac{1}{2}\left[\frac{n}{2}\left(\frac{1}{1-p}+\frac{1}{p}\right)\right]^{-1}$$

より，

$$\begin{aligned}
V(X) &= E\left(X^2\right)-E(X)^2=\langle x^2\rangle-n^2p^2 \\
&= \langle n^2(z+p)^2\rangle-n^2p^2 \\
&= n^2\langle z^2\rangle \\
&= n^2\cdot\frac{1}{2}\left[\frac{n}{2}\left(\frac{1}{1-p}+\frac{1}{p}\right)\right]^{-1} \\
&= np(1-p)
\end{aligned}$$

comment

確率分布の問です．(b) については別解の方針を取った人は上の解き方でもできることを試してください．また，(c) は p が極端に小さいときはポアソン分布になるという事実があります．５月 11 日出題分の問題で確かめてください．

解答 5 (エントロピー)

(a) 求める場合の数は，N 個の箱に M 個の球を詰める場合の数と同じであるから，

$$W_N(M)={}_{M+N-1}C_{N-1}$$

である．一般にこの場合の数を**縮退度**と呼ぶ．

(b) $\Sigma(E_A,E_B)=\log W_{N_A}(M_A)+\log W_{N_B}(M_B)$ で，A に関する式と B に関する式は対称だから，まず A についての式について考える．

$$\begin{aligned}
\log W_{N_A}(M_A) &= \log{}_{M_A+N_A-1}C_{N_A-1}=\log\frac{(M_A+N_A-1)!}{(N_A-1)!M_A!} \\
&\simeq (N_A+M_A)\log(N_A+M_A)-N_A\log N_A-M_A\log M_A \\
&= N_A\left[\left(1+\frac{M_A}{N_A}\right)\log\left(1+\frac{M_A}{N_A}\right)-\frac{M_A}{N_A}\log\frac{M_A}{N_A}\right]
\end{aligned}$$

これを B についても考え，E_A,E_B,N_A,N_B で表すと，

$$\begin{aligned}
\Sigma(E_A,E_B) &= N_A\left[\left(1+\frac{E_A}{N_A\hbar\omega}\right)\log\left(1+\frac{E_A}{N_A\hbar\omega}\right)-\frac{E_A}{N_A\hbar\omega}\log\frac{E_A}{N_A\hbar\omega}\right] \\
&+ N_B\left[\left(1+\frac{E_B}{N_B\hbar\omega}\right)\log\left(1+\frac{E_B}{N_B\hbar\omega}\right)-\frac{E_B}{N_B\hbar\omega}\log\frac{E_B}{N_B\hbar\omega}\right] \quad \text{(A-6)}
\end{aligned}$$

となる．

(c) エネルギー E_A,E_B は離散的に変化するが，$\hbar\omega$ は $N_A,N_B\gg 1$ なるスケールで考えれば非常に小さいので，連続変数と見なして差し支えない．そのため，確率が最大になるような場合は，先で求めた $\Sigma(E_A,E_B)$ の $E_A+E_B=E$(一定) のもと，E_A での微分が 0 になる点を考

えればよい．

式 (A-6) を E_A で微分して 0 になる点は，

$$\left[\log\left(1+\frac{E_A}{N_A\hbar\omega}-\log\frac{E_A}{N_A\hbar\omega}\right)\right]-\left[\log\left(1+\frac{E_B}{N_B\hbar\omega}-\log\frac{E_B}{N_B\hbar\omega}\right)\right]=0$$

より，

$$\frac{E_A}{N_A}=\frac{E_B}{N_B}=\frac{E}{N}$$

である．すなわち，１原子あたりの平均エネルギーが等しいとき，確率が最大になる．

(d) 式 (A-6) で $E_A=E_A^*+\epsilon$，$E_B=E_B^*-\epsilon$ とおいて，$\epsilon=0$ で展開する．その際に，

$$(x+\epsilon)\log(x+\epsilon)\simeq x\log x+(\log x+1)\,\epsilon+\frac{1}{2!}\frac{1}{x}\epsilon^2$$

を利用する．

$$\begin{aligned}\Sigma\left(E_A,E_B\right) &= N_A\left[\left(1+\frac{E_A^*+\epsilon}{N_A\hbar\omega}\right)\log\left(1+\frac{E_A^*+\epsilon}{N_A\hbar\omega}\right)-\frac{E_A^*+\epsilon}{N_A\hbar\omega}\log\frac{E_A^*+\epsilon}{N_A\hbar\omega}\right]\\ &+ N_B\left[\left(1+\frac{E_B^*-\epsilon}{N_B\hbar\omega}\right)\log\left(1+\frac{E_B^*-\epsilon}{N_B\hbar\omega}\right)-\frac{E_B^*-\epsilon}{N_B\hbar\omega}\log\frac{E_B^*-\epsilon}{N_B\hbar\omega}\right]\\ &\simeq \Sigma^*-\frac{N^2}{2\left(N\hbar\omega+E\right)E}\left(\frac{1}{N_A}+\frac{1}{N_B}\right)\epsilon^2+\cdots\end{aligned}$$

またこの式から，エネルギー配分 (E_A,E_B) を実現する確率 $P(E_A,E_B)$ は，最大値の近くで，

$$P\left(E_A,E_B\right)\propto\exp\left[-\frac{N^2}{2\left(N\hbar\omega+E\right)E}\left(\frac{1}{N_A}+\frac{1}{N_B}\right)\epsilon^2\right]$$

で振る舞うことが分かる．いま，$P\left(E_A,E_B\right)$ の最大値近傍を考えているから，$N_A\simeq N_B$，また $E\simeq N\hbar\omega$ であるから，ゆらぎの程度は $|\epsilon|\sim\frac{E}{\sqrt{N}}$ 程度と見積もられる．

(e) 等重率の原理とは，孤立したマクロな物体では充分に長い時間で見ると，実現可能な量子状態は全て等しい確率で実現することを仮定したものである．

(f)

$$S\left(E_A,E_B\right)=k_{\mathrm{B}}\log W\left(E_A,E_B\right)=S_A\left(E_A\right)+S_B\left(E_B\right)$$

であるから，両辺 E_A で微分して，

$$\frac{dS\left(E_A,E_B\right)}{dE_A}=\frac{dS_A\left(E_A\right)}{E_A}-\frac{dS_B\left(E_B\right)}{dE_B}=0$$

故に，

$$\frac{dS_A\left(E_A\right)}{dE_A}=\frac{dS_B\left(E_B\right)}{dE_B}$$

が求める関係式である．

(g)

$$S\left(E_A,E_B\right)=S\left(E_A^*,E_B^*\right)+\frac{1}{2}\left[\left(\frac{d^2S_A}{dE_A^2}\right)+\left(\frac{d^2S_B}{dE_B^2}\right)\right]\epsilon^2+\cdots$$

より，(E_A^*,E_B^*) でエントロピーが最大となるべしという条件から，

$$\frac{d^2S}{dE^2}<0$$

が示せた．

(h) 熱平衡状態を

$$\frac{dS_A}{dE_A} = \frac{dS_B}{dE_B}$$

で表すことができるので，温度 T と $\frac{dS}{dE}$ にはなんらかの関係式で結ぶことが可能である (経験則)．これによって，$f(T)$ を T の或る関数として，$\frac{dS}{dE} = f(T)$ と結べることになる．理想気体の場合，取り得る状態数からエントロピーを算出し，$f(T) = \frac{1}{T}$ とすることで，理想気体のエネルギー表式が得られ (詳しい計算は 5 月 11 日出題の問題で行ってください)，熱力学との整合性が得られる．

comment

エントロピーの問題．この議論の方法は長岡洋介著「統計力学」(岩波書店) によりました．計算が繁雑に見えるかも知れませんが，統計力学の基本中の基本なので確実に抑えてください．また，(h) については 5 月 11 日出題の問題で自分の手で確かめてください．