2024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; 5/13 13:00 (前半クラス), 5/7 13:00 (後半クラス)

I 確率論

確率 $1-p,\, p$ で $0, 1$ を取る N 個の独立な確率変数 $X_1, X_2, \ldots, X_N$ に対して、その平均

$$\bar{X}_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i \tag{1}$$

を考える。

(1) $n = 0, 1, \ldots, N$ に対して、確率変数 $\bar{X}_N$ が n/N を取る確率 $\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N]$ を求めよ。

解答例.—

N 回中 n 回だけ 1 が出る確率に等しいので、

$$\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] = \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \tag{2}$$

である。 □

(2) 確率変数 X の期待値 $\langle X \rangle$ を $\langle X \rangle = \sum_x x \mathrm{Prob}[X = x]$ によって定める。このとき、確率変数 $\bar{X}_N$ について期待値 $\mu = \langle \bar{X}_N \rangle$ と分散 $\sigma^2 = \langle (\bar{X}_N - \mu)^2 \rangle$ を計算せよ。

解答例.— 期待値は、

$$\begin{aligned}
\mu &= \sum_{n=0}^{N} \frac{n}{N} \mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] \\
&= \sum_{n=1}^{N} \frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \\
&= p \sum_{n=1}^{N} \frac{(N-1)!}{(n-1)!(N-n)!} p^{n-1} (1-p)^{N-n} \\
&= p
\end{aligned}$$

である。一方で分散は $\sigma^2 = \langle(\bar{X}_N - \mu)^2\rangle = \langle\bar{X}_N^2\rangle - \mu^2$ であるが、

$$\begin{aligned}
\langle\bar{X}_N^2\rangle &= \sum_{n=0}^{N} \frac{n^2}{N^2}\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] \\
&= \frac{1}{N^2}\sum_{n=0}^{N} n(n-1)\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] + \frac{1}{N^2}\sum_{n=0}^{N} n\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] \\
&= \frac{1}{N^2}N(N-1)p^2 + \frac{1}{N^2}Np \\
&= \frac{(N-1)p^2 + p}{N}
\end{aligned}$$

より、

$$\sigma^2 = \frac{(N-1)p^2 + p}{N} - p^2 = \frac{p(1-p)}{N}$$

となる。試行回数 N が増大するほど、分散は小さくなっていく。 □

(3) ε を正の定数とする。任意の離散確率変数 X に対して、

$$\mathrm{Prob}\Big[|X - \langle X\rangle\,| \geq \epsilon\Big] \leq \left(\frac{\sigma(X)}{\epsilon}\right)^2 \qquad \text{(Chebyshev の不等式)} \tag{3}$$

が成立することを示せ (ただし $\sigma(X)^2$ は X の分散である)。また、この結果を確率変数 $\bar{X}_N$ に適用することで任意の $\varepsilon > 0$ に対し

$$\lim_{N\to\infty} \mathrm{Prob}\Big[|\bar{X}_N - \mu| \geq \epsilon\Big] = 0 \qquad \text{(大数の弱法則)} \tag{4}$$

を示せ。

解答例.—

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

より Chebyshev の不等式が示される。また、これを確率変数 $\bar{X}_N$ に適用すると、

$$0 \leq \mathrm{Prob}\Big[|\bar{X}_N - \mu| \geq \epsilon\Big] \leq \left(\frac{p(1-p)}{N\epsilon}\right)^2 \to 0$$

であるので大数の弱法則が示される。 □

(4) 確率変数 $\bar{X}_N$ を期待値 0, 分散 1 となるように、$x = (\bar{X}_n - \mu)/\sigma$ で規格化された確率変数 x を定める。このとき、$\Delta x \ll 1$ に対して 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

$$p(x)\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \Delta x \tag{5}$$

となることを示せ。ただし、簡単のため $p = 1/2$ の場合に限定して良い。また、十分大きな自然数 n に対して成立する Stiring の公式

$$n! \sim \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n, \quad \log n! = n \log n - n + o(n) \tag{6}$$

を用いて良い。

解答例.— $p = 1/2$ のとき、

$$\bar{X}_n = \mu + x\sigma = \frac{1}{2} + \frac{x}{2\sqrt{N}}$$

である。

$$\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}(1 + x/\sqrt{N})\right)! \left(\frac{N}{2}(1 - x/\sqrt{N})\right)!} 2^{-N}$$

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、

$$\begin{aligned}
\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] &\sim \frac{\sqrt{2\pi N}(N/e)^N}{\pi N \sqrt{1 - x^2/N}(N/e)^N (1 + x/\sqrt{N})^{N(1+x/\sqrt{N})/2} (1 - x/\sqrt{N})^{N(1-x/\sqrt{N})/2}} \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi N}} (1 - x^2/N)^{-(N+1)/2} \left(\frac{1 - x/\sqrt{N}}{1 + x/\sqrt{N}}\right)^{x\sqrt{N}/2} \\
&\sim \sqrt{\frac{2}{\pi N}} e^{-x^2/2}
\end{aligned}$$

である。微小幅 Δx に対応する幅 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、

$$\begin{aligned}
p(x)\Delta x &= \mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N]\Delta n \\
&\sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \Delta x
\end{aligned}$$

である。 □

II　調和振動子

(1) 古典一次元調和振動子系の Hamiltonian

$$H(q,p) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \tag{7}$$

に対して Hamilton 方程式を書き下し、初期条件 $(q,p) = (q(0), p(0))$ を満たす解を求めよ。

解答例.— 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。$p(t)$ を消去すれば $\ddot{q} = -\omega^2 q$ が得られる。この微分方程式の基本解は $\sin\omega t, \cos\omega t$ であるが、初期条件 $q = q(0)$, $\dot{q} = p(0)/m$ より

$$q(t) = q(0)\cos\omega t + \frac{p(0)}{m\omega}\sin\omega t$$

である。これより直ちに

$$p(t) = p(0)\cos\omega t - m\omega q(0)\sin\omega t$$

も得られる。　□

(2) $\hat{q}, \hat{p}$ を正準交換関係 $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ を満たす位置演算子, 運動量演算子とする。このとき、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \tag{8}$$

で与えられる量子一次元調和振動子系の Hamiltonian を、

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right), \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{q} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \tag{9}$$

で定義される消滅 (生成) 演算子 $\hat{a}$ $(\hat{a}^\dagger)$ を用いて書き下せ。

解答例.—

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

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。　□

(3) 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し、Hamiltonian $\hat{H}$ の固有値を求めよ。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 $n-1, n-2, \ldots$ 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。このことから Hamiltonian $\hat{H}$ の固有値 E_n は

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

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。 □