# 2025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; 5/12 13:00 (前半クラス), 5/8 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。 □

**解答例 2.**—

$$\begin{aligned}
\langle \bar{X}_N \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle X_i \rangle \\
&= \frac{1}{N} Np = p. \quad \square
\end{aligned}$$

また、

$$\begin{aligned}
\langle (\bar{X}_N)^2 \rangle &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \langle X_i X_j \rangle \\
&= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^{N} \langle (X_i)^2 \rangle + \frac{1}{N^2} \sum_{i,j:i\neq j} \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle \\
&= \frac{1}{N^2} Np + \frac{1}{N^2} N(N-1)p^2
\end{aligned}$$

であるので (ただし 2 行目で独立性を用いた)、

$$\sigma^2 = \langle (\bar{X}_N)^2 \rangle - \langle \bar{X}_N \rangle^2 = \frac{p(1-p)}{N}. \quad \square$$

(3) $n, N-n, N$ はいずれも十分大きな自然数であるとする。このとき Stirling の公式 $n! \sim \sqrt{2\pi n}(n/e)^n$ を用いて、確率 $\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N]$ が

$$\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] \sim \sqrt{\frac{N}{2\pi n(N-n)}} e^{-ND(n/N)} \tag{3}$$

の形に書けることを示し、関数 $D(x)$ を求めよ。

**解答例.**—

$$\begin{aligned}
\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] &= \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \\
&= \exp\left(\log N! - \log n! - \log(N-n)! + n \log p + (N-n)\log(1-p)\right) \\
&\sim \exp\Bigg(N \log N - n \log n - (N-n)\log(N-n) \\
&\qquad + \log\left(\sqrt{\frac{N}{2\pi n(N-n)}}\right) + n \log p + (N-n)\log(1-p)\Bigg) \\
&= \sqrt{\frac{N}{2\pi n(N-n)}} \exp\left(-n \log \frac{n}{Np} - (N-n) \log \frac{N-n}{N(1-p)}\right)
\end{aligned}$$

従って、

$$D(x) = x\log\frac{x}{p} + (1-x)\log\frac{1-x}{1-p}$$

とおくと、

$$\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] \sim \sqrt{\frac{N}{2\pi n(N-n)}}e^{-ND(n/N)}$$

の形に表される。 □

(4) 前問の状況で $\bar{X}_N$ が区間 $[x, x+\Delta x]$ に含まれる確率

$$p(x)\Delta x = \sum_{n=Nx}^{N(x+\Delta x)} \mathrm{Prob}[\bar{X}_N = n/N] \tag{4}$$

を考える。区間幅 $\Delta x$ が十分小さく $x$ が $p$ に十分近いとき、確率密度関数 $p(x)$ が平均 $\mu$, 分散 $\sigma^2$ の正規分布で近似されることを示せ。

**解答例.**— $\Delta x$ が十分小さいとき

$$p(x)\Delta x = \mathrm{Prob}[\bar{X}_N = x]N\Delta x + \mathcal{O}\big((\Delta x)^2\big)$$

である。(3) の結果

$$\mathrm{Prob}[\bar{X}_N = x] \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi Nx(1-x)}}e^{-ND(x)}$$

において、係数部分と $D(x)$ のそれぞれを微小量 $x-p$ に関して最低次まで展開すると

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi Nx(1-x)}} \quad \sim \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi Np(1-p)}}.$$

一方で、

$$D'(x) = \log\frac{x(1-p)}{(1-x)p}, \quad D''(x) = \frac{1}{x(1-x)}$$

より $D(p) = D'(p) = 0$ であるので

$$D(x) \sim \frac{1}{2}D''(p)(x-p)^2 = \frac{(x-p)^2}{2p(1-p)}$$

以上から、

$$p(x) \quad \sim \quad \sqrt{\frac{N}{2\pi p(1-p)}}e^{-\frac{N(x-p)^2}{2p(1-p)}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

である。 □

(5) $\varepsilon$ を正の定数とする。任意の離散確率変数 $X$ に対して、

$$\mathrm{Prob}\Big[|X - \langle X\rangle| \geq \epsilon\Big] \leq \left(\frac{\sigma(X)}{\epsilon}\right)^2 \qquad \text{(Chebyshev の不等式)} \tag{5}$$

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

$$\lim_{N\to\infty} \mathrm{Prob}\Big[|\bar{X}_N - \mu| \geq \epsilon\Big] = 0 \qquad \text{(大数の弱法則)} \tag{6}$$

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、

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

であるので大数の弱法則が示される。 □

**注釈 (収束の速さ).**— (4) で得た正規分布に基づいて、平均値 $\bar{X}_N$ が期待値から分散の $m$ 倍以上ずれる確率を求めると

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Prob}[|x-\mu| \geq m\sigma] &= \left(\int_{\mu+m\sigma}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\mu-m\sigma}\right) \mathrm{d}x p(x) \\
&= 2\int_{m\sigma}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \\
&= 2\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x+m\sigma)^2}{2\sigma^2}} \\
&\leq 2\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2+m^2\sigma^2}{2\sigma^2}} \\
&= e^{-m^2/2}.
\end{aligned}
$$

よって、期待値から $m\sigma$ だけずれる確率は指数的に小さいことが分かる。一方で、(5) で得た大数の法則に基づいて同じ確率を評価すると

$$
\mathrm{Prob}[|x-\mu| \geq m\sigma] \leq \frac{1}{m^2} \tag{7}
$$

であり、$m$ について多項式的に減少する。これは正規分布によって得られるものより幾分ゆるい上限であることがわかる。なお、普通統計力学で現れるのは前者で、期待値からずれた状態に観測される確率は指数的に小さい。

## II　量子力学的自由粒子

3 次元空間中の質量 $m$ の自由粒子に対する Schrödinger 方程式を考え、その固有値方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

を考える。

(1) 一辺の長さ $L$ の立方体に閉じ込められているとして固定端境界条件 (箱の壁面上で $\psi(x,y,z)=0$) を課す。このとき変数分離を行いエネルギー固有値 $E$ を求めよ。

**解答例.**— $\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$ と置いて固有値方程式に代入すると、

$$\begin{aligned} EX(x)Y(y)Z(z) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(X''(x)Y(y)Z(z)+X(x)Y''(y)Z(z)+X(x)Y(y)Z''(z)\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}X(x)Y(y)Z(z)\left(\frac{X''(x)}{X(x)}+\frac{Y''(y)}{Y(y)}+\frac{Z''(z)}{Z(z)}\right) \end{aligned}$$

となる。よって、関数 $\frac{X''(x)}{X(x)},\frac{Y''(y)}{Y(y)},\frac{Z''(z)}{Z(z)}$ はそれぞれ $x,y,z$ に依存せず

$$\frac{X''(x)}{X(x)}=-k_x^2,\quad \frac{Y''(y)}{Y(y)}=-k_y^2,\quad \frac{Z''(z)}{Z(z)}=-k_z^2 \tag{8}$$

と書ける ($k_x,k_y,k_z\in\mathbb{C}$)。$X(x)$ についてこの微分方程式の一般解は $X(x)=A_x\cos(k_xx)+B_x\sin(k_xx)$ であり固定端境界条件 $X(0)=X(L)=0$ により $A_x=0$,

$$k_x=\frac{\pi}{L}n_x,\quad n_x\in\mathbb{N}$$

である。$Y(y),Z(z)$ についても同様なのでエネルギー固有値は

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2),\quad n_x,n_y,n_z\in\mathbb{N} \tag{9}$$

である。　□

(2) 体積 $L^3$ は十分大きいとして、エネルギー $\varepsilon$ 以下の固有値 $E$ を持つ固有状態の個数を求めよ。

**解答例.**— $E\le\varepsilon$ にある固有状態の個数は

$$n_x^2+n_y^2+n_z^2\le\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}\varepsilon \tag{10}$$

を満たす格子点 $(n_x,n_y,n_z)\in\mathbb{N}^3$ の個数に等しい。$\varepsilon$ が十分に大きいとき、これは半径 $\sqrt{\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}\varepsilon}$ の球の体積の 1/8 に相当するので

$$\frac{1}{8}\cdot\frac{4}{3}\pi\left(\sqrt{\frac{2mL^2}{\pi^2\hbar^2}\varepsilon}\right)^3=\frac{\sqrt{2}m^{3/2}L^3}{3\pi^2\hbar^3}\varepsilon^{3/2} \tag{11}$$

である。　□