

講義資料

http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/D2MatE_programs.html?page=statistics

統計力学 (C)

元素戦略MDX研究センター 神谷利夫

フロンティア材料研究所 伊澤誠一郎

課題 2025/10/7

課題1：統計分布関数はなぜエネルギーに関して
指数関数の形になっているのか、
数行以内で説明せよ

課題2：質問があれば書いてください

提出方法：LMS

ファイルは、一般的に読める形式であればよい。
(JPEGなどの画像ファイルも可)

提出期限: 10月8日(水) 23:59:59

統計力学

微視理論から多粒子のマクロ状態を統計的に説明する

1. 自由エネルギー U, H, F, G を
微視変数で表現する
物性を計算できる
2. 自由エネルギー U, H, F, G を
巨視変数 T, P, V, S で表現する
熱力学と対応させられる

時間平均を取ることの問題

測定値: 全ての粒子の運動 $r(t)$ の時間平均

$r(t)$ を求めるために: 全ての粒子に関する運動方程式を解く

分子動力学法: 数百万原子程度は実行可能

問題: $N_A \sim 10^{23}$ 個の粒子の方程式を
正確に解くことはできない

時間平均から統計平均へ

解決方法:系の時間変化は調べない

個々の粒子の運動を理解することはあきらめ、
統計的に取り扱う

- 異なる微視的状态 X の系を集めた統計集団
「アンサンブル」の確率分布を求める: 統計分布関数 $f(X)$

$$\text{物性 } P \text{ の統計平均値 (期待値) } \langle P \rangle = \frac{\sum_X P(X) f(X)}{\sum_X f(X)}$$

が実験で観測されるとする

アンサンブルの変数は何を取るべきか

異なる微視的状态 X の系を集めた統計母集団「アンサンブル」が現れる確率分布 $f(X)$ (統計分布関数) を求める

系の状態を記述する微視的な変数 X は何か

経験的に、それぞれの**粒子の座標、運動量** r_i, P_i

なぜ位置と運動量 r_i, P_i なのか: 1つの説明

$$\text{運動方程式: } m_i \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = F_i$$

2次微分方程式なので、一般解 $r_i(t)$ のそれぞれの成分 $x_i(t), y_i(t), z_i(t)$ は、それぞれ 2つずつの積分定数を決めれば、運動は一意的に決まる

(1粒子当たり6つの積分定数)

つまり: N 粒子系の自由度は $6N$

* r_i だけではすべての状態を記述できない

* たとえば r_i, v_i ですべての状態を記述できる

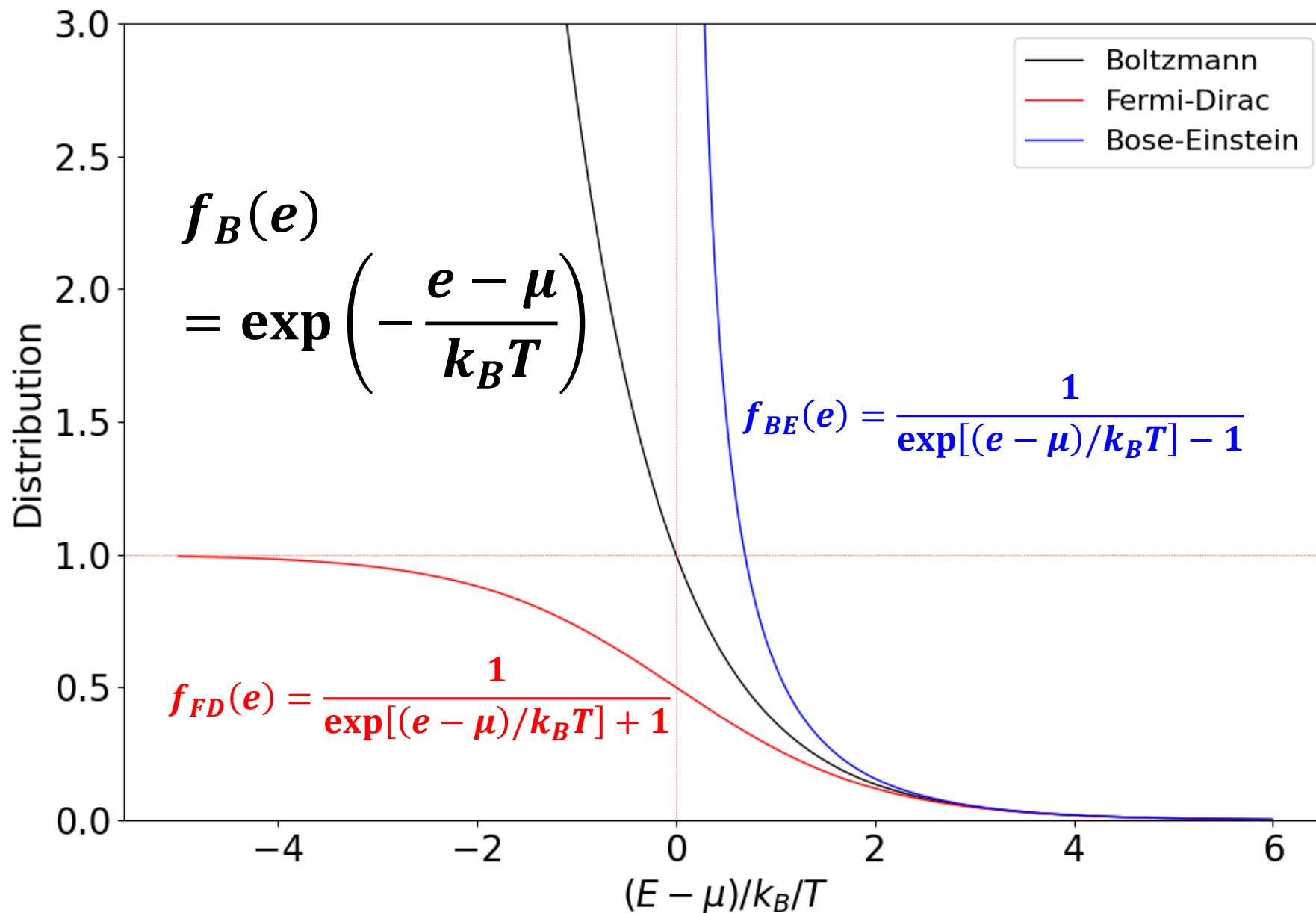
r_i, p_i でもよい: $\{r_i, P_i\}$ を独立変数とする空間「位相空間」を考える

* 加速度を加えて r_i, v_i, a_i とすると、このうち $3N$ 個の変数は独立ではない

統計力学: これから学ぶ方法

$\{r_i, P_i\}$ で表される状態の場合の数 (配置数) を考え、最も出やすい分布として統計分布関数を求める

【重要】 統計分布関数: 前半で一番重要なこと



経済物理学: Boltzmannマネーゲーム

お金をランダムな相手と交換し続けると貧富の差が生まれる

Pythonプログラム: randomtrade.py

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/StatisticsC/index.html>

使い方: 引数無しで `python randomtrade.py` を実行すると、Usageを表示

`python randomtrade.py npersons value(average) vtrade n(maxiteration) n(plotinterval) n(distribution func)`

使用例: `python randomtrade.py 200 50 1 10000 100 21`

200人が、最初に50ドルずつもっていて、1ドルずつ交換を10000回行う。

100サイクルごとにグラフを更新。

分布関数の横軸は、value(average)の10倍の範囲を21分割する。

実行例: `python randomtrade.py 2000 50 1 100000 100 21`

上段: それぞれの保有金額

中段: 保有金額順に並べ替えた結果

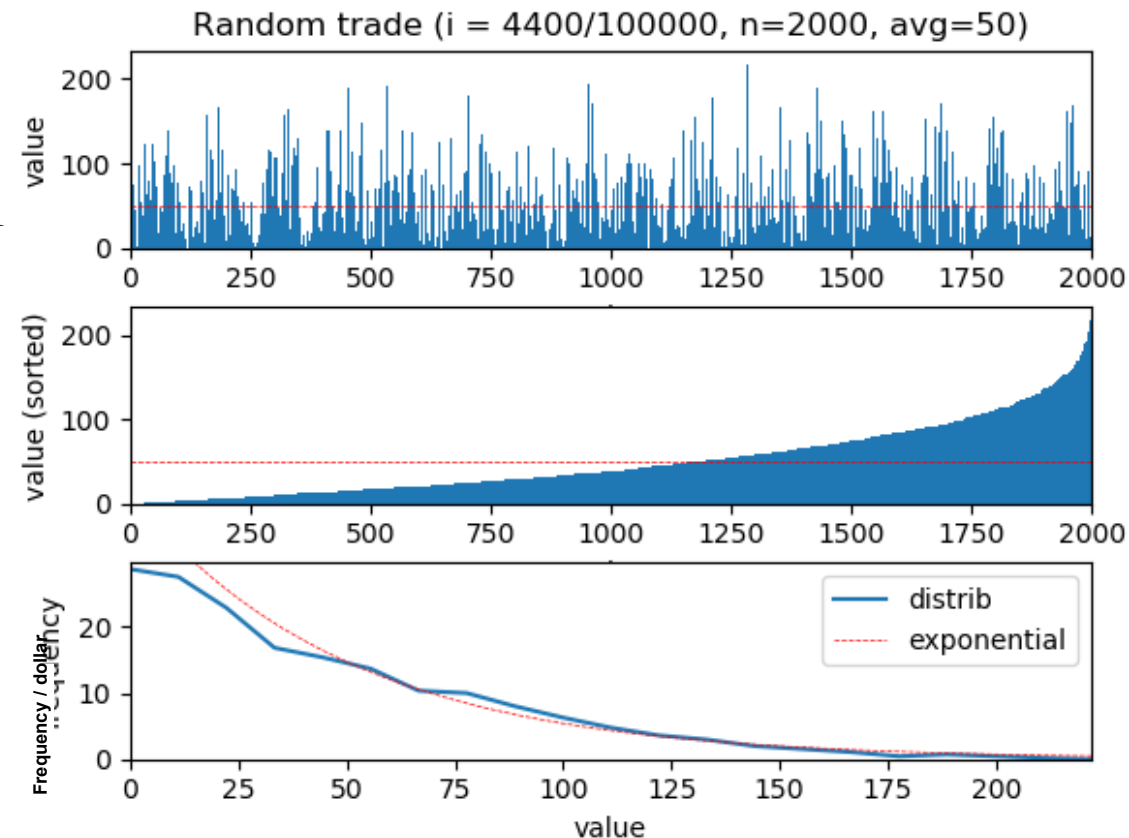
下段: 青線 金額に関する分布関数。

赤線 総数が n persons、
平均所有額 m が value(average)になる
指数関数分布曲線 $f(m) = A \exp(-bm)$

$$b = 1 / \langle m \rangle$$

$$A = Nb$$

右図は、4400回の交換サイクル終了時の結果

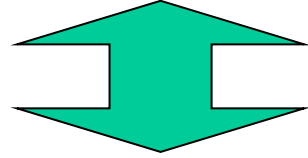


物質中の粒子も同じ: Boltzmann分布

「 N 人が全財産 M_{tot} を分け合います。

それぞれが出会うたびに小さな金額 Δm を交換していくと、
最後にはどのような財産分布になるでしょうか？」

$$P(m) \propto \exp\left(-\frac{m}{\langle m \rangle}\right)$$
$$\langle m \rangle = M_{\text{tot}}/N$$



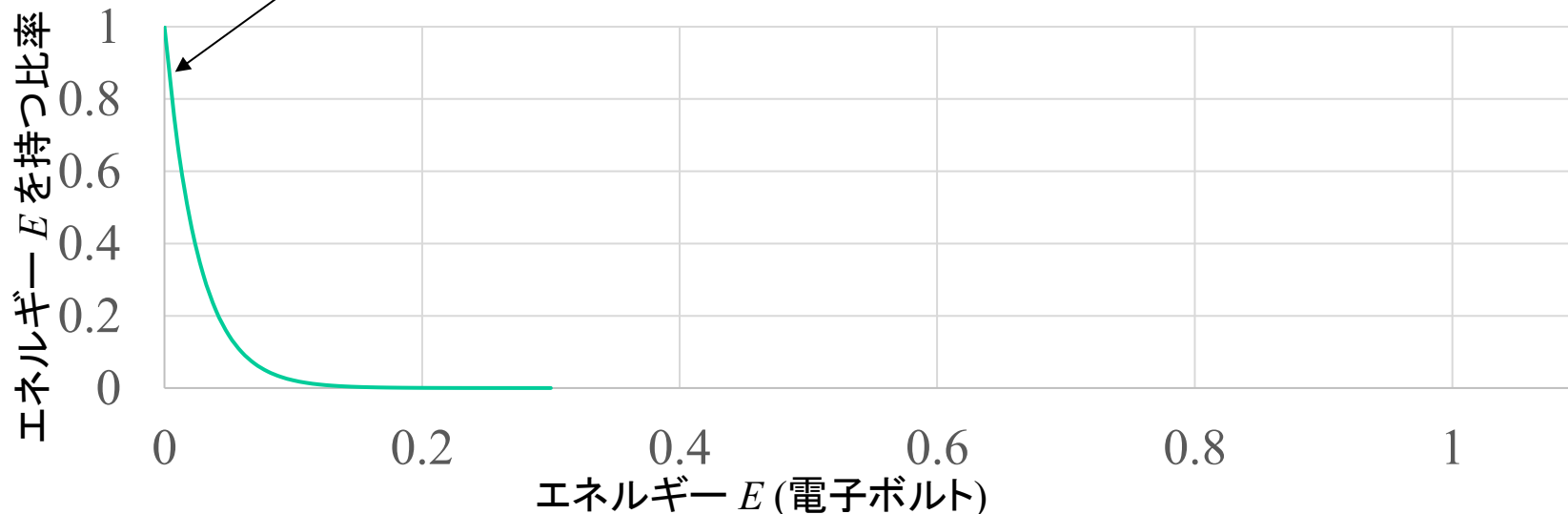
「 N 個の粒子が全エネルギー E_{tot} を分け合います。

電子が衝突するたびに小さなエネルギー Δe を交換していくと、
最後にはどのようなエネルギー分布になるでしょうか？」

$$P(e) \propto \exp\left(-\frac{e}{k_B T}\right)$$

温度 T は エネルギー平均 $\langle e \rangle$ と等価: $\langle e \rangle = k_B T$

「温度 T において、エネルギー e を持つ電子はどれくらいの割合いるのだろうか？」



統計力学にも、基礎方程式に依存しない普遍性がある

状態 X が現れる確率は

Newtonの運動方程式を使うか、
相対性理論の運動方程式を使うか、
量子力学を使うかに依存しない

系の全エネルギー $E(X)$ だけで決まる

$$P(E) = \exp\left(-\frac{E(X)}{k_B T}\right) / \sum_X \exp\left(-\frac{E(X)}{k_B T}\right)$$

正準理論 (canonical theory)

統計分布関数を異なる考え方で順次導出していく

1. 仮定: 空間の対称性だけ

自由理想気体、外部ポテンシャルなし (一様)

$$e_i = \frac{1}{2} m v_i^2$$

2. 仮定: 可能な配置数が最大になる状態が観測される

自由理想気体、外部ポテンシャルあり

$$e_i = \frac{1}{2} m v_i^2 + U(r_i)$$

3. 仮定: 全系の全エネルギーが一定 (正準理論)

粒子間に相互作用がある一般の場合にも適用可能

$$E = \sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 + \sum_{i,j} U_{i,j}(r_1, r_2, \dots, r_N)$$

統計分布関数を異なる考え方で順次導出していく

1. 仮定: 空間の対称性だけ

自由理想気体、外部ポテンシャルなし (一様)

$$e_i = \frac{1}{2} m v_i^2$$

2. 仮定: 可能な配置数が最大になる状態が観測される

自由理想気体、外部ポテンシャルあり

$$e_i = \frac{1}{2} m v_i^2 + U(r_i)$$

3. 仮定: 全系の全エネルギーが一定 (正準理論)

粒子間に相互作用がある一般の場合にも適用可能

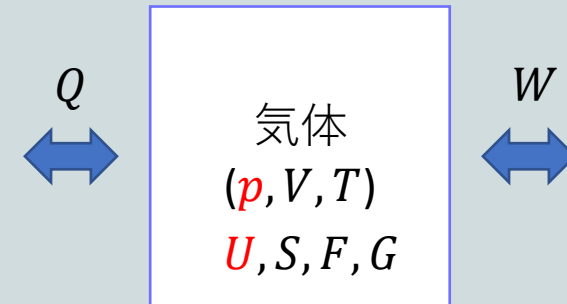
$$E = \sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 + \sum_{i,j} U_{i,j}(r_1, r_2, \dots, r_N)$$

第2回 § 3 気体分子運動論

理想気体の状態方程式を分子運動から説明

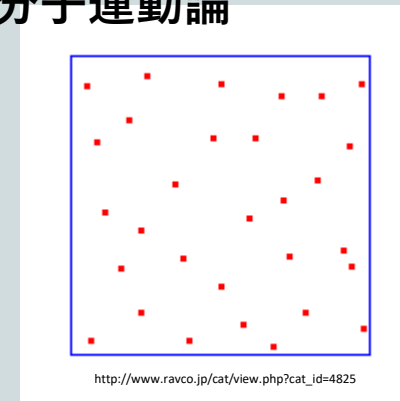
- 気体の速度分布
 - マクスウェルの仮定
- 気体の圧力
- マクスウェルの速度分布則
 - ボルツマン定数
 - 速さの分布
- 各種の平均値
 - ガンマ関数
 - エネルギー等分配則
 - 熱速度
- 理想気体の内部エネルギー
 - 比熱比
- 位相空間における分布関数
- ボルツマン方程式

熱力学



状態方程式の理由・内部エネルギーの起源は考えない

分子運動論



分子の運動量・運動エネルギーと温度・圧力の関係

マクスウェルの仮定

仮定0: 空間は均一 (外部ポテンシャルはない): 分布関数は (v_x, v_y, v_z) だけの関数

仮定1: 独立性: 分子の3方向 (v_x, v_y, v_z) の速度成分は互いに独立

独立事象の確率: $f(v_x, v_y, v_z) = g(v_x)g'(v_y)g''(v_z)$ (3.6')

仮定1': x,y,z方向の等価性: 分子の3方向 (v_x, v_y, v_z) の速度分布関数は同じ

$$g(v) = g'(v) = g''(v) \quad (3.6'')$$

仮定2: 回転対称性: 系を回転させても結果は変わらない。

f は座標系の角度 (θ, φ) に依存せず、 $|v|$ だけの関数になる。

都合により、変数を v^2, v_x^2, v_y^2, v_z^2 で表す。

$$f(v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = g(v_x^2)g(v_y^2)g(v_z^2) \quad (3.7')$$

マクスウェルの仮定：方程式を解く

独立性 $: f(v_x, v_y, v_z) = g(v_x)g'(v_y)g''(v_z) \quad (3.6')$

x,y,z方向が等価 $: g(v) = g'(v) = g''(v) \quad (3.6'')$

回転対称性 $: f(v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = g(v_x^2)g(v_y^2)g(v_z^2) \quad (3.7')$

この条件だけから f に関する微分方程式を導出できる

$$v_y = v_z = 0, g(0) = a \text{ を代入: } f(v_x^2) = a^2 g(v_x^2)$$

$$\therefore g(v_x^2) = a^{-2} f(v_x^2)$$

同様に

$$g(v_y^2) = a^{-2} f(v_y^2) \quad (v_z = v_x = 0)$$

$$g(v_z^2) = a^{-2} f(v_z^2) \quad (v_x = v_y = 0)$$

$$\therefore f(v^2) = a^{-6} f(v_x^2) f(v_y^2) f(v_z^2)$$

変数変換 $v_x^2 = \xi, \quad v_y^2 = \eta, \quad v_z^2 = \zeta, \quad v^2 = \xi + \eta + \zeta$

$$\mathbf{f(\xi + \eta + \zeta) = a^{-6} f(\xi) f(\eta) f(\zeta)} \quad (3.8)$$

数学の定理: $f(\xi + \eta) = C f(\xi) f(\eta)$ の解は指数関数

乗法型Cauchy方程式 $f(x + y) = f(x)f(y)$ の解は

- ・ 定義域が実数全体
- ・ $f(x)$ は連続関数、 $f(x) \geq 0$
- ・ 定義域の積分が有限 (規格化可能)

の条件 (確率密度関数となるなら)があれば、
指数関数に限定される

マクスウェルの仮定：方程式を解く

$$f(\xi + \eta + \zeta) = a^{-6} f(\xi) f(\eta) f(\zeta) \quad (3.8)$$

$\xi = \eta = \zeta = 0$ を代入

$$f(0) = a^{-6} f(0) f(0) f(0) \quad \therefore a^3 = f(0)$$

ξ, ζ 一定とし、(3.8)の両辺を η で2階微分

$$f''(\xi + \eta + \zeta) = a^{-6} f(\xi) f''(\eta) f(\zeta)$$

$\eta = \zeta = 0$ とすると (1変数2階微分方程式に変換)

$$f''(\xi) = a^{-6} f(\xi) f''(0) f(0)$$

(3.8)から

$$f(0) = a^{-6} f(0) f(0) f(0) \Rightarrow f(0) = a^3$$

$$\therefore f''(\xi) = a^{-3} f''(0) f(\xi)$$

マクスウェルの仮定： 方程式の解

$$\therefore f''(\xi) = a^{-3} f''(0) f(\xi)$$

- $a^{-3} f''(0) < 0$ の場合、 $-\beta^2 = a^{-3} f''(0)$ と置くと
$$f''(\xi) = -\beta^2 f(\xi)$$

微分方程式を解くと

$f(\xi) = A \sin(\beta \xi + \theta)$: f が負になることはないので物理的に意味がない

- $a^{-3} f''(0) > 0$ の場合、 $\alpha^2 = a^{-3} f''(0)$ と置くと
$$f''(\xi) = \alpha^2 f(\xi) \tag{3.9}$$

微分方程式を解いて

$$f(\xi) = \begin{cases} Ae^{\alpha \xi} & \xi \rightarrow \infty \text{ で } \infty \text{ に発散してしまうので除外} \\ Ae^{-\alpha \xi} \end{cases} \tag{3.10}$$

$$\therefore f(v^2) = Ae^{-\alpha v^2}$$

マクスウェル分布の導出：まとめ

仮定2: 回転対称: 分布関数は v^2 の関数 $f(v^2)$

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$$

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle$$

$f(v^2)$ の変数は独立成分の和

仮定1: 分子の3方向 (v_x, v_y, v_z) の速度成分は互いに独立、x, y, z方向の等価性。

$$f(v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = g(v_x^2)g(v_y^2)g(v_z^2) \quad \text{同じ関数の積}$$

「変数の和が関数の積になる」という
条件から指数関数が出てくる



一般化、抽象化: 正準理論

位置が $r \sim r + dr$, 速度が $v \sim v + dv$ の分子の数は

$$f(v^2)drdv = A \exp(-\alpha v^2) drdv \quad (3.11)$$

$dr = dx dy dz$ (dr : ベクトル dr が作る平行六面体の体積)

$$dv = dv_x dv_y dv_z \quad (3.12)$$

以降、 $f(v^2)$ の代わりに $f(v)$ とあらわす:

$$f(v)drdv = A \exp(-\alpha v^2) drdv \quad (3.11)$$

A と α の決定: 数密度 (規格化条件)

注意: 統計分布関数はもともと r, v の関数 $f(\mathbf{r}, v)$ だが、
Maxwell分布の場合は r によらないので
 v だけの関数 $f(v_x, v_y, v_z)$ のように書いている

そのため、全粒子数 N は座標についても積分する必要がある、

$$N = \int_V dx dy dz \iiint_{-\infty}^{\infty} f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z \quad (3.4)$$

で計算される。

$\int_V dx dy dz = V$ を使って

$$N = V \iiint_{-\infty}^{\infty} f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z \quad (3.13)$$

A と α の決定: 数密度 (規格化条件)

$$f(v_x, v_y, v_z) = f(v) = Ae^{-\alpha v^2} \quad (3.10)$$

より

$$N = V \iiint_{-\infty}^{\infty} dv_x dv_y dv_z Ae^{-\alpha v^2} \quad (3.13)$$

$$= VA \iiint_{-\infty}^{\infty} dv_x e^{-\alpha v_x^2} dv_y e^{-\alpha v_y^2} dv_z e^{-\alpha v_z^2}$$

$$= VA \left[\int_{-\infty}^{\infty} dv_x \exp(-\alpha v_x^2) \right]^3$$

$$\text{ガウス積分の公式: } \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2) = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (\alpha > 0) \quad (3.14)$$

から、

$$\frac{N}{V} = A \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.15,16) \Rightarrow A \text{ と } \alpha \text{ の条件式}$$

Aとαの決定: 圧力

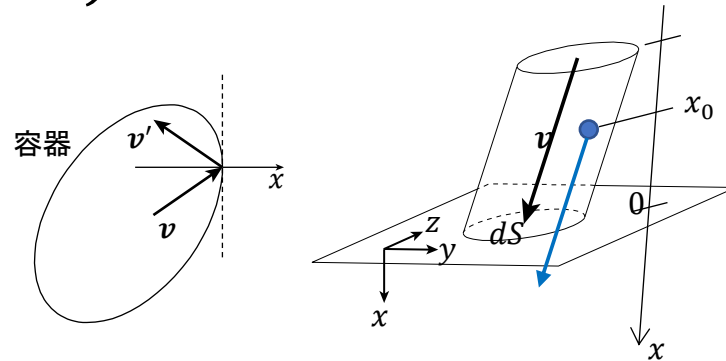
- 面直速度 v_x をもつ分子が単位時間中に壁に衝突する条件

- 速度 $v_x > 0$
- 単位時間後の x 位置: $-x_0 + v_x \geq 0 \Rightarrow x_0 \leq v_x$
体積 $dV = v_x dS$ の微小体積体内の分子が壁に衝突
速度 v を持つ分子数は

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{v}) d\boldsymbol{r} d\boldsymbol{v} &= dV f(\boldsymbol{v}) d\boldsymbol{v} = dV A \exp(-\alpha v^2) d\boldsymbol{v} \\ &= A v_x dS \exp(-\alpha v^2) d\boldsymbol{v} \end{aligned} \quad (3.17)$$

- 弾性衝突

$$v'_x = -v_x \quad v'_y = v_y \quad v'_z = v_z$$



- 分子一個が壁に当たって弾性衝突する際の運動量変化

$$\Delta P = m v'_x - m v_x = -2m v_x$$

Aとαの決定: 圧力

単位時間における全運動量の変化

$$\begin{aligned} dP/dt &= -2mA dS \int_0^\infty dv_x \iint_{-\infty}^\infty dv_y dv_z v_x^2 \exp(-\alpha v^2) \\ p &= -\frac{dF}{dS} = -\frac{d(dP/dt)}{dS} \\ &= 2mA \int_0^\infty dv_x v_x^2 \exp(-\alpha v_x^2) \int_{-\infty}^\infty dv_y \exp(-\alpha v_y^2) \int_{-\infty}^\infty dv_z \exp(-\alpha v_z^2) \\ &= 2mA \int_0^\infty dv_x v_x^2 \exp(-\alpha v_x^2) \left\{ \int_{-\infty}^\infty dv_y \exp(-\alpha v_y^2) \right\}^2 \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\int_0^\infty dx x^2 \exp(-\alpha x^2) = -\frac{d}{d\alpha} \int_0^\infty dx \exp(-\alpha x^2) = -\frac{d}{d\alpha} \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \frac{\pi^{1/2}}{\alpha^{3/2}} \quad (3.20)$$

を使うと

$$p = \frac{mA}{2\alpha} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{3/2} \quad (3.21)$$

$\frac{N}{V} = A(\pi/\alpha)^{3/2}$ から、

$$p = \frac{N}{V} \frac{m}{2\alpha} \quad (3.22)$$

A と α の決定: 理想気体と対応させる

$$p = \frac{N}{V} \frac{m}{2\alpha} \quad (3.22)$$

に 理想気体の状態方程式

$$pV = Nk_B T \quad (k_B: \text{ボルツマン定数}) \quad (3.23)$$

を代入。

$$\frac{N}{V} \frac{m}{2\alpha} = \frac{Nk_B T}{V} \quad (3.24)$$

$$\Rightarrow \alpha = \frac{m}{2k_B T} \quad (3.25, 27)$$

Aと α の決定: 理想気体と対応させる

- $\alpha = \frac{m}{2k_B T}$ を $\frac{N}{V} = A \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}}$ に代入

$$A = \frac{N}{V} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{-\frac{3}{2}} = \frac{N}{V} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.28)$$

$$f(v) d\mathbf{r} d\mathbf{v} = \frac{N}{V} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{mv^2}{2k_B T} \right) d\mathbf{r} d\mathbf{v} \quad (3.29)$$

マクスウェルの速度分布関数

$$f(v) = \frac{N}{V} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{\frac{1}{2}mv^2}{k_B T} \right)$$

Maxwell分布の適用範囲: 物理学の論理展開

1. 対称性から分布関数の形を限定。ただし、定数の不確定性が残る
 2. 分布関数が従うべき別の法則 (必要条件) から、定数を決定する
 3. 理想気体の方程式に従うという必要条件から、
 - ・ 導出した分布関数が理想気体の状態方程式と整合すること
 - ・ α は絶対温度だけで決まる (系、モデル、減少に依存しない)が確認できた
 4. A は確率分布関数の規格化定数なので、分布関数が決まれば数学的に決まる
- * 3. で α が T のみの関数であることから、理想気体の方程式から導出した分布関数が (理論の適用範囲内で) 十分条件を満たすことが保証される。
- * この関数を適用した対象が“理論の適用範囲内であるかどうか” は、実験結果と対照させて妥当性を検証する
(例: 分子間に相互作用がある場合は Boltzmann 分布に修正される)

マクスウェル分布の導出：まとめ

仮定2: 回転対称: 分布関数は v^2 の関数 $f(v^2)$

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$$

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle$$

$f(v^2)$ の変数は独立成分の和

仮定1: 分子の3方向 (v_x, v_y, v_z) の速度成分は互いに独立、等方的。

$$f(v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = g(v_x^2)g(v_y^2)g(v_z^2) \quad \text{同じ関数の積}$$

「変数の和が関数の積になる」という
条件から指数関数が出てくる



一般化、抽象化: 正準理論

位置が $r \sim r + dr$, 速度が $v \sim v + dv$ の分子の数は

$$f(v^2)drdv = A \exp(-\alpha v^2) drdv \quad (3.11)$$

$d\mathbf{r} = dx dy dz = dV$ ($d\mathbf{r}$: ベクトル $d\mathbf{r}$ が作る平行六面体の体積)

$$d\mathbf{v} = dv_x dv_y dv_z \quad (3.12)$$

以降、 $f(v^2)$ の代わりに $f(v)$ とあらわす:

$$f(v)drdv = \frac{N}{V} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{\frac{1}{2}mv^2}{k_B T} \right) \quad (3.11)$$

べき乗を含む指数関数の積分: Γ 関数

べき乗と指数関数含む積分のやり方: 微分可能なパラメータ a を利用する

$$I_0(a) = \int_0^\infty e^{-ax} dx = \frac{1}{a}$$

$$I_1(a) = \int_0^\infty x e^{-ax} dx = -\frac{d}{da} \int_0^\infty e^{-ax} dx = \frac{1}{a^2}$$

$$I_2(a) = \int_0^\infty x^2 e^{-ax} dx = -\frac{d}{da} I_1(a) = \frac{2}{a^3}$$

$$I_{1/2}(a) = \int_0^\infty x^{1/2} e^{-ax} dx = \int_0^\infty (t/a)^{1/2} e^{-t} dt = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{1/2}$$

$$I_{3/2}(a) = \int_0^\infty x^{3/2} e^{-ax} dx = -\frac{d}{da} \int_0^\infty x^{1/2} e^{-ax} dx = \frac{1}{2} \frac{\pi^{1/2}}{a^{3/2}}$$

$$I_{5/2}(a) = \int_0^\infty x^{5/2} e^{-ax} dx = -\frac{d}{da} I_{3/2}(a) = \frac{1}{2} \frac{3}{2} \frac{\pi^{1/2}}{a^{5/2}}$$

Γ 関数 $\Gamma(s) = \int_0^\infty x^{s-1} e^{-x} dx \quad (s > 0) \quad (3.39)$

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\Gamma(s+1) = s\Gamma(s) \quad * \text{階乗}(n!) \text{の実数バージョン}$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \pi^{1/2} \quad \Gamma(1) = I_0(1) = 0! = 1 \quad \Gamma(2) = I_1(1) = 1! = 1 \quad \Gamma(3) = I_2(1) = 2! = 2$$

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = I_{1/2}(1) = \Gamma\left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} \pi^{1/2} \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = I_{3/2}(1) = \frac{3}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{3}{4} \pi^{1/2}$$

Gauss関数の積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2) = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (\alpha > 0)$$

$$\int_0^{\infty} dx x \exp(-\alpha x^2) = -\frac{1}{2\alpha} \int_0^{\infty} dx \frac{d}{dx} \exp(-\alpha x^2) = -\frac{1}{2\alpha} [\exp(-\alpha \infty^2) - \exp(-\alpha 0^2)] = \frac{1}{2\alpha}$$

$$\int_0^{\infty} dx x^2 \exp(-\alpha x^2) = -\frac{d}{d\alpha} \int_0^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2) = -\frac{d}{d\alpha} \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \frac{\pi^{1/2}}{\alpha^{3/2}}$$

Gauss積分 $I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2)$ の導出:

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2) \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-\alpha y^2) \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \exp(-\alpha(x^2 + y^2))$$

2次元極座標へ変換: $r^2 = x^2 + y^2$, $dx dy = 2\pi r dr$, 積分範囲 $r = [0, \infty]$

$$I^2 = \int_0^{\infty} dr 2\pi r \exp(-\alpha r^2) = 2\pi \cdot \left(-\frac{1}{2\alpha}\right) [\exp(-\alpha \infty^2) - \exp(-\alpha 0^2)] = \frac{\pi}{\alpha}$$

$$\times I = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}$$