

講義資料

<http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/?page=statistics>

統計力学 (C)

元素戦略MDX研究センター 神谷利夫

物質理工学院材料系 久保田 雄太

講義予定 MAT.C203 火・金 15:25~17:05

授業準備期間 9月28日(月)~9月30日(水) 授業 10月1日(木)~11月24日(火)
10月9日(金)~10月12日(月) 大学祭(準備・片付け含む)のため授業休み 10月15日(木) 月曜の授業を行う
11月25日(水)~12月2日(水) 期末試験・補講 ※12月2日(水)は週1回科目の予備日

第01回 10/2 熱力学の復習

(神谷)

第02回 10/6 気体分子運動論 Maxwell分布

(神谷)

授業休み 10/9 (大学祭準備)

第03回 10/13 古典統計力学の基礎 (Boltzmann分布)

(神谷)

第04回 10/16 理想気体、古典統計力学の問題

(神谷)

第05回 10/20 (休講)

第06回 10/23 正準理論、大正準理論

(神谷)

第07回 10/27 量子統計力学、復習

(神谷)

第08回 10/30 古典統計力学の応用

(久保田)

第09回 11/6 固体の比熱

(久保田)

第10回 11/10 理想Bose気体、光子と熱輻射

(久保田)

第11回 11/13 理想Fermi期待、金属中の電子

(久保田)

第12回 11/17 半導体中の電子、Fermi準位、ドーピング

(久保田)

第13回 11/20 相転移

(久保田)

第14回 11/24 復習(統計力学全般)

(久保田)

第15回 11/27 試験

神谷: 統計分布関数の導出

1. 対称性から分布関数を導出
2. 配置数を最大化して分布関数を導出
3. エネルギーの配置数だけから導出 (正準理論)
4. 粒子数が変わる場合の分布関数 (大正準理論)
5. 制約条件がある場合の分布関数 (量子統計)

久保田先生: 統計力学の応用

1. 比熱 (フォノン)
2. 放射温度計
3. 金属中の電子物性、比熱 (電子)
4. 半導体中の電子物性
5. 超伝導

統計力学(C) 動画Web

<http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/?page=tutorial&id=statphys>

source HTMLdisplay HTML

- 2026材料データ × 計算材料科学 ハ
ンズオン
- 2026チュートリアルコース

- 学会等講演
- プレゼンテーション
- 生成AI
- プログラミング
- 数値解析
- 結晶・回折・干渉
- 結晶・回折・干渉(内部限定)
- 統計力学
- 第一原理計算
- 物理・科学
- 半導体デバイス
- 半導体デバイス(内部限定)
- データ科学
- 科学史

D²MatE D²MatE Program Top This page

source HTMLdisplay HTML

統計力学

本チュートリアルは、東京科学大学 物質理工学院 材料系 学部2年生の講義「統計力学(C)」の第1回から第6回までの数値解析講義を、AI生成音声を利用・再構成して動画に編集しなおしたものです。
講義題目に連番がないものは講義では触れていない、補足資料です。

Course materials (Lecture slides and python programs):

- [course_materials01-02.zip](#)

Slide files and Videos (monologue):

1. ▼ 01-熱力学と統計力学 (日本語)

講義資料
http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/?page=statistics

統計力学 (C)

元素戦略MDX研究センター 神谷利夫
物質理工学院材料系 久保田 雄太

第1回第1部 熱力学と統計力学
▶ 0:00 / 8:16

▶ - 日本語原稿 (独和型) (download/show)

▶ - 講義資料 (download/show)

2. ▼ 02-熱力学復習 (日本語)

講義資料
http://d2mate.mdxes.iir.isct.ac.jp/D2MatE/?page=statistics

統計力学 (C)

元素戦略MDX研究センター 神谷利夫
物質理工学院材料系 久保田 雄太

第1回第2部 熱力学復習
▶ 0:00 / 26:26

PDF+pythonプログラムなど

動画

PowerPointファイル。
右クリックメニューからDL

読み上げがおかしいところが残っているかもしれないので、
原稿

課題 2026/10/2

- 回答期限: 10/4 23:59:59
- LMSから電子ファイルを提出。
一般的なファイルフォーマット (.pdf, .txt, .docx, .xlsx, .pptx) はOK, APPLE独自フォーマットはNG
- LMSで投稿できない場合は、ファイルを kamiya.t.aa@m.titech.ac.jp へ送ってください。
添付ファイル名には 学籍番号とフルネームを入れてください

課題1: 生成AIで「統計力学は何の役に立ちますか」などの質問をして、
プロンプトと回答、および、**AIの回答を踏まえた自分の考え**を提出してください。
生成AIに聞く前に、まず自分の考えをまとめて、比較してみましょう。

「生成AIのrole」「前提条件」を変えると、
具体的な状況でよりよい回答・意外な回答が得られる場合があります

例: 「私は将来大学で研究をしたいと考えています」

「私は映画監督になりたいと考えています」

「将来コンビニ店長になりたいです」

「あなたは私の主指導教員です。私は企業で全固体電池の実用化を実現したいと考えています」

課題2: 質問・要望があれば書いてください

生成AIに聞いてわかることでも、教員に質問してみましょう

生成AI 利用の心得 — 考えてから相談する

生成AIを、答えを受け取る装置ではなく、思考を広げて検証する相手に



1 まず自分で考える

仮説・根拠・分からない点を整理する

こう考えられるのでは？

- 仮説
- 根拠
- 分からない点

2 中立的にAIへ質問する

自分の結論を示さず、一般的で制約の少ない質問をする

「代表的な考え方、異なる立場、重要な論点を整理してください」

3 回答と自分の考えを比較する

一致点・相違点・見落としを自分で判断する

AIの回答

自分の考え

一致している点は？
違う視点は？
見落としていたことは？

4 自分の考えを示して批判させる

弱点・反例・成立しない条件を検討してもらう

「私の結論に合わせず、批判的に検討してください」

5 根拠を確認し、自分で結論を出す

出典・事実・最新情報を確かめ、最終判断は自分で行う



出典



事実



最新情報



結論



AIに考えてもらう前に、自分で考える。AIの答えを受け取った後も、自分で考える。

課題回答例

Role&前提: 無機分野に興味のある学生
あなたは指導教員です。

A: 相転移・結晶構造の安定性
格子欠陥、ドーピング
材料シミュレーション

課題回答例

Q:あなたは警察官です。あなたの立場から、統計力学はなんの役に立ちますか。

A: 警察官の立場では統計力学は直接使わない。

警察の仕事を支える科学技術の多くが統計力学の上に成り立っている

【鑑識・科学捜査】 質量分析や赤外分光、ラマン分光の解析機器、DNA解析装置の温度制御

【爆発物・火災の挙動解析】 爆発や火災を現場で判断する際、統計力学のモデルシミュレーションが参考になる。

【薬物・化学物質の同定】 薬物の結晶構造や溶解度、蒸気圧、分子運動は統計力学を使って説明できるため、薬物や毒物の操作の際に役に立つ。

【通信・暗号・情報処理】 ノイズのある信号の最適化や画像処理、AIによる顔認証やナンバー認証には統計力学(と類似の数学)が用いられている。

【群衆・交通のマクロ挙動モデル】 人や車の動きは、多数の粒子の運動として捉えることで統計力学で扱える(経済物理学)。

課題回答例

Q: 統計力学はミクロの視点でも成り立つのか

A: 従来の(講義で習う)統計力学はそのままでは成り立たない(注意: 言い過ぎ。使い方が変わってくる)
ただし、長時間の測定をしたり、測定を繰り返すと、
平均値と揺らぎ(標準偏差)として、系の特徴を統計力学と対応させられる

Q: 新規超伝導物質・新奇物性物質を探索する学生です。統計力学は何の役に立つのか

A: 新規物質探索を行う上で、統計力学は「ミクロな電子や原子の量子力学的な振る舞い」を「マクロな実験室で測れる物性値」へと変換する、不可欠な翻訳機です。

量子力学にもとづく材料シミュレーションは、一般的に絶対零度での電子状態について計算をしています。
新しい超伝導体やスピン液体候補を合成したとき、その物質が室温でどんな性質を示すかは分かりません。
相転移の理解、実験データからの「逆算」などに役立つ。

「ただのレシピ通りに物質を焼く職人」ではなく、「物性を予言し、設計する研究者」になるためには、統計力学が絶対に必要です。

課題回答例

Q:半導体に関する仕事をしたい。統計力学は何の役に立つのか

A: 半導体のキャリア濃度、温度依存性、欠陥・ドーピング
薄膜・結晶成長にも関係する

A: 機械学習におけるニューラルネットワークや最適化問題は、統計力学のスピン系のモデルと数学的に等価であることが多く（注意: そうでないケースのほうが多い。数学に対応関係があることがある、くらいの意味）、AIの理論的基盤として統計力学の知見が直接的に活用されている。

検証: The Journal of the Thermoelectrics Society of Japanのように、熱電素子とフォノンの影響を結びつける文献は発見した。ボース-アインシュタイン統計との結びつきについては判断できなかった。

フォノンのエネルギー分布は Planck分布 (BE分布の特殊なケース) に従っている

第一原理計算(DFT)の温度との関係については、NIMS NOW に肯定する記述が発見できた。

最先端のDFTでは、有限温度の物性や相転移の計算も可能

課題回答例

AIのroleを変えた例

材料開発：合金や電池材料がどの温度・組成でどの相になるかを示す相図

ゴムが引っ張ると縮もうとするのも、分子鎖のエントロピーが原因

化学プラントの設計：反応がどこまで進むか（平衡定数）や、触媒表面に分子がどれだけ吸着するか

食品開発・料理人：チョコレートのテンパリングは、結晶の型を狙って選ぶ相転移の制御

マヨネーズの乳化、ゼリーのゲル化、飴のガラス転移も同じ枠組みで理解できます。

機械学習エンジニア：分類器の出力に使うソフトマックス関数はボルツマン分布そのもの

生成AIの「温度」パラメータも同じ由来

画像生成の拡散モデルは非平衡統計力学から着想された

金融のクオント：株価のランダムな動きのモデルは、ブラウン運動の理論と同じ数学です。

オプション価格のブラック・ショールズ方程式は、熱の拡散方程式に変換できます。

課題回答例

A: 統計力学はこれまでの研究で半導体の設計や宇宙の謎の解明に役に立ってきた。
星の寿命が尽きた後にできる「白色矮星」や「中性子星」といった超高濃度の天体: フェルミ縮退・縮退圧
=> 金属中の電子と同じ

これからはAIのブラックボックス解明や量子コンピュータのノイズ克服に役立っていく。

質問

Q: AIに回答してもらった後に回答をまとめてもらったものを課題に載せるかたちにしたのですが、回答そのままを載せるのとどちらがいいですか。

A: もとの文をそのまま載せても、まとめても構いませんが、
まとめるときは、自力でまとめましょう

Q: 講義の理解を深めるために、あらかじめ復習しておくべき数学の分野はありますか？

A: 基本的に微積分しか使わない。
関連科目に興味があるのであれば、解析力学を学ぶことは、今後役に立つ

Q: 教授にとっての統計力学を使えるようになる一番大きなメリットは何ですか？

A: 現実に扱う材料 (有限温度) を設計したり、理解するのに統計力学は不可欠

課題 2025/10/7

- 回答期限: 10/8 23:59:59
- LMSから電子ファイルを提出。
一般的なファイルフォーマット (.pdf, .txt., .docx, .xlsx, .pptx) はOK, APPLE独自フォーマットはNG
- LMSで投稿できない場合は、ファイルを kamiya.t.aa@m.titech.ac.jp へ送ってください。
添付ファイル名には 学籍番号とフルネームを入れてください

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・要望があれば書いてください

生成AIに聞いてわかることでも、教員に質問してみましょう

今日の流れ

第0部 はじめに: 今説明している資料

第1部 統計力学 予告編

第2部 Maxwellの速度分布

第3部 位相空間

目標

1. 統計分布関数が、基本的に指数関数となることを理解する
 - 運動方程式は必要ない
 - 速度空間の等方性だけあればよい
 - あるいは、エネルギー一定の制約があればよい