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　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、位相空間　(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)
　　古典統計力学の応用と問題1
第04回 10/16 正準理論、大正準理論　(神谷)
第05回 10/20 (休講)
第06回 10/23 量子統計力学の基礎　(神谷)
第07回 10/27 統計分布関数 復習　(神谷)

第08回 10/30 古典統計力学の応用と問題2　(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

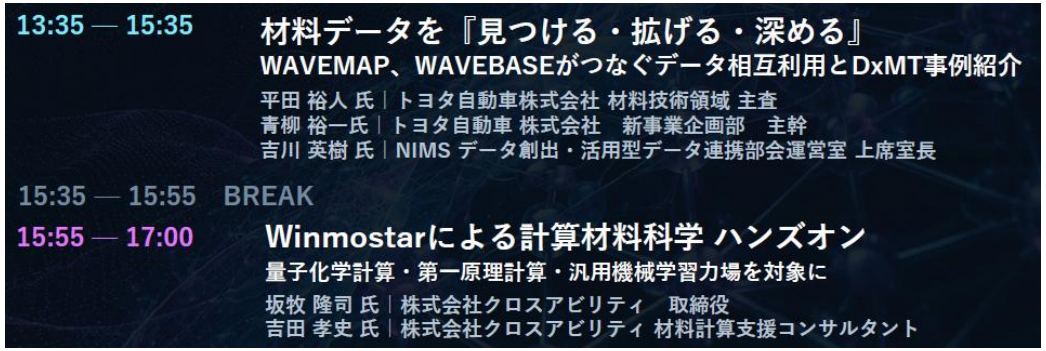
1. 対称性から分布関数を導出
2. 配置数を最大化して分布関数を導出
3. エネルギーの配置数だけから導出 (正準理論)
4. 粒子数が変わる場合の分布関数 (大正準理論)
5. 制約条件がある場合の分布関数 (量子統計)

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

10/22 ハンズオン (分子軌道法・バンド計算)





参加登録URL
https://forms.cloud.microsoft/r/uVvyDRqC8i

15:55-17:00
Winmostarによる計算材料科学 ハンズオン
量子化学計算・第一原理計算・汎用機械学習力場を対象に

Winmostarの概要紹介に続き、MOPAC GUIを用いた量子化学計算、Quantum ESPRESSO GUIを用いた第一原理計算（結晶・スラブ）を実習形式で体験します。その他LAMMPSおよびLAMMPSを介したMLFF計算についても手順を紹介します。

課題 2026/10/6

課題：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

1. ポテンシャルが一様の独立な理想気体の場合、空間の対称性、独立性から導出される。
この条件から、統計分布関数は、独立変数の和が関数の積になる関数であることが要請される。

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

この条件、および、確率密度関数となる関数は指数関数のみだから

2. **全エネルギーが一定の制約条件により、指数関数が導出される**
=> 数学的根拠は正準理論で説明する

質問

Q: Maxwellの速度分布関数の導出過程について疑問。

この関係式は「$v^2 = \xi + \eta + \zeta$」と定義しています。しかし、この条件式より、ξ と η の値が決まれば自動的に ζ の値も決まってしまうため、各成分はもはや独立ではないのではないのか。それにもかかわらず、「各方向の速度は独立だから分布関数の積になる」という前提をそのまま用いて方程式を立てている点に、論理的な矛盾があるように感じられた。

A: $v^2 = \xi + \eta + \zeta$ は変数の制約ではなく、(v_x, v_y, v_z) を 極座標 (v, θ, φ) に変換している。変数の自由度は3で、変わらないので、$\xi = v_x^2$, $\eta = v_y^2$ が決まっても、$\zeta = v_z^2$ は任意に選ぶことができる (ただし、v^2の値は決定する)。

$f(v_x, v_y, v_z)$は、$f(v, \theta, \varphi)$ と書き換えられるが、回転対称性から θ, φ には依存しないことを明記するため、$f(v)$ と書いている。変数が明示されていないだけで、f は3つの独立変数の関数

生成AI (Gemini Notebook) への質問

この疑問をnotebooklmに問いかけた回答:

左辺（回転対称性・等方性）の要請： $x_i + \eta + \zeta = C$（一定）を満たすように各成分の組み合わせをどのように変えても、和（v^2）が同じであれば左辺 $f(C)$ は必ず同じ定数（一定値）になる。

右辺（各成分の独立性）の要請： 各軸方向の運動は独立なので、同時確率は確率の積の形 $a^{-6}f(x_i)f(\eta)\ f(\zeta)$ で表されなければならない。

つまり、この式は「変数の和 $x_i + \eta + \zeta = C$ が一定であるようなすべての点（球表面上）において、関数の積 $f(x_i)f(\eta)f(\zeta)$ も一定（定数）にならなければならない」という非常に強力な条件を意味しています。」

との回答を得たが、いまだ理解しかねる。

A: 私も、この回答は意味不明。学習資料や講義資料にはない変数 x_i や定数 C が現れているので、Notebookへ投入したプロンプトが「変数の和が定数」という誤ったバイアスを与えている可能性がある（プロンプトバイアス）。

　生成AIの回答を書くときには、プロンプトもコピーしてくれると、より適切な判断ができる

生成AI (Gemini Notebook) への質問: 神谷の結果

Q: 以下は、統計力学のMaxwellの速度分布を導出する際の講義資料です。でも、最後に$v^2=〚vx〛^2+〚vy〛^2+〚vz〛^2$としているので、vx,vy,vzが独立でありません。それなのに、この後、これら変数が独立であるかのように偏微分します。おかしくないですか？

#講義資料

系: 1種類, N個の単原子分子理想気体。分子間に相互作用、エネルギー交換は無い

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

仮定1: 独立性: 分子の3方向 (vx, vy, vz) の速度成分は互いに独立

独立事象の確率: $f(vx, vy, vz)=g(vx)g'(vy)g''(vz)$ (3.6')

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

$g(v)=g'(v)=g''(v)$ (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, $〚vx〛^2$, $〚vy〛^2$, $〚vz〛^2$で表す。

$f(v^2=〚vx〛^2+〚vy〛^2+〚vz〛^2)=g(〚vx〛^2)g(〚vy〛^2)g(〚vz〛^2)$ (3.7')

生成AI (Gemini Notebook) への質問: 神谷の結果

回答:

結論から申し上げますと、この微分操作は**数学的にも物理的にも完全に正当であり、おかしくありません。**
違和感を覚えられた原因は、式 $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ を**「 v が一定値に固定されているという束縛条件（制約式）」**と捉えてしまっている点にあります1。
この論理展開が妥当である理由を、以下の3つのポイントで整理できます。

1. v_x, v_y, v_z は完全に独立な3つの変数（座標）
3次元の速度空間において、分子の速度成分 (v_x, v_y, v_z) は**互いに独立な3つの直交座標軸の値**です23。ある分子の v_x がどんな値であっても、v_y や v_z は自由な値をとることができます。したがって、v_x, v_y, v_z の間に何らかの従属関係（1つを決めたら他方が決まる関係）は存在しません2。
2. $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ は「制約」ではなく「関数の依存性」を表す
「回転対称性（仮定2）」が意味しているのは、**「確率密度 f の値は、ベクトルの向き（$¥theta, ¥phi$）には依存せず、原点からの距離の2乗 v^2 だけの関数になる」**ということです23。

---以下、延々と続く

質問

Q: 次回の話で「分子間の相互作用は無視するが、粒子間でエネルギーをやり取りする」の仮定はどういう意味、どういう状態か？

A: Maxwell-Boltzmann分布の導出では、以下のようにモデル化する

- 理想気体の系を考える。各分子の相互作用は無視できる。

  1粒子のエネルギー: $e_i = \frac{1}{2}mv_i^2 + U_{ext}(r_i) + \sum_{j,k,\cdots \neq i} U_{i,j,k\cdots}(\{r_i\})$

  一般的な系の全エネルギー: $E_{tot} = \sum_i \frac{1}{2}mv_i^2 + \sum_i U_{ext}(r_i) + \frac{1}{2}\sum_{i,j,k\cdots} U_{i,j,k\cdots}(\{r_i\})$

  この場合、$E_{tot} \neq \sum_i e_i$

  相互作用 $U_{i,j,k\cdots}(\{r_i\})$ を無視できると、$E_{tot} \cong \sum_i e_i$ として扱うことができ、解を求めることが簡単になる

- 粒子間でエネルギーをやり取りする

  完全に相互作用がなく、異なる粒子間でエネルギーの交換ができないと、初期状態のエネルギー分布から変化することがない => 平衡状態に到達できない

  そのため、無視できる相互作用 (粒子同士のごく短時間の衝突) により

  エネルギーが交換でき、エネルギー分布を変えられる過程を導入する必要がある

生成AIへ質問した回答の学生の要約

Claude Opusによる回答の要約

系の全エネルギーのうちほとんどは運動エネルギーの形で蓄えられており、
ポテンシャルエネルギー (神谷注: 相互作用エネルギーのほうが正確) が全エネルギー (神谷注: の平均) に占める割合は非常に少ないので、量としては無視できる。
しかし短く強い衝突として頻繁に働き、粒子間でエネルギーを再分配して系を熱平衡に導いているため、その存在は (神谷注: エネルギー分布を変えて平衡に到達するために) 必要。

解説:

私がOpus, ChatGPT Terraに同じ質問をした結果、どちらも、前ページの私の回答と同じことを、数式入りで回答しています。

つまり、上の要約は、正しい回答を要約していると思われます (前ページの私の回答と青字部分は対応しています)。

しかし、物理学のモデル化 (仮定) の要約としては、要点が絞れていないので、意味があいまいになっている

物理学とは

現代物理学とは、「自然現象を数学で記述する学問」

- 現実の現象を 簡単化 (モデル化) するため、仮定が必要
- 自然言語で仮定が記述されている場合、それは数式あるいは数学の表現により置き換えられている

物理の問題を要約する際の要点:

1. 仮定は何か
2. 仮定はどのような数式 (数学) で表現されているか
3. その仮定はなぜ必要か

を含むように要約してみましょう

生成AIに要約させた結果

Q: 数行で要約してください

相互作用を無視するとは、平衡状態のエネルギーを

$$E \simeq \sum_i \frac{p_i^2}{2m}$$

と近似するという意味です。
ただし平衡に至る過程では、分子は短距離で衝突し、その瞬間の相互作用でエネルギーを交換します。完全に相互作用がゼロなら速度は変化せず、Maxwell–Boltzmann 分布へ緩和しません。

↑生成AIの要約が要点を得ているからと言って、
生成AIで要約することを奨めるわけではありません

今回の生成AIの使い方は理想的です。

1. まず自分で考える
2. 生成AIに質問する
3. 先生に聞いて確認する

自分で生成AIに要約させて比較してみるのもよいトレーニングになりますが、
自分の要約とAIの要約が、何が違うかを考え、理解するようにしましょう

生成AIに質問

Q: 生成AIで「分布関数が指数関数形を取る理由を、数式的理解でなく、視覚的な理解で数行で示して

回答:
縦軸: そこに存在する「粒子の数（または確率）」
横軸: 「エネルギーの高さ」、「経過時間」
横に進むということは、同じ難易度のハードルをもう1度とび越えることなので、指数関数を得る概形となる

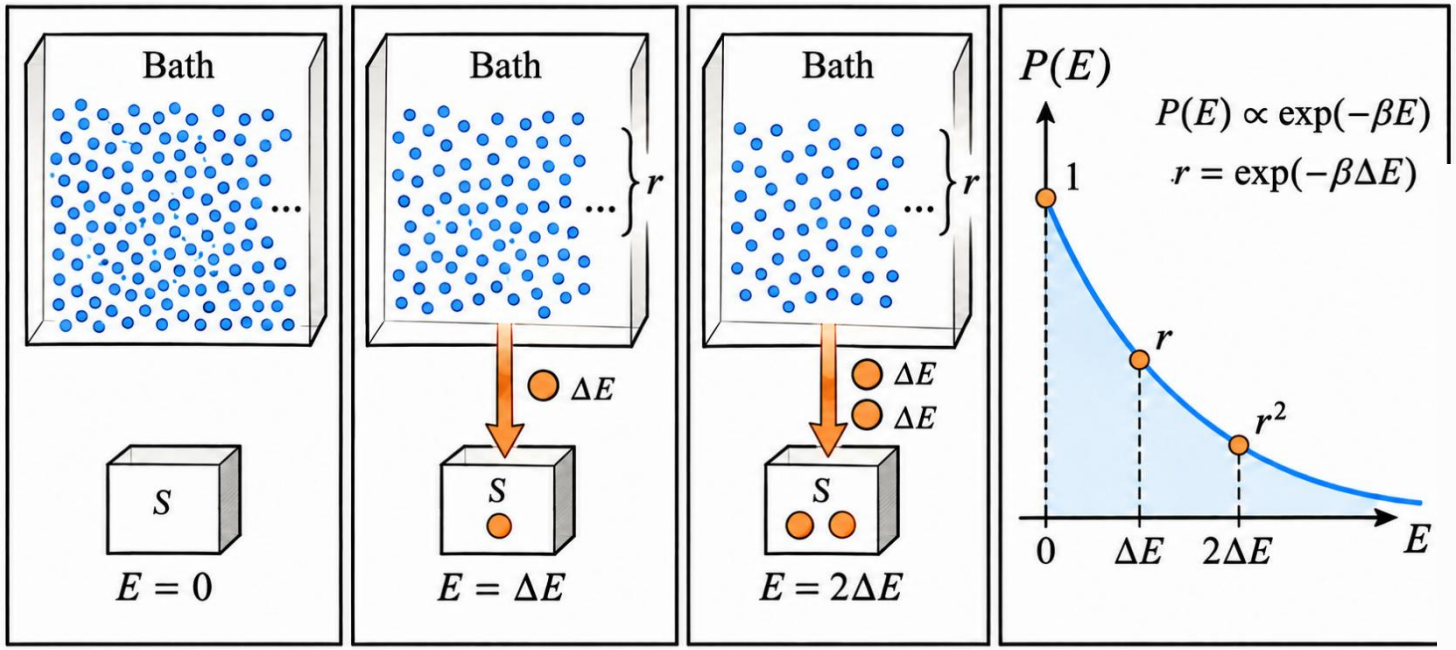
視覚的な理解でと書いたのでグラフをイメージする回答になっている。
意訳すると、エネルギーが高くなるためには、エネルギーを獲得するハードルを何度も超えるため、ハードルを越える確率を r とすると、r^n の確率になる と言いたいと解釈できる

　1つの説明の仕方だとは思うが、エネルギーが低い状態が現れやすいことを説明しようとするとランダムウォーク過程が必要。また、このモデル化だと、指数分布ではなく正規分布になる

生成AIに質問: 神谷バージョン

Q:分布関数が指数関数形を取る理由を、数式的理解でなく、視覚的に漫画で説明して

回答:



この漫画の読み方です。

小系 S が ΔE を得るたび、熱浴 Bath のエネルギーは ΔE 減ります。大きな熱浴では、そのとき熱浴が取り得る微視的状態数は、エネルギーを一刻み失うごとにほぼ同じ比 $r < 1$ 倍になります。

$$P(0) : P(\Delta E) : P(2\Delta E) : \cdots \simeq 1 : r : r^2 : \cdots$$

したがって、$E = n\Delta E$ と書けば

$$P(E) \propto r^n = \left(e^{-\beta \Delta E}\right)^{E/\Delta E} = e^{-\beta E}.$$

ポイントは、「エネルギーを得るたびに同じ難関を突破する」からではありません。小系が高いエネルギーを取るほど、残された熱浴が実現できる微視的状態が一定比で減るため、その状態全体の数、すなわち確率が等比級数になります。

厳密には「熱浴が十分大きく、ΔE がその全エネルギーに比べて小さい」範囲で比 r をほぼ一定と見なしています。

最近流行ってるらしい: アムロの倒し方を教えて

回答:

MS365 Copilot: 正面からモビルスーツ戦で挑むのは悪手です。
長距離からの飽和攻撃　情報戦・心理戦　補給や作戦面で優位を作る　複数のエースによる同時攻撃
ララァ級のニュータイプをぶつける　そもそも戦わない

ChatGPT6 Terra: 正面からの一騎打ちは避けるのが基本です。ニュータイプの反応・予測能力が強いので、複数方向からの攪乱、長距離の飽和攻撃、地形や任務目標を使った時間制限で優位を作る——というのがシャア側の定石でしょう。

Gemini Pro: アムロ・レイを打ち倒すのは、おそらく最も困難で絶望的なミッションの一つです。

1. モビルスーツに乗せない（政治的隔離）
2. 徹底的な精神攻撃（トラウマの刺激）
3. 未知の兵器による「完全な初見殺し」
4. 生身での白兵戦に持ち込む

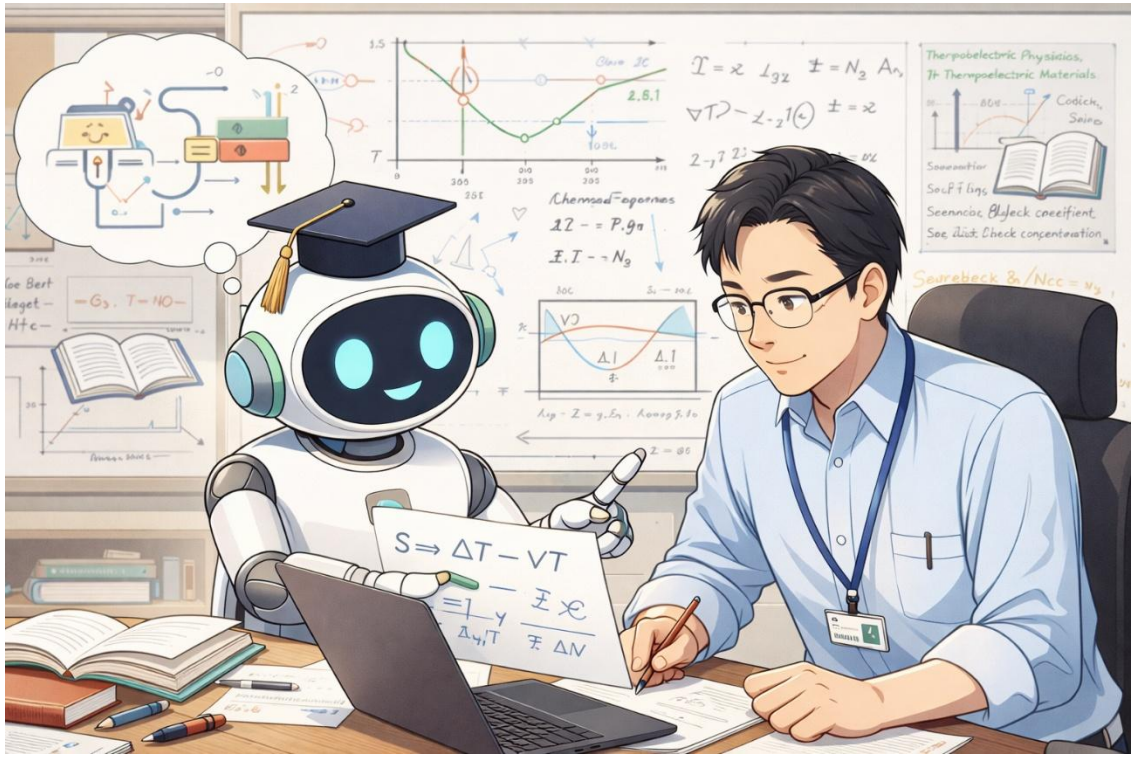
Claude Sonnet: 「アムロ」はガンダムシリーズのアムロ・レイのことだと思いますが、どの作品・ゲームかで答えが変わります。たぶんゲームの話だと思うので、よくあるパターンで答えますね。

私の今までのChatGPTさんの扱いがどんなものであったか、絵で表現してください

以前



生成AIと物理理論について議論した際、
生成AIが間違っていると主張したが、
結局AIが正しいことが判明した後



生成AIとの付き合い方も変わっていく

過信しない、が、否定もしない

適切な検証を重ねながら、効率的に仕事を進める方法を作る

課題 2026/10/13

- **回答期限: 10/14 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: 以下の問いに答えよ

(i) N個の粒子を3つの状態 (s1, s2, s3) にそれぞれ (n1,n2,n3)個ずつ 割り当てる場合の数 (配置数) Wを表せ。ここでは粒子は区別できるとして数えます

(ii) (s1, s2, s3) の各準位のエネルギーを (0, ε, 2ε) とする。系の全エネルギーを0.8Nεとし、全粒子数と全エネルギーの制約条件のもとで、Stirlingの近似とLagrangeの未定乗数法をもちいてWを最大化するn1, n2, n3を求めよ

(iii) (ii) で得た最確分布を Boltzmann 分布と比較し、系の温度 T を ε と k_B を用いて表せ。

課題２: 質問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　古典統計力学: Boltzmann分布

第2部　古典統計力学の応用と問題

目標

1. 微視的状態の配置数 W を、全エネルギー一定の条件で最大化すると、指数分布が出てくることを理解する
   - 時間依存の運動方程式は必要ない
   - エネルギーの式だけ使う
2. 古典統計力学にはいくつか問題がある
   - 和=>積分変換の際の体積が不定
   - 同種粒子を区別できないという、人為的な仮定が必要
   - 低温の比熱の温度依存性を説明できない