**統計力学入門：ミクロな世界からマクロな現象を読み解く**

**第1部：統計力学と熱力学の関係**

皆さん、こんにちは！今日から「統計力学入門」の講義を始めます。材料工学科の皆さんにとって、材料の性質を理解する上で、原子や分子といったミクロな世界で何が起きているかを知ることは非常に重要です。

熱力学は、高校の物理でも習ったように、温度、圧力、体積といった**マクロな量**の関係を扱う学問です。例えば、「熱を加えると気体は膨張する」といった現象を扱いますね。しかし、熱力学は「なぜ」そうなるのか、その根本的な理由までは教えてくれません。

一方、**統計力学は、無数の原子や分子（ミクロな世界）の運動を統計的に扱うことで、熱力学で扱うマクロな量を説明しよう**という学問です。

イメージとしては、あるクラス全員の身長を測るとき、クラス全員（ミクロ）の身長を一人ずつ調べるのではなく、その平均値や分布（マクロ）から、そのクラスの身長の傾向を推測するようなものです。

材料の中には、1立方センチメートルあたり$10^{23}$個もの原子や分子が含まれています。これら一つ一つの運動を追うことは不可能です。そこで、統計的な手法を用いることで、この莫大な数の粒子が集まったときに生じる振る舞いを理解しようとするのが統計力学の役割です。

**第2部：統計力学の考え方**

**1. 状態の数：Ω（オメガ）**

統計力学の最も基本的な考え方は、\*\*「あるエネルギーEを持つ系の取りうる状態の数」\*\*を数えることです。この数を$\Omega$（オメガ）と書きます。

例えば、サイコロを2つ振ったとき、出目の合計が4になる組み合わせは、(1,3), (2,2), (3,1) の3通りですね。この場合の$\Omega$は3になります。

**2. エントロピー：S**

熱力学の概念である\*\*エントロピーS\*\*は、**乱雑さや無秩序さの度合い**を示す量として知られています。統計力学では、このエントロピーを$\Omega$を用いて定義します。

S=kB​lnΩ

ここで、kB​は**ボルツマン定数**と呼ばれる定数です。この式は、\*\*「状態の数$\Omegaが多いほど、エントロピーS$は大きい」\*\*ことを意味します。つまり、より多くの状態を取りうる系ほど、より「乱雑」であると考えることができます。

例えば、氷（規則的な結晶構造）が融けて水（不規則な液体）になると、原子の配置の自由度が格段に増えます。このため、水は氷よりも$\Omega$が大きく、エントロピーも高くなります。

**3. 熱平衡状態**

なぜ熱は温度の高い方から低い方へ流れるのでしょうか？これも統計力学で説明できます。

熱平衡状態とは、**系が最も安定した状態**です。統計力学的には、**系が取りうる状態の数$\Omega$が最大となる状態**が熱平衡状態です。

例えば、お湯と冷水を混ぜるとぬるま湯になりますね。お湯の分子は速く、冷水の分子は遅く動いています。この2つの分子集団が混ざり合うことで、それぞれの分子が取りうる速度や位置の組み合わせ（Ω）が、混ぜる前よりも圧倒的に増えます。つまり、系全体のエントロピーが最大になるように変化しているのです。

この「エントロピー増大の法則」は、宇宙全体でも成り立っていると考えられており、宇宙の\*\*「時間の矢」\*\*の方向を決定しているという壮大な話にもつながります。

**第3部：統計分布関数**

無数の粒子のうち、ある一つの粒子に注目したとき、その粒子があるエネルギーを持つ確率はどうなるでしょうか？これを表すのが**統計分布関数**です。

**1. マクスウェル-ボルツマン分布**

これは、**気体分子の速度分布**を表す最も有名な分布です。ある温度Tの気体分子は、すべての分子が同じ速度で動いているわけではありません。分子の速度は様々な値を取りますが、その分布は温度に依存します。

温度が高くなると、分布のピークはより高速側に移動し、全体として分子の平均速度が上がります。これが「温度を上げると分子の運動が活発になる」という熱力学的な事実を、ミクロな視点から説明するものです。

**2. ボルツマン分布**

ボルツマン分布は、\*\*「あるエネルギーEを持つ状態に粒子が存在する確率」\*\*を表します。

P(E)∝e−E/kB​T

この式から、次のことがわかります。

* **Eが大きい（エネルギーが高い）状態ほど、存在する確率は低くなる**
* **Tが高い（温度が高い）ほど、エネルギーの高い状態にも粒子が存在しやすくなる**

これは非常に直感的ですね。エネルギーの高い状態は不安定なので、粒子はあまり存在しません。しかし、温度を上げて外部からエネルギーを与えると、エネルギーの高い状態にも粒子が励起されやすくなります。

このボルツマン分布は、半導体の電子の振る舞いを理解する上で非常に重要です。半導体中の電子は、この分布に従ってエネルギー準位を占有しています。

**第4部：応用**

統計力学は、材料科学の様々な分野で応用されています。

* **電子の振る舞い**：金属や半導体中の電子のエネルギー分布を理解することで、電気伝導性や半導体の性質を説明できます。
* **相転移**：固体、液体、気体といった物質の状態変化（相転移）は、統計力学を用いることで、ミクロな相互作用から説明することができます。
* **ポリマー（高分子）**：ポリマーの鎖の形がなぜランダムにねじれているのか、その構造を統計的に理解することで、ゴムの弾性などの性質を説明できます。

今日の講義で、ミクロな粒子の振る舞いを統計的に考えることで、マクロな材料の性質が驚くほど明快に説明できることを感じてもらえたら嬉しいです。皆さんが学ぶ材料の性質の根底には、いつもこの統計力学的な考え方があることを覚えておいてください。