統計力学と熱力学：材料工学への応用

材料工学科2年生のための100分講義ノート

# 1. 導入：統計力学と熱力学の役割、材料工学との関連

みなさん、こんにちは！今日は「統計力学」と「熱力学」の関係、そしてそれらが材料工学にどう応用されているかを一緒に学びましょう。

まず、「熱力学」とは、私たちが日常で感じる温度や熱、エネルギーの流れを扱う学問です。例えば、冷蔵庫が食材を冷やす仕組み、スマートフォンが熱くなる理由も熱力学で説明できます。

一方、「統計力学」は、物質の微視的な構成要素（原子や分子）がどのように振る舞うかを統計的に考えることで、熱力学的な性質を導く学問です。

材料工学では、ナノ材料の性質、半導体の動作、磁性体の振る舞いなど、統計力学の考え方が不可欠です。例えば、グラフェンのような新しい材料の特性は、ミクロな粒子の動きを理解することで明らかになります。

* 身近な例：アイスクリームが溶けるのはなぜ？
* 最新話題：量子ドットやナノ粒子の温度制御技術

# 2. 統計力学と熱力学の関係

## 2.1 熱力学のマクロ的視点

熱力学では、物質を「巨視的（マクロ）」に捉えます。例えば、1Lの水の温度や圧力、エネルギーなどは、個々の分子の動きを気にしなくても測定できます。

代表的な状態量：

* 内部エネルギー（U）
* エントロピー（S）
* 温度（T）
* 圧力（P）

## 2.2 統計力学のミクロ的視点

一方、統計力学は「微視的（ミクロ）」な粒子の状態を考えます。例えば、水分子1つ1つの運動やエネルギー分布を統計的に扱い、全体としての性質（マクロ状態）を導きます。

この関係を数式で表すと、エントロピーは次のようになります：

S = k\_B \ln \Omega

ここで、Sはエントロピー、kBはボルツマン定数、Ωは可能なミクロ状態の数です。

つまり、多くのミクロ状態が存在するほどエントロピーが高くなります。

また、エネルギーの分布や、粒子の配置からマクロな性質（温度・圧力など）を導くことができます。

# 3. 統計力学の基本概念

## 3.1 ミクロ状態とマクロ状態

「ミクロ状態」とは、すべての粒子の位置や運動量などの詳細な状態を指します。

「マクロ状態」とは、温度や圧力など、私たちが観測できる巨視的な性質です。

統計力学では、ミクロ状態の集まり（Ω）からマクロ状態の性質を計算します。

## 3.2 ボルツマン分布

エネルギーEを持つ状態の粒子数N(E)は、温度Tで次のような分布になります：

N(E) = N\_0 \exp\left(-\frac{E}{k\_B T}\right)

これは「ボルツマン分布」と呼ばれ、高いエネルギーの状態ほど粒子数が減少することを意味します。

この分布は、原子や分子の運動、材料中の電子の振る舞いにも応用されます。

## 3.3 分配関数の導入

統計力学の計算の基礎となるのが「分配関数（Z）」です。分配関数は、すべてのミクロ状態の重み付き合計を表します。

Z = \sum\_i \exp\left(-\frac{E\_i}{k\_B T}\right)

分配関数を使うことで、エネルギー、エントロピー、比熱などの熱力学的性質を計算できます。

# 4. 統計分布関数の種類と数式

統計力学では、粒子の性質によって分布関数が異なります。主な分布関数は以下の3つです。

## 4.1 ボルツマン分布（古典粒子）

エネルギーEの状態にある粒子の数：

f\_B(E) = \exp\left(-\frac{E}{k\_B T}\right)

古典的な分子や原子に適用されます。

## 4.2 フェルミ・ディラック分布（フェルミ粒子：電子など）

電子などの「フェルミ粒子」には、パウリの排他原理が働き、同じ状態に2つ以上入れません。

f\_F(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k\_B T}\right)+1}

ここでμは化学ポテンシャルです。半導体や金属の電子分布に重要です。

## 4.3 ボース・アインシュタイン分布（ボース粒子：フォノン、光子など）

フォノン（格子振動）や光子などの「ボース粒子」には、複数の粒子が同じ状態に入ることができます。

f\_B(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k\_B T}\right)-1}

超伝導やレーザー現象などで重要な役割を果たします。

## 4.4 分布関数のグラフ例

下の図は、各分布関数のエネルギー依存性を示しています（講義時に板書やスライドで図示）。

* ボルツマン分布：高エネルギーほど急激に減少
* フェルミ・ディラック分布：低温では急激なステップ状
* ボース・アインシュタイン分布：低エネルギーで発散的

# 5. 材料分野への応用例

## 5.1 比熱の説明と応用

比熱（C）は、物質1gを1Kだけ温度を上げるのに必要な熱量です。

統計力学では、比熱の温度依存性を説明できます。

例えば、デバイモデルでは、固体の格子振動（フォノン）が比熱に寄与することを次式で示します：

C = 9 N k\_B \left(\frac{T}{\theta\_D}\right)^3 \int\_0^{\theta\_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x -1)^2} dx

この理論で、低温で比熱がT³に比例する理由が分かります。

## 5.2 磁性体の統計力学

磁性体では、電子スピンの統計分布が磁化の温度依存性を決めます。

例えば、強磁性体の磁化は、ボルツマン分布に従って温度で減少します。

また、最近ではナノ磁性体やスピントロニクス材料など、統計力学の応用範囲が拡大しています。

## 5.3 半導体・ナノ材料の電子分布

半導体中の電子や正孔の分布はフェルミ・ディラック分布で記述されます。

ナノ構造体では、量子効果が顕著になり、統計力学的な取り扱いが重要です。

例えば、量子ドットでは電子のエネルギー準位が離散化し、分布関数が材料の発光特性に影響を与えます。

## 5.4 学生が興味を持ちそうな最新研究や話題

* ナノ材料の熱伝導率制御技術
* 量子コンピュータの材料設計と統計力学
* 新型磁性材料による省エネデバイス

これらの分野では、統計力学の考え方が新しい材料開発の基盤となっています。

# 6. まとめと質疑応答

## 6.1 本日のポイント整理

* 熱力学は巨視的、統計力学は微視的な視点
* エントロピーやエネルギーの数式的理解
* 分布関数（ボルツマン、フェルミ・ディラック、ボース・アインシュタイン）
* 比熱、磁性体、半導体、ナノ材料への応用例

## 6.2 学生への問いかけ

* もしナノ材料の温度制御が自由自在になったら、どんな新しい製品が生まれるでしょうか？
* 統計力学の考え方は、他の分野（生物学、情報科学など）にも応用できると思いますか？

## 6.3 今後の学習への動機付け

統計力学と熱力学の知識は、材料開発の最前線で活躍するために欠かせません。

今日の講義をきっかけに、ぜひ最新の研究や技術にも興味を持ってみてください。

質問があれば、ぜひ積極的に発言してください！