# 2023統計力学(C)-02-Maxewllの速度分布.pptx

## Slide 1 — 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
* 講義資料
* http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/StatisticsC/index.html

## Slide 2 — 講義予定　MAT.C203 火・金 15:25~17:05

* 授業期間 10月3日(木)～11月21日(木), 11月23日(土),11月25日(月)～11月27日(水)
* 10月17日(木)　月曜の授業を行う　10月23日(水)　入学式のため授業休み　11月2日(土)～5日(火)　大学祭(準備・片付け含む)のため授業休み
* 11月23日(土)（祝日)　土曜の授業を行う　11月22日(金),11月28日(木)～12月5日(木)　期末試験・補講　※11月29日(金),12月5日(木)は週１回科目の予備日
* 第01回 10/4 熱力学の復習 (神谷)
* 第02回 10/8 気体分子運動論 Maxwell分布 (神谷)
* 第03回 10/11 Maxwell分布、古典統計力学の基礎 I (位相空間) (神谷)
* 第04回 10/15 古典統計力学の基礎 II
* (微視的状態の数、エルゴード仮説、Boltzmann分布) (神谷)
* 第05回 10/18 (Zoom予定)正準理論、量子統計力学における等確率の原理 (神谷)
* 第06回 10/22 大正準理論、量子統計力学の基礎 (神谷)
* 第07回 10/25 量子統計力学の基礎、古典統計力学の応用と問題 (神谷)
* 第08回 10/29 　統計分布の復習 (伊澤)
* 第09回 11/1 固体の比熱 (伊澤)
* 授業休み　11/5 (大学祭片付け)
* 第10回 11/8 理想Bose気体、光子と熱輻射 (伊澤)
* 第11回 11/12 理想Fermi期待、金属中の電子 (伊澤)
* 第12回 11/15 半導体中の電子、Fermi準位、ドーピング (伊澤)
* 第13回 11/19 相転移 (伊澤)
* 第14回 11/26 復習（統計力学全般） (神谷)
* 第15回 12/3 試験

## Slide 3 — 課題 2023/10/3

* 課題： Legendre変換と自由エネルギーの
* 関係について述べよ
* 数行程度の説明でよい

## Slide 4 — 熱力学の独立変数

* 変数: p, V, T, ni の４種類 (E, Bなどはここでは考慮しない)
* 束縛条件: f (p, V, T, ni) = 0
* 物質ごとに決まっている状態方程式
* ＝＞独立変数は３種類
* 以下、ni は変化しない場合を考える
* ・ 独立変数は (p, V, T) のうち ２つ
* 残りの１つは他の２変数の関数
* ・ どの変数の組を選べばよいか？
* ＊ 問題を解くのに便利な組を選ぶことができる

## Slide 5 — 独立変数と関数

**Equations**

## Slide 6 — Legendre変換の特性

* 問題を解くのに便利な独立変数をもつ関数を選べる

**Equations**

## Slide 7 — Legendre変換の例: U => F

**Equations**

## Slide 8 — 熱力学関数のLegendre変換

**Equations**

## Slide 9 — 質問 2023/10/3

* Q: 現実世界では、限りなく可逆過程に近い減少は起こりうるのか
* A: 振り子
* スターリングエンジン (カルノーサイクルに最も近い)
* など、エネルギー散逸がない現象は可逆過程である場合がある
* ただし、厳密に可逆過程だと、
* 観測すら許されない・仕事を取り出すこともできない
* 第１種永久機関
* 外部からエネルギーを与えることなくエネルギーを取り出せる機関
* 熱力学第一法則を破る
* 第２種永久機関
* 外部からエネルギーを与えることも外部にエネルギーを与えることもなく
* 動く機関
* 熱力学第一法則は破らない
* エントロピーが増える過程があれば、第二法則により実現不可
* 現在まで、第２種永久機関と認められたものはない

## Slide 10 — 質問 2023/10/3

* Q: 表記ゆれ (ヘルムホルツエネルギーのF, や、dqやδqなど) を
* テストではどのように扱うか
* A: 定義して使ってください
* Q: 「講義中に行う演習および期末試験の評価の割合は？
* A: 演習＝＞レポートに修正。評価の詳細は未公表
* Q: 熱力学第二法則によって、過去に行けないことがわかると
* いっていたが、そのほかに熱力学第二法則からわかる
* 面白い事象はありますか？
* Q: 未来に行けることはありますか？

## Slide 11 — 課題 2023/10/6

* 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： T2SCHOLAR
* 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(日) 23:59:59

## Slide 12 — 統計力学

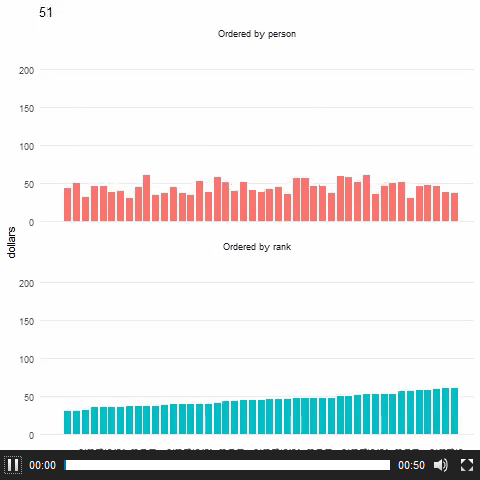
* 微視理論から多粒子のマクロ状態を統計的に説明する
  1. 自由エネルギー U, H, F, G を微視理論で表現する
* 物性を計算できる
  1. 自由エネルギー U, H, F, G を巨視変数 T, P, V, S で表現する
* 熱力学と対応させられる
* 問題と解決方法
* 全ての粒子に関する運動方程式を解く
* NA ~ 1023 個の粒子の方程式を正確に解くことはできない
* 個々の粒子の運動を理解することはあきらめ、
* 統計的に取り扱う

## Slide 13 — 統計力学

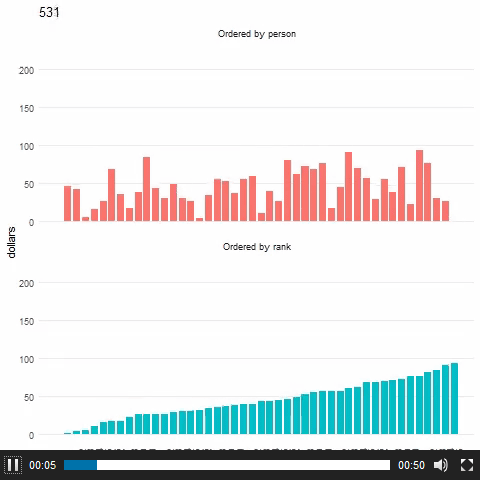
**Equations**

## Slide 14 — 「100人を部屋に集めてお金をランダムな相手に渡し続ける」とだんだんと貧富の差が生まれる

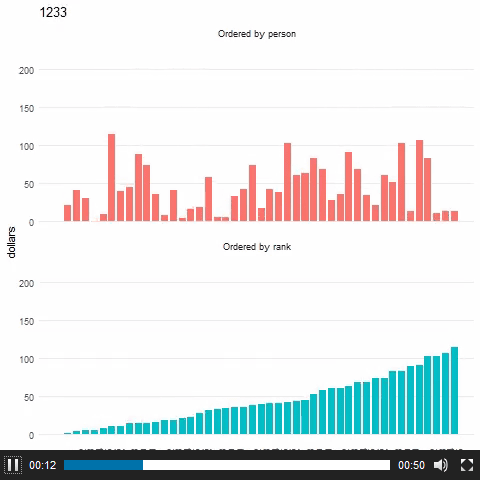
* 100ドルを持った100人を1つの部屋に集めて、それぞれ無作為に選ばれた人に1ドルを渡したらどうなるか。
* ＝＞ お金を渡す機会が増えれば増えるほど偏り、つまりは貧富の差が生まれる。
* 2017/9/11 Gigazine
* http://gigazine.net/news/20170711-random-people-give-money-to-random-other-people/
* ５１回
* １２３３回
* ４９４４回
* $45を持った45人でスタートした例:



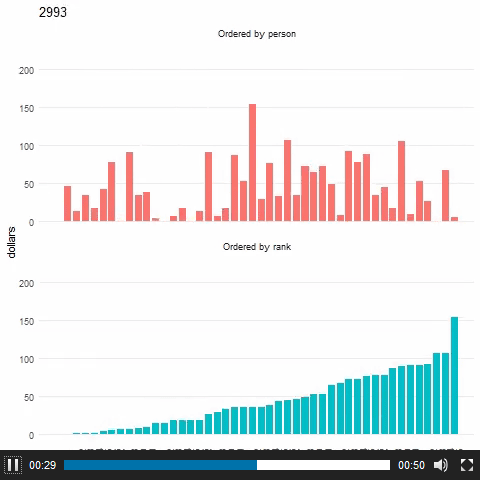
Embedded



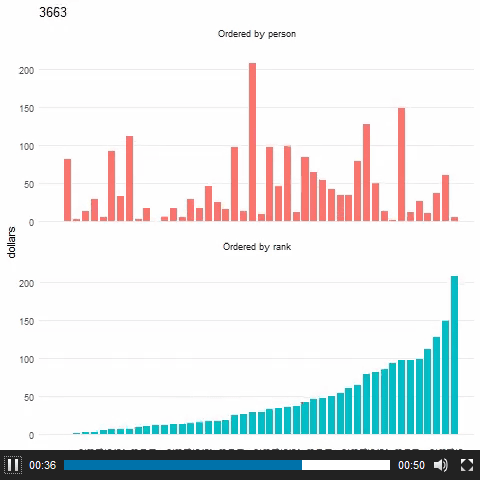
Embedded



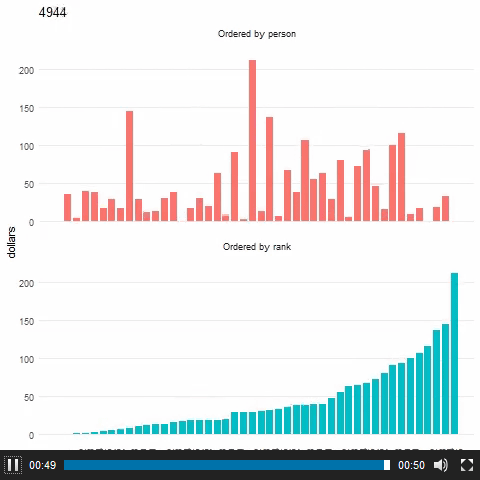
Embedded



Embedded



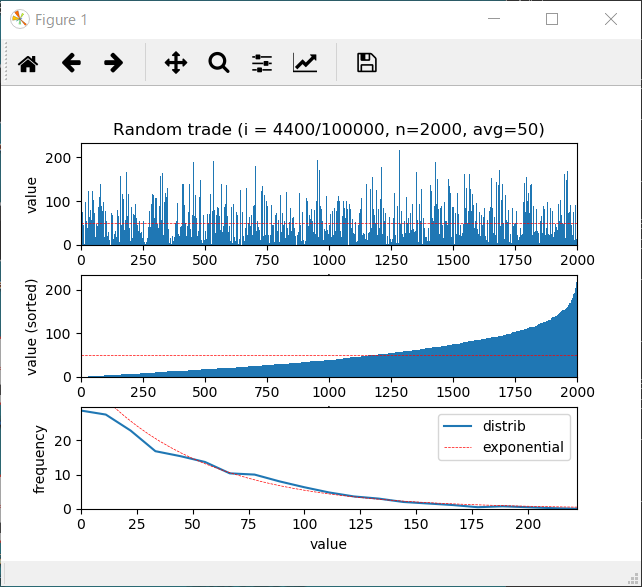
Embedded



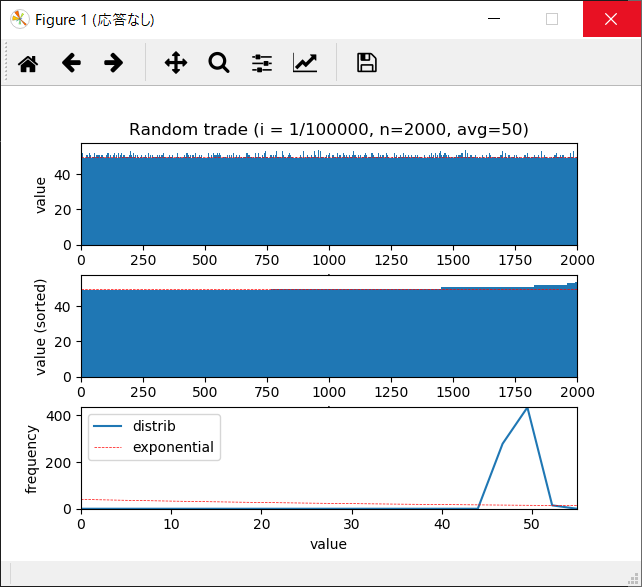
Embedded

## Slide 15 — 「100人を部屋に集めてお金をランダムな相手に渡し続ける」とだんだんと貧富の差が生まれる

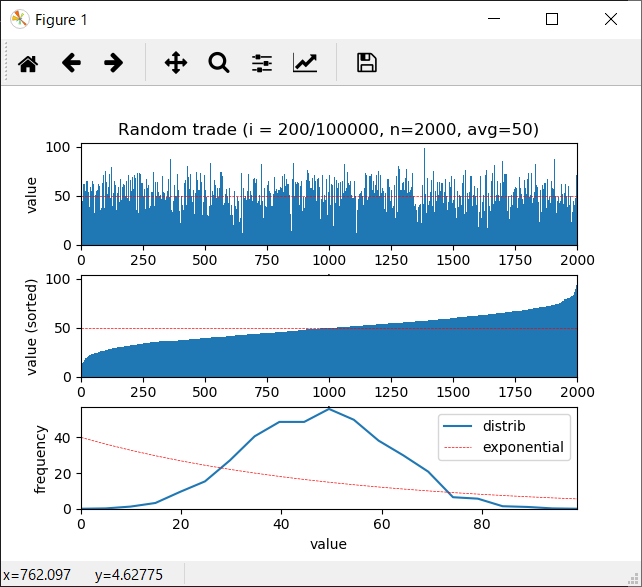
* Pythonプログラム: randomtrade.py
* http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/StatisticsC/index.html
* pythonのインストール (英語):
* http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/python/InstallPython/InstallPython.html
* 使い方: 引数無しで python randomtrade.py を実行すると、Usageを表示
* python randomtrade.py npersons value(average) vtrade n(maxiteration) 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npersons、
* 平均所有額 m が value(average)になる
* 指数関数分布曲線 f(m) = Aexp(-bm)
* b = 1 /
* A = Nb
* 右図は、4400回の交換サイクル終了時の結果
* Frequency / dollar



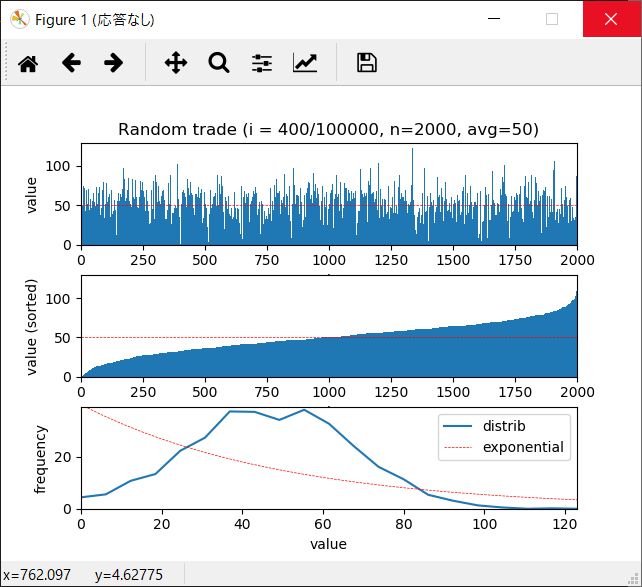
Embedded



Embedded



Embedded



Embedded

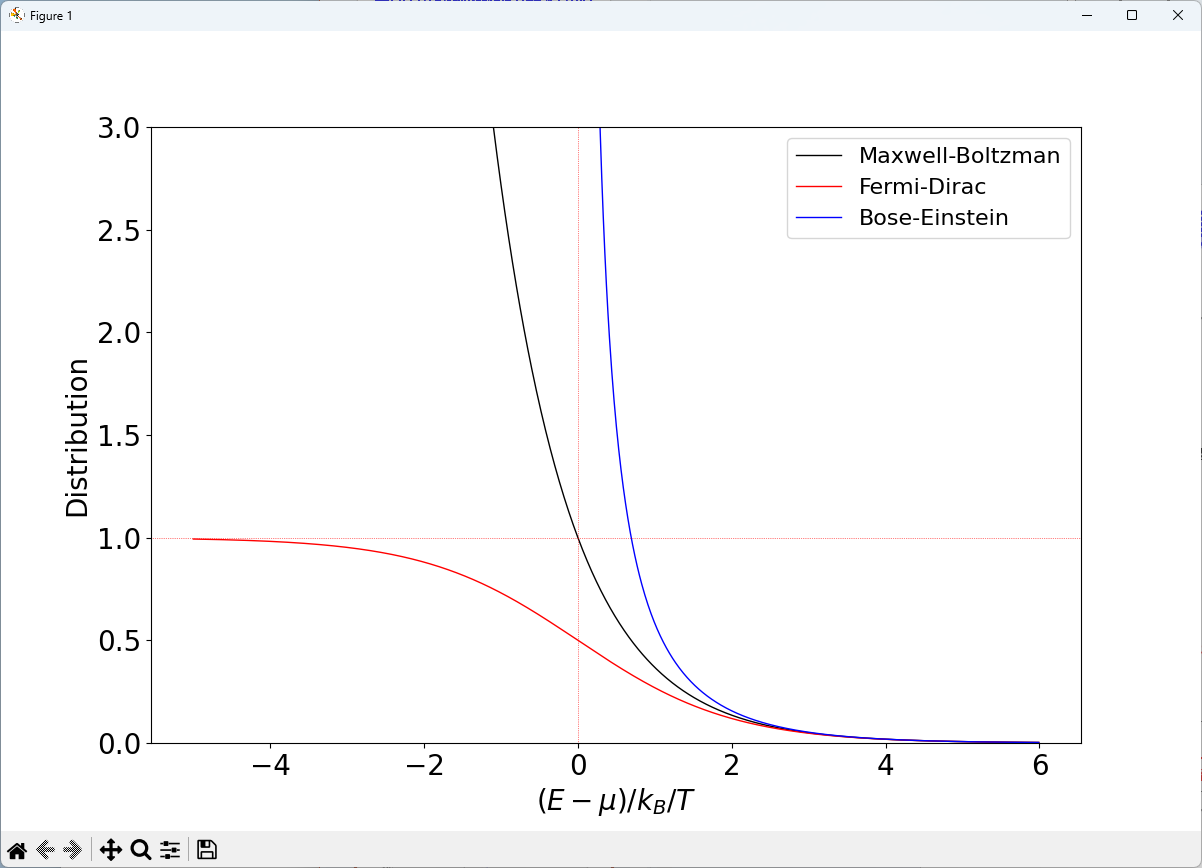
## Slide 16 — 物質中の粒子も同じ: Boltzmann分布

* 「N 人が全財産 Mtot 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？」
* 「N 個の粒子が全エネルギー Etot 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？」
* 温度 T は エネルギー平均 と等価： = kBT
* 「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？」
* エネルギー E を持つ比率
* エネルギー E (電子ボルト)

**Equations**

## Slide 17 — 【重要】　統計分布関数: 前半で一番重要なこと

**Equations**



Embedded

## Slide 18 — 統計分布関数を異なる考え方で順次導出していく

**Equations**

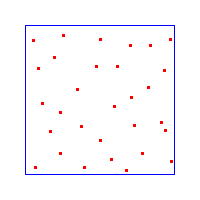
## Slide 19 — 統計力学では具体的な運動方程式を解く必要はない

* 正準理論 (canonical)： canon
* 原則，標準，根本原理 + 正則 ＝ 正準？
* 個別の原理などに依存しない、
* 一般性の高い理論
* 例: Newtonの運動方程式を使うか、
* 特殊相対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

## Slide 20 — 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
* 分子運動論
* 状態方程式の理由・内部エネルギーの起源は考えない
* 分子の運動量・運動エネルギーと温度・圧力の関係
* http://www.ravco.jp/cat/view.php?cat\_id=4825

**Equations**



Embedded

## Slide 21 — §3　Maxwellの速度分布: まとめ

* P. 55

**Equations**

## Slide 22 — マクスウェルの仮定(1)

**Equations**

## Slide 23 — マクスウェルの仮定(2)

**Equations**

## Slide 24 — マクスウェルの仮定(3)

**Equations**

$$
𝑓𝜉=𝐴𝑒{}^{}𝜉→\inftyで\inftyに発散してしまうので除外𝐴𝑒{}^{}
$$

## Slide 25 — マクスウェル分布: まとめ

* 「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

**Equations**

## Slide 26 — Aと𝜶の決定: 数密度 (規格化条件)

**Equations**

## Slide 27 — Aと𝜶の決定: 圧力

**Equations**

## Slide 28 — Aと𝜶の決定: 圧力

**Equations**

## Slide 29 — マクスウェルの速度分布則(1)

**Equations**

## Slide 30 — マクスウェルの速度分布則(2)

* 速度0の分子が一番多い?

**Equations**

## Slide 31 — ボルツマン定数・ボルツマン因子

**Equations**

## Slide 32 — 速度分布

* 速度空間
* 速度0の分子の割合は0

**Equations**

## Slide 33 — べき乗を含む指数関数の積分: Γ関数

**Equations**