

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 伊澤誠一郎

講義予定 MAT.C203 火・金 15:25~17:05

授業準備期間 9月29日(月)～9月30日(火) 授業 10月1日(水)～11月24日(月)(祝日)

10月16日(木) 月曜の授業を行う 10月22日(水) 入学式のため授業休み

11月1日(土)～4日(火) 工大祭(準備・片付け含む)のため授業休み 11月7日(金) 火曜の授業を行う 11月24日(月)(祝日) 月曜の授業を行う

11月25日(火)～12月2日(火) 期末試験・補講

第01回 10/3 熱力学の復習 (神谷)

第02回 10/7 気体分子運動論 Maxwell分布 (神谷)

第03回 10/10 Maxwell分布、古典統計力学の基礎 I (位相空間) (神谷)

第04回 10/14 古典統計力学の基礎 II
(微視的状态の数、エルゴード仮説、Boltzmann分布) (神谷)

第05回 10/17 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 10/21 大正準理論、量子統計力学の基礎 (神谷)

第07回 10/24 (休講?) 量子統計力学の基礎、古典統計力学の応用と問題

第08回 10/28 統計分布の復習 (伊澤)

第09回 10/31 固体の比熱 (伊澤)

授業休み 11/4 (工大祭片付け)

第10回 11/7 理想Bose気体、光子と熱輻射 (伊澤)

第11回 11/11 理想Fermi期待、金属中の電子 (伊澤)

第12回 11/14 半導体中の電子、Fermi準位、ドーピング (伊澤)

第13回 11/18 相転移 (伊澤)

第14回 11/21 復習(統計力学全般) (伊澤)

第15回 11/28 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)

(神谷)

伊澤先生: 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

課題 2025/10/7

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

$$f(v)drdv = A\exp(-\alpha v^2) drdv \quad (3.11)$$

- ・ 空間の対称性、独立性から導出される
- ・ 数学的には、独立変数の和が関数の積になる関数は指数関数だけだから

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

=> 同様の考え方は正準理論でも出てくる

質問

Q: 回転対称性は等方性に含まれるのでは

A: 正しいです。

任意の回転に対して対称 $\equiv$ どの方位に対しても物理法則が同じ

今回は、 x, y, z 方向に法則 (分配関数) が同じであることと、
法則 (分配関数) が θ, φ に依存しないことを明示するために
2つに分割しています。

「等方性」とすると条件が厳しくて回転対称性と同値になりますが、
「 x, y, z 方向の等価性」と、表現を限定するように修正すると、
回転対称性と分ける意味が明確になります

マクスウェルの仮定

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

仮定1: 独立性: 分子の3方向 (v_x, v_y, v_z) の速度成分は互いに独立

独立事象の確率: $f(v_x, v_y, v_z) = g(v_x)g'(v_y)g''(v_z)$ (3.6')

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

$$g(v) = g'(v) = g''(v) \quad (3.6'')$$

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, v_x^2, v_y^2, v_z^2 で表す。

$$f(v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = g(v_x^2)g(v_y^2)g(v_z^2) \quad (3.7')$$

マクスウェルの仮定：方程式を解く

独立性 $: f(v_x, v_y, v_z) = g(v_x)g'(v_y)g''(v_z) \quad (3.6')$

x, y, z方向が等価 $: g(v) = g'(v) = g''(v) \quad (3.6'')$

回転対称性 $: f(v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = g(v_x^2)g(v_y^2)g(v_z^2) \quad (3.7')$

この条件だけから f に関する微分方程式を導出できる

$$v_y = v_z = 0, g(0) = a \text{ を代入: } f(v_x^2) = a^2 g(v_x^2)$$

$$\therefore g(v_x^2) = a^{-2} f(v_x^2)$$

同様に

$$g(v_y^2) = a^{-2} f(v_y^2) \quad (v_z = v_x = 0)$$

$$g(v_z^2) = a^{-2} f(v_z^2) \quad (v_x = v_y = 0)$$

$$\therefore f(v^2) = a^{-6} f(v_x^2) f(v_y^2) f(v_z^2)$$

変数変換 $v_x^2 = \xi, \quad v_y^2 = \eta, \quad v_z^2 = \zeta, \quad v^2 = \xi + \eta + \zeta$

$$f(\xi + \eta + \zeta) = a^{-6} f(\xi) f(\eta) f(\zeta) \quad (3.8)$$

$f(\xi + \eta + \zeta) = a^{-6}f(\xi)f(\eta)f(\zeta)$: 1階微分から解く

Q: 分布関数を求める際に2階微分したが、1階微分でもよいのでは。
2階微分可能性まで要請する必要はないのでは

A: 1階微分で十分です。

$$f(\xi + \eta + \zeta) = a^{-6}f(\xi)f(\eta)f(\zeta) \quad (3.8)$$

ξ, ζ 一定とし、(3.8)の両辺を η で**1階微分**: $f'(\xi + \eta + \zeta) = a^{-6}f(\xi)f'(\eta)f(\zeta)$

$\eta = \zeta = 0$ とすると: $f'(\xi) = a^{-6}f(\xi)f'(0)f(0) = \alpha f(\xi)$

解: $f(\xi) = Ae^{\alpha\xi}$

- ・ α が複素数の可能性: $f(\xi)$ が実数関数であるので除外
- ・ α が正の実数の場合: $\xi \rightarrow \infty$ で ∞ に発散してしまうので除外

$$\times f(\xi) = Ae^{-\alpha\xi} \quad (\alpha > 0)$$

2階微分から導出している文献 (Gemini 2.5Pro)

- James Clerk Maxwell, "Illustrations of the Dynamical Theory of Gases",
Phil. Mag., Vol. 19, p. 19; Vol. 20, p. 21 (1860)
https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/9781848161337_0011
この導出法の原因
- 久保 亮五 編,『大学演習 熱学・統計力学』(裳華房)
最も標準的な教科書の一つ。対数を取ってから微分し、最終的に2階微分に相当する議論で定数を決定する
- Arnold Sommerfeld, "Thermodynamics and Statistical Mechanics"
(Lectures on Theoretical Physics, Vol. 5)
理論物理学の大家であるゾンマーフェルトの講義録
- E. H. Kennard, "Kinetic Theory of Gases" (1938)
気体分子運動論の古典的な名著。Maxwellの導出法を紹介

1階微分から導出している文献 (Gemini 2.5Pro)

Frederick Reif, “Fundamentals of Statistical and Thermal Physics“

1. 空間の等方性: $f(v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = g(v_x)g(v_y)g(v_z)$
2. 対数をとる: $\log f(v^2) = \log g(v_x) + \log g(v_y) + \log g(v_z)$
3. v_x で偏微分: $2v_x \frac{df(v^2)}{f(v^2)} = \frac{dg(v_x)}{g(v_x)} \Rightarrow \frac{df(v^2)}{f(v^2)} = \frac{1}{2v_x} \frac{dg(v_x)}{g(v_x)}$
4. 両辺が異なる変数のみの関数であるため、定数 $(-\alpha)$ に等しい
 $\frac{dg(v_x)}{g(v_x)} = -2\alpha v_x \Rightarrow \mathbf{g(v_x) = Aexp(-\alpha v_x^2)}$

2階微分を使っている理由 (Gemini 2.5Pro)

1. Maxwellの元々の思考をより忠実に再現し、
2. 「一般解を求めてから物理的条件で解を絞る」という物理学の王道の思考法を教える上で、教育的価値が高いと判断されているため

2つ目の理由は納得できない
(1階微分でも三角関数を含む一般解は出る)

この講義では、歴史的経緯を追って統計分布関数の普遍性を理解できるように構成しているので、あえてMaxwellの方法に従う

質問

Q: 分布関数を導いた時に理想気体の状態方程式を用いているので、理想気体にしか使えないのではないか。なぜ理想気体と仮定して式展開をしたのか

A: 論理展開を確認してみましょう

1. 対称性から分布関数の形を限定。ただし、定数の不確定性が残る
2. 分布関数に従うべき別の法則 (必要条件) から、定数を決定する
3. 理想気体の方程式に従うという必要条件から、
 - ・ 導出した分布関数が理想気体の状態方程式と整合すること
 - ・ α は絶対温度だけで決まる (系、モデル、現象に依存しない)が確認できた
4. A は確率分布関数の規格化定数なので、分布関数が決まれば数学的に決まる

* 3. で α が T のみの関数であることから、理想気体の方程式から導出した分布関数が (理論の適用範囲内で) 他の系にも応用可能であることを示唆している。

* この関数を適用した対象が“理論の適用範囲内であるかどうか”は、実験結果と対照させて妥当性を検証する (例: 分子間に相互作用がある場合は Boltzmann 分布に修正される)