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)
　　分配関数の乗数原理
第04回 10/16 古典統計力学の応用と問題、正準理論　(神谷)
第05回 10/20 (休講)
第06回 10/23 大正準分布、量子統計力学　(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

課題回答 2026/10/13

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: $W = \frac{N!}{n1!n2!n3!}$

(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

$\ln W = \ln N! - \ln n_1! - \ln n_2! - \ln n_3! \sim N \ln N - N - (n_1 \ln n_1 - n_1) - (n_2 \ln n_2 - n_2) - (n_3 \ln n_3 - n_3)$

$= N \ln N - n_1 \ln n_1 - n_2 \ln n_2 - n_3 \ln n_3$

制約条件: $n_1 + n_2 + n_3 = N$

$n_2\varepsilon + 2n_3\varepsilon = 0.8N\varepsilon$

最大化関数 $L = N \ln N - n_1 \ln n_1 - n_2 \ln n_2 - n_3 \ln n_3 + \alpha(n_1 + n_2 + n_3 - N) + \beta(n_2 + 2n_3 - 0.8N)$

n1で微分: $dL/dn1 = 0 = -\ln n1 - 1 + \alpha = 0$ $\quad n_1 = \exp(-1+\alpha) = N_0$ (定数)

n2で微分: $dL/dn2 = 0 = -\ln n2 - 1 + \alpha + \beta = 0$ $\quad n_2 = \exp(-1+\alpha+\beta) = N_0 \exp(\beta) = N_0 K$

n3で微分: $dL/dn3 = 0 = -\ln n3 - 1 + \alpha + 2\beta = 0$ $\quad n_3 = \exp(-1+\alpha+2\beta) = N_0 \exp(2\beta) = N_0 K^2$

制約条件: $n_1 + n_2 + n_3 = N = N0\,(1 + K + K^2)$

$n_2 + 2n_3 = 0.8N = N0\,(K + 2K^2)$

N/N0を代入して: $0.8\,(1 + K + K^2) = K + 2K^2$

$K^2 + (1/6)K - (2/3) = 0 \Rightarrow (K + 1/12)^2 = 2/3 + 1/12^2 \Rightarrow K = 0.737$

$n_1/N = 0.438,\ n_2/N = 0.323,\ n_3/N = 0.238$

(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。

$n_2/n_1 = \exp(-\varepsilon / k_B T) = K = 0.737 \Rightarrow k_B T = -\varepsilon / \ln(0.737) = 3.28\varepsilon$

課題 2026/10/16

- **回答期限: 10/18 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: 古典統計力学の問題点について数行以内に説明せよ

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　Boltzmann分布の復習

第2部　古典統計力学の応用と問題: Gibbsのパラドックス

第3部　古典統計力学の応用と問題: エネルギー等分配則

第4部　正準理論

目標

1. 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
2. 正準理論から、任意の系の統計分布関数が得られる
   - Boltzmann分布と同じ、エネルギーの指数関数系
   - ただし、1粒子のエネルギー e ではなく、**系のエネルギー E** を使う