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 Gibbsのパラドックス、正準理論　(神谷)
第05回 10/20　(休講)
第06回 10/23 等分配則、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 2026/10/16

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

後で出てくるスライド：**古典統計力学の問題はどう解決されたか**

- **1状態の位相空間体積 ν_μ が定まらないこと**
  自由粒子の固有状態から、1粒子の1状態位相空間体積は h^3 と定まる
- **同種粒子の不可識別性**
  ・正準・大正準統計では系の固有状態を扱うが、固有状態にはすでに粒子の入れ替えに対する対称性／反対称性が考慮されている
  ・独立粒子近似 (FD/BE統計) では、状態の占有数を扱う
  ことにより、そもそも粒子の区別をしていない。
- **(今日説明します) 低温でのエネルギー等分配則の破れ**
  離散的なエネルギー準位に対して量子統計分布が導入されるため、低温では高エネルギーフォノンの比熱に対する寄与が減少する
- **(後半で説明します) 黒体放射の紫外破綻**
  フォトンのエネルギーが hν に量子化されPlanck分布に従うため、高エネルギーフォトンの寄与が周波数に対して指数関数的に減少し、紫外発散がなくなる

質問

Q: テストに向けてどんなことを重点的に勉強すればいいのか、教えてください。

A:

期末試験の出題範囲

・基本的に教科書の範囲
　ただし、Einsteinモデル＋量子統計の比熱、電子の磁化率は含む

・基本的な考え方の理解を重視
・数式展開を暗記しないといけない問題は出さない。
・公式を覚えていないとわからない (不定)積分などは試験問題中で与える
・ただし、基本的な考え方に必要な数式、たとえば
　状態の数 W、Stirlingの式、Boltzmannの原理、統計分布関数の形と使い方、
　などについては、出題の範囲。

質問

Q: § 5.1 古典分配関数の修正 スライドについて

この資料の中のSについての等式ですが、両辺をTで割ったため、最初の項は$(3/2)Nk_{\mathrm{B}}T$ではなく、$(3/2)Nk_B$になるのではないかと思いました。

P. 101

§ 5.1 古典分配関数の修正

粒子を区別できるとする場合：分配関数 $Z_N = V^N \left(\frac{2\pi m}{\beta \nu_\mu{}^{2/3}}\right)^{3N/2}$

$$F = -k_B T \ln Z_N = -Nk_B T \left[\ln\left\{V\left(\frac{2\pi m}{\beta \nu_\mu{}^{2/3}}\right)^{3/2}\right\}\right] = U - TS = \frac{3}{2}Nk_B T - TS$$

$$S = \boxed{\frac{3}{2}Nk_B} + Nk_B \ln\left\{V\left(\frac{2\pi m}{\beta \nu_\mu{}^{2/3}}\right)^{3/2}\right\}$$ ：示量性量にならない

粒子を区別できないとする場合：WやZ^Nを$N!$で割る必要がある

分配関数 $Z_N = V^N \left(\frac{2\pi m}{\beta \nu_\mu{}^{2/3}}\right)^{3N/2} / N!$

$$F = -k_B T \ln\left(\frac{Z^N}{N!}\right) \cong -Nk_B T \ln\left\{V\left(\frac{2\pi m}{\beta \nu_\mu{}^{2/3}}\right)^{\frac{3}{2}}\right\} + k_B TN \ln N - k_B TN$$

$$\cong -Nk_B T \ln\left\{\frac{V}{N}\left(\frac{2\pi m}{\beta \nu_\mu{}^{2/3}}\right)^{3/2}\right\}$$

$$S = \frac{3}{2}Nk_B + Nk_B \ln\left\{\frac{V}{N}\left(\frac{2\pi m}{\beta \nu_\mu{}^{2/3}}\right)^{3/2}\right\}$$ ：$V \Rightarrow V/N$と修正され、Sは示量性量となっている（Nに比例）

質問

Q: 古典統計力学で、粒子を区別したまま計算しても矛盾しない場合と、
　　矛盾が生じる場合の違いは何ですか？

A: 粒子の入れ替えが起こる事象が無視できる場合、粒子を区別して数えます。
　例：固体中の原子の熱振動（この後説明します）

課題 2026/10/23

- **回答期限: 10/25 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: 古典統計力学と量子統計力学における等確率の原理の違いについて簡単に説明せよ

課題1: Boltzmann分布、Fermi-Dirac分布、Bose-Einstein分布の数式を書き、
手描きでグラフを描いてください。
グラフには、各分布の特徴的な値を記入してください。

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4回第3部　古典統計力学: エネルギー等分配則

第1部　大正準統計

第2部　量子統計力学: 多粒子系の量子力学

第3部　量子統計分布関数

目標

1. 古典統計力学の問題
   - 低温の比熱の温度依存性を説明できない
2. 大正準統計の使い方
3. FD/BE分布の意味 (1粒子状態の平均占有数)