

統計力学 (加藤) レポート (No.1) で出てきた質問とその答

レポート No.1 で出てきた質問に対する答えをまとめてみました。

Q1. 今までの講義はわかりやすかったのでよく理解できました。しかし今後今以上に難しくなると思いますが、統計力学を勉強するにあたって、どのようにすれば理解を深めることができるでしょうか。やはり演習問題を数多くこなすことしかないでしょうか。

A1. 授業では、とにかく直感的にわかってもらうことを第一としています。そのため扱う内容に限られるので、問題演習がやや不足することは避けられません。おっしゃるように、やはり自分で問題を解く努力をしたほうが良いと思います。長岡洋介著「統計力学」にそった授業になっていますから、この教科書の計算フォローや演習問題に取り組んでみるのが良いと思います。(他に自分にあった教科書を探しても構いません。) どの分野の勉強でもそうですが、自分の頭でじっくり考えるという作業は、とても大切ですし、大学を卒業しても役に立つことと思います。

Q2. 熱平衡状態というのは、厳密にいうとどういう風に定義されてるのですか？熱平衡状態に対応するマックスウェル分布は、最初に分子の速さがどのように分布していても、衝突を繰り返すうちに最終的にマックスウェル分布に落ち着くということなので、全体としては状態が変化していないけれども、個々の分子の状態は熱平衡状態では変化していますね。となるとやはり確率が最大となる状態と考えたほうが良いのでしょうか。

A2. 授業では、熱平衡の概念をちゃんと導入しなかったのが、混乱があったかもしれません。まず知っておいてほしいのは、熱平衡状態の定義には、「熱力学での定義」と「統計力学での定義」があることです。

熱力学では熱平衡状態を、「長時間放置された物質が行き着く、それ以上変化しないような状態」と定義します。熱力学では、原子一個一個に注目することはなく、マクロな(巨視的な)物質の挙動を記述しますから、定義としては、こうするしかありません。というより、「そのような状態が存在することを要請する」というのが正確です。この要請の根拠は、純粹にこれまでの人間の観察・経験にあります。熱平衡状態はもしかして存在しないのかもしれませんが、それを実験で確かめた人は今のところないので、そういう状態があるとしてよいと、みんなが信じているのです。これは、信じてもらえるでしょうか。

さて統計力学では、この熱平衡状態を、ミクロの側から（原子の立場から）記述したいわけです。それには、現在のところ、どうしても確率を導入しないわけにはいきません。もし、確率を導入せずに「熱平衡状態」の定義ができたならば、大変わかりやすい理論体系ができあがっていたと思います。しかし、残念ながら今のところ、（例えば分子の間の衝突をしっかりと考えるなどして）純粋に力学的な視点から、熱平衡状態を定義できたひとは、誰もいません。そこで統計力学では確率を導入してしまい、「確率最大の状態が熱平衡状態である」と厳密に定義してしまいます。これが今のところ一番うまいやり方なのです。統計力学での確率の利用には、どこか気持ち悪さがつきまわっていて、僕にもまだすっきりとした説明ができません。もし君がすべてを僕にすっきりと説明できたならば、僕は君に単位を保証します。

蛇足かもしれませんが、気体分子の運動に関して言うと、いくつかの議論がすでにあります。実は、あるもっともらしい条件のもとで、分子間の衝突によってほぼ確実に時間がたつにつれて確率（状態数）が増える（エントロピーが増える）状態へと移行することを証明できます。これをボルツマンのH定理といいます。興味があったら、原島鮮著「熱力学・統計力学」などで調べてみてください。ただ、この証明にも、まだすっきりとしない仮定が入っていますけど。

Q3. エントロピーはなぜ $S = k_B \log W$ と表すのですか？

A3. 念頭にあるのは、「熱力学ででてきたエントロピーの持つ性質をちゃんと再現するように、統計力学のほうでうまくエントロピーを定義してあげよう」ということです。たとえば、こうして定義しておく、エントロピー増大則がよく理解できますし、エントロピーでうまく温度の性質を持つ量を定義してやることができます。とにかく、うまくいくのです。熱力学ででてきたエントロピーの性質を、そっくりそのまま再現するような表式を、 $S = k_B \log W$ 以外にみつけることは、まず不可能だと思います。

Q4. 二日目の授業のノートで、「 x^2 以上の項を無視するのに、どうして x^2 の項がでてくるの？

A4. 間違えました。「 x^3 以上の項を無視する」に変えてください。

Q5. 教科書は絶対に必要か？なくてもノートだけで十分か？

A5. 絶対に必要とはいいいませんが、授業の補充や理解度の確認に利用すると便利だ、という点から、できれば教科書をもっていてほしいです。

Q6. $\log P_N(n)$ の計算中、 $n/N = 1/2 + x$ としていたが、これは平均値が $1/2$ であることが明らかであるために使っているが、もし平均値を求めるのが困難であるとき、どうすればいいか？

A6. 平均値を求めることは、そんなに困難なことではありません。もう何回か授業を聞いてもらえれば、平均値を計算することができるようになります。安心してください。(ただ、それなりの計算は必要になりますが、、、)

Q7. エントロピーの計算については、多少理解できましたが、エントロピーが何なのかは、未だに理解できていません。不可逆性はなんとなくわかりますが。

A7. すでに述べたように、エントロピーとはもともと熱力学で定義されている量です。意味はといえば、「不可逆性を表す量」となります。つまり、物質の状態を変化させるとき、それが勝手に起こるかどうかの、目安になります。反応や状態変化の「方向」を決めている量で、エントロピーが増える方向には、かってに変化が起こりますが、エントロピーが減る方向には勝手に変化が起こることはありません。

現段階で、完全に理解しようとするのは、ちょっと時期早尚な気がします。とりあえず先へ進んで、いろいろな計算を体験しながら、あとからまた考え直してみるのがいいのいいと思います。(僕もそのように勉強しました。)それでもなお、わからなければ、その時点でもう一度具体的に質問してください。

Q8. 靴のひもが歩いているうちに勝手に結ぶ確率はどれくらいですか？

A8. 誰か計算してください(笑)

Q9. テーラー展開がよくわかりません。

A9. 極めて重要な技法です。残念ながら、授業では扱っている時間がありません。やさしめの数学の本を買って、自習してください。和達三樹著「物理のための数学入門」(岩波物理入門コース)あたりがおすすめです。

Q10. 漢字を正しく書けませんか？

A10. 気をつけていますが、多分完全には無理です。僕に漢字の能力を期待しないでくださいね。

Q11. この統計力学は「熱力学」に改めたほうが良いと思うのですが、、

A11. この授業で、熱力学を議論しているつもりはなかったのですが、このような感想は意外でした。「統計力学」と「熱力学」は違う理論体系です。ただ、統計力学といえども、「熱力学」なしで語ることは不可能です。端的に言えば、「統計力学は、すでに知られている熱力学の理論体系がうまく再現するように構築されている」ということができます。熱力学は統計力学の指針になっているのです。ですけど、もちろんできあがった統計力学の理論は、熱力学の理論を再現しますから、極論すれば「統計力学は、熱力学を含む」といえなくもないのですが、僕はそれは極端すぎる考え方だと思います。

授業では熱力学との関係を深くつっこんで議論しなかったのですが、あるいは僕の力量不足で混乱されているかもしれない、もしそうなら申し訳なく思います。ですが、もしばらく、おつきあいください。そうすれば、以上の述べたことの意味が少しずつわかってくるとと思います。

Q12. ミクロカノニカルはあまり使われていないのに、ほとんどの教科書で最初にあるのが、なぜです。

A12. そうですね。現行の教科書がかかえている、大きな欠点だと考えています。ミクロカノニカル（小正準）統計はカノニカル（正準）統計を証明するのに必要なもので、僕の授業でも、はじめに説明します。ただ、そればかりに紙面をたくさん割いている今の教科書は、どうかなあ、と思っています。僕の授業では、とっととカノニカルの世界に行くことにしましょう。計算は、ずっと簡単になります。