統計力学バーチャルラボラトリーの使い方
（教科書として使われる先生へのガイド）

第1章　熱力学の要点

６ページ例題：アニメ１

二つの系を熱的に接触させた時の各系の温度変化を示す。直感的に理解しやすいように、温度の違う物体を接触させた時の、それぞれの系の温度変化を数値と色で示す。どちらの系の温度を高くしても、平衡状態では両者の温度が等しくなっていることを思い起こさせたのち、板書によって熱力学第２法則から導かれる平衡条件を説明する。

第**2**章　熱力学から統計力学へ

２２ページ：アニメ２

熱平衡を微視的に示す。アニメ１の現象を微視的に見たときの様子を示し、ミクロに見れば、両方の“運動状態”が同じところで平衡に達することを理解させる。このとき、それぞれ系のエネルギーは揺らぐことも納得させる。どちらの系のエネルギーを大きくしても、同様の平衡状態になることに注意し、さらにエネルギーが片側に集まった状態を作り、その状態が起こりにくいこと、またエネルギーゼロの状態にわずかなエネルギーを移すと、取りうる運動状態が急激に増すことを理解させる。そして、微視的な状態の数が平衡状態を決めるのに重要な役割をすることを示す。

２４ページ：アニメ３

板書で(2.1)式を説明した後、$W(E_1)\propto E_1^{N_1}$ のときに、粒子数 N （ここでは $N_1=N_2=N$ とした）を変化させて $W(E_1,E_2)$ を E_1 の関数として示し、そのピークが粒子数 N とともに急激に大きくなること、したがって、そのピークの状態が出現しやすくなることを納得させる。ピークの条件から(2.2)式以下の議論を板書により行い、エントロピーとミクロな状態数の関係(2.9) 式を導く。

２５ページ：アニメ４

容器の左半分に閉じ込められた粒子を自由膨張させると、平衡状態では容器の両側にほぼ同数配分される。平衡状態の条件が、やはり微視的状態の数で決まることを説明する。また、平衡状態では、各容器内の粒子数が揺らぐことも説明する。３３頁演習問題[1]～[3]で実際の計算を演習として行わせ、納得させる。

２９ページ：アニメ５

１次元上の箱の中の１個の古典粒子を考え、そのエネルギーが与えられると状態 (x,p) が位相空間内の代表点で表されることを、また、その代表点が時間と共に位相空間内を運動することを示す。状態の単位を h （後にプランク定数であることが示される）とすると、１粒子の場合はその軌跡が直線であることから、状態数がゼロとなる。そこで、エネルギーにある幅があると考え、その中にある粒子を何個か同時に考えると、軌跡に広がりができ、状態数が求まることを理解させる。その後、板書により(2.23)～

(2. 25)式の説明に進む。

第3章　アンサンブル理論とミクロカノニカルアンサンブル

４２ページ：アニメ６

1 個の粒子の 6 次元位相空間の (x, p_x) の断面を示す。多くの点は アンサンブルの各要素の状態を示す。初期状態は分布関数が片寄った非平衡状態であるが、十分時間が経つと、平衡状態となって一様な分布が出現することを示し、リウビルの定理の意味を直感的に理解させる。

４４ページ：アニメ７

ミクロカノニカルを選択してスタートすると、エネルギーを一定に保ちつつ（それぞれの準位にある要素数が変化しない）、状態が変化する。このときの状態数が組み合わせの数 ${}_N C_{N_1}$ で与えられることを説明した後、ボルツマンの原理を用いて熱力学量を求める。

第4章　カノニカルアンサンブル

５２ページ：アニメ７

カノニカルを選択して動画をスタートさせる。温度が一定の場合、様々なエネルギーの状態（それぞれの準位にある要素数が変化する）が出現し、系のエネルギーが揺らぐこと、また、左下の図によって、あるエネルギーの状態が出現する確率が、おおよそ指数関数的になることを説明する。様々な温度で状態の変化を見せた後、板書により(4. 6) 式を導く。このときアニメ 3 を用いて、片方の系（熱溜）の粒子数が大きい場合、ピークが左端に寄り、 $E_1 / E^{(0)} \approx 0$ における展開になることを説明するのは有効である。

５３ページ：アニメ７

(4. 6) 式の結果を、アニメを見て納得させる。

５８ページ：アニメ８（位相空間の回転方向の誤りなど修正中）

熱溜に接した独立な調和振動子（古典論に従う）の集団を示す。まず、温度を変えると、各振動子が様々な状態を取りうることを示す。ついで、位相空間内の軌跡を示して、その占める領域をボルツマン因子を重みにして求め、プランク定数を単位として計ることによって分配関数が求まることを説明する。その後、板書で（4. 31）式を具体的に求める。

５９ページ：アニメ９

熱溜に接した独立な調和振動子（量子力学に従う）の集団を示す。各振動子は様々な量子数をとることができ、その出現確率はボルツマン因子で決まる。分配関数が各状態のボルツマン因子の和で与えられることを説明した後、板書で具体的に計算して(4.34) 式を導く。全エネルギーは平均値の周りで揺らぐことにも注目させる。

６２、６３ページ：アニメ１０

磁場の中に置かれた磁気モーメントが熱溜に接しているときの運動を、磁場や温度を変えて示す。一般に、磁場と磁気モーメントの間の角度でエネルギーが決まるので、ボルツマン因子を考慮して(4.41)式で平均磁化が与えられることを板書によって説明する。さらに、古典系で具体的な計算を行った後、磁化曲線を示す。

６４ページ：アニメ１０（追加）

量子系の場合、磁気モーメントのz成分は、不連続的にしか変化できない。$J=1/2,3/2,5/2$について、温度、磁場を変えながら磁気モーメントの運動を見せ、分配関数の求め方を説明する。板書によって分配関数を具体的に求め、磁化の表式を求めてから、再度アニメにより磁化曲線を示す。

６６ページ：アニメ７

アニメ１０の量子系の $J=1/2$ の場合は二準位系であり、その振舞をアニメ７で再度示した後、板書により分配関数の計算、熱力学量の導出を行う。

６８ページ：アニメ７

板書で負の温度領域の説明をした後、アニメ７のCanonical(Reverse)を用いて、負温度の状態を実際に作る。時間変化をスタートさせ、平衡状態になったところで、Reverseボタンにより、磁場を逆転させる（上下の状態が逆転する）。すぐstop を押すと、負温度の状態が実現できる。なお、温度は要素の分布関数から決めている。

第5章　グランドカノニカルアンサンブル

７９ページ：アニメ１１

熱・粒子溜と接触した系で、粒子数が揺らぐ様子を見せる。容器内には上の壁を通して粒子が出入りし、粒子数が揺らぐ。系のエネルギー、粒子数が (E,N) である確率を求める必要があることを説明し、この章のグランドカノニカルアンサンブルの議論の導入とする。

８５ページ：アニメ１１（追加）

§５．３の議論で、実際に粒子数が揺らぐことを見せたのち、板書によりそのゆらぎの大きさと圧縮率の関係を示す。

第**6**章　Ｔ−Ｐアンサンブル

８９ページ：アニメ１２（追加）

熱・圧力溜に接した系の例として、一定の張力をかけられた金属とゴムひもの熱膨張を示す実験のビデオを示す。暖めると金属は延びるのに対し、ゴムひもは縮むことが示される。このような場合、圧力と温度が一定に保たれた系の統計力学が必要となることを認識させて、Ｔ−Ｐアンサンブルの議論の導入とする。

９３ページ：アニメ１２

6.2.2の議論で求めた高分子のモデルの長さは、温度と共に短くなる。ビデオを再度見せて、現象との比較から、理論的枠組みの正しさを納得させる。

第7章　量子統計力学入門

１１５ページ：アニメ１３

ボース粒子では1つのエネルギーレベルに入れる粒子数に制限はないが、フェ ルミ粒子では1つのエネルギーレベルに入れる粒子数は高々1個である。このために、与えられたエネルギーの状態を占有する粒子数（分布関数）は全く異なったものとなることを板書で説明した後、温度を変えて分布の変化を見せ、その違いを納得させる。

第8章　多原子分子気体の性質

１２２ページ：アニメ１４

２原子分子、３原子分子について、実際に分子を回転させて、その自由度の数を理解させる。２原子分子の時に等核分子と異核分子との違い、３原子分子の時に直線状分子と非直線状分子との違いを強調する。

１２６ページ：アニメ１４

２原子分子の場合、等核分子であれば、ちょうど反対を向くように回転させた状態は元の状態と区別できないことを見せ、分配関数は異核分子の場合の半分になることを説明する。

１２６ページ：アニメＡ３（追加：必要に応じて）

量子力学を用いると、分子の回転は球面調和関数で表せる。球面調和関数の対称性が、量子数Jで決まっていることを示す。

第9章　理想フェルミ気体

１３４ページ：アニメ１５

フェルミ分布関数の説明において、T/T_Fを適当に指定して、フェルミ分布関数とフェルミ面の変化を見せる。低温領域で、分布の崩れがk_BT程度の領域に限られることを示す。

第１０章　理想ボース気体

１５１ページ：アニメ１６

ボース-アインシュタイン凝縮を板書で説明した後、３次元のボース分布が温度の変化と共にどのように変化するかを示す。転移点以下で、原点を占める粒子数が急激に増す。アニメは３次元の分布関数の変化を２次元面内で示したもので、(10.28) 式の近似解を用いている。また原点の状態は、可視化するために１ピクセルの幅を持たせて描いてある。

第１１章　相転移

１６２ページ：アニメ１７

相転移の導入として、２次元イジング系のモンテカルロシミュレーションを示す。Manual 画面で Color で初期条件を選択し、Reset によって、画面を初期化する。そして、温度を指定して Run させる。磁化とエネルギーの時間変化が落ち着いたところが平衡状態である。高温では、各スピンは周りと関係なく反転し（画面では色が変わる）、平衡状態では磁化がゼロの状態になる。低温では、各スピンは周囲のスピンの向きの多い方に揃うように反転しやすく、平衡状態では上向きまたは下向きの磁化が出現する。中間のある温度で相転移が起こることを、感覚的に納得させる。

１６７ページ：アニメ１７

板書により、分子場近似による取扱いから相転移の特徴を明らかにした後、Auto 画面で温度を徐々に変化させて求まる磁化の温度依存性を示す。転移点近傍では平衡に達する時間が長くなる臨界緩慢化が起こっていることも説明する。

１７９ページ：アニメ１８（１７を１８と訂正）

ブロックスピンによる繰り込み変換を示す。256x256 ->　126x126 -> 64x64 -> 32x32-> 16x16 -> 8x8 に変換する。まず、あらかじめ用意された各温度の平衡分布を選択して左面にロードし、start によって、その温度における時間発展を行う。適当なところで pause した後、右面にコピーし、Renormalize により上の繰り込みを行う。臨界点以下ではゼロ度と同様の状態に向かうのに対し、臨界点より上ではランダムな配列を持つ高温状態に向かうことを示し、臨界点が繰り込み変換の不安定固定点になっていることを見る。

付録Ａ　ルジャンドル変換

１８９ページ：アニメＡ１

ある関数の独立変数を、その微係数にするとき、情報を失わないように抱絡線の式を用いることがルジャンドル変換である。様々な C の値について、曲線 $Y=(X-C)^2/2$ の接線群を描き、曲線がその抱絡線になっていることを見せる。逆に直線群 $-P^2-PC=Y-PX$ の抱絡線が、元の関数を再現することを示す。

付録Ｇ　ギブスのパラドックス（改訂版追加予定）

アニメＡ２

３１頁における「粒子が区別できない」ということの説明で、時間がある場合に利用する。粒子が区別できないことから、微視的状態数を $N!$ で割る必要があることを納得させるために、ギブスのパラドックスを説明する。まず、アニメで色の違う粒子を混合した後分離すると、エントロピーが増加することを示す。粒子が区別できるとした場合、同じ色の粒子を混合してもエントロピーが増大することになる。しかし、アニメで示す

ように同じ色の粒子を混合した後、再度分離しても、元の混合前の状態と区別できず、エントロピーは増加しない。このいわゆるギブスのパラドックスは、粒子が区別できないとすることにより、解消されることを板書で示す。