物性物理科学 II

注意：問題１から３までの各問に解答し，各問題の答えを別々の解答用紙に記入すること．１つの問題の解答が解答用紙２枚にわたるときは，２枚目にも問題の番号を書き，２枚目であることを明示すること．

問題 1

同一種類の粒子（質量 m）からなる理想気体をグランドカノニカル分布で考える．系の体積を V とし，温度 T，化学ポテンシャル μ で熱平衡状態にあるとする．粒子数 N の平均値は巨視的な数であるとする．この理想気体が古典系か量子系かによらず，大分配関数 Ξ は次式で与えられる．

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{p}_i} e^{-\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\left(\sum_i E_{\boldsymbol{p}_i} - \mu N\right)} \tag{1}$$

ただし，i 番目の粒子の運動量を $\boldsymbol{p}_i$，その運動エネルギーを $E_{\boldsymbol{p}_i} = \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}$ とする．(1) 式の運動量和 $\displaystyle\sum_{\boldsymbol{p}_i}$ は，古典系の場合は運動量積分 $\displaystyle\sum_{\boldsymbol{p}_i} = V^N \int \frac{d\boldsymbol{p}_1 d\boldsymbol{p}_1 ... d\boldsymbol{p}_N}{h^{3N} N!}$ で表される．また，量子系の場合は，$\displaystyle\sum_{\boldsymbol{p}_i}$ に量子統計による占有数の制約が課せられているものとする．ここで k_{B} はボルツマン定数，h はプランク定数である．また，大分配関数 Ξ を用いて，熱力学ポテンシャル Ω は $\Omega = -k_{\mathrm{B}}T \ln \Xi$ と表される．以下の問いに答えよ．導出過程も示すこと．

[1]　この理想気体が古典系である場合を考える．大分配関数 Ξ を計算し，T，μ の関数として式で表せ．ただし，粒子数 N についての総和を実行して求めた表式にすること．さらに，この結果を用いて，この系の熱力学ポテンシャル Ω，および全粒子数 N の平均値を T，μ の関数として式で表せ．必要であれば，指数関数のテイラー展開 $e^X = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{X^m}{m!}$（$X$ は実数），およびガウス積分の公式 $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ （a は正の実数）を用いよ．

[2]　理想気体における粒子数 N の揺らぎの二乗平均と熱力学ポテンシャル Ω との間の次の関係式が，古典系か量子系かによらず成立することを示せ．(ヒント：(1) 式を用いよ）

$$\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = -k_{\mathrm{B}}T \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2}. \tag{2}$$

ただし，$\langle A \rangle$ は物理量 A のグランドカノニカル分布についての平均値を表す．

[3]　この理想気体が古典統計に従う場合について，設問 [1] で求めた Ω を用いて (2) 式の右辺を計算し，答えを T，μ，m，$\langle N \rangle$ のうち，必要なものを用いて，最も簡単な形で表せ．また，この結果より，粒子数揺らぎの大きさについて何が言えるか，定性的に答えよ．

(次ページにつづく)

問題 1 のつづき

[4]　この理想気体を構成する粒子がフェルミ粒子である場合を考える．波数 $\boldsymbol{k}$ をもつ 1 個の粒子のエネルギーを $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}$ とし，スピン自由度は無視する．(2) 式の右辺を計算すると，その結果は以下のように表される．

$$\boxed{\quad（ア）\quad} + \sum_{\boldsymbol{k}} \boxed{\quad（イ）\quad}. \tag{3}$$

ここで $\sum_{\boldsymbol{k}}$ は波数 $\boldsymbol{k}$ についての和を表す．空欄（ア）に入る最も適切な式を以下の選択肢 (a)〜(i) から選んで記号で答えよ．また，空欄（イ）には波数 $\boldsymbol{k}$ の関数が入る．空欄（イ）に入る式をフェルミ分布関数 $f(\varepsilon_{\boldsymbol{k}})$ を用いて表せ．

　また，(3) 式を用いて，理想フェルミ気体の粒子数揺らぎの大きさが，同じ粒子数平均値を持つ古典理想気体と比較して，大きいか小さいか理由とともに答えよ．

　また，温度を絶対零度近傍で $T = 0$ に向かって減少させると，理想フェルミ気体の粒子数揺らぎの二乗平均がどのように変化するか述べよ．

選択肢：

(a) $\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu}\langle N\rangle$　(b) $\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu}\sqrt{\langle N^2\rangle}$　(c) $\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu}\langle N^2\rangle$　(d) $\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu}\right)^2\langle N\rangle$　(e) $\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu}\right)^2\sqrt{\langle N^2\rangle}$

(f) $\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu}\right)^2\langle N^2\rangle$　(g) $\langle N\rangle$　(h) $\sqrt{\langle N^2\rangle}$　(i) $\langle N^2\rangle$

[5]　この理想気体を構成する粒子がボース粒子である場合を考える．波数 $\boldsymbol{k}$ をもつ 1 個の粒子のエネルギーを $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}$ とし，スピン自由度は無視する．(2) 式の右辺を計算すると，その結果は以下のように表される．

$$\boxed{\quad（ア）\quad} + \sum_{\boldsymbol{k}} \boxed{\quad（ウ）\quad}. \tag{4}$$

ここで $\sum_{\boldsymbol{k}}$ は波数 $\boldsymbol{k}$ についての和を表す．空欄（ア）には設問 [4] の空欄（ア）と同じ式が入る．空欄（ウ）に入る式をボース分布関数 $n(\varepsilon_{\boldsymbol{k}})$ を用いて表せ．

　また，(4) 式を用いて，理想ボース気体の粒子数揺らぎの大きさが，同じ粒子数平均値を持つ古典理想気体と比較して，大きいか小さいか理由とともに答えよ．

　また，温度が絶対零度で全粒子がボース・アインシュタイン凝縮を起こし，$\boldsymbol{k} = 0$ の最低エネルギー状態にあるとき，粒子数揺らぎの二乗平均を全粒子数の平均値 $\langle N\rangle$ を用いて表せ．さらにこの場合の粒子数揺らぎの二乗平均についてどのようなことが言えるか，古典系およびフェルミ粒子系との違いに着目して答えよ．

問題２

スピン $S=1$ の常磁性イオンがあり，ハミルトニアン $\mathcal{H}_1$ が

$$\mathcal{H}_1 = a\left[\,3\,S_z{}^2 - S(S+1)\,\right] + b\,[\,S_x{}^2 - S_y{}^2\,]$$

で与えられる．ここで a, b はともに正の定数，S_x，S_y，S_z はスピン演算子 $\boldsymbol{S}$ の互いに直交する x, y, z 成分である．ただしスピンの大きさはプランク定数 h を2πで割った $\hbar$ を単位として表す． z 方向のスピンの固有状態 $|\,m\,\rangle$ を $|\,+1\,\rangle$, $|\,0\,\rangle$，$|\,-1\rangle$ と表現し， $S_z\,|\,m\,\rangle = m\,|\,m\,\rangle$ である．以下の問いに答えよ．

[1] $S_{\pm} \equiv S_x \pm i\,S_y$ (複号同順) を用いて，ハミルトニアン $\mathcal{H}_1$ の第 2 項を S_+ および S_-で表現し，$\mathcal{H}_1$ を書き換えよ． ただし i は虚数単位 ($i^2 = -1$) である．

[2] $|\,m\,\rangle$ を基底としたハミルトニアン $\mathcal{H}_1$ の行列要素 $\langle\,m\,|\,\mathcal{H}_1\,|\,m'\,\rangle$ をすべて求め，ハミルトニアン$\mathcal{H}_1$ の行列表現を書け．ここで,

$$S_{\pm}\,|\,m\rangle = \sqrt{S\,(\,S+1\,)-m\,(\,m\pm 1\,)}\ \ |\,m\pm 1\,\rangle \qquad \text{(複号同順)}$$

の関係を用いてよい.

[3] ハミルトニアン$\mathcal{H}_1$の固有値を求めよ.

(次ページにつづく)

問題２ のつづき

次に，このスピン系が一様な外部磁場 $\boldsymbol{H}$ に置かれているとする． 簡単のため，以下 $b=0$ の場合を考える．このとき ゼーマン相互作用の項を加えたハミルトニアン $\mathcal{H}_2$ は,

$$\mathcal{H}_2 = a\left[\,3\,S_z{}^2 - S(S+1)\right] + \; g\mu_{\mathrm{B}}\,\boldsymbol{S}\cdot(\,\mu_0\,\boldsymbol{H}\,)$$

となる．外部磁場は z 方向にある，つまり $\boldsymbol{H}=(\,0,\ 0,\ H_z\,)$ であるとし， g 値は正の定数とし，μ_0 は真空の透磁率， μ_{B} はボーア磁子である．以下の問いに答えよ．

[4] ハミルトニアン $\mathcal{H}_2$ の行列要素 $\langle\, m\,|\,\mathcal{H}_2\,|\,m'\,\rangle$ をすべて求め，ハミルトニアン $\mathcal{H}_2$ の行列表現を書け．

[5] スピンの固有状態 $|\,m\,\rangle$ のエネルギー固有値 $E(\,m\,)$ をすべて求め，$E(+1)$, $E(\,0\,)$, $E(-1\,)$ を外部磁場 H_z の関数として 1 つのグラフに図示せよ． このときグラフの縦軸との切片を明記せよ．

[6] 設問[5] の結果から，ある外部磁場を境に基底状態が変わることがわかる．その境界となる外部磁場の値を求め，境界値以下および以上で基底となるスピンの固有状態をそれぞれ答えよ．

問題３

十分な長さLを持つ一次元自由電子系を考える．自由電子のエネルギーを E としたとき，エネルギー E 以下の電子が占有する全状態数 N は,

$$N = \frac{2L}{\pi}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{1/2} E^{1/2} \qquad (1)$$

で表される．ここで，電子の波動関数は，空間反転に対し対称性は保たれている（パリティ保存）．また，$\hbar$はプランク定数を2πで割った定数, m^*は電子の有効質量（ $m^* > 0$）である．

[1] スピンの自由度を考慮し，上記(1)式を導け．

[2] 上記(1)式を用いて，単位長さ当たりの状態密度$D(E)$を求めよ．

一次元の真性半導体について考える．E_{V} を価電子帯上端のエネルギー，E_{C} を伝導帯下端のエネルギー, E_{g} をバンドギャップ，μ を有限温度におけるフェルミ粒子系の化学ポテンシャル, k_{B}をボルツマン定数, Tを温度とする．また，E_{g} が $k_{\mathrm{B}}T$より十分大きいとする．以下の問いに答えよ．

[3] 真性半導体のバンドギャップE_{g}を E_{V}，E_{C} を用いて表せ．

[4] 価電子帯上端から ε_{h} だけエネルギーが下がった準位 $E_{\mathrm{V}} - \varepsilon_{\mathrm{h}}$，伝導帯下端から ε_{e} だけエネルギーが上がった準位 $E_{\mathrm{C}} + \varepsilon_{\mathrm{e}}$ に対応する状態密度をそれぞれ D_{h}，D_{e} とする．また，ε_{h}，ε_{e} はそれぞれ，価電子帯の正孔の有効質量 m_{h}^*，および伝導帯の電子の有効質量 m_{e}^* をもつ自由電子系のエネルギーと考えてよい．このときエネルギーの関数である$D_{\mathrm{h}}(E)$，$D_{\mathrm{e}}(E)$をそれぞれ，E_{V}，E_{C}，μ，m_{e}^*，m_{h}^*，$\hbar$, E のうち，必要なものを用いて表せ．

[5] 有限温度Tのとき，電子はフェルミ－ディラックの分布関数 $f(E)$ に従って価電子帯から伝導帯に励起する．励起した電子濃度をn，励起によって価電子帯にできたホール濃度をpとしたとき，n，p をそれぞれ，$D_{\mathrm{h}}(E)$，$D_{\mathrm{e}}(E)$，$f(E)$ を用いて定積分形式で表せ．ただし，具体的な定積分の計算はしなくてよい．また, n, p はそれぞれ，単位長さ当たりの電子濃度，ホール濃度とする．

（次ページにつづく）

問題３のつづき

[6] 伝導帯に励起した電子濃度 n を計算し E_{V}, E_{C}, μ, m_{e}^{*}, $\hbar$, k_{B}, T のうち，必要なものを用いて表せ．ただし，m_{e}^{*} は，設問[4]で用いたものと同じ伝導帯の電子の有効質量である．また，E_{g} が $k_{\mathrm{B}}T$ より十分大きいとし，近似したフェルミーディラックの分布関数 $f(E) \cong \exp\left(\frac{\mu-E}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$ に従って電子の占有確率が決まるとする．また，$\int_0^\infty x^{-1/2}\exp(-\alpha x)\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ を用いても良い．α は定数である．

[7] $m_{\mathrm{h}}^{*} > m_{\mathrm{e}}^{*}$であるとし，バンドギャップの中心エネルギー$\frac{E_{\mathrm{V}}+E_{\mathrm{C}}}{2}$を原点においたとき，横軸に状態密度，縦軸にエネルギーをとって，設問[4]で導出した $D_{\mathrm{h}}(E)$, $D_{\mathrm{e}}(E)$を図示せよ．作成した図に有限温度における E_{V}, E_{C}, μ, $\frac{E_{\mathrm{V}}+E_{\mathrm{C}}}{2}$ を，適切な位置が分かるように書き込め．さらに，μ と $\frac{E_{\mathrm{V}}+E_{\mathrm{C}}}{2}$ の大小関係を定めた理由を説明せよ．