小テスト 1　次の問いに答えなさい．

(1) 電子が原子核や他の電子から受ける相互作用を，自由電子モデルではどのように扱うか説明しなさい．
(2) 状態密度について説明しなさい．
(3) 占有数について説明しなさい．
(4) 金属中の自由電子の運動について，規則的に並んだ原子核から受ける影響について説明しなさい．
(5) マティーセンの法則を説明しなさい．

小テスト 2　1 次元領域 $-\dfrac{L}{2} \leq x \leq \dfrac{L}{2}$ の中を質量 m の電子が自由に運動している．次の問いに答えなさい．

(1) 時間依存しないシュレディンガー方程式を書きなさい．ただし，ハミルトニアンを $\hat{\mathcal{H}}$，定常状態の波動関数を $\varphi(x)$，エネルギー固有値を E としなさい．

(2) 粒子が領域外に出ないとき，$\varphi(x) = C\cos\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right)$（ただし，$C$ は定数，n は自然数）と表される．この系でのエネルギー固有値 E を求めよ．なお，運動量演算子が $\hat{p} = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{d}{dx}$ で表されることを既知として良い．

(3) 電子が位置 x と $x + dx$ の間に存在する確率は $|\varphi(x)|^2 dx$ で与えられる．粒子が必ず領域内に存在することを踏まえて，$|C|$ を求めなさい．

小テスト 3　系の一辺の長さが L の 2 次元自由電子モデルでの状態数と状態密度について，次の問いに答えなさい．ただし，電子の質量を m_e，ディラック定数を $\hbar$ としなさい．

(1) 波数ベクトルが $\boldsymbol{k} = \dfrac{2\pi}{L}\boldsymbol{n}$（ただし，$\boldsymbol{n} = (n_x, n_y)$ で，n_x と n_y は整数）であることを踏まえ，一つのエネルギー固有状態が波数空間で占める面積を書きなさい．

(2) $\varepsilon = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ を踏まえ，状態数が $\Omega(\varepsilon) = \dfrac{m_e L^2}{\pi\hbar^2}\varepsilon$ で表されることを示しなさい．

(3) 状態密度 $D(\varepsilon)$ を求めなさい．

小テスト 4　フェルミ分布関数 $f(\varepsilon) = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}$（ただし，$\varepsilon \geq 0$）について，次の問いに答えなさい．ただし，$\beta$ と μ は正の定数とする．

(1) フェルミ分布関数のグラフを，絶対零度のときと有限温度（$T \neq 0$）のときそれぞれについて書きなさい．ただし，微分計算をする必要はなく，概形で良い．

(2) エネルギーの平均値 $\langle E \rangle$ を，ε，$f(\varepsilon)$，状態密度 $D(\varepsilon)$ を用いて積分表示しなさい．

(3) 状態密度が $D(\varepsilon) = \alpha\sqrt{\varepsilon}$（ここで，$\alpha$ は定数）で表されるとき，絶対零度でのエネルギーの平均値 $\langle E \rangle (T=0)$ を，α と μ を用いて表しなさい．

(4) 低温では比熱 $C \left(= \dfrac{d\langle E \rangle}{dT}\right)$ が T に比例することを示しなさい．

小テスト 5　粒子 (質量 M) の単振動（バネ定数 k）について，振動中心からのずれを x，粒子の速さを v として次の問いに答えなさい．ただし，ボルツマン定数を k_B としなさい．

(1) 粒子の力学的エネルギーを，k，M，x，v を用いて表しなさい．

(2) 単振動の振幅を A とするとき，原子の力学的エネルギーを k と A で表しなさい．

(3) エネルギー等分配則によると，単振動する粒子の位置エネルギーと運動エネルギーの平均はともに $\dfrac{1}{2}k_\mathrm{B}T$ である．このとき，振幅の 2 乗の平均値 $\left\langle A^2 \right\rangle$ を k，k_B，T を用いて表しなさい．

(4) 前問の結果を踏まえて，格子振動を原因とする抵抗率 ρ_L の高温での温度依存性を説明しなさい．ただし，散乱強度と散乱時間 τ が反比例の関係にあることは既知として良い．

(5) 格子振動による抵抗率 ρ_L は，温度 T について $\rho_\mathrm{L}(T) = B\left(\dfrac{T}{\Theta}\right)^5 \displaystyle\int_0^{\Theta/T} \frac{x^5}{(e^x-1)(1-e^{-x})}dx$（ここで，$B$ は定数，Θ はデバイ温度）で表されることが知られている．この式から，高温領域での ρ_L の温度依存性を定め，前問の説明と一致するかどうか述べなさい．

解答例

固体物性論特論 (2022 年度：鳴海)　　番号:　　名前:

小テスト 1　次の問いに答えなさい．

(1)　電子が原子核や他の電子から受ける相互作用を，自由電子モデルではどのように扱うか説明しなさい．
(2)　状態密度について説明しなさい．
(3)　占有数について説明しなさい．
(4)　金属中の自由電子の運動について，規則的に並んだ原子核から受ける影響について説明しなさい．
(5)　マティーセンの法則を説明しなさい．

(1) 相互作用はすべて無視する（ただし領域外には出ない）

(2) エネルギーが ε から $\varepsilon+d\varepsilon$ の範囲にある系がとりうる状態の数を $D(\varepsilon)d\varepsilon$ とするとき，$D(\varepsilon)$ を状態密度という．

(3) エネルギー固有状態 j を占めている粒子の個数

(4) 電子の波動性により，元の平面波と規則的に並んだ原子核による散乱で生じる球面波の干渉の結果，元の平面波と同じ方向に進む平面波が表れる．そのため，電子は運動量を保存したまま運動できる．

(5) 抵抗率が，不規則性の要因によるそれぞれの抵抗率の和でかけるという法則．

小テスト 2　1 次元領域 $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ の中を質量 m の電子が自由に運動している．次の問いに答えなさい．

(1)　時間依存しないシュレディンガー方程式を書きなさい．ただし，ハミルトニアンを $\hat{\mathcal{H}}$，定常状態の波動関数を $\varphi(x)$，エネルギー固有値を E としなさい．

(2)　粒子が領域外に出ないとき，$\varphi(x) = C\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$（ただし，$C$ は定数，n は自然数）と表される．この系でのエネルギー固有値 E を求めよ．なお，運動量演算子が $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ で表されることを既知として良い．

(3)　電子が位置 x と $x + dx$ の間に存在する確率は $|\varphi(x)|^2 dx$ で与えられる．粒子が必ず領域内に存在することを踏まえて，$|C|$ を求めなさい．

(1)　$\hat{\mathcal{H}}\varphi = E\varphi$

(2)　自由な運動なので $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

(1)に $\varphi = C\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ を代入すると

$$(\text{左辺}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(C\cos\frac{n\pi}{L}x\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\varphi \qquad \therefore\ E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 \text{〃}$$

(3)　$|\varphi|^2 = |C|^2\cos^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$. 確率の総和 $\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}|\varphi|^2dx$ が 1 になることから.

$$|C|^2\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\cos^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx = |C|^2\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\frac{1+\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)}{2}dx = \frac{L|C|^2}{2}$$

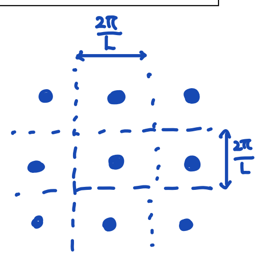
$$\therefore\ \frac{L|C|^2}{2} = 1 \iff |C| = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{〃}$$

小テスト 3　系の一辺の長さが L の 2 次元自由電子モデルでの状態数と状態密度について，次の問いに答えなさい．ただし，電子の質量を m_e，ディラック定数を $\hbar$ としなさい．

(1)　波数ベクトルが $\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n}$（ただし，$\boldsymbol{n} = (n_x, n_y)$ で，n_x と n_y は整数）であることを踏まえ，一つのエネルギー固有状態が波数空間で占める面積を書きなさい．

(2)　$\varepsilon = \frac{\hbar^2k^2}{2m_e}$ を踏まえ，状態数が $\Omega(\varepsilon) = \frac{m_eL^2}{\pi\hbar^2}\varepsilon$ で表されることを示しなさい．

(3)　状態密度 $D(\varepsilon)$ を求めなさい．



(1)　右図より $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$

(2)　エネルギー ε のとき，波数空間では半径 k の中の状態を占める．

よって，スピンの自由度(2)も考慮することで，

$$\Omega(\varepsilon) = 2\cdot\frac{\pi k^2}{(2\pi/L)^2} = \frac{L^2k^2}{2\pi} = \frac{m_eL^2}{\pi\hbar^2}\varepsilon \quad \blacksquare$$

(3)　$D(\varepsilon) = \frac{d\Omega}{d\varepsilon} = \frac{m_eL^2}{\pi\hbar^2}$ 〃

小テスト 4　フェルミ分布関数 $f(\varepsilon) = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}$（ただし，$\varepsilon \geq 0$）について，次の問いに答えなさい．ただし，$\beta$ と μ は正の定数とする．

(1) フェルミ分布関数のグラフを，絶対零度のときと有限温度（$T \neq 0$）のときそれぞれについて書きなさい．ただし，微分計算をする必要はなく，概形で良い．

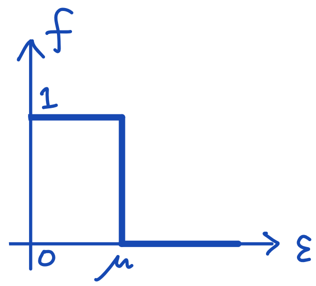
(2) エネルギーの平均値 $\langle E \rangle$ を，$f(\varepsilon)$ と状態密度 $D(\varepsilon)$ を用いて積分表示しなさい．

(3) 状態密度が $D(\varepsilon) = \alpha\sqrt{\varepsilon}$（ここで，$\alpha$ は定数）で表されるとき，絶対零度でのエネルギーの平均値 $\langle E \rangle (T=0)$ を，α と μ を用いて表しなさい．

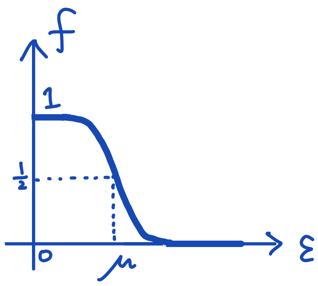
(4) 低温では比熱 $C \left(= \dfrac{d\langle E \rangle}{dT} \right)$ が T に比例することを示しなさい．

(1)

$\underline{T=0}$



$\underline{T>0}$



(2)

$$\langle E \rangle = \sum_i \varepsilon_i f(\varepsilon_i) = \int_0^\infty \varepsilon f(\varepsilon) D(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

(3) $T=0$ では $f(\varepsilon) = 1 \ (\varepsilon<\mu),\ 0 \ (\varepsilon>\mu)$ なので

$$\langle E \rangle = \int_0^\mu \varepsilon \cdot D(\varepsilon)\, d\varepsilon = \alpha \int_0^\mu \varepsilon^{\frac{3}{2}} d\varepsilon = \frac{2\alpha}{3}\left[\varepsilon^{\frac{5}{2}}\right]_0^\mu = \frac{2}{3}\alpha\mu^{\frac{5}{2}}$$

(4) 低温での展開公式を用いると，$\left(\varepsilon D(\varepsilon)\right)' = \alpha\left(\varepsilon^{\frac{3}{2}}\right)' = \frac{3\alpha}{2}\varepsilon^{\frac{1}{2}}$ より

$$\langle E \rangle \simeq \underbrace{\int_0^\mu \varepsilon D(\varepsilon)\, d\varepsilon}_{\uparrow (3)\text{で求めた項}} + \frac{\pi^2}{6} \cdot \left(\varepsilon D(\varepsilon)\right)'\Big|_{\varepsilon=\mu} (k_B T)^2 + O\left((k_B T)^4\right)$$

$$\fallingdotseq \frac{2}{3}\alpha\mu^{\frac{5}{2}} + \frac{\pi^2}{4}\alpha\sqrt{\mu}\, k_B^2 \cdot T^2$$

よって

$$C = \frac{d\langle E \rangle}{dT} = \frac{\pi^2}{2}\alpha\sqrt{\mu}\, k_B^2 \cdot T \propto T \quad ■$$

小テスト 5　粒子 (質量 M) の単振動（バネ定数 k）について，振動中心からのずれを x，粒子の速さを v として次の問いに答えなさい．ただし，ボルツマン定数を k_{B} としなさい．

(1) 粒子の力学的エネルギーを，k，M，x，v を用いて表しなさい．

(2) 単振動の振幅を A とするとき，原子の力学的エネルギーを k と A で表しなさい．

(3) エネルギー等分配則によると，単振動する粒子の位置エネルギーと運動エネルギーの平均はともに $\frac{1}{2}k_{\mathrm{B}}T$ である．このとき，振幅の 2 乗の平均値 $\langle A^2\rangle$ を k，k_{B}，T を用いて表しなさい．

(4) 前問の結果を踏まえて，格子振動を原因とする抵抗率 ρ_{L} の高温での温度依存性を説明しなさい．ただし，散乱強度と散乱時間 τ が反比例の関係にあることは既知として良い．

(5) 格子振動による抵抗率 ρ_{L} は，温度 T について $\rho_{\mathrm{L}}(T) = B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^5}{(e^x-1)(1-e^{-x})}dx$（ここで，$B$ は定数，Θ はデバイ温度）で表されることが知られている．この式から，高温領域での ρ_{L} の温度依存性を定め，前問の説明と一致するかどうか述べなさい．

(1) $\frac{1}{2}Mv^2 + \frac{1}{2}kx^2$　　(2) $\frac{1}{2}kA^2$

(3) (2)とエネルギー等分配則より $\left\langle \frac{1}{2}kA^2 \right\rangle = \frac{1}{2}k_BT + \frac{1}{2}k_BT$

$\therefore \langle A^2\rangle = \frac{2k_B}{k}T$ //

(4) 格子振動を安定点を振動中心とした単振動と考える。
散乱強度は振幅の2乗に比例するが，(3)より T に比例。
よって散乱時間は T^{-1} に比例し，抵抗率はその逆数なので
T に比例する。

(5) 高温領域では $\frac{\Theta}{T}$ が小さい。
積分変数 x の範囲は $0 \leq x \leq \frac{\Theta}{T}$ より，x も小さい。
そこで $e^{\pm x} \fallingdotseq 1 \pm x$ を用いると

$$\rho_L \fallingdotseq B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \int_0^{\frac{\Theta}{T}} \frac{x^5}{x \cdot x}dx = B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \left[\frac{1}{4}x^4\right]_0^{\frac{\Theta}{T}} = \frac{B}{4\Theta}T$$

よって (4)での説明と同じく $\rho_L \propto T$ が得られる。