小テスト 1　次の問いに答えなさい．

(1) 状態数 $\Omega(E)$ の定義を書きなさい．

(2) パウリの排他律について説明しなさい．

(3) 自由電子モデルでは，電子が原子核や他の電子から受ける相互作用をどのように扱うか説明しなさい．

(4) 占有数 n_j について説明しなさい．

(5) 結晶中を電子が 1 方向に運動するとき，ブロッホの定理からどのようなことが言えるか．

(6) マティーセンの法則を，「散乱の要因」と「抵抗率の和」という言葉を使って説明しなさい．

小テスト 2　1 次元領域 $0 \leq x \leq L$ 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，$\varphi(x) = A\sin\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right)$（ただし，$A$ 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 $|\varphi(x)|^2dx$ 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，$|A|$ を求めなさい．

小テスト 3　系の一辺の長さが L の 1 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 $k = \dfrac{2\pi}{L}n$（ただし，n 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長さを書きなさい．

(2) $\varepsilon = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m_e}$ を踏まえ，状態数 $\Omega(\varepsilon)$ を求めなさい．

(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，$\beta$ は逆温度（つまり，$\beta^{-1} = k_B T$）で μ は正の定数とする．また，状態密度は $D(\varepsilon) = \alpha\sqrt{\varepsilon}$（ここで，$\alpha$ は定数）で表されるものとしなさい．

(1)　粒子数の平均値 $\langle N \rangle$ を，$f(\varepsilon)$，状態密度 $D(\varepsilon)$ を用いて積分表示しなさい．

(2)　絶対零度における $f(\varepsilon)$ の概形を描きなさい．ただし，微分計算をする必要はなく，概形で良い．

(3)　$T = 0$ での粒子数の平均値 $\langle N \rangle$ を，α と μ を用いて表しなさい．

(4)　$T \neq 0$ での粒子数の平均値 $\langle N \rangle$ を求めなさい．ただし，十分に低温であるとしなさい．

小テスト 5　グリュナイゼンは，格子振動による抵抗率 ρ_1 が

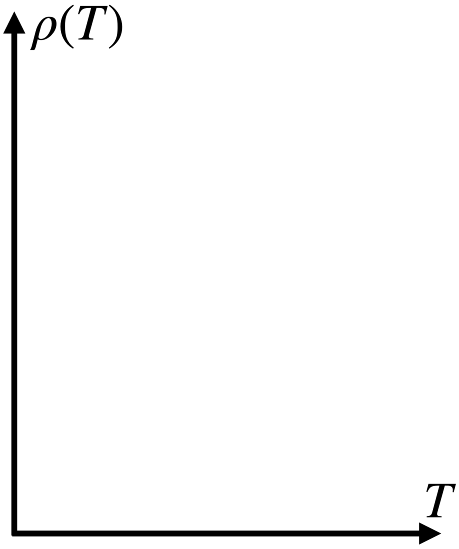
$$\rho_1(T) = B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^5}{(e^x-1)(1-e^{-x})}dx$$

（ここで，B は定数，Θ はデバイ温度）で表されると提唱した．

(1) デバイ温度よりも十分に高温であるとき，上式を計算し，$\rho_1(T)$ の T 依存性を説明しなさい．

(2) デバイ温度よりも十分に低温であるとき，上式を計算し，$\rho_1(T)$ の T 依存性を説明しなさい．ただし，$\displaystyle\int_0^{\infty} \frac{x^n}{(e^x-1)(1-e^{-x})}dx \simeq n!$ であることは既知としなさい．

(3) 格子振動により散乱が生じているデバイスの抵抗率 $\rho_1(T)$ と，格子振動と不純物により散乱が生じているデバイスの抵抗率 $\rho_2(T)$ について，それぞれの概形をグラフに描きなさい．



解答例

2023 年度 固体物性論特論 (担当：鳴海)　　番号:　　名前:

小テスト 1　次の問いに答えなさい．

(1)　状態数 $\Omega(E)$ の定義を書きなさい．
(2)　パウリの排他律について説明しなさい．
(3)　自由電子モデルでは，電子が原子核や他の電子から受ける相互作用をどのように扱うか説明しなさい．
(4)　占有数 n_j について説明しなさい．
(5)　結晶中を電子が 1 方向に運動するとき，ブロッホの定理からどのようなことが言えるか．
(6)　マティーセンの法則を，「散乱の要因」と「抵抗率の和」という言葉を使って説明しなさい．

(1) エネルギーが E 以下であるエネルギー固有状態の総数

(2) フェルミオンでは 1つの状態を 2つの粒子が占めることはできないという法則

(3) 相互作用はすべて無視する

(4) エネルギー固有状態 j を占めている粒子の個数

(5) 完全に規則正しい配列には影響を受けず運動量は保存する.

(6) 抵抗率が散乱の要因によるそれぞれの抵抗率の和で表される法則.

小テスト 2　1 次元領域 $0 \leq x \leq L$ 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，$\varphi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$（ただし，$A$ 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，$|A|$ を求めなさい．

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

(2) $\hat{\mathcal{H}} = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ より

$$\hat{\mathcal{H}}\left\{A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right\} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right\}'' = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{n^2\pi^2}{L^2}A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$\hat{\mathcal{H}}\varphi = E\varphi$ と比べることで　$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$ 〃

(3) $\int_0^L \varphi\, dx = 1$ より　$|A|^2\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx = |A|^2\int_0^L \frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)}{2}dx = \frac{L}{2}|A|^2$

∴ $|A|^2 = \frac{2}{L}$　∴ $|A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$ 〃

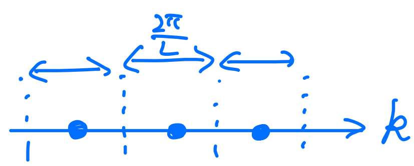
小テスト 3　系の一辺の長さが L の 1 次元自由電子モデルでの状態数と状態密度について，次の問いに答えなさい．ただし，電子の質量を m_e，ディラック定数を $\hbar$ としなさい．

(1) 波数ベクトルが $k = \frac{2\pi}{L}n$（ただし，n 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長さを書きなさい．

(2) $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ を踏まえ，状態数 $\Omega(\varepsilon)$ を求めなさい．

(3) 状態密度 $D(\varepsilon)$ を求めなさい．

(1) $\frac{2\pi}{L}$



(2) $\Omega(\varepsilon) = 2\frac{2k}{2\pi/L} = \frac{2Lk}{\pi} = \frac{2L}{\pi\hbar}\sqrt{2m_e\varepsilon}$

(3) $D(\varepsilon) = \frac{d\Omega(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{2L\sqrt{2m_e}}{\pi\hbar}\left(\varepsilon^{\frac{1}{2}}\right)' = \frac{L\sqrt{2m_e}}{\pi\hbar}\cdot\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$ 〃

2023 年度 固体物性論特論 (担当：鳴海)　　番号:　　名前:

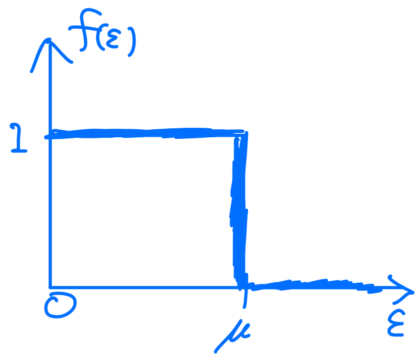
小テスト 4　フェルミ分布関数 $f(\varepsilon) = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}$（ただし，$\varepsilon \geq 0$）について，次の問いに答えなさい．ただし，$\beta$ は逆温度（つまり，$\beta^{-1} = k_B T$）で μ は正の定数とする．また，状態密度は $D(\varepsilon) = \alpha\sqrt{\varepsilon}$（ここで，$\alpha$ は定数）で表されるものとしなさい．

(1)　粒子数の平均値 $\langle N \rangle$ を，$f(\varepsilon)$，状態密度 $D(\varepsilon)$ を用いて積分表示しなさい．
(2)　絶対零度における $f(\varepsilon)$ の概形を描きなさい．ただし，微分計算をする必要はなく，概形で良い．
(3)　$T = 0$ での粒子数の平均値 $\langle N \rangle$ を，α と μ を用いて表しなさい．
(4)　$T \neq 0$ での粒子数の平均値 $\langle N \rangle$ を求めなさい．ただし，十分に低温であるとしなさい．

(1)　$N = \sum_{j=1}^{\infty} n_j$ より

$$\langle N \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \langle n_j \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} f(\varepsilon_j) = \int_0^{\infty} f(\varepsilon) D(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

(2)　T=0では 右のとおり (階段関数)



(3)

$$\langle N \rangle = \int_0^{\mu} D(\varepsilon)\, d\varepsilon = \alpha \int_0^{\mu} \varepsilon^{\frac{1}{2}}\, d\varepsilon = \frac{2\alpha}{3} \left[\varepsilon^{\frac{3}{2}} \right]_0^{\mu} = \frac{2\alpha}{3} \mu^{\frac{3}{2}}$$

(4)　低温では

$$\int_0^{\infty} f(\varepsilon)\, g(\varepsilon)\, d\varepsilon \fallingdotseq \int_0^{\mu} g(\varepsilon)\, d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} g'(\mu) (k_B T)^2$$

ここで $g(\varepsilon) = D(\varepsilon)$ では 左辺が $\langle N \rangle$ なので

$$\langle N \rangle = \frac{2\alpha}{3} \mu^{\frac{3}{2}} + \frac{\alpha \pi^2}{12\sqrt{\mu}} (k_B T)^2 \quad \left(\because\ D'(\varepsilon) = \frac{\alpha}{2} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \right)$$

小テスト 5　グリュナイゼンは，格子振動による抵抗率 ρ_1 が

$$\rho_1(T) = B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^5}{(e^x-1)(1-e^{-x})}dx$$

（ここで，B は定数，Θ はデバイ温度）で表されると提唱した．

(1) デバイ温度よりも十分に高温であるとき，上式を計算し，$\rho_1(T)$ の T 依存性を説明しなさい．

(2) デバイ温度よりも十分に低温であるとき，上式を計算し，$\rho_1(T)$ の T 依存性を説明しなさい．ただし，$\displaystyle\int_0^{\infty} \frac{x^n}{(e^x-1)(1-e^{-x})}dx \simeq n!$ であることは既知としなさい．

(3) 格子振動により散乱が生じているデバイスの抵抗率 $\rho_1(T)$ と，格子振動と不純物により散乱が生じているデバイスの抵抗率 $\rho_2(T)$ について，それぞれの概形をグラフに描きなさい．

(1) $\Theta \ll T$ では $\frac{\Theta}{T} \ll 1$．よって被積分関数の x は $0 < x \ll 1$．

このとき $\rho_1(T) = B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \int_0^{\frac{\Theta}{T}} \frac{x^5}{x \cdot x}dx$　$(\because e^{\pm x} \fallingdotseq 1 \pm x)$

$= \frac{B}{4}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \cdot \left(\frac{\Theta}{T}\right)^4 = \frac{B}{4\Theta}T$　$(\propto T)$

(2) $\Theta \gg T$ では $\frac{\Theta}{T} \to \infty$．よって

$\rho_1(T) = B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5 \int_0^{\infty} \frac{x^5}{(e^x-1)(1-e^{-x})}dx \simeq 5! \cdot B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^5$　$(\propto T^5)$

(3) $\rho_1(T)$ は低温で T^5 に，高温で T に比例なので右の実線のように描ける．

不純物は T にほぼ依存しないので，$\rho_2(T)$ は $\rho_1(T)$ を上に平行移動した点線のように描ける