

演習問題 4:量子理想気体

問題 1. 一辺 L の d 次元 (超) 立方体に閉じこめられた自由粒子系 ($\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$, $\vec{k} = (k_1, k_2, \dots, k_d)$) の (一粒子) 状態密度 $D_d(\epsilon)$ を求めたい。

- (a) (一粒子) エネルギー ϵ 以下の (一粒子) 状態の総数 $N_d(\epsilon)$ が $N_d(\epsilon) = CV_d \epsilon^{d/2}$ となることを示せ。(ここで $V_d = L^d$ は系の (一般化された) 体積、 C はある定数。)
- (b) $D_d(\epsilon) = \frac{d}{d\epsilon} N_d(\epsilon)$ を求め、 $d = 1, 2, 3$ の場合に $D_d(\epsilon)$ を $-\infty < \epsilon < \infty$ の範囲で図示せよ。
- (c) d 次元の自由電子系のフェルミ準位 ϵ_F^d を粒子密度 ρ_d の関数としてそれぞれ求めよ。
- (d) それぞれの場合に化学ポテンシャル及び電子比熱を温度の 1 次まで求めよ。ただし電子系はほとんど縮退しているとする。(なお、 $d = 2$ は半導体表面、 $d = 1$ 量子細線、等により実際の実現されている。)

問題 2. 磁場 H 中の (3次元の) 自由電子系において、磁場の方向に z 軸を取れば、一粒子エネルギーは $\epsilon_k^{S_z}(\epsilon_k) = \epsilon_k + g\mu_B S_z H$, $S_z = \pm 1/2$ となる ($\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$)。ただし、磁場のない自由粒子の状態密度を $D(\epsilon)$ 、 $g = 2$ とする。

- (a) 全系の化学ポテンシャル $\mu(T, H)$ として $S_z = \pm 1/2$ のそれぞれの電子数 $N_{\pm}(H)$ が以下のようになることを丁寧に説明せよ。

$$N_{\pm}(H) = \int_0^{\infty} d\epsilon_k D(\epsilon_k) f(\epsilon_k^{S_z}(\epsilon_k))$$

$f(x) = \frac{1}{e^{\beta(x - \mu(T, H))} + 1}$ はフェルミ分布関数。

- (b) $g\mu_B H \ll \mu$ の場合の磁化 $M = -\mu_B(N_+ - N_-)$ を磁場の 1 次まで求め、帯磁率 $\chi = (\frac{1}{V})M/H$ が

$$\chi = \frac{2\mu_B^2}{V} \int_0^{\infty} D'(\epsilon) f(\epsilon)$$

となることを示せ。

- (c) 強く縮退した場合 $kT \ll \epsilon_F$ に $\chi(T)$ を T の 1 次まで求めよ。ただし磁場のないときのフェルミ準位 ϵ_F ($T = 0$ での全系の化学ポテンシャル)、電子密度を n とする。 D をあらわに評価せよ。
- (d) 古典極限、 $kT \gg \epsilon_F$ で $\chi(T)$ をもとめよ。

問題 3. 全粒子数 N 、体積 V (密度 $\rho = \frac{N}{V}$) のスピン縮退のない 3 次元ボーズ理想気体を考える。

- (a) 十分高温では化学ポテンシャル μ は以下の等式から決まることを示せ。 ($\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$)

$$\rho V_Q(T, m) = \zeta_{3/2}(e^{\beta\mu}), \quad V_Q(T, m) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}\right)^{3/2}$$

$$\zeta_{3/2}(\lambda) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{\lambda^{-1}e^x - 1} = \sum_{k=1}^\infty \frac{\lambda^k}{k^{3/2}}$$

- (b) $V_Q(T, m)$ は温度 T の熱運動に対応するド・ブROI波長程度の立方体の体積であることを示せ。
- (c) ボーズ粒子系では $\mu < 0$ であるから $\zeta_{3/2}(e^{-\beta\mu}) < \zeta_{3/2}(1)$ である。よって $\rho V_Q(T_C) = \zeta_{3/2}(1)$ で定まる T_C 以下の温度では化学ポテンシャル $\mu = 0^-$ であり、上記関係式は以下のように変更される。

$$(N - N_0) \frac{V_Q(T)}{V} = \zeta_{3/2}(1)$$

ここで N_0 は最低エネルギー $\epsilon = 0$ の一粒子状態の占有数である。ここで $N_0 \approx \mathcal{O}(N)$ (マクロ) であることに注意する。この低温での振る舞いをボーズ・アインシュタイン凝縮という。 T_C を ρ の関数として求めよ。

- (d) N_0 を T_C を用いて T の関数として求めよ。
- (e) N_0 に関するボーズ分布関数から化学ポテンシャルは $T < T_C$ でより正確には $\mu \approx -\frac{k_B T}{N_0}$ であることを示せ。
- (f) 1次元、2次元では、ボーズ・アインシュタイン凝縮は起こらないことを示せ。

問題 4. conduction band (伝導帯) の bottom のエネルギー ϵ_c 、valence band (価電子帯) の top のエネルギー ϵ_v 、よってエネルギーギャップ $\epsilon_g = \epsilon_c - \epsilon_v$ である半導体を考える。またそれぞれのバンドでエネルギー分散は

$$\epsilon_k^c = \epsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad : \text{conduction band} \quad \epsilon_k^v = \epsilon_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad : \text{valence band}$$

とする。

- 電子濃度 $n_e = N_e/V$ とホール濃度 $n_h = N_h/V$:

$$N_e = \sum_{k: \text{conduction band}} f_e(\epsilon_k^c), \quad f_e(\epsilon_k^c) = f(\epsilon_k^c) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k^c - \mu)} + 1}$$

$$N_h = \sum_{k: \text{valence band}} f_h(\epsilon_k^v), \quad f_h(\epsilon_k^v) = 1 - f(\epsilon_k^v) = \frac{1}{e^{\beta(\mu - \epsilon_k^v)} + 1}$$

これらを用いて不純物のない純粋な (intrinsic な) 半導体においてみ
たされる電気的中性の条件は $n_e = n_h$ となり、これが化学ポテンシャル
を決定する関係式となる。

- 古典領域: 電子数、ホール数が十分少なく $\beta(\epsilon_k^c - \mu) \gg 1$, $\beta(\mu - \epsilon_k^v) \gg 1$ がみたされる場合、つまり $\epsilon_c - \mu \gg k_B T$, $\mu - \epsilon_v \gg k_B T$ の場合以下の関係式を示せ。(これは、化学ポテンシャルがエネルギーギャップの中にあり、伝導帯の底、価電子帯の頂点からともに温度に比べて十分に離れている場合である) 以下この古典領域で考える。

$$\begin{aligned} n_e &= n_c e^{-\beta(\epsilon_c - \mu)} \\ n_c &= \frac{1}{V} \sum_{k: \text{conduction band}} e^{-\beta(\epsilon_k^c - \epsilon_c)} = \frac{2}{V_Q(T, m_e^*)} \\ n_h &= n_v e^{-\beta(\mu - \epsilon_v)} \\ n_v &= \frac{1}{V} \sum_{k: \text{valence band}} e^{-\beta(\epsilon_v - \epsilon_k^v)} = \frac{2}{V_Q(T, m_h^*)} \end{aligned}$$

- 質量作用の法則: 上記関係式より

$$n_e n_h = n_c n_v e^{-\beta \epsilon_g}$$

これは不純物のない半導体の場合の $n_e = n_h \equiv n_i$ を用いて

$$\begin{aligned} n_e n_h &= n_i^2 \\ n_i &= \sqrt{n_c n_v} e^{-\beta \epsilon_g / 2} \end{aligned}$$

と書ける。

- intrinsic 半導体の化学ポテンシャル: $n_e = n_h \equiv n_i$ の場合

$$\mu = \frac{1}{2}(\epsilon_c + \epsilon_v) + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_h^*}{m_e^*}$$

となる。(これを示せ。)