

統計力学II 演習問題V

1. (*) 3次元の理想フェルミ気体のスピン帯磁率について次の問に答えよ。ただし、粒子の質量を m 、粒子数を N 、体積を V とする。また、一つ一つの粒子はスピン量子数 $S = 1/2$ のスピン S を持ち、 $S_z = \pm 1/2$ の二つの状態をとることができ、それぞれの状態で磁気モーメント $-g\mu_B S$ をもつとする。

- (a) 絶対零度でのスピン帯磁率 χ を求め、フェルミ面でのスピンあたり・体積あたりの一粒子状態密度 $D(\epsilon_F)$ と g, μ_B を用いて表せ。
- (b) ここで得られたスピン帯磁率を前期にやった局在スピン常磁性体の帯磁率と比較し、なぜそのような違いが出るか物理的に説明せよ。

2. (*) 前問の理想フェルミ気体の熱容量について次の問に答えよ。

- (a) 低温 $k_B T \ll \epsilon_F$ での熱容量 C を求め、 $D(\epsilon_F)$ と温度 T を用いて表せ。
- (b) 熱容量が (a) の様に振る舞う原因を物理的に説明せよ。
- (c) 熱容量を古典理想気体と比較し、なぜそのような違いが出るか物理的に説明せよ。

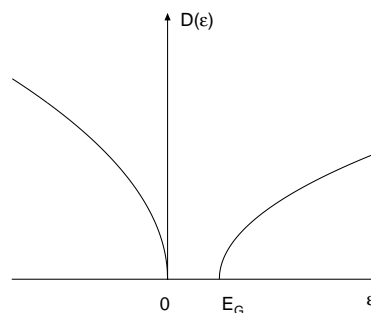
3. 理想ボーズ気体、理想フェルミ気体において

- (a) 3次元の非相対論的粒子の場合、圧力 p と単位体積当たりの内部エネルギー u の間に $p = \frac{2}{3}u$ の関係があることを示せ。
- (b) 一般に単位体積当たりの一粒子状態密度が $D(\epsilon) = A\epsilon^\alpha$ ($\alpha > -1$) で与えられるとき、この関係はどのように拡張されるか。

4. 半導体内の電子の単位体積・スピンあたりの1電子状態密度は図のように、ある幅にわたって状態のないエネルギー域がある。このようなエネルギー域を(エネルギー)ギャップ(禁制帯)と呼ぶ。その上下の有限の状態密度を持つ領域を(エネルギー)バンドとよぶ。不純物を含まない半導体物質の場合、絶対零度では下のバンドは電子で占められ(充満帯)、上のバンドは空である(伝導帯)。

簡単のため、それぞれのバンドの中での1電子エネルギー $\epsilon_c(\mathbf{k})$ 、 $\epsilon_v(\mathbf{k})$ を次のように仮定する。ここでエネルギーの原点は充満帯の最上部にとった。

$$\epsilon_c(\mathbf{k}) = E_G + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} \text{ (伝導帯)}, \quad \epsilon_v(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h} \text{ (充満帯)}$$



- (a) 伝導帯での状態密度 $D_c(\epsilon)$ 、充満帯での状態密度 $D_v(\epsilon)$ の表式を求めよ。
- (b) 有限の温度では伝導帯に電子が励起され、充満帯に穴があく。この穴を正孔 (hole) とよび、正の電荷を持った粒子のようにみなせる。電子の化学ポテンシャルを μ とし、 $E_G, \mu, E_G - \mu \gg k_B T$ とするとき、伝導帯に励起される電子と充満帯にできる正孔の1粒子分布関数はそれぞれ質量 m_e, m_h のボルツマン分布で近似できることを示せ。

(c) 上の条件が満たされるとき伝導帯に励起される電子の密度 N_e と充満帯にできる正孔の密度 N_h が次の式で与えられる事を示せ。

$$N_e \approx 2 \left\{ \frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2} \right\}^{3/2} e^{-(E_G - \mu)/k_B T} \quad N_h \approx 2 \left\{ \frac{m_h k_B T}{2\pi\hbar^2} \right\}^{3/2} e^{-\mu/k_B T}$$

(d) 伝導帯の電子の数と充満帯の正孔の数は等しいはずである。このことを使って μ を定め、 N_e と N_h が次の式で与えられる事を示せ。

$$N_e = N_p \approx 2 \left\{ \frac{\sqrt{m_e m_h} k_B T}{2\pi\hbar^2} \right\}^{3/2} \exp(-E_G/2k_B T)$$

5. フェルミエネルギーの上下で、単位体積あたり・スピンあたりの1粒子状態密度 $D(\epsilon)$ が対称 ($D(\epsilon) = D(-\epsilon)$) なスピン 1/2 のフェルミ粒子系を考える。ただし、 ϵ はフェルミエネルギー ϵ_F から測った1粒子エネルギーである。なお、一般に ϵ には上限・下限があるが、その外では $D(\epsilon) = 0$ とおく。

(a) 磁場や温度によって化学ポテンシャルは変化しないことを示せ。

(b) 近似なしに、熱容量 C 、スピン帯磁率 χ が

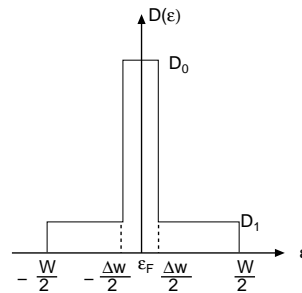
$$C = \frac{2V}{k_B T^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon^2 e^{\beta\epsilon}}{(e^{\beta\epsilon} + 1)^2} D(\epsilon) d\epsilon, \quad \chi = \frac{(g\mu_B)^2 V}{2k_B T} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\beta\epsilon}}{(e^{\beta\epsilon} + 1)^2} D(\epsilon) d\epsilon$$

で与えられることを示せ。

以下の2題では、この結果を利用してよい。

6. 単位体積あたり・スピンあたりの1電子状態密度が図のように

$$D(\epsilon) = \begin{cases} D_0 & 0 \leq |\epsilon| \leq \frac{\Delta w}{2} \\ D_1 & \frac{\Delta w}{2} < |\epsilon| < \frac{W}{2} \\ 0 & \frac{W}{2} < |\epsilon| \end{cases}$$



で与えられる物質を考える。ただし、1粒子エネルギー ϵ はフェルミエネルギー ϵ_F から測るものとする。 $W, \Delta w, D_0, D_1$ は定数であり、

$W \gg \Delta w, D_0 \gg D_1$ とする。また、電子は状態密度以外の点では理想フェルミ気体と見なせるとする。

(a) 絶対零度で磁場 H をかけたときのスピンによる磁化 M を求め、 M を H の関数として図示せよ。

(b) 熱容量 C の表式を求めよ。

(c) 低温領域 $k_B T \ll \Delta w$ 及び比較的高温の領域 $\Delta w \ll k_B T \ll W$ での熱容量の近似式を求め、温度依存性の概略を図示せよ。ただし、 $k_B T \ll W$ としてよい。

7. 単位体積あたり・スピンあたりの1電子状態密度が

$$D(\epsilon) = \begin{cases} A |\epsilon|^\alpha & 0 \leq |\epsilon| \leq \frac{W}{2} \\ 0 & \frac{W}{2} < |\epsilon| \end{cases}$$

で与えられるような物質について次の問に答えよ。ただし、1粒子エネルギーはフェルミエネルギー ϵ_F から測るものとし、 A, α は定数である。また、電子は状態密度以外の点では理想フェルミ気体と見なせるとする。

- (a) 絶対零度で磁場 H をかけたときのスピンによる磁化 M を求めよ。ただし、磁場は十分弱い ($g\mu_B H \ll W$) としてよい。
- (b) 低温 ($k_B T \ll W$) での熱容量 C を求めよ。
- (c) 低温でのスピン帯磁率 χ を求めよ。

8. 次のようなハミルトニアンで表される1次元結晶格子上の電子系を考える

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{l=1}^L \sum_{\sigma=\pm 1/2} t (|l, \sigma\rangle \langle l+1, \sigma| + |l+1, \sigma\rangle \langle l, \sigma|)$$

$|l, \sigma\rangle$ はスピン σ を持つ電子が l 番目の格子点 $x_l (= al)$ にいる状態を表す。

- (a) 周期的境界条件 $|l+L, \sigma\rangle = |l, \sigma\rangle$ を課す時、

$$|k, \sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=1}^L e^{ikx_l} |l, \sigma\rangle$$

がハミルトニアン \mathcal{H}_0 の固有状態であるために k の満たすべき条件を求めよ。また、エネルギー固有値 $\epsilon(k)$ を求めよ。

- (b) 任意の整数 n に対し、 $|k, \sigma\rangle$ と $|k + 2nQ, \sigma\rangle$ ($Q = \frac{\pi}{a}$) は同じ状態であることを示せ。以下、このことを考慮し、 k の変域を $-Q < k \leq Q$ に限ることにする。
- (c) スピンあたり・単位長さあたりの1電子状態密度 $D(\epsilon)$ を求めよ。
- (d) エネルギーの低い状態から順に電子を詰めてゆく時、フェルミエネルギー ϵ_F と粒子数 N の関係を求めよ。
- (e) 電子数 N と結晶の格子点数 L が等しいときフェルミエネルギーはいくらか。また、この状況で磁場 H をかけたとき、磁化 M を磁場の関数として求め、絶対零度での磁化曲線 (磁場と磁化の関係) の概略を図示せよ (磁場の弱い領域に限らず全体を求めよ)。