2024年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一) 第6回 問題

担当; 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部 9 号館 325 号室)

提出日; 7/8 13:00 (前半クラス), 7/1 13:00 (後半クラス)

I 理想 Fermi 気体

体積 V の立方体の中に閉じ込められた N 個の自由粒子からなる理想 Fermi 気体を考える。粒子のエネルギー固有値は $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$ で与えられ、スピンは 1/2 であるとする。次の問いに答えよ。

I-1

(1) 絶対零度において Fermi 粒子に占められる準位のうちで最高のエネルギー準位を Fermi エネルギーという。この粒子系の Fermi エネルギー ε_F を求めよ。

(2) 絶対零度におけるこの系の全エネルギーを ε_F を用いて表せ。また、これを用いて粒子系の圧力 P を求めよ。

(3) $\varepsilon < 0$ で $h(\varepsilon) = 0$ であるような滑らかな関数 $h(\varepsilon)$ に対して、十分低温な範囲では以下の近似ができる (Sommerfeld 展開)。

$$\int_0^\infty h(\varepsilon) f_F(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} h(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}\left(h'(\varepsilon_F) - \frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)} h(\varepsilon_F)\right)(k_B T)^2 + \mathcal{O}\big((k_B T)^4\big).$$

この式を用いて低温における系のエネルギー $E(T)$ および比熱 $C(T)$ を求めよ。

(4) 磁場 H 中に置かれた各電子のエネルギー準位は Zeeman 効果により $\varepsilon_\sigma(\boldsymbol{k}) = \hbar^2 \boldsymbol{k}^2/2m - \sigma\mu_0 H$ に分裂する (ただし、磁場の運動項への寄与は無視した)。ここで、$\sigma = +1$ (-1) は磁場に平行 (反平行) なスピン磁気モーメントを持つ電子を表す。この系の低磁場・低温極限における磁化率を求めよ。

I-2 Sommerfeld 展開

Sommerfeld 展開は、$k_B T \ll \varepsilon_F$ が成立するときの微小パラメータ $k_B T/\varepsilon_F$ に関する摂動展開である。以下の問いに答えよ。

(1) $\varepsilon < 0$ で $h(\varepsilon) = 0$ であるような滑らかな関数 $h(\varepsilon)$ に対して、十分低温な範囲では

$$\int_0^\infty h(\varepsilon) f_F(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon = \int_0^{\mu} h(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} h'(\mu)(k_B T)^2 + \mathcal{O}\big((k_B T)^4\big) \tag{28}$$

が成立することを示せ。

(2) 化学ポテンシャル μ の十分低温での温度依存性が

$$\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} \cdot \frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}(k_B T)^2 + \mathcal{O}\big((k_B T)^4\big)$$

となることを示せ。また、この結果を用いて Sommerfeld 展開を導出せよ。

(3) Na は常温・常圧で格子定数 $a = 4.23$ Å の体心立法構造を取る。各 Na 原子は 1 つの自由電子を供給し、Na 原子の作るポテンシャル, 電子間相互作用は無視するならばそれらの自由電子は理想 Fermi 気体とみなせる。このとき、室温 ($T = 273$ K) において比 $k_B T/\varepsilon_F$ を計算せよ。また、どのくらいの温度まで Sommerfeld 展開の基づく解析が妥当であるか検討せよ。

II　真性半導体

状態密度 $D(\epsilon)$ が以下で与えられる理想 Fermi 気体を考える。

$$D(\epsilon) = \begin{cases} A(\epsilon - \Delta)^{d/2-1} & (\Delta \leq \epsilon), \\ 0 & (0 < \epsilon < \Delta), \\ B(-\epsilon)^{d/2-1} & (\epsilon \leq 0). \end{cases}$$

ここで、A, B は適当な定数であり、d は系の次元を表す。また絶対零度においては、$\epsilon \leq 0$ の状態は全て埋まり $\epsilon \geq \Delta$ の状態は完全に空であるとする。基底状態のエネルギー $\epsilon_{\min}$ は十分に小さいとして、 $\epsilon_{\min} \to -\infty$ として計算して良い。

(1) 系が十分低温であるとき、化学ポテンシャル μ を逆温度 β の関数として求めよ。

(2) $d = 2$ および $d = 3$ の場合において、低温で励起される粒子数および比熱を求めよ。

III　理想 Bose 気体: Bose-Einstein 凝縮

長さ L の周期境界条件下にある 3 次元空間中の N 粒子からなるスピン 0 の理想 Bose 気体を考える。粒子のエネルギー固有値は $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$ で与えられ、エネルギーの小さい方から固有状態を $j = 1, 2, \ldots,$ とラベルを付ける。基底状態は $j = 1$ であり $\varepsilon_1 = 0$ の固有値を持つ。次の問いに答えよ。

(1) $\langle n_j \rangle / V$ が全ての j について粒子密度 $\rho = N/V$ より十分小さい量であると仮定する。このとき、粒子数期待値 $\sum_j \langle n_j \rangle$ を計算せよ。ただし、関数

$$F_{1/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha} - 1}$$

を用いて良い。

(2) 粒子数期待値が N であるとき、(1) と同じ仮定の下で化学ポテンシャル μ を決定する方程式を導出せよ。また、ある閾値 $\beta_c > 0$ があってこの方程式は $\beta > \beta_c$ で解 μ が存在しなくなることを示し、そのときの β_c を答えよ。

(3) $\beta > \beta_c$ において (2) の導出を修正し正しく化学ポテンシャル μ を決定する方程式を導出せよ。また、熱力学極限においてその解は $\mu = 0$ となることを示せ。

(4) $\beta > \beta_c$ において、状態 $j = 2, 3, \ldots,$ の占有数密度に関して $\langle n_j \rangle / V \to 0$ $(V \to \infty)$ であることを示せ。このことにより、 基底状態 $(j = 1)$ 以外の状態では $\beta > \beta_c$ でも占有数密度 $\langle n_j \rangle / V$ が粒子数密度 ρ に比べて十分小さいままであることが確かめられる。

(5) 熱力学極限 $V \to \infty$ における基底状態の粒子数密度 $\langle n_1 \rangle / V$ を、温度 T, 転移温度 $T_c = 1/(k_B \beta_c))$, 全粒子数密度 $\rho = N/V$ を用いて表し、温度 T に関する依存性を図示せよ。

(6) 前問までの結果のように、ある転移温度 T_c 以下の低温領域で基底状態 $j = 1$ に巨視的な数の粒子が凝縮する現象を Bose-Einstein 凝縮と呼ぶ。分散 $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$ を持つ 2 次元の理想 Bose 気体は Bose-Einstein 凝縮を起こさないことを説明せよ。