# 物性工学

問題１．金属中の電子のエネルギーについて，自由電子模型を用いて考察する．一辺の長さが$L$の立方体を考え，金属の内部でポテンシャルが一様（$U(\boldsymbol{r})=0$）であるとする．周期的境界条件

$$\varphi(x,y,z)=\varphi(x+L,y,z)=\varphi(x,y+L,z)=\varphi(x,y,z+L)$$

を用いると，波動関数は

$$\varphi(x,y,z)=\frac{1}{\sqrt{L^3}}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \qquad (1)$$

の形で書ける．ここで，$\boldsymbol{k}$は波数ベクトル，$V$は金属の体積である．電子のエネルギーを$E$，質量を$m$，プランク定数を$h\left(\hbar=\frac{h}{2\pi}\right)$として以下の問に答えなさい．解答の導出の過程も示すこと．

（１）波数ベクトル$\boldsymbol{k}$の$x$方向成分$k_x$がとりうる値を示せ．

（２）$E$よりも小さいエネルギーの状態の数は，波数空間で半径$k_0=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$の球の内部にある状態の数に等しい．波数が$k_0$以下の状態の数を，エネルギー$E$の関数で示せ．但し，スピンを考慮する事．

エネルギーが$E$と$E+dE$の間にある状態の数を計算すると，$D(E)dE=\frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}E^{1/2}dE$　となる．

（３）状態密度$D(E)$とエネルギー$E$の関係をグラフに示せ．また，グラフ上に０K において電子で占められている領域を示せ．但し，０K におけるフェルミエネルギーを$E_F^0$とする．同様に，温度$T>0$ Kにおいて，電子で占められている領域の概形を示せ．

（４）電子の密度$n$と$E_F^0$の関係を求め，$E_F^0$を$n$の関数で示せ．

（５）フェルミ波数$k_F$とフェルミ速度$v_F$を$n$の関数で示せ．

2021 年度神戸大学大学院工学研究科博士課程前期課程入学試験

問題２．図に示す１次元周期ポテンシャル（周期：$L = a + b$，ポテンシャルの高い部分：$V(x) = V_0$，低い部分：$V(x) = 0$）中の電子の振る舞いを考える．このような周期ポテンシャル中では，波動関数はブロッホの定理より，

$$\varphi(x) = u_k(x)\exp(ikx) \qquad (1)$$

$$u_k(x + L) = u_k(x) \qquad (2)$$

と書ける．$k$は波数（実数）である．電子のエネルギーを$E$，質量を$m$，プランク定数を$h\left(\hbar = \frac{h}{2\pi}\right)$として以下の問に答えなさい．

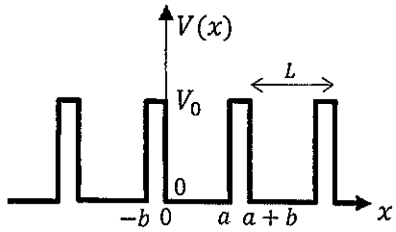


図　１次元周期ポテンシャル
（周期：$L = a + b$）

（１）式(1)をシュレディンガー方程式に代入して，$u_k(x)$の式を求めよ．

（２）前問の方程式の解は，

$$u_k(x) = A\exp\{i(\alpha - k)x\} + B\exp\{-i(\alpha + k)x\} \quad (0 \le x \le a) \qquad (3)$$

$$u_k(x) = C\exp\{(\beta - ik)x\} + D\exp\{-(\beta + ik)x\} \quad (-b \le x \le 0) \qquad (4)$$

の形でかける．$\alpha$及び$\beta$を求めよ．但し，$V_0 > E$ とする．

（３）境界条件から，$u_k(x)$の解の係数（$A, B, C$, D）に対する連立方程式を求めよ．

前問の連立方程式が解を持つための条件から，

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta}\sinh\beta b\sin\alpha a + \cosh\beta b\cos\alpha a = \cos kL \qquad (5)$$

の関係が得られる．この式は，$V_0 b$を一定にしたまま，$b \to 0$，$V_0 \to \infty$の極限を取ると，

$$P\frac{\sin\alpha a}{\alpha a} + \cos\alpha a = \cos ka \qquad (6)$$

$$P = \frac{\beta^2 ab}{2} \qquad (7)$$

となる．

（４）$P = \frac{3}{2}\pi$の場合について，式(6)の左辺を縦軸に，$\alpha a$を横軸にしたグラフの概形を$-4\pi < \alpha a < 4\pi$の範囲で示せ．縦軸と横軸の凡その目盛りも示すこと．さらに，グラフ上に式(6)の解が存在する$\alpha a$の範囲（エネルギーバンドの領域）を図示せよ．

（５）エネルギーが不連続になる波数$k$の値を求めよ．

（６）エネルギー$E$と$ka$の関係を示すグラフの概形を，$-3\pi < ka < 3\pi$の範囲で描け．また，同じグラフ上に，自由電子のエネルギー$E$と波数$k$の関係を破線で示せ．さらに図中に第１ブリュアン帯域の範囲を示せ．