物性工学

問題１．次の文章中の(i)〜(xi) に当てはまる言葉，数式，記号等を対応する解答欄に書け。

一辺 L の無限に高いポテンシャル障壁をもつ矩形井戸型ポテンシャル内の自由電子を考える。周期的境界条件を用いると，波動関数ψは次の境界条件を満たす。

$$\psi(x,y,z)=\psi(x+L,y,z)=\psi(x,y+L,z)=\psi(x,y,z+L).$$

ψとして

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{L^3}}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$$

を仮定すると，波数ベクトル$\boldsymbol{k}$は，次の離散的な値をとる。

$$k_x=\boxed{\text{(i)}}\,n_x \qquad (n_x=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$
$$k_y=\boxed{\text{(i)}}\,n_y \qquad (n_y=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$
$$k_z=\boxed{\text{(i)}}\,n_z \qquad (n_z=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

従って，電子のとりうる状態は，$\boldsymbol{k}$空間で$V_k=\boxed{\text{(ii)}}$ の体積を占める。エネルギー面$E(\boldsymbol{k})$と$E(\boldsymbol{k})+dE$の間の球殻にある状態の数は，スピンを考慮すると $\frac{2}{V_k}4\pi k^2dk$ となる。電子の質量をmとすると，$dE=\boxed{\text{(iii)}}\,dk$なので，単位体積当たりの状態数$dZ$をエネルギー$E$の関数で表すと，$dZ=\boxed{\text{(iv)}}\,dE$ となる。以上より，矩形井戸型ポテンシャル内の自由電子の状態密度は，$D(E)=\frac{dZ}{dE}=\boxed{\text{(iv)}}$ となる。

状態密度$D(E)$を用いると単位体積当たりの電子密度nは，$n=\int_0^\infty D(E)f(T,E)\,dE$で表される。ここで，$f(T,E)$は $\boxed{\text{(v)}}$分布関数である。$T=0\mathrm{K}$では，$\boxed{\text{(vi)}}$ の法則により電子は最低エネルギーから $\boxed{\text{(v)}}$エネルギーE_F^0までの状態を満たすため，$n=\int_0^{E_F^0}D(E)\,dE$となる。これを計算すると，E_F^0とnの関係$E_F^0=\boxed{\text{(vii)}}$ が得られる。また，E_F^0に対応する $\boxed{\text{(v)}}$波数k_Fを電子密度nの関数で表すと，$k_F=\boxed{\text{(viii)}}$となる。$\boxed{\text{(v)}}$温度$T_F$及び $\boxed{\text{(v)}}$速度v_Fを，それぞれE_F^0とk_Fを用いて表すと，$T_F=\boxed{\text{(ix)}}$，$v_F=\boxed{\text{(x)}}$ となる。但し，k_Bはボルツマン定数である。一般に，金属のT_Fは，金属の融点に比べて非常に $\boxed{\text{(xi)}}$ 。

問題２　次の文章中の(a)～(l)に当てはまる，言葉，数式，記号等を対応する解答欄に書け。

ほとんど自由な電子の近似を用いて固体のエネルギーバンド構造を考える。格子ベクトルを，$\boldsymbol{r_n} = n_1\boldsymbol{a_1} + n_2\boldsymbol{a_2} + n_3\boldsymbol{a_3}$（$n_1, n_2, n_3$は整数）とすると，ポテンシャル$V(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r_n})$は格子と同じ周期性を持つので，$V(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{G}} V_{\boldsymbol{G}} \exp(i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r})$のようにフーリエ級数に展開することができる。ただし，$\boldsymbol{G}$は，$\boldsymbol{G} = h\boldsymbol{g_1} + k\boldsymbol{g_2} + l\boldsymbol{g_3}$の形をした $\boxed{\text{(a)}}$ ベクトルである。$\boldsymbol{g_1}, \boldsymbol{g_2}, \boldsymbol{g_3}$は，$\boxed{\text{(a)}}$ の基本ベクトルで，それぞれを格子の基底ベクトル$\boldsymbol{a_1}, \boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{a_3}$であらわすと，$\boldsymbol{g_1} = \boxed{\text{(b)}}$ 及びその循環式となる。

シュレディンガー方程式 $\boxed{\text{(c)}\ \ \text{（シュレディンガー方程式を解答欄に書く）}}$ に波動関数$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ を代入して変形すると，

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{G}} V_{\boldsymbol{G}} C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}}\right] = 0$$

が得られる。これより，N個（Nは単位胞の数）の代数方程式の組，

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) C_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{G}} V_{\boldsymbol{G}} C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}} = 0 \qquad (1)$$

が得られ，その解としてエネルギー固有値$E(\boldsymbol{k})$が得られる。$E(\boldsymbol{k})$に属する波動関数$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$は，

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{G}} C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}} \exp[i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{r}] = \sum_{\boldsymbol{G}} C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}} \exp(-i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r})\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \qquad (2)$$

となり，変調された平面波で表される。変調関数$u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$は，逆格子点$\boldsymbol{G}$に対するフーリエ級数で表されるので，$u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$は $\boxed{\text{(d)}}$ の周期をもつ。式（２）のような波動関数を $\boxed{\text{(e)}}$ という。波数ベクトルが逆格子ベクトルだけ異なる $\boxed{\text{(e)}}$ は，$\boxed{\text{(f)}}$ 状態を表す。

自由電子のエネルギー面が周期ポテンシャルにより最も大きく摂動を受けるのは，$\boldsymbol{k}^2 \cong |\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}|^2$が満たされるとき，すなわち $\boxed{\text{(g)}}$ の端における$\boldsymbol{k}$ベクトルに対してである。この場合，式（１）で$C_{\boldsymbol{k}}$および$C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}}$のみが重要であり，次の２式のみを考えればよい。

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E\right) C_{\boldsymbol{k}} + V_{\boldsymbol{G}} C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}} = 0$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}|^2 - E\right) C_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}} + \boxed{\text{(h)}} C_{\boldsymbol{k}} = 0$$

（ただし，$V_0 = 0$を仮定）。この永年方程式を解くと，

$$\mathrm{E}^{\pm} = \frac{1}{2}\left(E^0_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}} + E^0_{\boldsymbol{k}}\right) \pm \left[\frac{1}{4}\left(E^0_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}} - E^0_{\boldsymbol{k}}\right)^2 + \boxed{\text{(i)}}\right]^{1/2} \qquad (3)$$

が得られる。ただし，$E^0_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}}$は摂動が無い場合の波数$\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}$のエネルギーである。また，この式の導出に $\boxed{\text{(h)}} = V^*_{\boldsymbol{G}}$を用いた。式（３）より，摂動が無い場合に，$E^0_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}} = E^0_{\boldsymbol{k}}$，すなわち$\boldsymbol{k}^2 = |\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}|^2$を満たす２つの状態において縮退がとけ、エネルギーが $\boxed{\text{(j)}}$ だけ分離する。すなわち，周期的であった自由電子のエネルギー構造に周期ポテンシャルの影響でギャップが生じエネルギーバンドにわかれる。尚，$\boldsymbol{k}^2 = |\boldsymbol{k}-\boldsymbol{G}|^2$は，$\boxed{\text{(k)}}$ の条件であり，$\boldsymbol{k}$は$\boldsymbol{G}$を $\boxed{\text{(l)}}$ する面上にある。