

問題

以下の設問1から3に解答せよ。ただし、ボルツマン定数を k_B 、プランク定数を $h = 2\pi\hbar$ 、虚数単位を i とする。

1. 以下の(a) – (f) から3問を選択し、解答せよ。

- (a) 理想気体のエントロピーが示量性を持つためにはどのような性質を導入する必要があるか、簡単に議論せよ。
- (b) ミクロカノニカル集団における状態数の役割と、カノニカル集団における分配関数の役割の類似性について、簡単に議論せよ。
- (c) 二準位系が N 個集まった系の比熱の温度依存性について、簡単に議論せよ。
- (d) ラグランジュの未定乗数法と、その統計物理での利用例について、簡単に説明せよ。
- (e) 1成分系の圧力-温度相図を描き、「化学ポテンシャル」と「ギブスの相律」という語を用いて相平衡の条件を議論せよ。
- (f) フェルミ粒子とボース粒子の実例を挙げ、それらの違いについて説明せよ。粒子個別、粒子集団両方の性質について言及すること。

2. 一粒子エネルギーが、ある正の定数 a と整数 $n \geq 0$ を用いて $\varepsilon_n = na$ ($n = 0, 1, 2, \dots, \infty$) と表せるような一粒子系が、 N 個集まっている。各一粒子状態はほとんど独立であるとする。この N 粒子系が、温度 T の熱浴と接しているカノニカル集団であるとして、以下の問いに答えよ。

- (a) この N 粒子系の分配関数 Z を求めよ。
- (b) この系のヘルムホルツ自由エネルギー F 、内部エネルギー U 、比熱 C を求めよ。
- (c) この系で、 $n = 0$ 以外の状態のエネルギーがある定数 b (> 0) だけ上昇した。この場合のヘルムホルツ自由エネルギーを求めよ。
- (d) (c) の場合に、 $T \gg a$ での物理量は b に依存しない。その理由の物理的描像について簡潔に説明せよ。

3. ギャップの大きさが E_g であるような3次元真性半導体のキャリア濃度の温度依存性を考える。ここで、電子の化学ポテンシャルは温度 T に依存し、 μ と置く。フェルミディラック分布関数は

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1} \quad (1)$$

と表される。

- (a) 温度 $T > 0$ において、伝導帯にあるエネルギー準位のひとつ ε_i に励起されている電子の数、価電子帯にあるエネルギー準位のひとつ ε_j に残っている電子の数をそれぞれ表せ。なお、考察しているエネルギー領域において、状態密度は一定であると考えて良い。
- (b) 価電子帯の上端をエネルギーの原点に取り、運動量 \mathbf{p} の電子と正孔のエネルギーは電子と正孔の対称性からそれぞれ $E_g + \mathbf{p}^2/2m_e$, $-\mathbf{p}^2/2m_h$ となるとする。ここで m_e, m_h はそれぞれ電子、正孔の質量である。低温、すなわち $k_B T \ll E_g - \mu$ かつ $\mu \ll k_B T$ の条件での電子および正孔濃度 n, p をボルツマン近似を用いて表せ。ヒント：運動量空間の3自由度で積分し、ガウス積分の公式を用いて計算する。
- (c) 真性半導体では $n = p$ であることから、化学ポテンシャル μ の温度依存性を求めよ。

公式集

スターリングの式 $\log N! \simeq N(\log N - 1)$

ガンマ関数 $\Gamma(n+1) = n!$, $\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{2^{2n} n!} \sqrt{\pi}$ (n は整数)

ガウス積分 $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi/a}$

1 粒子分配関数 $z = \sum_{i=1}^n e^{-\varepsilon_i/k_B T}$ ここで、 ε_i は粒子の取りうる状態 i のエネルギー

ヘルムホルツの自由エネルギー $F = -k_B T \ln Z$

全エネルギー $U = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z$

等比級数の和 $\sum_{n=1}^N a_1 r^{n-1} = \frac{a_1(1-r^N)}{1-r}$

微分公式 1 $\frac{d}{dx} \tanh x = \frac{1}{\cosh^2 x}$

積分公式 1 $\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$

以上