

第2章

問題1

光子1個のエネルギーと運動量の関係 $\epsilon = cp$ の両辺に、単位面積・単位時間あたりの入射光子数 N をかけて、光の強度 Φ と単位面積・単位時間に入射する光の運動量 P の関係 $\Phi = cP$ を得る。

立方体の質量を m 、光照射前後の立方体の速度変化を Δv 、光の照射面積を S 、照射時間を Δt として、運動量保存から

$$PS\Delta t = m\Delta v$$

光の強度 Φ の式に直して

$$\frac{\Phi}{c}S\Delta t = m\Delta v$$

$$\begin{aligned}\Phi &= \frac{cm\Delta v}{S\Delta t} = \frac{(3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1})(1.0 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3})(1.0 \times 10^{-6} \text{ m})^3(1.0 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-1})}{(1.0 \times 10^{-6} \text{ m})^2(1.0 \times 10^{-9} \text{ s})} \\ &= 3.0 \times 10^8 \text{ kg s}^{-3} = 3.0 \times 10^8 \text{ W m}^{-2} = 3.0 \times 10^4 \text{ W cm}^{-2}\end{aligned}$$

なお、エネルギー収支を考えると、

粒子が得た運動エネルギー

$$\frac{1}{2}m\Delta v^2 = \frac{(1.0 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3})(1.0 \times 10^{-6} \text{ m})^3(1.0 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-1})^2}{2} = 5.0 \times 10^{-28} \text{ J}$$

照射した光のエネルギー

$$\Phi S\Delta t = (3.0 \times 10^8 \text{ W m}^{-2})(1.0 \times 10^{-6} \text{ m})^2(1.0 \times 10^{-9} \text{ s}) = 3.0 \times 10^{-13} \text{ J}$$

となり、光のエネルギーから粒子の運動エネルギーへの伝達はほとんど行われなことがわかる。これは、光子のエネルギーに対して運動量が非常に小さいことを反映している。

参考までに、粒子の材料としてポリマーを考えると、典型的な比熱は $1.5 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 。粒子の運動エネルギーに伝達されない光のエネルギー（ \cong 照射した光のエネルギー）がすべて粒子の温度上昇に使われた場合、温度上昇は

$$\Delta T = \frac{(3.0 \times 10^{-13} \text{ J})}{(1.0 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3})(1.0 \times 10^{-6} \text{ m})^3(1.5 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1})} = 2.0 \times 10^{-11} \text{ K}$$

問題 2

例題 2.2 より，電子線の波長は

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}}$$

1 次の回折線の角度を θ として，図のように結晶中の原子により電子線が回折されるので，回折条件は，

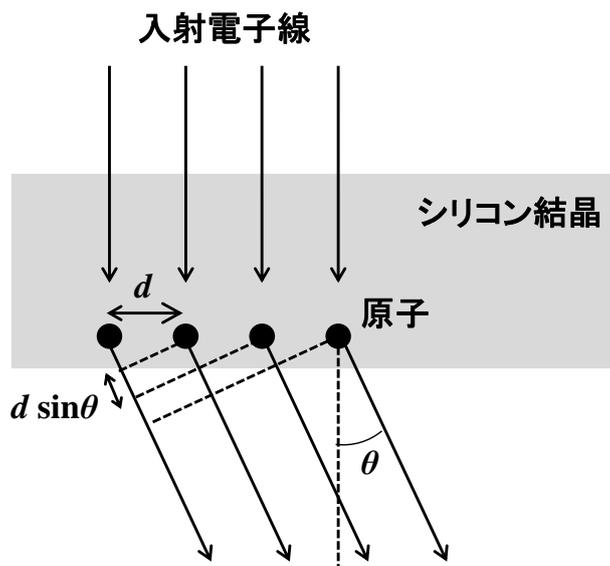
$$d \sin \theta = \lambda$$

これより，

$$\begin{aligned} \sin \theta &= \frac{h}{d\sqrt{2meV}} = \frac{(6.62 \times 10^{-34} \text{ J s})}{(1.4 \times 10^{-10} \text{ m})\sqrt{(2)(9.1 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})(1.0 \times 10^4 \text{ V})}} \\ &= 8.8 \times 10^{-2} \end{aligned}$$

シリコン薄片と蛍光版の距離を L として，蛍光板上での透過電子線による 0 次のスポットとシリコン(400) 面による 1 次の回折スポットの間の距離 D は，回折角 θ が小さいので

$$D = L \tan \theta \cong L \sin \theta = (10 \text{ cm})(8.8 \times 10^{-2}) = 0.88 \text{ cm}$$



問題 3

電子の物質波の波長は，

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

ボーアの仮定は

$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{p}$$

この関係から p を求めて力のバランス式に代入すると,

$$p = \frac{nh}{2\pi r}$$
$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m r^3}$$
$$r = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} n^2$$

$n=1$ のとき

$$r = \frac{(8.8 \times 10^{-12} \text{ m}^{-3} \text{ kg}^{-1} \text{ s}^4 \text{ A}^2)(6.6 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{(3.14)(9.1 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})^2} = 5.2 \times 10^{-11} \text{ m}$$

第3章

問題1

$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ について

$$\begin{aligned}\int_{all\ space} \Psi^* \hat{p} \Psi dx - \int_{all\ space} (\hat{p} \Psi)^* \Psi dx &= \int_{all\ space} \left(\Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right)^* \Psi \right) dx \\ &= -i\hbar \int_{all\ space} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx = -i\hbar \int_{all\ space} \frac{\partial}{\partial x} (\Psi^* \Psi) dx \\ &= -i\hbar \Psi^* \Psi |_{-\infty}^{\infty}\end{aligned}$$

一方,

$$\int_{all\ space} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (1)$$

なので, x 空間の端に近づくとき ($x \rightarrow \pm\infty$), $\Psi^* \Psi \rightarrow 0$ でなければならない. したがって,

$$\int_{all\ space} \Psi^* \hat{p} \Psi dx - \int_{all\ space} (\hat{p} \Psi)^* \Psi dx = -i\hbar \Psi^* \Psi |_{-\infty}^{\infty} = 0$$

すなわち, \hat{p} はエルミート演算子である.

$\hat{\epsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ について, 上記と同様に

$$\int_{all\ space} \Psi^* \hat{\epsilon} \Psi dx - \int_{all\ space} (\hat{\epsilon} \Psi)^* \Psi dx = i\hbar \int_{all\ space} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) dx = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{all\ space} \Psi^* \Psi dx$$

ここで, (1)より, 最後の項は定数の時間微分となり0になる. したがって, $\hat{\epsilon}$ はエルミート演算子である.

問題2

$$\begin{aligned}\int_{all\ space} \Psi^* \hat{A} \Psi dx &= \int_{all\ space} \left(\sum_m c_m^* \psi_m^*(x) e^{i\omega_m t} \right) \hat{A} \left(\sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\omega_n t} \right) dx \\ &= \int_{all\ space} \left(\sum_m c_m^* \psi_m^*(x) e^{i\omega_m t} \right) \left(\sum_n c_n \hat{A} \psi_n(x) e^{-i\omega_n t} \right) dx \\ &= \int_{all\ space} \left(\sum_m c_m^* \psi_m^*(x) e^{i\omega_m t} \right) \left(\sum_n c_n a_n \psi_n(x) e^{-i\omega_n t} \right) dx\end{aligned}$$

ここで, (3.32)に示した規格化直交条件を用いると, 添え字 m, n が等しい掛け算だけが残り, 各積分項は1になるので,

$$\int_{\text{all space}} \Psi^* \hat{A} \Psi dx = \sum_n |c_n|^2 a_n$$

問題 3

$$\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \left(1 + x \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \neq 0$$

したがって、演算子同士が交換可能でない運動量と位置は同時には観測できない。

$$\hat{e}t - t\hat{e} = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} t - t \frac{\partial}{\partial t} \right) = i\hbar \left(1 + t \frac{\partial}{\partial t} - t \frac{\partial}{\partial t} \right) = i\hbar \neq 0$$

したがって、演算子同士が交換可能でないエネルギーと時刻を同時に確定することはできない。

問題 4

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + V = \frac{1}{2m} \widehat{p}_x \widehat{p}_x + V$$

と書けることを利用して、

$$\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H} = \left(\frac{1}{2m} \widehat{p}_x \widehat{p}_x + V \right) \hat{x} - \hat{x} \left(\frac{1}{2m} \widehat{p}_x \widehat{p}_x + V \right)$$

$V\hat{x}$ の項が±で打ち消しあう。

$$\widehat{p}_x \hat{x} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x = -i\hbar + x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar + \hat{x} \widehat{p}_x$$

であることに注意して、

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H} &= \frac{1}{2m} (\widehat{p}_x (-i\hbar + x\widehat{p}_x) - \hat{x} \widehat{p}_x \widehat{p}_x) \\ &= \frac{1}{2m} (-i\hbar \widehat{p}_x - i\hbar \widehat{p}_x + \hat{x} \widehat{p}_x \widehat{p}_x - \hat{x} \widehat{p}_x \widehat{p}_x) = -\frac{i\hbar}{m} \widehat{p}_x \end{aligned}$$

また、

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H} &= \left(\frac{1}{2m} \widehat{p}_x \widehat{p}_x + V \right) \widehat{p}_x - \widehat{p}_x \left(\frac{1}{2m} \widehat{p}_x \widehat{p}_x + V \right) \\ &= \frac{1}{2m} \widehat{p}_x \widehat{p}_x \widehat{p}_x + V \widehat{p}_x - \frac{1}{2m} \widehat{p}_x \widehat{p}_x \widehat{p}_x - (-i\hbar) \frac{\partial V}{\partial x} - V \widehat{p}_x = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \end{aligned}$$

第4章

問題1

積分公式で

$$a = \frac{1}{\alpha^2}$$

したがって,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = \left(\frac{1}{\pi\alpha^2}\right)^{\frac{1}{2}} (\pi\alpha^2)^{\frac{1}{2}} = 1$$

問題2

(4.12)のフーリエ変換は

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\pi\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} e^{ik_0x} e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\alpha\pi^{\frac{3}{4}}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} e^{i(k-k_0)x} dx$$

積分公式を用いて ($a = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}$, $b = i(k - k_0)$)

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\alpha\pi^{\frac{3}{4}}}} \sqrt{2\pi\alpha} e^{\frac{1}{4}2\alpha^2 \cdot (-(k-k_0)^2)} = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha^2}{2}(k-k_0)^2}$$

問題3

電子が $1 \mu\text{m}$ 移動するのに必要な時間は $1 \times 10^{-11} \text{ s}$

例題 3.1 と同様に考えて, (4.29)における標準偏差の拡がりの項は, $\alpha = 1.4 \times 10^{-8} \text{ m}$ なの
で,

$$\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{m\alpha^2}\right)^2 t^2} = \sqrt{1 + \left(\frac{1.0 \times 10^{-34} \text{ J s}}{(1.7 \times 10^{-31} \text{ kg})(1.4 \times 10^{-8} \text{ m})^2}\right)^2 (1 \times 10^{-11} \text{ s})^2} \sim 30$$

波束の標準偏差が初期の 10 nm から $1 \mu\text{m}$ 移動する間に 30 倍である $0.3 \mu\text{m}$ にまで拡が
ってしまう。移動距離と波束の標準偏差が同程度になり, もはや電子の軌跡を線として
議論することは適切ではない。

第5章

問題1

$$\hat{a} = \hat{v} = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H}] \right)$$

\hat{p} は時間の項を形式的には含まないので $\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = 0$, 交換関係

$$\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H} = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$$

(第3章の章末問題4を参照)を用いて,

$$\hat{a} = -\frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial x}$$

問題2

速度演算子を用いて, 粒子の速度の期待値は

$$\begin{aligned} \langle v \rangle &= \int_{\text{all space}} \Psi^* \left(\frac{1}{m} \hat{p}_x \right) \Psi d\vec{r} \\ &= \int \left(\sum_{k_1} c_{k_1}^* A_{k_1}^* \exp(-i(k_1 x - \omega(k_1)t)) \right) \left(\sum_{k_2} \frac{\hbar k_2}{m} c_{k_2} A_{k_2} \exp(i(k_2 x - \omega(k_2)t)) \right) d\vec{r} \\ &= \sum_{k_1} \sum_{k_2} \int c_{k_1}^* A_{k_1}^* \exp(-i(k_1 x - \omega(k_1)t)) \frac{\hbar k_2}{m} c_{k_2} A_{k_2} \exp(i(k_2 x - \omega(k_2)t)) d\vec{r} \end{aligned}$$

規格化直交条件より, $k_1 = k_2$ の項のみが残り,

$$\langle v \rangle = \frac{\hbar}{m} \sum_k |c_k|^2 k = \frac{\hbar \langle k \rangle}{m} = \frac{\langle p_x \rangle}{m}$$

エーレンフェストの定理から導かれる一般的な関係式(5.17)と同じになる.

第6章

問題1

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ ik & -\beta & \beta & 0 \\ 0 & e^{-\beta b} & e^{\beta b} & -e^{ikb} \\ 0 & \beta e^{-\beta b} & -\beta e^{\beta b} & ike^{ikb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \\ D \\ T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ ik \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

1行目に $-ik$ をかけて2行目に足す.

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & ik - \beta & ik + \beta & 0 \\ 0 & e^{-\beta b} & e^{\beta b} & -e^{ikb} \\ 0 & \beta e^{-\beta b} & -\beta e^{\beta b} & ike^{ikb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ C \\ D \\ T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2ik \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ここから C, D, T に関する方程式を得る.

$$\begin{pmatrix} ik - \beta & ik + \beta & 0 \\ e^{-\beta b} & e^{\beta b} & -e^{ikb} \\ \beta e^{-\beta b} & -\beta e^{\beta b} & ike^{ikb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \\ T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2ik \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

左辺の行列 M の行列式は

$$\begin{aligned} |M| &= (ik - \beta)e^{\beta b} ike^{ikb} + (ik + \beta)(-e^{ikb})\beta e^{-\beta b} - (ik + \beta)e^{-\beta b} ike^{ikb} \\ &\quad - (ik - \beta)(-e^{ikb})(-\beta e^{\beta b}) \\ &= e^{(\beta+ik)b}(\beta^2 - k^2 - 2ik\beta) + e^{-(\beta-ik)b}(-\beta^2 + k^2 - 2ik\beta) \\ &= (\beta^2 - k^2)(e^{(\beta+ik)b} - e^{-(\beta-ik)b}) - 2ik\beta(e^{(\beta+ik)b} + e^{-(\beta-ik)b}) \end{aligned}$$

左辺の行列 M の逆行列は

M^{-1}

$$= \frac{1}{|M|} \begin{pmatrix} e^{(\beta+ik)b}(-\beta + ik) & -e^{ikb}(-k^2 + i\beta k) & -e^{ikb}(\beta + ik) \\ -e^{-(\beta-ik)b}(\beta + ik) & e^{ikb}(-k^2 - i\beta k) & -e^{ikb}(\beta - ik) \\ -2\beta & -e^{\beta b}(\beta^2 - i\beta k) + e^{-\beta b}(\beta^2 + i\beta k) & -e^{\beta b}(\beta - ik) - e^{-\beta b}(\beta + ik) \end{pmatrix}$$

(1)に M^{-1} を左から掛けて、 T の成分だけ書き出すと、

$$T = \frac{-4i\beta k}{(\beta^2 - k^2)(e^{(\beta+ik)b} - e^{-(\beta-ik)b}) - 2ik\beta(e^{(\beta+ik)b} + e^{-(\beta-ik)b})}$$

分子分母に e^{-ikb} を掛けて

$$\begin{aligned}
T &= \frac{4i\beta k e^{-ikb}}{(k^2 - \beta^2)(e^{\beta b} - e^{-\beta b}) + 2i\beta k(e^{\beta b} + e^{-\beta b})} \\
&= \frac{2i\beta k e^{-ikb}}{(k^2 - \beta^2) \frac{(e^{\beta b} - e^{-\beta b})}{2} + 2i\beta k \frac{(e^{\beta b} + e^{-\beta b})}{2}} \\
&= \frac{2i\beta k e^{-ikb}}{(k^2 - \beta^2) \sinh(\beta b) + 2i\beta k \cosh(\beta b)}
\end{aligned}$$

問題 2

$x < 0$ に関して, シュレーディンガー方程式から

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m} = E \quad (1)$$

したがって, $k_- = k$

同様に, $x > 0$ に関して,

$$\frac{\hbar^2 k_+^2}{2m} = E - \Delta V \quad (2)$$

時間項を含まない波動関数 ($\phi_{in} = A e^{ikx}$, $\phi_- = A_- e^{-ik_-x}$, $\phi_+ = A_+ e^{ik_+x}$) の $x = 0$ における波動関数の連続条件から

$$\phi_{in}(0) + \phi_-(0) = \phi_+(0) \rightarrow A + A_- = A_+ \quad (3)$$

$$\frac{d\phi_{in}}{dx}(0) + \frac{d\phi_-}{dx}(0) = \frac{d\phi_+}{dx}(0) \rightarrow ikA - ikA_- = ik_+A_+ \quad (4)$$

(1)に ik を掛けて(2)に足すと,

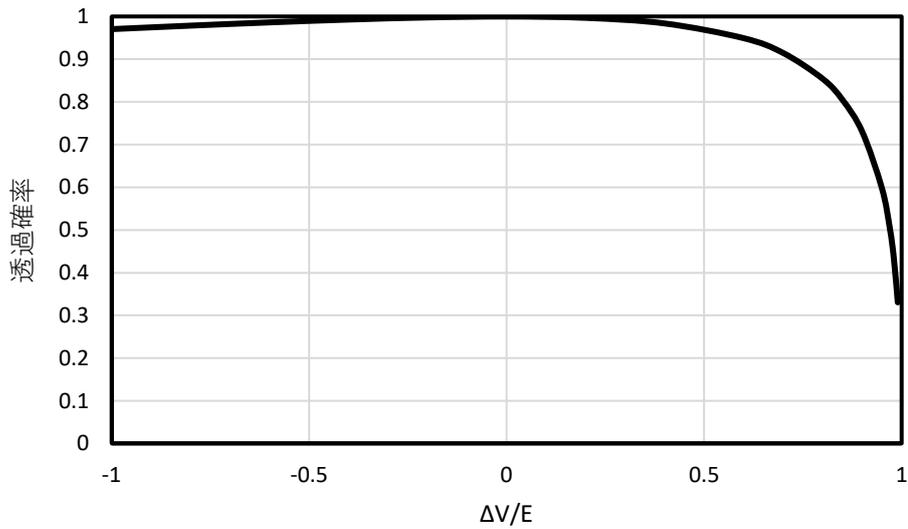
$$2ikA = i(k + k_+)A_+$$

$$A_+ = \frac{2k}{k + k_+} A$$

粒子の透過確率は, (6.24)で表される確率密度フラックスにより

$$\begin{aligned}
\eta &= \frac{J_p(\psi_+)}{J_p(\psi_{in})} = \frac{\frac{\hbar k_+ |A_+|^2}{m}}{\frac{\hbar k |A|^2}{m}} = \frac{k_+}{k} \left(\frac{2k}{k + k_+} \right)^2 = \frac{4kk_+}{(k + k_+)^2} = \frac{4\sqrt{E}\sqrt{E - \Delta V}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - \Delta V})^2} \\
&= \frac{4\sqrt{1 - \frac{\Delta V}{E}}}{\left(1 + \sqrt{1 - \frac{\Delta V}{E}}\right)^2}
\end{aligned}$$

グラフに描くと, 以下のようなになる.



問題 3

障壁を透過する電流は、

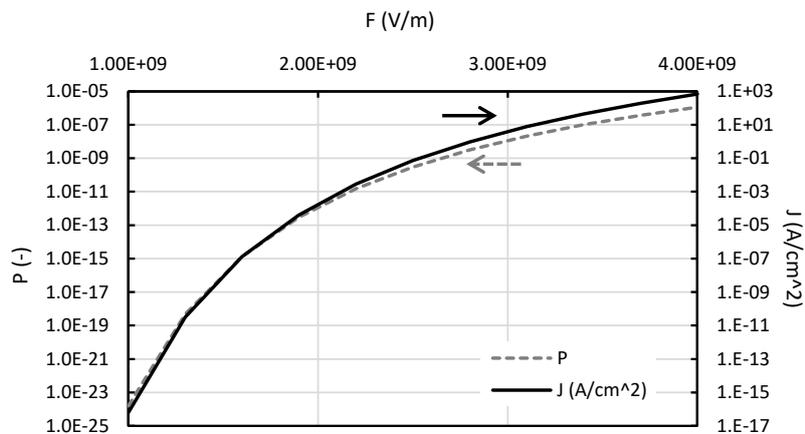
$$J = \frac{e^3 F^2}{16\pi^2 \hbar (V_0 - E_F)} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e F} (V_0 - E_F)^{3/2}\right)$$

指数関数の項は、例題 6.4 で計算した通り $P = 1.1 \times 10^{-6}$. これを用いて、

$$J = \frac{(1.6 \times 10^{-19} \text{C})^3 (4 \times 10^9 \text{ V m}^{-1})^2}{(16)(3.14)^2 (1.05 \times 10^{-34} \text{ J s})(4 \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ J})} (1.1 \times 10^{-6}) = 6.7 \times 10^6 \text{ A m}^{-2}$$

$$= 6.7 \times 10^2 \text{ A cm}^{-2}$$

なお、電子が感じる障壁高さを 4 eV のまま、電界 F を変化させると、透過確率 P とトンネル電流 J は下図のように急峻に変化する。



第7章

問題1

運動量演算子

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

を ψ_e に作用させると、 ψ_o に変化してしまい、固有値関係が成り立たない (ψ_e についても同様)。したがって、 ψ_e や ψ_o で表される粒子の状態の運動量は確定できない。これは、エネルギーと運動量が不可換である (第3章の章末問題(4)参照) ことに対応している。

$$\psi_e = \frac{1}{\sqrt{2l}} \left(e^{i\frac{\pi n}{l}x} + e^{-i\frac{\pi n}{l}x} \right)$$

と変形すると、 ψ_e は、 \hat{p}_x の固有関数である $e^{i\frac{\pi n}{l}x}$ と $e^{-i\frac{\pi n}{l}x}$ の線形結合であることがわかる。

すなわち、 ψ_e で表される粒子の運動量を観察すると、 $\frac{\pi\hbar n}{l}$ または $-\frac{\pi\hbar n}{l}$ が等確率で観察されると考えられる。

問題2

(a)

参考図における円弧の半径は、

(7.61)より

$$\frac{m_{eff}l^2V_0}{2\hbar^2} = \frac{(0.2 \times 9.1 \times 10^{-31}\text{kg})(2.0 \times 10^9\text{m})^2(2.0 \times 1.6 \times 10^{-19}\text{J})}{(2)(1.05 \times 10^{-34}\text{Js})^2} = 3.2$$

参考図から読み取って、

- ・ 左から1番目の $\eta = \xi \tan \xi$ との交点 $\rightarrow (\xi, \eta) = (1.2, 3.0)$
- ・ 左から1番目の $\eta = -\frac{\xi}{\tan \xi}$ との交点 $\rightarrow (\xi, \eta) = (2.3, 2.3)$

それぞれに対応するエネルギーを求める。(7.70)より、

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{2\xi}{l}\right)^2}{2m} = \frac{(1.05 \times 10^{-34}\text{Js})^2}{(2)(0.2 \times 9.1 \times 10^{-31}\text{kg})} \left(\frac{(2)(1.2)}{(2.0 \times 10^{-9}\text{m})}\right)^2 \frac{1}{1.6 \times 10^{-19}\text{J eV}^{-1}}$$
$$= 0.27 \text{ eV}$$

$$E_2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{2\xi}{l}\right)^2}{2m} = \frac{(1.05 \times 10^{-34}\text{Js})^2}{(2)(0.2 \times 9.1 \times 10^{-31}\text{kg})} \left(\frac{(2)(2.3)}{(2.0 \times 10^{-9}\text{m})}\right)^2 \frac{1}{1.6 \times 10^{-19}\text{J eV}^{-1}}$$
$$= 1.00 \text{ eV}$$

したがって、 $E_2 - E_1 = 0.73 \text{ eV}$ (交点の読み取りにより若干誤差が出る)。

(b)

半径 3.2 の円弧と $\eta = \xi \tan \xi$, $\eta = -\frac{\xi}{\tan \xi}$ との交点は全部で 3 個. したがって, 伝導帯の量子井戸に形成されるエネルギー準位は, 全部で 3 個.

問題 3

$$\epsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

より,

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= \left(\sum_m c_m^* \psi_m^*(x) e^{i\omega(m+\frac{1}{2})t} \right) \left(\sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} \right) \\ &= \left(\sum_m c_m^* \psi_m^*(x) e^{i\omega m t} \right) \left(\sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\omega n t} \right) \end{aligned}$$

$e^{i\omega m t}$, $e^{-i\omega n t}$ はそれぞれ角振動数 ωm , ωn で振動するが, 共通の角振動数は ω . したがって, $|\Psi(x, t)|^2$ は振動数 $\frac{\omega}{2\pi}$ で振動する.

なお, ポテンシャル $V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ を持つ調和振動子の運動を古典力学で扱うと, 角振動数 ω , 振動数は $\frac{\omega}{2\pi}$ となる. このように, 量子力学で扱う調和振動子の波束は, 古典力学で扱う調和振動子と同じ振動数で振動することが確認できた.

第 8 章

問題 1

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi = |a|^2 (\psi_+^* e^{i\omega_+ t} + \psi_-^* e^{i\omega_- t}) (\psi_+ e^{-i\omega_+ t} + \psi_- e^{-i\omega_- t})$$

ここでは ψ に実関数を用いているので、 $\psi^* = \psi$.

$$|\psi|^2 = \psi_+^2 + \psi_-^2 + 2\psi_+ \psi_- \cos(\omega_+ - \omega_-) t$$

すなわち、 $|\psi|^2$ は各振動数

$$\omega = \omega_+ - \omega_- = \frac{1}{\hbar} |E_+ - E_-|$$

で振動する。振動の周期 T は、

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{h}{|E_+ - E_-|}$$

である。障壁が薄く準位間の相互作用が大きい（エネルギーの分裂幅が大きい）ときには周期は短い。これは粒子が薄い障壁を迅速に「潜り抜ける」ことに対応する。一方、障壁が厚くて閉じ込め領域同士が相互作用しないときは、2つの準位は同じエネルギーを持つので、 $\omega = 0$ あるいは $T \rightarrow \infty$ となる。厚い障壁を粒子はトンネルできないのだから、 $t=0$ に存在していた閉じ込め領域に、粒子はずっと留まるわけである。

第9章

問題1

$k=0$ では障壁に区切られたすべての区画で e^{ikx} の項が同じ符号になるのに対し、 $k=\frac{\pi}{a}$ では e^{ikx} の項が隣接する区画で互いに逆の符号になる。したがって、 $k=0$ ではすべての区画で波動関数が同じ形で繰り返すのに対し、 $k=\frac{\pi}{a}$ では隣接する区画で互いに左右反転した形で波動関数が並ぶ。 $n=1$ のバンドでは各区画の波動関数は区画の中心に対して偶関数になっているのに対し、 $n=2$ のバンドでは奇関数になっている。このため、 $n=2$ のバンドでは奇関数が互いに左右反転しながら並ぶ $k=\frac{\pi}{a}$ のときが、同じ向きで並ぶ $k=0$ のときよりも $\psi(x)=0$ となる節の数が少なく、エネルギーが小さくなる。

問題2

図 8.4 に示された通り、障壁の幅 b が大きくなるとエネルギー E_+ と E_- の間隔は狭くなる。バンドの形成は、2つの閉じ込め領域が結合して同一のエネルギーを持つ準位から E_+ と E_- を持つ準位が形成されるのと本質的に同じ現象であるから、周期ポテンシャルにおいても障壁の幅 b が大きくなるとバンドのエネルギー幅は小さくなると考えられる。 b が十分大きくなると、隣接するエネルギー準位同士の相互作用は無くなるので、バンドは形成されなくなる。

問題3

ポテンシャルの周期 a が一定のまま障壁の幅 b が大きくなると、図 9.6 に示した E と k の分散曲線の間隔は保たれたままバンドの幅が狭くなる。すると、 $k=0$ 付近での E の k に対する曲率が小さくなるので、(9.46) にしたがって有効質量は大きくなる。すなわち、粒子は外力を受けた際に動きにくくなる。これは、障壁の幅 b が大きいと、粒子が障壁をトンネルしにくくなることに対応している。

第10章

問題1

7.3節より,

x, y, z の各成分の波動関数は

$$\psi = \psi_x \psi_y \psi_z$$

(7.33)

$$\mu_{fb} \equiv \langle f | -ex | b \rangle = \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \psi_{xf}^* (-ex) \psi_{xb} dx \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \psi_{yf}^* \psi_{yb} dy \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \psi_{zf}^* \psi_{zb} dz$$

これが0にならないためには,

$$\int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \psi_{xf}^* (-ex) \psi_{xb} dx \neq 0$$

これは x の波動関数成分について例題 10.2 とまったく同じ議論になる.

さらに, y と z に関する積分が0にならないために, 規格化直交条件から

$$\psi_{yf} = \psi_{yb}, \psi_{zf} = \psi_{zb}$$

が必要である.

したがって, x の量子数について奇数と偶数の間の遷移が起こり, その際に y と z の量子数は変化しない. すなわち, 入射電磁波の電界ベクトルと平行な向きに閉じ込められた量子状態について遷移が起こる. 遷移に必要な電磁波のエネルギーは遷移前後の状態のエネルギー差に等しく, 状態 n_{xb} から n_{xf} への遷移が起こるとして, (7.38)より

$$E = |E_f - E_b| = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} |n_{xf}^2 - n_{xb}^2|$$

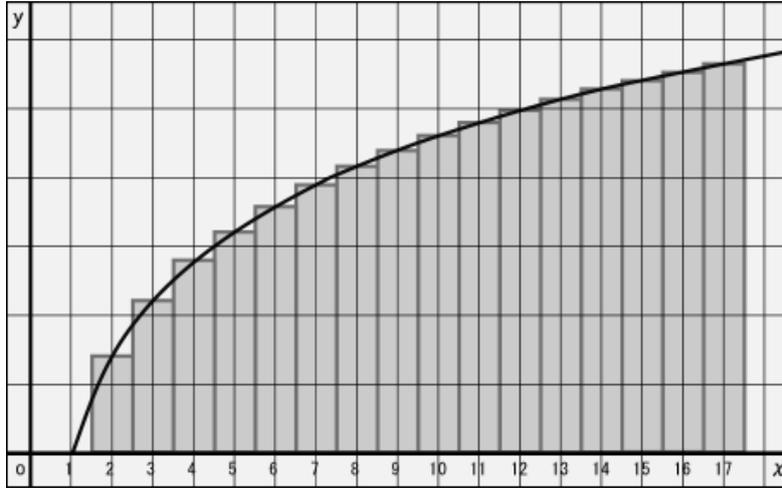
第 1 1 章

問題 1

$\sum_{x=1}^N \log(x)$ は下図のグレーで塗った部分の面積を表しており, N が十分大きければこれは $\log(x)$ の 1 から N までの積分として近似できる. よって,

$$\log(N!) = \sum_{x=1}^N \log(x) \sim \int_1^N \log(x) dx = [x \log(x) - x]_1^N = N \log N - N + 1 \sim N \log N - N$$

が成り立つ.



問題 2

(11.4)式に(11.5)式を代入すると

$$\begin{aligned} \log(P_N(x)) &\sim -N \left[\log 2 + \left(x + \frac{1}{2}\right) \log \left(x + \frac{1}{2}\right) + \left(-x + \frac{1}{2}\right) \log \left(-x + \frac{1}{2}\right) \right] \\ &= -N \left[\left(x + \frac{1}{2}\right) \log(1 + 2x) + \left(-x + \frac{1}{2}\right) \log(1 - 2x) \right] \end{aligned}$$

ここで, (11.6)式の対数関数の展開式を用いると, $\log(1 \pm 2x) = \pm 2x - 2x^2 \pm \frac{8}{3}x^3 - \dots$ となる. 2次までを取ることにすれば,

$$\log(P_N(x)) \sim -N \left[\left(x + \frac{1}{2}\right) (2x - 2x^2) + \left(-x + \frac{1}{2}\right) (-2x - 2x^2) \right] = -2Nx^2$$

これより,

$$p_N(x) \sim \exp(-2Nx^2)$$

が得られる. (11.7)式の係数 $\sqrt{\frac{2N}{\pi}}$ は誤差積分 $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$ から決まる.

問題 3

(1)

$$P_N(n) = \left(\frac{1}{6}\right)^n \left(\frac{5}{6}\right)^{N-n} {}_N C_n = \left(\frac{1}{6}\right)^n \left(\frac{5}{6}\right)^{N-n} \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

(2)

$$\begin{aligned} \log(P_N(n)) &\sim -N \left(\log 6 + \frac{N-n}{N} \log 5 + \frac{n}{N} \log \frac{n}{N} + \frac{N-n}{N} \log \frac{N-n}{N} \right) \\ &= -N \left\{ \log 6 + \left(-x + \frac{5}{6}\right) \log 5 + \left(x + \frac{1}{6}\right) \log \left(x + \frac{1}{6}\right) \right. \\ &\quad \left. + \left(-x + \frac{5}{6}\right) \log \left(-x + \frac{5}{6}\right) \right\} \\ &= -N \left\{ \left(x + \frac{1}{6}\right) \log(1 + 6x) + \left(-x + \frac{5}{6}\right) \log \left(1 - \frac{6}{5}x\right) \right\} \\ &= -N \left\{ \left(x + \frac{1}{6}\right) (6x - 18x^2) + \left(-x + \frac{5}{6}\right) \left(-\frac{6}{5}x - \frac{18}{25}x^2\right) \right\} \\ &= -\frac{18}{5}Nx^2 - \frac{432}{25}Nx^3 \end{aligned}$$

2次までを取ることにすれば, (11.7)式の導出にならない,

$$p_N(x) = \sqrt{\frac{18N}{5\pi}} \exp\left(-\frac{18}{5}Nx^2\right)$$

となる.

第12章

問題1

1mol の理想気体を考える。B→C と D→A の等温変化では熱量はすべて仕事になるので、

$$Q_1 = \int_B^C P dV = RT_1 \int_B^C \frac{dV}{V} = RT_1 \log \frac{V_C}{V_B}, \quad Q_2 = RT_2 \log \frac{V_D}{V_A}$$

が成り立つ。ここで理想気体の状態方程式 $PV = RT$ を用いている。A→B と C→D の断熱変化ではポアソンの式 (例題 12.1) が成り立つので、

$$T_1 V_B^{\gamma-1} = T_2 V_A^{\gamma-1}, \quad T_1 V_C^{\gamma-1} = T_2 V_D^{\gamma-1}$$

となる。この式より、 $\frac{V_C}{V_B} = \frac{V_D}{V_A}$ が成り立つことがわかるので、最初の式により

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{T_2}{T_1}$$

が成り立ち、したがって(12.10)式が成り立つ。

問題2

(12.25)式を全微分すれば、

$$dF = dE - TdS - SdT$$

となる。これに(12.22)式を代入すれば(12.26)式が得られる。同様に(12.25)式を T で割ったものの全微分は、

$$d\left(\frac{F}{T}\right) = d\left(\frac{E}{T}\right) - dS = \frac{dE}{T} + Ed\left(\frac{1}{T}\right) - dS = \frac{dE}{T} - \frac{E}{T^2}dT - dS$$

これに(12.22)式を代入すれば(12.27)式が得られる。

問題3

$G = F + PV$ を全微分すれば、

$$dG = dF + PdV + VdP$$

これに (12.26) 式を代入すれば(12.30)式が得られる。

第13章

問題1

$\frac{m}{1+m} = a (< 1)$ とおく. (13.12)式については,

$$\sum_{M_1=0}^{\infty} p_{N_1}(M_1) = \frac{1}{(1+m)^{N_1}} \sum_{M_1=0}^{\infty} \frac{(M_1 + N_1 - 1)!}{(N_1 - 1)! M_1!} a^{M_1}$$

であり, 一方ヒントのテイラー展開式より

$$(1-x)^{-N_1} = \sum_{M_1=0}^{\infty} \frac{(M_1 + N_1 - 1)!}{(N_1 - 1)! M_1!} x^{M_1}$$

なので,

$$\sum_{M_1=0}^{\infty} p_{N_1}(M_1) = \frac{1}{(1+m)^{N_1}} (1-a)^{-N_1} = 1$$

が成り立つ. (13.13)式については, 例題 13.1 で(13.6)式を導いたのにならぬ,

$$\begin{aligned} \sum_{M_1=0}^{\infty} M_1 p_{N_1}(M_1) &= \frac{1}{(1+m)^{N_1}} \sum_{M_1=0}^{\infty} \frac{(M_1 + N_1 - 1)!}{(N_1 - 1)! M_1!} M_1 a^{M_1} \\ &= \frac{a}{(1+m)^{N_1}} \frac{d}{da} \left(\sum_{M_1=0}^{\infty} \frac{(M_1 + N_1 - 1)!}{(N_1 - 1)! M_1!} a^{M_1} \right) = \frac{a}{(1+m)^{N_1}} \frac{d}{da} (1-a)^{-N_1} \\ &= \frac{aN_1}{(1+m)^{N_1}} (1-a)^{-N_1-1} = aN_1(1+m) = mN_1 \end{aligned}$$

が示せる.

問題2

$$\frac{\partial}{\partial \theta} Z(\theta) = \frac{\partial}{\partial \theta} \sum_i e^{-\frac{E_i}{\theta}} = \frac{1}{\theta^2} \sum_i E_i e^{-\frac{E_i}{\theta}}$$

より,

$$\bar{E} = \frac{\sum_i E_i e^{-\frac{E_i}{\theta}}}{Z(\theta)} = \theta^2 \frac{1}{Z(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} Z(\theta) = \theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} \log Z(\theta)$$

が成り立つ.

問題3

(11.13)式より, ミクロカノニカル分布でのエントロピー S は, スターリングの公式((11.3)式)を利用して,

$$\begin{aligned} S &= k_B \log W_N(E) = k_B \log(M + N - 1)! - k_B \log M! - k_B \log(N - 1)! \\ &\sim k_B(M + N) \log(M + N) - k_B M \log M - k_B N \log N \end{aligned}$$

とすることができる. ここで内部エネルギーは $E = M\varepsilon_0$ なので,

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial E} &= \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial S}{\partial M} = \frac{k_B}{\varepsilon_0} (M+N)(M+N)^{-1} + \frac{k_B}{\varepsilon_0} \log(M+N) - \frac{k_B}{\varepsilon_0} M M^{-1} - \frac{k_B}{\varepsilon_0} \log M \\ &= \frac{k_B}{\varepsilon_0} \log(M+N) - \frac{k_B}{\varepsilon_0} \log M = \frac{k_B}{\varepsilon_0} \log\left(\frac{M+N}{M}\right) = \frac{k_B}{\varepsilon_0} \log\left(1 + \frac{1}{m}\right)\end{aligned}$$

(12.24)式よりこれが $1/T$ に等しいので,

$$k_B T = \varepsilon_0 / \log\left(1 + \frac{1}{m}\right) \equiv \theta$$

が成り立つ.

問題 4

(1)

(13.23)式より,

$$Z_1 = \sum_{n=0}^1 e^{-\frac{n\varepsilon_0}{k_B T}} = 1 + e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}$$

(2)

粒子 1 個を部分系と考えれば, 全体の分配関数は部分系の分配関数の積であるから,

$$Z_N = Z_1^N = \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}\right)^N$$

【別解】 粒子 N 個の場合, 全体として取りうるエネルギー準位は $0, \varepsilon_0, 2\varepsilon_0, \dots, N\varepsilon_0$ の $N+1$ 個. 全体が n 番目の準位にあるということは, 上の準位にある粒子が n 個あるということで, この場合の数は ${}_N C_n$, つまり ${}_N C_n$ 個の状態が縮退している. よって

$$Z_N = {}_N C_0 + {}_N C_1 e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} + {}_N C_2 e^{-\frac{2\varepsilon_0}{k_B T}} + \dots + {}_N C_N e^{-\frac{N\varepsilon_0}{k_B T}} = \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}\right)^N \quad (\because 2 \text{ 項定理})$$

(3)

(13.48)式より

$$E = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \log\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}\right)^N = N k_B T^2 \frac{\frac{\varepsilon_0}{k_B T^2} e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}} = \frac{N \varepsilon_0}{e^{\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} + 1}$$

第14章

問題1

$$v = \frac{c}{\lambda} \text{より } dv = -\frac{c}{\lambda^2} d\lambda$$

$$\bar{E}_v dv = -\frac{8\pi}{c^3} \frac{hc^3}{\lambda^3} \frac{c}{\lambda^2} d\lambda = -\frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} = -\bar{E}_\lambda d\lambda$$

周波数 v が大きくなると波長 λ は小さくなることに注意されたい。

問題2

(14.14)式より $\lambda_m T = 0.2918 \text{ cm}\cdot\text{K}$ なので、 λ_m はそれぞれ、

$$(i) 2.918 \mu\text{m} \quad (ii) 486.3 \text{ nm} \quad (iii) 29.18 \text{ nm}$$

$$\text{波長 } 1 \mu\text{m} \text{ の光子のエネルギーは、 } \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{1 \times 10^{-6}} = 1.989 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$1 \text{ eV} = 1.60 \times 10^{-19} \text{ J}$ なので波長 $1.24 \mu\text{m}$ の光子エネルギーが 1 eV に相当する。これよりそれぞれ、

$$(i) 0.425 \text{ eV} \quad (ii) 2.55 \text{ eV} \quad (iii) 42.5 \text{ eV}$$

となる。光子のエネルギーは波長が短いほど大きいことに注意されたい。

問題3

(1)

14.1 節の議論にならって、

$$\frac{\lambda}{2} n = L \quad \text{より} \quad v = \frac{c}{2L} n$$

よって v と $v + \Delta v$ との間の状態数は

$$\frac{2L}{c} \Delta v$$

となる。

(2)

$$\int_0^{v_D} \frac{2L}{c} dv = N \quad \text{より} \quad v_D = \frac{c}{2L} N$$

(3)

$$\bar{E} = \int_0^{v_D} \frac{hv}{e^{\frac{hv}{k_B T}} - 1} \cdot \frac{2L}{c} dv = \int_0^{\Theta} \frac{x k_B T}{e^x - 1} \cdot \frac{2L}{c} \cdot \frac{k_B T}{h} dx = N k_B \Theta \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \int_0^{\Theta} \frac{x}{e^x - 1} dx$$

(4)

14.2 節の議論にならえば, $\Theta/T \rightarrow 0$ の極限では, $x \rightarrow 0$ なので $e^x - 1 \sim x$ とできるので,

$$\bar{E} \sim Nk_B \Theta \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \int_0^{\frac{\Theta}{T}} \frac{x}{x} dx = Nk_B \Theta \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \left(\frac{\Theta}{T}\right) = Nk_B T$$

よって $C_V = Nk_B$

(5)

同様に低温では $\Theta/T \rightarrow \infty$ とできるので,

$$\bar{E} = Nk_B \Theta \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 \int_0^{\infty} \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6} Nk_B \Theta \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2$$

これを微分して

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} Nk_B \frac{T}{\Theta}$$

となり, 1次元の場合には T に比例する.

第15章

問題1

$$\begin{aligned}\bar{N} &= k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \log \prod_v \left[1 \pm \exp\left(-\frac{\varepsilon_v - \mu}{k_B T}\right) \right]^{\pm 1} = k_B T \sum_{v=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \mu} \log \left[1 \pm \exp\left(-\frac{\varepsilon_v - \mu}{k_B T}\right) \right]^{\pm 1} \\ &= k_B T \sum_{v=1}^{\infty} \frac{\frac{1}{k_B T} \exp\left(-\frac{\varepsilon_v - \mu}{k_B T}\right)}{1 \pm \exp\left(-\frac{\varepsilon_v - \mu}{k_B T}\right)} = \sum_{v=1}^{\infty} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_v - \mu}{k_B T}\right) \pm 1}\end{aligned}$$

+がフェルミ粒子の場合、-がボーズ粒子の場合である。

問題2

陽子(P), 中性子(N), 電子(e⁻)はすべてフェルミ粒子で, フェルミ粒子が偶数個集まった粒子はボーズ粒子, 奇数個でフェルミ粒子

- ① 2P+N+2e⁻ フェルミ粒子 ② 2P+ 2e⁻ ボーズ粒子 ③ 2P+ 2N ボーズ粒子 ④ 3P+3N+2e⁻ ボーズ粒子 ⑤ 3P+4N+2e⁻ フェルミ粒子 よって①,⑤

問題3

$$\frac{d}{d\varepsilon} f(\varepsilon) = -\frac{1}{k_B T} \frac{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) + 1\right]^2}$$

なので, $\varepsilon = \mu$ における傾きは $f'(\mu) = -\frac{1}{4k_B T}$. よって,

$$f(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & \varepsilon < -2k_B T + \mu \\ -\frac{\varepsilon - \mu}{4k_B T} + \frac{1}{2}, & -2k_B T + \mu \leq \varepsilon \leq 2k_B T + \mu \\ 0, & 2k_B T + \mu < \varepsilon \end{cases}$$

問題4

(1)

$${}_N C_{N_1} = \frac{N!}{(N - N_1)! N_1!}$$

(2)

(1)のすべての場合についてエネルギー(-N₁ε₀)は同じ, つまり縮退している. したがって,

$$Z(N_1, T) = {}_N C_{N_1} \exp\left(\frac{N_1 \varepsilon_0}{k_B T}\right)$$

(3)

(15.20)式に $Z(N_1, T)$ を代入して, 2項定理を用いれば,

$$\mathcal{E}(T, \mu) = \sum_{N_1=0}^N {}_N C_{N_1} \exp\left(\frac{N_1(\varepsilon_0 + \mu)}{k_B T}\right) = \sum_{N_1=0}^N {}_N C_{N_1} \left[\exp\left(\frac{\varepsilon_0 + \mu}{k_B T}\right)\right]^{N_1} = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_0 + \mu}{k_B T}\right)\right]^N$$

(4)

(15.21)式より,

$$\bar{N}_1 = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \log \mathcal{E}(T, \mu) = k_B T N \frac{\frac{1}{k_B T} \exp\left(\frac{\varepsilon_0 + \mu}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_0 + \mu}{k_B T}\right)} = \frac{N}{\exp\left(-\frac{\varepsilon_0 + \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

よって,

$$\theta = \frac{1}{\exp\left(-\frac{\varepsilon_0 + \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

(5)

平衡状態では表面と気体の化学ポテンシャルは一致する. 理想気体の化学ポテンシャルは(15.38)式により求められる. これと状態方程式 $PV = Nk_B T$ により,

$$\exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) = \frac{P}{k_B T} \frac{h^3}{(2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}}}$$

を得る. これを(4)の θ の式に代入すると,

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{\exp\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T}\right) \frac{P}{k_B T} \frac{h^3}{(2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}}}}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T}\right) \frac{P}{k_B T} \frac{h^3}{(2\pi m k_B T)^{\frac{3}{2}}}} = \frac{P}{P + P_0(T)} \quad \text{ただし } P_0(T) \\ &= k_B T \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}\right) \end{aligned}$$

とラングミュアの等温吸着式が得られる.

第16章

問題1

(1)

xy 方向に広がる辺の長さ L の正方形の薄膜に閉じ込めるとする。(16.3)式にならうと,

$$p = \frac{h}{2L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$$

状態数は、半径 $\frac{2L}{h}p$ と半径 $\frac{2L}{h}(p + \Delta p)$ の円に挟まれた部分の面積の $1/4$ 。よって,

$$\frac{1}{4} \cdot 2\pi \left(\frac{2Lp}{h}\right) \frac{2L}{h} \Delta p = \frac{2\pi S}{h^2} p \Delta p$$

これをエネルギーに変換し、面積で割ってスピン重率 2 をかけると,

$$D(\varepsilon) = \frac{4\pi m}{h^2}$$

と一定値になる。

(2)

(16.10) 式にならうと,

$$n = \int_0^{\mu_0} \frac{4\pi m}{h^2} d\varepsilon = \frac{4\pi m}{h^2} \mu_0 \Rightarrow \mu_0 = \frac{h^2}{4\pi m} n$$

(3)

(16.12) 式にならうと,

$$\bar{\varepsilon}_0 = \frac{\int_0^{\mu_0} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\mu_0} D(\varepsilon) d\varepsilon} = \frac{\int_0^{\mu_0} \varepsilon d\varepsilon}{\int_0^{\mu_0} d\varepsilon} = \frac{1}{2} \mu_0 = \frac{h^2}{8\pi m} n$$

(4)

15.4 節の議論にならう。非縮退時には $f(\varepsilon)$ はボルツマン分布で近似できるから,

$$n \sim \int_0^{\infty} \frac{4\pi m}{h^2} \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) d\varepsilon = \frac{4\pi m}{h^2} k_B T e^{\frac{\mu}{k_B T}} \Rightarrow e^{\frac{\mu}{k_B T}} = \frac{nh^2}{4\pi m k_B T}$$

(15.38)-(15.40)式の議論から、非縮退条件は

$$n \ll \frac{4\pi m k_B T}{h^2}$$

(5)

フェルミ準位 μ は

$$n = \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

から求まる。いま $D(\varepsilon)$ は定数であり、また $f(\varepsilon)$ は

$$f(\varepsilon) = \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)} = -k_B T \frac{\frac{d}{d\varepsilon} \left[1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)\right]}{1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)}$$

となるので、右辺の積分が可能で、

$$n = -\frac{4\pi m k_B T}{h^2} \left[\log \left\{ 1 + \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) \right\} \right]_0^\infty = \frac{4\pi m k_B T}{h^2} \log \left(1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right)$$

これより、

$$\mu = k_B T \log \left(e^{\frac{nh^2}{4\pi m k_B T}} - 1 \right)$$

問題 2

中性子はフェルミ粒子だから、中性子星はフェルミ気体とみなせる。中性子数密度 n は

$$n = \frac{2 \times 10^{17}}{1.7 \times 10^{-27}} = 1.18 \times 10^{44} / \text{m}^3$$

なので、 $3n/8\pi = 1.41 \times 10^{43} / \text{m}^3$ 。これより、

$$\begin{aligned} T_F &= \frac{h^2}{2mk_B} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{(6.63 \times 10^{-34})^2 \times (1.41 \times 10^{43})^{\frac{2}{3}}}{2 \times 1.7 \times 10^{-27} \times 1.38 \times 10^{-23}} \\ &= 9.34 \times (14.1)^{\frac{2}{3}} \times 10^{10} \sim 5.45 \times 10^{11} \text{K} \end{aligned}$$

星の温度 10^8K はこの T_F よりもずっと小さいので、フェルミ縮退しているとして扱わなければならない、すなわち統計力学的には低温である。

問題 3

(1)

問題 1 と同様に状態密度が一定だから、

$$n = \int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = D_0 \int_0^{\varepsilon_a} d\varepsilon = D_0 \varepsilon_a$$

(2)

$$\overline{\varepsilon_{c0}} = \frac{\int_0^{\varepsilon_a} \varepsilon D_0 d\varepsilon}{\int_0^{\varepsilon_a} D_0 d\varepsilon} = \frac{1}{2} \varepsilon_a$$

(3)

$$n = D_0 \int_0^{\varepsilon_a} f(\varepsilon) d\varepsilon + D_0 \int_{\varepsilon_b}^\infty f(\varepsilon) d\varepsilon$$

から求められる。問題(1-5)と同じく状態密度一定なので積分が可能で、

$$\begin{aligned}
n &= -D_0 k_B T \left[\log \left\{ 1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right) \right\} \right]_{\varepsilon_a}^{\varepsilon_b} - D_0 k_B T \left[\log \left\{ 1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right) \right\} \right]_{\varepsilon_b}^{\infty} \\
&= D_0 k_B T \log \frac{\left(1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_b - \mu}{k_B T}} \right)}{1 + e^{-\frac{\varepsilon_a - \mu}{k_B T}}}
\end{aligned}$$

ここで(1)より $n = D_0 \varepsilon_a$, また $e^{\mu/k_B T} \gg 1$ より $1 + e^{\frac{\mu}{k_B T}} \sim e^{\frac{\mu}{k_B T}}$ とできるので, 上式から

$$e^{\frac{\varepsilon_a - \mu}{k_B T}} = \frac{1 + e^{-\frac{\varepsilon_b - \mu}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\varepsilon_a - \mu}{k_B T}}} \Rightarrow \mu = \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2}$$

が示せる. これは, $f(\varepsilon)$ が μ に対して対称な関数であり, 伝導帯での電子の分布と価電子帯での電子がない部分 (= 正孔) の分布が対称的になることから明かである. ただし, フェルミ分布としての特徴を失って価電子帯での電子がない部分が $\varepsilon = 0$ 付近にまで来るようになるとこれは成り立たない.

(4)

$\mu = (\varepsilon_a + \varepsilon_b)/2$ を用いて,

$$n_c = D_0 \int_{\varepsilon_b}^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = -D_0 k_B T \left[\log \left\{ 1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right) \right\} \right]_{\varepsilon_b}^{\infty} = D_0 k_B T \log \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_b - \varepsilon_a}{2k_B T}} \right)$$

$\varepsilon_b - \varepsilon_a \gg k_B T$ が成り立つ場合には $e^{-\frac{\varepsilon_b - \varepsilon_a}{2k_B T}} \ll 1$ なので, x が小さいときの近似式 $\log(1 + x) \sim 1$ から,

$$n_c \sim D_0 k_B T e^{-\frac{\varepsilon_b - \varepsilon_a}{2k_B T}}$$

これは電子が非縮退として最初の式で $f(\varepsilon) \sim \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)$ とボルツマン分布で近似したものと同じ.

(5)

$$\bar{\varepsilon}_c = \frac{D_0 \int_{\varepsilon_b}^{\infty} \varepsilon f(\varepsilon) d\varepsilon}{D_0 \int_{\varepsilon_b}^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon} = \frac{D_0}{n_c} \int_{\varepsilon_b}^{\infty} \varepsilon f(\varepsilon) d\varepsilon \sim \frac{e^{\frac{\varepsilon_b - \varepsilon_a}{2k_B T}}}{k_B T} \int_{\varepsilon_b}^{\infty} \varepsilon f(\varepsilon) d\varepsilon$$

ここで $f(\varepsilon) \sim \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)$ とボルツマン分布で近似できるので, 部分積分により,

$$\int_{\varepsilon_b}^{\infty} \varepsilon \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) d\varepsilon = \left[-k_B T \varepsilon \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right)\right]_{\varepsilon_b}^{\infty} + k_B T \int_{\varepsilon_b}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) d\varepsilon$$

$$= k_B T \varepsilon_b \exp\left(-\frac{\varepsilon_b - \mu}{k_B T}\right) + (k_B T)^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_b - \mu}{k_B T}\right)$$

よって,

$$\bar{\varepsilon}_c = \varepsilon_b + k_B T$$

この結果は、 ε_b を基準として考えれば、縮退していない場合のエネルギーの(16.21)式と係数を除いて一致する。係数の違いは、本問では状態密度を一定としているため電子の自由度が2次元(問題1参照)となっているためである。

問題4

(12.29)(12.37)式より,

$$G = N\mu = E - TS + PV = \frac{5}{3}E - TS \quad \Rightarrow \quad S = \frac{\frac{5}{3}E - N\mu}{T} = \frac{\frac{5}{3}N\varepsilon - N\mu}{T}$$

(16.17),(16.18)式を代入し、さらに $\varepsilon_0 = \frac{3}{5}\mu_0$ なので,

$$S = \frac{\pi^2 N k_B^2 T}{2 \mu_0}$$

ここで、 $T = 0$ において $S = 0$ 。

ミクロカノニカル分布ではエントロピー S は(13.53)式の $S = k_B \log W_N(E)$ で表される(ボルツマンの公式)。 $T = 0$ ではエネルギーが小さい状態から埋まっていき、1から N 番目の状態がすべて埋まる。粒子は区別できないのでこのとり方は1通りしかない、つまり $W_N(E) = 1$ であり、このときには $S = 0$ となり問題3の結果に一致する。

注:理想気体では $E = \frac{3}{2}Nk_B T$ なので状態方程式から $PV = \frac{2}{3}E$ が成り立つ。この式は量子理想気体でも縮退の有無にかかわらず一般に成り立つ、つまり電子気体も圧力をもつ。また、 $T = 0$ においてエントロピー $S = 0$ となることは熱力学第三法則と呼ばれ、古典的な統計力学ではこれを導くことができないが量子統計では上のように導くことができる。 $T = 0$ においてフェルミ気体はエネルギーはゼロではないが、エントロピーはゼロになることに注意せよ。

問題5

2次元ボーズ粒子気体の状態密度は2次元フェルミ粒子気体と同じく状態密度一定である。(A.2)式で $D(\varepsilon) = D_0$ とすると,

$$D_0 \int_0^{\infty} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) - 1} d\varepsilon = n$$

これは状態密度一定のフェルミ分布と同様に積分が実行できて,

$$n = k_B T D_0 \left[\log \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right) \right\} \right]_0^\infty = -k_B T D_0 \log \left(1 - e^{-\frac{\mu}{k_B T}} \right)$$

これより

$$\mu = k_B T \log \left(1 - e^{-\frac{n}{k_B T D_0}} \right)$$

$T \rightarrow 0$ とすると $\mu \rightarrow -k_B T e^{-\frac{n}{k_B T D_0}}$ となり, どんな低温でも化学ポテンシャル μ が存在するため, ボーズ-アインシュタイン凝縮を起こさない.