第 1 問　統計力学: 固体比熱

[1]

フェルミ分布を描く (略)。

[2]

電子数 N は状態密度と分布関数を用いて表して、ゾンマーフェルト展開を通して式を整理していく。

$$
\begin{aligned}
N &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon)D(\varepsilon)d\varepsilon \\
&= \int_{-\infty}^{\mu} D(\varepsilon)d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{\mathrm{d}D(\mu)}{\mathrm{d}\varepsilon} + \mathcal{O}(T^4) \\
&= \int_{0}^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\mu} D(\varepsilon)d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{\mathrm{d}D(\varepsilon_F)}{\mathrm{d}\varepsilon} + \mathcal{O}(T^4) \\
&= N + (\mu-\varepsilon_F)D_0 + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{\mathrm{d}D(\varepsilon_F)}{\mathrm{d}\varepsilon} + \mathcal{O}(T^4)
\end{aligned} \tag{2.1}
$$

よって

$$
\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6D_0}\frac{\mathrm{d}D(\varepsilon_F)}{\mathrm{d}\varepsilon}(k_BT)^2 \tag{2.2}
$$

[3]

$$
\begin{aligned}
E(T) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon)\varepsilon D(\varepsilon)d\varepsilon \\
&\simeq \int_{0}^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon)d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\mu} \varepsilon D(\varepsilon)d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}(\varepsilon D(\varepsilon))\Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F} \\
&\simeq E(0) + \varepsilon_F D_0(\mu-\varepsilon_F) + \frac{\pi^2\varepsilon_F}{6}(k_BT)^2\frac{\mathrm{d}D(\varepsilon_F)}{\mathrm{d}\varepsilon} + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 D_0 \\
&= E_0 + \frac{\pi^2}{6}D_0(k_BT)^2 \\
C(T) &= \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = \frac{\pi^2}{3}D_0k_B^2T
\end{aligned} \tag{3.1}
$$

[4]

ボーズ分布を描く (略)。

[5]

見慣れない notation だが、イバッハ・リュートでの求め方はこんな感じ。

$$
\rho(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3}\int_{\omega}\frac{dk}{|\boldsymbol{\nabla}_k\omega(k)|} = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi k(\omega)^2}{v} = \frac{V}{2\pi^2v^3}\omega^2 \tag{5.1}
$$

これで求めたのは状態密度であって状態数ではないかも。

[6]

フォノンの振動数の上限を ω_D とおく。このときフォノンの内部エネルギーは低温であることを使いながら変形すると

$$
\begin{aligned}
E &= \int_0^{\omega_D} \frac{3\rho(\omega)\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} d\omega \\
&= \frac{3V(k_BT)^4}{2\pi^2\hbar^3 v^3} \int_0^{\infty} \frac{(\beta\hbar\omega)^3}{e^{\beta\hbar\omega}-1} d(\beta\hbar\omega) \\
&= \frac{\pi^2 V k_B^4}{10\hbar^3 v^3} T^4 \\
C &= \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = \frac{2\pi^2 V k_B^4}{5\hbar^3 v^3} T^3
\end{aligned}
\tag{6.1}
$$

[7]

電子比熱とフォノン比熱をそれぞれ $\alpha T, \gamma T^3$ のように表すと

$$
\begin{aligned}
C_V &= \alpha T + \gamma T^3 \\
\frac{C_V}{T} &= \alpha + \gamma T
\end{aligned}
\tag{7.1}
$$

となる。これより C_V/T を T^2 にたいしてプロットすると直線状に並ぶことがわかる。$T \to 0$ の外挿で電子比熱の α が、傾きからフォノン比熱の γ が求まる。また、C_T/T が $T \to 0$ で 0 になるのは比熱に電子比熱が関わっていないことを表す。比熱はフェルミ面付近の電子が担っているので、このような結晶は半導体や絶縁体である。

感想

固体の比熱の話の総おさらい。初見のときにゾンマーフェルト展開を ε_F でいったん発想が思いつかないけど、物性をいろいろやってると結構自然な発想だというのに気付けた。

低温での半導体の比熱の測定とかやったことないけど、本当にそうなるのか?