

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。

$$\begin{aligned} N &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon) D(\varepsilon) d\varepsilon \\ &= \int_{-\infty}^{\mu} D(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{dD(\mu)}{d\varepsilon} + \mathcal{O}(T^4) \\ &= \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\mu} D(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{dD(\varepsilon_F)}{d\varepsilon} + \mathcal{O}(T^4) \\ &= N + (\mu - \varepsilon_F) D_0 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{dD(\varepsilon_F)}{d\varepsilon} + \mathcal{O}(T^4) \end{aligned} \quad (2.1)$$

よって

$$\mu = \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6D_0} \frac{dD(\varepsilon_F)}{d\varepsilon} (k_B T)^2 \quad (2.2)$$

[3]

$$\begin{aligned} E(T) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon) \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon \\ &\simeq \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\mu} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{d}{d\varepsilon} (\varepsilon D(\varepsilon)) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F} \\ &\simeq E(0) + \varepsilon_F D_0 (\mu - \varepsilon_F) + \frac{\pi^2 \varepsilon_F}{6} (k_B T)^2 \frac{dD(\varepsilon_F)}{d\varepsilon} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D_0 \\ &= E_0 + \frac{\pi^2}{5} D_0 (k_B T)^2 \\ C(T) &= \frac{dE}{dT} = \frac{\pi^2}{3} D_0 k_B^2 T \end{aligned} \quad (3.1)$$

[4]

ボーズ分布を描く (略)。

[5]

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

$$\rho(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega} \frac{dk}{|\nabla_k \omega(k)|} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k(\omega)^2}{v} = \frac{V}{2\pi^2 v^3} \omega^2 \quad (5.1)$$

[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

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

[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

$$\begin{aligned}
 C_V &= \alpha T + \gamma T^3 \\
 \frac{C_V}{T} &= \alpha + \gamma T^2
 \end{aligned} \tag{7.1}$$

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。 $T \rightarrow 0$ 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 $T \rightarrow 0$ 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い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、本当にそうなるんですか？