

1

物質概論

手抜きバージョン

しけたい4 (メ切が近すぎる)

1 謝辞

無断転載禁止です



- ・アイコンは夏蛸様のものを転載しています
- ・レポート問題の答えどこが違うんだと尋ねられると答えに困ります
- ・間違いを見つけましたらご連絡ください
- ・あくまで参考資料として扱ってください。レポートは自力で解くのをお勧めします
- ・特に画像はしけたい4がレポートで使うので wiki から直接引用したもの以外は使用を勧めません
- ・今回はネタがありません。ご注意ください。

冷蔵庫に飲み物が酒しかねえ！

というわけで酔っ払いなう。

どこがネタかというとアイコン除外すると、だいたいしけ4のレポートになるという点がネタです。プリンタ家になから研究室で朝刷るがな！

ちなみに問いの何番がレポート問題は忘れていたので全部解いているが気にしない。



2 問1



エネルギーが $E \sim E + \delta E$ となるような領域の広さを考える。 k は量子化されていて $k = \frac{2n\pi}{L}$ の周期境界条件を満たすものに限られているが、 k 空間上では k の値に依らず等しい密度で存在する。また、 $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ である。



エネルギーが $E \sim E + \delta E$ となる k は即ち

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k + \delta k)^2 - \frac{\hbar^2}{2m}(k) = \frac{\hbar}{m} k \delta k = \delta E \text{ より}$$

$$\delta k = \frac{m}{\hbar} \times \frac{1}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \delta E$$



此処までは系の次元に依らない。次にエネルギーが $E \sim E + \delta E$ に対応する k 空間の広さと、 k 空間上の格子点の密度を考える。

3次元の場合、密度が $\frac{L^3}{(2\pi)^3}$ で空間の広さが $4\pi k^2 \delta k = 4\pi \frac{2m}{\hbar^2} E \times \frac{m}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \delta E$ より

$$D(E) = \frac{1}{L^3} \times \frac{L^3}{2\pi^3} \times 4\pi \frac{2m}{\hbar^2} E \times \frac{m}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \times 2$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{3/2} E^{1/2}$$

となった。(最後の2はスピン自由度)



この調子で1次元、2次元へと拡張する

1次元の場合、密度が $\frac{L}{2\pi}$ 、空間の広さが δk なので

$$D = \frac{1}{L} \times \frac{L}{2\pi} \frac{m}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \times 2 = \frac{m}{\pi} \frac{1}{\sqrt{2mE}}$$



2次元の場合、密度が $\frac{L^2}{(2\pi)^2}$ 、空間の広さが $4\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \frac{m}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \delta E$ なので

$$D = \frac{1}{L^2} \frac{L^2}{(2\pi)^2} \times 4\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \frac{m}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \times 2 = \frac{2m}{\hbar\pi^2}$$

3 問2

n 次元系の古典的な電子比熱は、電子の運動量が等分配則より $\frac{1}{2}m \langle v^2 \rangle = \frac{n}{2}k_B T$ で与えられることから、3次元系での電子比熱は $\frac{3}{2}nk_B$ である。電子比熱は問1の続きで求めることができる。



$$C(T) = \frac{\partial}{\partial T} \left(\int_0^\infty f(E) D(E) dE \right) = \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty \frac{1}{\exp\left[\frac{1}{k_B T} (E - k_B T_F)\right] + 1} dE$$

具体的な計算はプリントにあるので省略すると

$$C(T) = \frac{1}{2} \pi^2 n k_B \frac{T}{T_F}$$

となる。これに具体的な値を入れることで比熱を求める。此処までで求めた式は「 1cm^3 あたりの比熱」なので、これを電子1モルあたりの比熱にする。



1cm^3 あたりの電子の数は

$\frac{\rho}{W} \times Z [\text{mol}]$ で表せる。よって、1モルあたりの比熱は

$\frac{1}{\frac{\rho}{W} \times Z} C(E)$ で求められる。

後はそれぞれを計算することで

種類	密度 ρ	原子量 W	価数 Z	C 古典	C 量子
Li	0.53	6.94	1	$n \times 2.71053 \times 10^{-19}$	$n \frac{T}{T_F} \times 8.91728 \times 10^{-19}$
Cu	0.53	6.94	1	$n \times 1.46794 \times 10^{-19}$	$n \frac{T}{T_F} \times 4.82934 \times 10^{-19}$
Al	0.53	6.94	1	$n \times 6.89489 \times 10^{-20}$	$n \frac{T}{T_F} \times 2.26833 \times 10^{-19}$

単位は $[mJ/\text{mol} \cdot K]$



補足：こいつは**モル比熱**という熱力学でよく使う物理量の一つで、金属によって実はあまり差が出ない。問いで出てきた n の見積もり方が $n \sim \frac{\rho}{W} \times Z$ であることから予想がつくだろう。

4 問 3



まずはデバイ模型から学習しよう。レッツゴー。隙間妖怪



$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{y^4 e^y}{(e^y - 1)^2} dy$$

高温で $C_V \sim 3Nk_B$

低温で $C_V \sim \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$

となり、こちらはデバイの T^3 則を満たすわ。



1 価、1 格子に 1 電子なので、比熱にまつわる N は無視して良い。電子比熱は T_F より温度が低いことを前提としているので

$$T_F \gg T \gg \Theta_D \text{ で } 3k_B \sim \frac{1}{2}\pi^2 k_B \frac{T}{T_F}$$

$$\Theta_D \gg T \text{ で } \frac{12\pi^4}{5} k_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \sim \frac{1}{2}\pi^2 k_B \frac{T}{T_F}$$

前者は $T \sim 5000\text{K}$ となり、適していない。

後者は $T^2 \sim 2.1$ となり、凡そ $1.4[\text{K}]$ で両者が等しくなることが予想がつく。



って。私に働かせないの。

しけ4、貴方が働くべきなのよ？

5 問 4



授業でやったことのトレースでらくらく潰せます。何度も書くのも馬鹿馬鹿しいですが電気移動度を計算する以外にやることがないので。



古典的な場合は

$$m \frac{dv}{dt} = eE - \frac{m(v-v_0)}{\tau}$$

$$j = env$$



この二つの式から定常状態の物理量は $v_{sta} = v_0 + \frac{\tau}{m} eE$

$$j_{sta} = en(v_0 + \tau eE)$$

$$v_0 = 0 \text{ として } j = \frac{ne^2\tau}{m} E = \sigma E$$

量子的な場合は

$\frac{df}{dt} = \tau(f - f_0)$ (分配関数の時間 τ での緩和を仮定)。定常状態 (f が t によらない) では

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \frac{\partial f}{\partial p} eE$$

$$\frac{\partial f}{\partial p} = \frac{\partial \epsilon}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial \epsilon} = v \frac{\partial f}{\partial \epsilon}$$

以上より

$$eEv \frac{\partial f}{\partial \epsilon} = \tau(f - f_0)$$



$$\text{これらから } f = f_0 + \tau eEv \frac{\partial f}{\partial \epsilon}$$

$$j = \int evf(\epsilon)D(\epsilon)d\epsilon$$

j の積分では二つのことを考えます。

・ f_0 の項はイラナイ

$\frac{\partial f}{\partial \epsilon}$ は δ 関数 $\delta(\epsilon - \epsilon_F)$ に近似

以上より

$$j = \tau e^2 v_{\epsilon_F}^2 D(\epsilon_F) E = \sigma E$$



自由電子ならば問 1 で求めた情報から

$$n = \frac{1}{L^3} 2 \times \frac{4\pi k_F^3}{3} \times \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{k_F^3}{3\pi}$$

$$D(\epsilon_F) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{3/2} E^{1/2} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m} k_F^2}$$

$$\frac{1}{2}m < v_{\epsilon_F} > = \frac{1}{3}\epsilon_F = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$$



以上より

$$\tau e^2 v_{\epsilon_F}^2 D(\epsilon_F) = \frac{ne^2\tau}{m}$$

となる。



5.1 課題 2



古典的な抵抗の表記は電気伝導に有効な「キャリアの密度」が状態密度によって変化することを考慮に入れていない。電気伝導はフェルミ面近傍の電子の影響が強く、状態密度の形にも依存することから、古典的な電気伝導度は自由電子近似から外れると正しい結果が得られなくなる。