物理工学専攻院試解答集
2014 年度物理学 II 第 4 問

政岡凜太郎

[1] 低周波の状態密度

d 次元の波数空間で、半径 k の球（円）に含まれる状態数は体積に比例し、$N(k) \propto k^d$ である。線形分散 $\omega = vk$ から $k = \omega/v$ なので

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} \propto \omega^{d-1}. \tag{1}$$

従って 3 次元立方格子では $p = 2$、2 次元正方格子では $p = 1$ である。

[2] 低温比熱

低周波の状態密度を $D(\omega) = A\omega^p$ と書く。Debye 近似では、このべき則を有限個のモード数に合う上限角周波数 ω_D まで延長する。この近似での内部エネルギーは

$$U = \int_0^{\omega_D} d\omega\, D(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1}. \tag{2}$$

十分低温では寄与する周波数は $k_B T/\hbar \ll \omega_D$ であり、上限を無限大まで延ばせる。$x = \hbar\omega/(k_B T)$ と置換すると

$$U \propto T^{p+2} \int_0^{\infty} \frac{x^{p+1}}{e^x - 1}\, dx, \qquad C_V = \frac{dU}{dT} \propto T^{p+1}. \tag{3}$$

よって 3 次元では $q = 3$、2 次元では $q = 2$ となる。

[3] 層状系の伝搬方向

図 3(i) の帯域幅は ω_a、(ii) は ω_b であり、$\omega_a \ll \omega_b$ である。面内では結合が強いため復元力と音速が大きく、面内方向の分散は広い帯域を持つ。従って (ii) が面内、分散の狭い (i) が弱く結合した面間方向である。

[4] 等エネルギー面

面内波数を $k_\parallel = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$、面間波数を k_z とする。両方向で線形分散が成り立つ $\omega_0 \ll \omega_a$ では、長波長の音響分散は

$$\omega^2 \simeq v_\parallel^2 k_\parallel^2 + v_\perp^2 k_z^2. \tag{4}$$

従って $\omega = \omega_0$ 面は

$$v_\parallel^2 (k_x^2 + k_y^2) + v_\perp^2 k_z^2 = \omega_0^2, \tag{5}$$

すなわち異方的な楕円体である。

$\omega_a \ll \omega_0 \ll \omega_b$ では、面内分散は線形の範囲にある。弱い面間方向の分散は k_z に依存するが、その ω^2 への寄与を $f(k_z)$ と書けば、通常の弱結合近似では $0 \le f(k_z) \lesssim \omega_a^2 \ll \omega_0^2$ である。したがって主項では

$$v_\parallel^2(k_x^2 + k_y^2) = \omega_0^2 - f(k_z) \simeq \omega_0^2. \tag{6}$$

面内波数の大きさは $k_\parallel \simeq \omega_0/v_\parallel$ でほぼ一定となり、等エネルギー面は k_z 方向に第一ブリルアン領域全体へ延びる円筒面に近い。

[5] 層状系の状態密度

低周波では楕円体の体積が ω^3 に比例する。状態数 $N(\omega) \propto \omega^3$ を微分すれば

$$D(\omega) \propto \omega^2, \qquad r = 2 \quad (\omega \ll \omega_a). \tag{7}$$

中間域の円筒では、面間方向の波数幅はほぼ一定で、囲まれる状態数は面内円の面積に比例する。主項の半径は $k_\parallel \simeq \omega/v_\parallel$ なので、$\omega \gg \omega_a$ では $N(\omega) \propto \omega^2$、従って

$$D(\omega) \propto \omega, \qquad r = 1 \quad (\omega_a \ll \omega \ll \omega_b). \tag{8}$$

[6] 層状系の比熱

熱的に寄与する周波数域全体で状態密度を $D(\omega) \propto \omega^r$ と近似できる場合、比熱積分で $x = \hbar\omega/(k_B T)$ と置けば

$$C_V \propto T^{r+1} \int_0^\infty dx\, x^{r+2} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2}. \tag{9}$$

この積分は温度によらない。$k_B T \ll \hbar\omega_a$ では熱的周波数域が低周波の $D(\omega) \propto \omega^2$ に収まるので $s = 3$ となる。

中間温度 $\hbar\omega_a \ll k_B T \ll \hbar\omega_b$ では、$D(\omega) \propto \omega$ が成り立つ領域の寄与は主項として

$$C_{V,\mathrm{mid}} \propto T^2 \int_{\hbar\omega_a/(k_B T)}^{\hbar\omega_b/(k_B T)} dx\, x^3 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \tag{10}$$

である。下端を 0 へ延ばす相対誤差は、被積分関数が $x \to 0$ で x に近づくため $O((\hbar\omega_a/k_B T)^2)$ となる。ただし実際の低周波モードをこの延長で置き換えたわけではない。[4] の非負で有界な面間寄与をもつ分散では、$\omega \lesssim \omega_a$ の状態数は面内半径 $\omega_a/v_\parallel$ の円筒内の状態数以下であり、熱的半径 $k_B T/(\hbar v_\parallel)$ の状態数に比べて $O((\hbar\omega_a/k_B T)^2)$ である。低周波の各モードの比熱は高々 k_B なので、この部分も主項には影響しない。上端側は熱的占有の指数因子で抑えられる。従って面内線形分散が熱的周波数域で有効なこの温度範囲では $C_V \propto T^2$、すなわち $s = 2$ である。$\hbar\omega_b \ll k_B T$ では全フォノンモードが古典極限に入り、各モードの比熱は温度によらず一定なので $s = 0$ となる。