

有効状態密度の計算を行うときに気をつけること

(数値計算での物理単位系の取り扱い)

有効状態密度 N_c を計算するときに、プランク定数やボルツマン定数を[eV]単位で表示し使う時の注意事項です。この事は一般的に言えることですが、間違いやすいので SI 単位系で計算する方がよいと考えます。

SI 国際単位(MKSA) 系での計算をする場合は、エネルギーの単位に[eV]を使わずに、[J]のままです。従ってボルツマン定数は $k = 1.38 \times 10^{-23}$ [J/K] を、プランク定数は $h = 6.62 \times 10^{-34}$ [J·s] を使います。仮に $m_e = 0.328m_0$ とすれば、300K で、

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} = 4.7 \times 10^{24} [\text{m}^{-3}] = 4.7 \times 10^{18} [\text{cm}^{-3}]$$

となります。ここで電子の静止質量 $m_0 = 9.11 \times 10^{-31}$ [kg] の値をそのまま使います。

さて、 k と h を[eV]に換算して計算してみます。 $e = 1.602 \times 10^{-19}$ [C] を使いますが、この場合、式(3)の括弧内の分母 h^2 には[eV]換算が二乗で入ってきます。分子は k で[eV]換算が一乗ですから一致しません。従って質量も[eV]換算をする必要があります、 $1[\text{kg}] = 6.24 \times 10^{18} [\text{eV} \cdot \text{s}^2 \cdot \text{m}^{-2}]$ の式が必要になってきます(電荷の逆数だけ補正が出ます)。これで括弧内が[eV]で統一されます。しかし気をつけないと質量に電荷を演算する事になるこの[kg]換算を見落とします。

以上のことから、SI 単位[J]のまま計算を進めていけば、質量は[kg]を素直に使えらるということです。SI(MKS)の基本単位で計算する方が安全です。例えば、自分で導出した理論式など、一般的な式に値を入れて計算して行く場合に、式の中で何処に換算があるのか気を付けないとミスに繋がります。従って、SI 単位系にある単位を使って計算を進めて行く事を勧めるわけです。

国際単位系については産業技術総合研究所ホームページ <http://www.nmij.jp/library/units/si/> に掲載してあります。物理量を計算するときは、長さ(m)、質量(kg)、時間(s)、電流(A)、温度(K)、物質質量(mol)、そして光度(cd)の七つからなる「基本単位」と、ラジアン(rad)など 22 個からなる「固有の名称とその独自の記号を与えた量とその単位」を使っての計算が無難です。

なお、ホール係数などを計算する場合は、実用単位系という更にややこしいものも使います。電磁気学の計算でも単位系が複雑です。教科書などをきちんと調べるように心懸けましょう。