

単価格子中の自由電子の数 ← 価数

$$bcc: \text{Na, K} \quad (\text{自由電子/原子} = 1, N = 2)$$

$$fcc: \text{Cu, Ag, Au} \quad (\text{自由電子/原子} = 1, N = 4)$$

$$\text{Al} \quad (\text{自由電子/原子} = 3, N = 4 \times 3 = 12)$$

$$\gamma\text{-P} = \text{Hg} \quad (\text{自由電子/原子} = 2, N = 6 \times 2 = 12)$$

例外: 3価、2価、 $N = 12$ である。

n (電子密度) の公式 (2.14) - ① -

$$\textcircled{1} \quad n = \frac{N}{V} \quad (\text{価数}) \quad (N = \text{単価格子中の電子数})$$

$$\textcircled{2} \quad n = \frac{(\text{価数}) \times N_A}{1 \text{ mol の体積}} \rightarrow \frac{(\text{分子量})}{(\text{質量密度})} \left(\frac{\text{g/mol}}{\text{g/cm}^3} = \frac{\text{cm}^3}{\text{mol} (=1)} \right)$$

Ex Cuの k_F を求める。

Cuの分子量63.5、密度 8.93 g/cm^3 とする。

$$1 \text{ mol の体積は、} 63.5 \div 8.93 = 7.11 \text{ cm}^3 = 7.11 \times 10^{24} \text{ \AA}^3$$

$$\text{立方体の形状を仮定すると、1辺の長さ} L \approx 2 \text{ cm} (1.92 \text{ cm}) \Leftrightarrow \frac{2\pi}{L} \approx 10^{-8} \text{ \AA}^{-1}$$

(1.44)に代入すると

$$k_F = \left[3\pi^2 \left(\frac{6.02 \times 10^{23}}{7.11 \times 10^{24}} \right) \right]^{\frac{1}{3}} \approx 1.358 \text{ \AA}^{-1}$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$$

$$1 \text{ mol の体積} = \frac{63.5}{8.93} = 7.11 \text{ cm}^3 = 7.11 \times 10^{-6} \text{ m}^3 = 7.11 \times 10^{24} \text{ \AA}^3$$

$$k_F = \left(3\pi^2 \left(\frac{6.02 \times 10^{23} \times 1}{7.11 \times 10^{24}} \right) \right)^{\frac{1}{3}} = 1.358 \text{ [\AA}^{-1}]$$

② n の計算方法

Na 結晶構造bcc、格子定数4.22Å

$$\text{原子1個当たりの体積}\Omega = \frac{(4.22)^3}{2} = 37.6[\text{\AA}^3]$$

Naは1価なので1原子あたり伝導電子1個 $\Rightarrow N=1$

$$\text{よって } E_F = 36.18 \times \left(\frac{1}{37.6}\right)^{\frac{2}{3}} = 3.2[\text{eV}]$$

温度に換算すると

$$E_F = k_B T_F \text{ から } T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{1.60219 \times 10^{-19}}{1.38062 \times 10^{-23}} = 1.160486 \times 10^4 [\text{K}]$$

$$\text{Naの } E_F \text{ は } T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{3.2 \times 1.60219 \times 10^{-19}}{1.38062 \times 10^{-23}} = 3.7 \times 10^4 [\text{K}]$$

1[eV] = 11605[K]より

約3万K位(37409K)

フェルミ面上の電子の波長 $\lambda_F = \frac{h}{mv_F}$ の数

$$\textcircled{1} n = \frac{2 \times 1}{(4.22)^3}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3n^{\frac{1}{3}} \right)^{\frac{2}{3}} \times 6.24 \times 10^{18} = 3.2 [\text{eV}]$$

$$E_F = k_B T_F \quad (k_B = 8.617 \times 10^{-5} [\text{eV/K}], T_F = 3.7 \times 10^4 [\text{K}])$$

$$T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{3.2 \times 1.602 \times 10^{-19}}{1.381 \times 10^{-23}} = 3.7 \times 10^4 [\text{K}]$$

$k_B [J/K] [6.6 \times 10^{-27} \text{ eV} \rightarrow J] = 1.38$

★
基本的に Å 1単位で計算する
これは、はいから、式で使うなら
mに次元を直して使う。

$$J = eV, \left(\frac{1}{e} = \frac{1}{6.602 \times 10^{-19}} \right)$$