

単位格子中の自由電子の数

$$b_{CC} = N_A / k_S \quad (\text{自由電子/原子} = 1, N = 2)$$

$$f_{CC} = \begin{cases} \text{Cu, Ag, Au} & (\text{自由電子/原子} = 1, N = 4) \\ \text{Al} & (\text{自由電子/原子} = 3, N = 4 \times 3 = 12) \end{cases}$$

$$f_{CP} = \text{Mg} \quad (\text{自由電子/原子} = 2, N = 6 / 2 = 12)$$

例外: 3倍、2倍、N=12 の場合。

n (電子密度) の公式 (21.24-2)

$$\textcircled{1} \quad n = \frac{N}{V} \quad (\text{個数}) \quad (N: \text{単位格子中の電子})$$

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

Ex Cuの k_F を求める。

Cuの分子量63.5、密度8.93g/cm³とする。

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

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

(1.44)に代入すると

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

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

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

(2) ana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

$$E_F = k_B T_F \text{から} \\ T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{1.60219 \times 10^{-19}}{1.38062 \times 10^{-23}} = 1.160486 \times 10^4 [\text{K}] \\ 1[\text{eV}] = 11605[\text{K}] \text{より} \quad \text{Naの} E_F \text{は} \\ T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{3.2 \times 1.60219 \times 10^{-19}}{1.38062 \times 10^{-23}} \quad T_F = \frac{3.2}{1.38062 \times 10^{-23}} \text{ 約 } 3 \text{万K位}(37409\text{K})$$

約3万K位(37409K)

$$n = \frac{2x}{(4,22)^3}$$

$$FF = \frac{\pi^2}{2m} \left(3\pi^2 \left(\frac{2x_1}{(4.22)^3} \right) \right)^{\frac{2}{3}} \times 6.24 \times 10^{18} = 3.2 \text{ [eV]}$$

$$E_F = k_B T_F \quad (\text{因} k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}, T_F = 721 \text{ K})$$

$$T_F = \frac{FF}{KB} = \frac{3.2 \times 1.602 \times 10^{-19}}{(1.381 \times 10^{-23})} = 3.7 \times 10^4 \text{ K}$$

∴ $\{J/k\} \subset \{f\}$. $f \mapsto J = f$.