電子物性学

第四回　自由電子の比熱

先週までにやったこと

1. ３次元自由電子(ハミルトニアンのポテンシャルV = 0)に対して
   周期境界条件を課して１電子状態を求めた

   電子状態とエネルギーは波数ベクトルで指定される（２週目までの内容)

波動関数

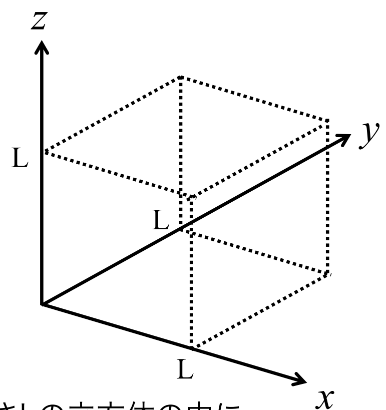
$$\Psi_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\ e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

エネルギー固有値

$$E_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$

波数ベクトル

$$\boldsymbol{k}_n = (2\pi/L)\ (n_x, n_y, n_z) \quad (n_{x, y, z} = 0, \pm 1, \pm 2\ldots)$$



１辺の長さLの立方体の中に
１電子を閉じ込める

2. 求めた電子状態(軌道)にパウリの排他律を考慮しながら
電子をN個(アボガドロ数~10^{23}オーダー)占有させてフェルミ球を構成した
(つまり波数を指定するn_x, n_y, n_zが10^{23}くらいの値になるまでの電子状態を考えることになる)

→ 最大の波数とエネルギーの値が非常に大きくなる

全電子の中で、最もエネルギーが高い電子状態を
占有している電子の波数をフェルミ波数k_F (フェルミ球の半径)、
エネルギーをフェルミエネルギーε_Fという (通常の金属ではε_F ～数eVオーダー)

1eV ~ 1万Kに相当するエネルギー

3. エネルギーεと$\varepsilon+d\varepsilon$の範囲に存在する状態の数を表す状態密度$D(\varepsilon)$という量を
定義して表式を求めた

$$D(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\varepsilon^{\frac{1}{2}}$$

エネルギーの２分の１乗に比例

今週やること

先週は絶対零度(T= 0)の状態を考えた
・２週目の講義で説明したように、有限温度ではフェルミエネルギーに近いエネルギー状態を占有する電子は熱エネルギーk_BTを受け取り、占有されていない励起状態に移ることができる（フェルミ分布関数)

状態密度が有限温度でどのように変化するか考える
さらに、得られた結果を用いて自由電子の比熱(と磁化)という物理量を求める

なぜ比熱(と磁化)か？

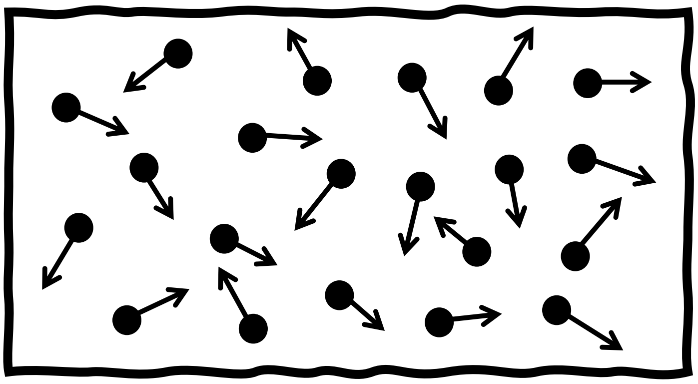
金属の自由(伝導)電子の存在については量子力学発見よりも前にわかっていた

伝導電子を古典的に扱った理論でも大きな成果があった
(例えばオームの法則、ウィーデマン・フランツの法則など　次週以降)

一方で比熱と磁化の説明には失敗した

古典論では

ある容器の中に単原子気体が閉じ込められて自由に運動しているのと同じように、
電子も金属の中に閉じ込められて運動すると考える



運動の一つの自由度に対して
$(1/2)k_BT$のエネルギー
３次元の運動では$(3/2)k_BT$

粒子数をNとすると全エネルギーEは
$E = (3/2)k_BT$

比熱は全エネルギーの温度微分

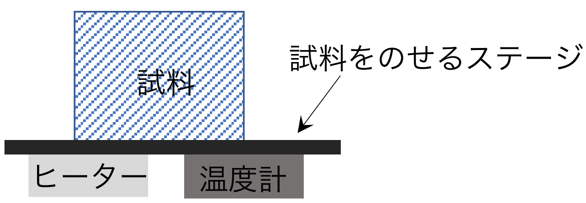
$$C = \frac{dE}{dT} = (3/2)Nk_B$$

しかし実際に観測される比熱は２桁以上小さな値となる　→ なぜ？
パウリの排他律とフェルミ統計を考慮していないから

比熱の測定方法

比熱とは
　ある量の物質の温度を1K上げるのに必要な熱量

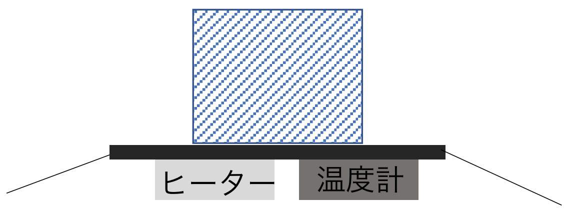
断熱法



抵抗Rのヒーターに電流Iを流す
$\Delta Q = RI^2$の熱量が発生
→ 何K温度が上がるか? ΔT

$C = \Delta Q/\Delta T$

緩和法



比熱が大きいと温度変化に時間がかかる

金属の低温での比熱

銅の比熱

W. S. Corak et al., Phys. Rev. **98** 1699, (1955)

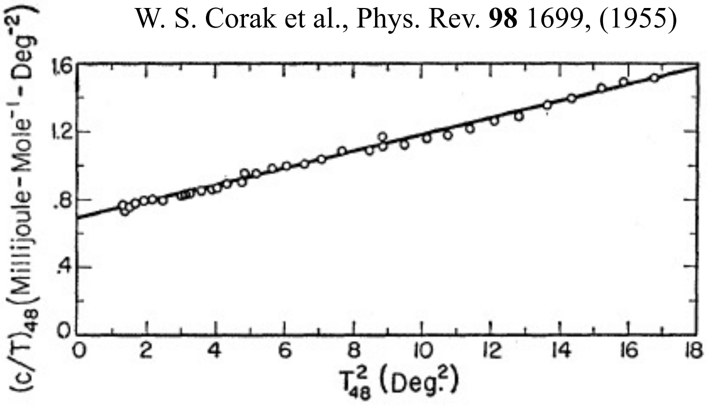


FIG. 5. Atomic heat of copper.

切片からγを傾きからβを求められる

格子比熱

デバイモデルでは低温でTの３乗に比例

電子比熱

Tに比例

低温で比熱を測定すると

$$\mathrm{C} = \gamma T + \beta T^3$$

$$C/T = \gamma + \beta T^2$$