電子物性学

第五回　自由電子の磁化と伝導

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

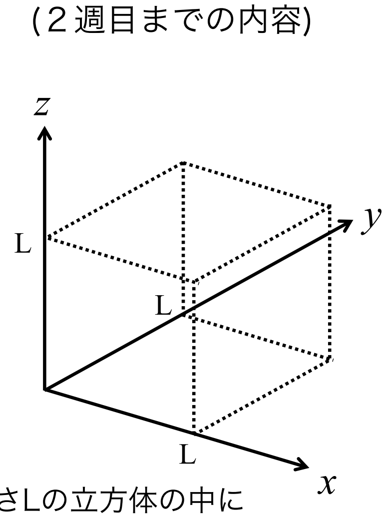
$$\Psi_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

エネルギー固有値

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

波数ベクトル

$$\boldsymbol{k}_n = (2\pi/L)\,(n_x, n_y, n_z) \quad (n_{x,\,y,\,z} = 0, \pm1, \pm2\ldots)$$



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)

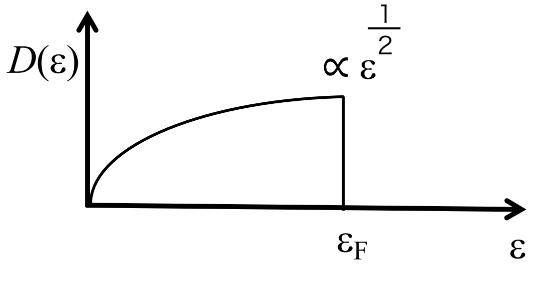
1eV ~ 1万Kに相当するエネルギー

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

3次元では

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

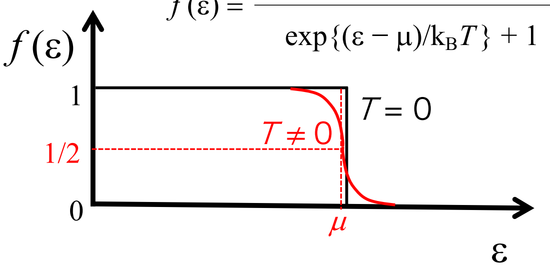
エネルギーの２分の１乗に比例

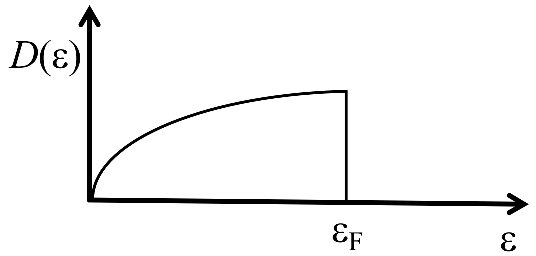


(３週目までの内容)
１次元、２次元の場合の状態密度は
レポート課題

4. 有限温度では各状態の占有確率がフェルミ分布関数に従うことを考慮する

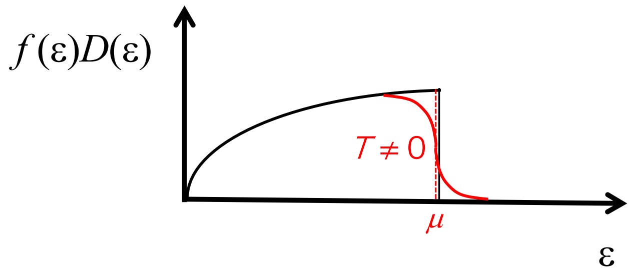
$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\{(\varepsilon - \mu)/k_B T\} + 1}$$





フェルミ分布関数と状態密度をかけあわせると…

$f(\varepsilon)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon$ =
(εとε+dεの範囲のエネルギーをもつ状態の数)×
(εのエネルギーをもつ状態の占有確率)
= (εとε+dεの範囲のエネルギーをもつ電子の個数)



5. 自由電子の比熱を導出した

$\varepsilon \times f(\varepsilon)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon$
= (εとε+dεの範囲のエネルギーをもつ電子の個数) × (その電子がもつエネルギー)
~ (エネルギー εをもつ電子のエネルギーの総和)

これをすべてのエネルギー範囲 0 ~ ∞ で積分すると全電子がもつエネルギーの総和Eとなる

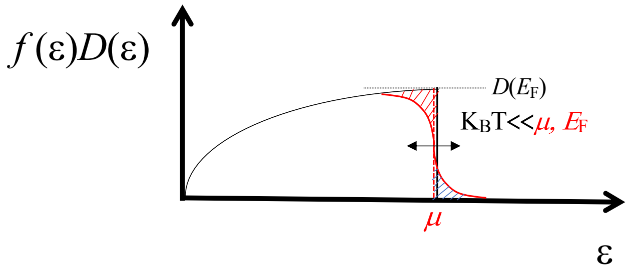
$$E = \int_0^\infty \varepsilon \times f(\varepsilon)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon$$

計算過程は先週の講義ノートや教科書参照

比熱CはエネルギーEの温度微分で与えられる　(ただし $k_B T \ll \mu$, E_Fを考えている)

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \gamma T \qquad \gamma = \frac{1}{3}\pi^2 D(E_F) k_B{}^2$$

電子比熱の定性的な説明



有限温度では赤い部分の状態を占有する電子が青い部分の高エネルギーをもつ状態へ移る

赤い部分の状態を占める電子の個数 ∝ $(1/2)D(E_F)\times k_B T$
励起した電子ひとつがもらうエネルギー $\sim k_B T$

全エネルギーの増加　$\Delta E \sim (1/2)\,D(E_F)\times k_B T\times k_B T = (1/2)\,D(E_F)\,k_B^2 T^2$
比熱 $C \sim (1/2)\,D(E_F)\,k_B^2 T$

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \gamma T$$

$$\gamma = \frac{1}{3}\pi^2 D(E_F) k_B^2$$

定量的に計算した場合と
数倍程度の違い

今週やること

1. 先週取扱えなかった磁化について比熱と同様に温度依存性を考える

2. 電気伝導(電気抵抗)・熱伝導といった伝導現象に対する
古典的モデルと量子力学を考慮したモデルの対比

1が長くなると2は来週以降とするかもしれません