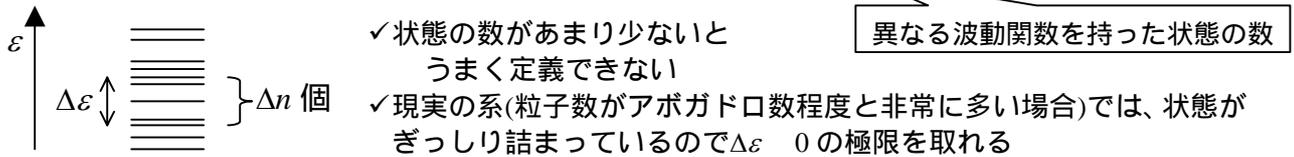


注意これは講義ノートではありません。計算の要点を抜粋しただけのものです。

状態密度 $D(\varepsilon) \equiv \Delta n / \Delta \varepsilon$ (エネルギー範囲 $\Delta \varepsilon$ に入っている状態数を Δn 個とする)



4-A 一次元の細い針金に閉じ込められた自由電子

針金の長さ L 、針金の内側ではポテンシャル=0、周期境界条件： $\varphi(0) = \varphi(L)$

固有関数： $\varphi(x) = A e^{ikx}$ 、但し $k = 2\pi n/L$ (n は整数、正負を取ることに注意)

固有エネルギー： $\varepsilon_n = \hbar^2 k^2 / 2m = \hbar^2 (2\pi n/L)^2 / 2m = (2\hbar^2 \pi^2 / mL^2) \cdot n^2$

状態密度： $D(\varepsilon) = \frac{\Delta n}{\Delta \varepsilon} \approx 2 \cdot \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} = 2 \cdot \left(\sqrt{\frac{2\hbar^2 \pi^2}{mL^2}} \right)^{-1} \frac{\partial \sqrt{\varepsilon}}{\partial \varepsilon} = \frac{L\sqrt{m}}{\hbar\pi\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$ (スピン $S = 1/2$ がある場合は二倍する)

n の正負の分

注) 上式はあくまで近似。εが小さいところでは相当ずれている。



4-B 三次元の金属の立方体に閉じ込められた自由電子

固有関数： $\varphi(\vec{r}) = C e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$ 、但し $\vec{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z)$ 、固有エネルギー $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 |\vec{k}|^2 / 2m$

まず、エネルギー ε 以下の状態数 $N(\varepsilon)$ を調べてみると、

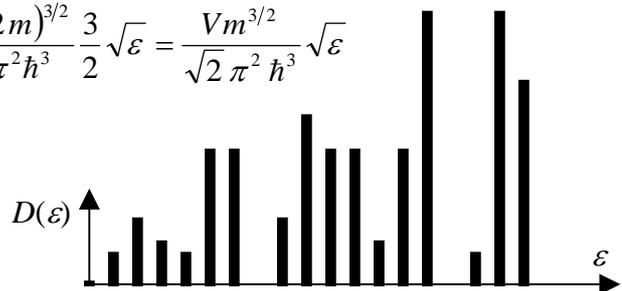
$\varepsilon > \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ を満たす (n_x, n_y, n_z) の組み合わせの数が $N(\varepsilon)$

よって、半径 $R = (L/2\pi) \sqrt{2m\varepsilon} / \hbar$ 球の体積を計算して、 $N(\varepsilon) = \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{V \cdot (2m\varepsilon)^{3/2}}{6\pi^2 \hbar^3}$

$\therefore D(\varepsilon) = \frac{N(\varepsilon + \Delta\varepsilon) - N(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon} \approx \frac{\partial N(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \frac{V(2m)^{3/2}}{6\pi^2 \hbar^3} \frac{3}{2} \sqrt{\varepsilon} = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon}$

(スピン $S = 1/2$ がある場合は二倍する)

注) この式もあくまで近似。εが小さいところでは相当ずれている。



4-C スピンがある場合の状態密度

$S = 1/2$ の場合、 と は同じエネルギー(磁場がない場合)なので、状態数は二倍になる。一般の大きさの S の場合、 $-S, -S+1, \dots, S-1, S$ までの状態が同じエネルギーなので $2S+1$ 倍。

磁場がかかった場合は、 と でエネルギーが異なるので別々に考える。

4-D 三次元金属中の自由電子のフェルミエネルギー $\mu(T=0)$

$N = \sum_i f_F(\varepsilon_i) = \int_0^\infty f_F(\varepsilon) 2D(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\mu(0)} 2D(\varepsilon) d\varepsilon = (V/3\pi^2) (\sqrt{2m/\hbar})^3 \mu(0)^{3/2}$

$\mu(0)$ をフェルミエネルギー ε_F と呼ぶ(絶対零度で金属中の電子が持つ最大エネルギー)

フェルミエネルギーの色々な表現 (波数 $k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 N/V}$ が一番覚えやすい)

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = k_B T_F = \hbar \omega_F = h \nu_F, \quad \lambda_F = 2\pi/k_F, \quad p_F = \hbar k_F = m v_F$$

(温度 T_F , 角速度 ω_F , 振動数 ν_F , 波数 k_F , 波長 λ_F , 運動量 p_F , 速度 v_F)

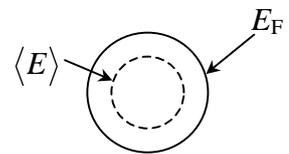
4-E 状態密度とは? (別の見方) 積分変数の変換の因子

$$\sum_{n_x} \sum_{n_y} \sum_{n_z} \dots \approx \underbrace{\iiint dn_x dn_y dn_z}_{n \text{ が大きい場合の近似}} = \underbrace{\frac{V}{(2\pi)^3} \iiint dk_x dk_y dk_z}_{\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)} = \iiint \overbrace{\frac{4\pi V}{(2\pi)^3} k^2 \frac{dk}{d\varepsilon}}^{D(\varepsilon)} d\varepsilon$$

4-F 三次元金属中の自由電子の平均のエネルギー

フェルミエネルギー ε_F は $T=0$ での最高のエネルギー

$$\langle E \rangle = \sum_{\text{状態 } s} \varepsilon_s f(\varepsilon_s) = \int_0^\infty \varepsilon f(\varepsilon) D(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{V \sqrt{2m}^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$



$T=0$ での圧力を熱力学の公式から求めると、

$$P = - \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial V}(S, V) = - \frac{3N}{5} \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial V} = - \frac{3N}{5} \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \right) = - \frac{3N}{5} \left(- \frac{2}{3} \frac{\varepsilon_F}{V} \right) = \frac{2\varepsilon_F}{5V} \equiv \text{“フェルミ縮退圧” と呼ぶ。}$$

(古典理想気体ではゼロである。無限小の体積に縮まってしまう。)

・白色矮星や中性子星は、このフェルミ縮退圧で重力に打ち勝っている。

4-G レポート (任意)

- 1) 二次元自由電子の状態密度を n_x, n_y が小さいとき (± 5 程度まで) に $\varepsilon=0 \sim 35$ まで厳密に計算してみよう ($\frac{\hbar^2 (2\pi)^2}{2m} = 1$ とした)。どの程度一定になっているだろうか。
- 2) フェルミ分布関数について、全粒子数 $N = \int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$ が温度とともにどう風に変化するか Excel など調べてみよう。状態密度は三次元金属の近似式 $D(\varepsilon) = \sqrt{\varepsilon}$ を使う (の前の係数を 1 としてよい)。 $N = \sum_i D(\varepsilon_i) f(\varepsilon_i)$ の和を計算してみれば良い。 $k_B T = 0, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3$ 程度について、和を $\varepsilon=0, 0.01, 0.02, 0.03 \dots 10$ の範囲で計算する。但し、ここでは化学ポテンシャルは $\mu=1$ と一定とする。
- 3) 上の問題で全粒子数が強制的に固定されている場合 (箱に閉じ込められている粒子など) には、化学ポテンシャルの方が温度変化する。絶対零度の時に $\mu=1$ とした場合、 $k_B T$ を上の問題の範囲で変化させると、 μ はどのような温度変化をしたら N は一定値に留まれるだろうか。
- 4) ボース分布関数で同じことをやってみよう。但し、今度は温度 $k_B T=1$ の時の化学ポテンシャルを $\mu=-1$ とし、徐々に温度を下げて行き、粒子数が一定になるためには μ がどのように温度変化しなくてはならないか調べよう。