

問題1

金属中では、原子核および内殻電子は陽イオンとして結晶格子上に局在しているが、最外殻電子は特定の原子核に束縛されずに動き回っている。これらの最外殻電子は、陽イオンおよび他の最外殻電子たちとクーロン相互作用しているが、これらを無視して自由に動き回っているとしたモデルを自由電子モデルという。この非常に単純化した自由電子モデルで、金属の電気伝導率、比熱などの物理量の振る舞いを説明することができる。

(1-1) 金属は一辺 L の立方体であるとし (体積 $V = L^3$)、この中を N 個の質量 m の自由電子が動き回っているとする。相互作用はないとしているので、1つの自由電子のハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \quad (1)$$

となる。Schrödinger 方程式 $\mathcal{H}\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$ を解くことにより、波動関数： $\Psi(x, y, z) \propto e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$, エネルギー固有値： $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ ($k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$) と書けることを示せ。

(1-2) 金属の表面において周期境界条件

$$\begin{aligned} \Psi(x=0, y, z) &= \Psi(x=L, y, z), \\ \Psi(x, y=0, z) &= \Psi(x, y=L, z), \\ \Psi(x, y, z=0) &= \Psi(x, y, z=L) \end{aligned} \quad (2)$$

を課すと、波数ベクトルが

$$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z), \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3)$$

と量子化されることを示せ。

(1-3) 絶対零度の極限を考えると、系は電子をエネルギー準位が低いものから順に N 個詰めた状態になる。一電子状態は、波数ベクトル \vec{k} を指定することにより定まる。波数空間において、エネルギーの低い順に N 個の電子を詰めていくと、エネルギー固有値は $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ で与えられるので、原点を中心とする球内に電子が詰まる。この球の半径をフェルミ波数 k_F という。この球内の状態数を数え上げることにより、 $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$ を示せ。ただし、電子にはスピンのみがあり、上向きと下向きの2自由度があるので、波数空間の1格子点あたり、電子を2個詰めることができることに注意せよ。