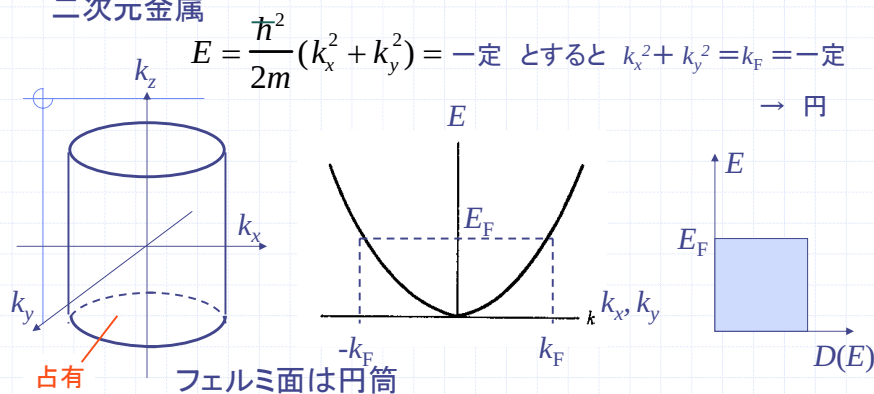


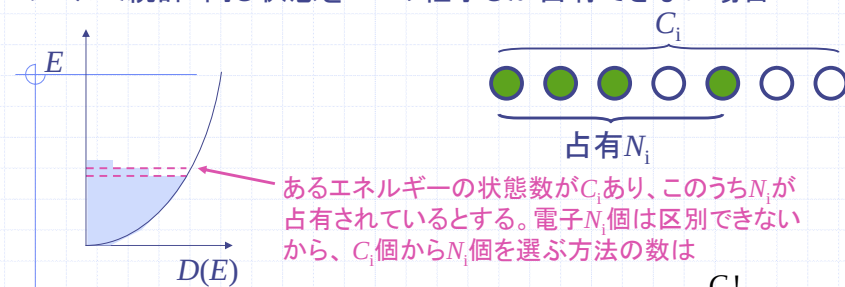
二次元金属



円の面積

$$2 \frac{\pi k^2}{(2\pi)^2} = N \Rightarrow N = \frac{L^2}{2\pi} k^2 = \left(\right) \Rightarrow D(E) = \frac{dN}{dE} = \left(\right)$$

フェルミ統計: 同じ状態を1つの粒子しか占有できない場合



$$W_i = \frac{C_i!}{N_i!(C_i - N_i)!}$$

エントロピーの統計力学的定義から

$$S = k_B \ln W = k_B \ln \prod_i W_i = k_B \sum_i \ln W_i = k_B \sum_i \ln \frac{C_i!}{N_i!(C_i - N_i)!}$$

$$= k_B \sum_i (C_i \ln C_i - N_i \ln N_i - (C_i - N_i) \ln (C_i - N_i))$$

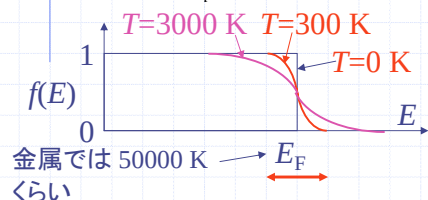
Stirlingの公式 $\ln N! = N \ln N - N$

実現する N_i の分布はギブス自由エネルギー

$F = E - TS - \mu N$ ただし $E = \sum N_i E_i$, $N = \sum N_i$
を最小にするものだから、 F を各 N_i で微分してゼロとおき、

$$\frac{\partial F}{\partial N_i} = E_i + k_B T (\ln N_i - \ln (C_i - N_i)) - \mu = 0$$

$$\Rightarrow \frac{C_i - N_i}{N_i} = \left(\right) \Rightarrow \text{占有率 } f(E_i) = \frac{N_i}{C_i} = \left(\right)$$



フェルミ-ディラック分布

$T=0$ のとき

$$E < \mu \quad f(E) = \frac{1}{e^{-\infty} + 1} = \left(\right)$$

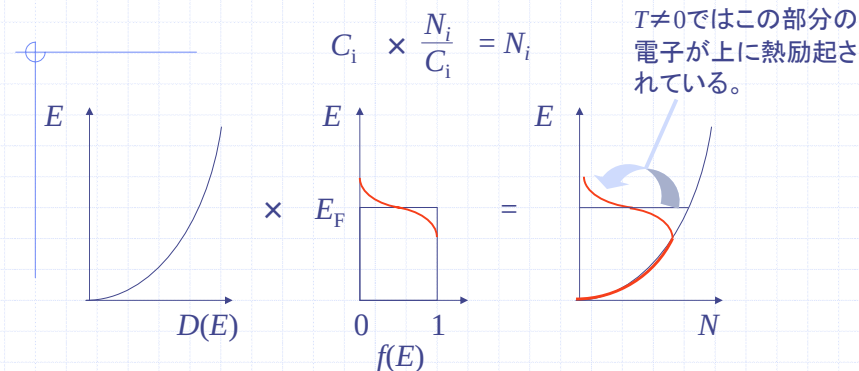
$$E > \mu \quad f(E) = \frac{1}{e^{+\infty} + 1} = \left(\right)$$

$E_F = \mu$: 化学ポテンシャル

$T \neq 0$ のとき

$k_B T$ くらいの幅で $f(E)$ は連続的に1から0になる。

実際の電子数は $D(E) \times f(E)$



$$\frac{E_F}{k_B T} \approx \frac{50000 \text{ K}}{300 \text{ K}} > 100 \quad \text{なので熱励起されているのは全体の1\%以下。}$$

金属電子の(内部)エネルギー

$$U(T) = \int_0^\infty (E - E_F) D(E) f(E) dE$$

比熱

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \int_0^\infty (E - E_F) D(E) \frac{\partial f(E)}{\partial T} dE$$

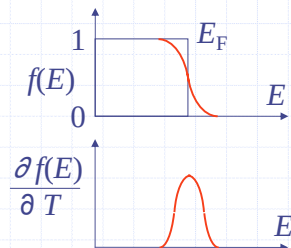
E_F をエネルギーの基準にとる
 T は $f(E)$ にのみ入っている。

ここで $f(E_i) = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} + 1} = \frac{1}{e^x + 1}$ $x = \frac{E - \mu}{k_B T}$ なので

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \left[\frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dT} \right] dx = \frac{dE}{k_B T^2} \left(-\frac{x}{e^x + 1} \right)$$

$\frac{\partial f(E)}{\partial T}$ は E_F の近くの $k_B T$ のみで0

でないから、この範囲で
 $D(E) \sim D(E_F)$ と近似して



$$C_V = D(E_F) \int_0^\infty (E - E_F) \frac{\partial f(E)}{\partial T} dE$$

$$= D(E_F) \int_0^\infty (k_B T x) \frac{x}{T (e^x + 1)^2} k_B T dx$$

$$= k_B^2 T D(E_F) \int_0^\infty x^2 \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} dx$$

積分表より $\pi^2/3$

$$= \left[\frac{\pi^2}{3} \right] T$$

$C_V = \gamma T$
 自由電子(金属電子)の比熱

あるいは $D(E_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F} = \frac{3}{2} \frac{N}{k_B T_F}$ T_F : フェルミ温度 を用いて

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} \frac{3}{2} \frac{N}{k_B T_F} k_B^2 T = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} = \frac{\pi^2}{2} n R \frac{T}{T_F}$$

気体定数

Dulong-Petitの法則より、自由電子が理想気体だとすると
 $C_V = 3R$ の比熱があるはずであるが、実際はこの

$$\frac{T}{T_F} \approx \frac{300\text{K}}{50000\text{K}} \approx 10^{-2} \text{ 以下}$$

自由電子がフェルミ分布しているため、 E_F 近傍の $k_B T$ 程度の電子しか熱励起されておらず、比熱に効かない。

金属電子はとても”フェルミ粒子”的

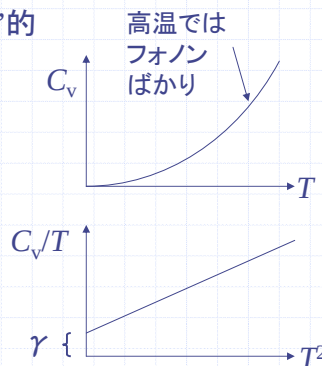
フェルミ気体 cf. 古典気体

格子振動(フォノン)比熱が $C_V \propto T^3$ となる低温で

$$C_V = \gamma T + \beta T^3 \Rightarrow \frac{C_V}{T} = \gamma + \beta T^2$$

自由電子 フォノン

低温(< 4 K)での比熱の測定から
 $\gamma \rightarrow D(E_F)$ を実験的に求められる。



演習問題: ボーズ-アインシュタイン統計

N_i 個の粒子を C_i 個の準位に入れる。
 いくつ入れてもよい。

N_i 個の玉と C_i-1 個のしきり板をならべる数

$$W_i = \frac{(C_i + N_i - 1)!}{N_i! (C_i - 1)!}$$

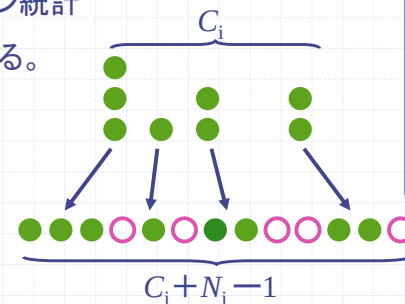
$C_i - 1 \rightarrow C_i$ とすると

$$\ln W_i = (C_i + N_i) \ln(C_i + N_i) - N_i \ln N_i - C_i \ln C_i$$

これを $F = E - TS - \mu N$ に入れて N_i で微分してゼロとおき、

$$\frac{\partial F}{\partial N_i} = \left[\frac{\partial}{\partial N_i} \left((C_i + N_i) \ln(C_i + N_i) - N_i \ln N_i - C_i \ln C_i \right) \right] = 0$$

$$\Rightarrow \frac{C_i + N_i}{N_i} = e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}}$$



$$f(E_i) = \frac{N_i}{C_i} = \left[\frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} - 1} \right] \quad \text{ボーズ-アインシュタイン統計}$$

$T \rightarrow 0$

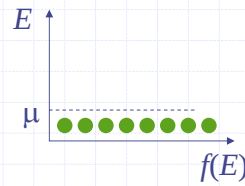
$$\begin{aligned} E_i - \mu > 0 \quad e^{+\infty} \rightarrow +\infty \quad f(E) \rightarrow 0 \\ E_i - \mu = 0 \quad e^0 \rightarrow 1 \quad f(E) \rightarrow +\infty \end{aligned}$$

すべての粒子が最低準位に落ち込む

$$E_i - \mu \rightarrow \hbar\omega \text{ とおくと} \quad f(E_i) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad \text{プランク分布}$$

フォノン(格子振動)はボーズ-アインシュタイン粒子
光(光子)も同様 → 黒体放射

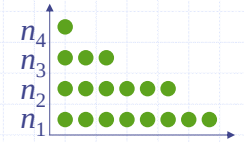
$$f(E_i) = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} \pm 1} \quad \left\{ \begin{array}{l} + \left[\text{ボーズ分布} \right] \\ - \left[\text{フェルミ分布} \right] \end{array} \right. \quad \text{量子統計}$$



$$E - \mu \gg k_B T \text{ では } e^{\frac{E - \mu}{k_B T}} \gg 1 \text{ だから} \quad f(E_i) = e^{-\frac{E_i - \mu}{k_B T}} \quad \text{ボルツマン分布(古典統計)}$$

古典統計

$N = \sum n_i$ 個の粒子が n_i 個ずつ状態 i に分布しているとする。
このときの統計的重みは



$$W = \frac{N!}{n_1! n_2! n_3! \dots} \quad \ln N! = N \ln N - N \quad \text{Stirlingの公式}$$

だから

$$\ln W = \ln \frac{N!}{n_1! n_2! n_3! \dots} = N \ln N - \sum_i n_i \ln n_i$$

これを $F = E - TS - \mu N$ に入れて ($S = k_B \ln W$)

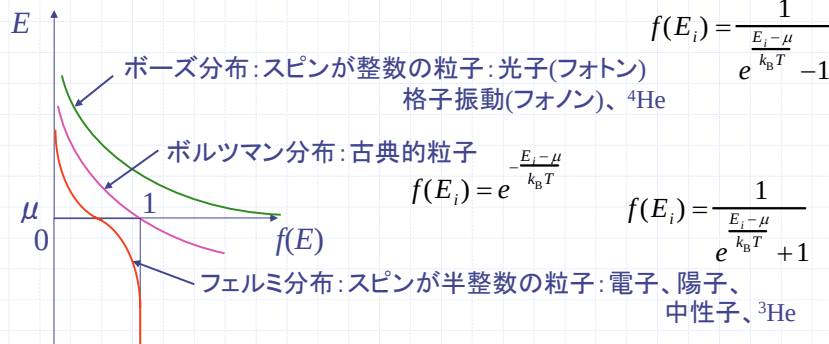
$$F = \sum_i E_i n_i - k_B T (N \ln N - \sum_i n_i \ln n_i) - \mu \sum_i n_i$$

n_i で微分して0とおくと

$$\frac{\partial F}{\partial N_i} = \left[\dots \right] = 0$$

したがって

$$f(E_i) = n_i = \left[\dots \right] \quad \text{ボルツマン分布}$$

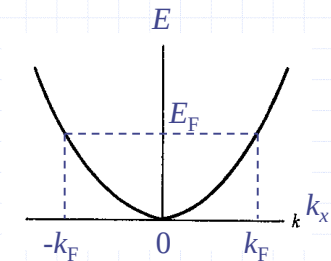
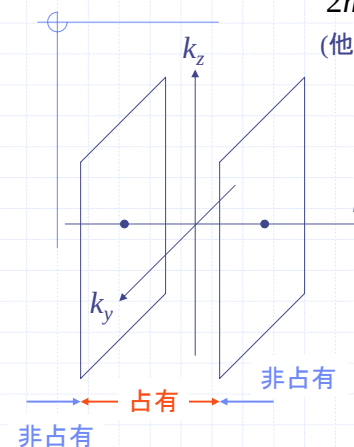


$E_i - \mu \gg k_B T$ ではすべてボルツマン分布に漸近。

一次元金属

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \text{一定} \quad \text{とすると} \quad k_x = k_F = \text{一定}$$

(他の k_y, k_z 方向には運動量を持たない
= 動かない。)



フェルミ面は1対の平面