$\boxed{\text{固体中の電子}}$

＊ 1　自由電子→箱の中の電子

＊ 2　ポテンシャル中の電子→結晶中の電子

・自由電子

$$\begin{cases} \nabla^2\psi + \dfrac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(x,y,z)\right]\psi = 0 & \text{時間に依存しない　シュレディンガー方程式} \\ \displaystyle\int_v \psi^*\psi dV = 1 & \text{規格化　dV：体積} \end{cases}$$

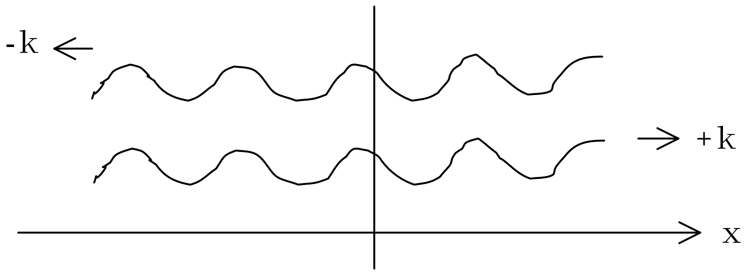
$U(x,y,z) = 0$　（ポテンシャルゼロ）

$\nabla^2 \to \dfrac{d^2}{dx^2}$　（一次元）

$E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$　$\left(\because P = \hbar k = mv,\ E = \dfrac{1}{2}mv^2 = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$

$\therefore k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

よって $\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi = \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$



$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Ae^{-ikx}$$

ちなみに $\begin{cases} e^{i(kx-wt)} & \text{+x に進む波} \\ e^{-i(kx-wt)} & \text{-x に進む波} \end{cases}$

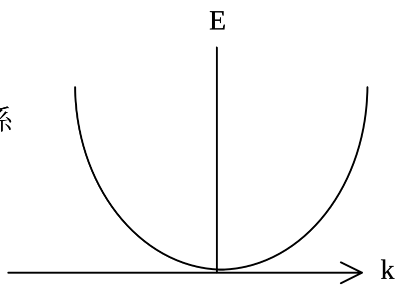
$$k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\langle P\rangle = \langle P_x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dx}dx = \hbar k\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi dx$$

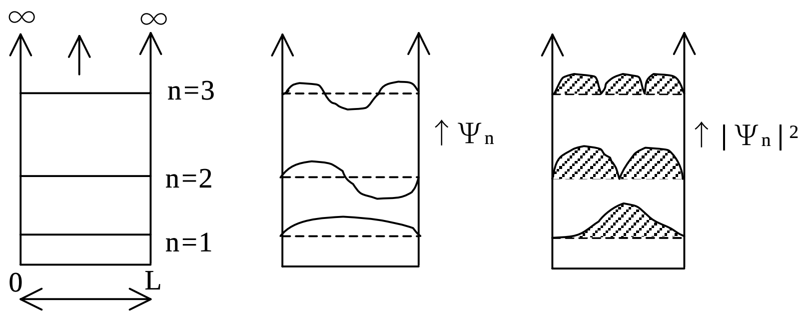
規格化条件　$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi dx = 1$

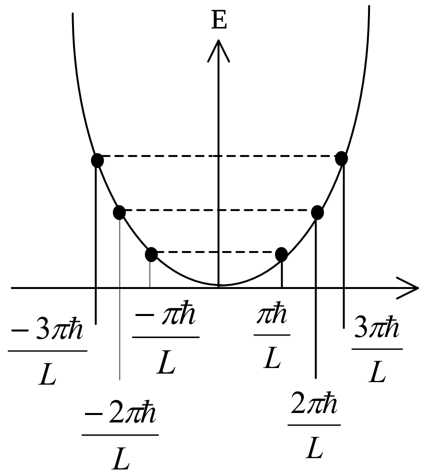
$\therefore\ \langle P\rangle = \hbar k = \dfrac{h}{2\pi}\dfrac{2\pi}{\lambda} = \dfrac{h}{\lambda}$　ドブローイの関係

$E = \dfrac{\langle P\rangle^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$



・箱の中の自由電子





$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \qquad 0<x<L$$

境界条件　$\Psi(0)=\Psi(L)=0$　　0　　$\because\ \Psi(0)=0$

$\Psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$

$\Psi(L)=A\sin kL=0$

$$k = \frac{n\pi}{L} \qquad n=1,\ 2,\ 3$$

$$\therefore \quad \psi_n(x) = A_n \sin\frac{n\pi x}{L} \qquad\qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

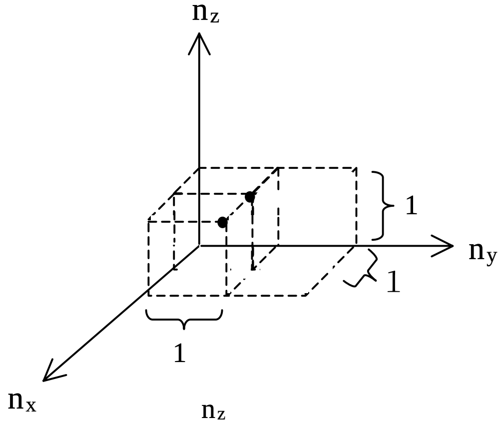
2 次元　$\psi(x,y) = \sqrt{\frac{4}{L^2}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)$

3 次元　$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{L}z\right)$

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\left(\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2}\right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2\left[\left(\frac{n_x\pi}{L}\right)^2+\left(\frac{n_y\pi}{L}\right)^2+\left(\frac{n_z\pi}{L}\right)^2\right]^2}{2m}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2mL^2}\left(n_x^2\pi^2+n_y^2\pi^2+n_z^2\pi^2\right) = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2} = \frac{h^2n^2}{8mL^2}$$

$\boxed{\text{状態密度}}$　単位エネルギー、単位体積あたりの状態の数　g(E)



単位エネルギーの大体の大きさは

$$E_{unit} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

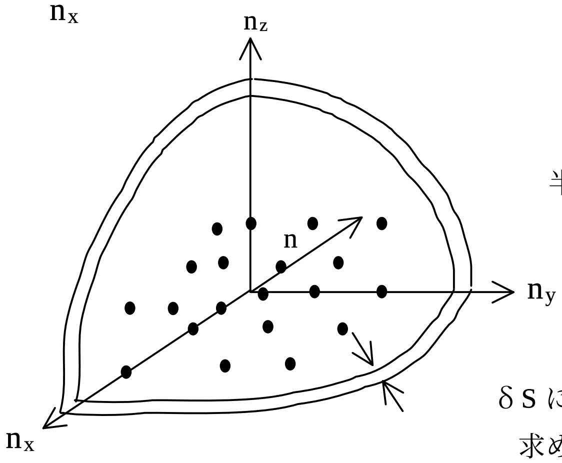
ここで一辺が 1cm の立方体を考えると

$$E_{unit} = \frac{(1.05\times10^{-34}J.s)^2}{2(9.1\times10^{-31}kg)(10^{-6}m^3)}$$

$$= 0.6\times10^{-33}J = 3.74\times10^{-15}eV$$

金属では E=3eV まで電子がつまる。

∴ $n_x=1.5\times10^7$　！！



半径 $n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \approx 115\times10^7$

δS にどれだけの状態（点）が含まれるかを
求めればよい

半径ｎ中の点の数　$\frac{4}{3}\pi n^3$　（なぜなら 単位体積あたり 点１個）

ただし、ｎは正だけ許されるので、全ての状態（点）の数　N(E)は

$$\mathrm{N}(E) = \frac{4}{3}\pi n^3 \times \frac{1}{8} = \frac{1}{6}\pi n^3$$

エネルギーでは

$$n^2 = \frac{8mL^2E}{h^2}$$

$$= \frac{1}{6}\pi(n^2)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{6}\pi\left(\frac{8mL^2E}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

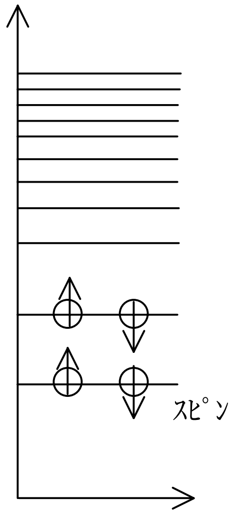
ただし $\mathrm{N}(E) = \int_0^E g(E)dE$　（単位体積あたり）

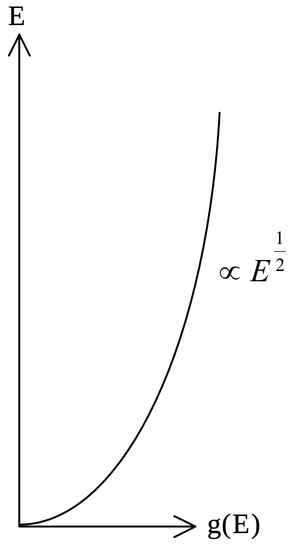
$$\therefore\ \underset{\text{状態密度}}{g(E)} = \frac{dN(E)}{dE}\times\underset{\text{ｽﾋﾟﾝ}}{2}$$

よって　$g(E) = \frac{2}{6}\pi\left(\frac{8mL^2}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{d}{dE}E^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{2}\frac{2}{6}\pi\left(\frac{8mL_2}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}E^{\frac{1}{2}} \div L^3$　（単位体積）

$$g(E) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3}E^{\frac{1}{2}}$$

$$E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}h^2$$

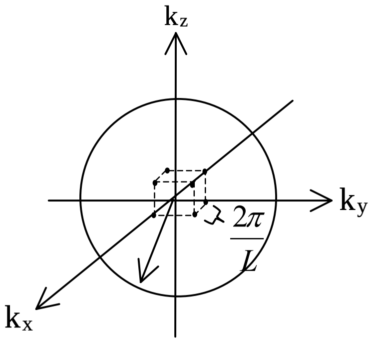




2 次元？

1 次元？

状態密度を k で考えると



フェルミ球

半径　k_F の球

フェルミ波数

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2\left(\sqrt{k_x{}^2+k_y{}^2+k_z{}^2}\right)^2}{2m}$$

$$k_x=\frac{2\pi n_x}{L}\qquad k_y=\frac{2\pi n_y}{L}\qquad k_z=\frac{2\pi n_z}{L}$$

$n_x, n_y, n_z=0,\ \pm1,\ \pm2$

各点にスピン考慮して 2 個ずつ電子をつめる。

フェルミ球中の電子の数は

$$N=2\times\left(\frac{4}{3}\pi k_F^3\right)\div\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3=\frac{k_F^3}{3\pi^2}V$$

単位体積あたりの自由電子数　$n=N/V=\frac{k_F^3}{3\pi^2}$

フェルミ速度　$V_F=\frac{\hbar k_F}{m}$

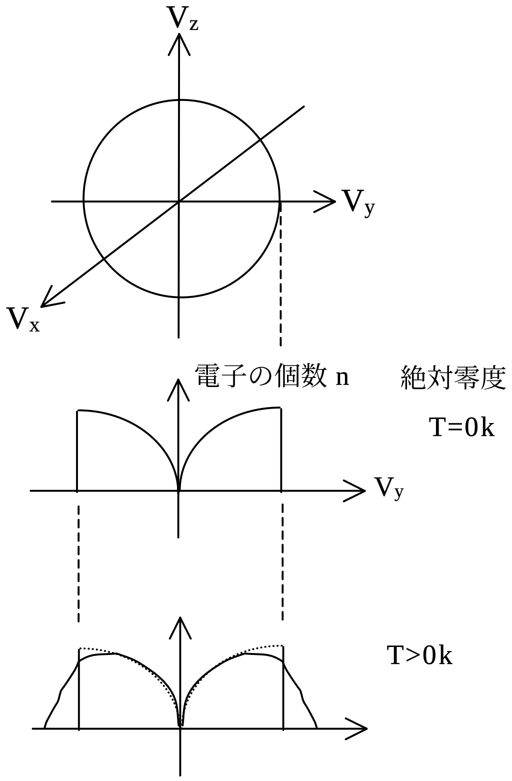
フェルミエネルギー　$E_F=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}$

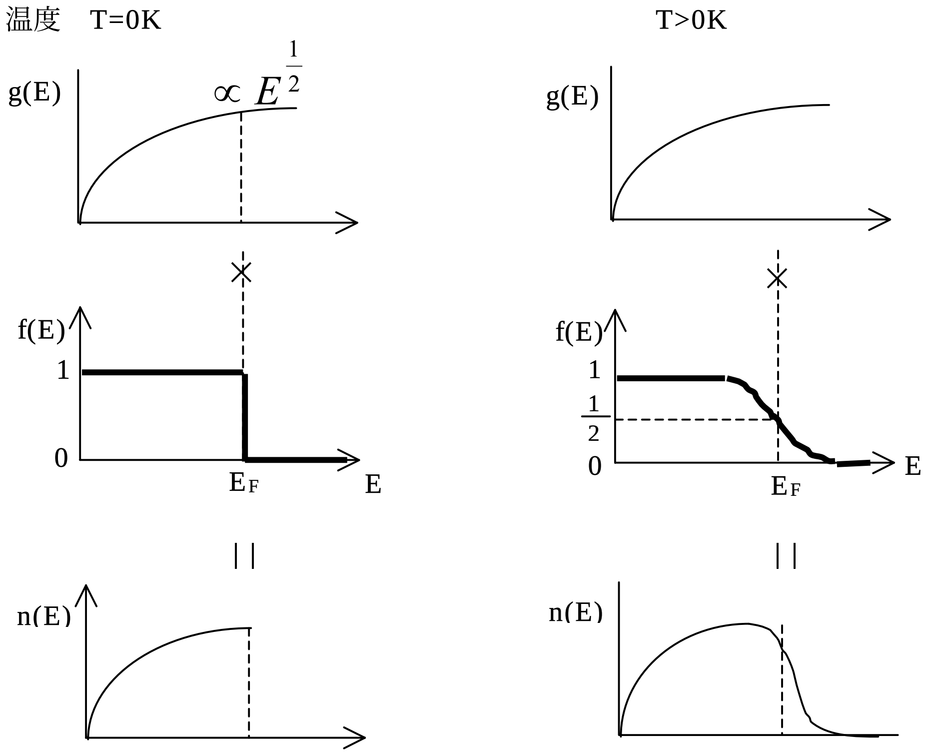
T=0K では、電子は E_F までの全てのエネルギー準位を占めている。

$$n = \int_0^{E_F} g(E)dE$$

$$= \int_0^{E_F} \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} E^{\frac{1}{2}} dE$$

$$E_F = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}}$$





電子濃度

$$n = \int_0^{\infty} g(E) f(E) dE$$

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}$$

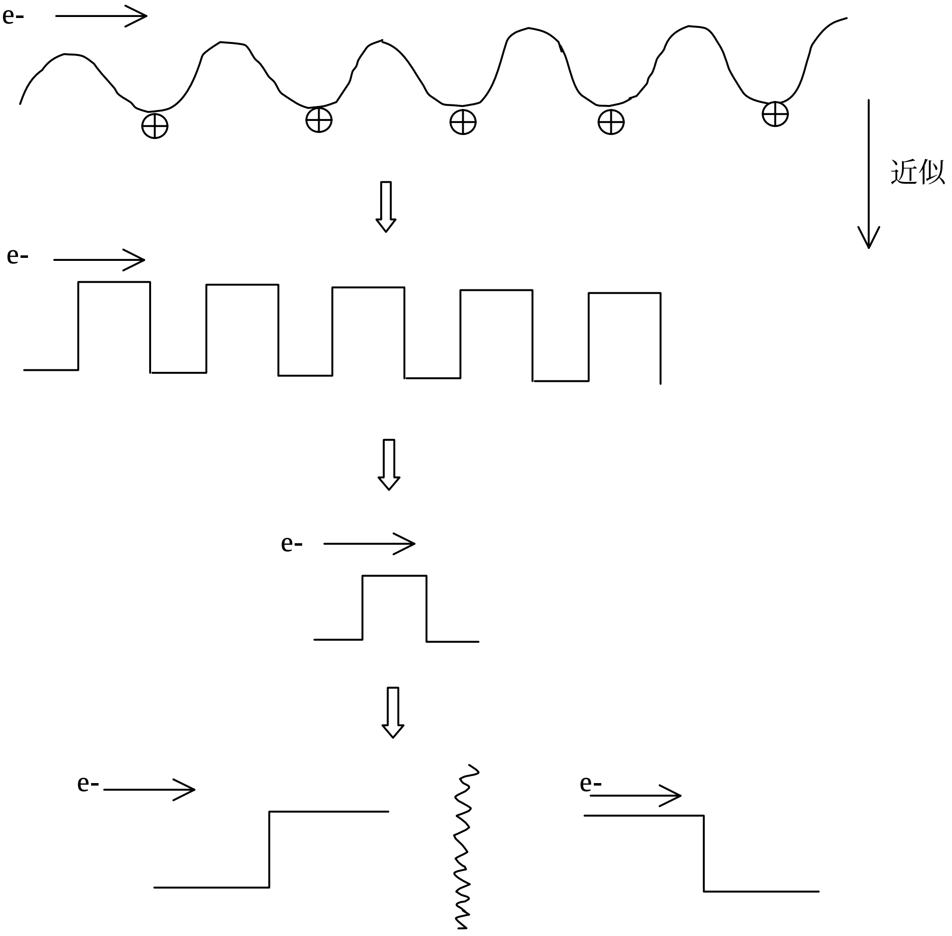
フェルミ　ディラック関数
あるエネルギーを電子が占有する確立

$$f(E_F) = \frac{1}{2}$$

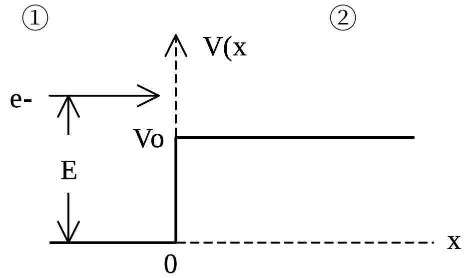
σ＝n　μ　e

電荷

・　結晶中の電子（ポテンシャル中の電子）



ステップポテンシャル



$$V(x)=\begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & x>0 \end{cases}$$

ケース１　０＜Ｅ＜V_0

①領域　$\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \qquad k=\left(\dfrac{2m}{\hbar^2}E\right)^{\frac{1}{2}}$

x<0　　$\Psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$　　x<0

②領域　$\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2}-\kappa^2\psi(x)=0 \qquad \kappa=\left(\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\right)^{\frac{1}{2}}$

x>0　　$\psi(x)=\overset{0}{\cancel{C}}\,e^{\kappa x}+De^{-\kappa x}$　　x>0

$\Downarrow$

x→∞で発散するのは物理に反する

$$\Psi(x)=\begin{cases} Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0 \\ De^{-\kappa x} & x>0 \end{cases}$$

境界条件　x=0 で　Ψ(x)と $\dfrac{d\psi(x)}{dx}$ が連続

$$\begin{cases} \Psi(0)\text{連続} & A+B=D \\ \dfrac{d\psi(0)}{dx}\text{連続} & ik(A-B)=-\kappa D \end{cases}$$

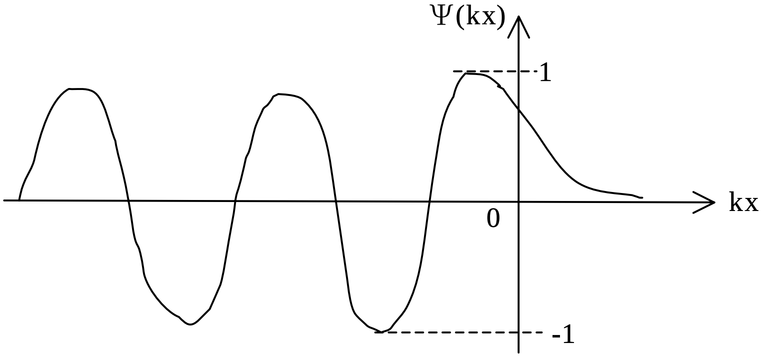
まとめると　$A=\dfrac{1+i\dfrac{\kappa}{k}}{2}D \qquad B=\dfrac{1-\dfrac{i\kappa}{k}}{2}D$

$$\frac{B}{A}=\frac{1-i\kappa/k}{1+i\kappa/k}=\frac{1-i(V_0/E-1)^{\frac{1}{2}}}{1+i(V_0/E-1)^{\frac{1}{2}}}$$

$$\therefore \quad \frac{B}{A}=e^{i\alpha}, \quad \alpha=2\tan^{-1}\left[-\left(\frac{V_0}{E}-1\right)^{\frac{1}{2}}\right]$$

$$\frac{D}{A} = \frac{2}{1 + i\kappa/k} = 1 + e^{i\alpha}$$

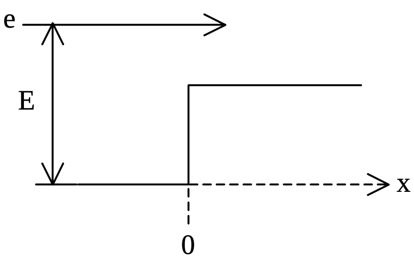
$$\Psi(x) = \begin{cases} 2Ae^{i\alpha/2}\cos\left(kx - \frac{1}{2}\right) & x<0 \\ 2Ae^{i\alpha/2}\cos\frac{\alpha}{2}3^{-\kappa x} & x>0 \end{cases}$$



$$A = \frac{1}{2}\exp\left(-\frac{i\alpha}{2}\right)$$

$$R = \frac{V}{V}\frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$　　反射率

ケース 2　E＞V_0



x<0 では

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) \qquad k = \left(\frac{2m}{\hbar^2}E\right)^{\frac{1}{2}}$$

x>0 では

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k'^2\psi(x) = 0 \qquad k' = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_0\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x<0 \\ Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} & x>0 \end{cases}$$

0 一度 x>0 に入った波は、決して反射されない。（逆行しない）

境界条件

$$\begin{cases} \Psi(0)\text{が連続} & A+B=C \\ \dfrac{d\psi(0)}{dx}\text{が連続} & k(A-B)=k'C \end{cases}$$

よって　$\dfrac{B}{A}=\dfrac{k-k'}{k+k'}$　　$\dfrac{C}{A}=\dfrac{2k}{k+k'}$

Current（電子流）j は

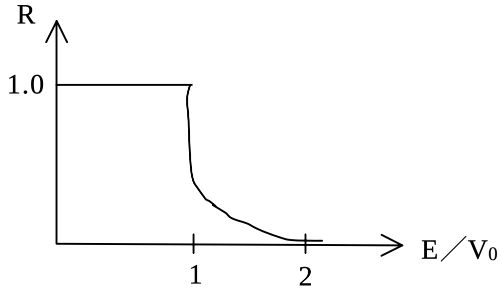
$$j=\begin{cases} V[|A|^2-|B|^2] & x<0 \\ V'|C|^2 & x>0 \end{cases}$$

ただし、$V=\dfrac{\hbar k}{m}$　　$V'=\dfrac{\hbar k'}{m}$

$$\frac{V}{V}\frac{|B|^2}{|A|^2}+\frac{V'}{V}\frac{|C|^2}{|A|^2}=R+T=1$$

R：反射率　（x＝0 で反射される率）

T：透過率　（x＝0 で透過される率）



$$R=\frac{|B|^2}{|A|^2}=\frac{(k-k')^2}{(k+k')^2}=\frac{\left[1-\left(1-\dfrac{V_0}{E}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2}{\left[1+\left(1-\dfrac{V_0}{E}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2}$$