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：$\varphi(x)=Ae^{ikx}$、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：$\varepsilon_n=\hbar^2k^2/2m=\hbar^2(2\pi n/L)^2/2m=\left(2\hbar^2\pi^2/mL^2\right)\cdot n^2$

状態密度：$D(\varepsilon)=\dfrac{\Delta n}{\Delta\varepsilon}\approx 2\cdot\dfrac{\partial n}{\partial\varepsilon}=2\cdot\left(\sqrt{\dfrac{2\hbar^2\pi^2}{mL^2}}\right)^{-1}\dfrac{\partial\sqrt{\varepsilon}}{\partial\varepsilon}=\dfrac{L\sqrt{m}}{\hbar\pi\sqrt{2}}\dfrac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$　(スピン S =½がある場合は二倍)

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：$\varphi(\vec{r})=C\,e^{ik_xx}e^{ik_yy}e^{ik_zz}$、但し $\vec{k}=\dfrac{2\pi}{L}(n_x,n_y,n_z)$、固有エネルギ $\varepsilon_{\vec{k}}=\hbar^2\left|\vec{k}\right|^2/2m$

まず、エネルギー ε 以下の状態数 N (ε) を調べてみると、

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

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

$$\therefore D(\varepsilon)=\frac{\mathrm{N}(\varepsilon+\Delta\varepsilon)-\mathrm{N}(\varepsilon)}{\Delta\varepsilon}\approx\frac{\partial\,\mathrm{N}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=\frac{V(2m)^{3/2}}{6\pi^2\hbar^3}\frac{3}{2}\sqrt{\varepsilon}=\frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\,\pi^2\hbar^3}\sqrt{\varepsilon}$$　(スピン S =½がある場合は二倍)

さらに、$\varepsilon=\hbar^2k^2/2m$, $k=2\pi/\lambda$ を代入すると、$D(\varepsilon)=4\pi m\left(V/h^3\right)(h/\lambda)$

４-C 三次元金属のフェルミエネルギー $\mu(T=0)$

$$N=\sum_i f_{\mathrm{F}}(\varepsilon_i)=\int_0^\infty f_{\mathrm{F}}(\varepsilon)\,2D(\varepsilon)\,d\varepsilon=\int_0^{\mu(0)}2\,D(\varepsilon)\,d\varepsilon=\left(V/3\pi^2\right)\left(\sqrt{2m}/\hbar\right)^3\mu(0)^{3/2}$$

$\mu(0)$ 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)

※フェルミエネルギーの色々な表現 (◎波数 $k_{\mathrm{F}}=\sqrt[3]{3\pi^2\,N/V}$ が覚えやすい)

$$\varepsilon_{\mathrm{F}}=\frac{\hbar^2k_{\mathrm{F}}^2}{2m}=k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{F}}=\hbar\omega_{\mathrm{F}}=h\nu_{\mathrm{F}},\ \ \lambda_{\mathrm{F}}=2\pi/k_{\mathrm{F}},\ \ p_{\mathrm{F}}=\hbar k_{\mathrm{F}}=m\upsilon_{\mathrm{F}}$$

(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 υ_{F})

４-D 状態密度とは？　≡積分変数の変換の因子

$$\sum_{n_x}\sum_{n_y}\sum_{n_z}\cdots\approx\iiint dn_xdn_ydn_z=\frac{V}{(2\pi)^3}\iiint dk_xdk_ydk_z\ \frac{V}{(2\pi)^3}\iiint 4\pi k^2dk=\iiint\overbrace{\frac{4\pi V}{(2\pi)^3}k^2\frac{dk}{d\varepsilon}}^{D(\varepsilon)}d\varepsilon$$

４-E 平均のエネルギー（フェルミエネルギーは $T=0$ での最高のエネルギー）

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

$T=0$ での圧力を求めると（古典理想気体ではゼロ)、

$$P=-\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial V}(S,V)=-\frac{3N}{5}\frac{\partial\varepsilon_{\mathrm{F}}}{\partial V}=-\frac{3N}{5}\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{\hbar^2k_{\mathrm{F}}^2}{2m}\right)=-\frac{3N}{5}\left(-\frac{2}{3}\frac{\varepsilon_{\mathrm{F}}}{V}\right)=\frac{2\varepsilon_{\mathrm{F}}}{5V}=\text{フェルミ縮退圧}$$