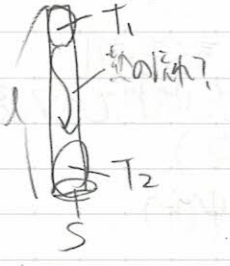
Date 26/10

PP119~121
○固体の熱伝導
・熱伝導率



ここでは$T_1 > T_2$として、熱の流れQは

$$Q = \lambda \frac{T_1 - T_2}{l} S$$

この比例のパラメータλを熱伝導率という
極限の考えで $l \to 0$ の極限を考えると、それは極小区間での熱勾配に等しくなる。

$$\Rightarrow J = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$$ (Jは単位時間・単位長さあたりの熱の流れ)

{導体 → 伝導電子が熱で運搬
{絶縁体 → フォノンが熱で運搬
　└調和近似：フォノンを調和振動子として扱う
　　(衝突しても波形は変わらない)
⇒角振動数ωのフォノンが衝突で繰り返し速度の差がなくなっている ≒気体に近いアナロジー

⇒フォノン気体　$\lambda = \frac{1}{3} C \langle v \rangle \Lambda$　(Λ：フォノンの平均自由行程, C：格子比熱, $\langle v \rangle$：平均速度)

熱がフォノンで伝搬するなら音響/光学の2モードがある。
⇒ボース分布に従う条件なら $n = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \simeq \frac{k_B T}{\hbar\omega}$

平均自由行程は逆に $\Lambda \propto T^{-1}$ になる
逆に低温だと $\Lambda \propto T^3$

KOKUYO LOOSE-LEAF ノ-836BT 6 mm ruled×36 lines

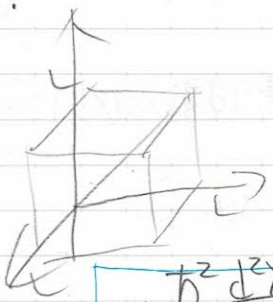
No.

Date

自由電子論 . pp.122～128

フォノン → 熱的な性質の表現に使われる
電子は固体とどう関わってくる？

◦自由電子モデル：金属における伝導電子のふるまいを記述するモデル



辺Lの立方体の中に電子を閉じこめた状態で考える
いま、イオンの影響がないので（$V(\boldsymbol{r})=0$）

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\psi(\boldsymbol{r})=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})$$

$\psi(\boldsymbol{r})$は $\psi(\boldsymbol{r})=X(x)Y(y)Z(z)$ と変数分離できるとして、
さらにEも成分ごとに $E=E_x+E_y+E_z$ ということにすると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2X(x)}{dx^2}=E_xX(x),\quad -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}=E_yY(y),\quad -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2Z(z)}{dz^2}=E_zZ(z)$$

の3本の微分方程式になる。
全部2階微分方程式なので、とりあえずXだけに注目して解くと、

$X(x)=C_xe^{i\sqrt{\frac{2m_eE_x}{\hbar^2}}x}$ → かたの部分で $k_x=\sqrt{\frac{2m_eE_x}{\hbar^2}}$ とおく、

これが他の変数においても添字入れかえただけで同じになるので、
$\psi(\boldsymbol{r})=C_xC_yC_ze^{ik_xx}e^{ik_yy}e^{ik_zz}=Ce^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ とまとめられる。

ところで、今この条件では立方体内のどこかに電子がある確率は1なので、

$$\int_V|\psi(\boldsymbol{r})|^2d\boldsymbol{r}=\int_0^L\int_0^L\int_0^L|Ce^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}|^2dxdydz=|C|^2L^3=1\quad\therefore C=\frac{1}{\sqrt{L^3}}=\frac{1}{\sqrt{V}}$$

ということで、波動関数は

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i(k_xx+k_yy+k_zz)}=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

（$\boldsymbol{k}$：波数ベクトル）

↓

$$E=E_x+E_y+E_z=\frac{\hbar^2}{2m_e}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)=\frac{\hbar^2}{2m_e}|\boldsymbol{k}|^2$$

周期的境界条件の適用

自由電子モデル $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ で結晶格子を想定した周期条件を考える。

$$\begin{cases} \psi(x+L,y,z) = \psi(x,y,z) \\ \psi(x,y+L,z) = \psi(x,y,z) \\ \psi(x,y,z+L) = \psi(x,y,z) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} e^{ik_x L} = 1 \\ e^{ik_y L} = 1 \\ e^{ik_z L} = 1 \end{cases} \therefore \begin{cases} k_x = \frac{2\pi}{L} n_x \\ k_y = \frac{2\pi}{L} n_y \\ k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \end{cases} \quad (n_x, n_y, n_z: \text{任意の整数})$$

波数ベクトルは (n_x, n_y, n_z) の3つの整数の組で指定される状態1つ1つが自由電子1つ1つの量子状態に対応する

→波数空間上では $2\pi/L$ の間隔で量子状態が並んでいる。

絶対零度におけるフェルミ統計

電子 ⇒ フェルミ粒子 → パウリの排他律

スピンまで考慮すると1状態あたり2つ電子が存在

多数の電子を考え、それを波数空間に図示すると、



一定半径の球の中にすべておさまることが知られている。

球のことをフェルミ球体、その球の半径をフェルミ波数という。

フェルミ波数が k_F のとき、球体の体積は $V_F = \frac{4\pi}{3} k_F^3$

電子の個数 N と仮定したとき、

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

なので、フェルミ波数は $k_F = \left(\frac{3\pi^2}{L^3} N\right)^{\frac{1}{3}} = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$ と導出できる。

(※ $n = N/V = N/L^3$)

フェルミ球体の表面 → フェルミ面

フェルミ面上の電子は最も高いエネルギーを持つ

(=フェルミエネルギー)

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}$$

フェルミ球内の電子のエネルギーは球内の全ての量子状態のエネルギーの合計

$$\Rightarrow E = 2\sum_{k\le k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_{k\le k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$$

(2スピンの分だけ)

(※ $\Delta k_x, \Delta k_y, \Delta k_z$：波数空間上での状態の間隔)

ここで、Nが非常に多い状態で仮定すると、球内の量子状態は連続しみなせるので、

$$E = \frac{2V}{(2\pi)^3}\int_{k\le k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} dk = \frac{2V}{(2\pi)^3}\cdot\frac{\hbar^2}{2m_e} 4\pi \int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m_e} V$$

よって1個あたりの平均エネルギー$\langle E\rangle$は

$$\langle E\rangle = \frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m_e} \div \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{3\hbar^2 k_F^2}{10 m_e} = \frac{3}{5} E_F$$