

問題 9: 凝縮系の電子構造

通常、凝縮系の電子構造は孤立原子の電子構造とは異なる。例えば、一次元の鎖状に並んだ Na 原子のエネルギー順位は図 1 のようになる。ここに、Na の 3s 軌道状態のエネルギー準位の変化を示す。Na 原子の数(N)が増加すると、エネルギー準位の間隔は減少する。非常に大きい N では、エネルギー順位の間隔は熱エネルギーに比べ無視出来る程度に小さくなり、3s 軌道順位の集まりは、図 1 最後に表示する様に、エネルギー順位のバンドと見なす事が出来る。このエネルギー順位のバンドを占有する Na の 3s 電子は、一次元鎖全体に広がり、金属的性質を導いている。従って、この 3s 電子は一次元の箱に閉じ込められた自由粒子と見なす事が出来る

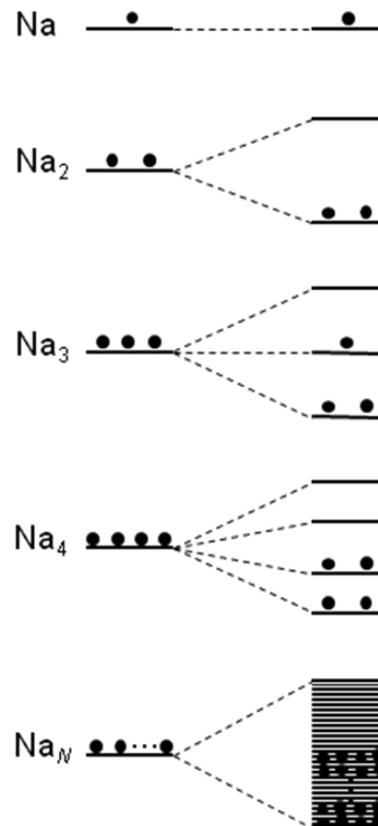


図 1

- a) 一次元の箱に閉じ込められた自由粒子の固有エネルギーは次式の様に表される：

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

ここで、 n は主量子数、 h はプランク定数、 m は電子の質量、および、 L は一次元鎖状 Na の長さである。この一次元鎖の長さを $L = a_0(N-1)$ と仮定する。ここで、 N は Na 原子の数、 a_0 は最近接原子間距離である。この場合の最高占有順位のエネルギーを計算せよ。

- b) 1.00 mg の Na が、最近接原子間距離 $a_0 = 0.360$ nm の一次元鎖を形成するとする。最低占有順位から最高占有順位のエネルギー幅を計算せよ。
- c) 室温での熱エネルギーが 25 meV であると仮定すると、最高占有準位と最低非占有順位とのエネルギーギャップが、熱エネルギー(25 meV)より小さくなるには、何個の Na 原子が必要か? 最低限必要と成る Na 原子数を、偶数個を仮定して計算せよ。