

フェルミ面の観測

金属ではフェルミ面近傍の電子のみが全ての性質を決めるから、物性はフェルミ面を反映する。

例えば、電子比熱 γT 、Pauli 常磁性磁化率 χ_P 、電気伝導率や熱伝導度：Viedeman-Franz 則。

<電子比熱>

$$\text{自由電子系のエネルギー} : U = \int_0^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon, T) d\varepsilon$$

$$\text{電子比熱} : C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \int_0^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) \frac{\partial f(\varepsilon, T)}{\partial T} d\varepsilon \approx D(\varepsilon_F) \int_0^{\infty} \varepsilon \frac{\partial f(\varepsilon, T)}{\partial T} d\varepsilon = \frac{\pi^2}{3} D(\varepsilon_F) k_B^2 T = \gamma T$$

$$\text{参考} : f(\varepsilon, T) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1}, \quad \frac{df}{d\varepsilon} = -\frac{1}{k_B T} f(1-f), \quad \frac{df}{dT} = -\frac{df}{d\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon - \mu}{T} + \frac{d\mu}{dT} \right)$$

<Pauli 常磁性磁化率>

$$\begin{aligned} \chi_P &= \int \{ (D(\varepsilon + H\mu_B) - D(\varepsilon - H\mu_B)) f(\varepsilon, T) \} d\varepsilon / H \\ &= 2\mu_B^2 D(\varepsilon_F) = \frac{3Ne\mu_B^2}{2\varepsilon_F} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right\} \end{aligned}$$

直接、フェルミ面の形状を知る。

- de Haas-van Alphen 効果
 χ の $1/H$ の振動
- サイクロトロン共鳴
- Shubnikov-de Haas 効果
 ρ の磁場による振動 など

<磁場内の電子の運動>

運動方程式：Lorentz 力を受けて運動する電子の Newton 方程式

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -\frac{e}{c} v_k \times H, \quad \text{結晶内では電子の運動量 } p = \hbar k, \quad (\text{電子の電荷} : -e)$$

ここで、 v_k は電子 $\psi_k(r)$ の速度ベクトル \rightarrow 速度演算子。

$$v_k = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_k \varepsilon(k), \quad (\text{演算子 } p/m = \hbar k/m, \quad \varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m \text{ より})$$

これらから $\frac{dk}{dt}$ は \mathbf{H} にも $\text{grad}_k \varepsilon(k)$ にも垂直でなければならない！

$\text{grad}_k \varepsilon(k)$ は $\varepsilon(k) = \text{constant}$ の面に垂直だから、 \mathbf{k} は \mathbf{H} に垂直に $\varepsilon(k) = \text{constant}$ の面にそって変化することになる。

$$H \parallel z \text{ とすると, } (\hbar \frac{dk_z}{dt} = 0 \Rightarrow k_z = \text{constant})$$

$$v_k = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_k \varepsilon(k) \rightarrow \frac{dr}{dt} = v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} \text{ を用いて運動方程式を書き下し,}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hbar \frac{dk_x}{dt} = -\frac{e}{\hbar c} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k_y} H = -\frac{e}{c} H \frac{\partial y}{\partial t} \\ \hbar \frac{dk_y}{dt} = \frac{e}{\hbar c} \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k_x} H = \frac{e}{c} H \frac{\partial x}{\partial t} \\ \hbar \frac{dk_z}{dt} = 0 \Rightarrow k_z = \text{constant} \end{array} \right.$$

これを積分して,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\hbar c}{eH} k_x = -y + Y \\ \frac{\hbar c}{eH} k_y = x + X \quad \text{ここで, } X, Y, Z \text{ は積分定数.} \\ k_z = Z \end{array} \right.$$

つまり、 \mathbf{k} 空間の軌道 C と実空間の C' は相似で C' は C を 90° 回転して $\frac{\hbar c}{eH}$ かければ良いことがわかる！
 ⇨ 電子の運動はフェルミ面の形と密接に関係していることがわかる！

例えば、閉じた軌道 ⇨ 電子のサイクロトロン運動 (振動数 ω_c , 周期 T)

$$\left| \frac{dk}{dt} \right| = \frac{eH}{c\hbar^2} \sqrt{\left(\frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k_x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k_y} \right)^2}$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega_c} = \oint_C dt = \oint_C \frac{dk}{(dk/dt)} = \frac{c\hbar^2}{eH} \oint_C \frac{dk}{\sqrt{\left(\frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k_x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k_y} \right)^2}} = \frac{c\hbar^2}{eH} \frac{\partial A(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon}$$

$$\omega_c = \frac{2\pi eH}{c\hbar^2} / \frac{\partial A(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon}$$

ここで A はフェルミ面の断面積。

これは、Lorentz 力に釣り合って電子がサイクロトロン運動しているのであるから ($e v H = m_c^* v \omega_c$)、サイクロトロン振動数 ω_c は、

$$\omega_c = \frac{eH}{m_c^* c}, \quad (m_c^* : \text{電子のサイクロトロン質量. 自由電子モデルでは } m_c^* = m)$$

従って,

$$m_c^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon} = \frac{\hbar^2}{2\pi} / \frac{\partial \varepsilon}{\partial A(\varepsilon, k_z)}$$

フェルミ面で分散関係がフラットなほど電子は重い！
有効質量テンソルの逆テンソル

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon(k)}{\partial k_i \partial k_j}$$

最も単純な場合，主軸方向の3成分が等しい。

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \varepsilon / \partial k^2}, \quad (\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \text{からも明か！})$$

☆磁場下で，金属中の電子のエネルギーレベルは<Landau 準位>（一次元調和振動子と同じ形）に分裂する。

$$\varepsilon(n, k_z) = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

磁化 M ，磁化率 χ は，
$$\left\{ \begin{array}{l} M = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial H} \\ \chi = -\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial H^2} \end{array} \right., \quad \text{だから Landau 準位をよぎるごとに振動する.}$$

(de Haas-van Alphen 効果)