

銅の電子構造とフェルミ面

発表者：森元太郎
指導教員：眞榮平孝裕

物質科学におけるほとんど全ての問題、物質の性質や物性の発現する現象を根本的に支配しているのは電子、特に価電子である。比較的小さい結合エネルギー（数 eV 程度以内）を持ち、空間的に広がった波動関数を持つ価電子は、原子が置かれた環境に敏感に反応し、物質の基本的性質を決める。磁性、誘電性、伝導性、光学的性質などの電子物性が価電子によって支配されていることは当然のことであるが、物質の機械的性質もまた、根本に戻れば価電子によって支配される。したがって、価電子の振る舞いを理論的に解明することは、物質の個性を知る上で重要である。金属の電気的性質はすべてフェルミ面の形状によって決定される。なぜならば電流はフェルミ面近傍の電子状態が変化することにより生ずるからである。さらに、熱伝導、硬さや色など金属ごとの物性の違いはフェルミ面の形状の違いから起こり、フェルミ面は「金属の顔」と呼ぶこともできる。フェルミ面とは波数空間において等エネルギーをもつ面である。フェルミ面は、絶対零度において電子によって占有されている軌道と占められていない軌道との境界面でもある。

最も簡単な例として、自由電子のフェルミ面を考える（図 1）。3次元の自由粒子に対するシュレディンガー方程式から電子の運動エネルギー $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ が求められる。絶対零度において電子によって占められている状態のうちの最高のエネルギーをフェルミエネルギーと呼び E_F と書く。 $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ の関係を満たす k_F をフェルミ・ベクトルと呼ぶ。3次元の k 空間で $|k| = k_F$ の面は球面であるから、この球をフェルミ球、球面をフェルミ面と呼ぶ。電子の密度を n_0 とすると、 $E_F = \hbar^2 / 2m \cdot (3\pi^2 n_0)^{2/3}$ が求められ、これからフェルミエネルギー E_F は電子の密度 n_0 に依存し、体積には関係しないことがわかる。

今回、銅 (Cu) (原子番号:29 電子配置:[Ar]3d¹⁰4s¹ 結晶構造:fcc 構造) のバンド構造とフェルミ面を理論的に導いた。ブリルアンゾーンからブリルアンゾーンへ連結したネック部分を除けば自由電子的なフェルミ面に似ていることが理解できる（図 2）。詳細は講演にて報告する。

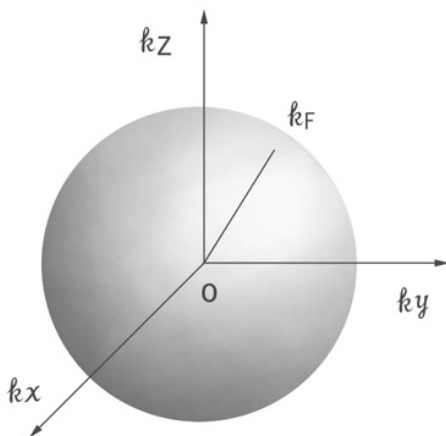


図 1: 自由電子のフェルミ面

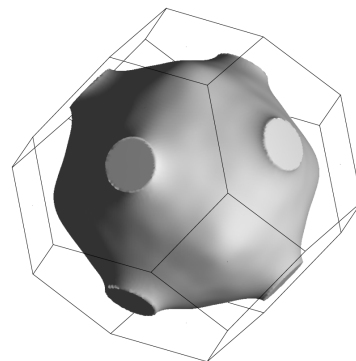


図 2: 銅 (Cu) のフェルミ面