

レポート課題(2)

自由電子ガスの全エネルギーとDOS

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{k^2}{2} \theta\left(\varepsilon_F - \frac{k^2}{2}\right)$$

$\swarrow \frac{k_F^2}{2}$

$$\frac{D(\varepsilon)}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi \delta\left(\varepsilon - \frac{k^2}{2}\right)$$

を計算せよ。

また、単体アルミニウム(fcc格子)のDOSをWebで探し(Materials Project等)自由電子ガスの結果との一致を確かめよ。

Alのバンド図について、どのように自由電子的なエネルギー分散($\frac{k^2}{2}$)が折り返されているか説明せよ。
