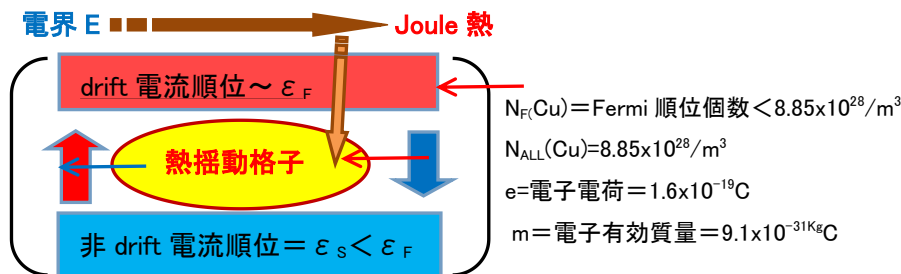


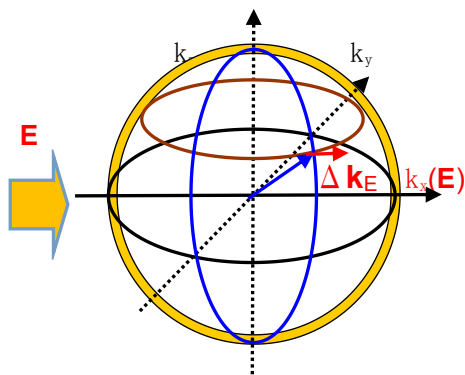
銅電子 29 個は 28 個原子結合価電子と 1 個の 4s¹ 伝導帯自由電子(N(Cu)=8.85x10²⁸/m³)に二分、電気伝導既成論では駆動電界 E で同時に N 全部が加速 drift 電流、電気抵抗になる熱格子相互作用で流れ平衡化(統計力学緩和過程平衡化)、統計力学第一原理として電子順位状態確率平衡とはその遷移入出等量で相殺、drift 電流順位と格子吸着離脱先順位



導電率 Drude 式: σ = Ne²τ / m* は正解なのだろうが、[N; τ] は違ってくるだろう。緩和時間 τ はけた違いに長い。格子牢獄電子は(電界)で脱走しては再逮捕を反復。他方格子は逮捕 energy で低位電子脱獄支援、??:電界印加下でも非 drift 電流が存在の理解に困難、格子内電子は前進波 + 後進波が対称の定在波、前進波方向電界印加は前者を強化、後者弱体化でむしろ格子結合を強める模様?、判定は専門家仕事。

[1]: 電界 Drift 電流速度 <<V_D> = eEτ / m*>

(1) 波数空間電子状態密度球と電界 drift 電流.



$E_F = p_F^2 / 2m = (\hbar k_F)^2 / 2m$. $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{C}$. $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$

$V_F = \text{grad}_k E / \hbar = (\hbar / m) \langle k_x, k_y, k_z \rangle$

$j = \sigma E = \rho V = Ne \langle \text{grad}_k E(k) / \hbar \rangle = Ne (\hbar (\mathbf{k}_F + \Delta \mathbf{k}_E) / m)$

全球平均化 $\langle j \rangle = E Ne (\hbar \Delta \mathbf{k}_E) / m = E Ne^2 \tau / m$

$\Delta p_E = \hbar \Delta k_E = e E \tau$

$V = \text{grad}_k E(k) / \hbar = \hbar (\mathbf{k}_F + \Delta \mathbf{k}_E) / m$

$\langle V_D \rangle = \hbar \Delta k_E / m = e E \tau / m$, 電圧比例で電流増

☞: 電流関与電子密度不変、drift 速度で電流増

☞: 教科書は全球成分微小電界方向シフト, 筆者は薄皮部分のみシフト、

(2) Drift 電流速度 <<V_D> = eEτ / m*>;

$\sigma(\text{Cu}) = 5.7 \times 10^7 / \Omega \text{m} < \text{実測値} > = Ne^2 \tau / m = 8.85 \times 10^{28} \times (1.6 \times 10^{-19} \text{C})^2 < \tau = 0.024 \text{ps} > / 9.11 \times 10^{-31} \text{kg}$

$\langle V_D \rangle = \hbar \Delta k_E / m = e E \tau / m = E \times 1.6 \times 10^{-19} \text{C} \times 0.024 \text{ps} / 9.11 \times 10^{-31} \text{kg} = E \times 4.2 \times 10^{-3} \text{m/s}$,

$\langle V_D \rangle = \hbar \Delta k_E / m = e E \tau / m = E \times 1.6 \times 10^{-19} \text{C} \times < 0.024 \text{ps} \times 360 > / 9.11 \times 10^{-31} \text{kg} = E \times 1.6 \text{m/s}$,

[2]: 伝導帯電子密度 N=8.85x10²⁸ の誤算(1/360)? !

結論: N=8.85x10²⁸. ⇒ N_{FS} = 1/2 x 4.7x10²⁶/m³ = 2.4x10²⁶/m³

(1) 4 個自由電子充满総数: $N(P_F) = 2 \text{spin} \times (\text{運動半径全球 } 4 \pi P_F^3 / 3) / (\text{最少運動虚体積 } \hbar 2 \pi / a)^3$

≪量子化 by "a"≫

$= (V / 3 \pi^2) (P_F / \hbar)^3 = (V / 3 \pi^2) k_F^3 \dots \langle V = 1 \text{m}^3 \rangle \Rightarrow k_F = \{ 3 \pi^2 N(P_F) \}^{1/3} = 1.38 \times 10^{10} / \text{m}$.

☞: 充满総数だからこれ以上電子を詰め込むと溢れる、蒸発する = Fermi 化学 Energy <E_F = 7eV>

自由電子密度 N = 8.45x10²⁸/m³. ← N = 4x1m³/a³ = 4x1m³ / (3,608 Å)³ = 8.51x10²⁸/m³

*ħ = 1.05x10⁻³⁴ Js;; *m = 9.11x10⁻³¹ kg;; *e = 1.6x10⁻¹⁹ C.

k_F = 1.36x10¹⁰/m.

V_F = (ħk_F/m) = 1.57x10⁶/m. E_F = 7eV = E_{eF}/e

(2) **Fermi 殻状態数** :

電子 energy 状態密度函数(E): $D(E) = dN/dE = (V/2\pi^2)(\sqrt{2m/\hbar})^3 E^{1/2}$.

$N = 8.45 \times 10^{28} / m^3$.

$e = 1.6 \times 10^{-19} C, m = 9.1 \times 10^{-31} kg, \hbar = 1.05 \times 10^{-34} Js$

$k_B T_{300} = 1.38 \times 10^{-23} \times 300 (K) = 4.14 \times 10^{-21} J$

$D(E) = (V/2\pi^2)(\sqrt{2m/\hbar})^3 E^{1/2} = 1.14 \times 10^{47}$.

$N_F = \int [dE / (\exp(\epsilon - \mu) / k_B T + 1)] \cdot D(E) \approx [(1/2)(k_B T_{300})] \cdot D(E_F)$

$= 2.4 \times 10^{26} / m^3$.

5. 金属の中の伝導電子 I

<https://o.ed.kyushu-u.ac.jp/BS/figs/2018/5-FreeElectronModel.pdf>

• Cuの場合

➢ $E_F = 7 eV$

➢ E_F 付近で $D(E_F) = 1.81 \times 10^{22} / eV$

• $1 eV = 1.6 \times 10^{-19} J$ であるから、室温の熱エネルギーは

$k_B T = 1.38 \times 10^{-23} \times 300 = 4.14 \times 10^{-21} J = 0.0259 eV$

• 従って、室温で $k_B T$ の幅に付近 4.69×10^{20} 程度の状態の数がある

[3]: 導電理論の現筆者認識要約。

粗雑学習感觸は格子中電子は格子内 **量子力学定常波<前進波+後進波>**、他方導体全体超長距離では **格子揺動<衝突断面積>** が主役で電子落下遷移-電子上昇遷移の平衡統計力学化模様、

☞: 大波常識の外洋、希な **3 角波** で船転覆、格子内定常波電子は外洋金属格子3角波で電子転覆と再浮上?!。

①局所金属格子内では量子力学(Bloch 解)で定在波解⇒量子力学定常波<無揺動>

(1) 定在波<穴あき反射鏡部屋の進行波+逆進波の対称性>:

周期場中の電子<Bloch 定理 = 電子定常状態解の存在 >

https://home.hiroshima-u.ac.jp/ino/lecture/SSP1slide7_ino2017.pdf

*ガス分子の多原子振動回転でも電子雲定常、超電導では格子振動在りだが電子波はマクロ定常状態、

物性物理学 II<Bloch 解: 逆格子と回折波条件⇒電子定在波 >

<http://maya.phys.kyushu-u.ac.jp/~knomura/education/Undergraduate/Busseibutsuri-II/Condensed-Matter-II.pdf>

[3]: ①(2) 電界印加<緩和過程平衡状態実現=対称性の破れと脱獄再逮捕刑務所模型> :

定在波 = 前進波 + 後進波、電界が前進波方向だと振幅増分。後者は振幅減少、総じて

残留定在波 energy 減少 で一層格子結合強化 <電界印加の結果、結合強化??!!! >。

前進波出現で後に **状態遷移発生** = 定常状態破壊。自由行程進行後に **格子揺動衝突落下遷移**、

及びこの衝突格子吸収 energy が下位 energy 定在波電子を伝導帯(Fermi 殻)順位に、

格子揺動上昇遷移。落下上昇両者収支決済平衡で緩和過程平衡状態実現。

☞格子脱走再逮捕組と格子内援助脱獄組がある。両者は格子揺動の働き。

②無外力有限温度金属は **揺動格子** と電子の相互作用存在で状態遷移平衡化 <統計力学揺動 = 三角波模型>。

* **揺動の定義** = 平均値からの外れ <2 乗偏差とその根>

(1) 金属外脱出を例外に金属中全電子は自由電子ではない<金属結合態役因>。正電荷格子との **可逆① & 不可逆相互作用** もあり、

energy 順位状態 **入出相殺の平衡状態** <相互作用の見かけ上の消失、だが統計力学揺動存在から量子力学非定常状態>。

http://777true.net/Statistical-Mechanics-the-Summary_1.pdf

http://777true.net/Quantum-Stochastic-Mechanics_QSM_the-Hidden.pdf

(2) 大波常識の外洋、希な **3 角波** で船転覆、前進後進定常波の **長距離格子波動関数**、外洋金属格子3角波で電子転覆??。

(3) 常温域で導電抵抗率は温度直線比例

格子落下&上昇遷移は **格子振幅 A 断面積揺らぎ** < ΔA^2 > ~ エネルギー偏差 $\sqrt{\langle \Delta E^2 \rangle} = (k_B \times \text{比熱})^{1/2} T$ 。

* $E = p^2/2m - kA^2/2 = \text{運動 energy} + \text{バネ energy} \dots$ 等分配

* 熱接触のみ、物質流 $n \mu$ 書略 canonical 分布で計算簡単化..

$\langle E \rangle = -\partial \ln Z = \sum_k E_k \exp(-\beta E_k) / \sum_k \exp(-\beta E_k)$ 。..... 導体内部 energy

$\partial \beta^2 \ln Z = \{ \sum_k E_k^2 \exp(-\beta E_k) - \langle \sum_k E_k \exp(-\beta E_k) \rangle^2 \} / \sum_k \exp(-\beta E_k) = \langle \Delta E^2 \rangle$

* 比熱 $C_P = \partial \langle E \rangle / \partial T$ 。 $d\beta = d(1/k_B T) = -dT / k_B T^2 = -k_B \beta^2 dT$ 。

$\langle \Delta E^2 \rangle = -\partial \langle E \rangle / \partial \beta = k_B T^2 \partial \langle E \rangle / \partial T$ 。

比熱と格子振動

https://home.hiroshima-u.ac.jp/ino/lecture/SSP1note3_ino2017.pdf

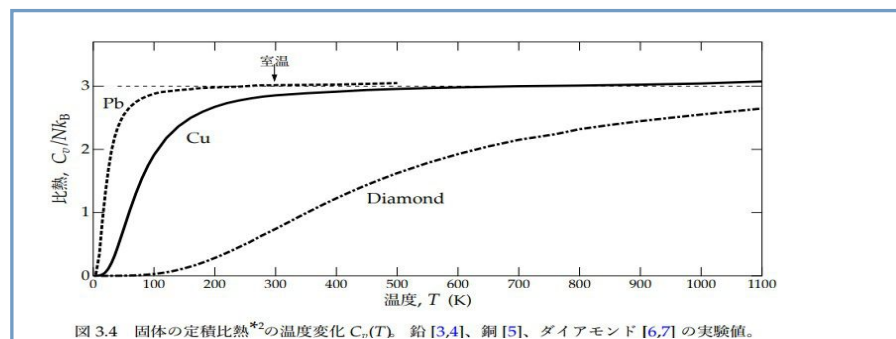


図 3.4 固体の定積比熱 C_v の温度変化 $C_v(T)$ 。鉛 [3,4]、銅 [5]、ダイヤモンド [6,7] の実験値。

付録1:電界印加でも電流無寄与の格子内電子?

格子内電子は前進波+後進波が対称の定在波、前進波方向電界印加は前者を強化、後者弱体化でむしろ格子結合を強める模様?
厳格証明は出来ないが、その他の状況証拠例。

[1]:電子波動関数定常でも原子核は振動回転。

正電荷原子(イオン)核と周辺電子の素(粗)過程実情

(1)量子力学定常状態のすさまじい隠れ実情(水素)

重正電荷水素原子核は軽負電荷電子を引力落下、原子核に落ちて確率密度最大。

原子核落下電子はそこから追い出される<隠れ素粒子連続反応>

* 水素元素 1s 軌道波動関数 = $\exp(-r/a_0) < 1/a_0^{3/2} \pi^{1/2} > \dots$ 定常状態安定!!

<https://www1.doshisha.ac.jp/~bukka/lecture/quantum/pdftext/pc4-01.pdf>

水素核周囲には極高温の{電子+陽電子}の真空偏極(連鎖)充満、1s 電子は静電系の真空偏極連鎖陽電子と軌道上で対消滅で核地獄落下(トンネル)、生き残った核近傍の対電子が核外脱出(トンネル)。

(2)H2水素ガス原子核2個は振動回転だが電子雲は定常。

ガス分子多原子核は振動回転だが素粒子電子雲は定常。

* 離散 energy 順位解 = 固有値固有状態で定常

[2]:Hellman-Feynman 静電力定理:

局所安定分子系では多数原子の振動回転運動があれど、電子状態は定常固有値状態。

電子運動とイオン殻運動の分離 → 電子状態は定常固有値状 $H\psi_k = E_k\psi_k$.

* 量子化学の断熱近似

* 結晶物理の Bloch 定理

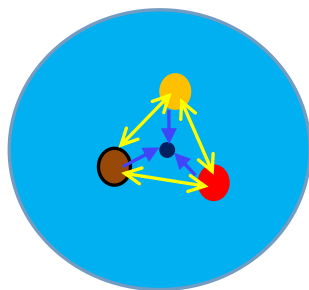
https://www.qcri.or.jp/pdfs/Kagaku_no_Ryohiki.30.881.PDF

$$F_A^\alpha = Z_A \int dr^3 \rho(r) (r_A / r_A^3) - Z_A \sum_{B \neq A} Z_B (R_{AB} / R_{AB}^3)$$

積分(総和)の平均値定理: ⇒ 電子電荷中心...イオン電荷中心.

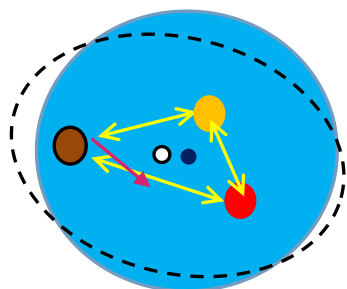
$$F_A^\alpha = Z_A Q_e \langle r_A / r_A^3 \rangle - Z_A \sum_{B \neq A} Z_B \langle R_{AB} / R_{AB}^3 \rangle$$

$$Q_e = \sum_B Z_B$$



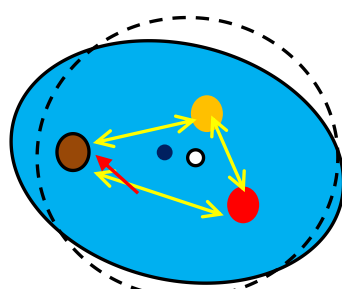
正電荷のイオン殻相互間では斥力が働く。その斥力を相殺するのが電子平均集積点引力、相殺が成立する限り、イオン多数の回転振動運動が可能。

電子波動関数は定常固有状態。



電子雲先行

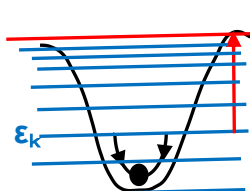
殻先行電子雲追従



粗暴な総括:

分子結合系一般では負電子電荷中心と正イオン電荷中心は一致して定常状態、

両者±電荷間引力=負エネルギー底値で小摂動に安定



$$\text{外乱力} = \epsilon_{FS} - \epsilon_k$$

なれど外乱による状態遷移は起こるので、±電荷間 Coulomb 力の素過程に波乱がある。

付録2: 自由(電子)波動関数の二つの意味。

(1) Schrodinger 方程式と無相互作用 $\langle H_0 \rangle$ +有相互作用 $\langle H_1 \rangle$ Hamiltonian,

$$i\hbar \partial_t \Psi(t) = [H_0 + H_1] \Psi(t) = H(t) \Psi(t).$$

*通常自由粒子 Hamiltonian. $H_0 = \sum_j p_j^2 / 2m_j$, $p_j = -i\hbar \text{grad}_j$, p_j の固有値直交関数基底: $\exp(\langle p_j x_j - \omega_j t \rangle / i\hbar)$
これが統計力学状態全ラベルを作る事に意味あり。力学が自由粒子系と言う意味でなし $\Rightarrow H_1$ 。

(2) 反応状態遷移<初期状態 $\Psi(0)$ に相互作用 H_1 が何回も作用し状態遷移系列形成>

$$\Psi(t) = \Psi(0) + (i\hbar)^{-1} \int_0^t dt_1 H(t_1) \Psi(t_1)$$

$$\Psi(t_n) = \Psi(0) + (i\hbar)^{-1} \int_0^{t_n} dt_{n-1} H(t_{n-1}) \Psi(t_{n-1})$$

$$\begin{aligned} \Psi(t) &= \Psi(0) + (i\hbar)^{-1} \int_0^t dt_1 H(t_1) \{ \Psi(0) + (i\hbar)^{-1} \int_0^{t_1} dt_2 H(t_2) \Psi(t_2) \} \\ &= \Psi(0) + (i\hbar)^{-1} \int_0^t dt_1 H(t_1) \Psi(0) + (i\hbar)^{-2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) \Psi(t_2) \\ &= \Psi(0) + (i\hbar)^{-1} \int_0^t dt_1 H(t_1) \Psi(0) + (i\hbar)^{-2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) \Psi(0) \\ &+ (i\hbar)^{-3} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 H(t_1) H(t_2) H(t_3) \Psi(0) + \dots \end{aligned}$$

* H_0 は上記で状態遷移に無関係、上記積分では実質 $H_1 = H(t)$ 、

(3) 土電荷間 Coulomb 引力相互作用<可逆定常系>:

$H_C = q_1 q_2 / 4\pi \epsilon r_{12}$... H_0 と同じ数学的に自己共役作用素、以下の意味で定常系、

$[H_0 + H_C] \Psi_j = E_j \Psi_j$. 直交関数基底固有関数系を形成、 H_0 と同資格。

(1) の素過程意味では複数回遷移後に初期状態復帰で定常となる、

\Rightarrow [1]:(1) 量子力学定常状態のすさまじい隠れ実情(水素)

(4) 不可逆遷移系 Coulomb 相互作用<電気抵抗元祖=格子揺動!>:

(a) 土電荷間 Coulomb 引力水素ではエネルギー底値の1S 電子は頻りに核に落下、だが下に遷移不可で復元、量子力学定常状態、

(b) 上記(a)の対偶命題、エネルギー天井値の銅3S 電子、格子三角波で落下断面積増、電子運動エネを格子供与、己は下降遷移、他方格子は下層電子にエネ供与で天井遷移。
 \Rightarrow 数学的には状態遷移を起こさない Coulomb 相互作用だがその実態内容素過程次第で定常系の破れが起きる。しかし巨視的に電子上昇遷移と下降遷移はバランス緩和過程。揺動散逸定理<揺動からの平衡復元と小外力からの平衡復元は同じ>に従ってる。

\Rightarrow 格子電子は反射鏡牢で量子力学定常波<Bloch 波動関数>、だが格子三角波到来で定常状態の一時破れで統計力学化、

付録2: 量子確率過程力学<非平衡系の一般論>

<http://www.777true.net/img007-Quick-Guide-to-Quantum-Stochastic-Mechanics.pdf>

(a) 揺動進展原理< $\Delta E \Delta t = \hbar$ の第0原理<数学定理近似?>一般証明>:

状態遷移反応時間 Δt 、頻度は energy 揺動 ΔE に比例

熱力学で書けば $\Delta E = T \cdot \Delta S(T)$ 、温度 T に比例(?)。

(b) 一般定常流れ j_{ex} と緩和時間 $\Delta t(\infty)$ 存在。

general opened system with constant thermo-chemical external flow= j_{ext} with heat beating time= $\Delta t(\infty)$..

$\omega(\infty) = T \cdot \omega(\infty) + \Delta t(\infty) \cdot j_{ex}$ ω = state density vector with internal reaction matrix= T .

*coherent 流れ典型は LASER 発振,,, random 性定常電流は伝導帯電子格子落下自由行程 L 緩和時間 τ 、

格子は落下電子から熱を獲得、その熱で非伝導帯電子を伝導帯持ち上げに使い平衡化。

\Rightarrow 電子 Fermi 速度: $V_F = L / \tau = 1600 \text{ km/s}$ 波数状態密度球最大半径。 L, τ ?

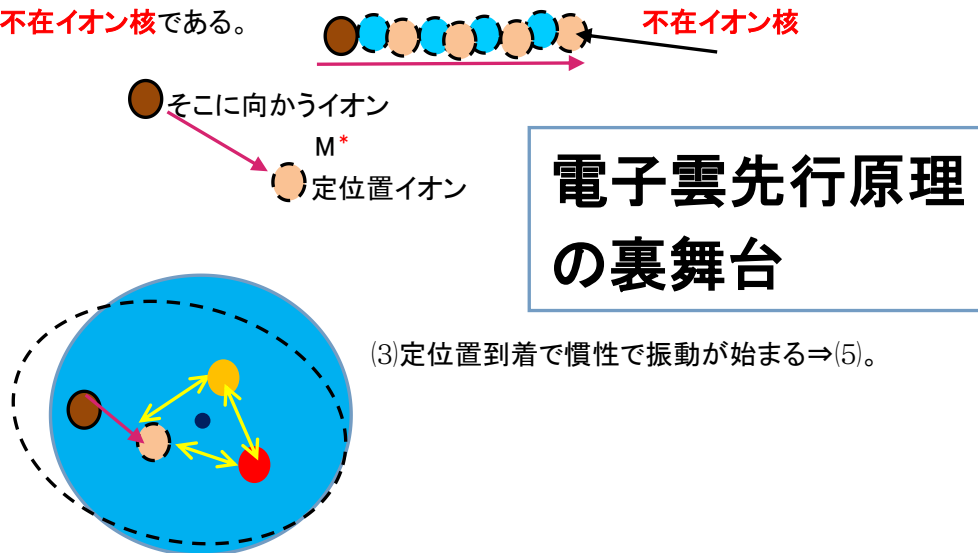
付録3:超伝導の超データXXな模型<浅学なので付録6に更新>。

付録4: 電子状態定常波:

イオン核が低速なれど運動状態で、電子波定常は判りずらいだろう。その回答は真空偏極超連鎖、
<http://www.777true.net/Real-Image-of-quantum-Chemical-Reaction.pdf>

(1)中辻氏から電子雲先行原理を教わったが、その時の筆者理解は静電場を写し取るというキルリアン写真、
植物成長未来の形が見えると言う。生命分子は基本的にイオン静電結合の鍵と錠の関係。

(2)先行電子雲がジツとして分子元素 M が結合定位置にくるまで待つ=電子雲先行原理。
実は先行電子雲ではイオン核 M 等は定常状態定位置 M^+ に既に居る=電子状態定常波!!
だがそれは真空偏極から発生した仮想イオン M^+ 、0から生まれたから負物質 M が寄り添い、
その列はこれからやってくる M 迄、引力超連鎖を形成する。M を引き寄せるのは先行電子雲でない。
不在イオン核である。



(3)定位置到着で慣性で振動が始まる⇒(5)。

(4)一般 gauge 場理論により Faddeev-Popov ghost が一般物質の超双極子を作る反応が提示できる。
<http://www.777true.net/Energy-Creation-Process-from-QED-to-QGD.pdf>

P4/16,

nucleon dipole formation reaction by FP ghost $\{\bar{C}^a, C^a\}$ with gauge field $\{A^a_\mu\}$:
Not only elementary particle, but also any complex particle has dipole ghost in vacuum.

(5)しつこく反復するがイオン核が相当の運動でも電子雲不動とは陰の定位置不動イオンが存在、
その位置周辺で引力振動(安定 potential)するわけです。外乱で振幅臨界超越ならば電子雲瞬間遷移、
再度先行原理機構が動作。

付録5: 導体電界印加では上昇遷移(drift 電流)と下降遷移(格子結合)で対称2分。

[3]: ①(2)電界印加<緩和過程平衡状態実現=対称性の破れと脱獄再逮捕刑務所模型>:

定在波=前進波+後進波、電界が前進波方向だと振幅増分。後者は振幅減少、総じて

残留定在波 energy 減少で一層格子結合強化<電界印加の結果,結合強化??!!!>。

格子 potential 変動と波動関数変化

振幅変調上下 split energy-band での同時変動発生

[1]: Bloch 定理 1: 格子周期 Potential: $V(\mathbf{r}+\mathbf{R})=V(\mathbf{r})$ 下で次式 Bloch 波動関数は固有値解になる。

*川村肇、固体物理学 p66、共立全書、1968、東京

$$[p^2/2m+V(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r})=\varepsilon\Psi(\mathbf{r}).$$

$$[p^2/2m+V(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{R})=\varepsilon\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{R})\dots\mathbf{R}\equiv\sum_{j=1}^3N_j\mathbf{a}_j\dots\text{格子 vector.}$$

$$\Rightarrow\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{R})=\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R})\Psi(\mathbf{r}).$$

周期性から $\mathbf{r},(\mathbf{r}+\mathbf{a}_1)$ の位置で物理量が同じでなければならない $\Rightarrow\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{a}_1)=\exp(i\lambda)\Psi(\mathbf{r})$, gauge 不変性.

$$\Rightarrow\lambda=\langle\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\rangle\dots\dots\langle\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\rangle=2\pi N\langle\text{並行},N=\text{整数}\rangle,\langle\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\rangle=0\langle\text{直交}\rangle.$$

Bloch 定理 2 $\Rightarrow\Psi(\mathbf{r})=\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\dots u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\equiv u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})\dots\dots\langle\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\rangle=2\pi N\langle\text{並行},N=\text{整数}\rangle,\langle\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\rangle=0\langle\text{直交}\rangle\dots\dots$

*Bloch 波動関数は搬送波 x 変調波の形式で、両者ともに \mathbf{R} の周期函数、

搬送波 \mathbf{k} は格子 vector= \mathbf{R} の関係で指定され、変調波は $V(\mathbf{r})$ と搬送波 \mathbf{k} から決定され、以下の S 方程式の解、

Bloch 定理 3; $V(\mathbf{r})$ 作用反映の $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の Schrodinger 方程式< \mathbf{k} の関数>

$$(\varepsilon-\hbar^2\mathbf{k}^2/2m)u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=[-\hbar^2\nabla^2/2m+V(\mathbf{r})]u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})-(\hbar^2/m)\langle\mathbf{k}\cdot\text{grad}.u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle$$

$$=[-\hbar^2\nabla^2/2m+V(\mathbf{r})-(\hbar^2/m)\langle\mathbf{k}\times\text{grad}.u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle]u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\quad\text{vector 内積}$$

通常的一般項 \mathbf{k} 波運動量 x U 波運動量 <電子格子相互作用>

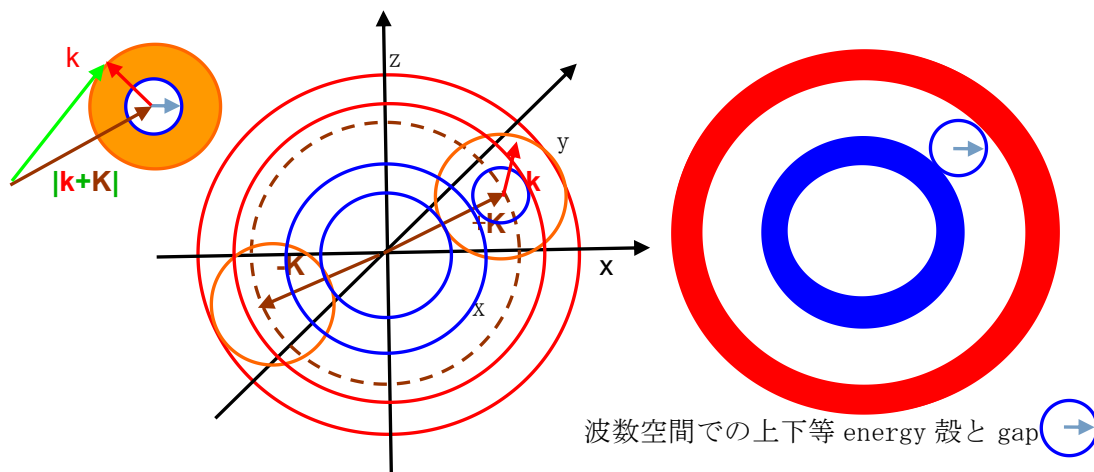
* $\langle\mathbf{k}\cdot\text{grad}.u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle=0$ の両者直交性が成立すると両者独立、それ以外では両者間相互作用で energy 取引がある。

[2]: Potential 変動= $V(\mathbf{r})+\delta V(\mathbf{r})$ は変調波振幅変動= $A_{\mathbf{k}}+\delta A_{\mathbf{k}}$ になり、
上下 energy 帯に等振幅で影響、

$$\Psi(\mathbf{r})\equiv B\cos\langle\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}\rangle\sum_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{k}}\sin\langle\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\rangle=B\cos\langle\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})\rangle\sum_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{k}}\sin\langle\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})\rangle.$$

$$=(B/2)\sum_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{k}}\sin\langle\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{K})\rangle+(B/2)\sum_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{k}}\sin\langle\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}+\mathbf{K})\rangle.$$

sinusoidal 波積は一般に 2 項和に展開できる。ここで上下対称 energy split ができる。

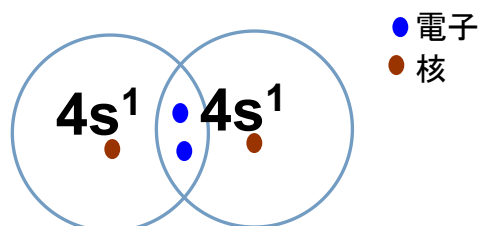


波数空間での上下等 energy 帯と gap

$$\Psi(\mathbf{r})+\delta\Psi(\mathbf{r})=(B/2)\sum_{\mathbf{k}}(A_{\mathbf{k}}+\delta A_{\mathbf{k}})\sin\langle\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{K})\rangle+(B/2)\sum_{\mathbf{k}}(A_{\mathbf{k}}+\delta A_{\mathbf{k}})\sin\langle\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}+\mathbf{K})\rangle.$$

[3]: Cu-Cu($4s^1$) の軌道結合が銅の軟弱結合生成

Cu($4s^13d_{10}$) の最外殻電子配置、



銅は面心立方格子の結果、最隣接原子数は $4\times 3=12$ 個も掛け持ちで共有結合、だから 1-1 結合の $1/12$ の力、それが銅の機械的軟弱性原因なのだろう。 $4s^1$ 電子は電気伝導論では自由電子と呼ぶが金属結合従事では自由でない。

付録6: 超伝導の超デタ XX な模型_改定版2<2024/9/20>。

実用化近づく超伝導送電、強みは？

<https://www.nikkei.com/article/DGXZQODL126LC0S2A110C2000000/>

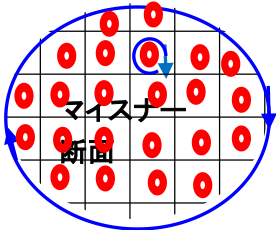
鉄道総研によると送電線1本が長さ1キロメートル以上なら、送電ロスが減るメリットが冷却コストを上回り。複数の鉄道会社が採用に関心を示し。日本は昭和電線が超伝導送電線を手掛けるなど素材が強み。将来は再生エネ発電分野へ応用が期待され、電力・通信会社に広がる可能性もありそうです。

* 筆者は第一原理から飛躍のない接明でないし理解できない、物性論は量子化学基礎がないと本物にならない、本件に浅学推論で間違いあっても容赦下さい。

(1) マイスナー効果 = 超伝導体内部磁界0(M断面)から推定される spin 配置の一般論。

次直流静磁界電流の Maxwell 方程式は電磁場第一原理、これに全てがあるだろう。

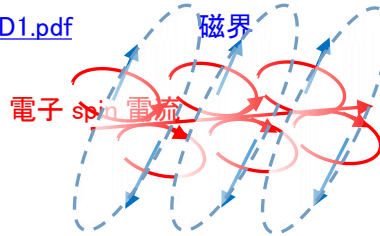
$$\text{curl}H = j. \Rightarrow \text{網目円環磁界流が面垂直電流を形成} \langle \oint dS \cdot j = \oint dS \cdot \text{curl}H = \oint ds \cdot H \rangle$$



円周縁以外は逆向き磁界間で相殺、
網目一個は全同一回転方向-円周磁界、面垂直に
● 電流線 がドサーと並ぶ。

<http://www.777true.net/QED1.pdf>

P5 参照、

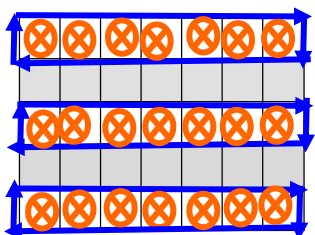


だから上記の原理 spin 配置になる結晶分子設計が仕事になる

磁性の担い手(磁性の源) / Source of Magnetism

<http://www.kk-actus.jp/source>

(2) 磁界間相殺 < 反強磁性体 M 断面模型 >



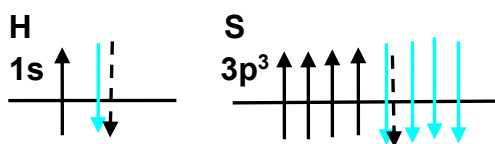
結晶配列設計により、spin 列方向が
層毎に交番<反強磁性体>、
層電流は紙面垂直、
同方向電流は引力、磁界循環空白域はちじむ?。

磁界は循環で安定化する

(3) 世界初! -70°Cの高温超伝導体の結晶構造を解明

https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2016/20160510_2

H3(1s¹)S(3s²3p⁴⁻¹?)



超高压で左の電子配置だと3個の共有結合結果、不對電子は消失して spin 磁気 moment=0, 反強磁性体模型での超伝導は成立しない。

他方超高压下では格子電荷 potential も消失

$$\square E = \text{grad}(\rho / \epsilon) \rightarrow 0. \langle \text{電荷物質圧縮で密度傾斜} \rangle$$

Bloch 関数進行電子が実現するかもしれない。

H3S の構造を見ると、理論が判って設計された結晶構造に見える、非常に単純対称。
超高压は実用的には見えないのだが、

(4) **銅酸化物の超電導機構; 超デタ XX な模型** <2024/9/22>。

30年を経た今日でも、銅酸化物超伝導体におけるそのメカニズムは明らかになっていません。

https://www.riken.jp/press/2016/20160527_3/index.html

銅酸化物高温超伝導体が示す、**反強磁性と高温超伝導が共存する性質を解明しました**

<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/news2.html?pid=11098>

超伝導の歴史

https://www.phys.chs.nihon-u.ac.jp/takahashi/information/members/B4_imagawa.pdf

銅酸化物超伝導体の結晶構造はペロブスカイト構造を基礎とし、名前の由来でもある銅(Cu)と酸素(O)からなる CuO₂ 面を結晶中に必ず持っている。そしてこの CuO₂ 面とキャリアを供給する役目を果たしているブロック層(LSCO では [La, Sr]₂O₂層)と呼ばれる原子層が交互に積み重なった積層ペロブスカイト構造をしている。銅酸化物超伝導体は**反強磁性絶縁体**の母物質にキャリアをドーピングすることで超伝導を発現、エレクトロンドープの場合もキャリアのドーピングにより反強磁性から超伝導、常金属というように性質が変化していく。

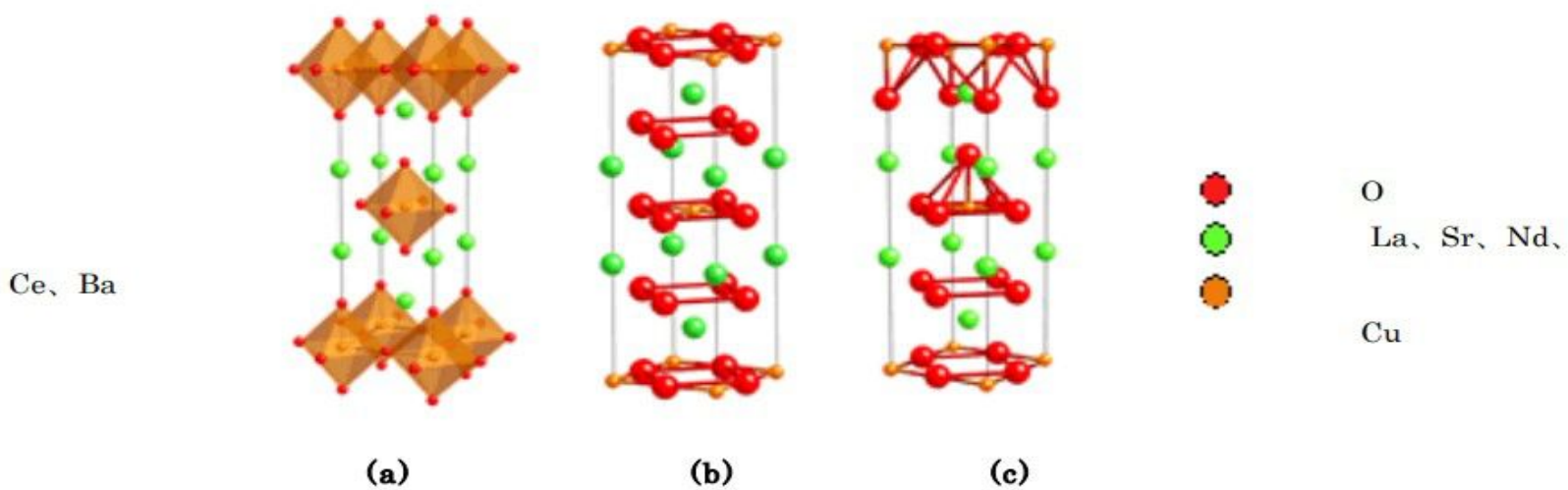


図 2.6. 単位格子内に CuO₂ 面を 1 枚持つ系の結晶構造(a)T 構造(LSCO) (b)T'構造(NCCO)(c)T*構造(NSCCO)[6]

(a) $Cu(4s^1 3d^{10})O_2(2s^2 2p^4) = \underline{Cu \text{ の一個不対電子が実現!!!}}$

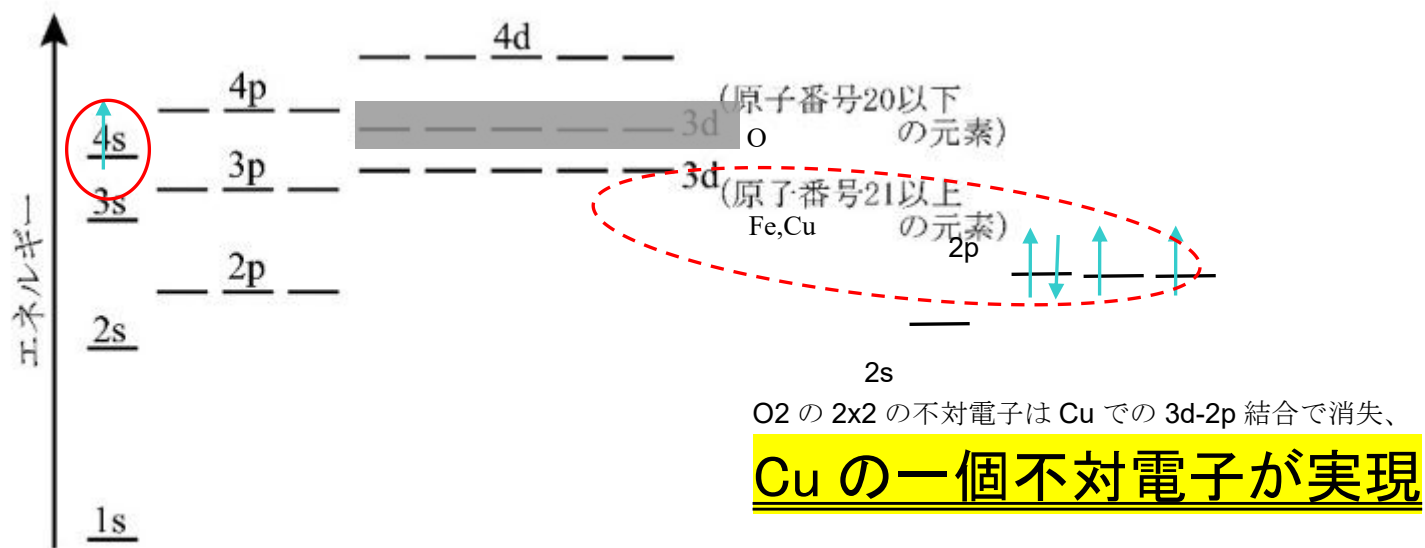


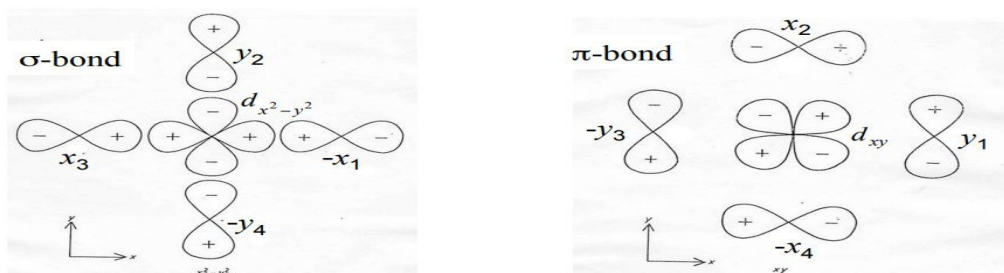
図 3 多電子原子の原子軌道のエネルギーの順番

https://www.jstage.jst.go.jp/article/kakyoshi/71/4/71_164/_pdf-char/ja

酸化物: 共有結合性 (covalency)

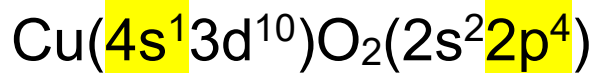
殆どのイオン結晶中では磁性イオンは陰イオンを介して結ばれている。交換相互作用のベースとなる軌道(スピンの乗っている軌道)

→ d-p混成軌道(分子軌道)



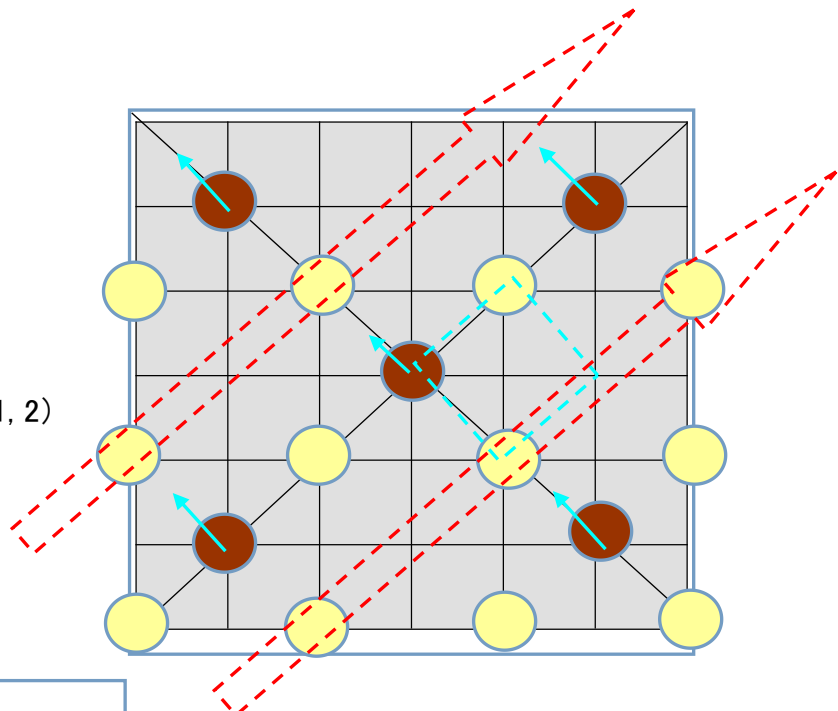
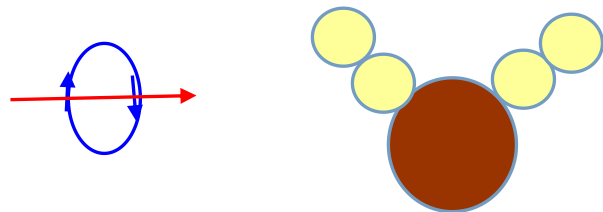
https://ocw.kyoto-u.ac.jp/wp-content/uploads/2010/04/2010_mukikouzouron1_5.pdf

(b) 反強磁性体層



高温超伝導のやさしい理解 - 東北大学応用物理
<https://www.apph.tohoku.ac.jp/low-temp-lab/materia.pdf>

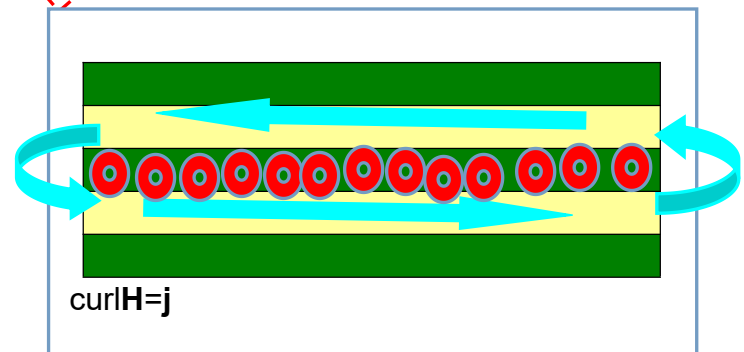
銅 spin 間の超交換相互作用
 母物質で見られる反強磁性相関の特性は色濃く残っている 1, 2)



(c) 筆者の早急推定結論:

(2) 磁界間相殺 < 反強磁性体 M 断面模型 >

2次元正方格子 CuO2 面がシート上下にはランタノイド等による
 電気伝導をブロックする層??
 筆者模型だとこの層が電流(電子、ホール)層??



反強磁性

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%8F%8D%E5%BC%B7%E7%A3%81%E6%80%A7>

高温超伝導

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E9%AB%98%E6%B8%A9%E8%B6%85%E4%BC%9D%E5%B0%8E>



銅酸化物高温超伝導体は全てペロブスカイト構造を基礎とした結晶構造。これら銅酸化物高温超伝導体の構造には以下のような特徴がある。

2次元正方格子 CuO2 面がシート状に広がっている。

多くの物質では、このシートの上下にはランタノイド等による電気伝導をブロックする層があり、

CuO2 面とブロック層が交互に積層する構造をとっている。ブロック層が存在しない無限層と呼ばれるものもある。

ランタノイド: ${}_{57}\text{La} [\text{Xe}] 4f^0 5d^1 6s^2$ 。すなわちキセノン配置の外側に、4f を空で残したまま、5d, 6s 軌道に電子が入る。

<https://info.ouj.ac.jp/~hamada/TextLib/kk/chap14/Text/Cs901402.html>

*超伝導後記:

やはり量子化学の本物理解がないと難しい。

*数珠玉リング列<spin 磁界>-電流コンベア模型:

楕円線に回転数珠玉のコンベア、オスと電流箱が流れる。

