

# Электроны в кристаллах.

## §7 Квантовая теория свободных электронов в металлах.

*План:*

- 1. Описание квантовых систем.*
- 2. Энергетические уровни и плотность состояний в одномерном случае.*
- 3. Энергия Ферми и функция Ферми-Дирака.*
- 4. Свободный электронный газ в трехмерном случае.*
- 5. Характеристики фермиевских электронов.*

# 1. Описание квантовых систем

$$\psi(x, y, z, t)$$

$$dW = |\psi|^2 dV_0 = \psi\psi^* dV_0 \quad (1)$$

$$\frac{dW}{dV_0} = |\psi|^2 \quad \text{- плотность вероятности}$$

$$X\psi(x) = x\psi(x) \quad (2)$$

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$P_x\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial x} \quad (3)$$

# 1. Описание квантовых систем

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (4)$$

$$H = T + U = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x) \quad (5)$$

$$L\psi = \alpha\psi \quad (6)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (7)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (9)$$

# 1. Описание квантовых систем

$$U(t) = \text{const} \quad \psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$$

$$E\varphi(t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} \quad (10)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi(x) = 0 \quad (11)$$

$$\varphi(t) = C \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) \quad (12)$$

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi(x, 0)|^2 \quad (13)$$

## 2. Энергетические уровни и плотность состояний в одномерном случае

электрон массы  $m$  длины  $L$   $\psi(x)$

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (14)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (15)$$

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \quad (16)$$

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{2\pi}{\lambda_n} x \quad (17)$$

## 2. Энергетические уровни и плотность состояний в одномерном случае

$$\frac{1}{2}\lambda_n n = L, \quad \lambda_n = \frac{2L}{n} \quad (18)$$

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n}{L} x \quad (19)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ -A \left( \frac{\pi n}{L} \right)^2 \sin \frac{\pi n}{L} x \right] = E_n A \sin \frac{\pi n}{L} x \quad (20)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 (\pi n)^2}{2m L^2} \quad (21)$$

$$\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n \quad (22)$$

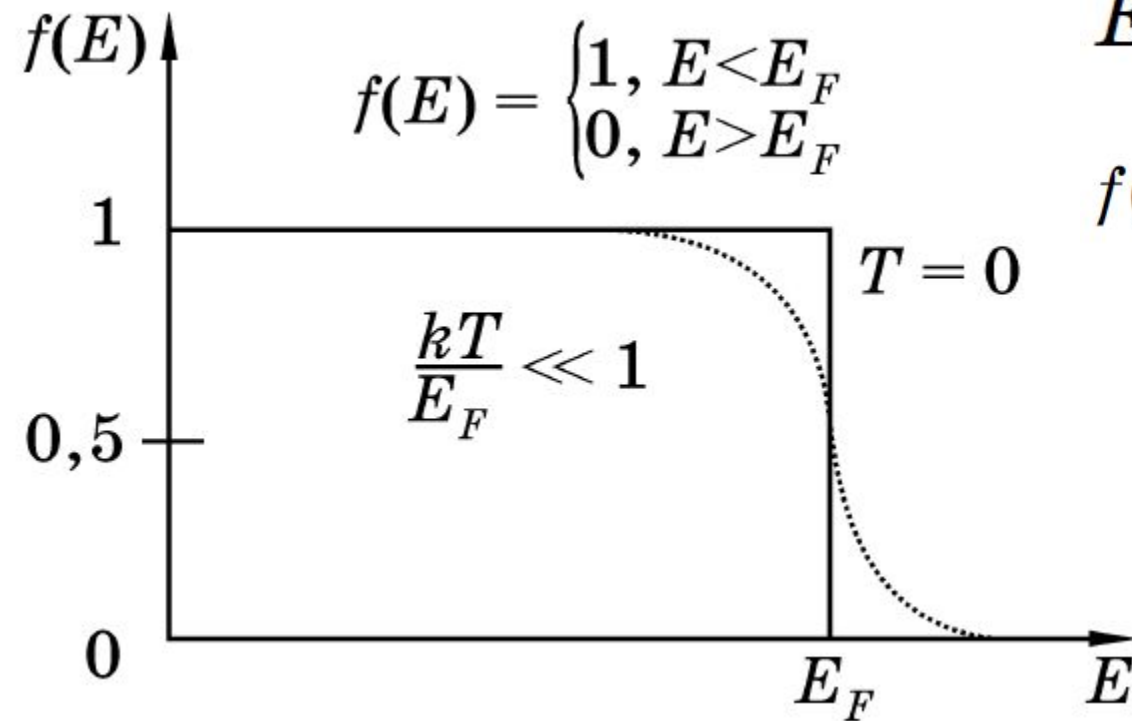
### 3. Энергия Ферми и функция Ферми-Дирака

$$N \quad \psi_n(x) \quad E_n \sim n^2 \quad \frac{N}{2}$$
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} \left( \frac{N}{2} \right)^2 \quad (23)$$

$$n_F \quad \psi_{n_F}(x) \quad E_F$$

### 3. Энергия Ферми и функция Ферми-Дирака

$$f(E) = \begin{cases} 1, & E < E_F, \\ 0, & E > E_F. \end{cases} \quad (24)$$



$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{kT}\right) + 1} \quad (25)$$

$$f(E) = \frac{1}{2}$$

$$\mu = E_F$$

Функция Ферми-Дирака для  $T = 0$  и для некоторой достаточно низкой температуры



## 4. Свободный электронный газ в трехмерном случае

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (26)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\Psi_\alpha \left( -\frac{L}{2} \right) = \Psi_\alpha \left( \frac{L}{2} \right) = 0 \quad (27)$$

$$\psi(r) = A \sin \left( \frac{\pi n_x}{L} x \right) \sin \left( \frac{\pi n_y}{L} y \right) \sin \left( \frac{\pi n_z}{L} z \right) \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \psi(x + L, y, z) &= \psi(x, y, z) = \\ &= \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L) \end{aligned} \quad (29)$$

## 4. Свободный электронный газ в трехмерном случае

$$\psi(\vec{r}) = A \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (30)$$

$$\frac{d\psi}{dx} = ik_x A \exp i(k_x x + k_y y + k_z z) = ik_x \psi, \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -k_x^2 \psi \quad (31)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\psi = -k^2\psi \quad (32)$$

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (33)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (34)$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (35)$$

$$|\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (36)$$

$$\exp(ik_x L) = \exp(ik_y L) = \exp(ik_z L) = 1 \quad (37)$$

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L} \quad (38)$$

## 5. Характеристики фермиевских электронов

$$\begin{aligned} E_F \quad dz \quad (E, E + dE) \quad E &= \frac{p^2}{2m} \quad p = \sqrt{2mE} \\ dp &= \sqrt{\frac{m}{2E}} dE \\ dz &= \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} p^2 dp = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} 2mE \sqrt{\frac{m}{2E}} dE = \\ &= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} dE = \alpha \sqrt{E} dE, \\ \alpha &= \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned} \quad (39)$$

# 5. Характеристики фермиевских электронов

$$dn(E, E + dE) dz = 2fdz.$$

$$(T = 0) \quad (f = 1) \quad E < E_F$$

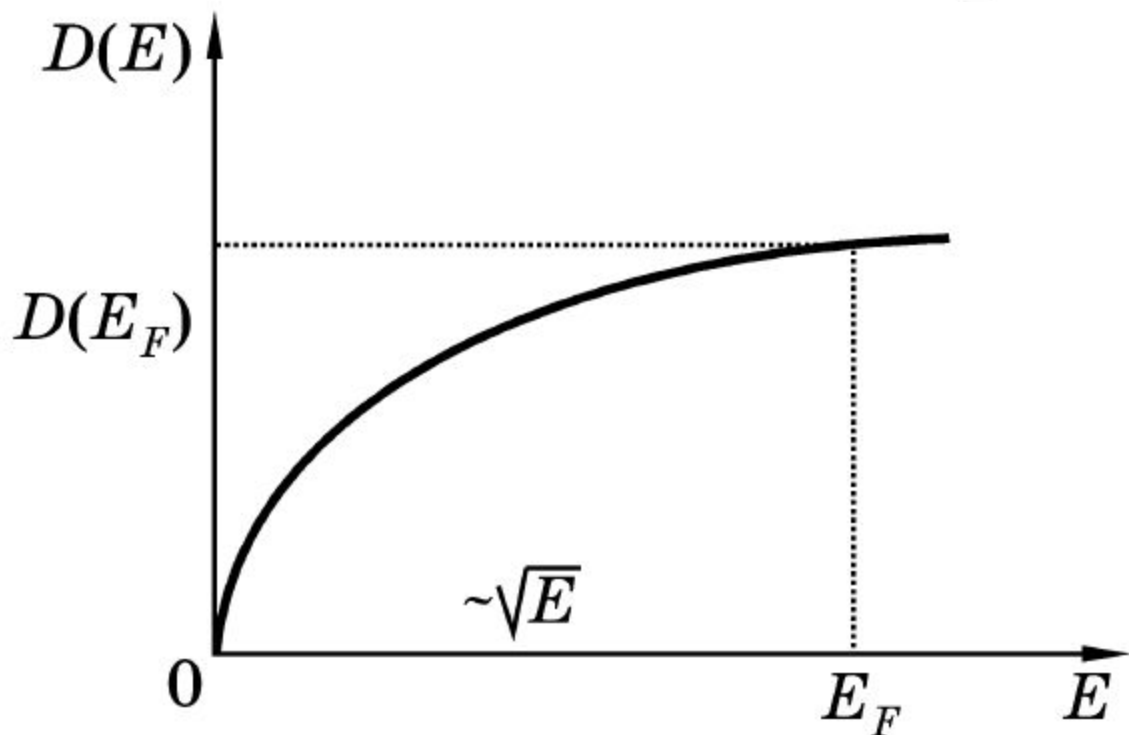
$$dn = 2\alpha\sqrt{E}dE \quad (40)$$

$$D(E) \equiv \frac{dn}{dE} = 2\alpha\sqrt{E}$$

от 0 до  $E_F$

$T = 0 \text{ K}$

*Плотность состояний  $D(E)$  как функция энергии  $E$  для газа свободных электронов*



## 5. Характеристики фермиевских электронов

$$n = \int_0^{E_F} D(E) dE = \int_0^{E_F} 2\alpha\sqrt{E} dE = \frac{4}{3}\alpha E_F^{\frac{3}{2}} \quad (41)$$

$$E_F = \frac{(2\pi\hbar)^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} n^{\frac{2}{3}} \quad (42)$$

$$E_{\text{эЛ}} = \int_0^{E_F} E dn = \int_0^{E_F} E 2\alpha\sqrt{E} dE = 2\alpha \frac{2}{5} E_F^{\frac{5}{2}} \quad (43)$$

$$\langle E \rangle = \frac{E_{\text{эЛ}}}{n} = \frac{E_F^{\frac{5}{2}}}{5} \frac{3}{7 E_F^{\frac{3}{2}}} = \frac{3}{5} E_F \quad (44)$$

## 5. Характеристики фермиевских электронов

$$n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3} \quad E_F = 5 \text{ эВ}, \quad \langle E \rangle = 3 \text{ эВ}$$

$$k_B T_0 = E_F, \quad T_0 = \frac{\pi^2 \hbar^3}{2mk_B} n^{\frac{2}{3}} \quad (45)$$

$$10^{23} \text{ см}^{-3} \quad T_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mk_B} n^{\frac{2}{3}} = 10^5 \text{ К} \quad (46)$$

$$E = E_F$$

$E = E_F$  в  $k$ - или ( $p$ )-пространстве