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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2. Энергетические уровни и плотность состояний в одномерном случае

электрон массы m длины L $\psi(x)$

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

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

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

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

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

2. Энергетические уровни и плотность состояний в одномерном случае

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

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

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

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

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

3. Энергия Ферми и функция Ферми-Дирака

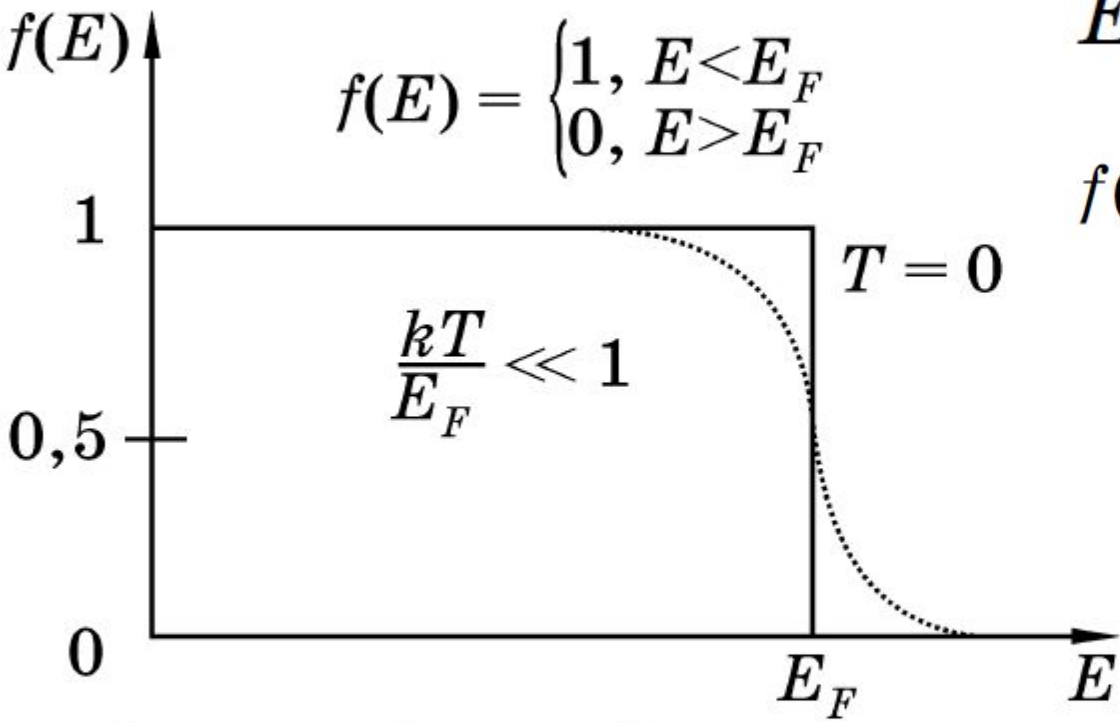
N $\quad \psi_n(x)$ $\quad E_n \sim n^2$ $\quad \dfrac{N}{2}$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}\left(\frac{N}{2}\right)^2 \qquad (23)$$

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

3. Энергия Ферми и функция Ферми-Дирака

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



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

$E < E_F \quad E > E_F$

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

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

$$\mu = E_F$$

4. Свободный электронный газ в трехмерном случае

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

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

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

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

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

4. Свободный электронный газ в трехмерном случае

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

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

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

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

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \quad (34) \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (35) \qquad |\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (36)$$

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

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

5. Характеристики фермиевских электронов

$E_F \qquad dz \qquad (E, E+dE) \qquad E = \frac{p^2}{2m} \qquad p = \sqrt{2mE}$

$$dp = \sqrt{\frac{m}{2E}}dE$$

$$dz = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3}p^2 dp = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3}2mE\sqrt{\frac{m}{2E}}dE = \qquad (39)$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E}dE = \alpha\sqrt{E}dE,$$

$$\alpha = \frac{2\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3}$$

5. Характеристики фермиевских электронов

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

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

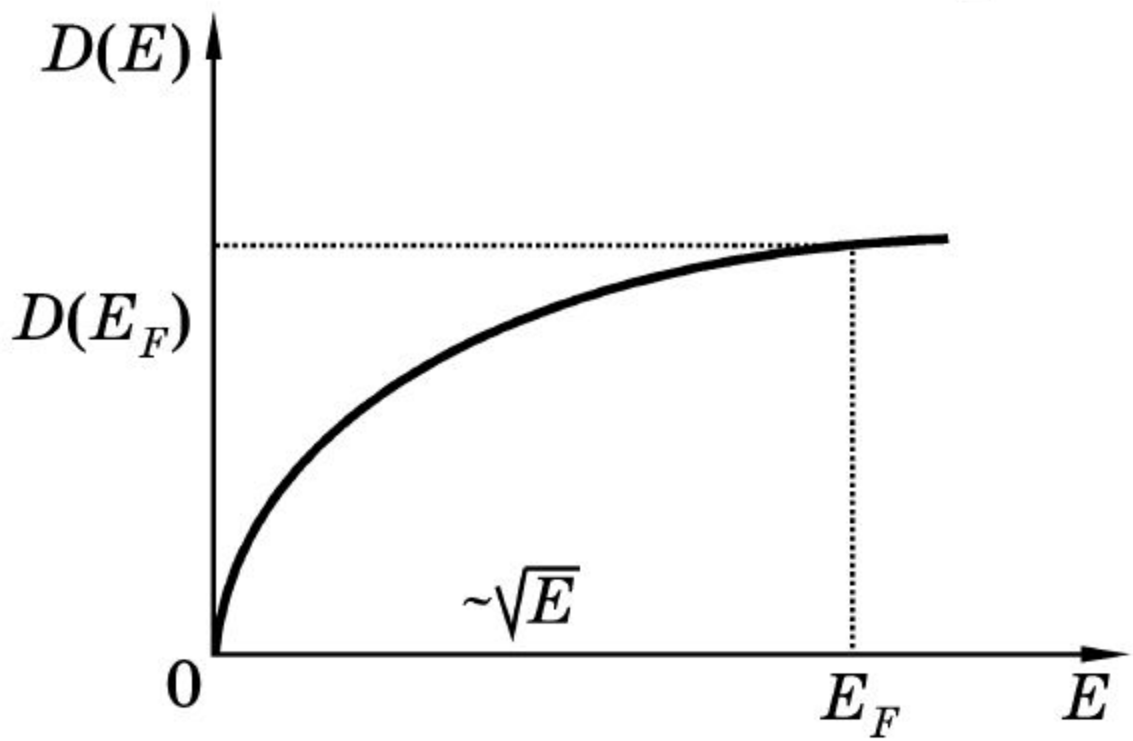
$$dn = 2\alpha\sqrt{E}dE \quad (40)$$

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

от 0 до E_F

$T = 0$ К

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



5. Характеристики фермиевских электронов

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

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

$$E_{эл} = \int_0^{E_F} Edn = \int_0^{E_F} E2\alpha\sqrt{E}dE = 2\alpha\frac{2}{5}E_F^{\frac{5}{2}} \qquad (43)$$

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

5. Характеристики фермиевских электронов

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

$$k_Б T_0 = E_F, \quad T_0 = \frac{\pi^2 \hbar^3}{2mk_Б} n^{\frac{2}{3}} \qquad (45)$$

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

$$E = E_F$$

$E = E_F$ в k- или (p)-пространстве