

## Свободный электронный газ

Рассмотрим свободный электронный газ в одномерной потенциальной яме.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) + E \psi(x) = 0$$

$$\psi(x) = C e^{ikx}$$

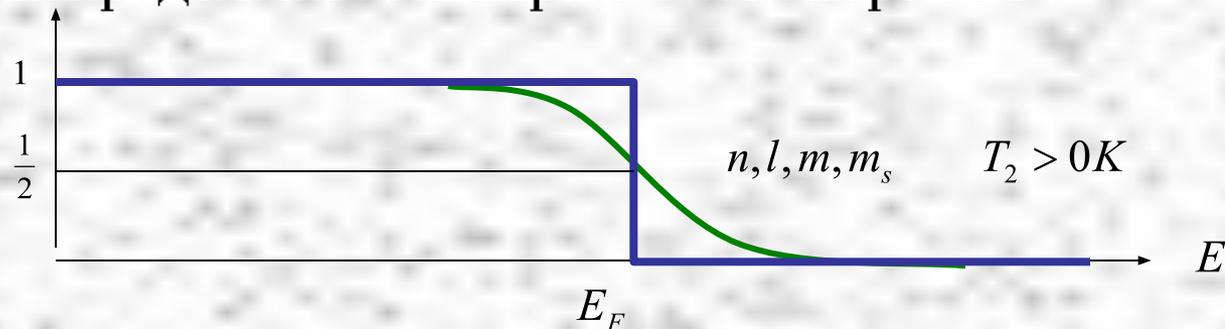
$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad k = \frac{\pi n}{l}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} n^2 \quad n=1,2,3 \dots$$

В соответствии с принципом Паули, в квантовом состоянии, заданном четверкой квантовых чисел, может находиться только один электрон. В квантовом состоянии, заданном тройкой квантовых чисел, могут находиться два электрона с противоположно направленными спинами.

Рассмотрим потенциальную яму при температуре  $T=0\text{ K}$

Так как на каждом уровне может находиться не более двух электронов, то при  $0\text{ K}$  окажутся заполнены электронами все нижележащие уровни, вплоть до некоторого уровня, получившего название уровня Ферми. Свободный электронный газ имеется только в проводниках. Для них определен уровень Ферми. Уровень Ферми – наивысший заполненный энергетический уровень при  $0\text{ K}$ . Построим функцию распределения электронов по энергиям.



При повышении температуры от  $0\text{ K}$  электроны, находящиеся на самых высоких энергетических уровнях, получают возможность перейти на более высокий уровень.

## Уровень Ферми

Уровень Ферми – уровень, вероятность заполнения которого равна одной второй.

Энергия, соответствующая уровню Ферми, называется энергией Ферми. Пусть в атоме  $N$  электронов, тогда число уровней, заполненных при 0К будет равно:

$$n = \frac{N}{2}$$

С учетом того, что на данном уровне может быть 2 электрона,

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} \left( \frac{N}{2} \right)^2$$

Рассмотрим электронный газ в трехмерном случае

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + E \psi(\mathbf{r}) = 0$$

Решением является функция

$$\psi(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

$$\int_{(V)} \psi \cdot \psi^* dV = 1 \qquad \int_{(V)} C^2 dV = 1$$

- Рассмотрим куб размером  $L$ .

$$C^2 L^3 = 1 \Rightarrow C = \frac{1}{L^{3/2}} \quad \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

- В трехмерном случае на волновую функцию накладываются требования: она должна быть периодической с периодом  $L$ .

Это будет выполнено если

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_1 \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_2 \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_3$$

$$(n_1 = 1, 2, 3, \dots) \quad (n_2 = 1, 2, 3, \dots) \quad (n_3 = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

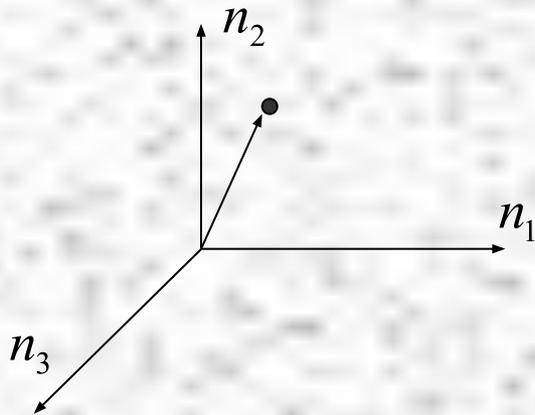
$$k^2 = \frac{4\pi^2}{L^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = n^{*2}$$

$$k^2 = \frac{4\pi^2}{L^2} n^{*2}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{4\pi^2}{L^2} \cdot n^{*2}$$

Перейдем в пространство волновых чисел



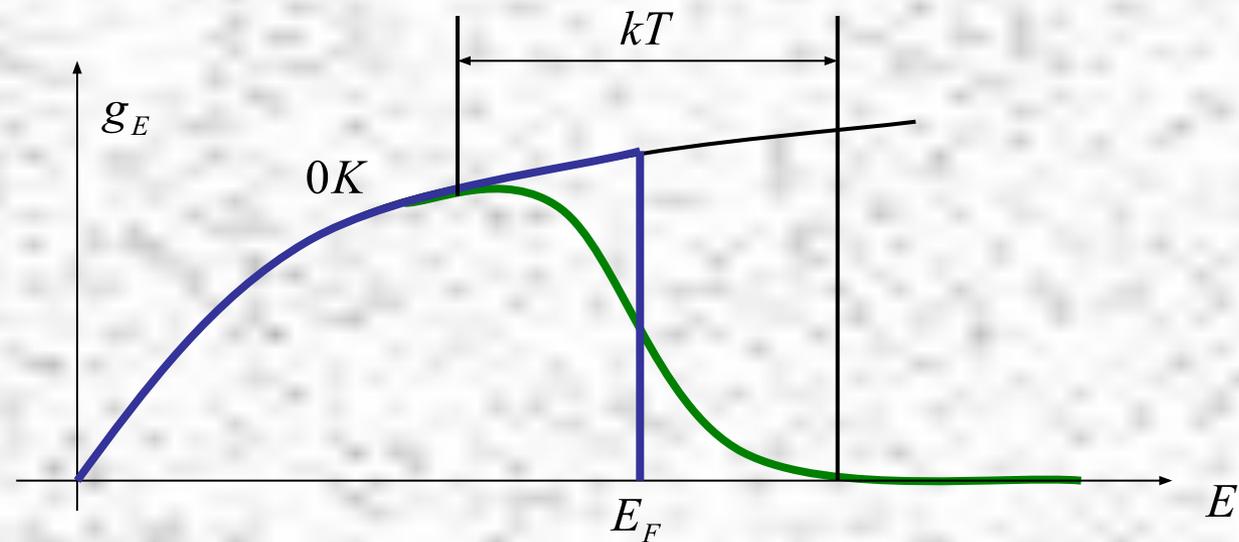
Каждая точка в этом пространстве соответствует двум состояниям электрона, отличающимся направлением спина.

- Подсчитаем количество состояний с энергией, не превышающей некоторого значения  $E$ .
- Число этих состояний будет определяться объемом сферы в пространстве квантовых чисел  $n_1, n_2, n_3$ , умноженному на два с учетом ориентации спина.

$$v_E = 2 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot n^{*3}, \quad n^{*2} = \frac{2mL^2 E}{4\pi^2 \hbar^2},$$

$$v_E = \frac{8}{3} \pi \left( \frac{mL^2}{2\pi^2 \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot E^{\frac{3}{2}} = \frac{8}{3} \frac{L^3}{\pi^2 \hbar^3} \left( \frac{m}{2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot E^{\frac{3}{2}} \quad (1)$$

$$g_E = \frac{dv_E}{dE} = \frac{4L^3}{\pi^2 \hbar^3} \left( \frac{m}{2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot E^{\frac{1}{2}}$$



Обозначим концентрацию электронов через  $n$ , тогда количество электронов в объеме  $V$  определяется как  $nV$ . С другой стороны, количество электронов в  $V$  определяются формулой (1)

$$nV = \frac{8}{3} \frac{L^3}{\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{m}{2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{3}{2}} \quad n = \frac{8}{3} \frac{m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3 2^{\frac{3}{2}}} E^{\frac{3}{2}}$$

При 0К заняты все энергетические уровни до уровня Ферми, следовательно, энергия Ферми определяется следующим образом

$$E_F^{\frac{3}{2}} = \frac{3\pi^2 \hbar^3 2^{\frac{3}{2}} n}{8m^{\frac{3}{2}}}$$

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

- Если перевести энергию Ферми в тепловую энергию, то она будет соответствовать  $T=60000$  К.  
При температуре 300 К  $E_F = \frac{1}{40} eV$ .  
Такая энергия может перевести с одного уровня на другой только электроны, находящиеся вблизи уровня Ферми. Основная масса электронов поглощать тепловую энергию не будет. В процессе нагревания участвует лишь незначительная доля электронов, находящихся вблизи уровня Ферми. Этим объясняется малая теплоемкость электронного газа.
-