Свободный электронный газ. Уровень Ферми.

Свободный электронный газ

Рассмотрим свободный электронный газ в одномерной потенциальной яме.

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

$$\psi(x)=Ce^{ikx}$$

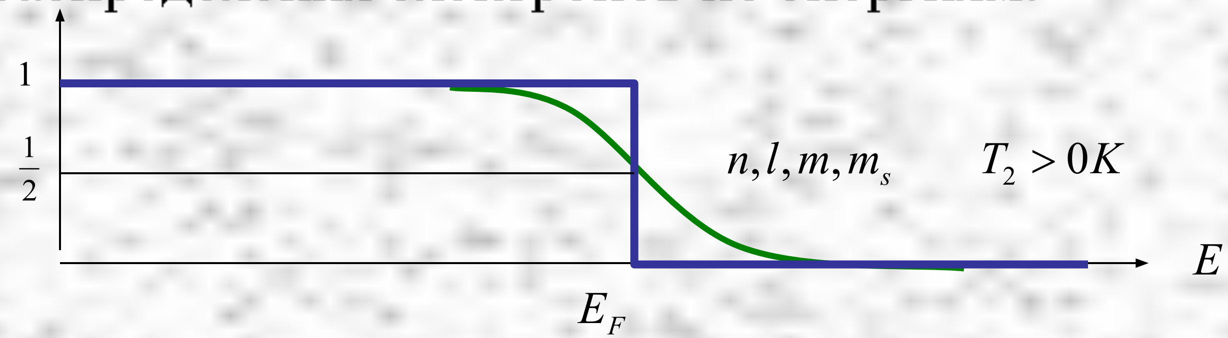
$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}\Rightarrow E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \qquad k=\frac{\pi n}{l}$$

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

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 находится два электрона с противоположно направленными спинами.

Рассмотрим потенциальную яму при температуре T=0 K

Так как на каждом уровне может находиться не более двух электронов, то при 0 К 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 К. Построим функцию распределения электронов по энергиям.



При повышении температуры от 0 К 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

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

Решением является функция

$$\psi(\vec{r})=Ce^{i\vec{k}\vec{r}}$$

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

- Рассмотрим куб размером L.

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

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

  Это будет выполнено если

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_1 \quad (n_1 = 1,2,3,...) \qquad k_y = \frac{2\pi}{L} n_2 \quad (n_2 = 1,2,3,...) \qquad k_z = \frac{2\pi}{L} n_3 \quad (n_3 = 1,2,3,...)$$

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

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

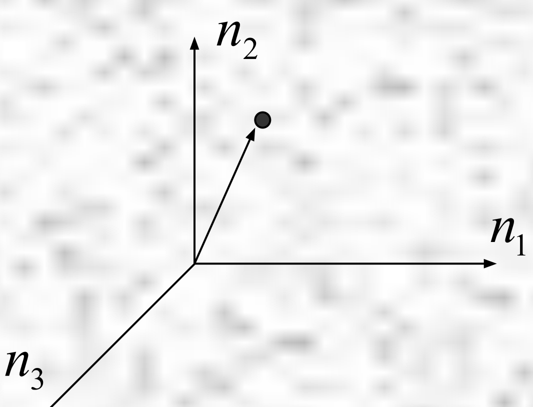
$$k^2 = \frac{4\pi^2}{L^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

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

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

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

Перейдем в пространство волновых чисел



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

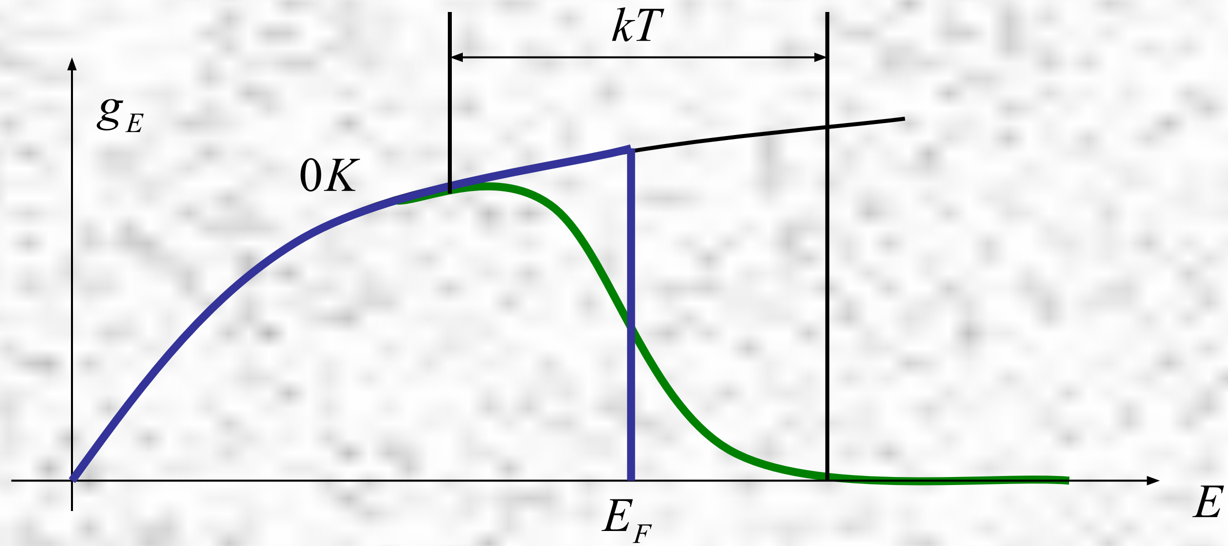
Уровень Ферми

- Подсчитаем количество состояний с энергией, не превышающей некоторого значения Е.
- Число этих состояний будет определяться объемом сферы в пространстве квантовых чисел n1, n2, n3, умноженному на два с учетом ориентации спина.

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

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

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



Уровень Ферми

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

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

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

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

- Если перевести энергию Ферми в тепловую энергию, то она будет соответствовать Т=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.
-