

# Лекция № 8

## КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ

## ВОПРОСЫ

23. Электроны в металлах. Функция распределения Ферми-Дирака. Энергия и уровень Ферми.

24. Элементы зонной теории твердых тел. Металлы (проводники), полупроводники и диэлектрики с точки зрения зонной теории твердых тел.

25. Электросопротивление, его температурная зависимость. Сверхпроводимость. Свойства сверхпроводников. Высокотемпературные сверхпроводники.



23. Электроны в металлах.  
Функция распределения  
Ферми-Дирака.  
Энергия и уровень Ферми.

В квантовой механике, как и в классической статистической физике, закономерности поведения частиц имеют статистический и вероятностный характер. Однако в квантовой механике необходимость статистического описания поведения ансамбля частиц является следствием корпускулярно-волнового дуализма частиц материи, открытого Луи де Бройлем.

Квантовая теория для объяснения электропроводности металлов учла все особенности новых свойств электронов:

1) электрон отрицательно заряженная частица

$$q_e = - 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл};$$

2) электрон имеет массу покоя

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг};$$

- 3) заряд электрона инвариантен и не зависит от скорости движения;
- 4) электрон имеет двойственную корпускулярно-волновую природу;
- 5) электрон относится к тождественно-неразличимым частицам;
- 6) электрон имеет собственный момент импульса  $L_{sz} \neq 0$ ;



7) электрон имеет спиновое магнитное число

$$m_s = \pm 1/2 \text{ (спин } S = 1/2);$$

8) электроны имеют собственный магнитный момент  $\mu_{ms} \neq 0$ ;

9) электроны описываются статистикой *Ферми-Дирака*, являются фермионами с полуцелым СПИНОМ.

В квантовой механике состояние электрона описывается набором квантовых чисел: главное квантовое число  $n = 1, 2, 3, \dots$  ; характеризует энергию электрона в атоме; орбитальное квантовое число  $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$ ; характеризует энергию взаимодействия электронов;

МАГНИТНОЕ КВАНТОВОЕ ЧИСЛО

$$m_{\ell} = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell;$$

характеризует проекцию момента импульса; спиновое квантовое число

$$m_S = \pm 1/2 \quad (\text{спин } S = 1/2).$$

При заполнении электронами энергетических состояний (уровни энергии) для фермионов выполняется принцип Паули:

В данной системе тождественных фермионов любые два из них не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии.

Заполнение электронами энергетических уровней происходит при одновременном выполнении трех условий:

а) электроны должны иметь вполне определенные значения квантовых

чисел:  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ ,  $m_s$ ;

б) соответствовать минимуму энергии;

в) подчиняться принципу запрета Паули.

Электронный газ  
(электроны проводимости)  
находится в трёхмерной  
потенциальной яме  
(кристаллическая решётка).  
В квантовой механике доказывається,  
что энергия таких частиц может  
иметь только дискретные  
(квантовые) значения.

Электроны являются фермионами  
(их спин равен  $\pm 1/2$ )  
и их распределение по энергиям  
описывается формулой  
Ферми-Дирака:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{W_i - W_F}{kT}} + 1}$$

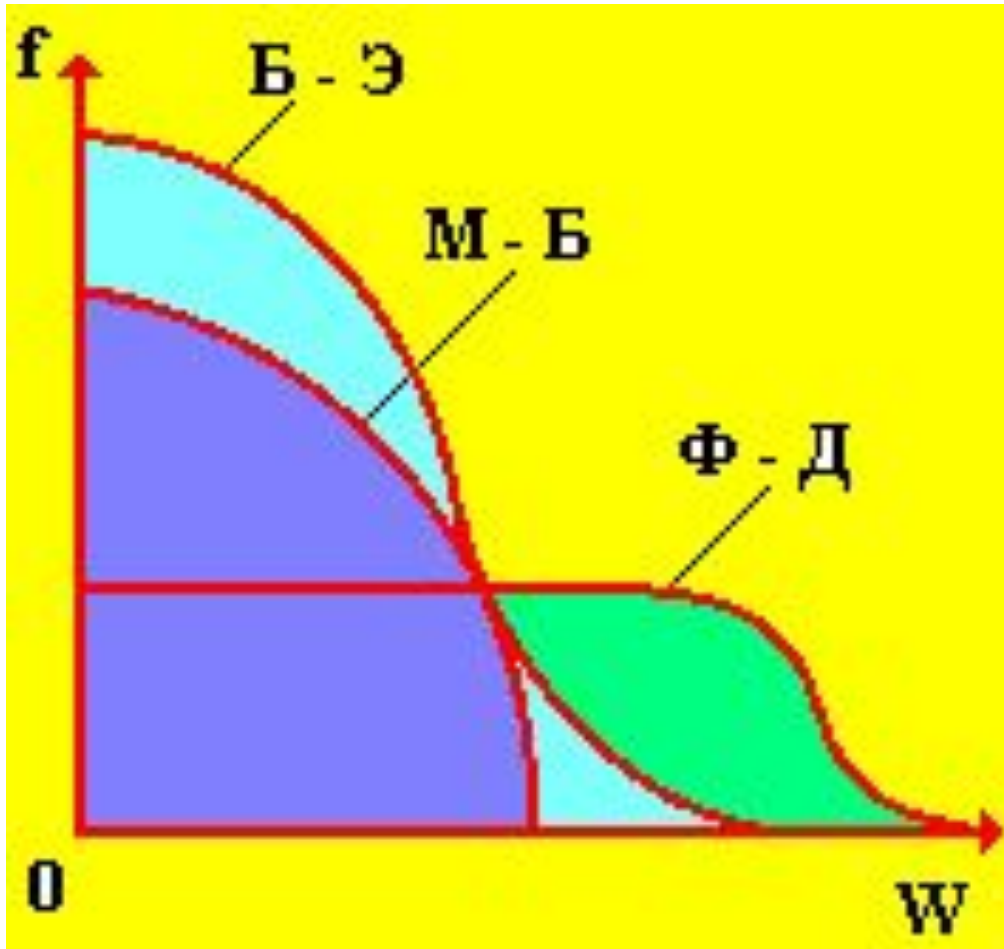
$\langle n_i \rangle$  – среднее число частиц,  
приходящихся на одно квантовое  
состояние,  
 $k$  – постоянная Больцмана,  
 $T$  – термодинамическая  
температура,  
 $W_i$  – энергия данного состояния,  
 $W_F$  – уровень Ферми  
(максимально возможная энергия  
при абсолютном нуле).



Бозоны – частицы с целым спином,  
в некотором квантовом состоянии  
может находиться неограниченное  
число частиц.

Формула Бозе-Эйнштейна:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{W_i - W_F}{kT}} - 1}$$



На рисунке  
приведены  
графики  
функций  
распределения

Максвелла - Больцмана,  
Бозе - Эйнштейна и Ферми - Дирака.

При абсолютном нуле электроны располагаются попарно на самых низких, доступных для них уровнях.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \langle n_i \rangle = 2, & \text{если } W_i < W_F; \\ \langle n_i \rangle = 0, & \text{если } W_i > W_F; \\ \langle n_i \rangle = 1, & \text{если } W_i = W_F. \end{array} \right.$$

Энергия Ферми  
при абсолютном нуле:

$$W_F = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}$$

$h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – постоянная  
Планка;

$n \approx 10^{28} - 10^{29}$  м<sup>-3</sup> – концентрация  
электронов.

Температура Ферми:

$$T_F = \frac{W_F(0)}{k_B}$$

$$W_F(0) = 5 \text{ эВ}, T_F \approx 60\,000 \text{ К.}$$

## Средняя энергия электронов

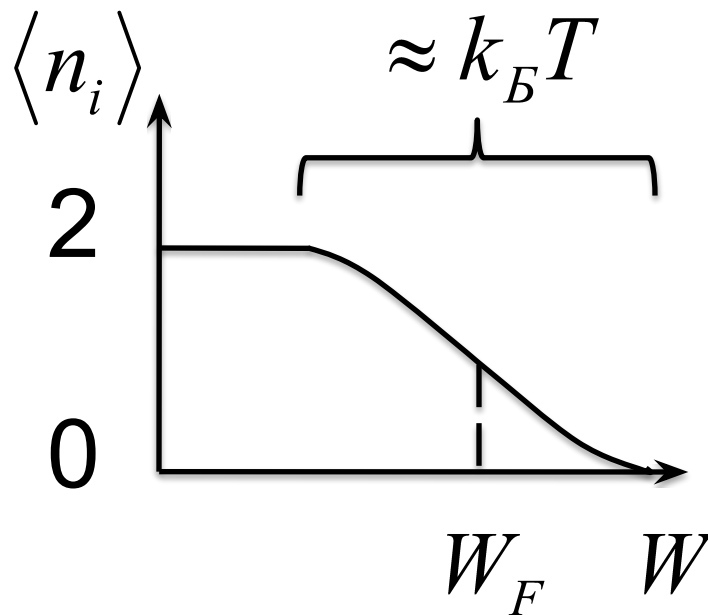
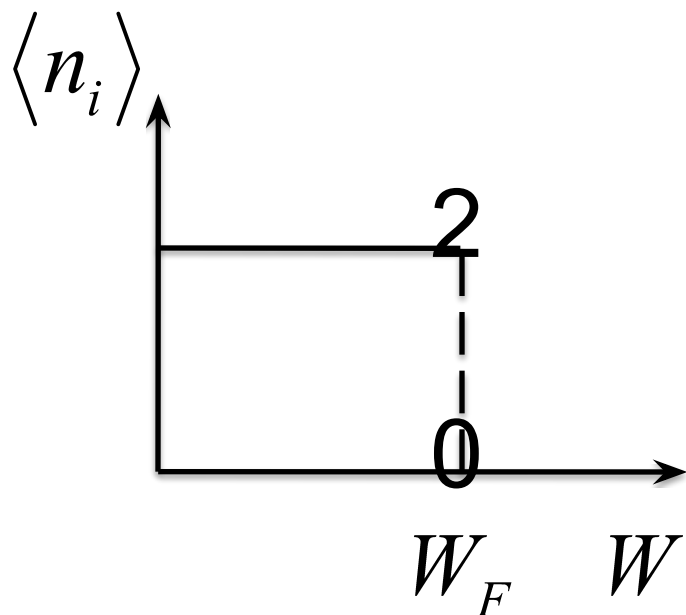
$$\langle W \rangle = \frac{3}{5} W_F \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{W_F} \right) \right]$$

Средняя энергия (в эВ) свободных электронов при абсолютном нуле

$$\langle W \rangle \approx \frac{3}{5} W_F = \frac{3}{5} \cdot 5 = 3$$

Чтобы классическому электрону сообщить такую энергию, его нужно нагреть до 25 000 К.

Уровень Ферми слабо, но всё же зависит от температуры.



Средняя энергия теплового движения, равная по порядку величины  $k_B T$ , составляет при комнатной температуре 1/40 эВ. Такая энергия может возбуждать только электроны, находящиеся на самых верхних уровнях, примыкающих к уровню Ферми. Остальная масса электронов поглощать энергию не будет.





## 24. Элементы зонной теории твёрдых тел.

Металлы (проводники),  
полупроводники и диэлектрики с  
точки зрения зонной теории  
твёрдых тел.

Электрон – квантовая частица, обладающая волновыми свойствами.

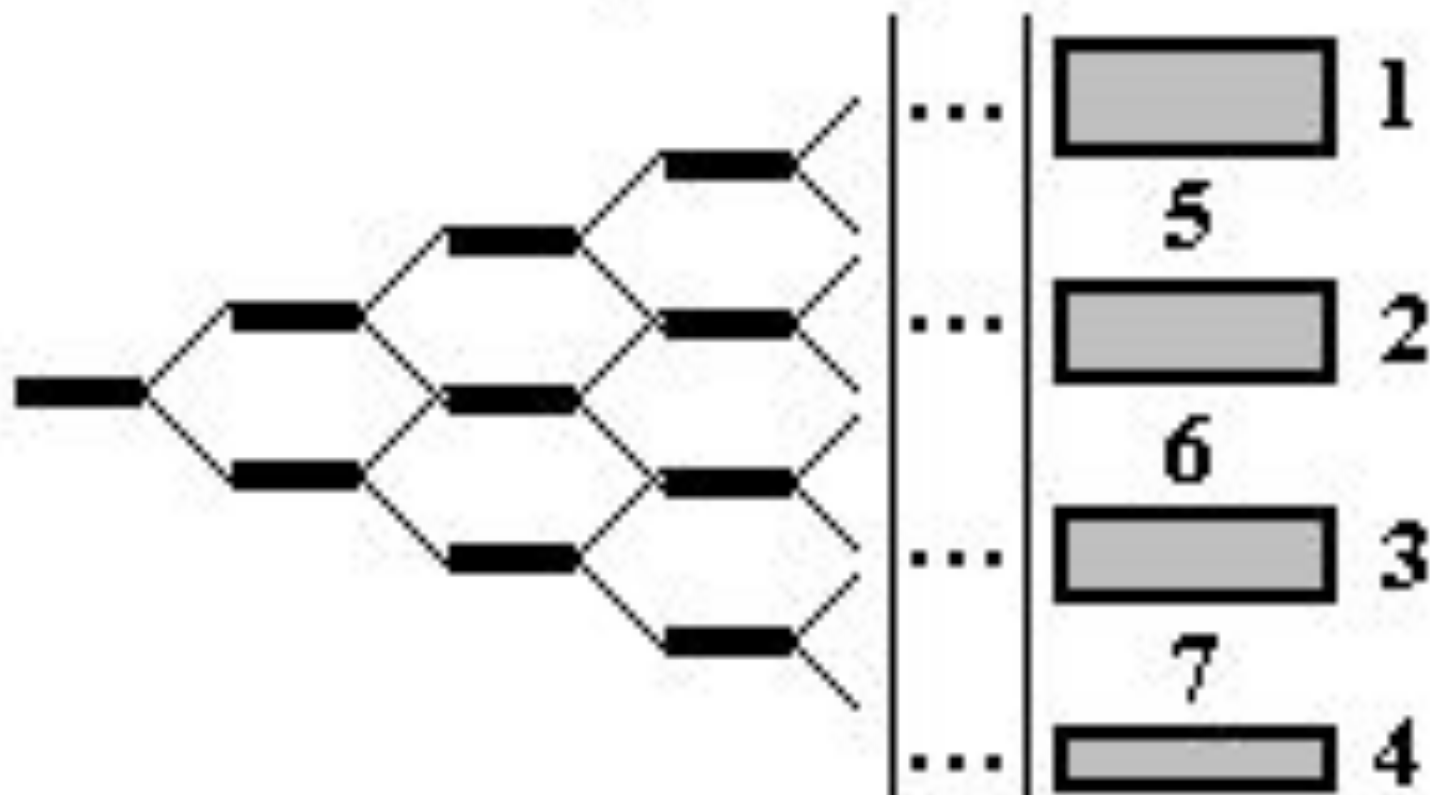
Согласно квантовой механике, электрон в изолированном атоме обладает определённым набором энергетических уровней.

Для одинаковых атомов эти уровни одинаковы.

При сближении атомов  
(допустим  $N$  штук)

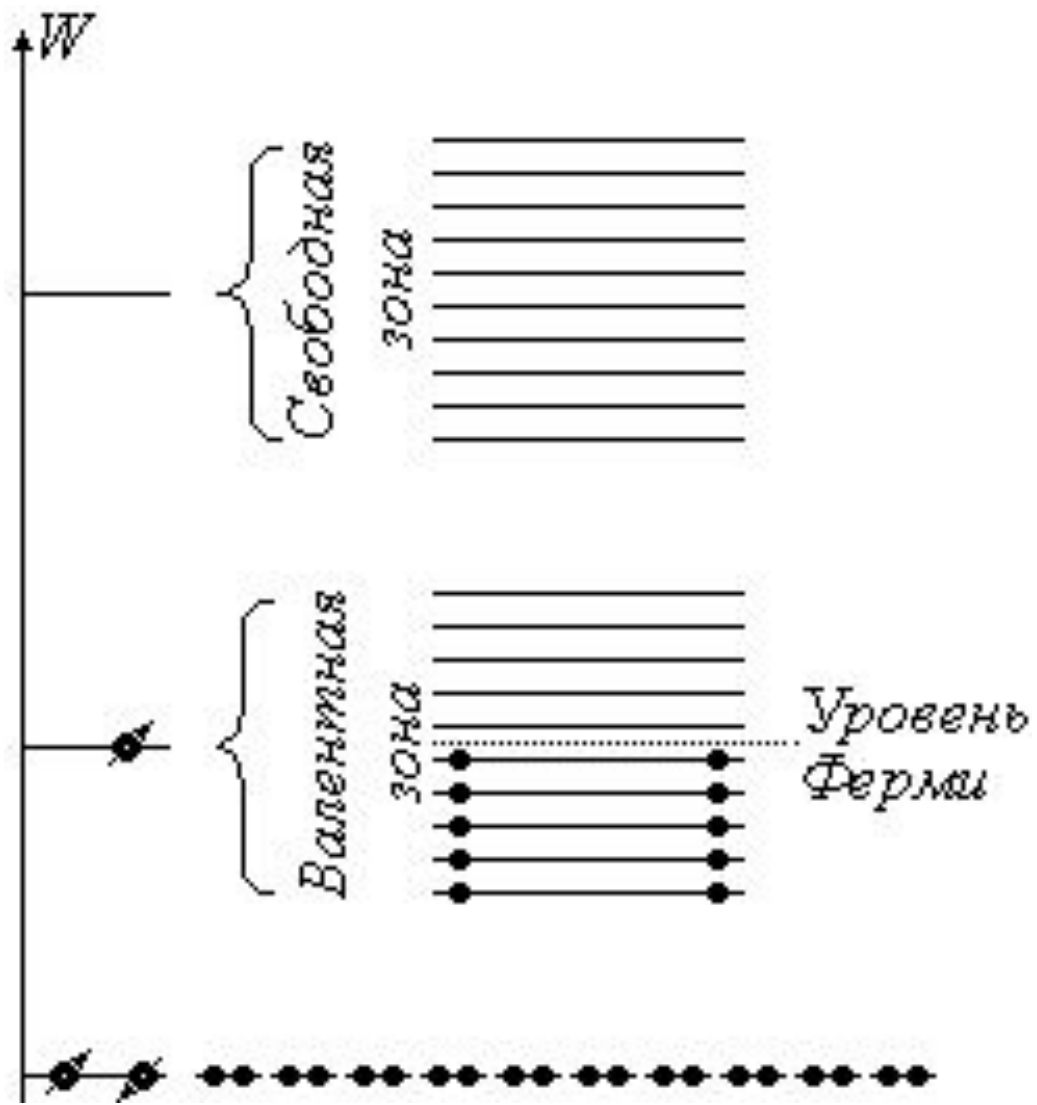
на месте одного, одинакового для  
всех атомов, возникает  $N$  уровней,  
очень близких. Такие уровни  
образуют полосу или зону.  
Уровни, заполненные в атоме  
внешними электронами,  
возмущаются сильнее.

**1, 2, 3, 4 - Разрешенные зоны**



**5, 6, 7 - Запрещенные зоны**

Расстояние между уровнями в разрешенной зоне кристалла очень мало. Например, при ширине разрешенной зоны в 1 эВ ( $1\text{эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Дж) это расстояние составляет примерно  $10^{-22}$  эВ. Но число уровней в разрешенных зонах конечно, что оказывает влияние на распределение электронов по энергетическим состояниям.



## Заполнение зон.

Металлы – вещества с высокой электро- и теплопроводностью, хорошо отражают электромагнитные волны, зависимость сопротивления от температуры –  $\rho = \rho_0 (1 + \alpha t)$ .

Диэлектрики (изоляторы) – вещества с очень низкой электропроводностью.

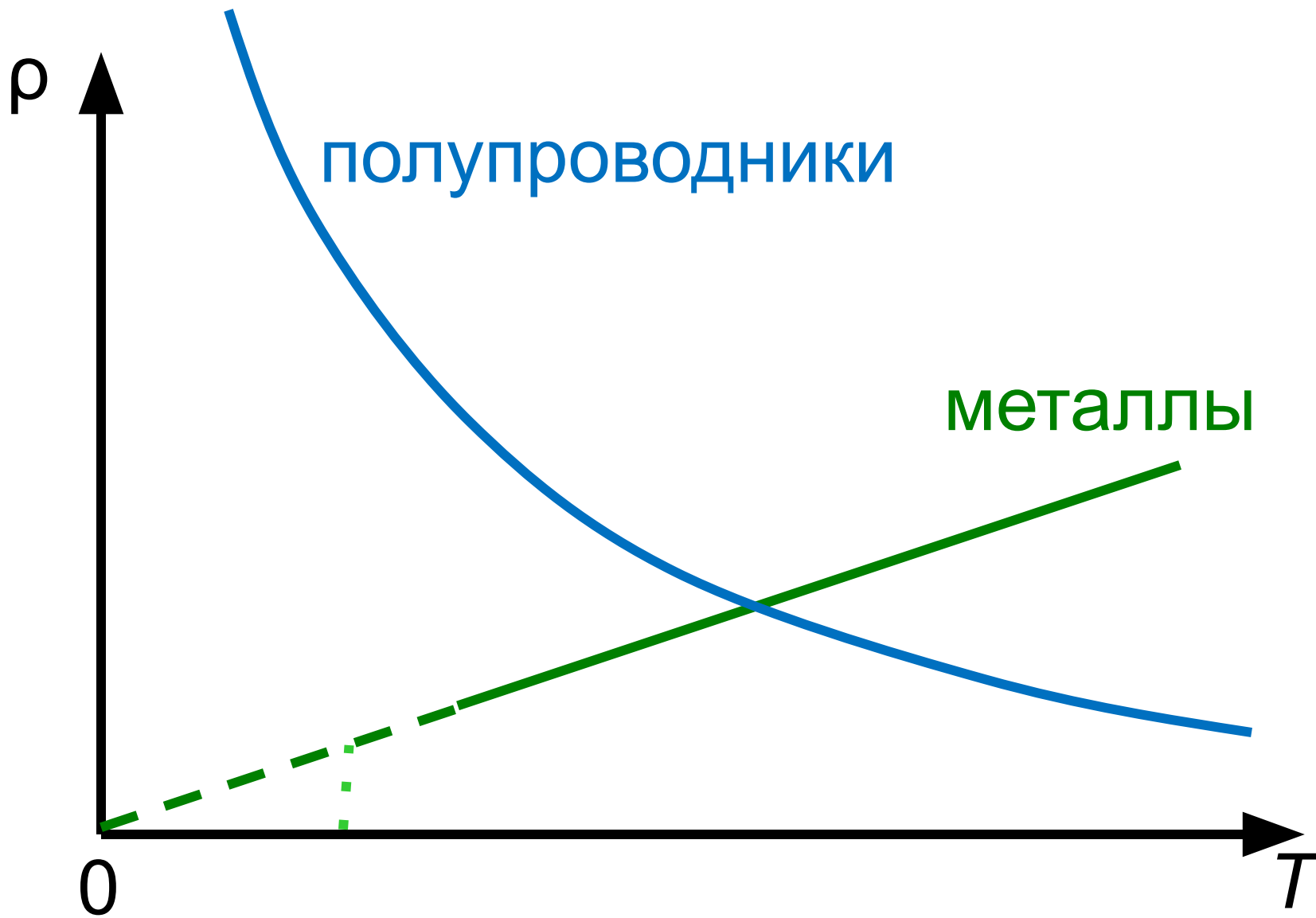


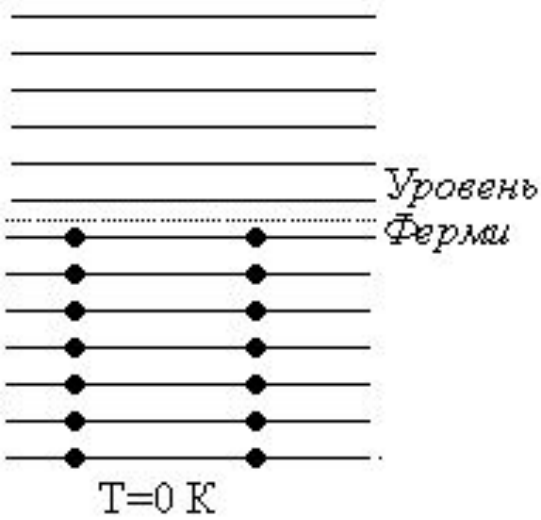
Полупроводники – широкий класс веществ, с промежуточным значением сопротивления или проводимости по сравнению с металлами и диэлектриками.

Температурная зависимость проводимости

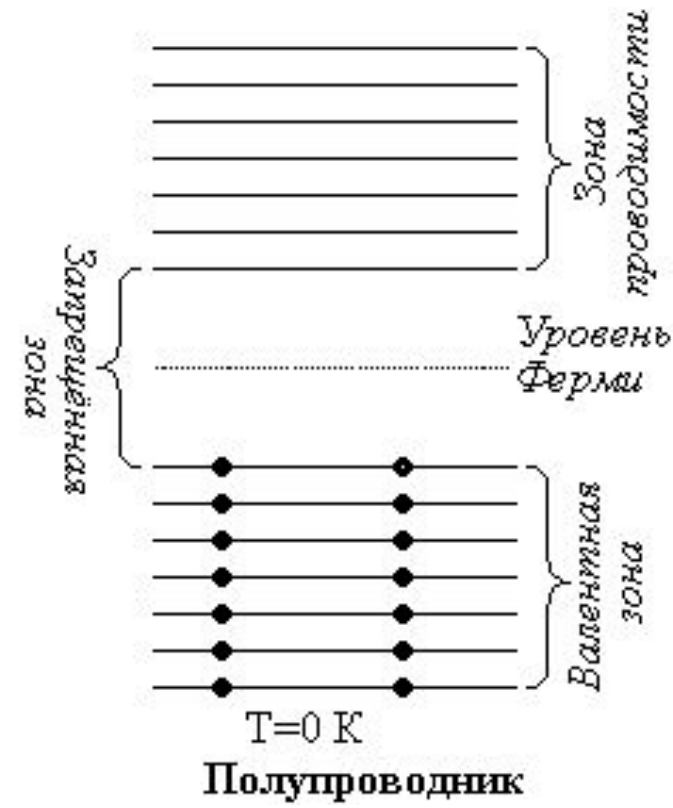
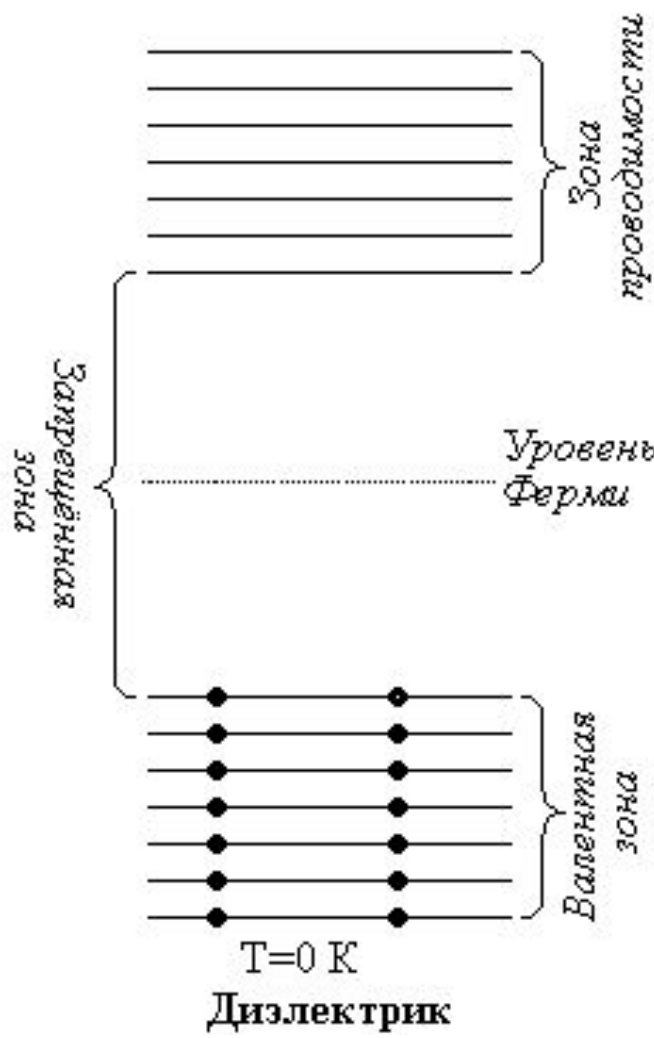
( $\Delta W$  – размер запрещённой зоны)

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta W}{2kT}} \quad \rho = \rho_0 e^{\frac{\Delta W}{2kT}}$$





Проводник



В металлах валентный уровень заполнен не полностью, поэтому для перевода электрона на более высокий уровень достаточно мало энергии ( $10^{-23}$ - $10^{-22}$  эВ – расстояние между соседними уровнями). Энергии теплового движения ( $\sim 10^{-4}$  эВ) для этого достаточно.

Достаточно даже дополнительной  
энергии со стороны электрического  
поля

(может быть сообщена электронам  
энергия

$\Delta W \approx 10^{-3}$  эВ при  $E = 10^5$  В/м –  
обычные источники тока).

В таблице приведены значения  
ширины запрещенной зоны  
(энергии активации)  
 $\Delta W$  и концентрации электронов  $n$   
в металлах, диэлектриках  
и полупроводниках.

	<b>Диэлектрики</b>					
$\Delta W, \text{ эВ}$	10		5		3	
$n, \text{ м}^{-3}$	$10^{-59}$		$10^{-29}$		10	
	<b>Полупроводники</b>				<b>Проводники</b>	
$\Delta W, \text{ эВ}$	2	1	0,75	0,5	0,1	0,01
$n, \text{ м}^{-3}$	$10^8$	$10^{17}$	$10^{19}$	$10^{21}$	$10^{24}$	$10^{29}$





25. Электросопротивление,  
его температурная зависимость.  
Сверхпроводимость.  
Свойства сверхпроводников.  
Высокотемпературные  
сверхпроводники.

Зависимость сопротивления от температуры в металлах –

$$\rho = \rho_0 (1 + \alpha t).$$

Эта зависимость экспериментальная, она плохо согласуется с выводами классической теории:

$$\frac{1}{\rho} = \sigma = \frac{ne^2\lambda}{2m\nu} = \mu ne$$

но хорошо соответствует квантовой теории, которая учитывает волновые свойства электрона:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{2m^*}$$

здесь  $n$  – концентрация электронов,  
 $\tau$  – время релаксации – время, за которое скорость дрейфа электрона уменьшается в « $e$ » раз,

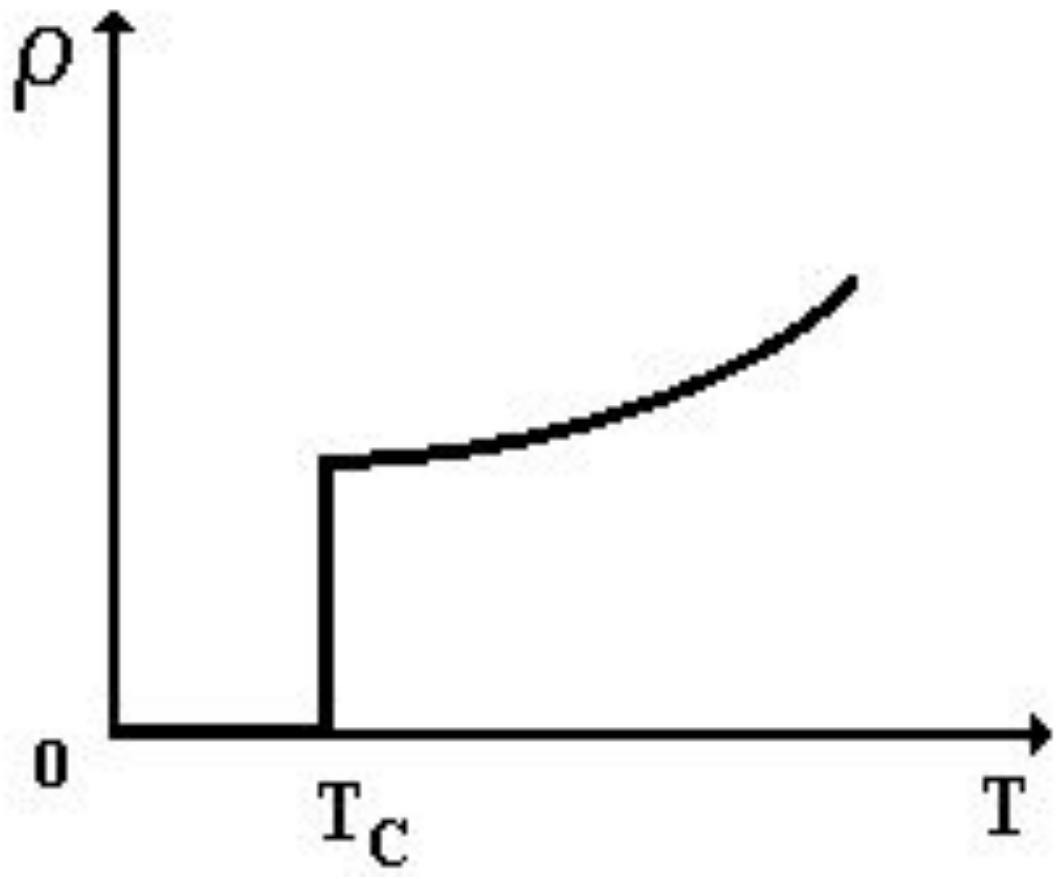
$m^*$  – эффективная масса электрона

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2\varepsilon/dk^2}$$

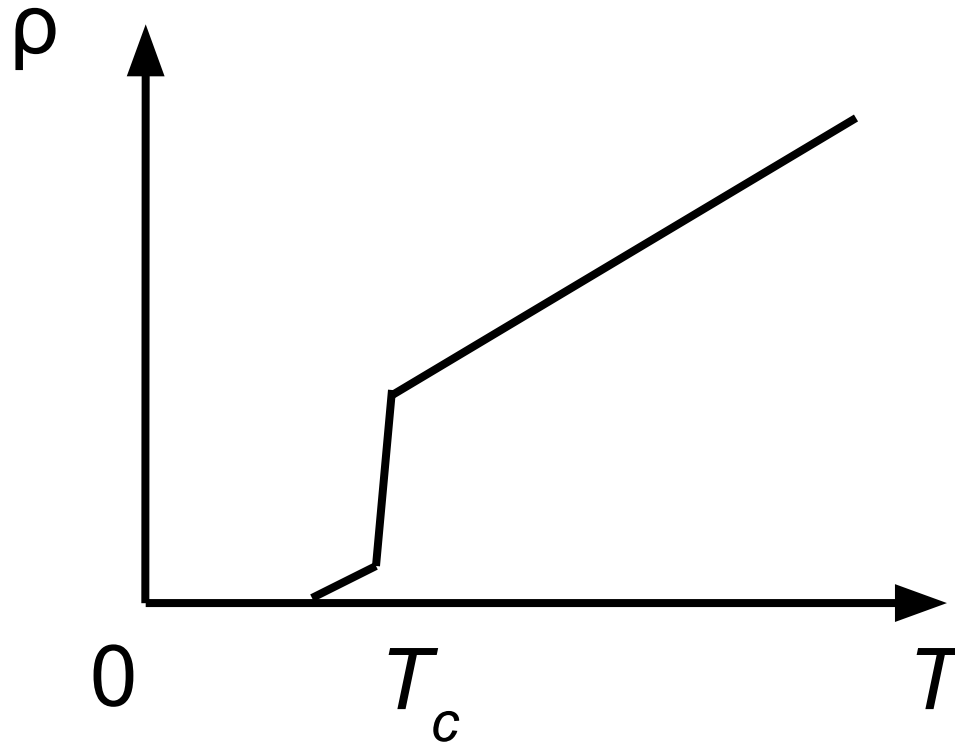
$\varepsilon$  – энергия электрона,

$k$  – волновой вектор электрона.

Вблизи абсолютного нуля возможно так называемое сверхпроводящее состояние. Сверхпроводимость – свойство многих веществ, в том числе и проводников и многих сплавов и др., состоящее в том, что их электрическое сопротивление скачком уменьшается до нуля при охлаждении образцов ниже критической температуры  $T_C$ , характерной для данного материала.



Для ртути  $T_C = 4,15$  К.  
Температура кипения гелия  
4,215 К ( $^4\text{He}$ ), 3,19 К ( $^3\text{He}$ ).



Если при превышении некоторого значения температуры (или магнитной индукции или силы тока)

сверхпроводящее состояние разрушается, то это значение называется критическим.

Критическое значение тем меньше, чем больше два других параметра.



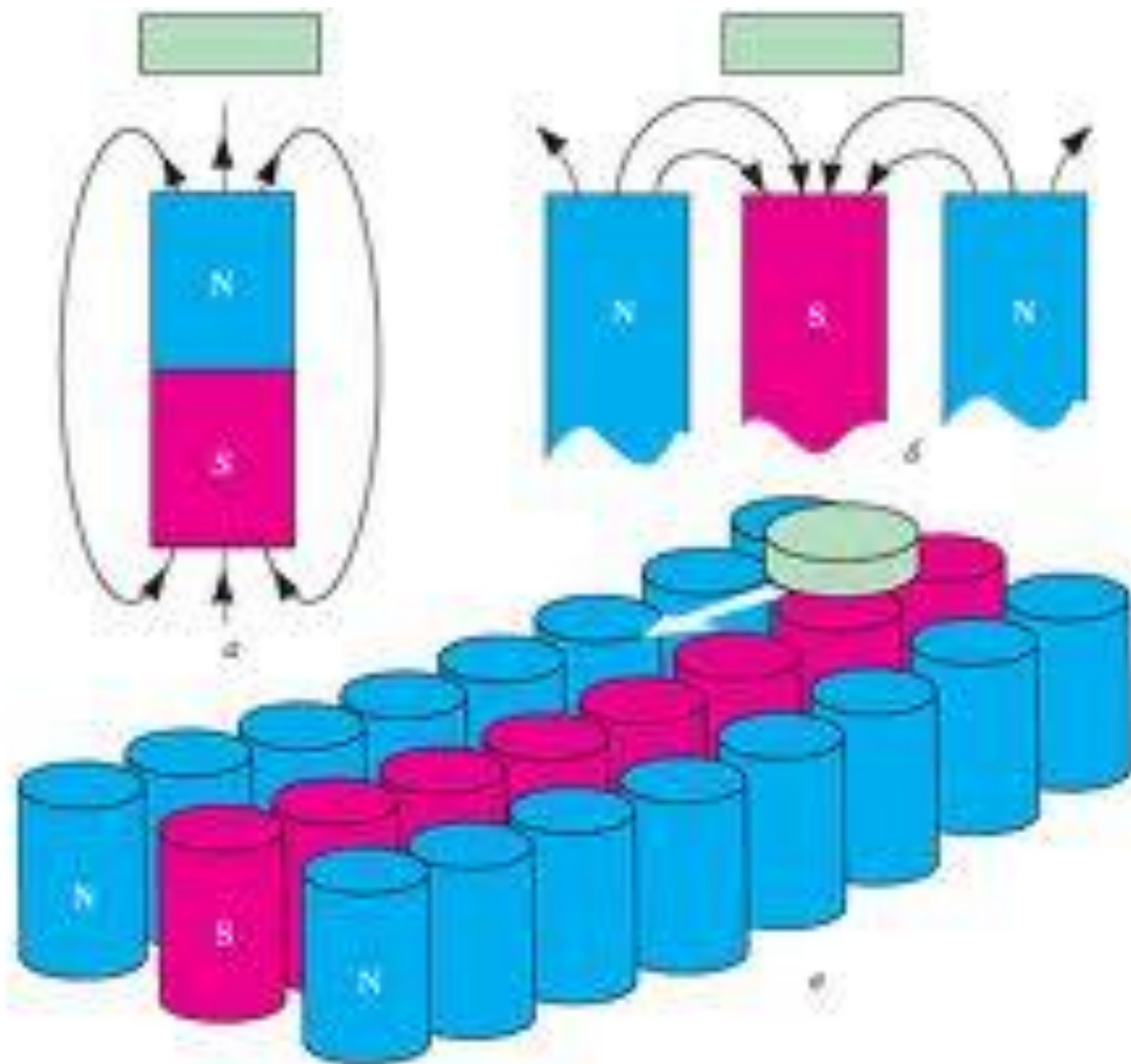


а

Сверхпроводники – идеальные  
диамагнетики, они полностью  
выталкивают из себя магнитное поле  
( $\mu = 0$ ).

Эффект Мейснера – магнитное поле  
в сверхпроводник не проникает,  
поэтому возможно зависание  
сверхпроводника в воздухе,  
исключительно за счет внешнего  
магнитного поля.





Куперовское спаривание электронов:  
электроны проводимости, с  
различными спинами могут  
объединяться в так называемые  
куперовские пары.

Такие пары представляют бозон, а бозоны могут накапливаться в основном состоянии, из которого их сравнительно трудно перевести в возбуждённое состояние.

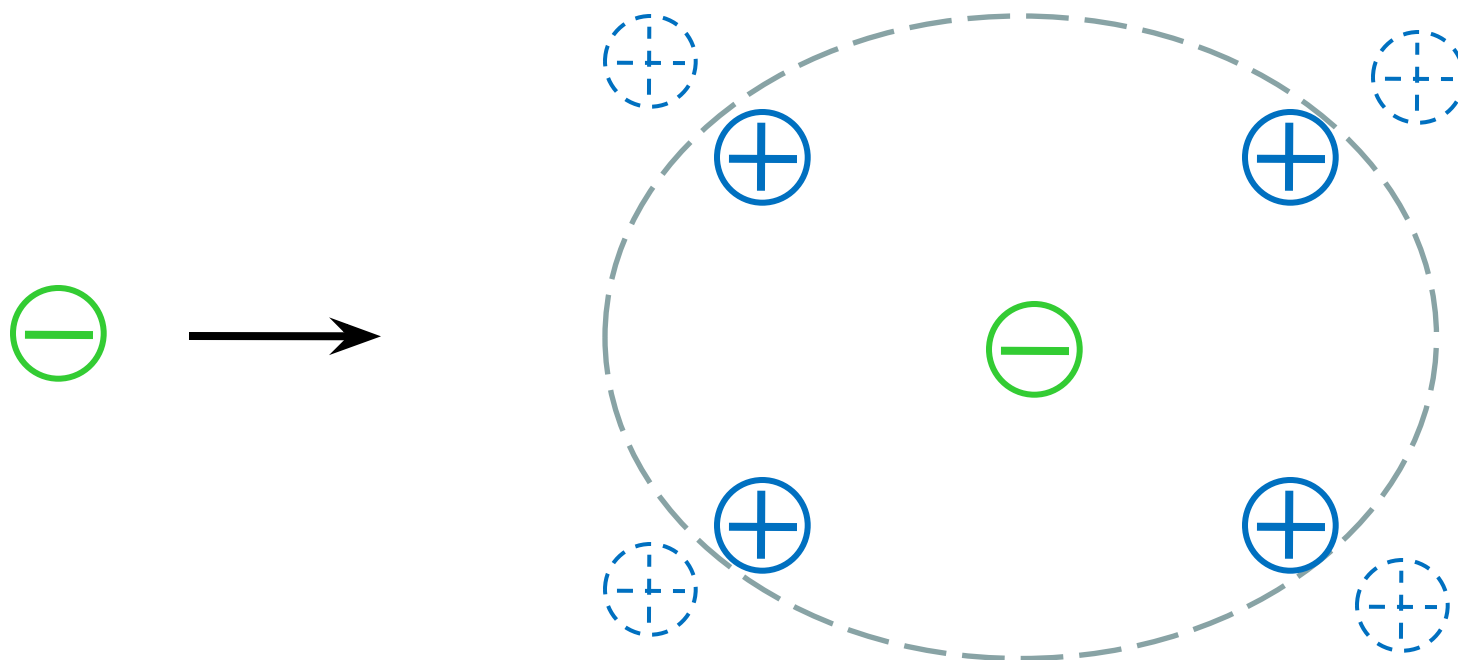
Такие пары существуют долго и двигаются согласованно – это и есть ток сверхпроводимости.

Спин бозонов равен целому числу  
(0, ±1) и их распределение по  
энергиям описывается формулой  
Бозе-Эйнштейна:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{W_i - W_F}{kT}} - 1}$$

# Объяснения

1) Классическое: электроны притягиваются за счёт посредника – атомов кристаллической решётки, которых к себе притянули.





2) Квантовое: электроны обмениваются фононами.

При низких температурах, у сверхпроводников это притяжение больше кулоновского отталкивания.

Расстояние между куперовскими электронами примерно  $10^{-4}$  см.

Фононы – квазичастицы, передающие колебания в твёрдых телах (фонон – квант колебаний).

Чтобы разрушить такую связь необходимо паре сообщить энергию

$$\Delta \approx 3,2k_{\text{Б}}T_{\text{крит}} \sqrt{\left(1 - T/T_{\text{крит}}\right)}$$

Это размеры щели, запрещённой зоны, которая появляется в энергетическом спектре электрона в области уровня Ферми, когда он образует пару.

# Квантование потока

Из теории сверхпроводимости следует, что магнитный поток  $\Phi$ , связанный со сверхпроводящим кольцом, по которому циркулирует ток, должен быть равен

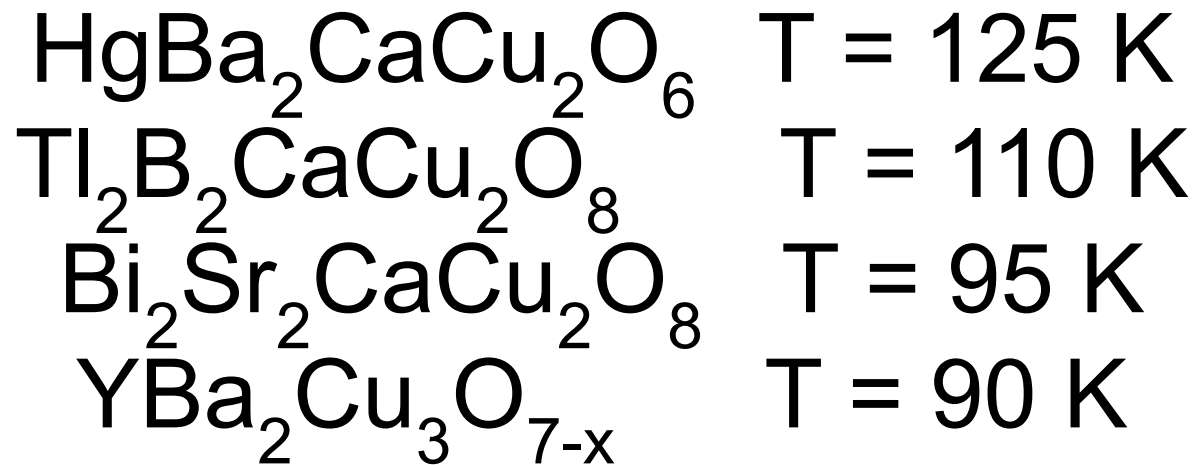
$$\Phi = n \cdot \Phi_0 = n \cdot \frac{2\pi\hbar}{q}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$\Phi_0$  – квант магнитного потока,  
 $q$  – заряд носителя тока.

# Высокотемпературная сверхпроводимость (ВТСП):

Обычная сверхпроводимость  $T_{\text{крит.}}$   
макс. = 23,2 К ( $\text{Nb}_3\text{Ge}$ ).

ВТСП открыта в 1986 г (Беднорц и Мюллер), основа оксид меди, по сути керамика, (то есть проволоку не вытянешь).



температура жидкого азота  
77 K

# Эффект Джозефсона

Протекание сверхпроводящего тока через тонкий слой диэлектрика, разделяющий два сверхпроводника – туннельный переход.

1-го рода: стационарный,  $I < I_K$ ,  $\Delta U = 0$ .

2-го рода: нестационарный,  $I > I_K$ ,

$\Delta U \neq 0$ , идёт излучение

электромагнитных волн с частотой

$\omega = 2eU/\hbar$ , через контакт течёт

переменный ток.

Куперовская пара электронов при прохождении контакта получает энергию  $2eU$ , возвращаясь в исходное состояние, пара излучает эту энергию на частоте

$$\omega = \frac{2eU}{\hbar}$$

