

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:

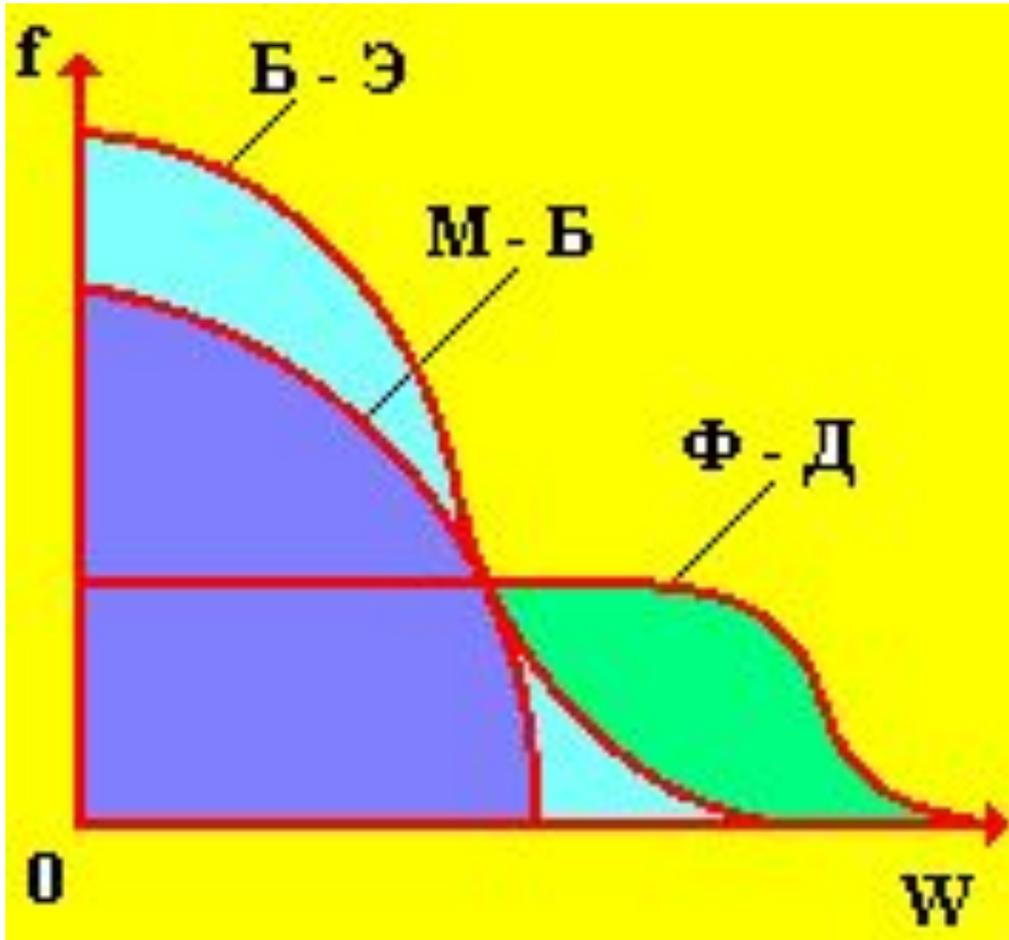
$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{W_i - W_F}{kT}} + 1}$$

$\langle n_i \rangle$ – 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⁻³ – 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

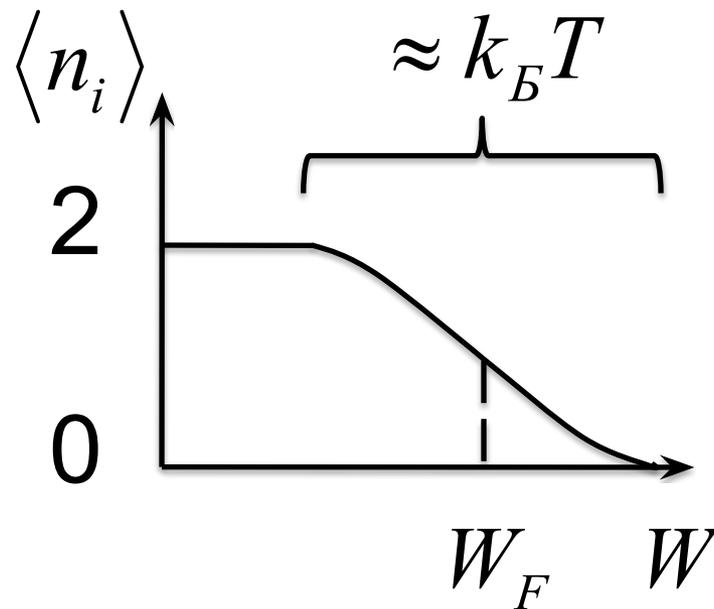
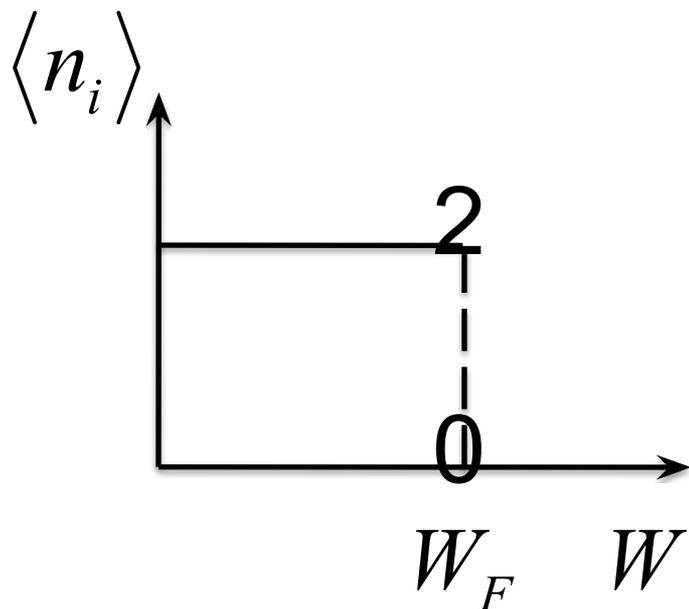
$$\langle W \rangle = \frac{3}{5} W_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{W_F} \right) \right]$$

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 твердых тел.

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

Электрон – квантовая частица, обладающая волновыми свойствами.

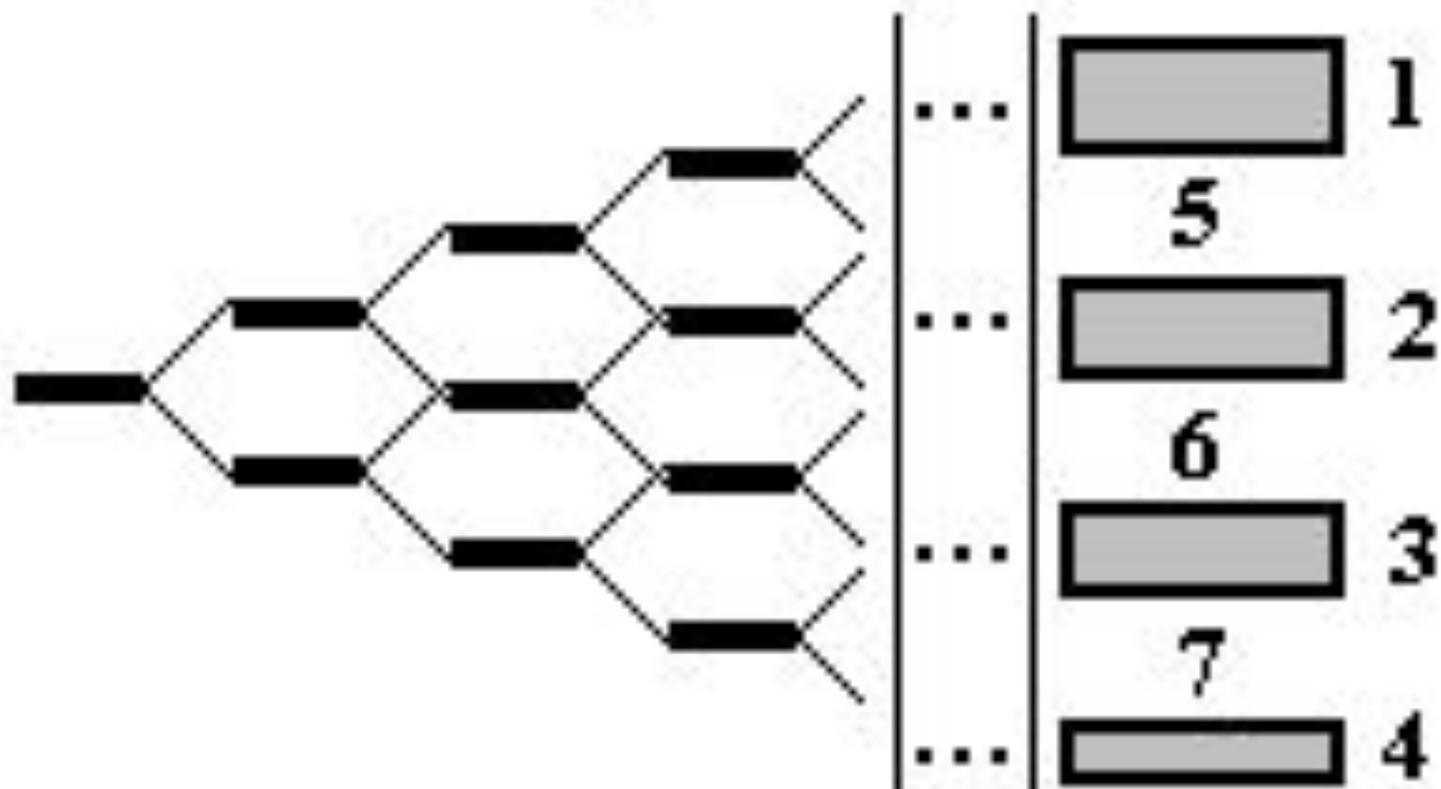
Согласно квантовой механике, электрон в изолированном атоме обладает определённым набором энергетических уровней.

Для одинаковых атомов эти уровни одинаковы.

При сближении атомов
(допустим N штук)

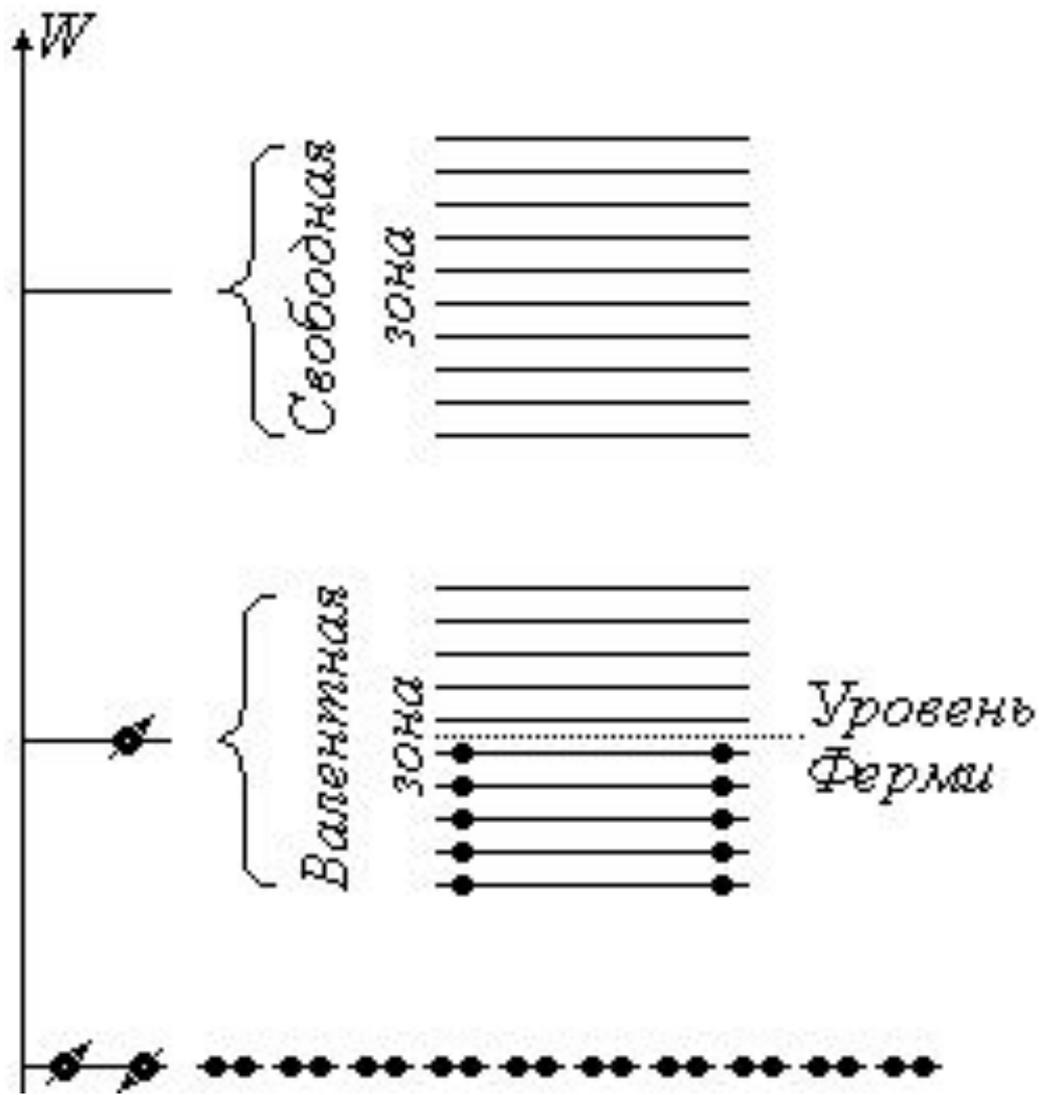
на месте одного, одинакового для
всех атомов, возникает N уровней,
очень близких. Такие уровни
образуют полосу или зону.
Уровни, заполненные в атоме
внешними электронами,
возмущаются сильнее.

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 – $\rho = \rho_0 (1 + \alpha t)$.

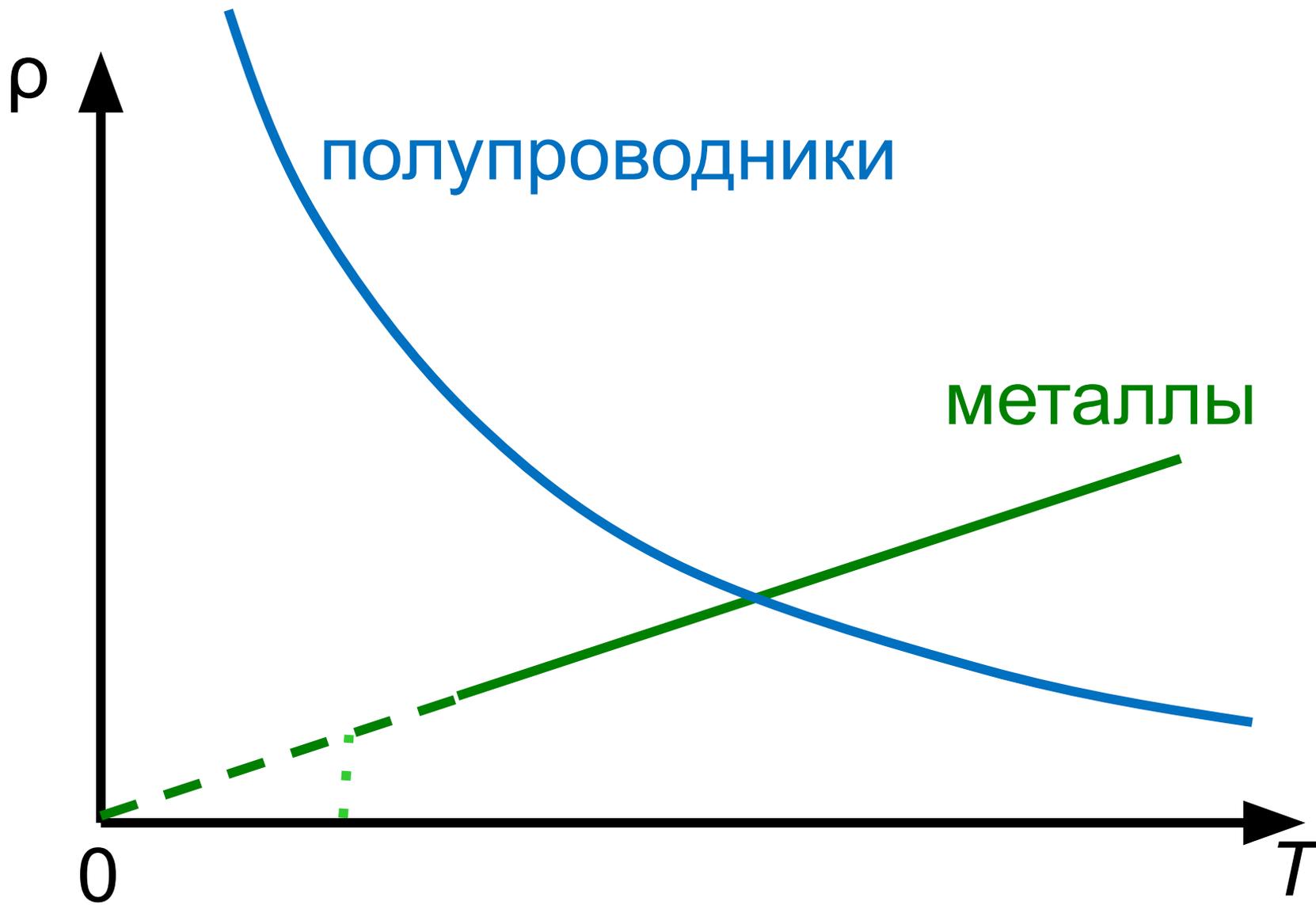
Диэлектрики (изоляторы) – вещества с очень низкой электропроводностью.

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

Температурная зависимость проводимости

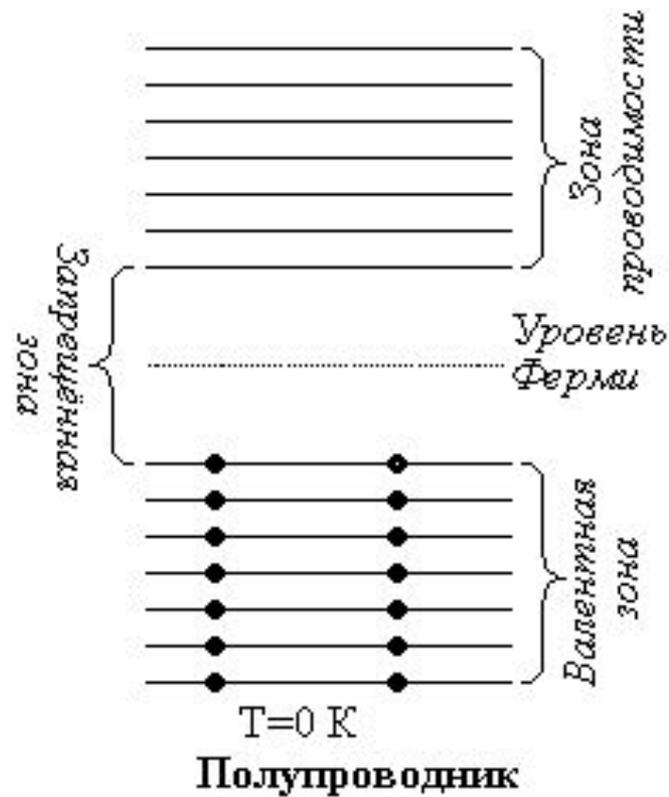
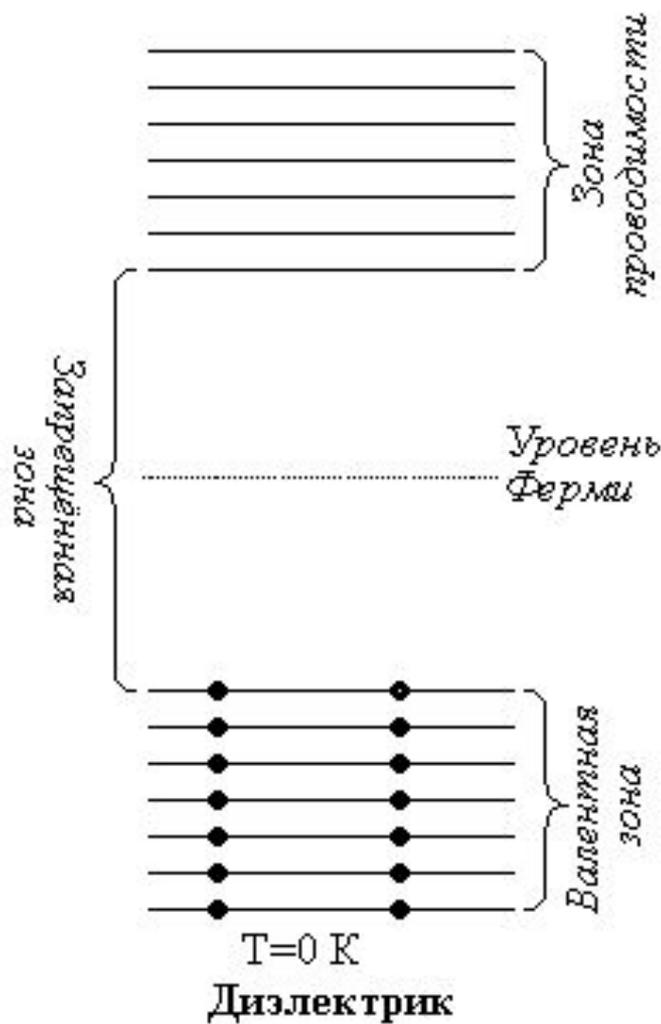
(ΔW – размер запрещённой зоны)

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





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)
 ΔW и концентрации электронов n
в металлах, диэлектриках
и полупроводниках.

	Диэлектрики					
$\Delta W, \text{ эВ}$	10		5		3	
$n, \text{ м}^{-3}$	10^{-59}		10^{-29}		10	
	Полупроводники				Проводники	
$\Delta W, \text{ эВ}$	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,
 τ – время релаксации – время, за которое скорость дрейфа электрона уменьшается в « e » раз,

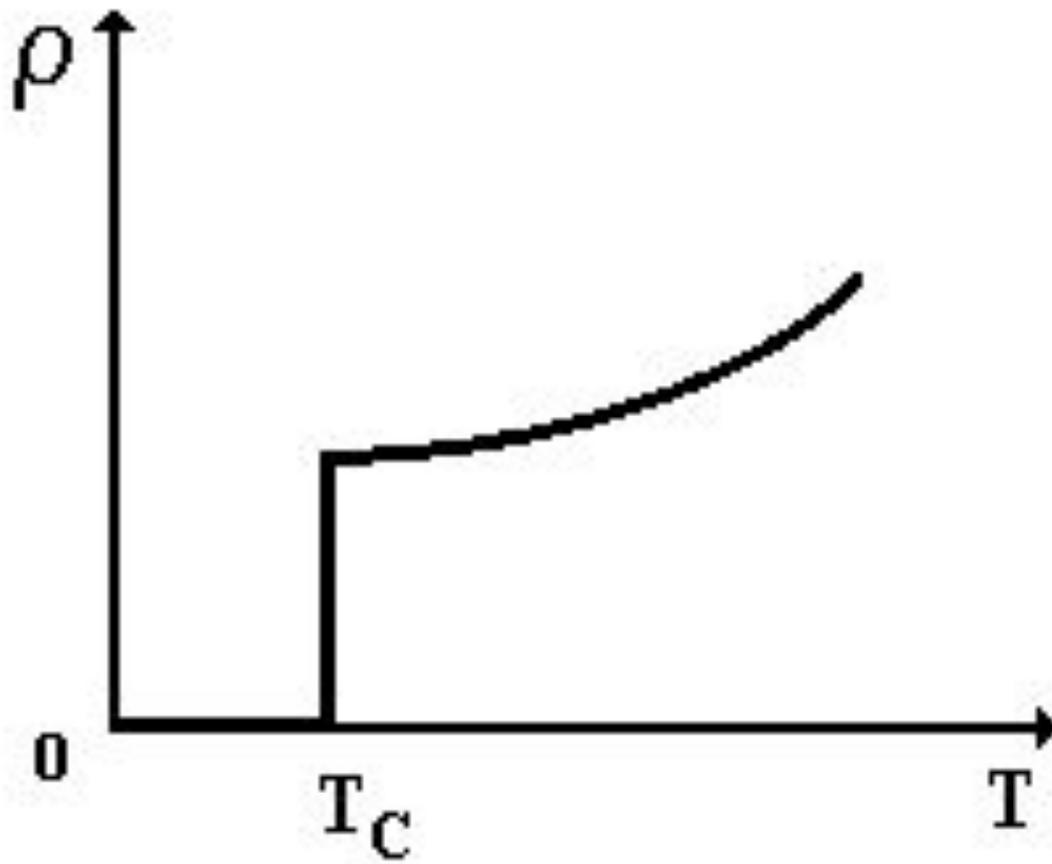
m^* – эффективная масса электрона

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

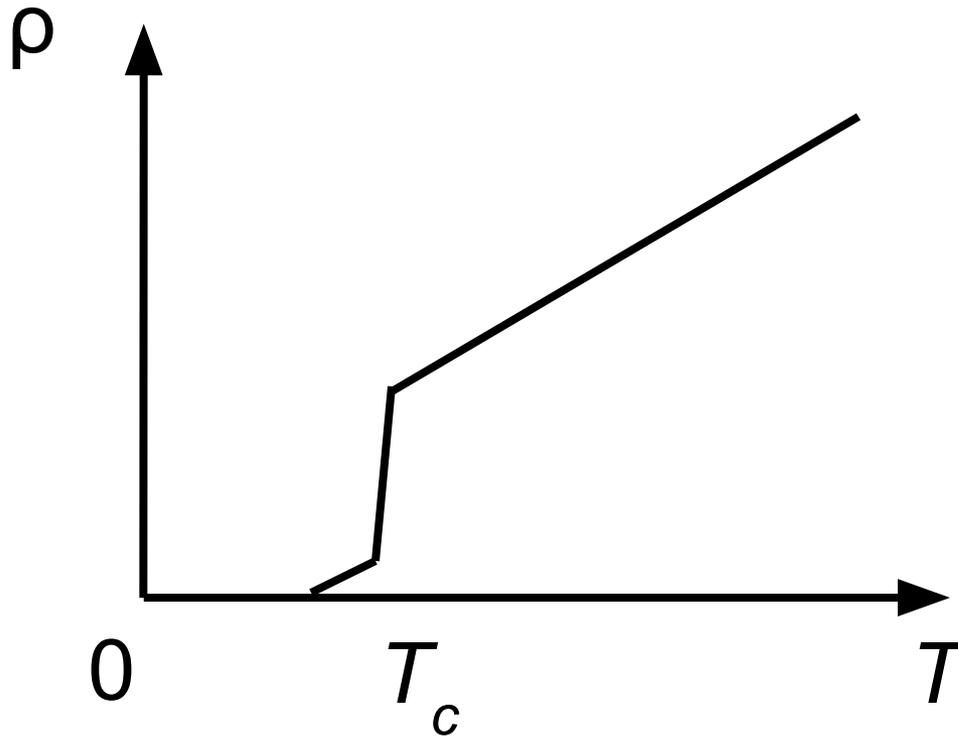
ε – энергия электрона,

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 (^4He), 3,19 К (^3He).



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.

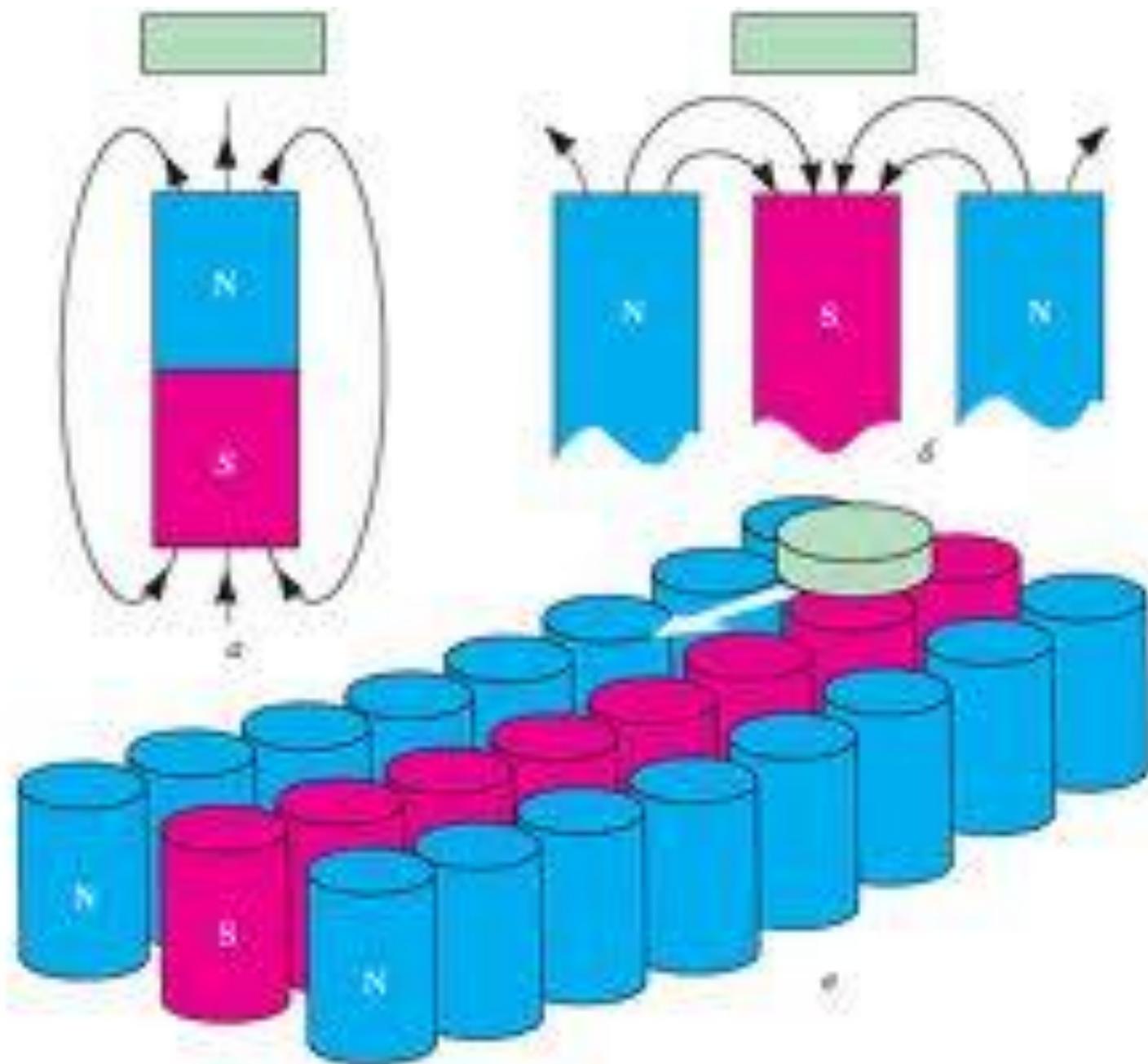


а

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.

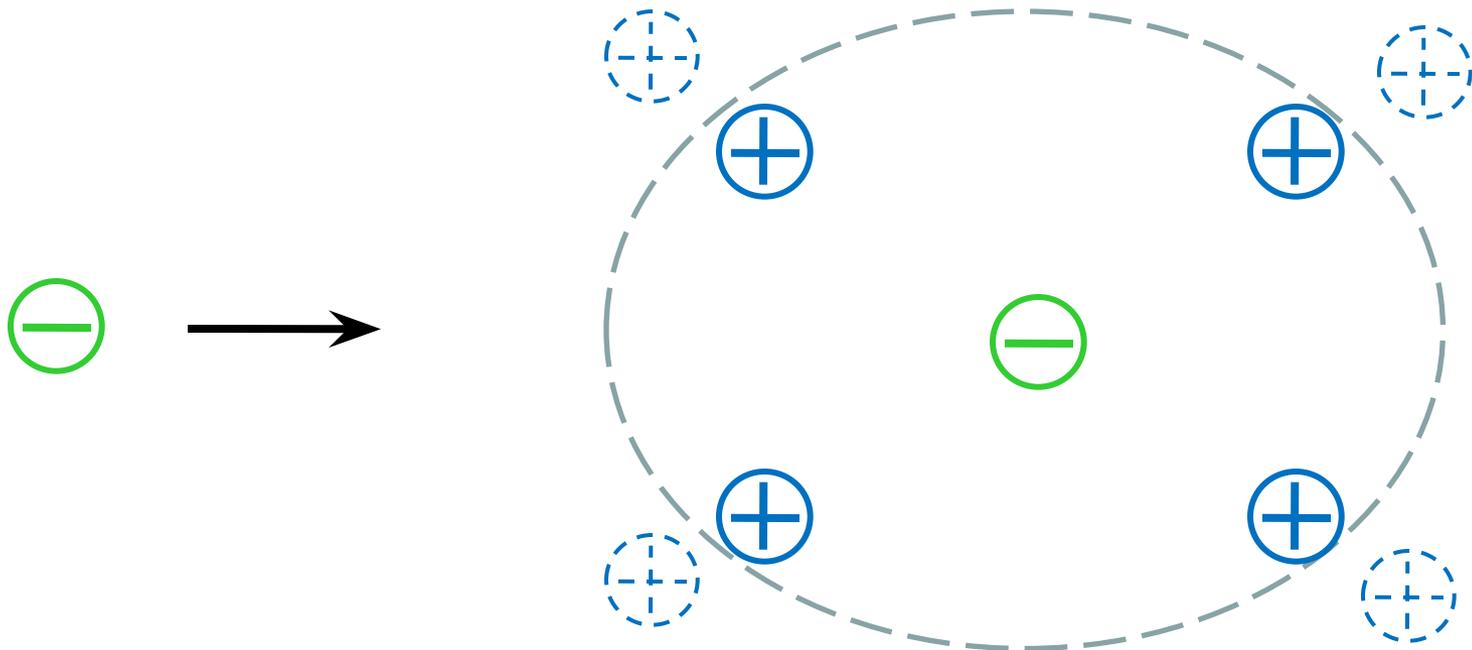
Такие пары существуют долго и двигаются согласованно – это и есть ток сверхпроводимости.

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 Φ , связанный со сверхпроводящим кольцом, по которому циркулирует ток, должен быть равен

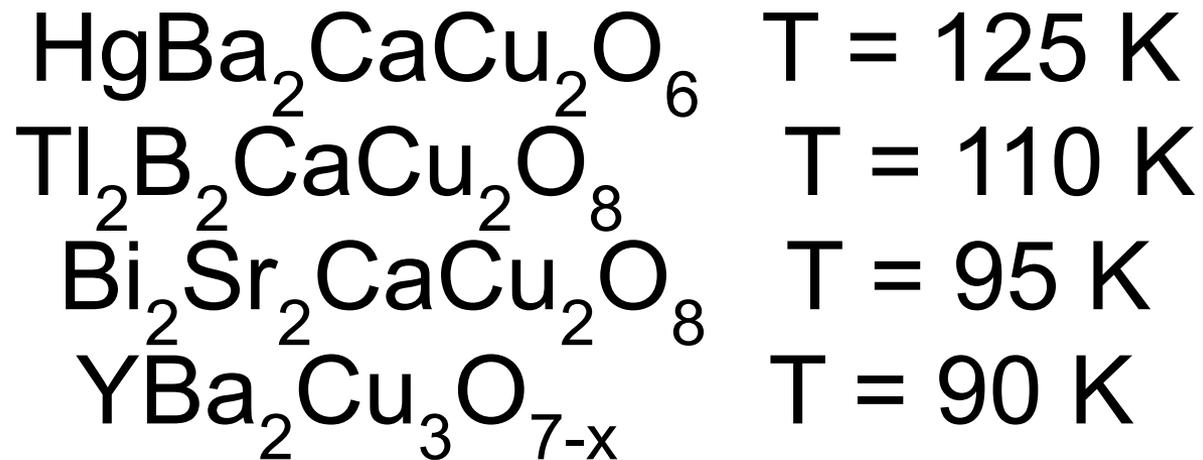
$$\Phi = n \cdot \Phi_0 = n \cdot \frac{2\pi\hbar}{q}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Φ_0 – квант магнитного потока,
 q – заряд носителя тока.

Высокотемпературная сверхпроводимость (ВТСП):

Обычная сверхпроводимость $T_{\text{крит.}}$
макс. = 23,2 К (Nb_3Ge).

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

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

