

Министерство образования Российской Федерации
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ»

Факультет электроники
Кафедра микроэлектроники

Материалы и элементы электронной техники Ч.І

доц. Лазарева Н.П.

тема: **6**

Квантовая статистика электронов в металле



Квантовая статистика электронов в металле

(разработана советским ученым Я. И. Френкелем и немецким физиком А. Зоммерфельдом)

Классическая теория исходит из представлений о существовании в металлах свободных электронов. К ним применяются законы классической статистики (статистики Максвелла—Больцмана), согласно которой распределение электронов по энергетическим состояниям описывается экспоненциальной функцией вида:

$$F(\mathcal{E}) = A \cdot \exp\left(-\frac{\mathcal{E}}{kT}\right)$$

При этом в каждом энергетическом состоянии может находиться любое число электронов

В квантовой теории вероятность заполнения энергетических состояний электронами определяется функцией Ферми:

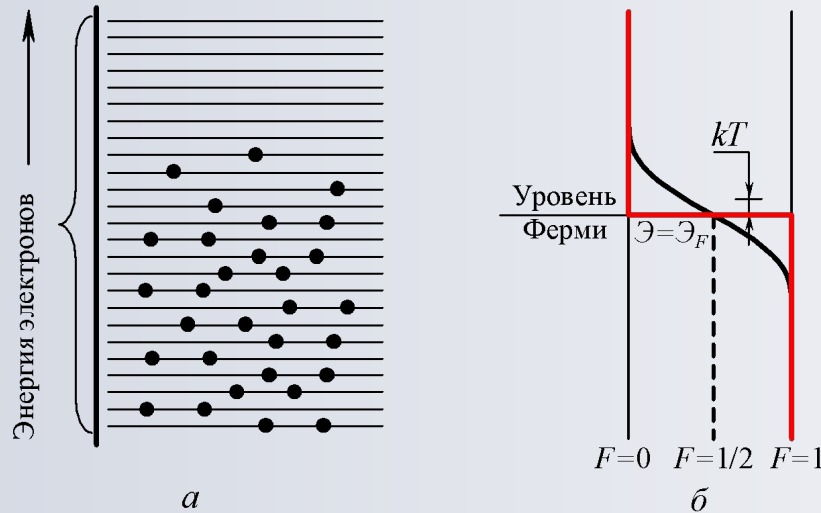
$$F(\mathcal{E}) = \left[1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{kT}\right) \right]^{-1}$$

где \mathcal{E} — энергия уровня, вероятность заполнения которого определяется; \mathcal{E}_F — энергия характеристического уровня, относительно которого кривая вероятности симметрична.



$$F(\mathcal{E}) = \left[1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{kT}\right) \right]^{-1}$$

Квантовая статистика электронов в металле



При $T = 0\text{K}$ функция Ферми обладает следующими свойствами:

$$F(\mathcal{E}) = 1, \text{ если } \mathcal{E} \leq \mathcal{E}_F \text{ и}$$
$$F(\mathcal{E}) = 0, \text{ если } \mathcal{E} > \mathcal{E}_F$$

Распределение электронов в частично заполненной зоне (а) и функция вероятности заполнения электронами уровней (б):

I — уровни, почти заполненные; *II* — интервал размывания; *III* — уровни, почти полностью свободные

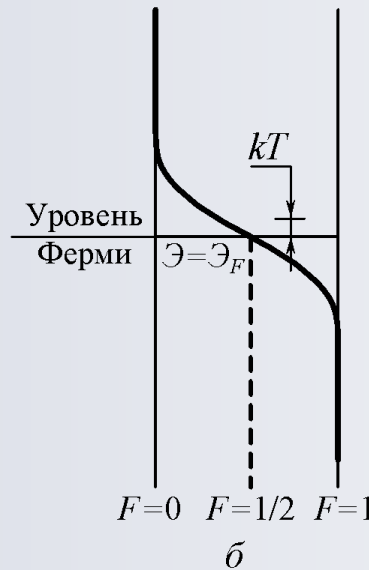
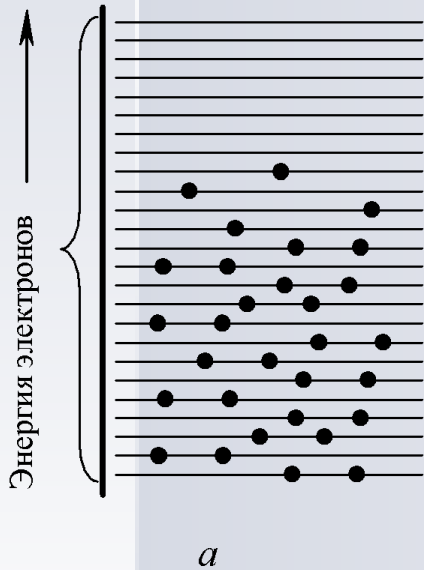
При нагревании кристалла ему сообщается тепловая энергия порядка kT . За счет теплового возбуждения некоторые электроны, находящиеся вблизи уровня Ферми, начинают заполнять состояния с более высокой энергией: график функции распределения становится несколько пологим



Квантовая статистика электронов в металле

Вероятность заполнения энергетических состояний электронами
(функция Ферми)

$$F(\varepsilon) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}\right) \right]^{-1}$$



III Величина ε_F определяет максимальное значение энергии, которую может иметь электрон в металле при температуре абсолютного нуля. Эту *I* характеристическую энергию называют энергией Ферми или *уровнем Ферми*.

Распределение электронов в частично заполненной зоне (а) и функция вероятности заполнения электронами уровней (б):

I — уровни, почти заполненные; *II* — интервал размытия; *III* — уровни, почти полностью свободные



Квантовая статистика электронов в металле

Энергия \mathcal{E}_F не зависит от объема кристалла, а определяется только концентрацией свободных электронов, что непосредственно вытекает из принципа Паули.

Поскольку концентрация свободных электронов в металле весьма велика, энергия Ферми также оказывается высокой и в типичных случаях составляет от 3 до 10 эВ (см. табл.)

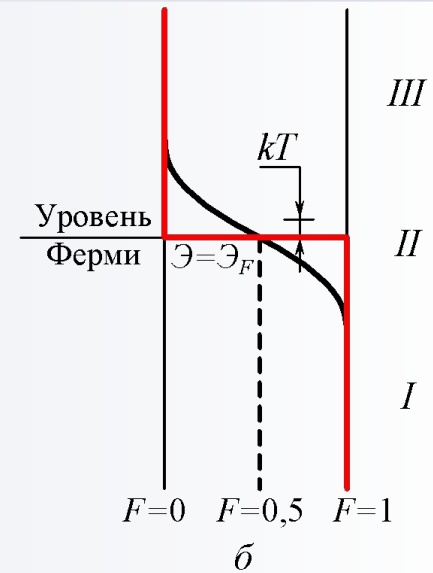
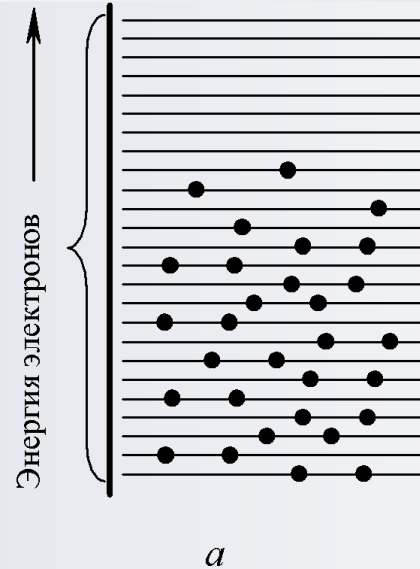
Низкотемпературные значения энергии Ферми и концентрации свободных электронов для ряда металлов

Металл	Na	Cs	Cu	Ag	Au	Be	Mg	Zn	Al	In	Pb	Sn
\mathcal{E}_F , эВ	3,23	1,58	7,0	5,48	5,51	14,14	7,13	9,39	11,63	8,60	9,37	10,03
$n \cdot 10^{-28}$, м ⁻³	2,65	0,91	8,45	5,85	5,90	24,2	8,60	13,1	18,06	11,5	13,2	14,5



Квантовая статистика электронов в металле

$$F(\mathcal{E}) = \left[1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{kT}\right) \right]^{-1}$$



Из формулы следует, что **при любой температуре** для уровня с энергией $\mathcal{E} = \mathcal{E}_F$ вероятность заполнения электронами равна 0,5.

Все уровни, расположенные ниже уровня Ферми, с вероятностью больше 0,5 заполнены электронами.

Наоборот, все уровни, лежащие выше уровня Ферми, с вероятностью более 0,5 свободны от электронов



Квантовая статистика электронов в металле

Распределение электронов по энергиям определяется не только вероятностью заполнения уровней, но и плотностью квантовых состояний в зоне:

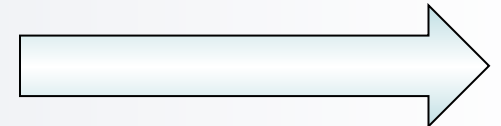
$$dn(\mathcal{E}) = N(\mathcal{E})F(\mathcal{E})d\mathcal{E}$$

где dn — число электронов, приходящихся на энергетический интервал от \mathcal{E} до $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$;
 $N(\mathcal{E})$ — плотность разрешенных состояний в зоне, т. е. число состояний, приходящихся на единичный интервал энергии в единице объема

Исходя того, что энергетические уровни и радиусы стационарных орбит, которые может иметь электрон в атоме:

$$\mathcal{E}_n = -\frac{mZ^2e^4}{8\varepsilon_0^2h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \qquad r_n = \frac{\varepsilon_0h^2}{\pi mZe^2} n^2$$

Распределение электронов по энергиям в металле можно представить параболической зависимостью

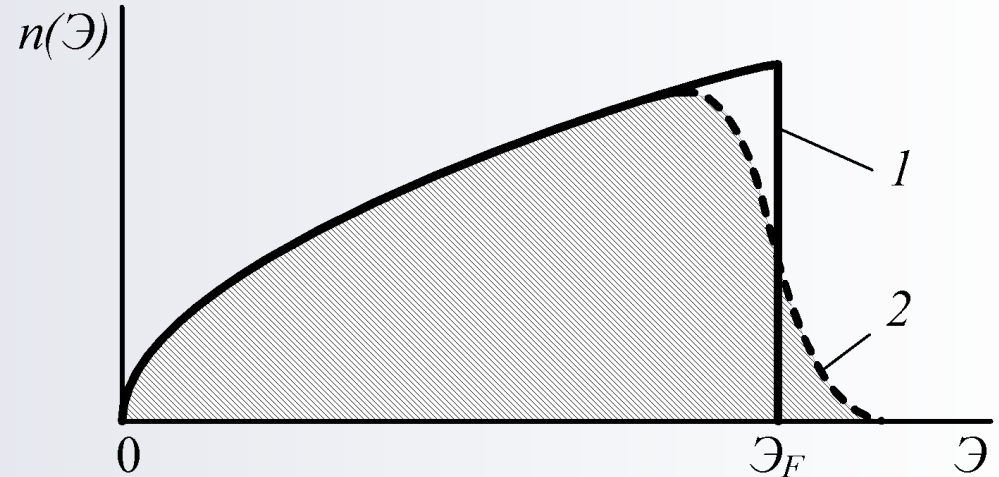




Квантовая статистика электронов в металле

Распределение электронов по энергиям в металле:

1 – $T=0 K$; 2 – $T \neq 0 K$



Электроны, расположенные в глубине от уровня Ферми (заштриховано), не могут обмениваться энергией с кристаллической решеткой, ибо для них все ближайшие энергетические состояния заняты.

При повышении температуры происходит некоторое размытие распределения электронов по энергиям, однако их общее количество сохраняется практически неизменным. Поэтому температурное изменение удельного сопротивления металлов обусловлено, главным образом, изменением средней длины свободного пробега электронов.