ЭЛЕКТРОННАЯ ПОДСИСТЕМА

Вырожденный электронный газ

1. **Электроны – фермионы – полуцелый спин => квантовая статистика Ферми - Дирака**
2. $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi^{0}_{\vec{k}} \exp(i\vec{k}\vec{r})$ **- волновая функция свободного электрона**
3. **В объеме V электронные состояния квантованы, что отвечает определенному значению импульса, принимающего дискретные значения. В импульсном пространстве квантовые состояния делят весь объем на микрообъемы так что число разрешенных состояний в импульсном пространстве равно:**

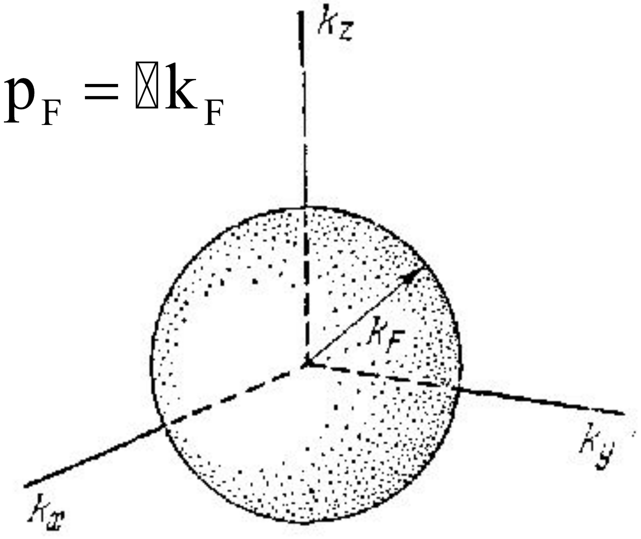
$$N_e = 2\frac{4\pi p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3/V} = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3}V$$

$$p_F = (3\pi^2)^{1/3}(N_e/V)^{1/3}\hbar;$$

$$\varepsilon_F = (p_F^2/2m) = (3\pi^2)^{2/3}(\hbar^2/2m)(N_e/V)^{2/3}$$

$$\lambda_F = 2\pi\hbar/p_F \approx 2\pi a$$

$$p_F = \hbar k_F$$



А. Полная энергия электронного газа при нулевой температуре:

$$E = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3 m_e}\int_0^{p_F} p^4 dp = \frac{V p_F^5}{10 m_e \pi^2 \hbar^3} = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2 N_e}{10 m_e}\left(\frac{N_e}{V}\right)^{2/3}$$

Б. Давление электронного газа при этом можно найти из соотношения

$$PV = (2/3)E \longrightarrow P = \frac{(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2}{5 m_e}\left(\frac{N_e}{V}\right)^{5/3}$$

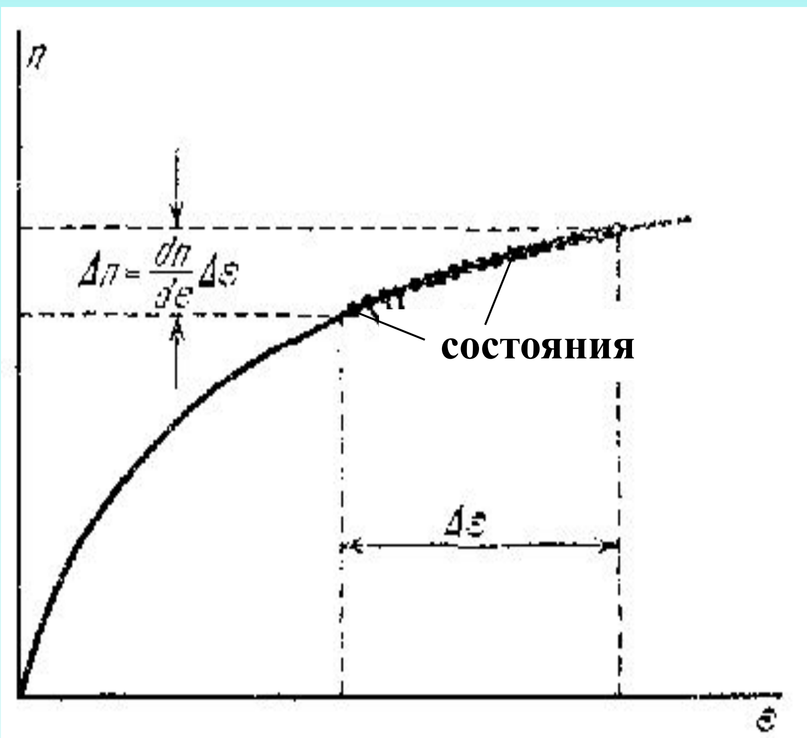
Оценим давление вырожденного ферми-газа, приняв, что плотность есть:

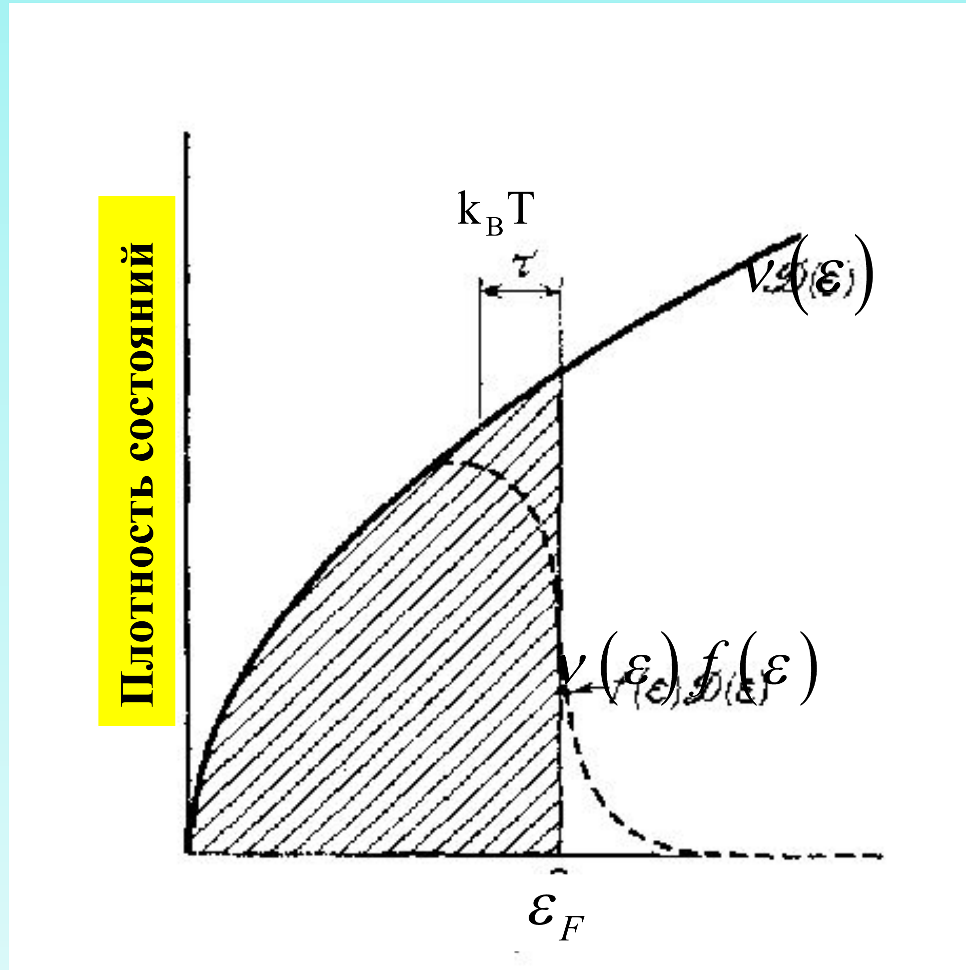
$N_e / V \approx 10^{22}$ **электронов/см^3, тогда получим P** $\approx 10^4$ атм!!!

В. Плотность числа состояний электронов

Введем плотность числа состояний, согласно соотношению:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{dN_e}{d\varepsilon} = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{1/2}$$





Термодинамика свободного электронного газа

В общем случае, электронная подсистема, находящаяся при ненулевой температуре, требует для расчета ее свойств знания энергетического спектра. Поскольку фактически энергетический спектр электронов в конденсированном теле является непрерывным (расстояния между отдельными уровнями существенно меньше самих значений энергии), то можно перейти в исходных формулах для термодинамических величин от суммирования к интегрированию. Если воспользоваться понятием плотности числа электронных состояний, то получим (заметим, что интегрирование распространяется на всю область энергий; в запрещенных состояниях $\nu\left(\varepsilon\right)$=0):

$$\Omega(T,N_e) = -k_B T\int_0^\infty \nu(\varepsilon)\ln\left\{\exp\left[(\mu-\varepsilon)/k_B T\right]+1\right\}d\varepsilon$$

$$\mathrm{N_e} = \int_0^\infty \nu(\varepsilon)\left\{\exp\left[(\varepsilon-\mu)/\mathrm{k_B T}\right]+1\right\}d\varepsilon$$

$$\mathrm{E} = \int_0^\infty \varepsilon\nu(\varepsilon)\mathrm{f_{FD}}(\varepsilon)d\varepsilon \qquad \mu = \mu(T,N_e) - \text{химический потенциал}$$

Вся термодинамика электронного газа «разыгрывается» в тонком «пояске» вблизи энергии Ферми !!!

Вычисления дают $$E \approx E(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \nu(\varepsilon_F)$$

Теплоемкость электронного газа: $$c_e = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right) \approx \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T \nu(\varepsilon_F)$$

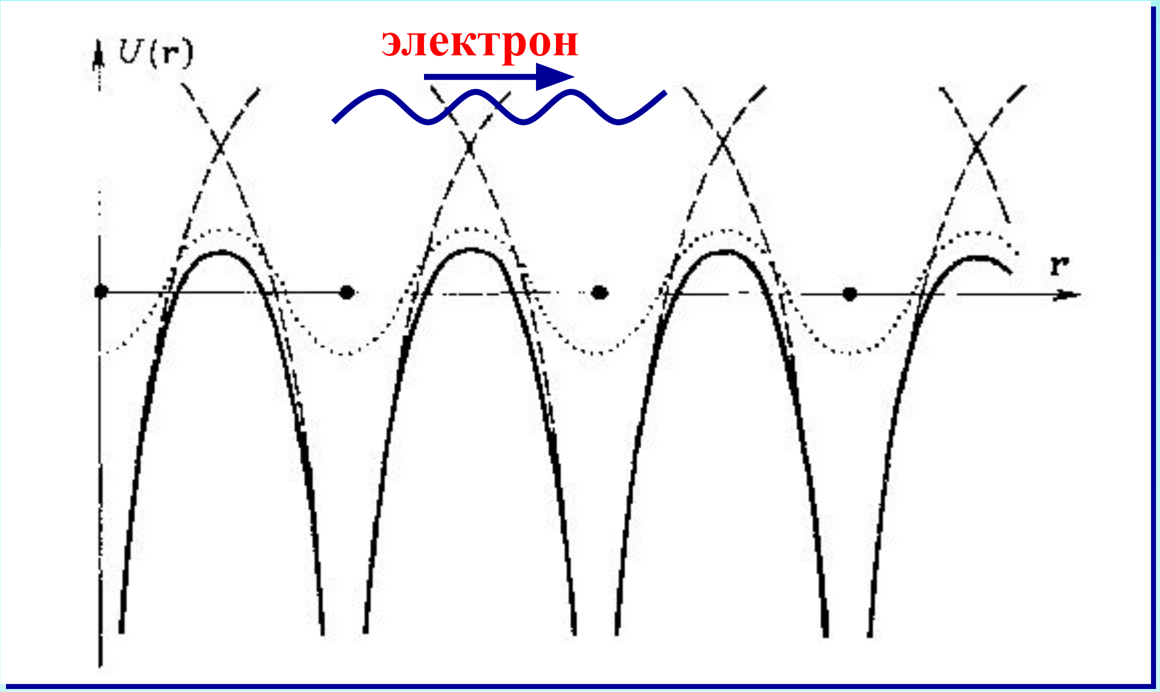
Таким образом, в конденсированном теле, где есть свободные электроны, общая теплоемкость складывается из фононной (закон Дебая) и электронной:

$$c = c_{ph} + c_e = \alpha T^3 + \gamma T$$

где $\gamma = (\pi^2/3) k_B^2 \nu(\varepsilon_F)$ – постоянная Зоммерфельда

Электроны в кристаллической решетке

В кристалле электроны находятся в периодическом потенциале



Какова волновая функция и энергетические состояния электронов в периодическом потенциале? Почему конденсированные тела, образуясь из газовой фазы, одни становятся диэлектриками, другие проводниками или полупроводниками?

Теорема Блоха

Периодический потенциал решетки

$$U(\vec{r}+\vec{a}) = U(\vec{r})$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})\cdot u_{\vec{k}}(\vec{r})$$ **(Ф.Блох, 1929г.)**

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{a}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$ **- периодическая функция с периодом решетки**

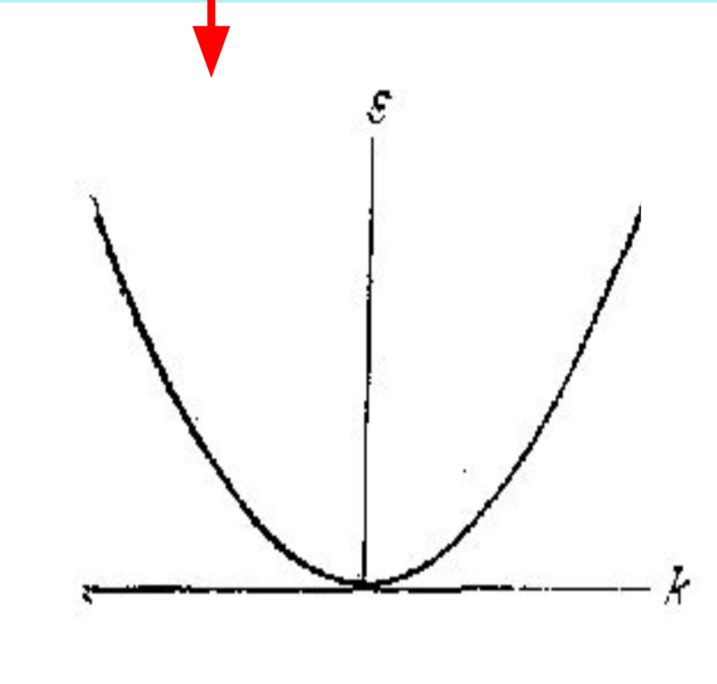
Теорема Блоха решает вопрос о поведении электронов в кристалле. Но, она не дает ответа на вопрос, почему существуют проводники, полупроводники и диэлектрики…..

Энергетический спектр электронов в кристалле

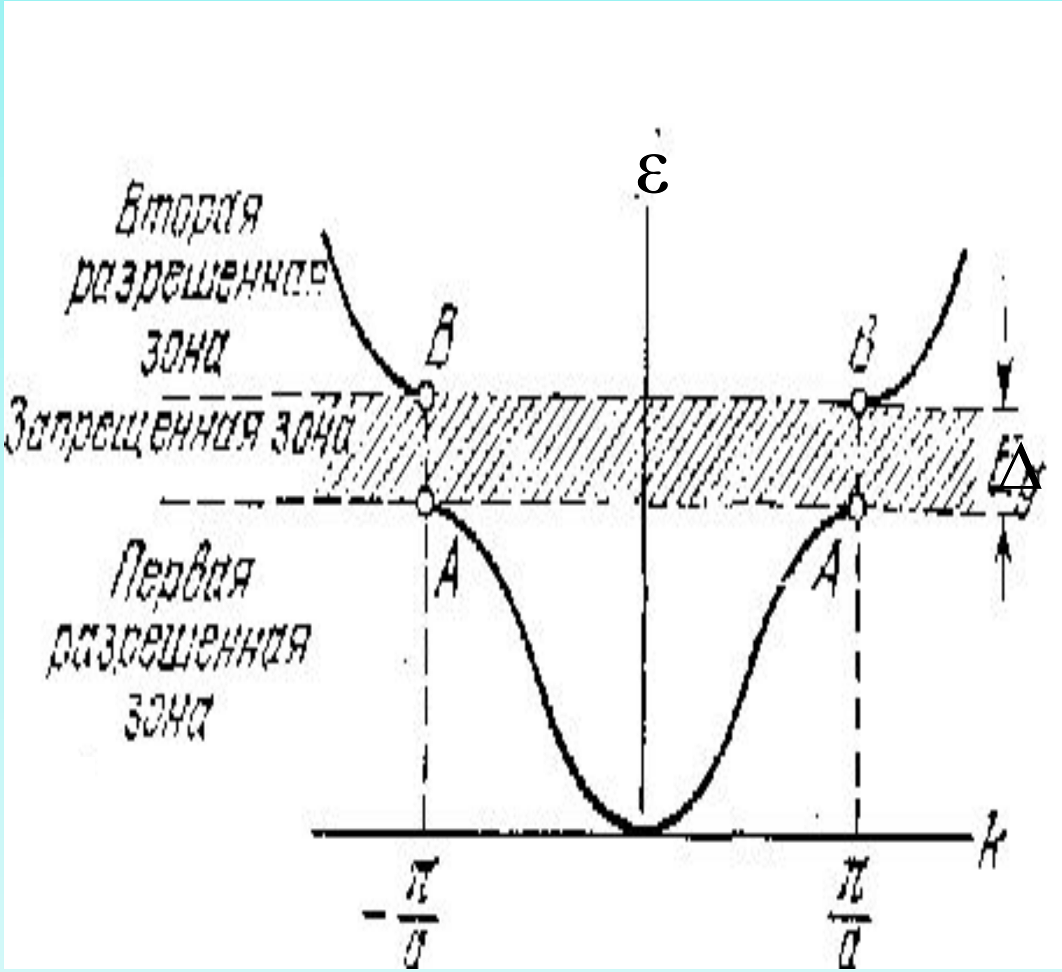
Важнейшее следствие движения электронов в периодическом потенциале – наличие энергетических щелей (зон запрещенных состояний). Выясним качественно, откуда появляются такие зоны.

Прежде всего заметим, что для свободных электронов энергия $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ **является непрерывной функцией волнового вектора; волновые функции подобных электронов - бегущие волны, несущие импульс** $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

Вместе с тем в периодической решетке подобные волны должны испытывать отражения от ионных остовов (*брэгговские отражения*), что приводит к возможности интерферировать волнам, отраженным от ионных остовов ближайших ионов. В этом случае возможно возникновение стоячих электронных волн, что означает отсутствие при определенных условиях на длины этих волн решений уравнения Шредингера даже в виде блоховских волн. Таким образом, энергия электронов в кристалле также, как и в атоме, имеет разрешенные и запрещенные уровни энергии, только в кристалле энергия электронов в может занимать непрерывные зоны разрешенных состояний, разделенных зонами запрещенных состояний.



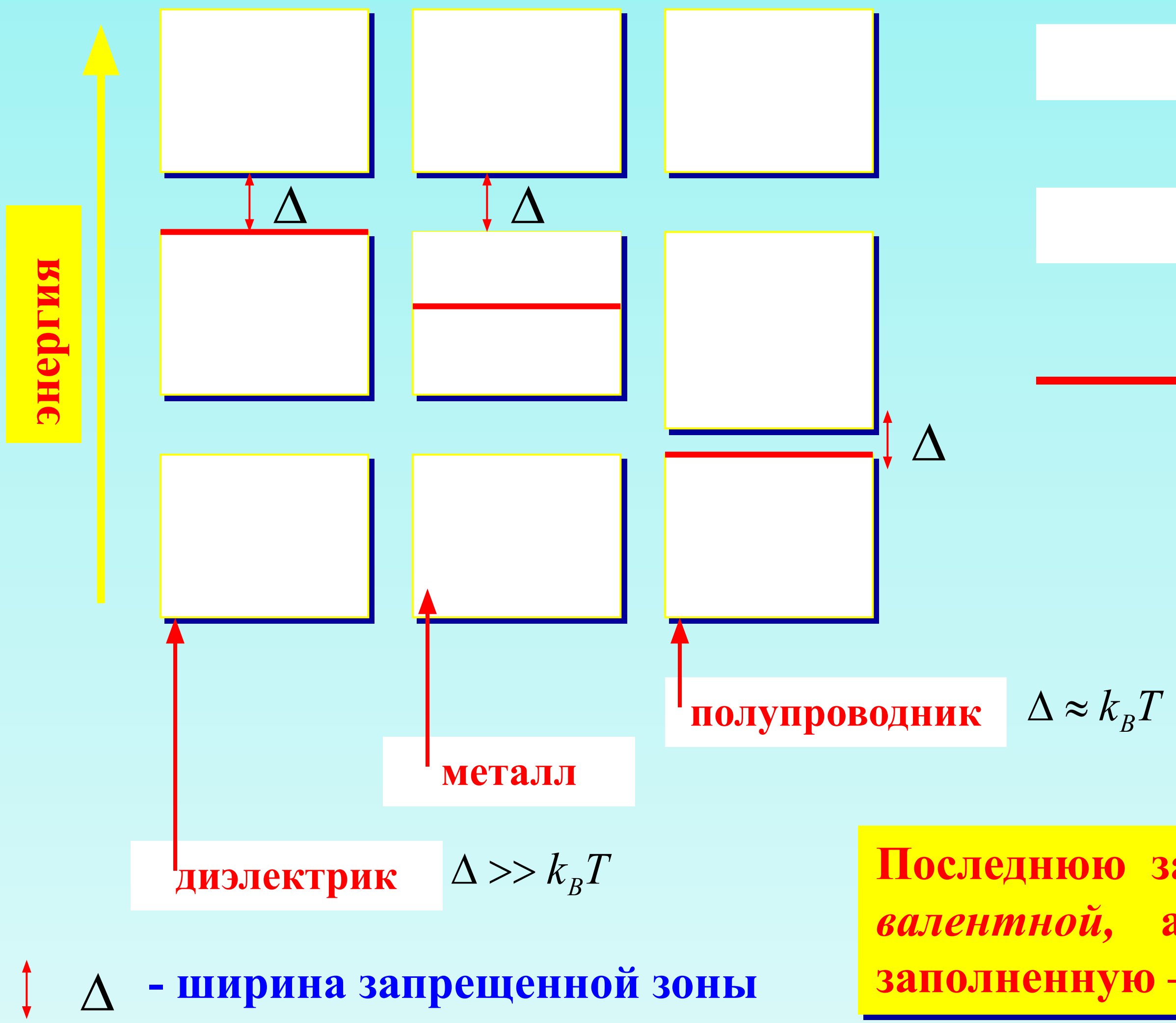
Образование запрещенных зон в кристалле



Таким образом, в кристалле электроны могут не иметь при определенных импульсах *никаких энергетических состояний –* *<u>запрещенные зоны энергий</u>*

Зонная картина энергетического электронного спектра дает возможность классифицировать твердые тела по типу заполнения этих зон

Классификация твердых тел (по зонной структуре)



Последнюю заполненную зону называют *валентной*, а последующую частично заполненную – *зоной проводимости*

Классификация твердых тел (по зонной структуре)

А). Диэлектрики

Если последняя из разрешенных зон полностью заполнена электронами, но все более высокие по энергии зоны целиком свободны, то такие тела называются *диэлектрикам (изоляторами); для типичного изолятора – алмаза:*

$$\Delta \approx 5{,}4\,\text{эВ} \approx 6{,}3 \cdot 10^{4}\ \text{К}$$

Б). Полупроводники

В *полупроводниках* при T=0 валентная зона полностью заполнена, а зона проводимости – свободна, аналогично диэлектрикам; для типичного полупроводника Si : $\Delta \approx 1{,}17\,\text{эВ} \approx 1{,}4 \cdot 10^{4}\ \text{К}$

В). Металлы

Если последняя разрешенная зона заполнена неполностью, то в этом случае даже слабое внешнее электрическое поле вызывает появление электрического тока. Такие тела носят название *металлов;* типичными металлами являются щелочные (Li, Na, K, Cs, Rb), а также благородные (Cu, Ag, Au).