W2.1 Model Sommerfelda

$c_V \sim \frac{3}{2} k_B$ (nieobserwowane!) ciepło ē metali

Rozkład klasyczny Maxwella – Boltzmanna

$$f_{MB}(\vec{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m v^2}{2 k_B T}}$$

nieadekwatny

Rozkład kwantowy Fermi – Dirac

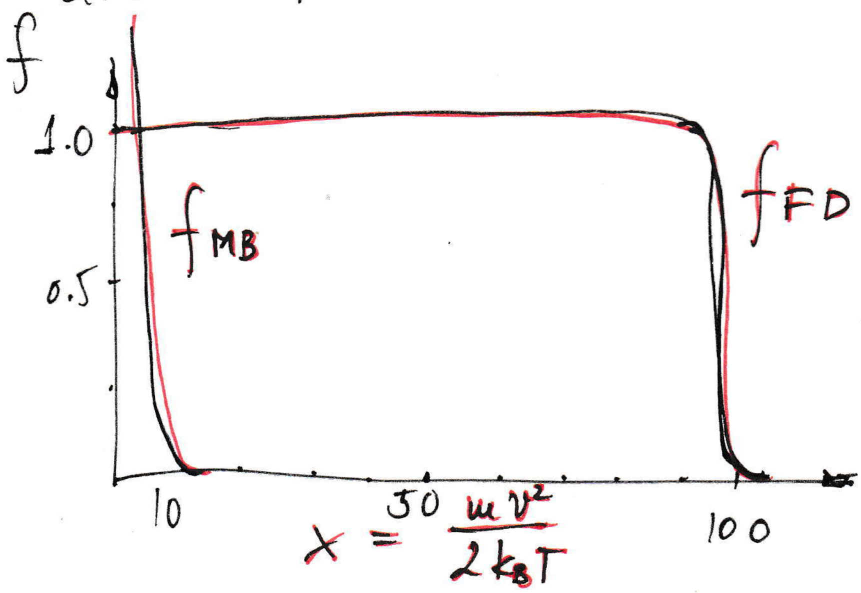
potencjał chemiczny $\mu = k_B T_0$

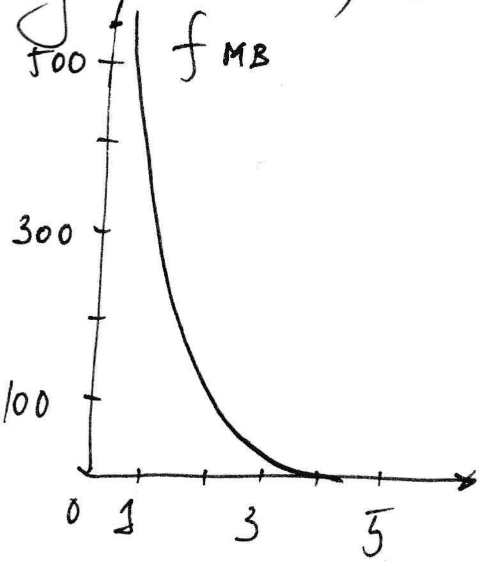
$$f_{FD}(\vec{v}) = \frac{\left(\frac{m}{\hbar}\right)^3}{4\pi^3} \frac{1}{\exp\left[(E - k_B T_0)/k_B T\right] + 1}$$

$E = \frac{m v^2}{2}$ $\qquad T_0 \to$ z warunku unormowania

$$n = \int f_{FD}(\vec{v})\, d\vec{v} \qquad T_0 \sim 10^4\,K!$$

dla $T < 1000\,K$ rozkłady bardzo się różnią





FD – uwzględnienie zakazu Pauliego!

W2.2 **Kwantowa teoria gazu elektronowego** #1

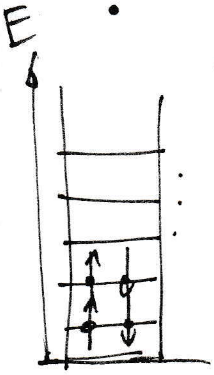
stan podstawowy $T=0$! (czyli b. małe T)

- rozkład gęstości e w oparciu o funkcję falową

r. Sch. $$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r})$$

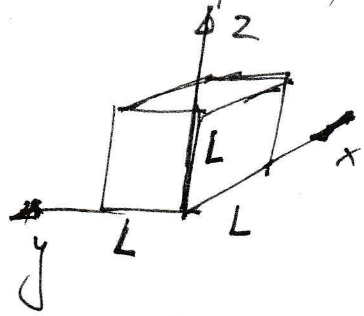
r. własne (brak potencjału — brak oddziaływań)

- warunek e musi przebywać w objętości V
  - nie uwzględniamy efektów powierzchni
- warunki periodyczne Borna – Karmana



$$\psi(x,y,z+L) = \psi(x,y,z)$$
$$\psi(x,y+L,z) = \psi(x,y,z)$$
$$\psi(x+L,y,z) = \psi(x,y,z)$$

1D $\psi(x+L)=\psi(x)$



rozwiązanie $\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

fala płaska $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ $\vec{k}$ — niezależne od $\vec{r}$!

$$\underbrace{\int d\vec{r}\, |\psi(\vec{r})|^2 = 1}$$ znalezienie gdziekolwiek

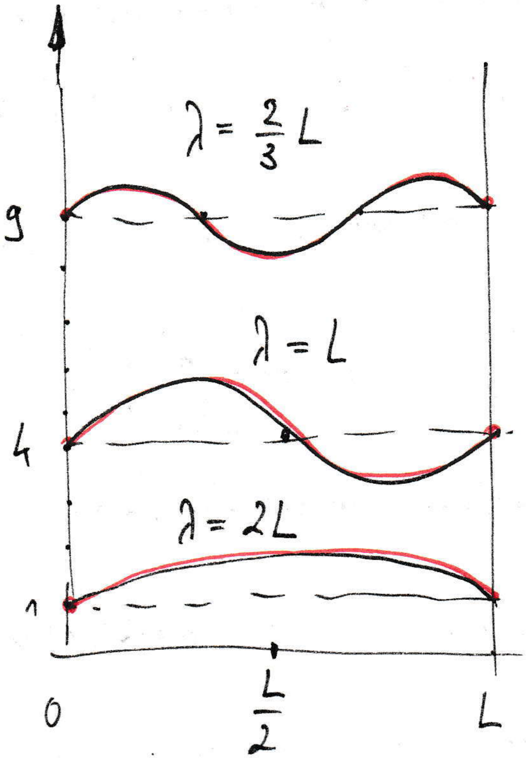
$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} = \frac{\hbar}{i}\hat{\nabla}$ operator pędu

$\vec{p} = \hbar\vec{k}$ $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \ldots$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \hbar\vec{k}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

wartość własna

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{2L}\right)^2$$



1D

$$\psi_n = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n} x\right) \qquad \frac{1}{2} n \lambda_n = L$$

orbitale ↗

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{\lambda_n}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi n}{2L}\right)^2 =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2$$

W2.3 **Kwant. teoria gazu $\bar{e}$** #2

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar \vec{k}}{m} \qquad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$ – długość fali de Broglie'a

$$e^{i k_x L} = e^{i k_y L} = e^{i k_z L} = 1$$

z warunku normowania

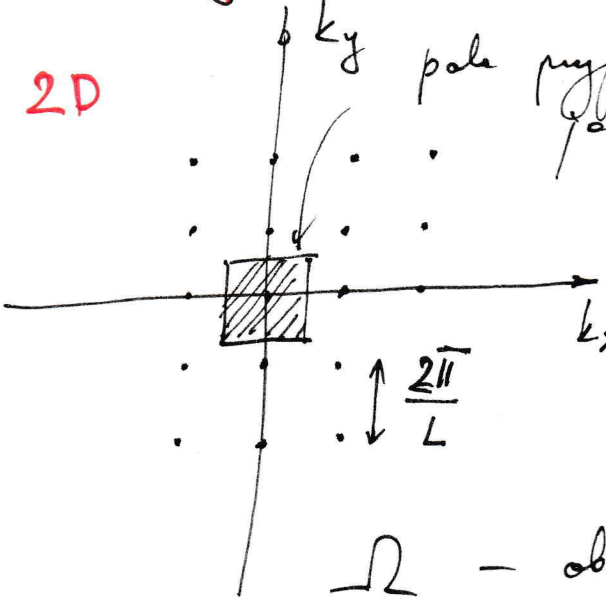
$$e^z = 1 \Rightarrow z = 2\pi i n$$ (n – liczba całk.)

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L} \qquad k_y = \frac{2\pi n_y}{L} \qquad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$$

n_x, n_y, n_z — liczby całkowite

2D

pole przypadające na jeden punkt "k"



• objętość przypadająca na punkt k $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^d$ d – wymiar

L – duże → $\frac{2\pi}{L}$ – małe

Ω – obszar w przestrzeni k

• liczba wektorów k: $\frac{\Omega}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{\Omega V}{8\pi^3}$

• gęstość poziomów k: $\frac{\Omega V}{8\pi^3} \Big/ \Omega = \frac{V}{8\pi^3}$

(ilość poziomów na j. objętości)

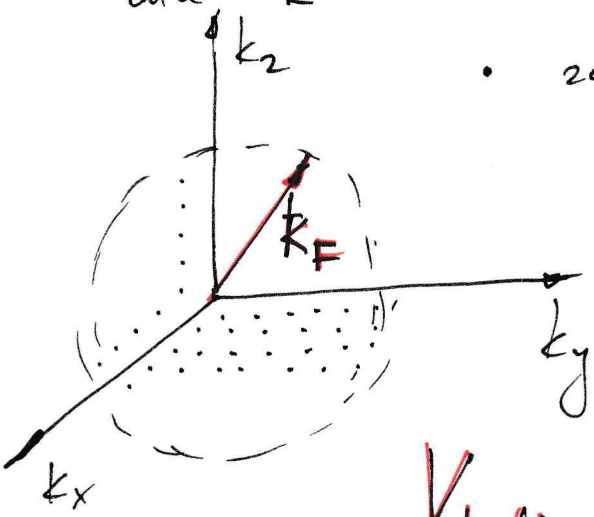
może być ~ 10^{22} punktów

ale spin $\bar{e}$ $+\frac{\hbar}{2}$ $-\frac{\hbar}{2}$ • poziomy jednoelektron.

W2.4

Kula Fermiego

dla $\vec{k}=0$ $\quad E=0$ $\quad$ bo $E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



• zapełniamy poziomy od najniższych !

dla dużych N (liczba $\bar{e}$) obszar <u>nierozróżnialny</u> od kuli

$$V_{kuli} = \frac{4}{3}\pi k_F^3$$

Liczba dopuszczalnych wektorów wewnątrz kuli

$$\cancel{\frac{V_{kuli}}{\frac{V}{8\pi^3}}} = \left(\frac{4\pi k_F^3}{3}\right)\left(\frac{V}{8\pi^3}\right) = \frac{k_F^3}{6\pi^2}V$$

wraz z degeneracją spinową $\pm\frac{\hbar}{2}$

$$N = 2\cdot\frac{k_F^3}{6\pi^2}V = \frac{k_F^3}{3\pi^2}V \quad \text{(liczba elektronów)}$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad \text{(gęstość elektronowa)}$$

promień k_F – wektor falowy Fermiego (promień Fermiego)

powierzchnia kuli ⟶ powierzchnia Fermiego

oddziela stany puste $\quad k > k_F$

od stanów zajętych $\quad k \le k_F$

<u>occupied</u> $\quad$ <u>unoccupied</u>

W 2.5

$$\boxed{p_F = \hbar k_F}$$ pęd Fermiego

$$\boxed{v_F = \frac{\hbar k_F}{m}}$$ prędkość Fermiego

pełni podobną rolę jak $\bar{v} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$ w gazie klasycznym.

Parametry Fermiego wyraża się często w funkcji parametru $2 < \frac{r_s}{a_0} < 6$

$$k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} = \frac{1.92}{r_s}$$ lub $$\boxed{k_F = \frac{3.63}{r_s/a_0} \frac{1}{Å}}$$

$$v_F = \frac{\hbar}{m} k_F = \frac{4.20}{r_s/a_0} \cdot 10^8 \frac{cm}{s}$$ ok. 1% pr. światła

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \left(\frac{e^2}{2a_0}\right)(k_F a_0)^2$$ $$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$a_0 = 0.529$ Å

a_0 – promień Bohra

$$1\,Ry = \frac{e^2}{2a_0} = 13.6\,eV$$

$$E_F = \frac{50.1\,eV}{(r_s/a_0)^2} \longrightarrow 1.5\,eV < E_F < 15\,eV$$

Energia stanu podstawowego

$$E = 2 \sum_{\vec{k} < \vec{k}_F} \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$ $$\Delta\vec{k} = \frac{8\pi^3}{V} \to d\vec{k}$$

$V \to \infty$

$$\sum_k F(\vec{k})\, \Delta\vec{k} \Longleftrightarrow \int \frac{d\vec{k}}{8\pi^3} F(\vec{k})$$

W2.6 $\frac{E}{V} = \frac{1}{4\pi^3}\int\limits_{k<k_F} d\vec{k}\,\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \ldots$ gęstość energii

ALE! Można policzyć liczbę stanów (N) i gęstość stanów $D(E)$

czasem $g(E), n(E)$

bo $N = \frac{k_F^3}{3\pi^2}V \Rightarrow \boxed{k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}}$

$$\boxed{E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}}$$

ważne!

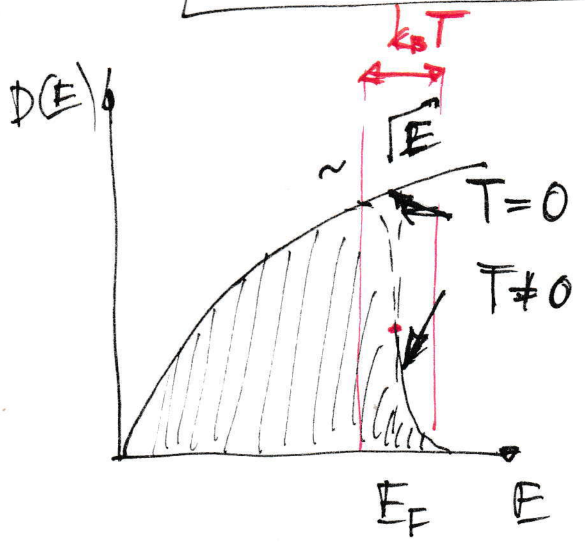
oraz $v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$

Całkowita liczba stanów (orbitali) o energii $\varepsilon < E$!

$$\boxed{N = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{3/2}}$$

$$\boxed{D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{\frac{1}{2}}}$$

gęstość stanów elekt.



Ponieważ $\ln N = \frac{3}{2}\ln E + $ stała

$$\frac{dN}{N} = \frac{3}{2}\frac{dE}{E}$$

czyli $D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{3}{2}\frac{N}{E}$

to znaczy, że liczba orbitali przy powierzchni Fermiego na jedn. energii jest równa liczbie elektronów przewodn. podzielona przez E_F !

$$D(E_F) = \frac{3}{2}\frac{N}{E_F} \;!$$

W 2.7 Pojemność cieplna elektronów #1

DUŻY PROBLEM! Klasycznie ciepło wł. cząstek $\sim \frac{3}{2} k_B$

dla N atomów $C_V \sim \frac{3}{2} N k_B$, a w metalach 100 razy mniej!

- zakaz Pauliego + statystyka FD

tylko ē przy powierzchni Fermiego są wzbudzane termicznie! $U \approx N \frac{T}{T_F} k_B T$ • jakościowo

← tylko część ē wzbudzona

$$\boxed{C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} \approx N k_B \left(\frac{T}{T_F}\right)}$$

$T_F \sim 5 \cdot 10^4$ K

- ilościowo $\Delta U = U(T) - U(0)$ bo $f(E) = 1$ dla $T = 0$

$$\Delta U = \int_0^\infty E D(E) f(E) dE - \int_0^{E_F} E D(E) dE$$

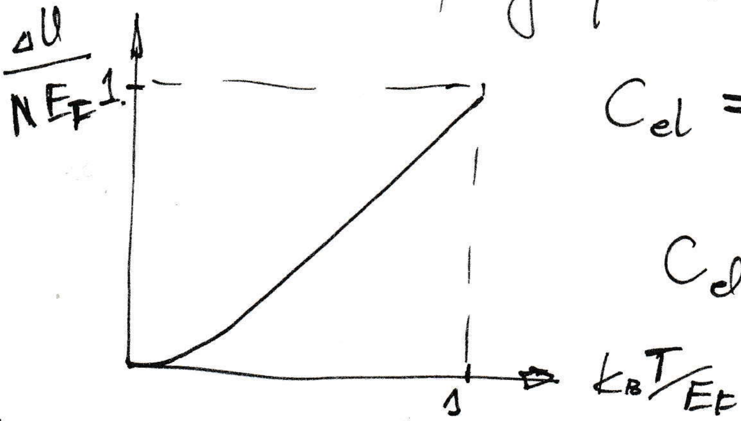
i

$$N = \int_0^\infty D(E) f(E) dE = \int_0^{E_F} D(E) dE \quad / \cdot E_F$$

$$\left(\int_0^{E_F} + \int_{E_F}^\infty\right) E_F D(E) f(E) dE = \int_0^{E_F} E_F D(E) dE$$

$$\Delta U = \int_{E_F}^\infty (E - E_F) f(E) D(E) dE + \int_0^{E_F} (E_F - E)[1 - f(E)] D(E) dE$$

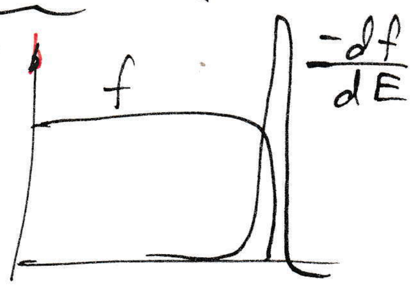
powyżej E_F poniżej E_F



$$C_{el} = \frac{dU}{dT} = \int_0^\infty (E - E_F) \frac{df}{dT} D(E) dE$$

$$C_{el} \sim D(E_F) \int_0^\infty (E - E_F) \frac{df}{dT} dE$$

W 2.8 Pojemność cieplna elektronów #2



$$\frac{df}{d\tau} = \frac{E-E_F}{\tau^2}\,\frac{\exp[(E-E_F)/\tau]}{\{\exp[(E-E_F)/\tau]+1\}^2}$$

całki Fermiego

$$C_{el} = k_B^2 T D(E_F) \int_{-E_F/k_B T}^{\infty} x^2 \frac{e^x}{(e^x+1)^2}\,dx \qquad x = \frac{E-E_F}{k_B T}$$

$k_B T$ — τ

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\ldots) = \frac{\pi^2}{3}$$

$$\boxed{C_{el} = \frac{1}{3}\pi^2 k_B^2 T D(E_F)}$$

jeden z najważniejszych wyników t. elektronów swobodnych

lub używając wzoru $D(E_F) = \frac{3N}{2k_B T_F} = \frac{3N}{2E_F}$ $\boxed{E_F = k_B T_F}$

$$\boxed{C_{el} = \frac{1}{2}\pi^2 N k_B T/T_F}$$

$$C_{el} = \gamma T$$

temperatura Fermiego