

Dodatek 10

Kwantowa teoria przewodnictwa I

Teoria klasyczna miała następujące mankamenty:

- (1) zmierzone wartości średniej drogi swobodnej okazały się o kilka rzędów wielkości większe niż oczekiwane
- (2) teoria nie dawała poprawnych zależności temperaturowych
- (3) nie przewidywała istnienia półprzewodników i izolatorów

Obecnie omówimy krótko (obszernie - patrz wykład) model elektronów swobodnych w zastosowaniu do teorii przewodnictwa. Chwilowo ograniczymy się do teorii przewodnictwa metali. W pierwszym przybliżeniu elektron w metalu można traktować jako cząstkę poruszającą się swobodnie pomiędzy jego brzegami. Przypomina to sytuację cząstki w pudle potencjału, która była przez nas już rozwiązywana. Okazuje się, że już taki prosty model daje niezłe wyniki.

przypadek jednowymiarowy (1D)

wiemy, że elektrony są fermionami spełniającymi rozkład Fermiego – Diraca

$$f(E_n) = \frac{1}{e^{\frac{E_n - E_F}{kT}} + 1}, \quad (1)$$

przy czym

$$f(E_n) = \frac{n_n}{g_n}, \quad (2)$$

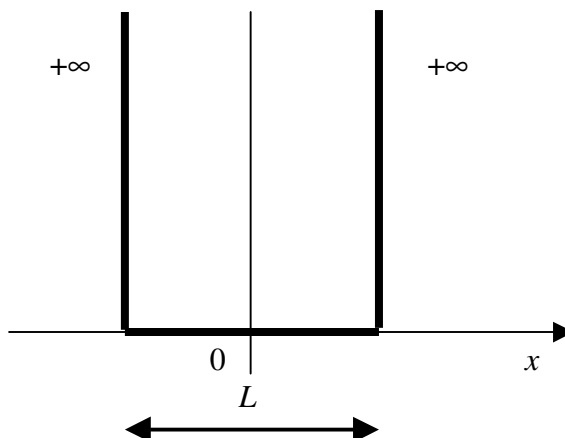
gdzie

n_n – liczba cząstek o energii E_n

g_n – liczba dostępnych stanów o energii E_i (gęstość stanów)

N – całkowita liczba cząstek

zastosujemy funkcję rozkładu do elektronów uwięzionych w pudle potencjału takim jak rozpatrywane w dodatku D6



zakładamy, że szerokość bariery potencjału wynosi L , stąd

$$n \frac{\lambda}{2} = L \quad \rightarrow \quad \lambda_n = \frac{2L}{n} \quad (3)$$

dlatego pęd i energia są skwantowane zgodnie z formułami

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = h \frac{n}{2L} \quad \rightarrow \quad E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{n}{2L} \right)^2 \quad (4)$$

funkcje falowe muszą być unormowane tak, aby dla każdego stanu energetycznego prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w pudle było równe jedności, stąd

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (5)$$

(sprawdzić)

zakładamy teraz, że w pudle umieszczamy N elektronów, każdy poziom energetyczny oznaczony liczbą kwantową n można obsadzić przez 2 elektrony, jeden ze spinem ku górze, drugi ku dołowi

jeżeli będziemy obsadzali N elektronami począwszy od najniższego $n = 1$, to najwyższy poziom n_F spełni zależność

$$2n_F = N \quad (6)$$

energię najwyższego obsadzonego poziomu nazywamy *energiją Fermiego*, wstawiając n_F do (4) otrzymujemy

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{n_F}{2L} \right)^2 = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{N}{4L} \right)^2 \quad (7)$$

otrzymane zależności są dobrym modelem jednowymiarowego układu przewodzącego

w metalach N , n_n – liczba cząstek o energii E_n i g_n – liczba dostępnych stanów o energii E_i (gęstość stanów) są bardzo dużymi liczbami i w modelach teoretycznych często zamiast sum używa się różniczek i całek

np. gęstość stanów $g = g(E)$ (rozumianą jako liczbę stanów elektronowych w jednostkowym przedziale energii) można otrzymać różniczkując (4)

$$dE = \frac{h^2}{m} \left(\frac{n}{2L} \right) \frac{dn}{L} \quad (8)$$

stąd (pamiętając o spinie elektronu) mamy

$$g(E) = 2 \frac{dn}{dE} = \frac{8L^2 m}{h^2} \cdot \frac{1}{n} = \frac{4L}{h} \left(\frac{m}{2E} \right)^{1/2} \quad (9)$$

widać, że gęstość stanów maleje z energią

przy takim podejściu również funkcje rozkładu (1) należy traktować jako ciągłą

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \quad (10)$$

oczywiście jest spełniona zależność

$$\int_0^{\infty} f(E) g(E) dE = N \quad (11)$$

przypadek (3D)

prawdziwy metal jest 3 – wymiarowy, dlatego trzeba rozwiązać 3 – wymiarowego równania Schrodningera dla cząstek w pudle 3D, jeżeli to zrobimy zamiast (5) otrzymamy (rozwiąż, patrz wykład, różne podręczniki, np. C. Kittel, Wstęp do fizyki ciała stałego, itp.)

założymy, że próbka metalu ma kształt sześcianu o boku L , w trzech wymiarach wektor falowy $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ i funkcja falowa ma postać

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{V} \right)^{1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (12)$$

funkcja falowa jest już znormalizowana w ten sposób, że spełnia warunek brzegowy (3) w każdym wymiarze z osobna, tzn.

$$n_x \frac{\lambda}{2} = L \quad \rightarrow \quad \lambda_{nx} = \frac{2L}{n_x} \quad (13)$$

stąd

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \quad (14)$$

po podstawieniu (12) do 3D równania Schrodningera

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (15)$$

otrzymuje się formułę na energie własne

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2, \quad (16)$$

gdzie składowe k spełniają warunki brzegowe (14), powyższe równanie w przestrzeni pędów jest równaniem kuli

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (17)$$

jeżeli będziemy obsadzać poziomy energetyczne N elektronami, podobnie jak to robiliśmy na etapie (7) otrzymamy energię Fermiego

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}k_F^2 \quad (18)$$

w przestrzeni pędów wewnątrz kuli o objętości

$$V_k = \frac{4}{3}\pi k_F^3 \quad (19)$$

dozwolona liczba stanów wynosi

$$2\frac{V_k}{\Delta V_k} = \frac{V}{3\pi^3}k_F^3, \quad (20)$$

gdzie $\Delta V_k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ jest elementem objętości w przestrzeni \mathbf{k}

jeżeli, podobnie jak na etapie (6) założymy, że

$$2\frac{V_k}{\Delta V_k} = N, \quad (21)$$

otrzymamy prosty wzór

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (22)$$

gdzie $n = V / N$ jest koncentracją (numeryczną) gazu elektronowego, stąd zgodnie z (17)

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3} \quad (23)$$

funkcja gęstości stanów (9) jest równa (patrz wykład)

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (24)$$

widać, że zupełnie inaczej jak w przypadku 1D, gęstość stanów rośnie z energią

Powyższe formuły są użyteczne w wielu zagadnieniach fizyki ciała stałego. Jak to wykorzystać do opisu przewodnictwa metali?

(1) teoria kwantowa rzuca nowe światło na średni czas relaksacji τ (patrz wykład)

siła działająca na elektrony ze strony pola elektrycznego $F = -e E$, powoduje zmiany pędu elektronów, a zatem ich liczb falowych

$$\delta k = \frac{\delta p}{\hbar} = \frac{F \cdot \delta t}{\hbar} \quad (25)$$

kula nie rozpędza się do nieskończoności, bo zachodzą zderzenia elektronów, w stanie ustalonym czas rozpędzania wynosi średnio

$$\delta t = \tau \quad (26)$$

oznacza to przesunięcie w przestrzeni pędów kuli Fermiego o wielkość δk w kierunku przepływu prądu, przesunięcie to nadaje dodatkową prędkość

$$\delta v = \frac{F \cdot \tau}{m} = - \frac{e \cdot E \cdot \tau}{m} \quad (27)$$

z dodatkową prędkością δv związany jest transport ładunku

$$j = nq \cdot \delta v \quad (28)$$

z dwu powyższych wyrażeń otrzymujemy

$$j = \frac{ne^2\tau}{m} E \quad (29)$$

a więc formułę identyczną jak klasyczna, stąd dalsze formuły

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad \text{i} \quad \rho = \frac{m}{ne^2\tau} \quad (30)$$

czas relaksacji jest parametrem, który można wyznaczyć głębiej studiując ruch elektronów w sieci krystalicznej (potencjał periodyczny)

(2) średnia droga swobodna elektronu w obrazie kwantowym jest równa

$$l = 2\tau v_E \quad (31)$$

gdzie v_F jest prędkością elektronów na powierzchni Fermiego (dla pędu Fermiego), obliczoną zgodnie z oczywistym wyrażeniem

$$mv_F = \hbar k_F \quad (32)$$

do którego podstawiamy (20), stąd

$$v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (33)$$

(3) obowiązuje również formuła klasyczna

$$j = ne\mu E \quad (34)$$

tyle, że ruchliwość ma już inny sens

$$\mu = \frac{e\tau}{m} = \frac{v_F}{E} \quad [\text{m}^2/\text{Vs}] \quad (35)$$