第二节、电子气的费米能

电子是费米子，服从Fermi-Dirac分布:

热平衡态下，电子处在能量为E的状态的几率为

$$f(E)=\frac{1}{e^{(E-E_F)/k_BT}-1}$$

E_F 为费米能, 是温度和电子总数的函数

分两种情况求 E_F 的表达式

(1)、T=0 K

$$f(E)=\begin{cases}1 & (E<E_F)\\ 0 & (E>E_F)\end{cases}$$

能量处在 E ~ E+dE 之间的电子数为：

$$dN=C\sqrt{E}\,f(E)dE$$

系统总的电子数为：

$$N=\int_0^{\infty} dN=\int_0^{\infty} C\sqrt{E}\,f(E)\,dE$$

$$=\int_0^{E_F^0} C\sqrt{E}\,dE=\frac{2}{3}C(E_F^0)^{3/2}$$

E_F^0 **-----T=0 K 时系统的费米能**

$$N = \frac{2}{3} C (E_F^0)^{3/2} \qquad E_F^0 = \left(\frac{3N}{2C}\right)^{2/3}$$

将 $C = 4\pi V_C \left(2m/\hbar^2\right)^{3/2}$ 代入，得：

$$E_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m}(3n\pi^2)^{2/3}$$

$n = N/V_C$ -----系统的电子密度

电子气系统中，每个电子的平均能量：

$$\overline{E}=\frac{\int EdN}{N}=\frac{C}{N}\int_0^{E_F^0}E^{3/2}dE$$

$$=\frac{2C}{5N}(E_F^0)^{5/2}$$

将 $E_F^0=(\frac{3N}{2C})^{2/3}$ 代入 $\bar{E}=\frac{2C}{5N}(E_F^0)^{5/2}$

$$\Downarrow$$

$$\bar{E}=\frac{3}{5}E_F^0$$

$E_F^0\approx$几个eV，即使在 $T=0K$ ，电子气

系统仍然具有相当大的平均能量。

(2)、当 $T \neq 0K$ ，但 $k_B T << E_F$

能量处在 E ~ E+dE 之间的电子数为

$$dN = C\sqrt{E}\, f(E)dE$$

系统总的电子数为：

$$N = \int_0^\infty dN = \int_0^\infty C\sqrt{E}\, f(E)dE$$

$$N=\int_0^\infty C\sqrt{E}\,f(E)dE=\frac{2}{3}C\int_0^\infty f(E)dE^{3/2}$$

$$=\frac{2}{3}Cf(E)E^{3/2}\Big|_0^\infty-\frac{2}{3}C\int_0^\infty E^{3/2}\frac{\partial f(E)}{\partial E}dE$$

$$\Downarrow$$

$$N=-\frac{2}{3}C\int_0^\infty E^{3/2}\frac{\partial f}{\partial E}dE$$

直接引用下述积分表达式：

$$I=-\int_0^{\infty} g(E)\frac{\partial f(E)}{\partial E}dE=g(E_F)+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2g''(E_F)+\ldots$$

$$N=-\frac{2}{3}C\int_0^{\infty}E^{3/2}\frac{\partial f}{\partial E}dE$$

$$\Downarrow$$

$$N=\frac{2}{3}CE_F^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(k_BT/E_F\right)^2\right]$$

$$N=\frac{2}{3}CE_F^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}(k_BT/E_F)^2\right]$$

而 $N=\frac{2}{3}C(E_F^0)^{3/2}$，所以：

$$(E_F^0)^{3/2}=(E_F)^{3/2}[1+\frac{\pi^2}{8}\cdot(\frac{k_BT}{E_F})^2]$$

由于 $k_B T << E_F$ ，所以：

$$(E_F^0)^{3/2} = (E_F)^{3/2}[1 + \frac{\pi^2}{8} \cdot (\frac{k_B T}{E_F})^2]$$

$$\Downarrow$$

$$E_F \approx E_F^0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} (\frac{k_B T}{E_F^0})^2 \right]$$

讨论:

1. 费米面和费米温度

2. 电子的激发

可见，当温度升高时，E_F 比 E_F^0 小，在通常温度下，E_F 与E_F^0 相差不大。

对金属而言，通常，E_F^0 ~ 几个eV，也就是说，与之对应特征**费米温度**：。

$$T_F = E_F / k_B \approx 10^4 \sim 10^5 K$$

对自由电子，等能面在 $\vec{k}$ 空间中为球面，因此，对应于 $E = E_F$ 的等能面称之为**费米面**，它为 $\vec{k}$ 空间中半径等于

$$k_F = \sqrt{2mE_F}\Big/\hbar$$

的球面

讨论:

1. 费米面和费米温度

2. 电子的激发

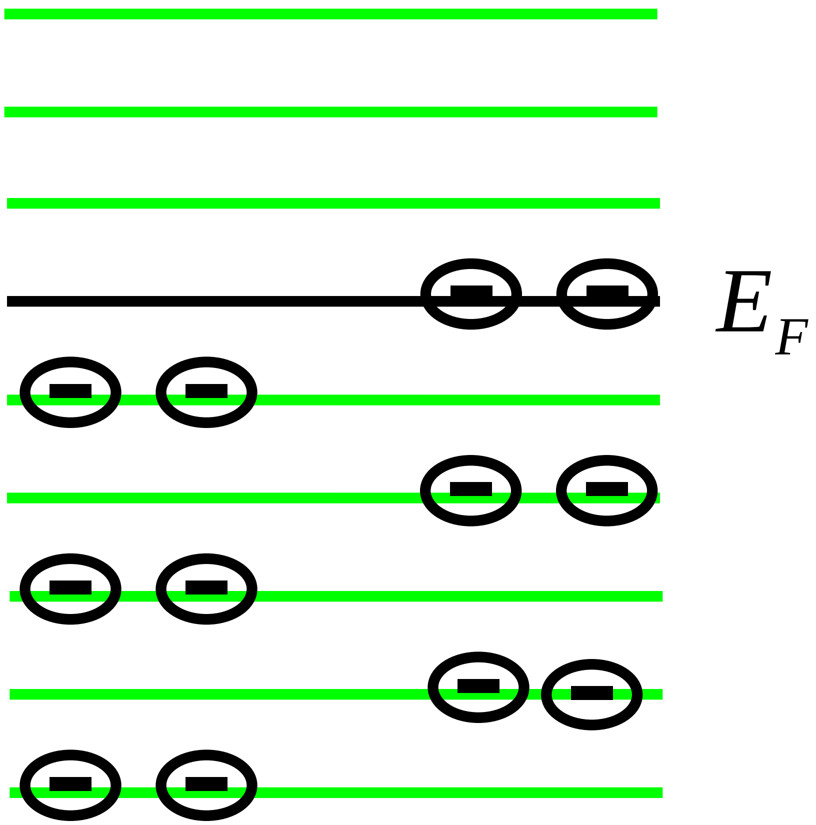
在绝对零度下，费米面 E_F^0 以内的状态全被电子占据，费米面以外没有电子。

$$f(E)=\frac{1}{e^{(E-E_F)/k_BT}-1}$$

$$f(E)=\begin{cases}1 & (E<E_F)\\ 0 & (E>E_F)\end{cases}$$

费米面以内能量处在 E_F 范围内的电子将被激发到费米面外 E_F 范围内的能级上去。

$$E_F \approx E_F^0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F^0} \right)^2 \right]$$


E_F

课堂练习

1. 某边长L的矩形金属包含N个自由电子，求该二维自由电子气的费米能。

2. 某长L的一维金属线包含N个自由电子，求该一维自由电子气的费米能。

1. 某边长L的矩形金属包含N个自由电子，求该二维自由电子气的费米能。

电子运动的能量：

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

$\vec{k}$ 为电子波函数的波矢 (模式)

k_x, k_y 为波矢在x,y方向的分量。

根据周期性边界条件，得：

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

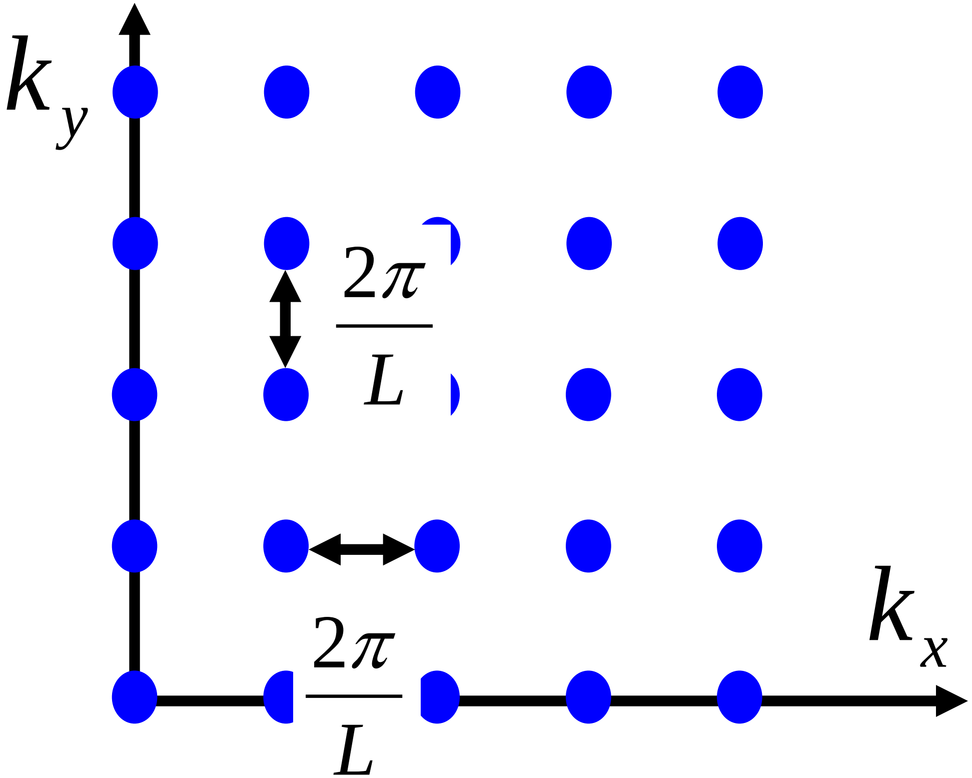
$$k_y = \frac{2\pi}{L} n_y$$

n_x, n_y 为正、负整数和零

在波矢空间中，每个许可状态可用一个点来表示，这些点的坐标为：

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

$$k_y = \frac{2\pi}{L} n_y$$



波矢空间中每个状态代表点所占面积：

$$(2\pi/L)\times(2\pi/L)=(2\pi/L)^2$$

$\vec{k}$ 空间中单位面积内代表点数(状态密度)：

$$(L/2\pi)^2$$

$\vec{k}$ 空间中，在 $\vec{k} \to \vec{k} + d\vec{k}$ 面积元

$d\vec{k} = dk_x dk_y$ 中所包含状态数为：

$$(\frac{L}{2\pi})^2 d\vec{k}$$

每个状态可容纳2个自旋方向相反的电子，面积元 $d\vec{k} = dk_x dk_y$ 中所包含的电子数为 $dZ = 2(\frac{L}{2\pi})^2 d\vec{k} = \frac{S_C}{2\pi^2} d\vec{k}$

电子能量为 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2\right)$

$\vec{k}$ 空间，自由电子能量等于某一定值的

曲面为一圆，圆的半径为： $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

能量介于E～E+dE 的区域对应于半径

为 k～k+dk 的弧，其面积为 $2\pi k dk$

半径为 k ~ k+dk 圆弧内的电子数为：

$$dZ = \frac{S_C}{2\pi^2} \cdot 2\pi k dk$$

利用 $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ，得：

$$dk = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \frac{dE}{2\sqrt{E}}$$

单位能量间隔内所能容纳的电子数为：

$$dZ = \frac{mS_C}{\pi\hbar^2} dE$$

能级密度为：

$$\frac{dZ}{dE} = \frac{mS_C}{\pi\hbar^2} = C$$

$$N=\int_0^\infty f(E)dZ=\int_0^\infty \frac{mS_C}{\pi\hbar^2}fdE=\frac{mS_C}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty fdE$$

$$=\frac{mS_C}{\pi\hbar^2}\left[Ef\Big|_0^\infty-\int_0^\infty E\frac{\partial f}{\partial E}dE\right]$$

$$=-\frac{mS_C}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty E\frac{\partial f}{\partial E}dE$$

直接引用下述积分表达式：

$$I = -\int_0^{\infty} g(E)\frac{\partial f(E)}{\partial E}dE = g(E_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 g''(E_F) + \ldots$$

$$N = -\frac{mS_C}{\pi\hbar^2}\int_0^{\infty} E\frac{\partial f}{\partial E}dE$$

$$\Big\downarrow$$

$$N = \frac{mS_C}{\pi\hbar^2}E_F \longrightarrow E_F = \frac{\pi\hbar^2}{mS_C}N = \frac{\pi\hbar^2}{m}n$$

2. 某长L的一维金属线包含N个自由电子，求该一维自由电子气的费米能。

电子运动的能量：

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2$$

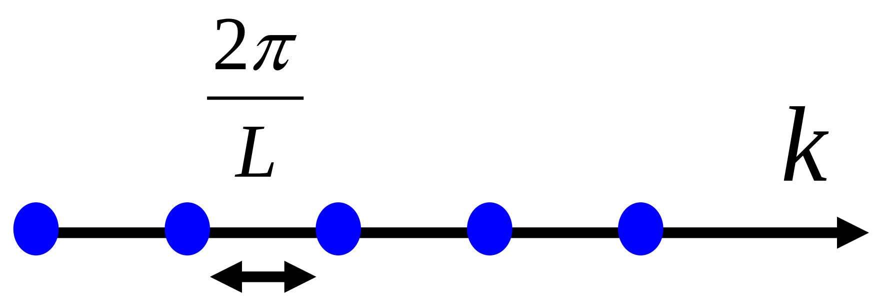
$\vec{k}$ 为电子波函数的波矢 $\vec{k} = k_x \hat{i}$

根据周期性边界条件，得： $k = \frac{2\pi}{L} n$

------- n 为正、负整数和零

在波矢空间中，每个许可状态可用一个点来表示，这些点的坐标为：

$$k = \frac{2\pi}{L} n$$



波矢空间中每个状态代表点所占长度：

$$2\pi/L$$

$\vec{k}$ 空间中单位长度内代表点数(状态密度)：

$$L/2\pi$$

$\vec{k}$ 空间中，在 $\vec{k} \to \vec{k} + d\vec{k}$ 线元

$d\vec{k}$ 中所包含状态数为：

$$\frac{L}{2\pi} d\vec{k}$$

每个状态可容纳2个自旋方向相反的电子，线元 $d\vec{k}$ 中所包含电子数为

$$dZ = 2\frac{L}{2\pi}d\vec{k} = \frac{L}{\pi}d\vec{k}$$

电子能量为

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

而 $d\vec{k} = 2d\left|\vec{k}\right| = 2dk$

k ~ k+dk 内的电子数为：

$$dZ = \frac{L}{\pi} \cdot 2dk$$

利用 $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ，得 $dk = \dfrac{\sqrt{2m}}{\hbar} \cdot \dfrac{dE}{2\sqrt{E}}$

单位能量间隔内所能容纳的电子数为：

$$dZ = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar} E^{-1/2} dE$$

能级密度为：

$$\frac{dZ}{dE} = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar} E^{-1/2}$$

$$N=\int_0^\infty f(E)\,dZ=\int_0^\infty \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}E^{-1/2}f\,dE$$

$$=\frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\int_0^\infty E^{-1/2}f\,dE$$

$$= \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\int_0^{\infty} f dE^{1/2}$$

$$= \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\left[E^{1/2} f \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} E^{1/2} \frac{\partial f}{\partial E} dE \right]$$

$$= -\frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\int_0^{\infty} E^{1/2} \frac{\partial f}{\partial E} dE$$

直接引用下述积分表达式:

$$I=-\int_0^\infty g(E)\frac{\partial f(E)}{\partial E}dE=g(E_F)+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2g''(E_F)+\ldots$$

$$N=-\frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\int_0^\infty E^{1/2}\frac{\partial f}{\partial E}dE$$

$$\Downarrow$$

$$N=\frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\left[E_F^{1/2}-\frac{\pi^2}{24}\left(k_BT\right)^2E_F^{-3/2}\right]$$

$$N = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar} E_F^{1/2}\left[1 - \frac{\pi^2}{24}\left(\frac{k_B T}{E_F}\right)^2\right]$$