**37 КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛЕ.**

Согласно модели свободных электронов, валентные электроны атомов металла могут свободно перемещаться в пределах образца. Именно валентные электроны обуславливают электропроводность металла и по этой причине их называют электронами проводимости.

Рассмотрим образец металла в форме куба со стороной *L*. Электрон проводимости движется свободно в пределах образца и не может покинуть его. Следовательно, он находится в трехмерной прямоугольной яме бесконечной глубины. Потенциальная энергия

Уравнение Шредингера для электрона в пределах образца имеет вид

Его решение ищем методом разделения переменных, представив

Подстановка этого выражения в УШ приводит к уравнению

Разделив это уравнение на приходим к уравнению

Левая сторона уравнения состоит из суммы трех слагаемых, которые зависят от различных независимых переменных: *x, y, z*. Правая сторона является постоянной величиной. Поэтому следует положить, что каждое слагаемое равно постоянной:

В результате приходим к трем уравнениям для бесконечно глубокой одномерной потенциальной ямы (§12)

Воспользовавшись результатами §12, запишем нормированное решение исходного уравнения

Из требования выполнения стандартных условий находим возможные значения :

Энергия квантуется и ее возможные значения

Совокупность натуральных чисел , определяющих значение энергии электрона (фермиона), удобно задавать в трехмерном пространстве точками с соответствующими координатами. Каждой точке в этом пространстве с координатами соответствует *g=*2 состояния с энергией . Два состояния возникают вследствие наличия двух проекций спина у электрона. Число состояний с энергией меньше некоторого значения равно произведению *g=*2 на число точек внутри первого квадранта ( сферы радиуса

Число точек внутри сферы совпадает с объемом соответствующего шара. Следовательно, число состояний с энергией меньше некоторого значения равно

Число состояний с энергией, лежащей в интервале от до

Функция

Пусть – концентрация свободных электронов и – число свободных электронов в металле. Если металл находится при низкой температуре , то эти электроны, в соответствии с принципом Паули, будут последовательно занимать по одному каждое состояние на самых низких энергетических уровнях. Заполнение состояний будет происходить до некоторой энергии. Эту энергию называют энергией Ферми (соответствующий уровень – уровнем Ферми) - . Ноль означает, что температура металла . Все уровни с энергией будут заполнены *N* свободными электронами. Уровни с энергией будут свободными. Поэтому энергия Ферми определяется из соотношения

Итак, энергия Ферми при равна

Энергия Ферми слабо зависит от температуры. При зависимость описывается приближенной формулой

Определим среднюю энергию электронов при . Энергия всех электронов равна

Полное число электронов

Следовательно средняя энергия валентных электронов равна

В качестве примера рассмотрим медь. По известной концентрации валентных электронов получаем

Если бы электроны подчинялись законам классической механики, то этой средней энергии соответствовала температура

многократно больше температуры плавления меди. Величину называют температурой Ферми. Для меди .

Согласно классической теории, электроны проводимости должны были наравне с ионами кристаллической решетки давать вклад в теплоемкость металла. Это не согласуется с экспериментальными данными. Объяснение следует из квантовой теории. На графике распределения электронов по энергиям при кривая представляет собой параболу обрывающуюся при . При график на участке обращается в нуль. При . Следовательно, лишь малая часть электронов, находящихся на самых верхних уровнях, при нагревании поглощает тепловую энергию. Поэтому вклад электронов в теплоемкость металла пренебрежимо мал.

График распределения Ферми -Дирака

при имеет вид ступеньки. Действительно при

При ступенька становится пологой в области шириной .

Из сравнения графиков и следует, что . Химический потенциал совпадает с энергией Ферми. Их равенство сохраняется и при .

**Другие варианты нахождения . (можно не читать)**

1.В качестве решений исходного УШ можно взять функции

Подстановкой в УШ, действительно убеждаемся, что эти функции являются решениями. Они являются собственными функциями трех операторов проекций импульса

с собственными значениями Энергия электрона

Стандартные условия сводятся к требованию периодичности пси-функции по *x, y, z* с периодом

Получаем возможные значения компонент волнового вектора

Состояние электрона определяется четырьмя квантовыми числами . Энергия электрона

Число состояний , имеющих энергию меньше некоторого значения равно удвоенному (из-за двух проекций спина) числу точек с координатами ( в *n*-пространстве внутри сферы радиуса

Число точек равно объему шара. Следовательно

Выражение совпадает с ранее полученным.

2. В пределах образца металла энергия равна

Объем фазового пространства, отвечающего состояниям с энергией меньше некоторого значения равен

Объем элементарной фазовой ячейки

Следовательно, число состояний с энергией меньше , с учетом двух проекций спина равно

Результат совпадает с предыдущими.