

III.4 Gaz Fermiego. Struktura pasmowa ciał stałych

Gaz Fermiego

Gaz Fermiego to gaz swobodnych, nie oddziałujących, identycznych fermionów w objętości $V=a^3$.

Poszukujemy $N(E)dE$ funkcji rozkładu liczby elektronów (fermionów) o energiach w przedziale $<E, E+dE>$.

Metoda: podobna jak dla fotonów CDCz- obliczymy liczbę fal stojących w objętości $V=a^3$. Tym razem fale stojące będą falami prawdopodobieństwa; będziemy żądać, żeby funkcje falowe elektronów (fermionów) znikwały na krawędziach pudła. Podobnie jak dla pola elektrycznego fotonów prowadzi to do warunku periodyczności:

$$\left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \text{ czyli } k^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 = \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Skwantowana energia kinetyczna związana jest z liczbą falową wzorem

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Przypomnienie CDCz:: Obliczenie $N(\nu)$ i $n(\nu) = N(\nu) / V$ (Rayleigh-Jeans)

Będziemy badali e-m fale stojące we wnętrzu CDCz. Przyjmiemy dla prostoty rachunków, że wnęka jest sześcianem o krawędzi a i objętości $V=a^3$. Na ściankach wnętrza fale e-m mają węzły, co narzuca warunki periodyczności tj. całkowitą liczbę $\lambda/2$ na odległości a .

Dla fali o wektorze falowym $\vec{k}$ ($k=2\pi/\lambda$) możemy napisać:

$$\begin{aligned} k_x &= k \cos \alpha & \lambda_x / 2 &= \lambda / 2 \cos \alpha \\ k_y &= k \cos \beta & \lambda_y / 2 &= \lambda / 2 \cos \beta \\ k_z &= k \cos \gamma & \lambda_z / 2 &= \lambda / 2 \cos \gamma \end{aligned} \quad \text{i}$$

Warunki periodyczności:

$$\frac{2a}{\lambda_x} = n_x, \quad \frac{2a}{\lambda_y} = n_y, \quad \frac{2a}{\lambda_z} = n_z,$$

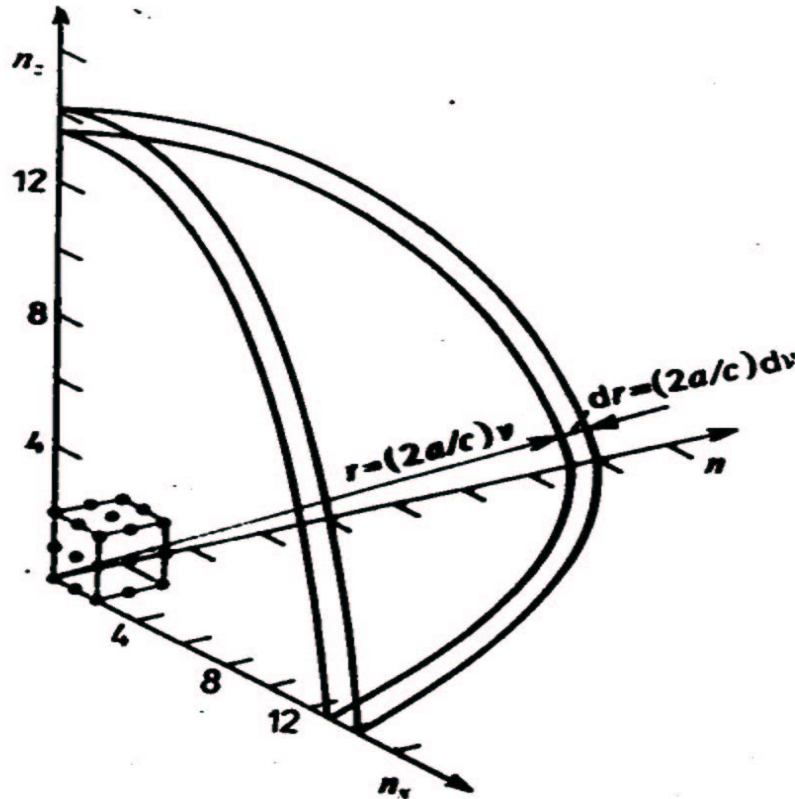
Wynika stąd, że:

$$\left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma) = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

Ponieważ cosinusy kierunkowe dodają się w kwadratach do jedynki dostajemy ostatecznie:

$$\frac{2a}{\lambda} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

Całkowanie w przestrzeni węzłów



$$r = \left(\frac{2a}{c} \right) v = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

$$r^2 dr = \left(\frac{2a}{c} \right)^2 v^2 dv$$

Ile fal o częstościach pomiędzy ν a $\nu + d\nu$ i różnych kierunkach wektorów falowych znajduje się we wnętrzu CDCz?

Należy policzyć liczbę węzłów w 1/8 warstwy kulistej o promieniu $r = \frac{2a}{c} \nu$ i grubości dr w przestrzeni węzłów n_i .

Wprowadźmy gęstość węzłów $N'(r)$

$$\text{Liczba węzłów : } \frac{4\pi r^2 N'(r) dr}{8} = \frac{\pi r^2 N'(r) dr}{2}$$

$$\text{Zamieniamy zmienne : } r^2 dr = \left(\frac{2a}{c}\right)^3 \nu^2 d\nu$$

Wobec tego liczba fal stojących o jednej polaryzacji w przedziale częstości $[\nu, \nu + d\nu]$ wynosi:

$$N(\nu) d\nu = N'(r) dV = \left(\frac{2a}{c}\right)^3 \frac{\pi}{2} \nu^2 d\nu, \text{ zaś uwzględniając obie polaryzacje: } N(\nu) d\nu = \frac{8\pi a^3}{c^3} \nu^2 d\nu$$

Ostatecznie gęstość fal stojących:

$$n(\nu) d\nu = \frac{N(\nu) d\nu}{V} = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu$$

Gaz Fermiego cd.

Dalsze obliczenia będą bardzo podobne jak dla fotonów CDCz.

$$N(E)dE = N(r)dr \quad \text{gdzie } r^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

$$N(r)dr = \frac{1}{8} (4\pi r^2) dr = \left| \begin{array}{l} dE = 2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} r dr \\ \sqrt{E} = \frac{\pi \hbar^2}{\sqrt{2ma^2}} r \end{array} \right|$$

oraz

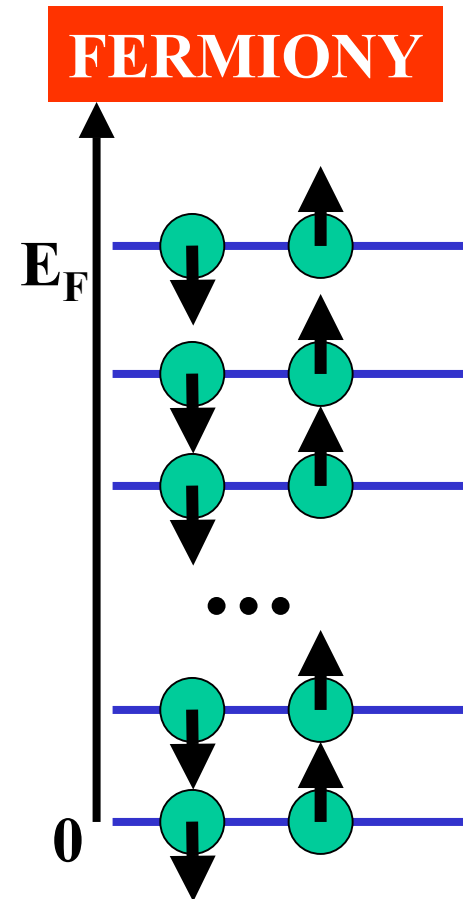
$$N(E)dE = \frac{m^{3/2} a^3}{\sqrt{2} \pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE$$

Gaz Fermiego cd.

Dla fermionów obowiązuje zakaz Pauliego: nie więcej niż dwa elektrony w stanie o tej samej energii.

Dla N elektronów w $T=0$ wszystkie stany od $E=0$ do $E=E_F$ (energii Fermiego) są wypełnione.

Dla bozonów w $T=0$ wszystkie cząstki znajdują się w stanie o zerowej energii.



Gaz Fermiego cd.

Energia Fermiego i liczba elektronów w $T=0$:

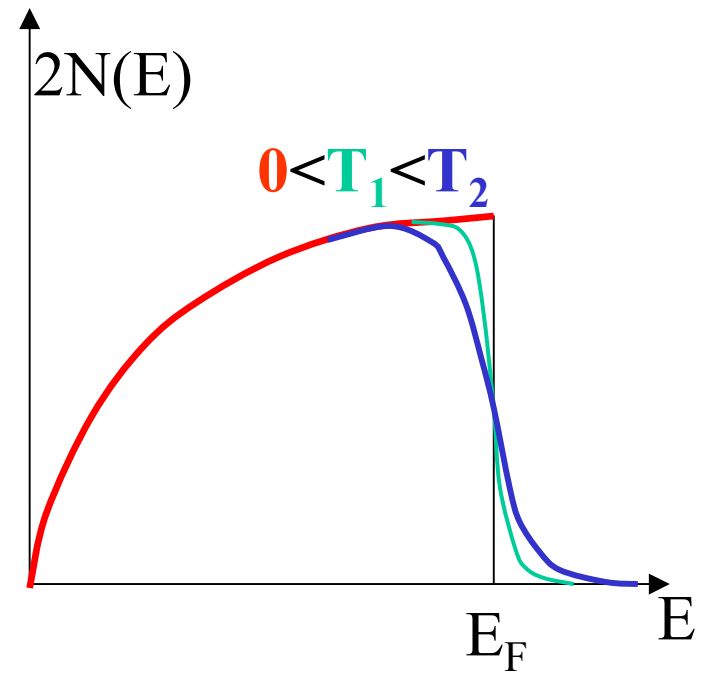
$$N = 2 \int_0^{E_F} N(E) dE = \frac{\sqrt{2} m^{3/2} V}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{(\sqrt{2})^3 m^{3/2} V}{3 \pi^2 \hbar^3} (E_F)^{3/2}$$

skąd:

$$E_F = (3)^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

Średnia energia fermionów:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F$$



Gaz Fermiego cd.

Zależność od temperatury:

$$N(E, T) dE = 2 N(E) F(E, T) dE$$

gdzie

$$F(E, T) = \frac{1}{e^{(E - E_0)/kT} + 1}$$

$$\text{oraz } E_0(T) = E_0 = E_F \text{ gdy } kT \ll E_F$$

Dla fotonów rozkład Plancka jest szczególnym przykładem rozkładu Bosego- Einsteina; zamiast funkcji F wstawiamy funkcję B :

$$B(E, T) = \frac{1}{e^{(E - E_0)/kT} - 1}$$

Gaz Fermiego cd.

Konsekwencje praktyczne: niemal swobodne **elektrony** przewodnictwa w metalu tworzą gaz Fermiego.

Gęstość elektronów przewodnictwa w metalu np. miedzi:

$$\left(\frac{N}{V}\right) \approx \frac{N_{Av} \rho_{Cu}}{A_{Cu}} \approx \sim 6 \cdot 10^{23} \frac{9}{64} \approx \sim 8 \cdot 10^{22} \text{ elektronów / cm}^3$$

Energia Fermiego:

$$E_F \approx 7 \text{ eV}$$

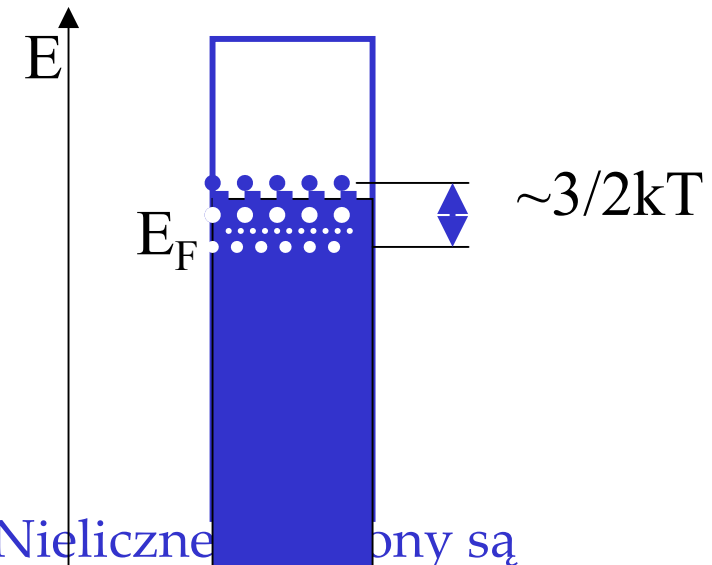
Średnia energia elektronów:

$$\langle E \rangle = 0.6 E_F = 4 \text{ eV}$$

Energia termiczna dla $T = 300 \text{ K}$:

$$3/2 kT = 3/2 \times 0.025 \text{ eV} \ll \langle E \rangle$$

Wszystkie stany poniżej E_F są zajęte. Nieliczne elektrony są powyżej.



Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa ciał stałych

Dalsze rozważania dotyczą przede wszystkim kryształów, które ze względu na symetrie dużo lepiej poddają się opisowi teoretycznemu niż ciała bezpostaciowe.

W ciałach stałych (kryształach, szklach) odległości międzyatomowe (stałe sieci w kryształach) są rzędu 0.1 nm czyli rzędu rozmiarów atomów. Funkcje falowe elektronów zewnętrznych (walencyjnych) z różnych atomów nachodzą na siebie. Elektrony zewnętrzne ulegają więc częściowemu uwspólnieniu.

Badania rentgenowskie pokazują, że poziomy elektronów wewnętrznych z rdzenia są bardzo mało wrażliwe na sąsiedztwo innych atomów.

Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa kryształów

Izolowane
atomy- elektrony
walencyjne



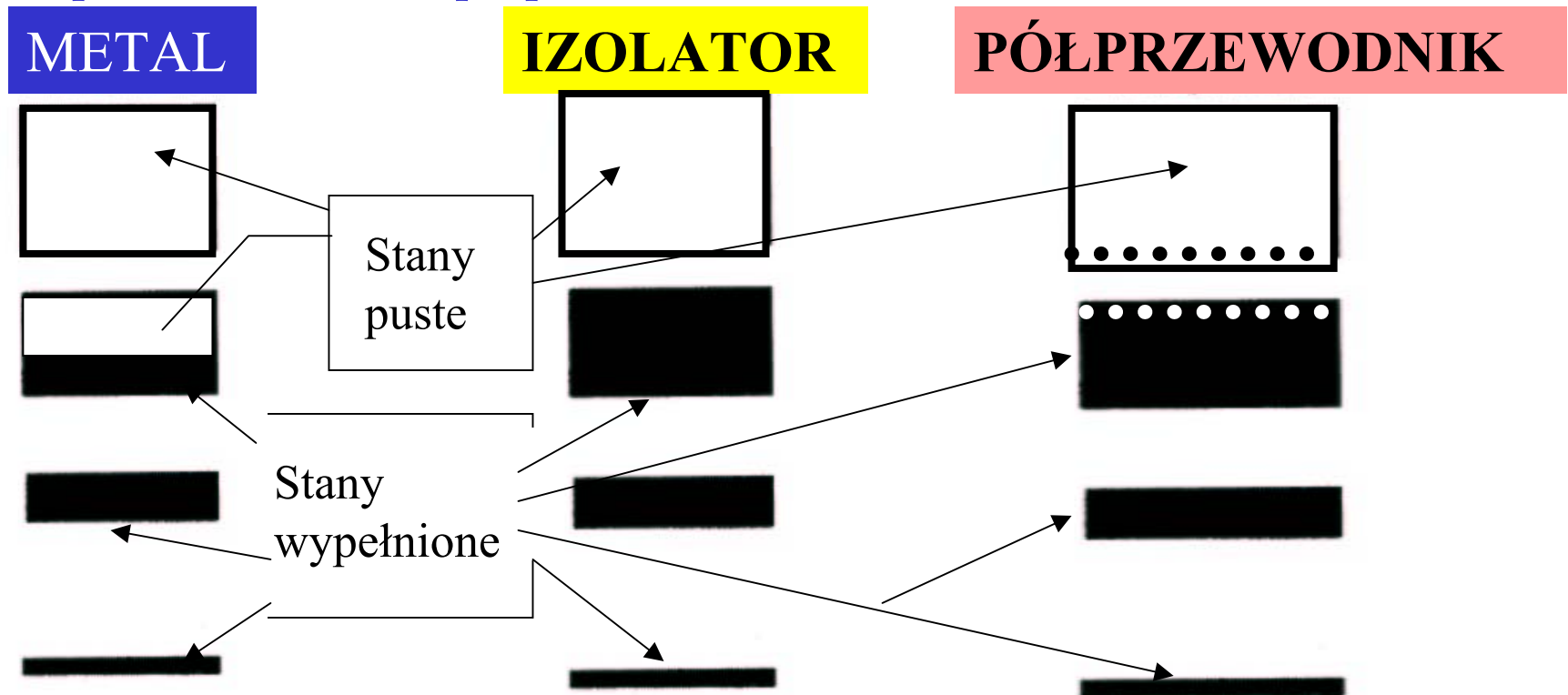
Zasada Pauliego
wymaga,
żeby poziomy
elektronów
walencyjnych atomów
bliskich sobie
przesunęły się tak, żeby
żadne dwa elektrony o
tych samych liczbach
kwantowych nie miały
tej samej energii. W ten
sposób w ciałach
stałych powstają pasma
wspólnych elektronów.

Atomy w kryształach



Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa ciał stałych

Zależnie od stanu obsadzenia pasm i wielkości przerw energetycznych między nimi ciała stałe są metalami (przewodnikami), półprzewodnikami lub izolatorami.



Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa kryształów

W kryształach wyróżniamy komórki elementarne-najmniejsze układy atomowe posiadające symetrie danej sieci krystalicznej.

Komórka elementarna składa się typowo z kilku atomów, ale są też sieci bardziej skomplikowane o kilkudziesięciu (10^2) lub nawet 10^6 atomów (kryształy białek).

Struktura pasmowa kryształu silnie zależy od liczby atomów w komórce elementarnej jak i od rodzaju wiązań międzyatomowych w sieci krystalicznej (*kryształy jonowe, atomowe, molekularne i metaliczne*).

Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa kryształów

Typy wiązań krystalicznych:

Jonowe: wiązania między pierwiastkami silnie elektroujemnymi (VI, VII grupa UO) a silnie elektrododatnimi (I, II grupa UO),

Atomowe: pierwiastki IV grupy UO, diament, szara cyna,

Molekularne: gazy szlachetne, cząsteczki o wiązaniach atomowych takie jak O_2 lub Cl_2 ,

Metaliczne: jony pierwiastków elektrododatnich tworzą sieć krystaliczną, zaś elektrony walencyjne-gaz elektronowy.

Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa kryształów

Zjawisko Halla 1879

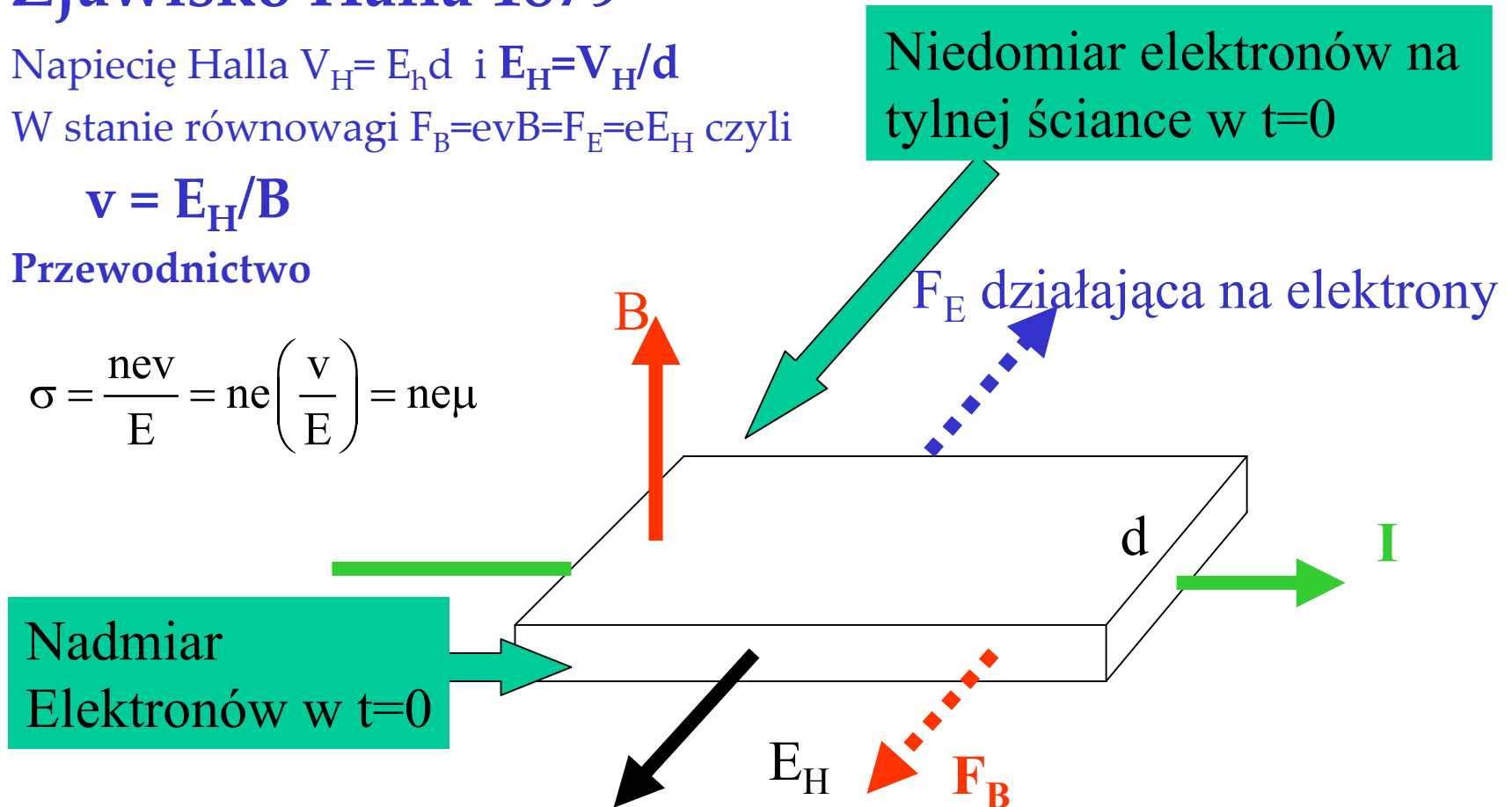
Napięcie Halla $V_H = E_H d$ i $E_H = V_H / d$

W stanie równowagi $F_B = evB = F_E = eE_H$ czyli

$$v = E_H / B$$

Przewodnictwo

$$\sigma = \frac{nev}{E} = ne \left(\frac{v}{E} \right) = ne\mu$$



Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa kryształów

Zjawisko Halla pozwala wyznaczyć znak ładunku i koncentrację nośników.

Dla wielu metali $n/N=1$

Dla niektórych metali zachodzi $n/N < 1$, a dla np. berylu, wapnia, wolframu napięcie Halla ma przeciwny znak- ładunki nośników są przeciwne.

Dla półprzewodników jest jeszcze zabawniej:

- Dla germanu domieszkowanego fosforem nośniki mają ujemne ładunki ale n/N jest znacznie mniejsze od jedności.
- Dla germanu domieszkowanego borem nośniki mają znak dodatni.

Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa kryształów

Rola domieszek w przewodnictwie półprzewodników

Przykład: fosfor (V gr. OU) w krzemie (IV gr. UO)

Fosfor ma 5 elektronów walencyjnych, krzem 4. Fosfor jest **donorem** elektronów.

Dodatkowy elektron walencyjny jest słabo związany na domieszce fosforowej; jego energia wiązania wynosi ok.. **45 meV** (~300 razy mniej niż w atomie wodoru).

Absorbując 45 meV foton uwalnia się, przechodzi do pasma przewodnictwa. Jest to możliwe np. na skutek wzbudzeń termicznych.

Si domieszkowane P jest półprzewodnikiem typu n.

Domieszkowanie Si pierwiastkami z III gr UO np. Al.

Tym razem na domieszce wiąże się dziura z pasma walencyjnego. Jej energia wiązania wynosi dla Al. ok. 57 meV. Al jest **akceptorem**.

Si domieszkowane Al. Jest półprzewodnikiem typu p.

Znak nośników jednoznacznie określa zjawisko Halla

Gaz Fermiego cd. Struktura pasmowa kryształów

Złącze p-n (L. Sosnowski)

W wyniku dyfuzji nośników większościowych w warstwie granicznej ustali się pole elektryczne od n do p.

Cały opór elektryczny przypada na cienki obszar warstwy granicznej.

Polaryzacja zaporowa: + na n.

Polaryzacja przewodnictwa: + na p.

Energia potencjalna dziur i elektronów :

