

Dokończenie zadania z poprzedniego tygodnia.

① Gaz swobodnych elektronów

Rozwiązać zagadnienie gazu N nieoddziaływających elektronów w $T=0$. Wypisać stan podstawowy dla tego układu i znaleźć energię stanu podstawowego. Policzyc ciśnienie tego gazu i porównać je z wynikiem dla gazu doskonałego. Co ten wynik mówi nam o stabilności gazu nieoddziaływających elektronów?

Rozwiązanie:

Zaskakująco dużo o własnościach elektronowych możemy dowiedzieć się na podstawie modelu gazu elektronowego bez oddziaływań. Rozważamy model swobodnych elektronów:

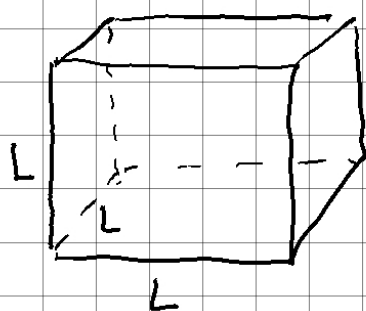
$$\hat{H} = \hat{T}_{ee} = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) =$$

$$= \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}\sigma}$$

Stany bazowe: $\{|\vec{k}, \sigma\rangle\}$, gdzie

$$\langle \vec{r}, \sigma' | \vec{k}, \sigma \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

W bazie $|\vec{k}, \sigma\rangle$ hamiltonian jest diagonalny.



Nakładamy periodyczne

warunki brzegowe, wtedy

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L} \vec{n}, \text{ gdzie } \vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$$

$$(n_i \in \mathbb{Z})$$

Porządkujemy naszą bazę jednoznacznie tak, że:

$$|\vec{k}_1, \uparrow\rangle, |\vec{k}_1, \downarrow\rangle, |\vec{k}_2, \uparrow\rangle, |\vec{k}_2, \downarrow\rangle, \dots,$$

$$\text{gdzie } \epsilon_{k_1} \leq \epsilon_{k_2} \leq \epsilon_{k_3} \leq \dots$$

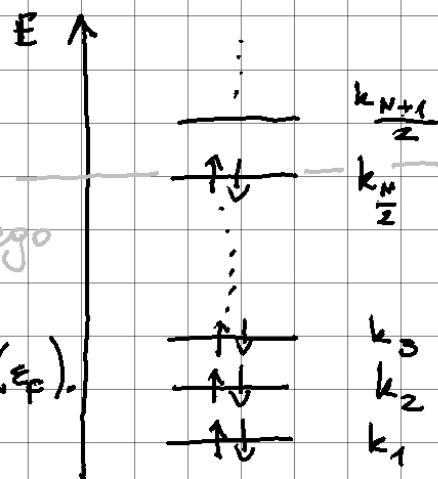
Zajmujemy się przypadkiem $T=0$.

Stan podstawowy:

$$|FS\rangle = a_{\vec{k}_1\uparrow}^+ a_{\vec{k}_1\downarrow}^+ a_{\vec{k}_2\uparrow}^+ \dots a_{\vec{k}_{N/2}\uparrow}^+ a_{\vec{k}_{N/2}\downarrow}^+ |0\rangle$$

↑
mone
Fermiego

Najwyższa energia stanu, poziom
który jest obsadzany
nazwany energią Fermiego (ϵ_F).



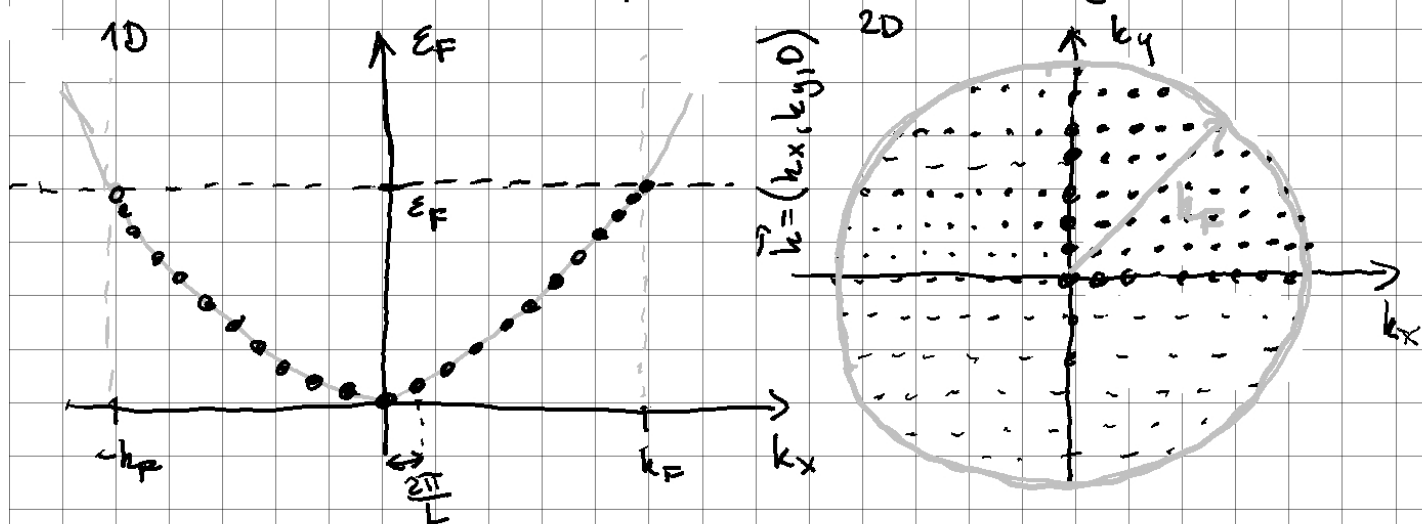
$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - \text{energia Fermiego}$$

$$k_F = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \epsilon_F} - \text{wektor falowy Fermiego}$$

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} - \text{długość fali Fermiego}$$

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

$$T_F = \epsilon_F / k_B - \text{temperatura Fermiego}$$



Bechcie nas interesowała sytuacja
w której $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, $n = \frac{N}{V} = \text{const.}$

Jest to tzw. granica termodynamiczna.

Wartość oczekiwana liczby σ_z spinu:

$$\hat{n}_{\vec{k}\sigma} |FS\rangle = \begin{cases} 1 |FS\rangle, & \text{gdy } |\vec{k}| \leq k_F \\ 0, & \text{gdy } |\vec{k}| > k_F \end{cases} = \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

$$N = \langle FS | \hat{N} | FS \rangle = \langle FS | \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{n}_{\vec{k}\sigma} | FS \rangle =$$

$$= \sum_{\sigma} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \theta(k_F - |\vec{k}|) \langle FS | FS \rangle =$$

granica termodynamiczna:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{\vec{k}} (\cdot) \xrightarrow[\substack{V \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty \\ n = \text{const}}]{\quad} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k (\cdot) \end{array} \right\}$$

$$= \underset{\substack{\uparrow \\ \text{degeneracja} \\ \text{spinowa}}}{2} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} 4\pi dk k^2 = \frac{V}{(2\pi)^3} 2 \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3,$$

degeneracja
spinowa

stad

$$n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

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

Na przykład dla miedzi (Cu):

$$n \approx 8.47 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3} \quad \left(\begin{array}{l} \text{pomiar przy} \\ \text{wykonywanie efektu} \\ \text{Halla} \end{array} \right)$$

Dla miedzi mamy:

$$k_F \approx 13.6 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} = 13.6 \text{ nm}^{-1}$$

$$\lambda_F \approx 0.46 \text{ nm}$$

$$\varepsilon_F \approx \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \approx 10^{-18} \text{ J} \approx 7 \text{ eV}$$

$$T_F \approx 10^5 \text{ K} \leftarrow \text{ekstremalnie wysokie } T!$$

$$v_F \approx 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} = 0.5\% \cdot c \leftarrow \text{właściwie nie-relatywistyczny}$$

Energia wewnętrzna:

$$E^{(0)} = \langle FS | \hat{H} | FS \rangle = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle FS | \hat{h}_{\vec{k}\sigma} | FS \rangle =$$

$$= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3k \, k^2 \Theta(k_F - k) =$$

$$= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{k_F} dk \, 4\pi k^4 = \frac{V}{5\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} k_F^5 =$$

$$= \frac{V}{5\pi^2} \varepsilon_F k_F^3 = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

$$\frac{E^{(0)}}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3}$$

czyli $E^{(0)} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} N^{5/3} V^{-2/3}$

Cisnienie:

$$p = - \left(\frac{\partial E^{(0)}}{\partial V} \right)_N = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \frac{2}{3} n^{5/3} = 10^6 \text{ atm!}$$

Dla gazu doskonałego:

$$p = \frac{N}{V} RT = nRT = 0, \text{ bo } T = 0$$

Wysokie ciśnienie wskazuje na niestabilność gazu elektronowego, należy uwzględnić oddziaływanie między elektronami.

Cisnienie zdegenerowanego gazu fermionów jest głównym czynnikiem zapobiegającym zapadaniu się białych karłów.

