

## Model jednowymiarowy (1D)

### Poziomy energetyczne i funkcja falowa stojąca

Elektron znajduje się na linii (0 – L)

$$\begin{aligned} V &= \infty & x < 0; x > L \\ V &= 0 & 0 \leq x \leq L \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = E_n \psi_n \quad \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \psi_n = 0$$

Warunki brzegowe

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

$$k^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}$$

Wartość własna energii

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

Wartość wektora falowego

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Funkcja falowa stojąca

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

## Energia i wektor falowy Fermiego – 1D

$T = 0 \text{ K}$ , poziomy powyżej  $E_F$  są puste;  $2n_F = N$

$$E_F = \frac{h^2}{8mL^2} n_F^2 = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{N}{2L} \right)^2 = \frac{h^2}{8m} \left( \frac{n_e}{2} \right)^2$$

Wektor falowy Fermiego  $k_F$

$$k_F^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2}$$

$$k_F = \frac{\pi N}{2L} = \frac{\pi}{2} n_e$$

Całkowita energia  $N$  elektronów

$$E_{cal} = 2 \sum_{n=1}^{n_F} E_n = 2 \frac{h^2}{8mL^2} \sum_{n=1}^{N/2} n^2 = 2 \frac{h^2}{8mL^2} \left[ \frac{1}{3} \left( \frac{N}{2} \right)^3 \right]$$

$$E_{cal} = \frac{1}{3} N E_F$$

## gęstość stanów – 1D

Liczba stanów elektronowych w jednostce przedziale energii

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

$$D(E) = 2 \frac{dn}{dE} = \frac{8mL^2}{h^2} \frac{1}{n} = \frac{2\sqrt{2}L}{h} \frac{m^{1/2}}{E^{1/2}}$$

## Model dwuwymiarowy (2D)

### Poziomy energetyczne i funkcja falowa stojąca

Elektron znajduje się w studni potencjału nieskończoności dwuwymiarowym

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + \frac{d^2 \psi_n}{dy^2} \right) = E_n \psi_n$$

Warunki brzegowe

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

Wartość własna energii

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

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2) = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2)$$

Funkcja falowa stojąca

$$\psi_n(x) = \left( \frac{2}{L} \right) \sin \left( \frac{n_x \pi}{L} x \right) \sin \left( \frac{n_y \pi}{L} y \right)$$

## Energia i wektor falowy Fermiego – 2D

$N$  to liczba całkowita elektronów. Każdy poziom ma  $2e$ .  $N/2$  to liczba możliwych poziomów czy możliwych zestawów dodatnich liczb całkowite  $n_x, n_y$ .

Ponieważ  $n_x > 0, n_y > 0$  liczba dwójek dodatnich całk. jest dana przez  $1/4$  pola okrągła o promieniu  $n_{\max}$

$$\frac{N}{2} = \frac{1}{4} (\pi n_{\max}^2) \quad n_{\max}^2 = \frac{2N}{\pi} = (n_x^2 + n_y^2)$$

Energia Fermiego  $E_F$

$$E_F = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n_{\max}^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \left( \frac{2N}{\pi} \right) = \frac{\pi \hbar^2}{m} \left( \frac{N}{L^2} \right) = \frac{\pi \hbar^2}{m} n_e$$

Wektor falowy Fermiego  $k_F$

$$k_F^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2} \quad k_F = \left( 2\pi \frac{N}{L^2} \right)^{1/2} = (2\pi n_e)^{1/2}$$

## gęstość stanów – 2D

Gęstość stanów

$$D(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{m L^2}{\pi \hbar^2} = \frac{4\pi m L^2}{h^2}$$

Gęstość stanów na jednostkę powierzchni

$$g(E) = \frac{D(E)}{S} = \frac{D(E)}{L^2} = \frac{m}{\pi \hbar^2} = \frac{4\pi m}{h^2}$$

## Energia całkowita – 2D

$$E_{cal} = \int_0^{E_F} D(E) E dE = \int_0^{E_F} \frac{m L^2}{\pi \hbar^2} E dE = \frac{m L^2}{2\pi \hbar^2} E_F^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{m L^2}{\pi \hbar^2} E_F \right) E_F$$

$$E_{cal} = \frac{1}{2} N E_F$$

## Model trójwymiarowy (3D)

### Poziom energetyczne i funkcja falowa stojąca

Elektron znajduje się w pudle o krawędzi  $L$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + \frac{d^2 \psi_n}{dy^2} + \frac{d^2 \psi_n}{dz^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_n = E_n \psi_n$$

Warunki brzegowe  $\psi(0) = \psi(L) = 0$

Wartość własna energii

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Funkcja falowa

$$\psi_n(x) = \left( \frac{2}{L} \right)^{3/2} \sin\left( \frac{n_x \pi}{L} x \right) \sin\left( \frac{n_y \pi}{L} y \right) \sin\left( \frac{n_z \pi}{L} z \right)$$

## Energia i wektor falowy Fermiego – 3D

... Liczba trójek dodatnich całk. jest dana przez 1/8 objętości kuli o promieniu  $n_{\max}$

$$\frac{N}{2} = \frac{1}{8} \left( \frac{4\pi n_{\max}^3}{3} \right) \quad n_{\max}^2 = \left( \frac{3N}{\pi} \right)^{2/3} = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Energia Fermiego  $E_F$

$$E_F = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n_{\max}^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^3 N}{\pi L^3} \right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$$

Wektor falowy Fermiego  $E_F$

$$k_F = \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$$

## gęstość stanów – 3D

Gęstość stanów

$$D(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} = \frac{8\sqrt{2} \pi m^{3/2} V}{h^3} E^{1/2}$$

Gęstość stanów na jednostkę objętości

$$g(E) = \frac{1}{V} D(E) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} = \frac{8\sqrt{2} \pi m^{3/2}}{h^3} E^{1/2}$$

## Energia całkowita – 3D

$$E_{cal} = \int_0^{E_F} D(E) E dE = \int_0^{E_F} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{V}{2\pi^2} E^{3/2} dE = \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{V}{2\pi^2} \frac{2}{5} E_F^{5/2} = \frac{3}{5} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{V}{3\pi^2} E_F^{3/2} E_F$$

$$E_{cal} = \frac{3}{5} N E_F$$

## funkcja falowa bieżąca płaska-3D

Warunki Borna-Karmana (warunki brzegowe periodyczne)

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L)$$

Funkcja fali bieżącej płaskiej

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{L^3}\right)^{1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \left(\frac{1}{V}\right)^{1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

z odpowiadającą energią

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

z składową wektora falowego  $\mathbf{k}$

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L} \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L} \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

## Gęstość elektronów swobodnych

*Liczba elektronów w jednostkę objętości (w  $1\text{cm}^3$  lub w  $1\text{m}^3$ ).*

**Dane są typ struktury i stała sieci a**

$$n_e = Z_e n_{at} = Z_e \frac{1 [\text{cm}^3]}{V_0} = Z_e \frac{1}{V_k/N} = Z_e \frac{N}{V_k} \quad [\text{elektronów/cm}^3]$$

Odstęp między atomami:

$$1\text{m}^3 = n_{at} \cdot d^3 \quad d = (1/n_{at})^{1/3}$$

$$d = (V_k / N)^{1/3}$$

**Dane jest gęstość substancji**

$$n_e = Z_e n_{at} = Z_e \frac{1}{V_o} = Z_e \frac{1}{V_{mol}/N_A} = Z_e \frac{1}{M_{mol}/\rho N_A} = Z_e \frac{N_A \rho}{M_{mol}}$$

Odstęp między atomami:

$$d = (M_{mol}/N_A \rho)^{1/3}$$

$$n_e(\text{Na}) = z_e \frac{N}{a^3} = 1 \frac{2}{(4.28 \cdot 10^{-8})^3} = 25.5 \cdot 10^{21} \text{ el/cm}^3 = 25.5 \cdot 10^{27} \text{ el/m}^3$$

$$d(\text{Na}) = \sqrt[3]{a^3/N} = \sqrt[3]{(4.28 \cdot 10^{-8})^3/2} = 3.4 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$

$$n_e(\text{Na}) = 1 \frac{6.023 \cdot 10^{23} \times 0.970}{23}$$

$$d(\text{Na}) = \sqrt[3]{23/(6.023 \cdot 10^{23} \times 0.970)}$$

**Liczba elektronów w objętości V**

$$N_e = n_e V$$

# Powierzchnia Fermiego (3D)

$$n_e = A \cdot 10^{21} \text{cm}^{-3}$$

$$n_e = A \cdot 10^{27} \text{m}^{-3}$$

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

$$p_F = \hbar k_F$$

$$v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n_e)^{1/3} = \frac{\hbar}{m} k_F$$

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

$$T_F = \frac{E_F}{k_B}$$

CGS

$$\hbar = 1.05 \cdot 10^{-27} \text{ erg.s}$$

$$k_B = 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erg/deg}$$

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-28} \text{ g}$$

$$E = [\text{erg}]$$

$$1\text{eV} = 1.6 \cdot 10^{-12} \text{ erg}$$

SI

$$\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/deg}$$

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$E = [\text{erg}]$$

$$1\text{eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

|    | $n_e$ ( $10^{27} \text{m}^{-3}$ ) | $k_F$ ( $10^{10} \text{m}^{-1}$ ) | $v_F$ ( $10^6 \text{m/s}$ ) | $E_F$ ( $10^{-12} \text{J}$ ) | $E_F$ (eV) | $T_F$ ( $10^3 \text{ }^\circ\text{K}$ ) |
|----|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------|-------------------------------|------------|-----------------------------------------|
| Na | 25.5                              | 0.91                              | 1.05                        | 5.02                          | 3.14       | 36.4                                    |

## Ciśnienie $p(V)$ i moduł sprężystości $B(V)$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_e)^{2/3} \qquad E_{cal} = \frac{3}{5} N E_F = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \frac{N^{5/3}}{V^{2/3}}$$

### Ciśnienie

$$p = - \frac{dE}{dV} = (-) \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} N^{5/3} \left( -\frac{2}{3} \right) \frac{1}{V^{5/3}} = \frac{2}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3} \frac{N}{V}$$

$$= \dots$$

### Moduł sprężystości

$$B = -V \frac{dp}{dV} = (-V) \frac{2}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} N^{5/3} \left( -\frac{5}{3} \right) \frac{1}{V^{7/3}} = \frac{2}{3} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3} \frac{N}{V}$$

$$= \dots$$