

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА
(для групп Е8-01,02,Т8-31,32,32а,32б,37,70а, 70б)

(Примечание. Для групп Т8-32,32а,32б курс называется «Теория конденсированного состояния»)

Лекция 1.

Электронная ветвь возбуждения в кристаллах. Плазменная модель непереходного металла. Гамильтониан электрон-ионной системы. Условие глобальной и локальной электронейтральности.

Принцип адиабатического приближения: индивидуальными степенями свободы электронов можно пренебречь в силу очень большого отношения масс ионов и электронов, при этом мы рассматриваем колебания ионов или атомов в системе покоя атомов.

В системе покоя электронов ионы практически покоятся, следовательно, ионная система должна рассматриваться как классическая.

Электронная система – квантовая, и поэтому методы описания электронной и ионной составляющих – разные. У электронов, как частиц с полуцелым спином, есть еще принцип Паули, который действует всегда. Перенос заряда в твердом теле обусловлен чисто электронным вкладом.

Будем анализировать металлы, но не все. Электроны, “растекаясь” по металлу, объединяют атомы в единое целое. Рассмотрим *простые* металлы, в которых нет “свободного места” для электронов ионного остова (то есть ионы имеют полностью заполненные электронные оболочки). Ферромагнетики таким образом мы не рассматриваем. Гамильтониан простого металла имеет вид

$$\hat{H} \cong \underbrace{\hat{T}_e + \hat{V}_{ee}} + \hat{T}_i + V_{ii} + \hat{V}_{ei}$$

Сумма кинетической энергии электронов и их взаимодействия между собой

$$\hat{T}_e = \sum_{\alpha=1}^{ZN} \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m}$$

$T_i = 0$, т.к. из принципа адиабатического приближения по отношению к электронам (ионы не движутся)

Это есть плазменная модель простого металла (такой вид гамильтониана). Отличие от истинной плазмы: в плазме положения ионов произвольны (\vec{R}_n).

Будем рассматривать простой одноатомный кристалл, Z- валентность; тогда, если число ячеек N, то число электронов e^- равно $Z \cdot N$.

$$\widehat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta}^{ZN} \frac{(-e)^2}{|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|}$$

$$\frac{V_i}{V_0} \leq 10\% \quad V_i - \text{объем иона} \quad V_0 - \text{объем ячейки}$$

Следовательно, расстояние между ионами (или атомами) много больше размеров самих ионов $a \gg r_i$

$$V_{ii} = \frac{1}{2} \sum_{n \neq n_1=1}^N \frac{(+Ze)^2}{|\vec{R}_n - \vec{R}_{n_1}|}$$

Ионы друг по отношению к другу ведут себя как точечные заряды.

$$\widehat{V}_{ei} = \sum_{\alpha=1}^{zN} \sum_{n=1}^N \widehat{V}_{ei}(\vec{r}_\alpha - \vec{R}_n)$$

Таким образом, всегда есть параметр V_{ei} - амплитуда взаимодействия конкретных ионов

и электронов e^- , которая разная в каждом конкретном случае. Если расстояние между ионами и электронами большое, то они друг относительно друга как точечные объекты, и взаимодействие – кулоновское, но возможны и «лобовые» столкновения, тогда взаимодействие зависит от внутренней структуры иона.

В силу полноты набора экспоненциальных функций типа плоских волн любую функцию можно разложить в ряд Фурье.

$$\widehat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta=1}^{zN} e^2 \underbrace{\sum_{\vec{q}} \frac{4\pi}{\Omega q^2} e^{i\vec{q}(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)}}_1 \frac{1}{|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|}$$

$$\Phi(\vec{R}) = \sum_{\vec{q}} \Phi(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{R}}$$

(Разложение функции в ряд Фурье:

$$\Phi(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\vec{R} e^{-i\vec{q}\vec{R}} \Phi(\vec{R})$$

$$V_{ii} = \frac{1}{2} \sum_{n \neq n_1=1}^N z^2 e^2 \sum_{\vec{q}} \frac{4\pi}{\Omega q^2} e^{i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_{n_1})}$$

$$\hat{V}_{ei} = \sum_{\alpha=1}^{zN} \sum_{n=1}^N \sum_{\vec{q}} V_{ei}(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r}_\alpha - \vec{R}_n)}$$

“Операторность” \hat{V}_{ei} заключена в координатах электронов.

Вклад дают $q \sim$ обратному расстоянию между частицами.

Чем больше расстояние между частицами, тем меньшие q надо учитывать, и наоборот, чем ближе находятся частицы, тем большие волновые векторы дают вклад в сумму, как неосциллирующие экспоненты.

Система металла (как и любая устойчивая макроскопическая система в целом) электронейтральна.

Электроны могут (в принципе) собраться все в одной части металла, тогда она будет заряжена отрицательно, а кусок (область), где электронов нет – положительно. Конечно, в реальности такого никогда не происходит. Чтобы избежать этой возможности при описании, потребуем локальной электронейтральности (чтобы нейтральными был любой, даже быть может, микроскопически малый объем).

Тогда количество “-” и “+” в любом объемчике должно быть одинаково – распределение ионного заряда и электронной плотности должны быть однородными.

$$\Phi(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\vec{R} e^{-i\vec{q}\vec{R}} \Phi(\vec{R}) \xrightarrow{\vec{q} \rightarrow 0} \Phi(0) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\vec{R} \Phi(\vec{R}) \cdot 1 - \text{среднее}$$

значение $\Phi(\vec{R})$.

Таким образом, во всех Фурье – разложениях нужно выделить вклад Фурье – компонент с $\vec{q} \rightarrow 0$. Но этот вклад аномален (q стоит в знаменателе).

$$\lim_{q \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta=1}^{zN} \frac{4\pi}{\Omega q^2} \cdot 1 + \frac{1}{2} \sum_{n \neq n_1=1}^N \frac{4\pi z^2 e^2}{\Omega q^2} \cdot 1 + \sum_{\alpha=1}^{zN} \sum_{n=1}^N V_{ei}(q \rightarrow 0) \cdot 1 \right\}$$

$$V_{ei}(\vec{q} \rightarrow 0) \approx \frac{4\pi(-e)(+Ze)}{\Omega q^2} + \frac{b}{\Omega} (q^2)^0 + Aq^2 + Bq^4 + \dots$$

В этой формуле последние три слагаемые – некулоновские члены;

первый член самый главный: $q \rightarrow 0 \Rightarrow$ расстояния большие \Rightarrow это кулоновское взаимодействие (конкретный вид).

Фурье – компонента электрон-ионного взаимодействия зависит от q^2 , т.е. входят только четные степени, из-за вещественности потенциала.

При $q \rightarrow 0$ все слагаемые, начиная с Aq^2 , равны нулю.

Тогда получим предел:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta=1}^{ZN} 1 + Z^2 \frac{1}{2} \sum_{n \neq n_1=1}^N 1 - Z \sum_{\alpha=1}^{ZN} \sum_{n=1}^N 1 \right\} + \frac{b}{\Omega} \sum_{\alpha=1}^{ZN} \sum_{n=1}^N 1 + \bar{0}(q^2)$$

В силу обменного отталкивания налетающего электрона (это главная часть некулоновского взаимодействия) $b > 0$!

$b = 0$ - для водорода в металлической форме, так как в этом случае ионом является протон, и налетающий электрон не взаимодействует с другими электронами ионного остова. Но металлический водород при обычных условиях не существует.

$$\sum_{\alpha \neq \beta=1}^{ZN} = (ZN)^2 - ZN ; \quad \sum_{n \neq n_1=1}^N 1 = N^2 - N ; \quad \sum_{\alpha=1}^{ZN} \sum_{n=1}^N = ZN \cdot N$$

Таким образом,

$$\{\dots\} = \frac{Z^2 N^2}{2} - \frac{ZN}{2} + \frac{Z^2 N^2}{2} - \frac{Z^2 N}{2} - Z^2 N^2 = -\frac{N}{2} (Z^2 + Z)$$

Получаем

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\Omega_0 \mathcal{N}} \cdot \frac{\mathcal{N}}{2} (-Z^2 - Z) + \frac{b}{\Omega_0 \mathcal{N}} ZN^2 + \bar{0}(q^2) \approx (\dots) N^{2/3} + \frac{b}{\Omega_0} ZN \approx \frac{b}{\Omega_0} ZN$$

Остался вклад только от одной ячейки (в первом слагаемом), второе слагаемое содержит $N \sim 10^{24}$.

Первое слагаемое $\sim \frac{1}{q^2}, q \rightarrow 0$; второе слагаемое $\sim N$ — макроскопическое число.

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sim \frac{1}{q_{\min}^2} \sim L^2 \sim N^{2/3} \quad (!)$$

$q = 0$ отвечает бесконечная длина волны; максимальная длина волны равна размеру кристалла L .

$$q_{\min} \sim \frac{2\pi}{\lambda_{\max}} \sim \frac{1}{L} \sim \frac{1}{N^{1/3}} \quad (\text{всего ячеек } N, L - \text{линейный размер})$$

Второе слагаемое всегда \gg первого в $N^{1/3}$ раз.
Мы использовали трехмерность системы.

Для плоского (двумерного) кристалла первый член уже нельзя было бы выкинуть, следовательно, условие локальной электронейтральности систем пониженной размерности требует отдельного рассмотрения.

Таким образом, с макроскопической точностью,

$$\widehat{H} \approx \widehat{T}_e + \widehat{V}_{ee} + V_{ii} + \widehat{V}_{ei} \approx \widehat{T}_e + \left(\widehat{V}_{ee} + V_{ii} + \widehat{V}_{ei} \right) \Big|_{\vec{q} \neq 0} + \frac{b}{\Omega_0} ZN$$

В скобках собраны слагаемые, отвечающие за неоднородность распределения заряда (бесконечные вклады гасятся в силу электронейтральности).

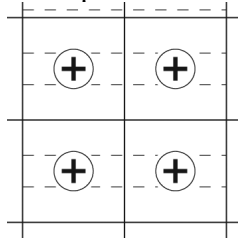
Некулоновость электрон-ионного взаимодействия связана с конечным размером ионов.

Рассмотрим ион-ионное взаимодействие.

$$E_i \equiv V_{ii} \Big|_{q \neq 0} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi z^2 e^2}{\Omega q^2} \sum_{n \neq n_1} e^{i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_{n_1})}$$

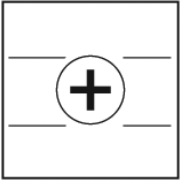
При фиксированных n, n_1 учитываются q , не превышающие $\frac{1}{|\vec{R}_n - \vec{R}_{n_1}|}$. Таким

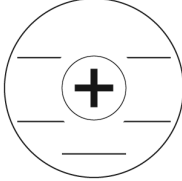
конкретным вычислением занимался Эвальд. Суммарный ионный заряд погашается электронами - локальная электронейтральность; заменим нашу систему эквивалентной:

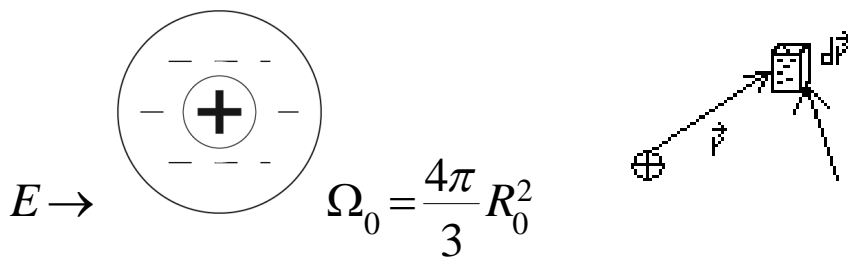


Ионная решетка, погруженная в электронную жидкость. Эта система

чисто вспомогательная; мы предполагаем, что e^- - жидкость остается неоднородной, несмотря на присутствие ионов.

$\approx N \cdot$  \approx Суммарный заряд и дипольный момент равны нулю.

$\approx N \cdot$  (заменили на сферическую ячейку того же объема - мы полностью разбили взаимодействие на N вкладов одной ячейки; от формы ничего не зависит)



Выделенный электронный заряд взаимодействует с ионом и с окружающей электронной жидкостью;

$$E_1 = \int_{\Omega_0} \frac{(+Ze) \left(d\vec{r} \frac{-Ze}{\Omega_0} \right)}{r} = -\frac{Z^2 e^2}{\Omega_0} \int_0^{R_0} \frac{1}{r} 4\pi r^2 dr = -\frac{Z^2 e^2}{\Omega_0} 4\pi \underbrace{\int_0^{R_0} dr \cdot r}_{\frac{R_0^2}{2}}$$

Интегрируем по всей ячейке.

$$E_1 = -\frac{Z^2 e^2}{\frac{4\pi}{3} R_0^3} \cdot \frac{4\pi}{2} \cdot R_0^2 = -\frac{3 Z^2 e^2}{2 R_0} \quad (\text{При расчете считаем, что ионы точечные!})$$

Для вспомогательных электронов не надо учитывать неточность. Этот электронный заряд взаимодействует также и с остальными электронами из сферы. По теореме Гаусса, заряд, распределенный по сфере, эквивалентен точечному заряду в центре;

$$E_2 = \int_{\Omega_0} \frac{\left(-\frac{Ze}{\Omega_0} d\vec{r} \right) \left(-\frac{Ze}{\Omega_0} \frac{4\pi}{3} r^3 \right)}{r} = +\frac{Z^2 e^2}{\Omega_0^2} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot 4\pi \underbrace{\int_0^{R_0} dr \frac{r^2 \cdot r^3}{r}}_{\frac{R_0^5}{5}}$$

$$E_2 = \frac{Z^2 e^2}{\left(\frac{4\pi}{3} \right)^2 R_0^6} \frac{(4\pi)^2 R_0^5}{3 \cdot 5} = +\frac{3 Z^2 e^2}{5 R_0}$$

$$E = E_1 + E_2 = 3 \frac{Z^2 e^2}{R_0} \underbrace{\left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{5} \right)}_{-\frac{3}{10}} = -\frac{9 Z^2 e^2}{10 R_0} ; \quad \text{Энергия системы оказалась}$$

отрицательной. Таким образом, система с полностью скомпенсированным (погашенным) зарядом устойчива.

Лекция 2.

Энергия ионной решетки. Представление чисел заполнения для электронного газа. Операторы рождения и уничтожения. Антиккоммутатор. Кинетическая энергия электронов.

$$E_i \approx -N \frac{9 Z^2 e^2}{10 R_0}$$

Вернемся к полному гамильтониану системы.

$$\widehat{H} = \widehat{T}_e + \widehat{V}_{ee} + \widehat{T}'_i + V_{ii} + \widehat{V}_{ei} \rightarrow \widehat{T}_e + \left(\widehat{V}_{ee} + V_{ii} + \widehat{V}_{ei} \right) \Big|_{\vec{q} \neq 0} + \frac{b}{\Omega_0} ZN$$

$T_i = 0$ - принцип адиабатического приближения по отношению к электронам. \rightarrow с

учетом электронейтральности (глобальной и локальной). $\left(\widehat{V}_{ee} + V_{ii} + \widehat{V}_{ei} \right) c$

точностью $\sim 10^{-8} \approx N^{-1/3}$. $b > 0$, кроме случая, когда ион-протон, а так - b - отвечает за отталкивание (положительная величина).

При условии, что *полный* заряд всех ионов погашен (иначе система бы разлетелась),

$$E_i \equiv V_{ii} \Big|_{q \neq 0} = \frac{1}{2} \sum_{n \neq n_1=1}^N \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi Z^2 e^2}{\Omega q^2} e^{i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_{n_1})} \sim \dots \approx -\frac{9 Z^2 e^2}{10 R_0} \cdot N$$

автоматически получили минус для такой системы.

Введем систему единиц:

$$\Omega_0 = \frac{4\pi}{3} R_0^3 = Z \cdot \frac{4\pi}{3} r_e^3 \rightarrow R_0 = r_e Z, \quad Z \text{ - на каждый ион в ячейке приходится}$$

Z электронов.

Тогда r_e зависит от электронной плотности. Обезразмерим это выражение, введя борковский радиус:

$$E_i \approx -\frac{9 e^2}{10 r_e} \cdot Z^{5/3} \cdot N \approx -\frac{9 e^2}{10 a_b r_s} \cdot Z^{5/3} \cdot N$$

$$r_e = a_b r_s; \quad a_b = \frac{\hbar^2}{m e^2} \quad \text{Здесь борковский радиус является только}$$

единицей размерности длины.

Энергию удобно измерять в, естественных единицах, связанных с энергией атома водорода, так называемых ридбергах ($\frac{e^2}{a_0} = 2Ry$; $\frac{me^4}{2\hbar^2} = Ry$).

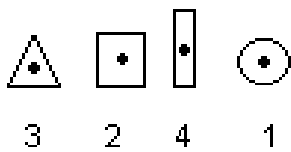
. Таким образом $E_i \approx -\frac{1,8}{r_s} Z^{5/3} N \cdot Ry$, получили числовой коэффициент,

зависящий только от электронной плотности.

Результат расчета по методу Эвальда для гранецентрированной кубической решетки:

$$E_i \approx -\frac{1,792}{r_s} Z^{5/3} N \cdot Ry.$$

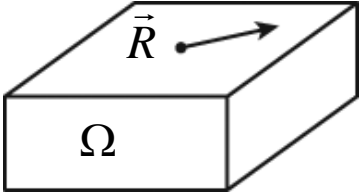
Для разной формы элементарных решеток эта энергия, конечно, несколько отличается:

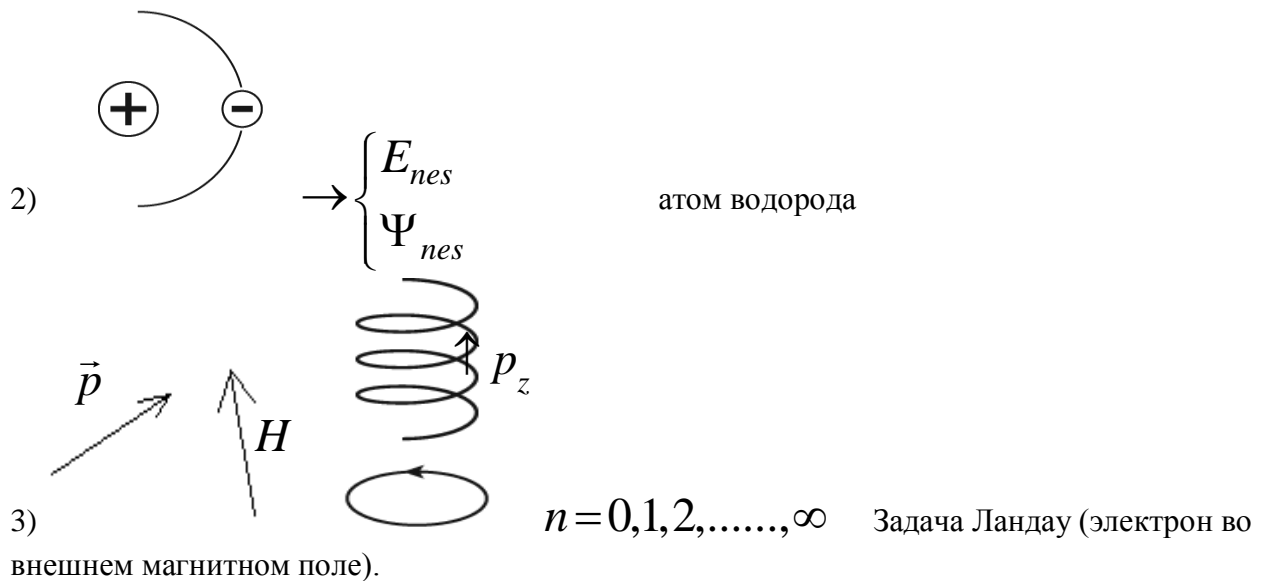


. Чем ближе к сферической форме, тем лучше работает наше приближение:

$$\widehat{T}_e = \sum_{\alpha=1}^{ZN} \frac{\widehat{P}_\alpha^2}{2m}, \quad \widehat{P}_\alpha = -i\hbar\nabla_\alpha, \quad \alpha - \text{номер электрона.}$$

Нам необходимо теперь где-то взять волновую функцию (многоэлектронную!), и посчитать диагональный элемент кинетической энергии. Получить многочастичную функцию мы точно не можем, поэтому надо делать какое-то приближение. Сохраняя число электронов неизменным, представим кинетическую энергию как совокупность одноэлектронных вкладов. Одноэлектронная задача решается точно, например, задача о состоянии свободного электрона в заданном объеме:

1)  $\rightarrow \Psi_k = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}}, \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Квантовым числом является волновой вектор \vec{k} .



Вместо суммы по частицам возникает сумма по состояниям:

$$\hat{T}_e = \sum_{\substack{k_1 \\ k_2}} \underbrace{\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)_{k_1 k_2}}_{\text{матричный элемент}} \hat{a}_{k_1}^+ \hat{a}_{k_2}, \text{ где } \hat{a}_{k_1}^+ \text{ и } \hat{a}_{k_2} \text{ операторы уничтожения и рождения}$$

одного электронного состояния.

Все возможные числа заполнения электронов принимают всего два значения :0 и 1 – в отличие от бозонных систем.

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)_{\substack{\vec{k}_1 \sigma_1 \\ \vec{k}_2 \sigma_2}} = \delta_{\sigma_2 \sigma_1} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \right) \equiv \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \varepsilon_{k_1}$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 = +1$$

$$\sigma_1 = +1, \sigma_2 = -1$$

$$\sigma_1 = -1, \sigma_2 = +1$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 = -1$$

$$\hat{a}_i \Psi_{n_i} = n_i \Psi_{(1-n_i)} - \text{введем оператор поглощения таким образом (он может}$$

действовать только на состояние с $n_i = 1$, тогда мы получим Ψ_0); так определенное действие оператора автоматически учитывает «фермиевость» частиц.

$$\widehat{a}_i^+ \Psi_{n_i} = (1-n_i) \Psi_{(1-n_i)} \quad \text{аналогично.}$$

$$\widehat{a}_i^+ \widehat{a}_i \Psi_{n_i} = n_i \widehat{a}_i^+ \Psi_{(1-n_i)} = n_i (1-1+n_i) \Psi_{n_i} = n_i \Psi_{n_i}, \quad n_i \text{ не в квадрате, т.к. } n_i$$

принимает значение 0, 1; можно оставить первую степень.

Оператор $\left(\widehat{a}_i^+ \widehat{a}_i \right)$ является диагональным по отношению к любому состоянию и

собственным значением имеет $n_i \Rightarrow$ можно записать:

$$\widehat{N}_i \Psi_{n_i} \equiv \left(\widehat{a}_i^+ \widehat{a}_i \right) \Psi_{n_i} = n_i \Psi_{n_i}; \quad \widehat{N}_i - \text{оператор числа частиц.}$$

$$\widehat{a}_i^+ \widehat{a}_i \Psi_{n_i} = (1-n_i) \left(\widehat{a}_i \Psi_{(1-n_i)} \right) = (1-n_i)(1-n_i) \Psi_{1-(1-n_i)} = (1-n_i) \Psi_{n_i}$$

Если сложить эти два равенства, получим

$$\left\{ \widehat{a}_i \widehat{a}_i^+ \right\} \equiv \widehat{a}_i \widehat{a}_i^+ + \widehat{a}_i^+ \widehat{a}_i = 1 - \text{антикоммутатор.}$$

Для баз. операторов получим коммутатор

$$\left\{ \widehat{a}_i \widehat{a}_i \right\} = \left\{ \widehat{a}_i^+ \widehat{a}_i^+ \right\} = 0; \quad \left\{ \widehat{a}_i \widehat{a}_i^+ \right\} = \delta_{ij}$$

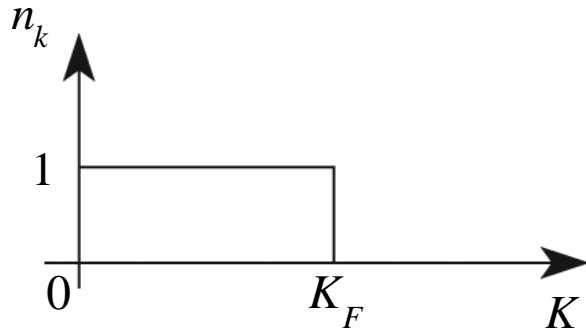
$$\text{Матричный элемент: } \left(\frac{\widehat{p}}{2m} \right)_{k_1 k_2} = \sum \int d\tau \Phi_{k_1}^+ (\dots, \tau) \frac{\widehat{p}}{2m} \Phi_{k_2} (\dots, \tau) \widehat{A}(\tau)$$

$$\widehat{A} = \sum_{\alpha} \widehat{A}(\vec{r}_{\alpha}) = \sum_{k_1} \left(\widehat{A}(\vec{r}) \right)_{k_1 k_2} \widehat{a}_{k_1}^+ \widehat{a}_{k_2}$$

Из трех задач (одноэлектронных) нам подходит только свободный электрон в металле, хотя такой подход формально подходит для всех трех случаев.

$$n_k = \begin{cases} 1, & 0 \leq K \leq K_F \\ 0, & K > K_F \end{cases} \quad \text{Изначально подразумевается } T = 0. \quad K_F - \text{фермиевский}$$

K , определяется числом e^- (ZN).



$$\begin{aligned} K_1 &\rightarrow \vec{K}_1, \sigma_1 \\ K_2 &\rightarrow \vec{K}_2, \sigma_2 \end{aligned} \quad \text{Волновой вектор и спин -}$$

два квантовых числа. Тогда волновая функция $\Phi_{k_1}(\dots, \tau) \equiv \frac{e^{i\vec{k}_1 \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_1}(\xi)$;

$$\hat{\chi}_{\sigma}(\xi) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \sigma = +1 \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \sigma = -1 \end{cases} \quad \text{Спиновые волновые функции образуют полный}$$

ортонормированный набор (т.к. они собственные функции оператора спина). Здесь σ меряется в единицах $\frac{\hbar}{2}$; поэтому пишем не $\frac{1}{2}$, а 1. ξ - номер элемента в строке или столбце.

$$\Phi_{k_2}(\dots, \tau) \equiv \frac{e^{i\vec{k}_2 \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_2}(\xi)$$

$$\hat{T}_e = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)_{\substack{\vec{k}_1 \sigma_1 \\ \vec{k}_2 \sigma_2}} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2}^- ;$$

Вычислим матричный элемент кинетической энергии

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)_{\substack{\vec{k}_1 \sigma_1 \\ \vec{k}_2 \sigma_2}} \equiv \sum_{\xi} \int d\vec{r} \frac{e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_1}^+(\xi) \frac{\hat{p}^2}{2m} \cdot \frac{e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_1}(\xi)$$

$$\hat{\chi}_{\sigma}^+(\xi) = \{(1,0) \text{ или } (0,1)\}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)_{\substack{\vec{k}_1 \sigma_1 \\ \vec{k}_2 \sigma_2}} &= \underbrace{\left\{ \sum_{\xi} \hat{\chi}_{\sigma_1}^+(\xi) \hat{\chi}_{\sigma_2}^+(\xi) \right\}}_{\delta_{\sigma_1 \sigma_2}} \cdot \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) e^{i\vec{k}_1 \vec{r}} = \\
&= \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}} \left(\Delta e^{i\vec{k}_2 \vec{r}} \right) = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \underbrace{\int d\vec{r} e^{-i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \vec{r}}}_{\delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1}} \\
&= (\vec{k}_2)^2 e^{i\vec{k}_2 \vec{r}} = -\vec{k}_2^2 e^{i\vec{k}_2 \vec{r}}
\end{aligned}$$

Таким образом, для оператора кинетической энергии во вторичном квантовании получаем:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)_{\substack{\vec{k}_1 \sigma_1 \\ \vec{k}_2 \sigma_2}} = \delta_{\sigma_2 \sigma_1} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \right) \equiv \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \varepsilon_{k_1},$$

где $\varepsilon_{k_1} \equiv \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$.

$$\sum_{\xi} \hat{\chi}_{\sigma_1}^+(\xi) \hat{\chi}_{\sigma_2}^+(\xi) = \begin{pmatrix} a^* & b^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = a^* c + b^* d = \begin{cases} (1,0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1+0=1, \\ (1,0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0+0=0, \\ (0,1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0+0=0, \\ (0,1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0+1=1, \end{cases}$$

$$\begin{aligned} & \sigma_1 = \sigma_2 = +1 \\ \text{при} & \sigma_1 = +1, \sigma_2 = -1 \\ & \sigma_1 = -1, \sigma_2 = +1, \text{соответственно.} \\ & \sigma_1 = \sigma_2 = -1 \end{aligned}$$

Продолжим вычисление кинетической энергии.

$$\widehat{T}_e = \sum_{\alpha} \dots = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \varepsilon_{k_1} \hat{a}_{\vec{k}_1}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{k}_2}^{\dagger} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_k \hat{a}_{\vec{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{k}}^{\dagger} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon_k \widehat{N}_{\vec{k}}^{\dagger}$$

Обозначим,

$$|\{n\}\rangle \equiv |n_1, n_2, \dots, n_{N_e}\rangle$$

Окончательно выражение для кинетической энергии электронов примет вид

$$\begin{aligned} E_e^{(0)} & \equiv \langle \{n\} | \sum_{\vec{k}} \varepsilon_k \widehat{N}_{\vec{k}}^{\dagger} | \{n\} \rangle = \sum_{\vec{k}_1 \sigma} \varepsilon_k \underbrace{\langle \{n\} | \widehat{N}_{\vec{k} \sigma} | \{n\} \rangle}_{\langle n_1, n_2, \dots, n_{k-1}, n_k, n_{k+1}, \dots |} = \\ & \underbrace{\text{произвед.1}}_{\sum_{\vec{k}} \varepsilon_k \langle \{n\}^k, \{n\}^k \rangle} \underbrace{n_k \langle n_k | n_k \rangle = 1}_{\widehat{N}_{\vec{k} \sigma} | n_k \rangle} = \sum_{\vec{k}_1 \sigma} \varepsilon_k n_k = \\ & = \left(\sum_{\sigma} 1 \right) \left(\underbrace{\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \cdot \varepsilon_k \cdot n_k}_{\sum_{\vec{k}} ; d\vec{k} = k^2 dk d\Omega_{\vec{k}}} \right) = 2 \cdot \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \left(\int d\Omega_{\vec{k}} \right) \int dk k^2 \varepsilon_k n_k = \\ & = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_F} dk \cdot k^2 \cdot \frac{\pi^2 k^2}{2m} \cdot 1 = 2 \cdot \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \cdot \frac{\pi^2}{2m} \cdot \frac{k_F^5}{5} = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{5} \frac{\pi^2 k_F^5}{2m} \end{aligned}$$

Лекция 3.

Оператор числа частиц. Невзаимодействующий электронный газ, его основные характеристики, уравнение состояния. Одночастичные возбуждения в электронном газе металла.

Итак,

$$E_e^{(0)} = \langle \{n\} | \sum_{\vec{k}, \sigma} \widehat{N}_{\vec{k}} \varepsilon_k | \{n\} \rangle = 2 \cdot \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \cdot \frac{1}{5} \cdot \frac{\pi^2 k_F^5}{2m}$$

Введем теперь оператор числа электронов

$$\widehat{N}_e = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \sigma_1 \\ \vec{k}_2 \sigma_2}} (\delta(\vec{r} - \vec{r}_1))_{\vec{k}_1 \sigma_1} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2}^- ;$$

При этом мы опять воспользовались вторичным квантованием.
 $N_e = ZN$ - оператор числа электронов.

Вычислим, как и раньше, матричный элемент:

$$\begin{aligned} (\delta(\vec{r} - \vec{r}_1))_{\vec{k}_1 \sigma_1} &= \sum_{\vec{k}_2 \sigma_2} \int d\vec{r}_1 \frac{e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}_1}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_1}(\xi) \delta(\vec{r} - \vec{r}_1) \frac{e^{i\vec{k}_2 \vec{r}_1}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_2}(\xi) = \\ &= \left[\sum_{\xi} \hat{\chi}_{\sigma_1}^+(\xi) \hat{\chi}_{\sigma_2}(\xi) \right] \underbrace{\frac{1}{\Omega} \int d\vec{r}_1 e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \vec{r}_1} \delta(\vec{r} - \vec{r}_1)}_{\frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \vec{r}}}{\Omega}} \end{aligned}$$

Теперь оператор числа электронов принимает вид

$$\hat{n}_e = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \sigma_1 \\ \vec{k}_2 \sigma_2}} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \vec{r}}}{\Omega} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2}^- = \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \vec{r}}}{\Omega} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2}^- ;$$

$$n_e = \langle \{n\} | \hat{n}_e | \{n\} \rangle = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma}} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}}}{\Omega} \langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma} | \{n\} \rangle (=)$$

Действуя оператором \hat{a}_{k_2} на набор состояний, мы можем уменьшать n_{k_2} на 1 только внутри ферми-сферы; Затем с помощью оператора $\hat{a}_{k_1}^+$ можем увеличить n_{k_1} на 1 только если k_1 - снаружи сферы или единственное уменьшенное состояние внутри, то есть k_2 . Если электрон «родится» вновь внутри сферы, получим исходное состояние. Чтобы матричный элемент не равнялся нулю, $\hat{a}_{k_1}^+$ должен действовать на состояния k_2 , т.е. «исправлять» результат действия \hat{a}_{k_2} .

$$\text{Таким образом, } \langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma} | \{n\} \rangle = \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1 \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma} | \{n\} \rangle = \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \hat{N}_{\vec{k} \sigma}$$

продолжим вычисления,

$$(\text{=}) \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma}} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}}}{\Omega} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \langle \{n\} | \hat{N}_{\vec{k} \sigma} | \{n\} \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} \langle \{n\} | \hat{N}_{\vec{k} \sigma} | \{n\} \rangle$$

Итак, на прошлой лекции мы получили выражения для различных вкладов в энергию системы:

$$E_i \approx -\frac{1,8}{r_s} Z^{5/3} N R_y, \quad r_s = \frac{r_e}{a_0}$$

$$\hat{T}_e = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \frac{p_{\alpha}^2}{2m} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_k \hat{N}_{\vec{k}\sigma}, \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \hat{N}_{\vec{k}\sigma} = \hat{a}_{\vec{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}\sigma}$$

$$n_k = \begin{cases} 1, & 0 \leq k \leq k_F \\ 0, & k > k_F \end{cases} \leftarrow \text{внутри сферы Ферми}$$

$$E_e^{(0)} = \langle \{n\} | \hat{T}_e | \{n\} \rangle = 2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{k_F^5}{5} - \text{это кинетическая энергия}$$

электронов.

$$\hat{n}_e = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma}} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}}}{\Omega} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2},$$

$$n_e = \langle \{n\} | \hat{n}_e | \{n\} \rangle = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma}} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}}}{\Omega} \left\langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2} | \{n\} \right\rangle =$$

$$= \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma}} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}}}{\Omega} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \left\langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2} | \{n\} \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{\Omega} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \sigma \\ n_k \langle \{n\} | \{n\} \rangle}} \left\langle \{n\} | \hat{N}_{\vec{k}} | \{n\} \right\rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}_1 \sigma} n_k = \frac{1}{\Omega} \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \underbrace{\int d\vec{k} \cdot n_k}_{\sum_k} = \frac{1}{\Omega} \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int d\vec{k} \cdot k^2 \cdot 1$$

Заметим, что

$$n_e \cdot \Omega = N_e = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad (*)$$

Тогда

$$E_e^{(0)} = \langle \{n\} | \hat{T}_e | \{n\} \rangle = 2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^5}{5} = \left[\frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \right] \cdot \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m},$$

или

$$E_e^{(0)} = N_e \cdot \frac{3}{5} \varepsilon_F, \text{ коэффициент } \frac{3}{5} \text{ показывает, что электроны ближе к поверхности}$$

Ферми дают вклад больше; (n_k - однородное распределение от 0 до 1).

Шаровой слой при большем радиусе (большей энергии) содержит в себе больше точек.

Получим теперь уравнение состояния электронного газа.

$T=0, S=0 \Rightarrow$ нет разницы между полной и свободной энергиями.

$$P_e^{(0)} = - \left. \frac{\partial E_o^{(0)}}{\partial \Omega} \right|_{N_e} = N_e \cdot \frac{3 \hbar^2}{5 2m} \left(- \frac{\partial}{\partial \Omega} K_F^2 \right)$$

$$(*) \rightarrow K_F = \left(3\pi^2 \frac{N_e}{\Omega} \right)^{1/3}, \quad K_F^2 = \left(3\pi^2 N_e \right)^{2/3} \Omega^{-2/3}$$

$$P_e^{(0)} = N_e \cdot \frac{3 \hbar^2}{5 2m} \left(3\pi^2 N_e \right)^{2/3} \left(- \frac{\partial}{\partial \Omega} \Omega^{-2/3} \right) = \frac{2}{3} \left(N_e \cdot \frac{3 \hbar^2}{5 2m} K_F^2 \right) \frac{1}{\Omega} = \frac{2}{3} E_e^{(0)} \frac{1}{\Omega}$$

Получаем уравнение состояния $\Omega P_e^{(0)} = \frac{2}{3} E_e^{(0)}$ - в некотором смысле, это

аналог уравнения Клайперона – Менделеева для идеального газа.

Система свободных электронов сопротивляется сжатию, то есть устойчива против коллапса. Существование K_F^2 следует из принципа запрета Паули.

$$\widehat{T}_e = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \frac{p_{\alpha}^2}{2m} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_k \widehat{N}_{\vec{k}\sigma}; \quad N_e = Z \cdot N$$

Выразим электронную энергию в ридбергах

$$\begin{aligned} E_0^{(0)} &= N_e \cdot \frac{3}{5} \varepsilon_F = N_e \cdot \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{1}{\Omega/N_e} \right)^{2/3} = N_e \cdot \frac{3 \hbar^2}{5 2m} \left(3\pi^2 \frac{1}{\frac{4\pi}{3} r_e^3} \right)^{2/3} = \\ &= N_e \cdot \frac{3 \hbar^2}{5 2m} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_e^2} = N_e \cdot \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right) e^2 \frac{1}{r_s^2} \frac{1}{a_0^2} = N_e \cdot \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} Ry \end{aligned}$$

$$\frac{\Omega}{N_e} = \Omega_e = \frac{4\pi}{3} r_e^3 \quad \text{объем, приходящийся на одну частицу}; \quad r_s = \frac{r_e}{a_0}$$

Окончательно для кинетической энергии электронного газа имеем

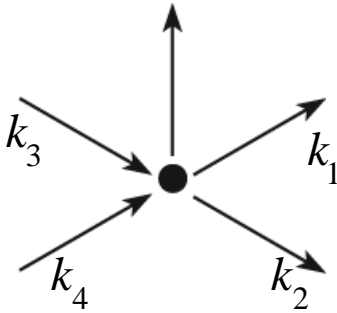
$$\boxed{E_e^{(0)} \simeq \frac{2,21}{r_s^2} ZN \cdot Ry}$$

Теперь рассмотрим энергию взаимодействия электронов.

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta=1}^{N_e} e^2 \sum_{\vec{q}} \frac{4\pi}{\Omega q^2} e^{i\vec{q}(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)} \quad - \text{ это уже двухчастичный оператор.}$$

Перейдем к вторичному квантованию.

$$\hat{A} = \sum_{\alpha, \beta} \hat{A}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta) = \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{k}_4} \left(A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right)_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{k}_4} \hat{a}_{k_1}^+ \hat{a}_{k_2}^+ \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4}$$



“четырёхквостка”(диаграмма взаимодействия электронов)

$$\left(A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right)_{k_1 k_2 k_3 k_4} = \sum_{1\dots 2\dots} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \Phi_{k_1}^+(1, \dots, \vec{r}_1) \cdot \Phi_{k_2}^+(2, \dots, \vec{r}_2) \hat{A}(r_1, r_2) \Phi_{k_3}(2, \dots, \vec{r}_2) \times \Phi_{k_4}(1, \dots, \vec{r}_1)$$

Аргументы внешних и внутренних обкладывающих функций должны совпадать.

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{k}_4 \\ \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}} \left(e^{i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right)_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{k}_4} \hat{a}_{k_1}^+ \hat{a}_{k_2}^+ \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4$$

Вычислим матричный элемент

$$\begin{aligned}
& \left(e^{i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right)_{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \vec{k}_3 \vec{k}_4} = \\
& \quad \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \\
& \sum_{\xi_1} \sum_{\xi_2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \frac{e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}_1}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_1}^+(\xi_1) \frac{e^{-i\vec{k}_2 \vec{r}_2}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_2}^+(\xi_2) \cdot e^{i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \times \\
& \times \frac{e^{-i\vec{k}_3 \vec{r}_2}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_3}^+(\xi_2) \frac{e^{-i\vec{k}_4 \vec{r}_1}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_4}^+(\xi_1) = \\
& = \left[\frac{\sum_{\xi_1} \hat{\chi}_{\sigma_1}^+(\xi_1) \hat{\chi}_{\sigma_4}^+(\xi_1)}{\delta_{\sigma_1 \sigma_4}} \right] \left[\frac{\sum_{\xi_2} \hat{\chi}_{\sigma_2}^+(\xi_2) \hat{\chi}_{\sigma_3}^+(\xi_2)}{\delta_{\sigma_2 \sigma_3}} \right] \times \\
& \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r}_1 e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{q} + \vec{k}_4) \vec{r}_1} \cdot \frac{1}{\Omega} \int d\vec{r}_2 e^{i(-\vec{k}_2 - \vec{q} + \vec{k}_3) \vec{r}_2} = \\
& = \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \delta_{\vec{k}_4, \vec{k}_1 - \vec{q}} \delta_{\vec{k}_3, \vec{k}_2 + \vec{q}}
\end{aligned}$$

При этом мы учли известные выражения для символа Кронекера

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\Omega} \int d\vec{r}_1 e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{q} + \vec{k}_4) \vec{r}_1} &= \delta_{\vec{k}_4, \vec{k}_1 - \vec{q}} \\
\frac{1}{\Omega} \int d\vec{r}_2 e^{i(-\vec{k}_2 - \vec{q} + \vec{k}_3) \vec{r}_2} &= \delta_{\vec{k}_3, \vec{k}_2 + \vec{q}}
\end{aligned}$$

Лекция 4.

Взаимодействующий электронный газ. Обменное взаимодействие. Оператор электрон-электронного взаимодействия. Структура корреляционной энергии. Корреляция в положении электронов. Коррелятор «плотность- плотность». Энергия взаимодействия электронов. Вигнеровский кристалл.

Для оператора энергии электрон-электронного взаимодействия получаем:

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{k_1 k_2} 1 \cdot 1 \cdot 1 \cdot \hat{a}_{\vec{k}_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2 + \vec{q} \sigma_2} \hat{a}_{\vec{k}_1 - \vec{q} \sigma_1} \sigma_1 \sigma_2$$

Теперь найдем электрон-электронный вклад в энергию:

$$E_e^{(1)} = \left\langle \{n\} | \hat{V}_{ee} | \{n\} \right\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{k_1 k_2} \left\langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1 \sigma_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2 \sigma_2}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2 + \vec{q} \sigma_2} \hat{a}_{\vec{k}_1 - \vec{q} \sigma_1} | \{n\} \right\rangle =$$

(**)

Функция $|\{n\}\rangle$ не должна поменяться; индексы операторов рождения и уничтожения должны совпадать попарно. Имеется две возможности спаривания :

$$(1) \quad \begin{aligned} \vec{k}_1 &= \vec{k}_1 - \vec{q} & \vec{k}_2 &= \vec{k}_2 + \vec{q} & \rightarrow \vec{q} &= 0 \\ \sigma_1 &= \sigma_2 & \sigma_2 &= \sigma_2 \end{aligned}$$

Но в нашей сумме $\vec{q} \neq 0$, следовательно, этот способ спаривания дает нулевой вклад (мы учитываем электронейтральность).

$$(2) \quad \begin{aligned} \vec{k}_1 &= \vec{k}_2 + \vec{q} & \vec{k}_2 &= \vec{k}_1 - \vec{q} \\ \sigma_1 &= \sigma_2 & \sigma_2 &= \sigma_1 \end{aligned}, \quad \text{Тогда имеем:}$$

$$(**) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k} \sigma} \left\langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k} \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k} - \vec{q} \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k} \sigma} \hat{a}_{\vec{k} - \vec{q} \sigma} | \{n\} \right\rangle = (***)$$

У всех операторов оказались одинаковые спиновые индексы σ (однонаправленные), т.е. $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow \Rightarrow$ сумма $\sum_{\sigma} \rightarrow 2$.

$$\left\{ \hat{a}_i \hat{a}_j^+ \right\} = \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad \hat{a}_{\vec{k} - \vec{q} \sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k} \sigma} = -\hat{a}_{\vec{k} \sigma} \hat{a}_{\vec{k} - \vec{q} \sigma}^+$$

(***)

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k}\sigma} \langle \{n\} | \underbrace{\hat{a}_{\vec{k}_1\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{k}_1\sigma}}_{\hat{N}_{\vec{k}_1\sigma}} \underbrace{\hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}}_{\hat{N}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}} | \{n\} \rangle = \\
 &\quad \underbrace{n_{\vec{k}-\vec{q}}}_{n_{\vec{k}} n_{\vec{k}-\vec{q}}} | \{n\} \rangle \\
 &\quad \underbrace{n_{\vec{k}} n_{\vec{k}-\vec{q}}}_{n_{\vec{k}} n_{\vec{k}-\vec{q}}} \langle \{n\} | \{n\} \rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k}_1\sigma} n_{\vec{k}} n_{\vec{k}-\vec{q}} = E_e^{(1)} \equiv \langle \{n\} | \hat{V}_{ee} | \{n\} \rangle
 \end{aligned}$$

Вклад получился отрицательным, хотя взаимодействие – кулоновское (отталкивание одноименных точечных зарядов). Вклад оказался отрицательным, что соответствует притяжению. Этот удивительный на первый взгляд результат объясняется тем, что прямое кулоновское отталкивание полностью компенсировалось за счет электронейтральности. Электроны с различными проекциями спинов $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$ по сравнению с $\uparrow\downarrow$ и $\downarrow\uparrow$ могут находиться на различных расстояниях. Взаимодействие при учете электронейтральности “цепляет” пару с совпадающими спинами, \Rightarrow , расстояние между ними больше, чем среднее r_e .

Так как мы считаем все вклады для среднего значения r_e , мы завысили вклад электронов с параллельными спинами $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$. Расстояние между такими электронами на самом деле больше, чем среднее, \Rightarrow , вклад получился отрицательный (т.е. мы завысили $E_e^{(0)}$, отрицательность $E_e^{(1)}$ это компенсирует).

Корреляционная функция или коррелятор «плотность – плотность».

Как уже было сказано, движение электронов определяется их квантовыми свойствами, большую роль играют обменные эффекты, связанные с «фермиевостью» электронов.

$$\hat{n}_e(\vec{r}) = \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma_1}} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}}}{\Omega} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2} - \text{оператор плотности электронов.}$$

Рассмотрим коррелятор типа

$$\begin{aligned} \mathbb{K}(R) &\equiv \left\langle \{n\} | \hat{n}_e(\vec{r}) \hat{n}_e(\vec{r} + \vec{R}) | \{n\} \right\rangle = \left\langle \{n\} | \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma}} \frac{e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}}}{\Omega} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2} \cdot \right. \\ &\sum_{\substack{\vec{k}_3 \vec{k}_4 \\ \sigma}} \frac{e^{i(-\vec{k}_3 + \vec{k}_4)(\vec{r} + \vec{R})}}{\Omega} \hat{a}_{\vec{k}_3}^+ \hat{a}_{\vec{k}_4} | \{n\} \rangle = \\ &= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma_1}} \sum_{\substack{\vec{k}_3 \vec{k}_4 \\ \sigma_2}} e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}} e^{i(-\vec{k}_3 + \vec{k}_4)(\vec{r} + \vec{R})} \langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2} \hat{a}_{\vec{k}_3}^+ \hat{a}_{\vec{k}_4} | \{n\} \rangle = \end{aligned} \quad (***)$$

$$(1) \quad \vec{k}_1 = \vec{k}_2, \quad \sigma_1 = \sigma_1; \quad \vec{k}_3 = \vec{k}_4, \quad \sigma_2 = \sigma_2$$

$$(2) \quad \vec{k}_1 = \vec{k}_4, \quad \sigma_1 = \sigma_2; \quad \vec{k}_2 = \vec{k}_3, \quad \sigma_1 = \sigma_2 \quad \text{Складываем обе возможности:}$$

$$\begin{aligned} (***) &= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} 1 \cdot \langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_1} \hat{a}_{\vec{k}_3}^+ \hat{a}_{\vec{k}_3} | \{n\} \rangle + \\ &\quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\hat{N}_{\vec{k}_1 \sigma_1}} \underbrace{\hspace{10em}}_{\hat{N}_{\vec{k}_3 \sigma_2}} \rightarrow n_{\vec{k}_3} n_{\vec{k}_1} \langle \{n\} | \{n\} \rangle \\ &+ \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\sigma_1} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{r}} e^{i(-\vec{k}_2 + \vec{k}_1)(\vec{r} + \vec{R})} \langle \{n\} | \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2} \hat{a}_{\vec{k}_2}^+ \hat{a}_{\vec{k}_1} | \{n\} \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K(R) &= \underbrace{\left(\sum_{\vec{k}_1 \sigma_1} n_{k_1} \right) \left(\sum_{\vec{k}_3 \sigma_2} n_{k_3} \right)}_{\left(\frac{N_e}{\Omega} \right)^2 = n_e^2} \frac{1}{\Omega^2} + \\
&+ \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} e^{i(-\vec{k}_2 + \vec{k}_1) \vec{R}} \langle \{n\} | \widehat{a}_{k_1}^+ \widehat{a}_{k_1} \widehat{a}_{k_2} \widehat{a}_{k_2}^+ | \{n\} \rangle = \\
&\quad \underbrace{\quad}_{\widehat{N}_{\vec{k}_1 \sigma}} \quad \underbrace{\quad}_{1 - \widehat{N}_{\vec{k}_2 \sigma}} \\
&= n_e^2 + \frac{2}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} n_{k_1} (1 - n_{k_2}) \cdot 1 \cdot e^{i(-\vec{k}_2 + \vec{k}_1) \vec{R}} = \\
&= n_e^2 + \frac{2}{\Omega^2} \left(\sum_{\vec{k}_1} n_{k_1} e^{i\vec{k}_1 \vec{R}} \right) \underbrace{\left(\sum_{\vec{k}_2} e^{-i\vec{k}_2 \vec{R}} \right)}_{\sim \delta_{\vec{R}, 0}} - \frac{2}{\Omega^2} \left(\sum_{\vec{k}_1} n_{k_1} e^{i\vec{k}_1 \vec{R}} \right) \left(\sum_{\vec{k}_2} n_{k_2} e^{-i\vec{k}_2 \vec{R}} \right)
\end{aligned}$$

\vec{R} всегда для этих элементов не равно нулю (у них совпадает спин, и по принципу Паули они не могут находиться в одной точке). Поэтому этот член отбрасываем.

Замечание.

$\widehat{a}_{k_1 \sigma_1} \widehat{a}_{k_2 \sigma_2}$ не всегда (анти)коммутируют (возможно $\vec{k}_1 = \vec{k}_2$).

Некоммутирующая пара даст $N_e : N_e^2 \sim N_e \leftarrow$ этой частью мы пренебрегли \Rightarrow
точность второго слагаемого $\sim \frac{1}{N_e}$.

Итак, было получено выражение для оператора электрон-электронного взаимодействия.

$$\widehat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta=1}^{N_e} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} e^{i\vec{q}(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \widehat{a}_{k_1}^+ \widehat{a}_{k_2}^+ \widehat{a}_{k_2 + \vec{q}} \widehat{a}_{k_1 - \vec{q}}$$

$\sigma_1 \sigma_2 \quad \sigma_2 \quad \sigma_1$

Поправка к энергии за счет этого взаимодействия

$$E_e^{(1)} = \left\langle \{n\} | \widehat{V}_{ee} | \{n\} \right\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k}_1 \sigma} n_k n_{k-q}$$

Стартуя с положительной отталкивательной энергии, мы получили отрицательную поправку; остался вклад только от электронов с одинаковыми спинами $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$.

Из – за фермиевости системы (за счет принципа Паули) электроны с одинаковыми спинами не могут располагаться также близко, как это возможно для электронов с противоположными спинами $\uparrow\downarrow$.

Электроны, которые располагаются на расстоянии больше, чем при однородном распределении, дают в кинетическую энергию меньший вклад \Rightarrow отрицательная поправка.

Вернемся к исследованию коррелятора «плотность – плотность».

$$K(\vec{R}) = \left\langle \{n\} | \hat{n}_e(\vec{r}) \hat{n}_e(\vec{r} + \vec{R}) | \{n\} \right\rangle \underset{(\uparrow\uparrow)(\downarrow\downarrow)}{\approx} n_e^2 + (\dots) \delta_{\vec{R}10} - \frac{1}{\Omega} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{R}} n_{\vec{k}_1} n_{\vec{k}_2}$$

$$\delta_{\vec{R}10} \text{ возникло от } \sum_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2\vec{R}}; \quad \sum_{\sigma} \text{ дает } 2.$$

В силу принципа Паули $\vec{R} = 0$ невозможно для электронов с совпадающими спинами; поэтому второе слагаемое можно выбросить;

$$\left(\sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1\vec{R}} n_{\vec{k}_1} \right) \left(\sum_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2\vec{R}} n_{\vec{k}_2} \right) = \left(\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} n_{\vec{k}} \right)^2$$

Так как сумма по всем \vec{k}_2 , можно заменить $\vec{k}_2 \rightarrow -\vec{k}_2$, $n_{\vec{k}_2}$ зависит только от модуля.

$$\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} n_{\vec{k}} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{R}} n_k = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_F} dk \cdot k^2 \cdot 1 \cdot \int_{-1}^1 dx e^{ikRx} =$$

($x \equiv \cos\theta$, получаем)

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_F} dk \cdot k \cdot 1 \cdot \frac{2 \sin kR}{kR} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{1}{R} \int_0^{k_F} dk \cdot k \cdot \sin kR = \quad (*)$$

Интеграл возьмем по частям: $\int_0^{k_F} k \sin kR dk = - \int_0^{k_F} k \cdot \frac{1}{R} d(\cos kR) =$

$$= \frac{k \cos(kR)}{R} \Big|_0^{k_F} + \frac{1}{R} \int_0^{k_F} dk \cdot \cos kR =$$

$$-\frac{k_F \cos k_F R}{R} + \frac{\sin k_F R}{R^2} = \frac{1}{R^2} (\sin k_F R - k_F R \cos k_F R)$$

$$(*) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{1}{R^3} [\sin(k_F R) - k_F R \cos(k_F R)] =$$

(перепишем это выражение в безразмерных переменных) :

$$= \frac{3}{2} \underbrace{\left(\frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot k_F^3 \right)}_{N_e} \left(\frac{\sin z - z \cos z}{z^3} \right)_{z=k_F R} = \frac{3}{2} N_e \left(\frac{\sin z - z \cos z}{z^3} \right)_{|z=k_F R}$$

В результате корреляционная функция приобретает вид

$$K(\vec{R}) \approx n_e^2 - \frac{1}{\Omega^2} \cdot \cancel{2} \cdot \frac{9}{\cancel{4}} N_e^2 \left(\frac{\sin z - z \cos z}{z^3} \right)^2$$

С учетом $\frac{N_e^2}{\Omega^2} = n_e^2$ получаем

$$\frac{K(\vec{R})}{n_e^2} \approx 1 - \frac{9}{2} \left(\frac{\sin z - z \cos z}{z^3} \right)^2_{|z=k_F R}$$

Отследим за пространственным поведением этой функции:

1) Рассмотрим поведение на больших расстояниях $R \rightarrow \infty \sim k_F R = z \gg 1$

$$\left(\frac{\sin z - z \cos z}{z^3} \right)^2 \leq \frac{1}{z^4} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} 0$$

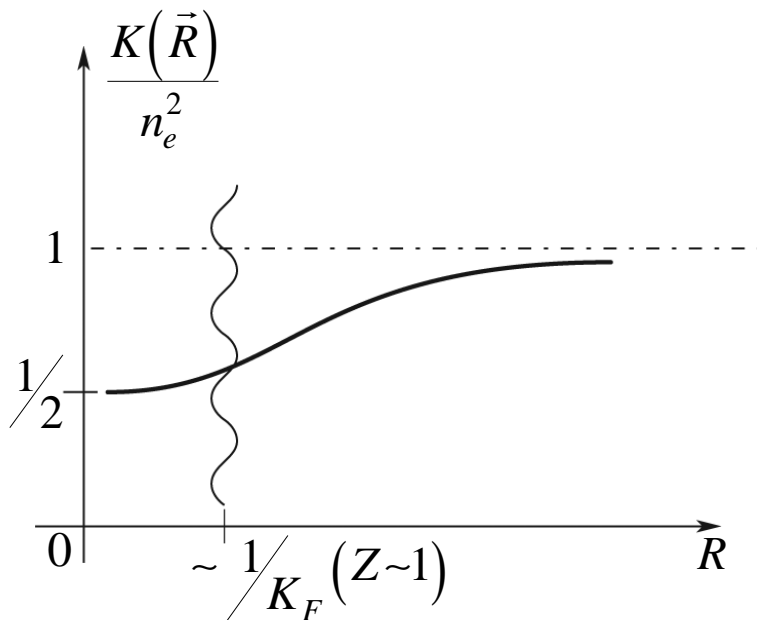
$$\frac{K(\vec{R})}{n_e^2} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 1$$

2) Теперь для малых расстояний $R \sim 0$ (но $R \neq 0$ - это невозможно по физическим причинам, соответственно, $z \ll 1$)

$$\left(\frac{\sin z - z \cos z}{z^3} \right)_{z \ll 1} \approx \frac{\left(z - \frac{z^3}{6} + \dots \right) - z \left(1 - \frac{z^2}{2} + \dots \right)}{z^3} \approx \left(-\frac{1}{6} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{3}$$

z^3 сокращается со знаменателем;

$$\frac{K(R)}{n_e^2} \underset{R \sim 0}{\approx} 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} = \frac{1}{2}$$



Таким образом, наблюдается уменьшение эффективной плотности электронов с такой же проекцией спина в непосредственной окрестности данного электрона – так называемая “обменная дырка”.

Плотность точно таких же электронов e^- в окрестности любого выделенного электрона уменьшается вдвое.

Лекция 5.

Диэлектрическая проницаемость электронного газа. Поляризационный оператор. Экранировка внешнего заряда электронным газом различной плотности. Фриделевские осцилляции. Собственные возбуждения в электронном газе, плазмоны.

Диэлектрическая проницаемость электронного газа –

- величина, наиболее полно описывающая эффект электростатического взаимодействия в системе взаимодействующих электронов, поскольку фактически диэлектрическая проницаемость – реакция системы на внешний заряд.

Уравнения Максвелла для истинного электрического поля и электрической индукции в среде $\operatorname{div}\vec{E} = 4\pi e\rho_t$ и $\operatorname{div}\vec{D} = 4\pi e\rho_{ext}$ связывают \vec{E} с полным зарядом системы

$\rho_t = \rho_{ext} + \rho_{ind}$ (с учетом перестройки собственных зарядов как реакции на появление ρ_{ext} и, как следствие, - возникновение ρ_{ind}), а \vec{D} - с внешним ρ_{ext} .

Поскольку все уравнения – линейны, то можем считать все фигурирующие величины представленными лишь одной Фурье – компонентой.

В результате уравнения принимают вид:

$$\begin{cases} i(\vec{q}\vec{E}(\vec{q},\omega)) = 4\pi e\rho_t(\vec{q},\omega), \\ i(\vec{q}\vec{D}(\vec{q},\omega)) = 4\pi e\rho_{ext}(\vec{q},\omega). \end{cases}$$

Отсюда, для продольных(вдоль $\vec{q}!$) составляющих поля и индукции получаем соотношение:

$$\frac{D_{\parallel}(\vec{q},\omega)}{E_{\parallel}(\vec{q},\omega)} = \frac{\rho_{ext}(\vec{q},\omega)}{\rho_t(\vec{q},\omega)}$$

Но с другой стороны связь D_{\parallel} и E_{\parallel} определяет продольную диэлектрическую проницаемость:

$$D_{\parallel}(\vec{q},\omega) = \varepsilon(\vec{q},\omega)E_{\parallel}(\vec{q},\omega) \quad , \quad \text{т.е.} \quad \varepsilon(\vec{q},\omega) = \frac{\rho_{ext}(\vec{q},\omega)}{\rho_{ext}(\vec{q},\omega) + \rho_{ind}(\vec{q},\omega)} \quad ,$$

так что найдя при заданном $\rho_{ext}(\vec{q},\omega)$ отклик системы в виде возникающего $\rho_{ind}(\vec{q},\omega)$, мы получим и $\varepsilon(\vec{q},\omega)$.

Работать технически будем в приближении самосогласованного поля – возмущающий внешний заряд перераспределяет собственные заряды системы, что приводит и к изменению как их взаимодействия между собой, так и с этим внешним зарядом. Каждый отдельный электрон чувствует теперь поле, возникшее как от внешнего заряда, так и от перестроившихся других электронов – в этой “перестройке” уже есть доля и самого рассматриваемого электрона. При этом приближение будет состоять в том, что поле

перестроившихся электронов мы будем рассматривать как усредненное по всему объему, т.е. фактически – сглаженное, и тем самым – пренебрегать флуктуациями. Ясно физически, что это приближение будет тем лучше, чем выше плотность электронов (как всегда в статистике флуктуации $\sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ (!)).

Итак, мы будем искать истинную электронную плотность в каждой точке, возникающую в результате действия в системе результирующего потенциал

$$V_t = e \left\{ \varphi_t(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t} + \varphi_t^* e^{-i\vec{q}\vec{r} - i\omega t} \right\} - \text{величины действительной. При этом}$$

плотность ρ_t и потенциал φ_t связаны уравнением Пуассона:

$$\Delta \varphi_t(\vec{r}, t) = -4\pi e \rho_t(\vec{r}, t), \text{ что в Фурье – представлении дает}$$

$$-q^2 \varphi_t(\vec{q}, \omega) = -4\pi e \rho_t(\vec{q}, \omega), \text{ или } \varphi_t(\vec{q}, \omega) = \frac{4\pi e}{q^2} \rho_t(\vec{q}, \omega).$$

Что касается полной плотности ρ_t , то мы получим ее как среднее значение от оператора плотности:

$$\rho_t = \left\langle \{n\} | \widehat{\rho}(\vec{r}) | \{n\} \right\rangle = \left\langle \{n\} | \sum_{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}) | \{n\} \right\rangle =$$

$$= \left\langle \{n\} | \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}' \\ \sigma, \sigma'}} \widehat{a}_{\vec{k}}^+ \widehat{a}_{\vec{k}'} \sum_{\xi} \int d\vec{r}_a \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}_a) \chi_{\sigma}^*(\xi) \delta(\vec{r} - \vec{r}_a) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}_a) \chi_{\sigma'}(\xi) | \{n\} \right\rangle =$$

$$= \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \left\langle \{n\} | \widehat{a}_{\vec{k}}^+ \widehat{a}_{\vec{k}'} | \{n\} \right\rangle = \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \left| \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right|^2$$

Здесь $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ - истинная одночастичная электронная Ψ -функция, возникающая в результате самосогласованного воздействия на каждый электрон.

Наша задача – найти $\psi_{\vec{k}}$, возникшую в результате воздействия \widehat{V}_t на первоначально однородное распределение электронов с волновой функцией

$$\psi_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{r}, t) = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} t}$$

Уравнение Шредингера (в нестационарном случае):

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \widehat{H} \psi(\vec{r}, t), \quad \widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_t.$$

Ищем $\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}}(t) \psi_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{r}, t)$, так что: $i\hbar \frac{\partial C_{\vec{k}'}(\vec{r}, t)}{\partial t} \sum_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}', \vec{k}_1}(t) C_{\vec{k}_1}(t)$, где

$$V_{\vec{k}' \vec{k}_1} = \int d\vec{r} \psi_{\vec{k}'}^{*(0)}(\vec{r}, t) V_t(\vec{r}, t) \psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}, t) =$$

$$= \int d\vec{r} \frac{e^{-i\vec{k}'\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \cdot e^{\frac{1}{\hbar} \varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} t} \cdot e \left[\varphi_t(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t} + \varphi_t^*(\vec{q}, \omega) e^{-i\vec{q}\vec{r} + i\omega t} \right] \frac{e^{-i\vec{k}_1\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \varepsilon_{\vec{k}_1}^{(0)} t} =$$

$$= e\varphi_t(\vec{q}, \omega) \cdot e^{i \left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}_1}^{(0)}}{\hbar} \right) t - i\omega t} \cdot \overbrace{\frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{i(-\vec{k}' + \vec{q} + \vec{k}_1)\vec{r}}}_{\delta_{\vec{k}_1, \vec{k}' - \vec{q}}} + e\varphi_t^*(\vec{q}, \omega) \cdot e^{i \left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}_1}^{(0)}}{\hbar} \right) t + i\omega t} \cdot \underbrace{\frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{i(-\vec{k}' - \vec{q} + \vec{k}_1)\vec{r}}}_{\delta_{\vec{k}_1, \vec{k}' + \vec{q}}}$$

Используем далее теорию возмущений, полагая в правой части $C_{\vec{k}_1}(t) \approx C_{\vec{k}_1}^{(0)}(t) = \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}}$, т.е. считаем, что в начальном невозмущенном состоянии электрон находился в определенном состоянии \vec{k} (!).

Т.е. $i\hbar \frac{\partial C_{\vec{k}'}(t)}{\partial t} \approx V_{\vec{k}', \vec{k}}(t) \cdot 1$, так что,

$$C_{\vec{k}'}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{\vec{k}', \vec{k}}(t') dt' = -\frac{i}{\hbar} \left\{ e\varphi_t(\vec{q}, \omega) \cdot \delta_{\vec{k}', \vec{k}' - \vec{q}} \cdot \frac{e^{i \left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}}{\hbar} \right) t - i\omega t}}{i \left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}}{\hbar} \right) - i\omega} + \right.$$

$$\left. + e\varphi_t^*(\vec{q}, \omega) \cdot \delta_{\vec{k}', \vec{k}' + \vec{q}} \cdot \frac{e^{i \left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}}{\hbar} \right) t + i\omega t}}{i \left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}}{\hbar} \right) + i\omega} \right\},$$

где мы предполагаем, что взаимодействие включается адиабатически, т.е. $\omega \rightarrow \omega + i\delta$, $\delta \rightarrow +0$.

$$= e\varphi_t(\vec{q}, \omega) \delta_{\vec{k}', \vec{k}' + \vec{q}} \cdot \frac{e^{-i(\omega_{kk'}^0 + \omega)t}}{\hbar\omega + \begin{pmatrix} \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} \\ \varepsilon_{\vec{k} + \vec{q}}^{(0)} \end{pmatrix}} - e\varphi_t^*(\vec{q}, \omega) \delta_{\vec{k}', \vec{k}' - \vec{q}} \cdot \frac{e^{-i(\omega_{kk'}^0 - \omega)t}}{\hbar\omega - \begin{pmatrix} \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}'}^{(0)} \\ \varepsilon_{\vec{k} - \vec{q}}^{(0)} \end{pmatrix}}$$

В результате, в первом порядке теории возмущений:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) &\approx \psi_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{r}, t) + \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} C_{\vec{k}'}(t) \psi_{\vec{k}'}^{(0)}(\vec{r}, t) = \\ &= \frac{e^{i\vec{k}\vec{r} - \frac{1}{\hbar}\varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}t}}{\sqrt{\Omega}} + \frac{e\varphi_t(\vec{q}, \omega)}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{q}}^{(0)}} \cdot e^{-i\omega t} \cdot e^{\frac{1}{\hbar}(-\varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} + \varepsilon_{\vec{k} + \vec{q}}^{(0)})t} \cdot \frac{e^{i(\vec{k} + \vec{q})\vec{r} - \frac{1}{\hbar}\varepsilon_{\vec{k} + \vec{q}}^{(0)}t}}{\sqrt{\Omega}} - \\ &- \frac{e\varphi_t^*(\vec{q}, \omega)}{\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} + \varepsilon_{\vec{k} - \vec{q}}^{(0)}} \cdot e^{i\omega t} \cdot e^{\frac{1}{\hbar}(-\varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} + \varepsilon_{\vec{k} - \vec{q}}^{(0)})t} \cdot \frac{e^{i(\vec{k} - \vec{q})\vec{r} - \frac{1}{\hbar}\varepsilon_{\vec{k} - \vec{q}}^{(0)}t}}{\sqrt{\Omega}} = \\ &= \frac{e^{i\vec{k}\vec{r} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}t}}{\sqrt{\Omega}} \left\{ 1 + \left(\frac{e\varphi_t(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{q}}^{(0)}} - \frac{e\varphi_t^*(\vec{q}, \omega) e^{-i\vec{q}\vec{r} + i\omega t}}{\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} + \varepsilon_{\vec{k} - \vec{q}}^{(0)}} \right) \right\} \end{aligned}$$

Отсюда результирующая полная электронная плотность:

$$\begin{aligned} \rho_t &= \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} |\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)|^2 = \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \frac{1}{\Omega} |1 + (\dots)|^2 \approx \\ &\approx \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}}}{\Omega} \left\{ 1 + (\dots) + (\dots)^* \right\} = \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}}}{\Omega} + \\ &+ \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}}}{\Omega} \left\{ e\varphi_t(\vec{q}, \omega) e^{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t} \left[\frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{q}}^{(0)}} - \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k} - \vec{q}}^{(0)}} \right] + (C.C) \right\} \end{aligned}$$

Здесь $\sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}}}{\Omega} = \frac{N_e}{\Omega} = n_e^{(0)}$ - исходная невозмущенная равновесная электронная плотность.

Все остальное - ρ_{ind} , так что прямо:

$$\rho_{ind}(\vec{q}, \omega) = \frac{e\varphi_t(\vec{q}, \omega)}{\Omega} \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \left(\frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k} + \vec{q}}^{(0)}} - \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k} - \vec{q}}^{(0)}} \right), \text{ или, если во}$$

втором члене заменить $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{q}$:

$$\rho_{ind}(\vec{q}, \omega) = \frac{e\varphi_t(\vec{q}, \omega)}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}+\vec{q}}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)}} \quad (!)$$

$$\text{Так что: } \rho_{ind}(\vec{q}, \omega) = \rho_t(\vec{q}, \omega) \cdot \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}+\vec{q}}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)} + i\delta}.$$

Отсюда непосредственно находим:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{q}, \omega) &= \frac{\rho_{ind}(\vec{q}, \omega)}{\rho_t(\vec{q}, \omega)} = \frac{\overbrace{\rho_{ext} + \rho_{ind}}^{\rho_t} - \rho_{ind}}{\rho_t} = 1 - \frac{\rho_{ind}}{\rho_t} = \\ &= 1 - \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}+\vec{q}}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)} + i\delta} \end{aligned}$$

$$\text{или окончательно: } \boxed{\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k}} \frac{n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}+\vec{q}}}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)} + i\delta}}$$

$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = \varepsilon^{(1)}(\vec{q}, \omega) + i\varepsilon^{(2)}(\vec{q}, \omega)$ (из-за наличия $i\delta$ в знаменателе (!)), где

$$\varepsilon^{(1)}(\vec{q}, \omega) \equiv \text{Re } \varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \left[\sum_{\vec{k}} (n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}}) P \frac{1}{\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)}} \right], \text{ а}$$

$$\varepsilon^{(2)}(\vec{q}, \omega) \equiv \text{Im } \varepsilon(\vec{q}, \omega) = -\pi \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k}} (n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}}) \delta(\hbar\omega + \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)}), \text{ т.е.}$$

распространение волны возмущения $\sim e^{i\vec{q}\vec{r} - i\omega t}$ оказывается в определенном интервале

ω и \vec{q} - затухающим \rightarrow для выполнения $\delta(\dots) = 0$ нужно: $\hbar\omega = \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}$, -

возмущение переводит электрон из состояния (\vec{k}) в состояние $(\vec{q} + \vec{k})$ вблизи

поверхности Ферми в полосе шириной 2ω , что и дает поглощение волны, с одной стороны, и возникновение конечного времени жизни у электрона, с другой стороны.

При этом замечательно, что $\rho_t = \frac{\rho_{ext}}{\varepsilon} \rightarrow$ внешнее воздействие экранируется за счет

перестройки системы, что и определяет коллективные свойства этой системы.

В частности, если $\omega \rightarrow \infty$, т.е. внешняя частота столь велика, что у электронов нет состояний, переход между которыми мог бы осуществляться при поглощении такого кванта $\hbar\omega$, то $\text{Im } \varepsilon = 0$, и более того:

$$\text{Re } \varepsilon(\vec{q}, \omega) \approx 1 + \frac{4\pi e^2}{\Omega^2 q^2} \left\{ \frac{1}{\hbar\omega} \overbrace{\sum_{\vec{k}} (n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}})}^{\equiv 0} + \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \sum_{\vec{k}} (n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}}) (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)}) + \dots \right\}$$

$\varepsilon^{(1)}(\vec{q}, \omega)_{\omega \rightarrow \infty} \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$, где ω_p^2 - квадрат некоторой характерной частоты.

Получим эту частоту, полагая ω - большим, а $|\vec{q}|$ - малым (это автоматически даст $\text{Im } \varepsilon \equiv 0!$).

$$\text{Тогда } \frac{\omega_p^2}{\left(\frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega}\right)} \cong \frac{1}{\cancel{\hbar^2}} \sum_{\sigma \vec{k}} \left(-\frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \right) \cancel{\hbar^2} (\vec{v}_{\vec{k}} \vec{q})^2 = 2 \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3 k \delta(\varepsilon_{\vec{k}}^{(0)} - \varepsilon_F) (\vec{v}_{\vec{k}} \vec{q})^2$$

$$\text{Следовательно: } \omega_p^2 = \frac{4\pi e^2}{m} \left(\underbrace{2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot k_F^3}_{n_e(!)} \right) = \frac{4\pi n_e e^2}{m_e} (!) \text{ - так называемая}$$

плазменная частота электронов.

Можно найти и следующий по (ω^{-2}) член (легко проверить, что член $\sim \frac{1}{\omega^3}(\dots) \equiv 0!$ -),

$$\text{именно: } = + \frac{1}{(\hbar \omega)^4} \sum_k \underbrace{(n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}})}_{\frac{\partial n_{\vec{k}}}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \cdot \hbar (\vec{v}_{\vec{k}} \vec{q})} \underbrace{(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(0)})}_{\approx (\hbar (\vec{v}_{\vec{k}} \vec{q}))^3} = - \frac{1}{\omega^4} \sum_k \delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_F) v_F^4 \cdot q^4 \cdot \cos^4 \theta,$$

так что будем иметь в интеграле по углам: $2\pi \int_{-1}^1 \alpha x \cdot x^4 = 2\pi \cdot \frac{2}{5} = \frac{3}{5} \cdot \left(\frac{4\pi}{3}\right)$, т.е.

$$-\frac{3}{5} \cdot \frac{\omega_p^2}{\omega^4} \cdot (q v_F)^2;$$

Окончательно: $\varepsilon(\vec{q}, \omega)_{\substack{\omega \rightarrow \infty \\ \vec{q} \ll k_F}} \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - \frac{3}{5} \cdot \frac{\omega_p^2}{\omega^4} \cdot (q v_F)^2 \rightarrow 1!$, т.е. столь

быстроменяющиеся поля не экранируются.

Отметим далее, что если $\rho_{ext} = 0$, то в этом случае: $\rho_t = \rho_{ind}$, или с учетом

$$(1 - \varepsilon(\vec{q}, \omega)) = \frac{\rho_{ind}}{\rho_t},$$

$$\rho_{ind} \cdot \varepsilon = 0 \rightarrow \begin{cases} (1) \rho_{ind} = 0 - \text{система не реагирует} \\ (2) \varepsilon(\vec{q}, \omega) = 0 - \text{незатухающие собственные частоты (Im} = 0) \end{cases};$$

$$1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - \frac{3}{5} \cdot \frac{\omega_p^2}{\omega^4} (q v_F)^2 + \dots = 0, \text{ или } \omega^2 \cong \omega_p^2 + \frac{3}{5} (q v_F)^2 + \dots$$

Рассмотрим экранировку точечного заряда, статический случай $\omega = 0$.

$$V_{ind}(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(\vec{q})}$$

$$V_{ind}(\vec{r}) = \int d^3 \vec{q} \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(\vec{q})} e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

При больших \vec{r} вклад в интеграл дают малые \vec{q} , тогда можно считать, что

$$\varepsilon(\vec{q}) = 1 + \frac{\lambda_{TF}^2}{q^2}, \text{ и } V_{ind}(\vec{r}) = \int d^3q \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda_{TF}^2} e^{i\vec{q}\vec{r}} \sim \frac{e^2}{\vec{r}} e^{-\lambda_{TF}\vec{r}}, \text{ т.е. экспоненциальный}$$

спад.

Но ! в $\varepsilon(\vec{q})$ есть еще неаналитичность при $\vec{q} = 2k_F$

(точнее во второй производной $\varepsilon(\vec{q})$).

Поэтому будет аномальный вклад в интеграл $\int d^3\vec{q} \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(\vec{q})} e^{i\vec{q}\vec{r}}$, дважды интегрируя по

частям, получим $V(r \rightarrow \infty) \sim \frac{\cos(2k_F r + \eta)}{r^3}$ - осциллирующее и гораздо медленнее

спадающее поведение. Это называется Фриделевские осцилляции.

Лекция 6.

Поправки высших порядков в энергии электрон-электронного взаимодействия. Электрон-ионное взаимодействие в неоднородном случае. Оператор смещений ионов во вторичном квантовании.

$$E_e^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \sum_{\vec{k}_1 \sigma} n_k n_{k-q} = -e^2 \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}_1} \underbrace{\frac{4\pi}{\Omega |\vec{k} - \vec{k}_1|^2}}_{\text{это Фурье-образ функции } \frac{1}{R}} n_k n_{k-1} = (**)$$

это Фурье-образ функции $\frac{1}{R}$

(Переобозначим $k - q = k_1$; $q = k - k_1$.)

$$(**) = e^2 \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}_1} \int d\vec{R} \underbrace{\frac{e^{-i(\vec{k} - \vec{k}_1)\vec{R}}}{\Omega R}}_{\frac{4\pi}{\Omega |\vec{k} - \vec{k}_1|^2}} \cdot n_k n_{k-1} \approx$$

(В этом интеграле $\vec{k} \neq \vec{k}_1$, иначе – расходимость. Поэтому это ограничение можно снять (и так выполняется).)

$$\approx e^2 \frac{1}{\Omega} \int \frac{d\vec{R}}{R} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}_1} \left(e^{i\vec{k}\vec{R}} n_k \right) \left(e^{i\vec{k}_1\vec{R}} n_{k_1} \right) = (***)$$

Мы перешли к таким суммам с точностью до $\frac{1}{N_e}$; кулоновская особенность перешла в

$$\frac{1}{R} \text{ при } R \rightarrow 0.$$

Ранее мы уже считали

$$\sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}_1} \left(e^{i\vec{k}\vec{R}} n_k \right) \left(e^{i\vec{k}_1\vec{R}} n_{k_1} \right) = \left| \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} n_k \right|^2 = \frac{9}{4} N_e^2 \left(\frac{\sin z - z \cos z}{z^3} \right)^2 \Big|_{z=k_F R}$$

$$(***) = -\frac{e^2 9}{\Omega 4} N_e^2 \int \frac{d\vec{R}}{R} \frac{(\sin z - z \cos z)^2}{z^6} = -\frac{e^2 9}{\Omega 4} N_e^2 \frac{1}{k_F^2} \int_0^\infty \frac{4\pi R^2 dR_{k_F}}{R} \frac{(\sin z - z \cos z)^2}{z^5} =$$

(Обезразмерили R , добавив нужное количество k_F)

$$= -\frac{e^2}{\Omega} \frac{9}{4} N^2 \frac{4\pi}{k_F^2} \int_0^\infty dz \underbrace{\frac{(\sin z - z \cos z)^2}{z^5}}_{\text{(обозначим) } I}$$

$$\left(\frac{\sin z}{z}\right)' = \frac{\cos z}{z} - \frac{\sin z}{z^2} = -\frac{1}{z^2}(\sin z - z \cos z)$$

Штрих означает производную по z ;

$$\left(\frac{\sin z}{z}\right)'' = -\frac{\sin z}{z} - \frac{\cos z}{z^2} - \frac{\cos z}{z^2} + \frac{2 \sin z}{z^3} = -\frac{\sin z}{z} + 2 \cdot \frac{1}{z^3}(\sin z - z \cos z)$$

Учитываем, что

$$\begin{cases} \frac{1}{z^2}(\sin z - z \cos z) = -\left(\frac{\sin z}{z}\right)' \\ \frac{1}{z^3}(\sin z - z \cos z) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin z}{z} + \left(\frac{\sin z}{z}\right)'' \right] \end{cases}$$

Перемножив эти выражения, получим:

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty dz \frac{(\sin z - z \cos z)^2}{z^5} = -\frac{1}{2} \int_0^\infty dz \left(\frac{\sin z}{z}\right)' \left[\left(\frac{\sin z}{z}\right) + \left(\frac{\sin z}{z}\right)'' \right] = \\ &= -\frac{1}{2} \left\{ \int_0^\infty dz \left(\frac{\sin z}{z}\right)' \cdot \left(\frac{\sin z}{z}\right) + \int_0^\infty dz \left(\frac{\sin z}{z}\right)'' \cdot \left(\frac{\sin z}{z}\right)' \right\} = \\ &= -\frac{1}{2} \left\{ \int_0^\infty d\left(\frac{\sin z}{z}\right) \cdot \left(\frac{\sin z}{z}\right) + \int_0^\infty d\left(\frac{\sin z}{z}\right)' \cdot \left(\frac{\sin z}{z}\right)' \right\} = \\ &= -\frac{1}{2} \left\{ \underbrace{\left[\frac{1}{2} \left(\frac{\sin z}{z}\right)^2\right]_0^\infty}_{0-1} + \frac{1}{2} \underbrace{\left[\left(\frac{\sin z}{z}\right)'\right]^2_0^\infty}_{0-0} \right\} = \frac{1}{4} \end{aligned}$$

Следовательно, интеграл $I = \int_0^{\infty} dz \frac{(\sin z - z \cos z)^2}{z^5} = \frac{1}{4}$

Таким образом, обменная поправка оказалась равной:

$$E_e^{(1)} \simeq - \frac{(k_F e^2)^2}{\Omega} \frac{9}{4} N_e^2 \frac{4\pi}{k_F k_F^2} \cdot \frac{1}{4}$$

$$N_e = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3, \quad \Omega k_F^3 = N_e \frac{(2\pi)^3}{2} \frac{3}{4\pi}$$

$$E_e^{(1)} = -e^2 k_F \frac{9}{4} N_e \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{1}{3} = -N_e k_F e^2 \frac{9^3}{4} \cdot \frac{4\pi}{4} \cdot \frac{2 \cdot 4\pi}{3 \cdot 8 \cdot 2\pi^3}$$

Итак $E_e^{(1)} \simeq -N_e (k_F e^2) \cdot \frac{3}{4\pi}$

$$k_F e^2 = \underbrace{\left(3\pi^2 \frac{1}{\Omega_e}\right)^{1/3}}_{k_F} e^2 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_e} e^2 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \underbrace{\left(\frac{e^2}{a_0}\right)}_{2Ry}$$

$$\Omega_e = \frac{4\pi}{3} r_e^3 \quad ; \quad (r_e = a_0 r_s);$$

$$E_e^{(1)} \simeq -N_e \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \cdot 2Ry \frac{3}{4\pi} \simeq -\frac{0,916}{r_s} N_e Ry$$

(если посчитать все численные коэффициенты.)

С формальной точки зрения, (вторая поправка по теории возмущений)

$$E_e^{(2)} = \sum_{s \neq 0} \frac{\langle 0 | \hat{V}_{ee} | S \rangle \langle S | \hat{V}_{ee} | 0 \rangle}{E_0 - E_s}$$

$|0\rangle \equiv |\{n\}\rangle$, $|S\rangle$ – промежуточное состояние системы.

\hat{V}_{ee} содержит 4 оператора $(a^+ a^+ a a) \Rightarrow$ после действия на $|0\rangle$ имеется ферми – сфера с двумя дырками внутри и двумя рожденными электронами e^- над поверхностью ферми–сферы – это и есть промежуточное состояние $|S\rangle$.

Второй оператор \hat{V}_{ee} должен дырки «закрыть», а электроны над поверхностью Ферми – поглотить.

$$E_e^{(2)} \sim \sum_{s \neq 0} \frac{\left\langle \dots \sum_q \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \dots \right\rangle \left\langle \dots \sum_{q_1} \frac{4\pi e^2}{\Omega q_1} \dots \right\rangle}{E_0 - E_s} \sim$$

(подставили только размерные величины)

$$\sum_q \searrow$$

$$\sim \frac{\left(\cancel{\Omega} k_F^\beta \right) \frac{e^2}{\cancel{\Omega} k_F^2} \left(\cancel{\Omega} k_F^\beta \right) \frac{e^2}{\cancel{k_F^2} \cancel{\Omega}}}{\varepsilon_F} (\dots) \sim \frac{(e^2 k_F)^2}{\varepsilon_F} (\dots) \sim \frac{(e^2 k_F)^2}{\frac{\hbar^2}{m} k_F^2} (\dots)$$

$$\sum_q \dots = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \dots = \left(\Omega k_F^3 \right) \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \leftarrow_{\text{число}}$$

$$E_e^{(2)} \sim \frac{e^4}{\hbar^2/m} (\dots) \sim \frac{e^2}{\left(\hbar^2/m e^2 \right)} (\dots) \sim (\dots) \frac{e^2}{a_\delta} \sim \underbrace{(\dots)}_{\sim (r_s)^0} \cdot Ry \quad (!)$$

Т.к. r_s – безразмерный параметр, то при вычислении может быть еще и логарифм (\ln – особенность кулоновских систем).

$\ln r_s$ при малых r_s отрицателен; $E_e^{(2)}$ – отрицательна.

На сегодняшний день вычислено точное значение:

$$E_e^{(2)} = (\alpha + \beta \ln r_s) Ry, \quad \alpha = -0,115.$$

Поправка 3-го ряда содержит уже 12 одноэлектронных операторов; она также вычислена:

$$E_e^{(3)} \sim \langle \dots V_{ee}^3 \rangle = r_s (\gamma + \delta \ln r_s) Ry$$

$$\varepsilon_{corr} = E_e^{(2)} + E_e^{(3)} + \dots$$

С формальной точки зрения, энергия (корреляционная) представляет собой функциональный ряд по степеням r_s и $\ln r_s$. Возникает вопрос, хорошо ли сходится ряд ε_{corr} как функции r_s . Для хорошей сходимости ряда необходимо, чтобы каждый следующий член был меньше предыдущего, то есть r_s должны быть малы по сравнению с единицей.

$$r_s = \frac{r_e}{a_0} \sim 2 \searrow Li \div 6 \searrow Cs \quad \text{для элементов первой группы (реальных щелочных металлов).}$$

Истинным параметром этого ряда оказалось по числовым причинам $\frac{r_s}{4,5}$.

С точки зрения этого подхода металлы с большим r_s - “плохие”: чем больше размер иона, тем хуже выполняется условие “простоты” (расстояние между электронами \ll расстояние между ионами, а не сравнимы).

Мы всегда можем использовать корреляционную энергию в виде ряда, ограничиваясь, в зависимости от точности, каким – то количеством первых членов.

С чего мы начали:

$$\widehat{H} \cong \widehat{T}_e + \left(\widehat{V}_{ee} + \widehat{V}_{ii} + \widehat{V}_{ei} \right)_{\vec{q} \neq 0} + \frac{b}{\Omega_0} \underbrace{z_0 N}_{N_e} \quad (\text{с учетом электронейтральности –}$$

локальной)

$$\widehat{T}_e = + \frac{2,21}{r_s^2} ZNRy; \quad \widehat{V}_{ee} = - \frac{0,916}{r_s} ZNRy + \varepsilon_{corr};$$

$$\widehat{V}_{ii} = - \frac{1,8}{r_s} Z^{5/3} NRy;$$

$$\widehat{V}_{ei} |_{\vec{q} \neq 0} = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \sum_{n=1}^N \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{ei}(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r}_\alpha - \vec{R}_n)} =$$

(по слагаемым этот оператор одночастичен)

$$= \sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} \left(\sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{n=1}^N V_{ei}(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{R}_n)} \right)_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2} =$$

(от вклада по частицам перешли к вкладу по состояниям)

$$= \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{n=1}^N V_{ei}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\vec{R}_n} \sum_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} \left(e^{i\vec{q}\vec{r}} \right)_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \hat{a}_{\vec{k}_1}^+ \hat{a}_{\vec{k}_2}^- .$$

Матричный элемент в этой формуле

$$\begin{aligned} \left(e^{i\vec{q}\vec{r}} \right)_{\substack{\vec{k}_1, \vec{k}_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} &= \sum_{\xi} \int d\vec{r} \frac{e^{-i\vec{k}_1\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_1}^+(\xi) e^{i\vec{q}\vec{r}} \frac{e^{i\vec{k}_2\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \hat{\chi}_{\sigma_2}(\xi) = \\ &= \underbrace{\left\{ \sum_{\xi} \hat{\chi}_{\sigma_1}^+(\xi) \hat{\chi}_{\sigma_2}(\xi) \right\}}_{\delta_{\sigma_1 \sigma_2}} \underbrace{\frac{1}{\Omega} \int d\vec{r} e^{i(-\vec{k}_1 + \vec{q} + \vec{k}_2)\vec{r}}}_{\delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1 - \vec{q}}} . \end{aligned}$$

Следовательно, мы можем записать

$$\hat{V}_{ei} \Big|_{\vec{q} \neq 0} = \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{n=1}^N V_{ei}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\vec{R}_n} \sum_{\substack{\vec{k}, \sigma \\ \sigma \sigma}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k} - \vec{q}}^- .$$

Вычислим теперь энергию электрон-ионного взаимодействия.

$$E_{ei}^{(1)} = \left\langle \{n\} \left| \hat{V}_{ei} \Big|_{\vec{q} \neq 0} \right| \{n\} \right\rangle \sim \sum_{\vec{q} \neq 0} \dots \left\langle \{n\} \left| \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k} - \vec{q}}^- \right| \{n\} \right\rangle \equiv 0$$

$$\vec{k} = \vec{k} - \vec{q} \Rightarrow \vec{q} = 0$$

$$\sigma = \sigma$$

Но у нас $\vec{q} \neq 0$, следовательно, $E_{ei}^{(1)} \equiv 0$ - первая поправка к энергии электрон-ионного взаимодействия есть ноль.

Чтобы понять, как решетка влияет на электронные состояния, необходимо вычислять вторую поправку: $E_{ei}^{(2)} = ?$

$\vec{R}_n = \vec{n} + \hat{u}_n$ такой величиной задается мгновенное положение иона вблизи узла n ;

$$e^{-i\vec{q}\vec{R}_n} = e^{-i\vec{q}\vec{n}} e^{-i\vec{q}\hat{u}_n} = (*)$$

$$\hat{u}_n = \sum_{\xi} \hat{u}_{\xi n}, \quad \hat{u}_{\xi n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}}} \left(\vec{l}_{\xi} e^{i\vec{q}\vec{n}} \hat{b}_{\xi} + \text{эрмит сопр.} \right)$$

$$\hat{u}_{\xi n} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}, \text{ эта величина макроскопически мала всегда;}$$

$\vec{q}\hat{u}_{\xi n}$ - мало, можно разложить экспоненту в ряд.

$$(*) = e^{-i\vec{q}\vec{n}} \left\{ \prod_{\xi} \underbrace{e^{-i\vec{q}\vec{u}_{\xi n}}}_{1 - i\vec{q}\vec{u}_{\xi n} + \bar{0}(u^2)} \right\} \approx$$

равновесное положение (ион сидит в узле).

$$\approx e^{-i\vec{q}\vec{n}} \left\{ 1 - i\vec{q} \sum_{\xi} \vec{u}_{\xi n} + \bar{0}(u^2) \right\} \approx e^{-i\vec{q}\vec{n}} \left\{ 1 - i\vec{q}\vec{u}_n + \bar{0}(u^2) \right\} \approx$$

Результат такой, будто $\vec{q}\vec{u}_{\xi n} \ll 1$, хотя этого нигде заложено не было. Это связано с тем,

что мы учли только линейный вклад; в линейной приближении из – за того, что

$\vec{u}_n = \sum_{\xi} \vec{u}_{\xi n}$, мы это и получили; для квадратичного слагаемого не сработало бы.

$$\vec{q}\hat{u}_n \sim \frac{\sqrt{\vec{u}^2}}{a}$$

$$\approx e^{-i\vec{q}\vec{n}} - i\vec{q}e^{-i\vec{q}\vec{n}}\vec{u}_{\xi n} + \dots$$

Лекция 7.

Вклад электрон-ионного взаимодействия с учетом колебаний ионов . Гамильтониан Фрелиха. Возможные типы электрон- фононного взаимодействия. Изменение полной энергии системы электронов и фононов. Полная энергия электрон- ионной системы. Нулевая модель металла и проблема металлического водорода.

$$\hat{V}_{ei} \Big|_{\vec{q} \neq 0} \approx \hat{V}_{ei}^{(0)} + \hat{V}_{ei}^{(1)} + \dots$$

$$\hat{V}_{ei}^{(0)} = \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{n=1}^N V_{ei}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}\vec{n}} \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}} = (*)$$

Взаимодействие электронов с жесткой колеблющейся решеткой.

$$\text{Решеточная функция } \sum_n e^{-i\vec{q}\vec{n}} = N \delta_{\vec{q}, \vec{G}}$$

$(\vec{q} \neq 0)$ необходимо, чтобы \exp обращалась в 1.

\vec{G} - вектора обратной решетки.

$$(*) = N \sum_{\vec{G} \neq 0} V_{ei}(\vec{G}) \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{G}}$$

Электрон, двигаясь через жесткую решетку, не будет на ней рассеиваться, если его состояние является собственным для этой решетки: он не может обменяться вектором \vec{G} с решеткой.

$$\hat{V}_{ei}^{(1)} = \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{n=1}^N V_{ei}(\vec{q}) \left\{ -i\vec{q}\vec{u}_n e^{-i\vec{q}\vec{n}} \right\} \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}$$

Зависимость от n теперь входит еще в \vec{U}_n ;

$$\sum_n \vec{u}_n e^{-i\vec{q}\vec{n}} = \sum_{\xi} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}}} \left\{ \vec{l}_{\xi} \hat{b}_{\xi} \left(\sum_n e^{i(\vec{f}-\vec{q})\vec{n}} \right) + \vec{l}_{\xi}^* \hat{b}_{\xi}^+ \left(\sum_n e^{i(-\vec{f}-\vec{q})(\vec{f}-\vec{q})\vec{n}} \right) \right\}$$

\vec{q} - электронный волновой вектор.

\vec{f} - фононный (решеточный) вектор.

$$\sum_n e^{i(\vec{f}-\vec{q})\vec{n}} = N \delta_{\vec{f}-\vec{q}, \vec{G}} = N \delta_{\vec{f}, \vec{q}+\vec{G}}$$

$$\sum_n e^{i(-\vec{f}-\vec{q})\vec{n}} = N \delta_{-\vec{f}-\vec{q}, \vec{G}} = N \delta_{\vec{f}, -\vec{q}-\vec{G}}$$

Проведем суммирование по \vec{f} ; получим:

$$= \sum_s \sqrt{\frac{\hbar N}{2M}} \left\{ \vec{l}_s(\vec{q} - \vec{\mathcal{G}}) \frac{\hat{b}_s(\vec{q} + \vec{\mathcal{G}})}{\sqrt{\omega_s(\vec{q} + \vec{\mathcal{G}})}} + \vec{l}_s^*(-\vec{q} - \vec{\mathcal{G}}) \frac{\hat{b}_s^+(-\vec{q} - \vec{\mathcal{G}})}{\sqrt{\omega_s(-\vec{q} - \vec{\mathcal{G}})}} \right\} = (*)$$

\vec{f} как собственный фоновый вектор принадлежит первой ячейке обратной решетки;

Если $\vec{q} < \frac{\vec{G}}{2}$ и попадает внутрь первой ячейки, то найдется подходящее \vec{f} , и никакого

\vec{G} не надо ($\vec{G}=0$); если \vec{q} выпадает из первой ячейки, нужно подобрать такое

значение \vec{G} , которое его в эту ячейку вернет. Законы сохранения требуют, чтобы \vec{G} было одним и только одним. \vec{G} - период решетки, следовательно, его можно отбросить, однако если \vec{q} не лежит в первой ячейке обратной решетки, "вычитать" соответствующее \vec{G} необходимо.

(вспоминаем $\vec{l}_s^*(-\vec{q}) = \vec{l}_s(\vec{q})$);

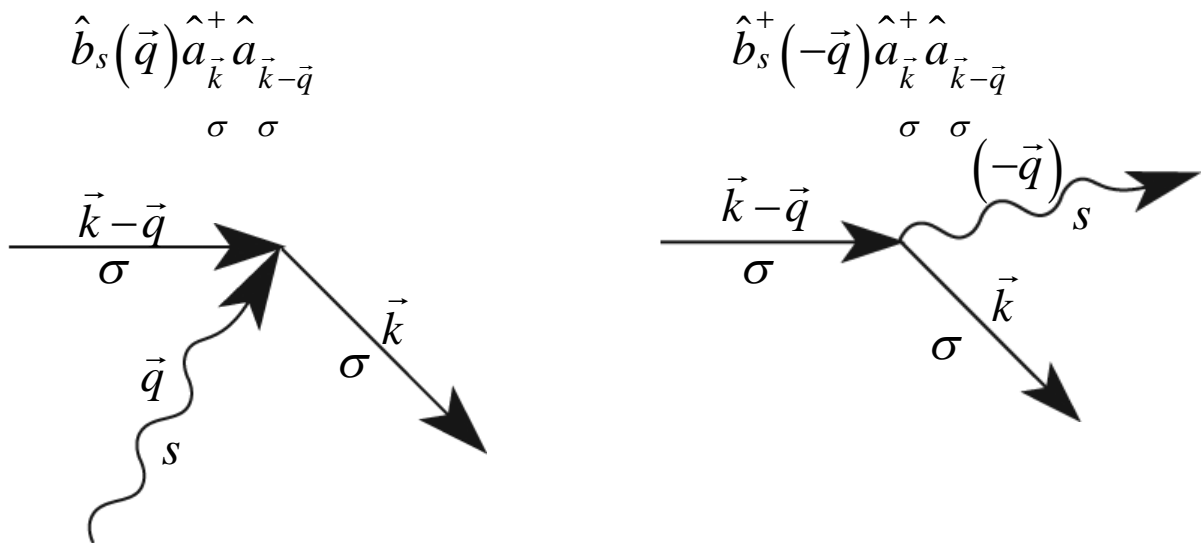
$$(*) = \sum_s \sqrt{\frac{\hbar N}{2M}} \frac{\vec{l}_s(\vec{q})}{\sqrt{\omega_s(\vec{q})}} \left\{ \hat{b}_s(\vec{q}) + \hat{b}_s^+(-\vec{q}) \right\}.$$

Подставим эту сумму в исходное выражение;

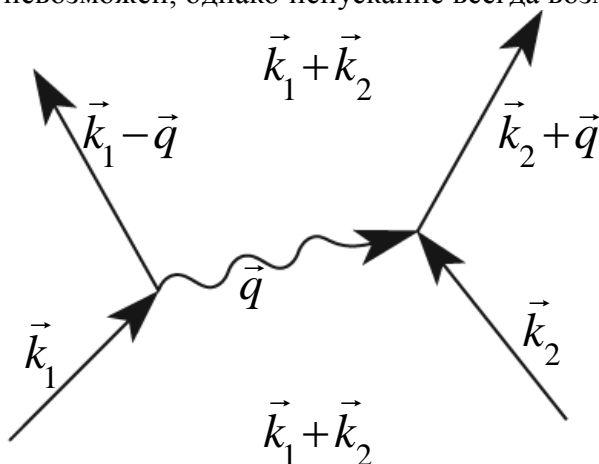
$$\hat{V}_{ei}^{(1)} = \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_s \sum_{\vec{k}} A_s(\vec{q}) \left\{ \hat{b}_s(\vec{q}) + \hat{b}_s^+(-\vec{q}) \right\} \hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}} \equiv \hat{H}_{e.ph},$$

где $A_s(\vec{q}) \equiv V_{ei}(\vec{q}) \sqrt{\frac{\hbar N}{2M \omega_s(\vec{q})}} (-i\vec{q} \vec{l}_s(\vec{q}))$ - вершина электрон- фононного взаимодействия.

Полученный результат называется гамильтонианом Фрѐлиха, или оператором электрон – фононного взаимодействия.



Первоначальное направление $\vec{k} - \vec{q}$ за счет “зацепления” за решетку всегда меняется, то есть электрон – фононное взаимодействие приводит к сопротивлению. При $T = 0$ равновесных фононов нет, поэтому первый процесс (с поглощением фонона) невозможен; однако испускание всегда возможно.



Если фонон, испущенный одним электроном, подхватывается другим, то его как такового в решетке нет, то есть такой фонон - виртуальный; Суммарный импульс пары электронов при определенных обстоятельствах не меняется при «зацеплении» за решетку, что и является причиной возможной сверхпроводимости. Но для этого нужно, чтобы каждый электрон нашел себе пару. Эти пары называются куперовскими. Это низкотемпературная сверхпроводимость (теория БКШ).

Итак, гамильтониан простого металла имеет следующий вид

$$\hat{H} \approx \hat{T}_e + \left(\hat{V}_{ee} + V_{ii} + \hat{V}_{ei} \right) \Big|_{\vec{q} \neq 0} + \frac{b}{\Omega_0} ZN,$$

где

$$\hat{T}_e \rightarrow E_e^{(0)} \approx + \frac{2,21}{r_s^2} ZNRy$$

$$\hat{V}_{ee} \rightarrow - \frac{0,916}{r_s} ZNRy + \underbrace{\varepsilon_{corr}}_{E^{(2)} + \dots}$$

$$V_{ii} \rightarrow - \frac{1,8}{r_s} Z^{5/3} NRy$$

$$\hat{V}_{ei} \rightarrow 0 + E_{ei}^{(2)} + \dots$$

Полная энергия простого металла в ридбергах

$$E_{tot}^{(0)} \approx \frac{2,21}{r_s^2} ZN - \frac{1,8}{r_s} Z^{5/3} N - \frac{0,916}{r_s} ZN + \frac{b}{\Omega_0} ZN + 0 \left(\varepsilon^{(2)} \dots \right)$$

Если выкинуть все поправки более высоких порядков

$$E_{tot}^{(0)} \approx \left(\frac{2,21}{r_s^2} Z - \frac{1,8}{r_s} Z^{5/3} - \frac{0,92}{r_s} Z \right) N + \frac{b}{\Omega_0} ZN$$

Для веществ с $Z=1$, (основное состояние простого металла) и $b=0$ (возможно ли устойчивое состояние атомарного водорода)? имеем

$$E_{tot}^{(0)} \approx \left(\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{2,72}{r_s} \right) N - \text{функция только } r_s, \text{ то есть электронной плотности.}$$

$$E = E(T, \Omega)$$

Рассмотрим случай $T=0$

$$E = E(\Omega)$$

Полная энергия

$$0 = \frac{\partial E_H^{(0)}}{\partial \Omega} = \frac{\partial E_H^{(0)}}{N \partial \Omega_0} = \frac{\partial E_H^{(0)}}{N 4\pi a_0^3 r_s^2 \partial r_s} = \frac{1}{N 4\pi a_0^3 r_s^2} \left(\frac{-2 \cdot 2,21}{r_s^3} + \frac{2,72}{r_s^2} \right) = 0$$

$$\Omega_0 = \frac{4\pi}{3} r_e^3 = \frac{4\pi}{3} a_0^3 r_s^3$$

$$r_s^{(0)} = \frac{2 \cdot 2,21}{2,72} \approx 1,63$$

Таким образом, существует точка экстремума, расположенная на расстоянии $1,63a_0$, которая соответствует экстремуму энергии. Убедимся в том, что это минимум:

$$\frac{\partial^2 E_H^{(0)}}{\partial \Omega^2} = \frac{1}{N^2 (4\pi a_0^3)^2 r_s^2} \frac{\partial}{\partial r_s} \frac{1}{r_s^2} \left(-\frac{2 \cdot 2,21}{r_s^3} + \frac{2,72}{r_s^2} \right) \Bigg|_{r_s=r_s^{(0)}} = (*)$$

Считаем производную только от скобки (при подстановке $r_s^{(0)}$ скобка дает

$$0 \rightarrow \frac{1}{r_s^2} \text{ можно не дифференцировать).}$$

$$(*) = \frac{1}{N^2 (4\pi a_0^3)^2 \left((r_s^{(0)})^2 \right)^2} \left(+\frac{6 \cdot 2,21}{(r_s^{(0)})^4} - \frac{2 \cdot 2,72}{(r_s^{(0)})^3} \right)$$

$$\frac{1}{(r_s^{(0)})^4} \left[6 \cdot 2,21 - 2 \cdot 2,72 \cdot (r_s^{(0)}) \right]$$

$$6 \cdot 2,21 - \cancel{2,72} \cdot 2 \cdot \frac{2 \cdot 2,21}{\cancel{2,72}} = 2 \cdot 2,21 > 0$$

$$\frac{\partial^2 E_H^{(0)}}{\partial \Omega^2} > 0 \quad ! \quad \text{То есть это действительно - минимум.}$$

Значит, существует метастабильное состояние, поэтому до сих пор идет исследование металлического водорода (ищут!).

Если бы он существовал, он был бы сверхпроводником при комнатной температуре (такая фононная структура) и, возможно, лучшим экологически чистым топливом.

Время жизни этого метастабильного состояния неизвестно, так как неизвестны все каналы развала метастабильной фазы.

Известно, что **3,5** Мегабар – необходимое давление для образования металлического водорода.

Для изучения свойств простых металлов с $b \neq 0$, величину b можно оценить по макроскопическим параметрам системы (из равновесной плотности электронов).

Лекция 8.

Одноэлектронное приближение. Уравнение Шредингера для электрона в поле периодического потенциала. Зонная структура спектра. Статистика заполнения электронами состояний в зонах. Классификация кристаллов. Диэлектрики, полупроводники, металлы. Волновые функции Блоха. Движение в классических электрическом и магнитном полях. Эффективные массы электронов.

Одноэлектронные собственные состояния в кристалле (в жесткой неколеблущейся решетке).

Рассмотрим характерные особенности поведения одного электрона в периодическом потенциале.

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(\vec{r}),$$

$$\hat{U}(\vec{r} + \vec{n}) = \hat{U}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

$$\hat{U}(\vec{r} + \vec{n}) = \sum_{\vec{G}} U(\vec{G}) e^{i\vec{G}(\vec{r} - \vec{n})}$$

В таком разложении свойство периодичности выполняется автоматически.

Произведение $\vec{G}\vec{n}$ всегда дает целое число (2π) , то есть лишняя \exp просто дает множитель 1.

Будем искать волновую функцию электрона в периодической решетке в виде

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}_1} C(\vec{q}_1) e^{i\vec{q}_1\vec{r}}. \text{ Подействуем на эту функцию оператором кинетической}$$

энергии

$$\hat{T}\psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \left(\sum_{\vec{q}_1} C(\vec{q}_1) e^{i\vec{q}_1\vec{r}} \right) = \sum_{\vec{q}_1} C(\vec{q}_1) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \underbrace{\left(\nabla \nabla e^{i\vec{q}_1\vec{r}} \right)}_{e^{i\vec{q}_1\vec{r}} (i\vec{q}_1)^2}$$

$$\text{Таким образом, первое слагаемое 1) } T\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}_1} C(\vec{q}_1) \frac{\hbar^2 q_1^2}{2m} e^{i\vec{q}_1\vec{r}}.$$

Вклад от оператора потенциальной энергии

$$\begin{aligned}
U(\vec{r})\psi(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G}} U(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}} \sum_{\vec{q}_1} C(\vec{q}_1) e^{i\vec{q}_1\vec{r}} = \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}_1} U(\vec{G}) C(\vec{q}_1) e^{i(\vec{G}+\vec{q}_1)\vec{r}} = \\
&= \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{G}} U(\vec{G}) C(\vec{q}-\vec{G}) e^{i\vec{q}\vec{r}}
\end{aligned}$$

(в последней формуле мы сделали замену $\vec{G} + \vec{q}_1 \rightarrow \vec{q}$)

$$\boxed{\sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \left\{ \frac{\hbar^2 q^2}{2m} C(\vec{q}) + \sum_{\vec{G}} U(\vec{G}) C(\vec{q}-\vec{G}) \right\} = \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} C(\vec{q}) E} \quad \text{- это уравнение -}$$

полный аналог уравнения Шредингера. Получили равенство рядов Фурье; экспоненты образуют полную ортонормированную систему, следовательно, коэффициенты должны совпадать:

$$\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - E \right) C(\vec{q}) + \sum_{\vec{G}} U(\vec{G}) C(\vec{q}-\vec{G}) = 0$$

Вместо дифференциального уравнения Шредингера мы получили алгебраическую систему уравнений на коэффициенты.

\vec{q} мы предполагаем независимой величиной; в данном уравнении она фиксирована;

количество неизвестных $\left\{ C(\vec{q}-\vec{G}) \right\}$ зависит от количества векторов обратной

решетки. Используя это обстоятельство, можно сказать, что

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}_1} C(\vec{q}_1) e^{i\vec{q}_1\vec{r}} \rightarrow \sum_{\vec{G}} C(\vec{q}+\vec{G}) e^{i(\vec{q}+\vec{G})\vec{r}}$$

(все неизвестные коэффициенты C отличаются друг от друга только добавкой своего фиксированного \vec{G})

В результате можно получить ограниченный ряд. Заменим $\vec{q} \rightarrow \vec{q} + \vec{G}_1$, где \vec{G}_1 - любой

вектор обратной решетки из набора \vec{G} , и подставим в исходное уравнение:

$$\left(\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - E \right) C(\vec{q} + \vec{G}_1) + \sum_{\vec{G}} U(\vec{G}) C(\vec{q} + \vec{G}_1 - \vec{G}) = 0$$

Или, вынося знак суммы за общую скобку, имеем

$$\sum_{\vec{G}} \left\{ \left[\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - E_n \right] \delta_{\vec{G},0} + U(\vec{G}) \right\} C_n(\vec{q} + \vec{G}_1 - \vec{G}) = 0.$$

Вспомним линейную алгебру – уравнение $\sum_j a_{ij} x_j = 0 \rightarrow \det \|\hat{a}\| = 0$

У нас $j \rightarrow \vec{G}$; $i \rightarrow \vec{G}_1$ и уравнение на собственные значения будет таким:

$$\det \left\| \left[\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - E \right] \delta_{\vec{G},0} + U(\vec{G}) \right\| = 0.$$

Ограничиваясь конечным числом столбцов и строк, получаем

$$D_0 + D_1 E + D_2 E^2 + \dots = 0, \text{ ряд обрывается в зависимости от нужной нам точности.}$$

Найдем $E_n(\vec{q})$ (они все существуют в силу Теоремы существования и единственности решения системы линейных уравнений) $n = 1, 2, \dots$ - в общем случае, разные.

Итак, в принципе можно найти энергии и волновые функции электрона с заданной точностью.

$$1) E_n(\vec{q}) \quad n = 1, 2, \dots$$

$$2) \psi_{n,\vec{q}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_n(\vec{q} + \vec{G}) e^{i(\vec{q} + \vec{G})\vec{r}} = e^{i\vec{q}\vec{r}} U_{n\vec{q}}(\vec{r}); \text{ - это теорема Блоха.}$$

$$U_{n\vec{q}}(\vec{r}) \equiv \sum_{\vec{n}} C_n(\dots) e^{i\vec{G}\vec{r}}; \rightarrow U_{n\vec{q}}(\vec{r}) \equiv U_{n\vec{q}}(\vec{r} + \vec{n})$$

Итак, для одноэлектронной задачи в периодической решетке имеем

$$\sum_{\vec{G}} \left\{ \left(\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - E \right) \delta_{\vec{G},0} + U(\vec{G}) \right\} C(\vec{q} + \vec{G}_1 - \vec{G}) = 0.$$

Условия разрешимости

$$\det \left\| \left[\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - E \right] \delta_{\vec{G},0} + U(\vec{G}) \right\| = 0$$

$$E_n(\vec{q}) \quad , n = 1, 2, \dots$$

\vec{G}_1 нумерует строки (количество уравнений).

\vec{G} нумерует столбцы.

\vec{G}, \vec{G}_1 определены на одном множестве.

Хотя формально \vec{G}, \vec{G}_1 принимают бесконечное множество значений, ряд всегда можно обрезать так, что последующие члены заведомо меньше предыдущих.

$$E_n(\vec{q})$$

Теорема Блоха:



$$\begin{cases} \psi_{n\vec{q}} = e^{i\vec{q}\vec{r}} U_{\vec{q}n}(\vec{r}) \\ U_{\vec{q}n}(\vec{r} + \vec{n}) \equiv U_{\vec{q}n}(\vec{r}) \end{cases}$$

Если в системе заменить $\vec{q} \rightarrow \vec{q} + \vec{G}'$, то просто получим циклическую перестановку строк, следовательно, определитель может только если знак поменять.

$\det = 0$, следовательно, он не изменится и, следовательно, набор корней не поменяется.

$$E_n(\vec{q} + \vec{G}') \equiv E_n(\vec{q})$$

Период изменения волнового вектора - \vec{G} ;

$$-\frac{\pi}{a_\alpha} = -\frac{G_{\min}^\alpha}{2} < q_\alpha \leq \frac{G_{\min}^\alpha}{2} = \frac{\pi}{a_\alpha}$$

Собственные функции эрмитового оператора образуют полную ортогональную систему:

$$\int d\vec{r} \psi_{\vec{q}n}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{q}_1s}(\vec{r}) = \delta_{\vec{q}\vec{q}_1} \delta_{ns}$$

$$\text{При } \vec{q} = \vec{q}_1 \rightarrow \int d\vec{r} U_{\vec{q}n}^*(\vec{r}) U_{\vec{q}s}(\vec{r}) = \delta_{ns}$$

Собственные значения энергии располагаем в порядке возрастания

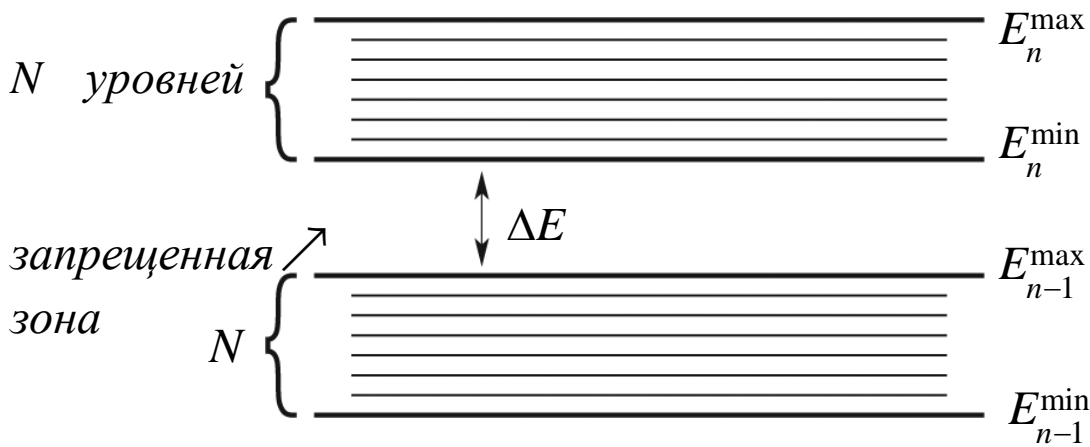
(при фиксированном \vec{q}):

$$E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq \dots$$

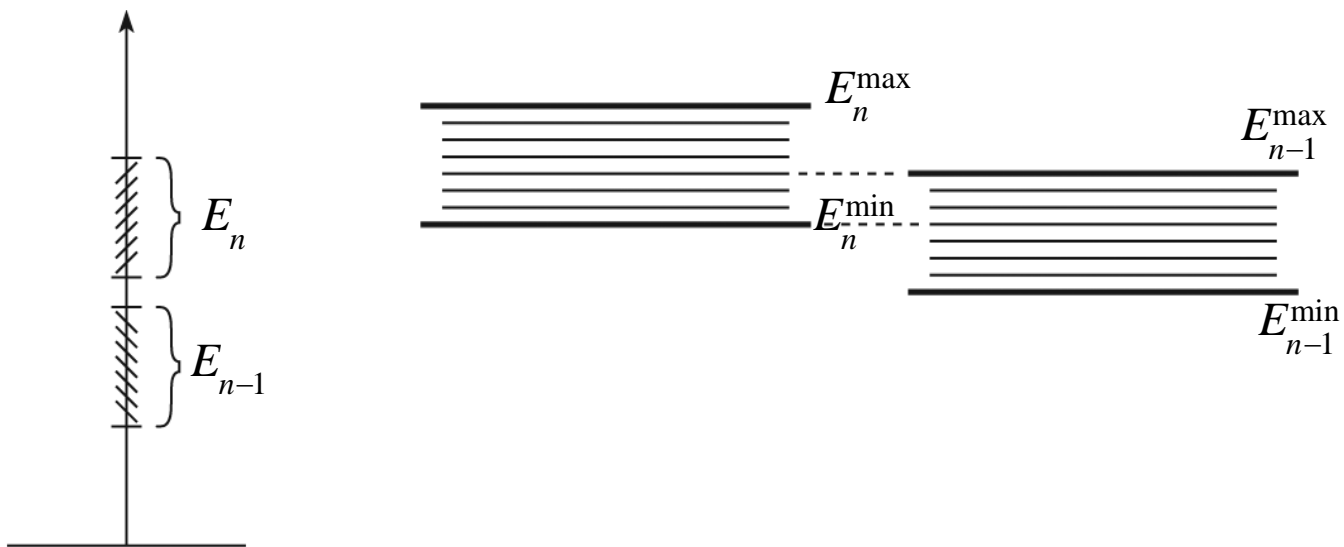
(Множество собственных значений счетно).

$$\text{Набор } \{\vec{q}\} = N$$

$$\underbrace{E_n^{\min} \leq E_n(\vec{q}) \leq E_n^{\max}}$$



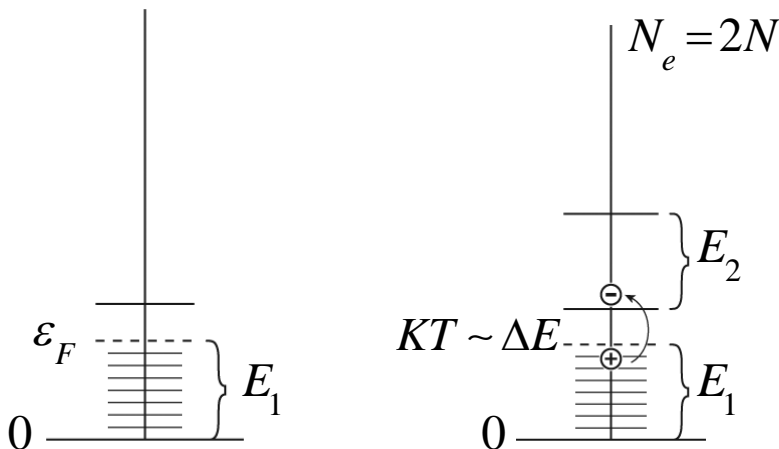
Спектр имеет полосатую (зонную) структуру. Запрещенной зоны может и не быть, зоны могут перекрываться.



При перекрытии хоть уровни и отвечают различным аналитическим функциям \vec{q} , но численно – перекрываются.

Внутри каждой зоны $2N$ состояний. Расселим по ним N электронов одновалентного металла.

Включение электрического поля позволяет (всегда) перевести часть электронов из – под \mathcal{E}_F в область над \mathcal{E}_F . Там – все еще разрешенная зона, это проводник.



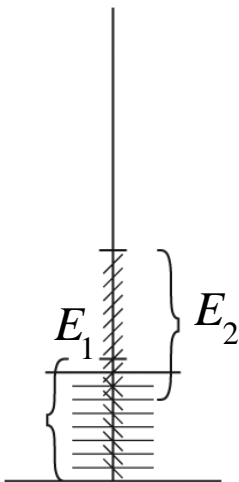
Для двухвалентного металла: $2N$ электронов занимают все $2N$ состояний в первой зоне. Если вторая зона отщеплена, то электрическое поле не позволяет переводить электроны на свободные уровни (нет свободных состояний) – диэлектрик.

Если вторая зона расположена выше первой на расстояние порядка κT , то некоторые электроны могут перескочить и двигаться в разрешенной второй зоне. В свою очередь в первой остались дырки, и там (оставшиеся) электроны тоже имеют не занятые места для “перескоков” → полупроводник с комбинированной проводимостью.

Если за некоторое время в диэлектрике один электрон накопит достаточно энергии от внешнего поля, чтобы перепрыгнуть вверх, возникает пробой диэлектрика; ток возрастает лавинообразно (следующие электроны занимают места перескочивших и сами перескакивают).

В структуре с чередующимися энергетическими зонами нечетно-валентные металлы всегда будут проводниками, четно-валентные – диэлектриками;

При $T = 0$;



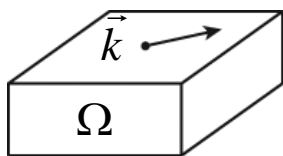
Четно-валентный металл может быть проводником, только если зоны перекрываются.

Собственные полупроводники: чистые диэлектрики при $T = 0$, полупроводник – при конечном T .

По типу заполнения зон можно определить структуру и свойства вещества. Таким образом, для любого электрона в поле кристаллической решетки имеется только одно состояние, определяемое квазиволновым вектором \vec{q} и номером энергетической зоны n .

Лекция 9.

Операторы координаты и скорости зонного электрона. Внутрizonные и межзонные вклады. Групповая и фазовая скорости электронов.



$$\psi_{\vec{k}} = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}}$$

Как перемещается электрон внутри объема?

Хотим построить функцию, которая будет “привязана” к построенному положению электрона вблизи определенной точки. Среди собственных функций такой функции нет. Волновой пакет:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n\vec{q}} a_n(\vec{q}) \psi_{\vec{q}n}(\vec{r}), \quad \psi(\vec{r}) \text{ отлична от нуля при } 0 < |\vec{r}| < a$$

Какие коэффициенты a_n существуют и что с ними происходит?

Хотим определить, как эта функция перемещается внутри кристалла.

Вводим оператор координаты:

$$\vec{r}\psi(\vec{r}) = \sum_{n\vec{q}} a_n(\vec{q}) \vec{r}\psi_{\vec{q}n}(\vec{r}) \quad - \quad \text{какое - то новое состояние.}$$

Если представим эту функцию как новую суперпозицию блоховских функций, получим новую функцию, следовательно, проследим за изменением $\psi(\vec{r})$ в пространстве.

$$\begin{aligned} \vec{r}\psi_{\vec{q}n}(\vec{r}) &= \vec{r}e^{i\vec{q}\vec{r}}U_{\vec{q}n}(\vec{r}) = \left(-i \frac{\partial}{\partial \vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \right) U_{\vec{q}n}(\vec{r}) = \\ &= -i \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{q}} \underbrace{\left(e^{i\vec{q}\vec{r}} U_{\vec{q}n} \right)}_{\psi_{\vec{q}n}} - e^{i\vec{q}\vec{r}} \frac{\partial U_{\vec{q}n}}{\partial \vec{q}} \right\} \end{aligned}$$

Таким образом,

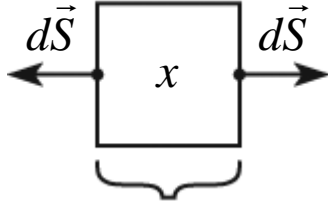
$$\begin{aligned} \vec{r}\psi(\vec{r}) &= \sum_{\vec{q}n} a_n(\vec{q}) (-i) \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{q}} \psi_{\vec{q}n} - e^{i\vec{q}\vec{r}} \frac{\partial U_{\vec{q}n}}{\partial \vec{q}} \right\} = \\ &= \sum_n (-i) \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \left\{ \int d\vec{q} a_n(\vec{q}) \frac{\partial}{\partial \vec{q}} \psi_{\vec{q}n} - \int d\vec{q} a_n(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \frac{\partial U_{\vec{q}n}}{\partial \vec{q}} \right\} = (*) \end{aligned}$$

Интеграл берется по первой ячейке обратной решетки.

$$\int d\vec{q} a_n(\vec{q}) \frac{\partial U_{\vec{q}n}}{\partial \vec{q}} = \int d\vec{q} \frac{\partial}{\partial \vec{q}} (a_n(\vec{q}) \psi_{\vec{q}n}) - \int d\vec{q} \frac{\partial a_n(\vec{q})}{\partial \vec{q}} \psi_{\vec{q}n}$$

$\int d\vec{q} \frac{\partial}{\partial \vec{q}} (a_n(\vec{q}) \psi_{\vec{q}n})$ в силу теоремы Остроградского преобразуется к

поверхностному интегралу $\oint_S a_n(\vec{q}) \psi_{\vec{q}n} dS$.



\vec{G} , то есть период всех функций, зависящих от \vec{q} . Значения в этих точках

совпадают, а $d\vec{S}$ отличается знаком, следовательно, поверхностный интеграл из-за периодичности равен нулю.

$$(*) = \sum_n \sum_{\vec{q}} \left\{ \left(i \frac{\partial a_n(\vec{q})}{\partial \vec{q}} \right) \psi_{\vec{q}n} + i a_n(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \frac{\partial U_{\vec{q}n}}{\partial \vec{q}} \right\} = (*)$$

В первом слагаемом уже есть линейная комбинация блоховских функций.

Блоховские функции, являясь собственными функциями эрмитового оператора, удовлетворяют условию ортонормированности;

$$\left\{ \begin{aligned} \int d\vec{r} \psi_{\vec{q}_1 n_1}^* \psi_{\vec{q}_2 n_2} &= \delta_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} \delta_{n_1 n_2} \\ \int d\vec{r} U_{\vec{q}_1 n_1}^* U_{\vec{q}_2 n_2} &= \delta_{n_1 n_2} \end{aligned} \right.$$

$$\frac{\partial U_{\vec{q}n}}{\partial \vec{q}} = \sum_m \vec{f}_{mn}(\vec{q}) U_{\vec{q}m} ; \quad \vec{f}_{mn}(\vec{q}) = \int d\vec{r} U_{\vec{q}m}^* \frac{\partial U_{\vec{q}n}}{\partial \vec{q}} ;$$

$$\sum_{\vec{q}} \sum_n i a_n(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \underbrace{\sum_m \vec{f}_{mn}(\vec{q}) U_{\vec{q}m}}_{[*]} = \sum_{\vec{q}} \sum_n i e^{i\vec{q}\vec{r}} \underbrace{U_{\vec{q}n}}_{\psi_{\vec{q}n}} \sum_m \vec{f}_{nm}(\vec{q}) a_m(\vec{q})$$

[*] так как. это суммы по одному и тому же набору индексов, поменяем $m \leftrightarrow n$

$$(*) = \sum_n \sum_{\vec{q}} \left\{ i \frac{\partial a_n(\vec{q})}{\partial \vec{q}} + \sum_m i \vec{f}_{nm}(\vec{q}) a_m(\vec{q}) \right\} \psi_{\vec{q}n}$$

В результате мы построили для функции $\vec{r}\psi(\vec{r})$ разложение по собственным функциям с новыми коэффициентами.

$$\boxed{\vec{r}\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}n} \left(\hat{r}_{\vec{q}n} a_n(\vec{q}) \right) \psi_{\vec{q}n}}$$

Оператор координаты в пространстве \vec{q}, n :

$$\hat{r}_{\vec{q},n} \equiv i \frac{\partial}{\partial \vec{q}} + \hat{\Omega}(\vec{q}) ; \hat{\Omega}(\vec{q}) a_n(\vec{q}) \equiv i \sum_m \vec{f}_{nm}(\vec{q}) a_m(\vec{q}).$$

Таким образом, оператор $\hat{\Omega}$ перебирает все m . Индексы n, m - номера собственных состояний (E_n, E_m) .

$\frac{\partial}{\partial \vec{q}}$ - внутризонное действие; $\hat{\Omega}(\vec{q})$ - межзонное взаимодействие.

Мы получили ответ на вопрос, как перемещается волновой пакет при заданном наборе собственных функций.

Найдем теперь оператор скорости.

$$\hat{V} = \hat{r} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{r} \right]$$

$$\begin{aligned} & E_{n_1}(\vec{q}_1) \delta_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} \delta_{n_1 n_2} \\ & \left\langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{V} | \vec{q} n \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \sum_{\vec{q}_2 n_2} \left\{ \left\langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{H} | \vec{q}_2 n_2 \right\rangle \left\langle \vec{q}_2 n_2 | \hat{r} | \vec{q} n \right\rangle - \right. \\ & \left. - \left\langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{r} | \vec{q}_2 n_2 \right\rangle \left\langle \vec{q}_2 n_2 | \hat{H} | \vec{q} n \right\rangle \right\} = \\ & E_n(\vec{q}) \delta_{\vec{q}_2 \vec{q}} \delta_{n_2 n} \end{aligned} \quad (**)$$

Матричный элемент \hat{H} всегда диагональный (блоховские функции $\langle \vec{q} n |$ - его собственные).

$$(**) = \frac{i}{\hbar} \left\{ E_{n_1}(\vec{q}_1) \langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{r} | \vec{q} n \rangle - \langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{r} E_n(\vec{q}) | \vec{q} n \rangle \right\}$$

$$\hat{r} E_n(\vec{q}) = \left\{ i \frac{\partial}{\partial \vec{q}} + \vec{\Omega}(\vec{q}) \right\} E_n(\vec{q}) = i \left(\frac{\partial E_n(\vec{q})}{\partial \vec{q}} + E_n(\vec{q}) \frac{\partial}{\partial \vec{q}} \right) + \hat{\Omega}(\vec{q}) E_n(\vec{q})$$

В результате получаем,

$$\begin{aligned} \left\langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{V} | \vec{q} n \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} \left\{ E_{n_1}(\vec{q}_1) \langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{r} | \vec{q} n \rangle - i \frac{\partial E_n(\vec{q})}{\partial \vec{q}} \langle \vec{q}_1 n_1 | \vec{q} n \rangle - \right. \\ &\left. - E_n(\vec{q}) \langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{r} | \vec{q} n \rangle \right\} = \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{q})}{\partial \vec{q}} \delta_{\vec{q}_1 \vec{q}} \delta_{n_1 n} + (E_{n_1}(\vec{q}_1) - E_n(\vec{q})) \frac{i}{\hbar} \langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{r} | \vec{q} n \rangle \end{aligned}$$

Первое слагаемое - внутризонный вклад, второе - межзонный вклад (в силу разности $E_{n_1} - E_n$). Если n_1 и n совпадают, то

$$\vec{V}_n(\vec{q}) = \left\langle \vec{q}_1 n_1 | \hat{V} | \vec{q} n \right\rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{q})}{\partial \vec{q}} \quad \text{- получили групповую скорость}$$

(перемещение центра тяжести пакета).

Изменение квантовых чисел:

$$\dot{\vec{p}} \equiv \hbar \dot{\vec{q}} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hbar \vec{q} \right] \rightarrow \frac{i}{\hbar} \left[E_n(\vec{q}), \hbar \vec{q} \right] = 0 \longrightarrow \boxed{\vec{p} = \hbar \vec{q} = const}$$

Квазиимпульс

в собственном представлении

Так определенная величина \vec{p} на самом деле не является импульсом:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla \rightarrow \left\langle \vec{q} n | \hat{\vec{p}} | \vec{q} n \right\rangle = \quad \text{(если этот матричный элемент окажется}$$

равным $\hbar \vec{q}$, это будет импульс)

$$= \int d\vec{r} \left(e^{i\vec{q}\vec{r}} U_{\vec{q}n}^* \right) \underbrace{(-i\hbar\nabla)}_{\mapsto} \underbrace{\left(e^{i\vec{q}\vec{r}} U_{\vec{q}n} \right)}_{\sum_{\vec{G}_1} C_n(\vec{q}+\vec{G}) e^{i(\vec{q}+\vec{G})\vec{r}}} = (*)$$

$$\underbrace{\sum_{\vec{G}_1} C_n(\vec{q}+\vec{G}) e^{i(\vec{q}+\vec{G})\vec{r}}}_{\sum_{\vec{G}_1} C_n(\vec{q}+\vec{G}) i(\vec{q}+\vec{G}) e^{i(\vec{q}+\vec{G})\vec{r}}}$$

$$(*) = \int d\vec{r} \sum_{\vec{G}_1} C_n^*(\vec{q}+\vec{G}) e^{-i(\vec{q}+\vec{G}_1)\vec{r}} \sum_{\vec{G}} \hbar(\vec{q}+\vec{G}) C_n(\vec{q}+\vec{G}) e^{i(\vec{q}+\vec{G})\vec{r}} =$$

$$= \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{G}_1} \hbar(\vec{q}+\vec{G}) C_n^*(\vec{q}+\vec{G}_1) C_n(\vec{q}+\vec{G}) \underbrace{\int d\vec{r} e^{-i(\vec{q}+\vec{G}_1)\vec{r}} e^{i(\vec{q}+\vec{G})\vec{r}}}_{\delta_{\vec{G}_1\vec{G}}}$$

(Объем не надо писать, так как исходная функция нормирована на единицу.)

$$\boxed{p = \sum_{\vec{G}} \hbar(\vec{q}+\vec{G}) \left| C_n(\vec{q}+\vec{G}) \right|^2 \neq \hbar\vec{q}} !$$

Таким образом, величина $\vec{p} = \hbar\vec{q}$ - не импульс; \vec{p} - квазиимпульс.

Если \vec{q} попало в первую ячейку, то $\hbar\dot{\vec{q}} = 0$, ничего не происходит.

Лекция 10.

Движение электронов во внешнем электрическом поле. Уравнение движения для квазиимпульса. Ускорение. Тензор эффективных масс. Блоховские осцилляции. Возможность создания полупроводниковых диодов – генераторов.

Теперь рассмотрим, как электрон и кристалл реагирует на наличие внешнего электрического поля:

$$\begin{cases} \widehat{H} \rightarrow \widehat{H} + \widehat{H}' \\ \widehat{H}' = -e\vec{\mathcal{E}}\widehat{r} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \hbar\dot{\vec{q}} &= \frac{i}{\hbar} \left[\widehat{H} + \widehat{H}', \hbar\vec{q} \right] = \frac{i}{\hbar} \underbrace{\left[\widehat{H}, \hbar\vec{q} \right]}_0 + \frac{0}{\hbar} \left[-e\vec{\mathcal{E}}\widehat{r}, \hbar\vec{q} \right] = -\frac{i}{\hbar} e\mathcal{E}^\alpha \left[\widehat{r}^\alpha, \hbar\vec{q} \right] = \\ &= -\frac{i}{\hbar} e\mathcal{E}^\alpha \left[i \frac{\partial}{\partial q_\alpha} + \widehat{\Omega}_\alpha(\vec{q}), \hbar\vec{q} \right] = -\frac{i}{\hbar} e\mathcal{E}^\alpha \left\{ i \left[\frac{\partial}{\partial q_\alpha}, \hbar\vec{q} \right] + \left[\widehat{\Omega}_\alpha(\vec{q}), \hbar\vec{q} \right] \right\} = \end{aligned}$$

(Второе слагаемое $\left[\widehat{\Omega}_\alpha(\vec{q}), \hbar\vec{q} \right] = 0$, так как $\widehat{\Omega}$ по определению действует на n (перепутывает).)

$$= -\frac{i}{\hbar} e\mathcal{E}^\alpha i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \vec{q} - \vec{q} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \right\} = e\mathcal{E}^\alpha \left\{ \underbrace{\frac{\partial \vec{q}}{\partial q_\alpha} + \vec{q} \frac{\partial}{\partial q_\alpha}}_{\frac{\partial}{\partial q_\alpha} \vec{q} \dots} - \vec{q} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \right\}$$

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial q_\alpha} = \vec{e}_\alpha;$$

$$\boxed{\dot{\vec{p}} = \hbar\dot{\vec{q}} = e(\vec{e}_\alpha \mathcal{E}^\alpha) = e\vec{\mathcal{E}}}$$

$$\vec{e}_x \mathcal{E}^x + \vec{e}_y \mathcal{E}^y + \vec{e}_z \mathcal{E}^z$$

Рассмотрим величину, соответствующую ускорению:

$$w_n^\alpha(\vec{q}) = \dot{V}_n^\alpha(\vec{q}) = \frac{d}{dt} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{q})}{\partial q_\alpha} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{d}{dt} E_n(\vec{q}) =$$

$$= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{\partial E_n(\vec{q})}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E_n(\vec{q})}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} \underbrace{1}_{\dot{q}_\beta} \equiv \left(\frac{1}{m_n^*} \right)^{\alpha\beta} (e\mathcal{E}^\beta)$$

$$w_n^\alpha(\vec{q}) = \left(\frac{1}{m_n^*} \right)^{\alpha\beta} (e\mathcal{E}^\beta) = \dot{V}_n^\alpha(\vec{q}), \text{ тензорный коэффициент имеет размерность}$$

$\frac{1}{\text{масса}}$.

$$\left(\frac{1}{m_n^*} \right)^{\alpha\beta} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\vec{q})}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} \equiv \left(\frac{1}{m_n^*} \right)^{\beta\alpha} - \text{тензор эффективных масс (название – из –}$$

за размерности);

Пусть

$$1) \vec{q} \sim \vec{q}_0 \rightarrow E_n(\vec{q}_0) = E_n^{\min},$$

тогда

$$E(\vec{q} \sim \vec{q}_0) = E_n^{\min} + 0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_n(\vec{q}_0)}{\partial q_0^\alpha \partial q_0^\beta} (q - q_0)^\alpha (q - q_0)^\beta \simeq$$

По α, β идет сумма.

$$E_n(\vec{q}) \left\{ \begin{array}{l} \text{---} E_n^{\max} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} E_n^{\min} \end{array} \right.$$

$\frac{1}{\partial q^\alpha \partial q^\beta}$ - симметричный тензор, следовательно, может быть приведен к

диагональному виду.

$$\simeq E_n^{\min} + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(\tilde{q}^x - \tilde{q}_0^x)^2}{m_{n,x}^*} + \frac{(\tilde{q}^y - \tilde{q}_0^y)^2}{m_{n,y}^*} + \frac{(\tilde{q}^z - \tilde{q}_0^z)^2}{m_{n,z}^*} \right]$$

$$\frac{1}{m_{n,\alpha}^*} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\vec{q}_0)}{\partial (\tilde{q}_0^\alpha)^2} > 0!$$

Мы получили представление о функциональном поведении $E(\vec{q})$ вблизи минимума.

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{m_n^*}\right)^{\alpha,\beta} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\vec{q})}{\partial \tilde{q}^\alpha \partial \tilde{q}^\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{2 \partial \tilde{q}_\alpha \partial \tilde{q}_\beta} [\dots] = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \tilde{q}_\alpha} \left[\frac{\partial (\tilde{q}_\beta - \tilde{q}_{0\beta})^2}{\partial \tilde{q}_\beta} \frac{1}{m_{n,\beta}^*} \right] = \\ &= \frac{1}{\cancel{2} \partial \tilde{q}_\alpha} \cancel{2} (\tilde{q}_\beta - \tilde{q}_{0\beta}) = \delta^{\alpha\beta} \frac{1}{m_{n,\alpha}^*} \end{aligned}$$

$$\begin{array}{c} \tilde{q} \sim \tilde{q}_0 \\ \swarrow \\ w_n^\alpha(\vec{q}) = \frac{\delta^{\alpha\beta}}{m_{n,\alpha}^*} e \mathcal{E}^\beta = \frac{e \mathcal{E}^\alpha}{m_{n,\alpha}^*} > 0! \end{array}$$

Ускорение

$$2) \vec{q} \sim \vec{q}'_0 \rightarrow E_n(\vec{q}'_0) = E_n^{\max}$$

$$E_n(\vec{q} \sim \vec{q}'_0) \approx E_n^{\max} - \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(\tilde{q}_x - \tilde{q}'_{0x})^2}{m'_{n,x}} + \frac{(\tilde{q}_y - \tilde{q}'_{0y})^2}{m'_{n,y}} + \frac{(\tilde{q}_z - \tilde{q}'_{0z})^2}{m'_{n,z}} \right];$$

$$\frac{1}{m'_{n,\alpha}} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \frac{\partial^2 E_n(\vec{q}'_0)}{\partial (\tilde{q}'_{0\alpha})^2} \right|; \text{ теперь, с учетом знака минус в предыдущей формуле}$$

$$\left(\frac{1}{m_n^*}\right)_{\vec{q} \sim \vec{q}'_0}^{\alpha\beta} = -\frac{\delta^{\alpha\beta}}{m'_{n,\alpha}} \rightarrow w_n^\alpha(\vec{q} \sim \vec{q}'_0) = -\frac{e \mathcal{E}^\alpha}{m'_{n,\alpha}} < 0!$$

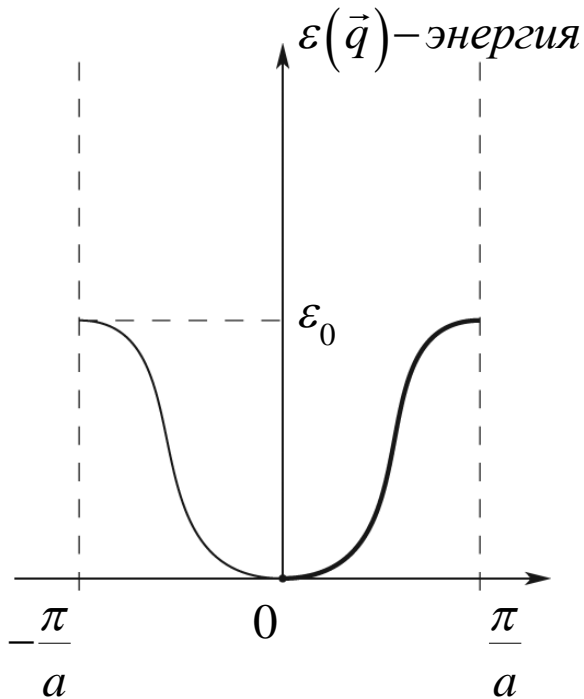
Понятие эффективной массы можно ввести только вблизи экстремумов (в силу разложения). Иначе в точке, где вторая производная переходит через ноль, эффективная масса m^* обращалась бы в бесконечность.

Электрон находится под воздействием двух полей – поля решетки и внешнего однородного постоянного поля $\vec{\mathcal{E}}$.

Знание $E_n(\vec{q})$ и есть знание воздействия поля решетки.

Вблизи минимума зоны электрон “почти” свободный (воздействие поля решетки сведено к минимуму), и он ускоряется внешним полем.

Затем поле решетки “притормаживает” внешнее поле, и кривизна из положительной переходит в отрицательную!



$$\hbar \dot{q} = (-e)(-\mathcal{E}) = e\mathcal{E} > 0$$

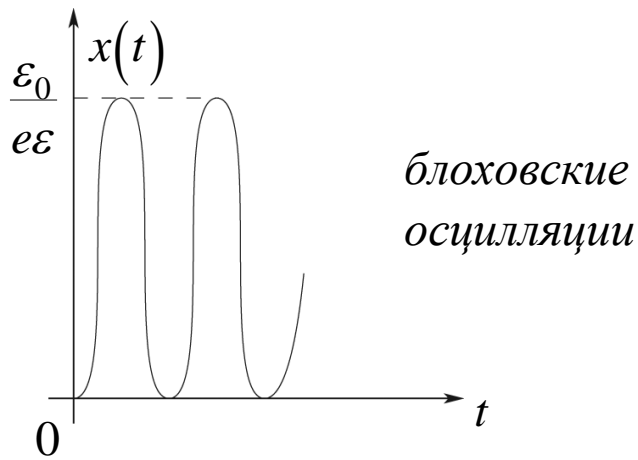
$$q(t) = \frac{e\mathcal{E}}{\hbar}t + q(0) \quad ; \quad q \text{ только растет со временем, } q(0) = 0 \text{ - в минимальном}$$

положении.

$-\vec{\mathcal{E}}$ - против оси, чтобы учесть знак заряда.

$$x(t) = \int_0^t V(t_1) dt_1 = \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\vec{q}(t_1))}{\partial q(t_1)} dt_1 = \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(q(t_1))}{\frac{1}{\hbar} e\mathcal{E}} dt_1 =$$

$$= \frac{\varepsilon(q(t))}{e\mathcal{E}} = \boxed{\frac{\varepsilon\left(\frac{e\mathcal{E}}{\hbar}t\right)}{e\mathcal{E}} = x(t)}$$



$x(0) = 0$ координата электрона.

$x(t)$ - осциллирующая функция, следовательно, ток равен нулю.

Для того, чтобы наблюдать такое поведение электрона необходимо иметь идеальный кристалл размером с Эверест. В реальных кристаллах раньше сработает отражение от стенок, чем блоховость.

Существуют такие потенциалы (созданные руками), при которых векторная функция будет меняться на расстояниях порядка нужных нам.

При таких осцилляциях $x(t)$, производная от тока, то есть динамическое

сопротивление – отрицательно, таким образом этот “прибор” является генератором (диод Ганна).

Лекция 11.

Движение электронов во внешнем стационарном магнитном поле. Траектория, по которой движется электрон в магнитном поле. Понятие годографа. Циклотронная эффективная масса. Диаманитный резонанс. Представление расширенных зон.

Магнитное поле энергии не меняет, следовательно, примитивный учет его как дополнительное слагаемое в гамильтониане – невозможен. Однако здесь работает другой простой подход.

$$H = 0 \rightarrow \rightarrow \rightarrow \rightarrow H \neq 0$$

↓

↓

$$E_n(\hbar\vec{q}) \rightarrow \rightarrow E_n\left(\hbar\vec{q} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \quad \text{Энергия как функция остается неизменной; но}$$

$$\text{rot}\vec{A} = \vec{H}$$

меняется ее аргумент (градиентная инвариантность).

То есть теперь $\vec{p} = \hbar\vec{q} - \frac{e}{c}\vec{A}$ - (новый) кинематический квазиимпульс. Как он меняется

со временем?

$$\overbrace{\left(\hbar\vec{q} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)}^{\bullet} = ?$$

Оценим, сколь сильно влияет магнитная добавка на изменении квазиимпульса.

$$\vec{A} = (-Hy, 0, 0) \rightarrow \text{rot}\vec{A} = (0, 0, H) \text{ - калибровка Ландау.}$$

$$\hbar\vec{q} - \frac{e}{c}\vec{A} = \left(p_x + \frac{eH}{c}y, p_y, p_z\right) \quad \vec{p} \equiv \hbar\vec{q}$$

Следовательно, влияние магнитного поля оценивается отношением \rightarrow

$$\frac{\frac{eH}{c}|y|}{p_x} \sim \frac{\frac{eH}{c}a}{p_x} \sim \frac{\frac{eH}{c} \frac{\hbar}{p_F}}{p_F} \sim \frac{\hbar\left(\frac{eH}{cm^*}\right)}{p_F^2/m^*} \sim \frac{\hbar\omega_*}{\varepsilon_F}$$

Здесь $\omega_* = \frac{eH}{cm^*}$ - циклотронная (Ларморова) частота.

y - декартова координата - локализация электрона, ограниченная размерами ячейки.

$$a \cdot p_F \sim \hbar$$

$$p_x \sim p_F$$

$$\hbar\omega_* = \hbar \frac{eH}{cm^*} \sim 10^{-27} \frac{5 \cdot 10^{-10} \cdot 1.2c}{3 \cdot 10^{10} \cdot 10^{-27}} \boxed{[H]} \sim 10^{-20} \frac{[H] \text{ эрг}}{1,6 \cdot 10^{-12} \frac{\text{эрг}}{eV}} \sim$$

числен. знач. поля
(без размерн.)

$\sim 10^{-8} [H] eV$. Таким образом, отношение характерной магнитной энергии к энергии Ферми составляет

$$\frac{\hbar\omega_*}{\varepsilon_F} \sim \frac{10^{-8} [H]}{10} \sim 10^{-9} \underbrace{(10^4 \div 10^5)}_{[H]}$$

Это ничтожно малый параметр по сравнению с параметром адиабатичности $\sim 10^{-3}$.

$$\boxed{\frac{eH}{c} |y|}{p_x} \sim 10^{-5} \div 10^{-4}$$

Таким образом, на размерах ячейки можно считать поле постоянным, и можно провести разложение.

$$\overbrace{\left(\hbar\vec{q} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)}^{\bullet} = \frac{i}{\hbar} \left[E_n \left(\hbar\vec{q} - \frac{e}{c} \vec{A} \right), \hbar\vec{q} - \frac{e}{c} \vec{A} \right] \quad \text{Тогда уравнение движения :}$$

$$\hbar\dot{\vec{q}} = \frac{i}{\hbar} \left[E_n(\hbar\vec{q}) + \frac{\partial E_n(\hbar\vec{q})}{\partial \hbar\vec{q}} \cdot \left(-\frac{e}{c} \vec{A} \right) + \dots, \hbar\vec{q} - \frac{e}{c} \vec{A} \right] \simeq$$

$$\simeq \frac{i}{\hbar} \left\{ \left[\cancel{E_n(\hbar\vec{q}), \hbar\vec{q}} \right] + \underbrace{\frac{\partial E_n(\vec{q})}{\hbar \partial q_\alpha}}_{\text{групповая скорость}} \cdot \left(-\frac{e}{c} \vec{A} \right) \left[A^\alpha, \hbar\vec{q} \right] + \left[E_n(\hbar\vec{q}), -\frac{e}{c} \vec{A} \right] + \dots \right\}$$

$[A^\alpha, \hbar\vec{q}]$ - это не векторное произведение, это коммутатор.

$$A^\alpha = -H \hat{y} \delta^{\alpha x}$$

$$\hbar\dot{q}_x \simeq \frac{i}{\hbar} \left\{ -\frac{e}{c} V_n^x H \left[\cancel{0, \hat{y}, \hbar q_x} \right] + \left[E_n(\hbar\vec{q}), -\frac{e}{c} (-H \hat{y}) \right] \right\}$$

Ограничимся движением внутри одной зоны (Ω не дает вклада); $\hat{y} = i \frac{\partial}{\partial q_y}$

$$\hbar \dot{q}_x \approx \frac{i}{\hbar} \left[E_n(\hbar \vec{q}), \frac{eH}{c} i \frac{\partial}{\partial q_y} \right] = -\frac{1}{\hbar} \frac{eH}{c} \left\{ \cancel{E_n} \frac{\partial}{\partial q_y} - \frac{\partial E_n}{\partial q_y} - \cancel{E_n} \frac{\partial}{\partial q_y} \right\} = \frac{eH}{c} \underbrace{\frac{\partial E_n}{\hbar \partial q_y}}_{\frac{\partial E_n}{\partial p_y} = v_n^y}$$

$$\hbar \dot{q}_y = \frac{i}{\hbar} \left\{ -V_n^x \frac{e}{c} H \left[-i \frac{\partial}{\partial q_y}, \hbar q_y \right] + [E_n(\hbar \vec{q}), 0] \right\} = -\frac{1}{\hbar} V_n^x \frac{eH}{c} \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial q_y}, q_y \right]}_1$$

$$\hbar \dot{q}_y \approx -\frac{eH}{c} V_n^x$$

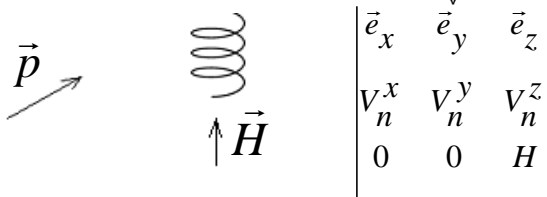
$$\hbar \dot{q}_z \approx 0$$

Таким образом, в линейном приближении окончательно мы получаем

$$\begin{cases} \hbar \dot{q}_x \approx \frac{eH}{c} V_n^y, \\ \hbar \dot{q}_y \approx -\frac{eH}{c} V_n^x, \\ \hbar \dot{q}_z \approx 0. \end{cases}$$

$$\dot{\vec{p}} \equiv \hbar \dot{\vec{q}} = \frac{e}{c} \underbrace{\begin{bmatrix} \vec{V}_n & \vec{H} \end{bmatrix}}_{\substack{\vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ v_n^x & v_n^y & v_n^z \\ 0 & 0 & H}}$$

-получилась вроде как магнитная составляющая



силы Лоренца; однако \vec{p} - не импульс.

$$\dot{p}_z = 0 \rightarrow p_z = p_{z0} = const$$

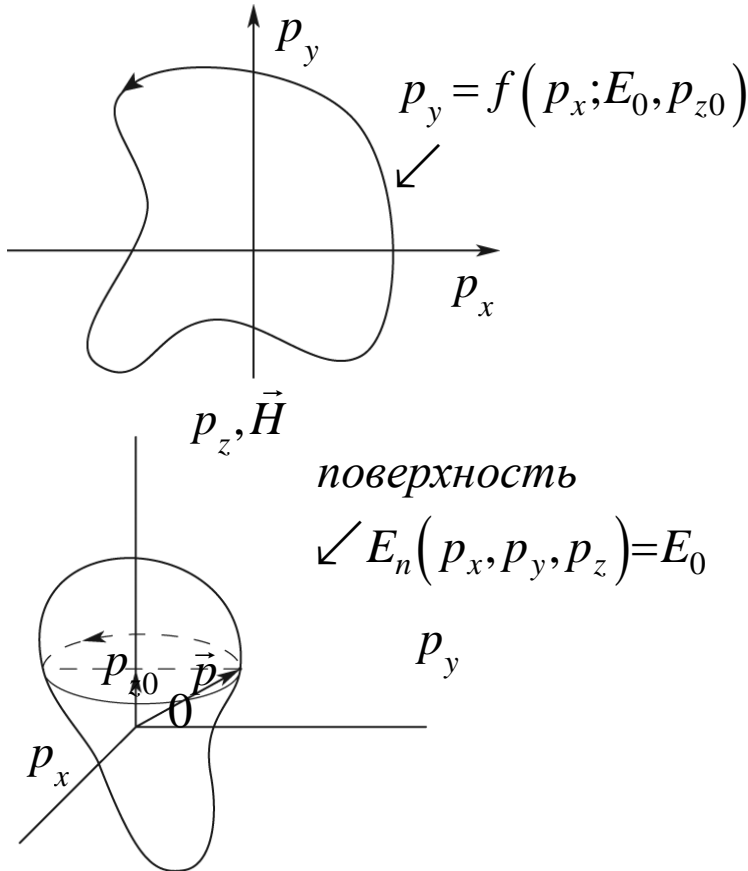
$$\frac{dE_n(\vec{q})}{dt} = \frac{\partial E_n}{\hbar \partial \vec{q}} (\hbar \dot{\vec{q}}) = \left(\vec{V}_n, \frac{e}{c} [\vec{V}_0 \vec{H}] \right) \equiv 0$$

То есть $E_n(p_x, p_y, p_{z0}) \equiv E_0 = const'$

Это уравнение определяет в импульсном пространстве поверхность

$$p_y = F(p_x; E_0, p_{z0})$$

Зависимость $p_y(p_x)$ есть траектория, по которой движется электрон в импульсном пространстве. Эта кривая называется годограф.



Электрон, находящийся на этой поверхности при заданном значении E_0 , в магнитном поле с нее никуда уйти не может.

$p_{z0} = const$, следовательно, проводим секущую плоскость $\perp OZ$;

Все точки получившейся кривой удовлетворяют двум условиям

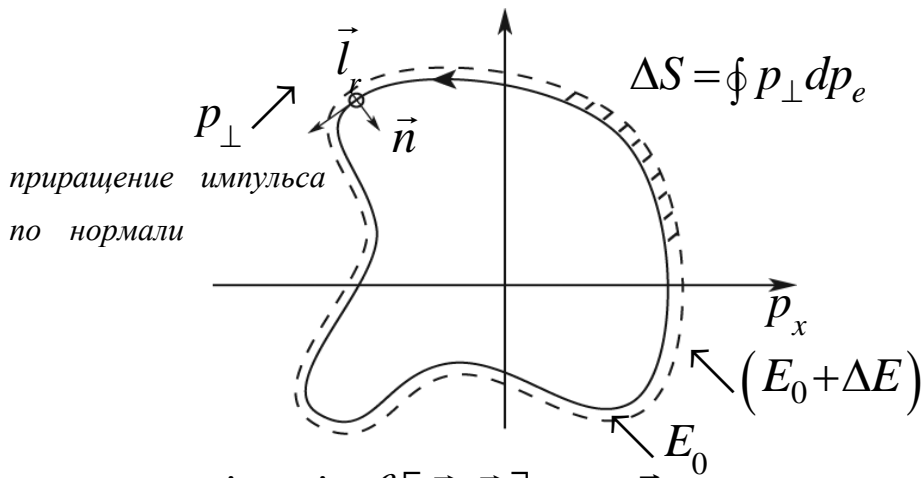
$$(p_{z0} = const; E_0 = const)$$

Введем три вектора:

\vec{l} - касательная к годографу;

\vec{n} - нормаль к годографу;

$\vec{l}_r \in$ плоскости \perp годографу.



$$\dot{\vec{p}} \equiv \hbar \dot{\vec{q}} = \frac{e}{c} [\vec{V}_n \vec{H}] \times \vec{l}$$

$$\frac{d\vec{p}_l}{dt} = \frac{eH}{c} (\vec{l} [\vec{V}_n \vec{l}_z]) = \frac{eH}{c} \left(\vec{V}_n \underbrace{[\vec{e}_z \vec{l}]}_{\vec{n}} \right) = \frac{eH}{c} V_n^\perp$$

$dt = \frac{c}{eH V_n^\perp} dp_l$ - интервал времени, за который электрон пройдет участок dp_l . Двигаясь по замкнутой кривой, электрон рано или поздно вернется в исходную точку.

Период такого движения : $T = \frac{c}{eH} \oint \frac{dp_l}{V_n^\perp} \equiv \frac{2\pi}{\omega_H^*}$.

$$\omega_H^* = \frac{1}{\frac{1}{2\pi} \frac{c}{eH} \oint \frac{dp_l}{V_n^\perp}} \equiv \frac{eH}{cm_H^*}$$

$$m_H^* \equiv \frac{1}{2\pi} \oint \frac{dp_l}{V_n^\perp} \text{ - циклотронная эффективная масса.}$$

Чем больше длина годографа (охватываемая им площадь), тем больше масса.

$$p_\perp = \frac{1}{\frac{\partial E_n}{\partial p_\perp}} \Delta E = \frac{1}{V_n^\perp} \Delta E$$

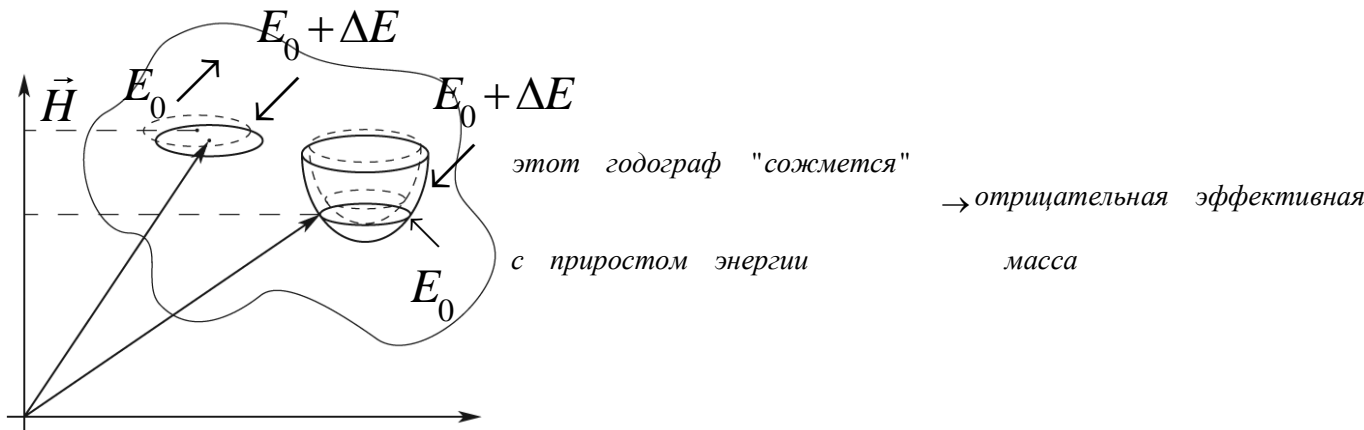
$$\Delta S = \oint \frac{1}{V_n^\perp} dp_l \Delta E$$

$$\oint \frac{dp_l}{V_n^\perp} = \frac{\Delta S}{\Delta E}$$

$$m_H^* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S(E, p_z)}{\partial E}$$

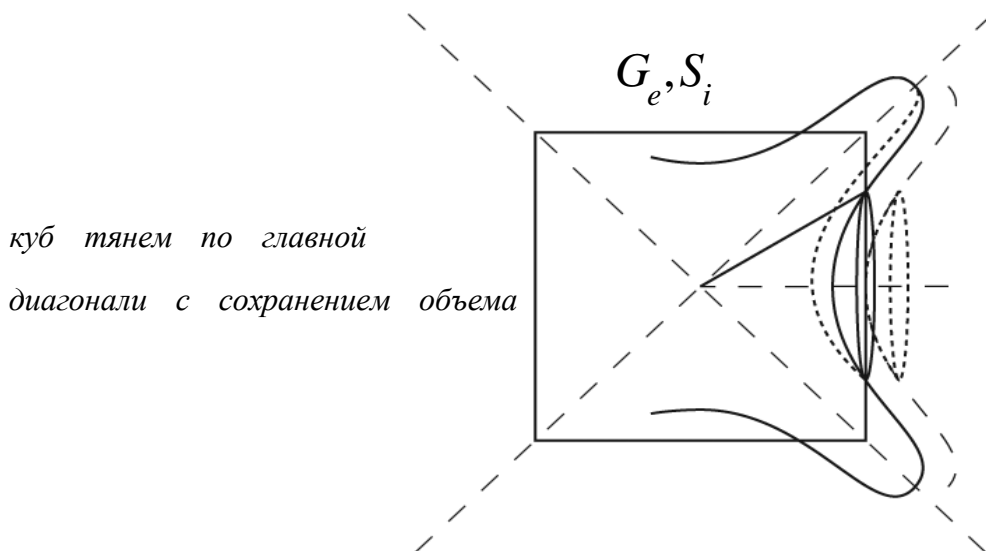
Таким образом, эффективная масса определяется скоростью изменения площади, охваченной годографом при изменении энергии.

На поверхности постоянной энергии могут быть невыпуклые области.



В силу симметрии (например, кубическая решетка), исходная поверхность постоянной энергии – куб, взаимодействие “растягивает” его по диагоналям.

Если поле направлено перпендикулярно грани, то реализуется ситуация отрицательной циклотронной эффективной массы.



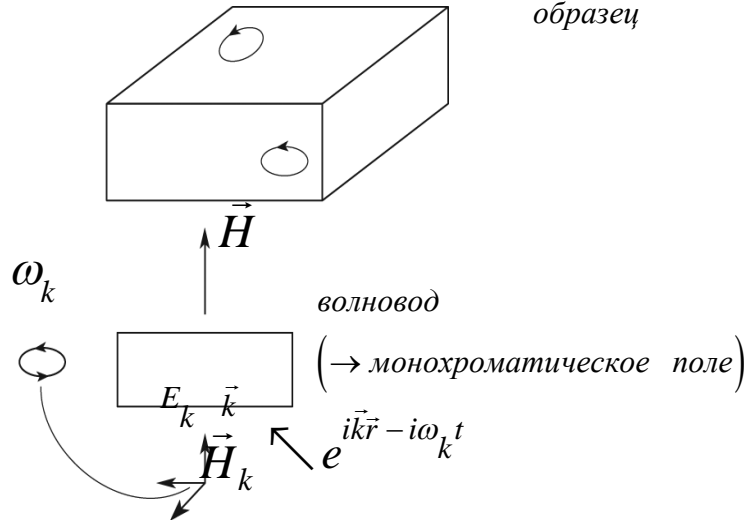
В некотором магнитном поле у каждой частицы – свой годограф.

Если частоты вращения поля ω_k и вращения электрона по годографу не совпадают,

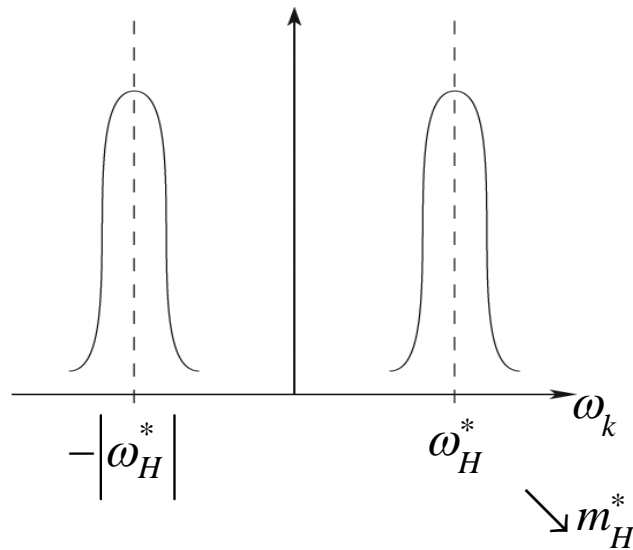
ничего не происходит; если совпадают – в системе покоя электрона на него действует постоянное электронное поле, которое перемещает (разгоняет) электрон!

Электрон поглощает квант поля $\hbar\omega_k$.

полупроводниковый
образец

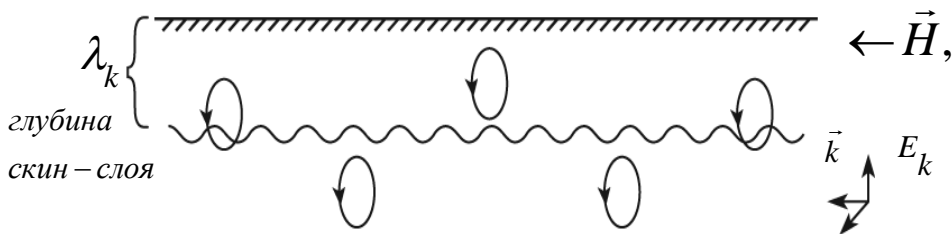


Поляризуем волну по кругу.



Диаманитный резонанс. По пикам можно вычислить ω_H^* и m_H^* .

Если это не полупроводник, а металл, то магнитное поле проникает только на глубину скин – слоя; электроны будут вести себя по разному:

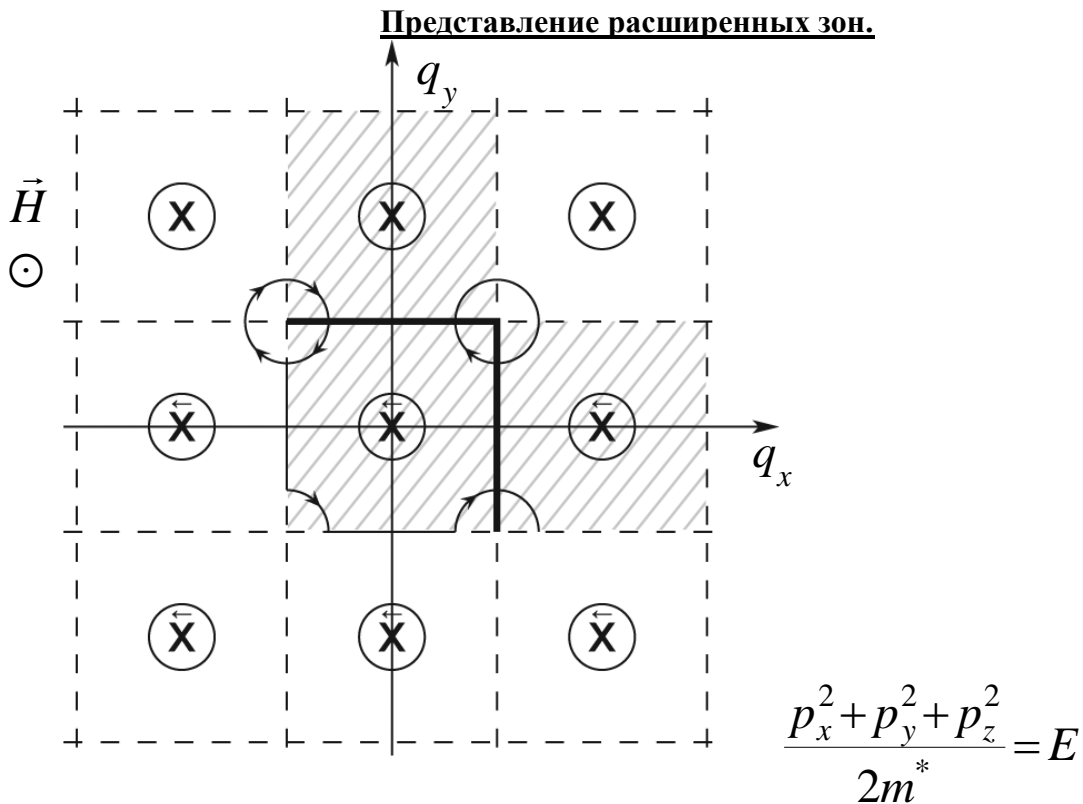


Для годографов, частично попадающих в скин – слой, электроны ускоряются подобно циклотронным – на участках пути, где приложено поле.

Тогда (при совпадении частот) получаем пик поглощения - циклотронный резонанс.

Лекция 12.

Приближение почти свободных электронов. Пустая решетка Шокли. Поправки к энергии одноэлектронного состояния в различных порядках теории возмущений. Особенности спектра электронов вблизи дна зоны и на границе зоны. Возникновение энергетической щели.



Если приложить магнитное поле вдоль оси Z ,

$$S(E, p_z) = \pi p_{\perp}^2 = \pi (p_x^2 + p_y^2) = \pi [2m^* E - p_z^2] \quad \text{- площадь сечения.}$$

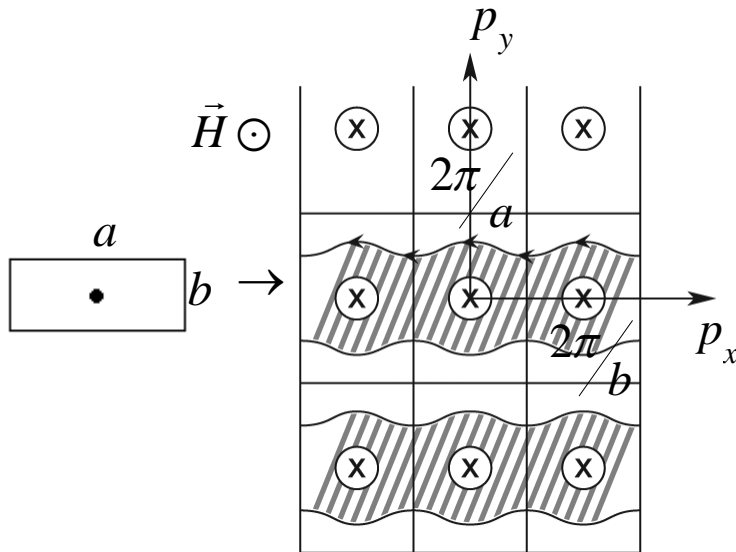
Область, занятая электронами есть сфера, повторяющаяся во всех ячейках.

Мы «наливаем» электроны, сфера расширяется.

Это происходит, пока сфера не выходит за границы первой ячейки (электронов мало); потом поверхность изменяется (пока не заполнена ячейка).

Рано или поздно голографы начинают охватывать свободные состояния, и получается ситуация с отрицательными m_H^* .

В случае кубической решетки касание сферой «стенок» происходит одновременно.



Электрон “двигается” по синусоиде в импульсном пространстве.

Возникает структура типа «гофрированные цилиндры».

Т.е. электрон двигается по незамкнутой траектории, и нельзя ввести никакой циклотронной массы (нельзя ввести охватываемую площадь).

$$\rho_0 \sim \frac{\alpha H^2}{\beta + \gamma H^2} \xrightarrow{H \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{\gamma} \quad \text{для замкнутых траекторий не зависит от поля,}$$

при больших полях возникает насыщение; ρ - магнитосопротивление (добавка к сопротивлению от магнитного поля).

$$\rho \sim \alpha' H^2 \xrightarrow{H \rightarrow \infty} \infty \quad \text{для незамкнутых траекторий.}$$

Если магнитное поле отходит от направления Z , то траектория становится замкнутой (даже если очень длинной).

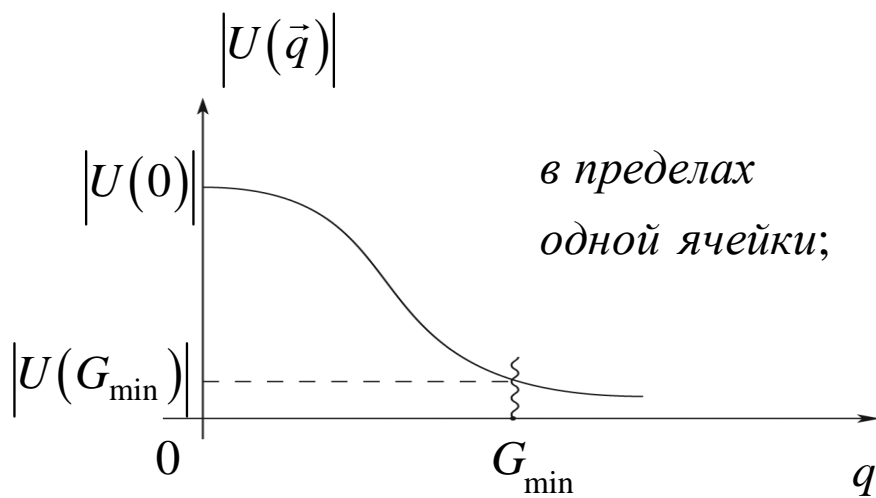
Таким образом, поведение электрона во внешнем магнитном поле зависит от вида его закона дисперсии.

$$E_n(\vec{q}) = ? \rightarrow \det \left\| \left[\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - E \right] \delta_{\vec{G},0} + U(\vec{G}) \right\| = 0$$

Для решения этого уравнения необходимо знать тип и параметры решетки (вектора обратной решетки) и значения потенциала. Мы не знаем вида Фурье – компоненты потенциала; мы не знаем, что такое вообще потенциал. Нужна какая – то модель.

Приближение почти свободных электронов (ПСЭ).

$$\left(\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - E \right) C(\vec{q} + \vec{G}_1) = - \underbrace{\sum_{\vec{G}} U(\vec{G}) C(\vec{q} + \vec{G}_1 - \vec{G})}_{= -U(0)C(\vec{q} + \vec{G}_1) - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) \dots}$$



$$U(\vec{G}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\vec{r} U(\vec{r}) e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

Разбивается на n интегралов по одной ячейке.

$U(\vec{r})$ - периодическая функция. Разделили воздействие Фурье – компонент на нулевую

и ненулевые части U .

В результате получаем:

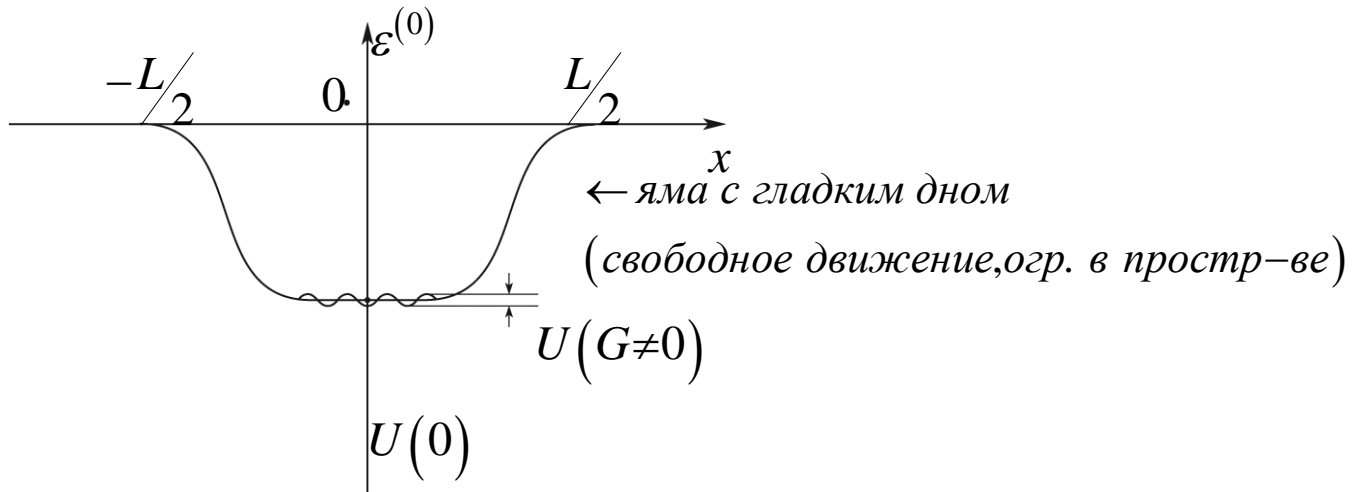
$$\left(\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - \underbrace{(E - U(0))}_E \right) C(\vec{q} + \vec{G}_1) = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) C(\vec{q} + \vec{G}_1 - \vec{G})$$

Слагаемые, оставшиеся в правой части малы по сравнению с нулевыми; это позволяет применить теорию возмущений.

"0" порядок $\left[\frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - E^{(0)} \right] C^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_1) = 0$ это так называемая

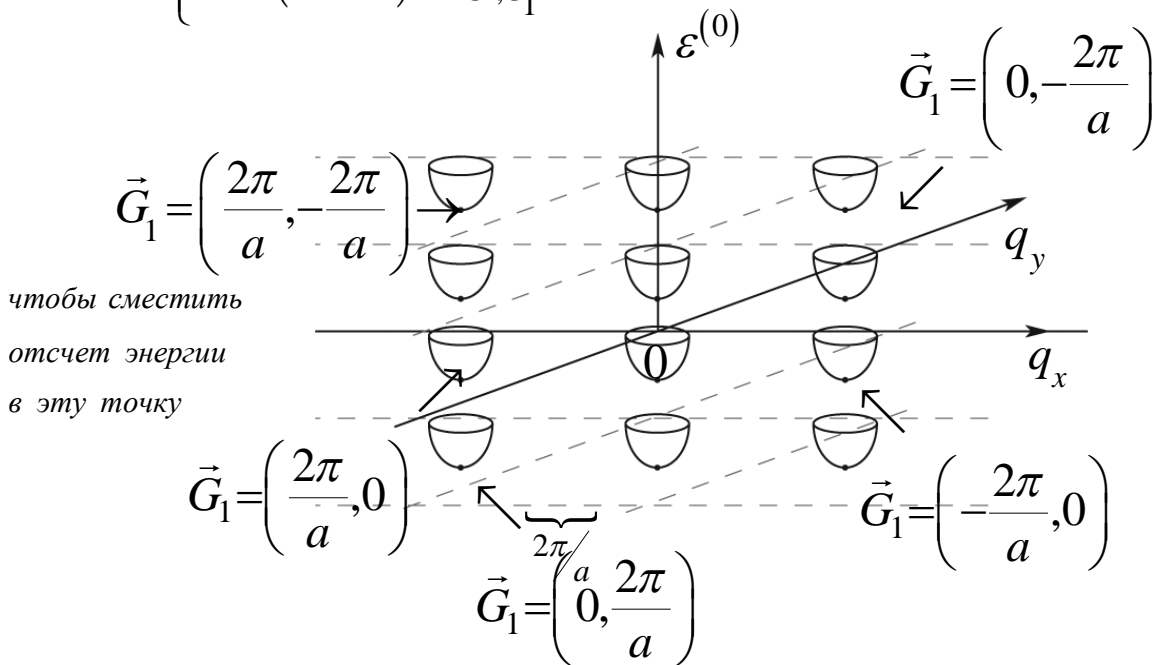
пустая решетка Шокли:

Получили условия на \vec{G}_1 , то есть учет решетки, хотя мы от нее вроде как хотели избавиться.



Учет последующих Фурье – компонент привел бы к искривлению дна с ничтожной амплитудой.

$$\rightarrow \begin{cases} \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_1) = \frac{\hbar^2 (\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} \\ C^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}') = \delta_{\vec{G}', \vec{G}_1} \end{cases}$$



Для разных \vec{G}_1 получаем параболоиды, расположенные в разных ячейках обратной решетки.

$$\psi_{\vec{q}} = e^{i\vec{q}\vec{r}} \sum_{\vec{G}'} C(\vec{q} + \vec{G}_1) e^{i\vec{G}'\vec{r}} \approx e^{i(\vec{q} + \vec{G}_1)\vec{r}} \quad \text{плоская волна (свободное движение).}$$

$$\begin{cases} \varepsilon = \varepsilon^{(0)} + \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \dots \\ C = C^{(0)} + C^{(1)} + C^{(2)} + \dots \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
& \text{"1" порядок} \quad \left[-\varepsilon^{(1)} \right]_{-\varepsilon^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}')} \underbrace{C^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}')}_{\delta_{\vec{G}',\vec{G}_1}} + \left[\varepsilon^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}') - \varepsilon^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}_1) \right] C^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}') = \\
& = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) \underbrace{C^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}'-\vec{G})}_{\delta_{\vec{G}'-\vec{G},\vec{G}_1}}
\end{aligned}$$

$$1) \quad \vec{G}' = \vec{G}_1 \rightarrow \left[-\varepsilon^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}_1) \right] \cdot 1 + 0 \cdot C^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}_1) = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) \underbrace{\delta_{\vec{G}_1-\vec{G},\vec{G}_1}}_{\delta_{\vec{G},0}} = 0;$$

Таким образом, поправка $\varepsilon^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}_1) = 0$ для любого параболоида;

$$\begin{aligned}
2) \quad \vec{G}' \neq \vec{G}_1 & \rightarrow -\varepsilon^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}') \cdot 0 + \left[\varepsilon^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}') - \varepsilon^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}_1) \right] C^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}') = \\
& = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) \delta_{\vec{G},\vec{G}'-\vec{G}_1} = -U(\vec{G}'-\vec{G}_1)
\end{aligned}$$

Из этого уравнения легко найти выражение для коэффициентов разложения

$$C^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}') \Big|_{\vec{G}' \neq \vec{G}_1} = \frac{-U(\vec{G}'-\vec{G}_1)}{\varepsilon^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}') - \varepsilon^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}_1)}$$

Есть ли поправка к волновой функции при $\vec{G}' = \vec{G}_1$ - мы не знаем.

$$\begin{aligned}
& \text{"2" порядок} \quad \left[-\varepsilon^{(2)}(\vec{q}+\vec{G}') \right] C^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}') + \left[-\varepsilon^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}') \right] C^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}') + \\
& + \left[\varepsilon^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}_1) - \varepsilon^{(0)}(\vec{q}+\vec{G}') \right] C^{(2)}(\vec{q}+\vec{G}') = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) C^{(1)}(\vec{q}+\vec{G}'-\vec{G})
\end{aligned}$$

Опять рассмотрим сначала случай $\vec{G}' = \vec{G}_1$.

$$\begin{aligned}
1) \vec{G}' = \vec{G}_1 &\rightarrow -\varepsilon^{(2)}(\vec{q} + \vec{G}_1) \cdot 1 + \underset{\varepsilon^{(1)}(\vec{q} + \vec{G}_1) = 0}{[-0]} C^{(1)}(\vec{q} + \vec{G}_1) + [0] C^{(2)}(\vec{q} + \vec{G}_1) = \\
&= - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) C^{(1)} \left(\vec{q} + \underbrace{\vec{G}_1 - \vec{G}}_{\neq \vec{G}_1} \right) = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) \frac{-U(\cancel{\vec{G}}_1 - \vec{G} - \cancel{\vec{G}}_1)}{\varepsilon^{(0)}(\vec{q} + (\vec{G}_1 - \vec{G})) - \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_1)} = \\
&= + \sum_{\vec{G} \neq 0} \left| U(\vec{G}) \right|^2 \frac{1}{\left[\varepsilon^{(0)}(\vec{q} + (\vec{G}_1 - \vec{G})) - \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_1) \right]} \\
&\text{(так как } \vec{G} \neq 0 \text{ здесь мы подставили } C^{(1)} \left(\vec{q} + \underbrace{\vec{G}_1 - \vec{G}}_{\text{вместо } \vec{G}' \neq \vec{G}_1} \right) \text{)}.
\end{aligned}$$

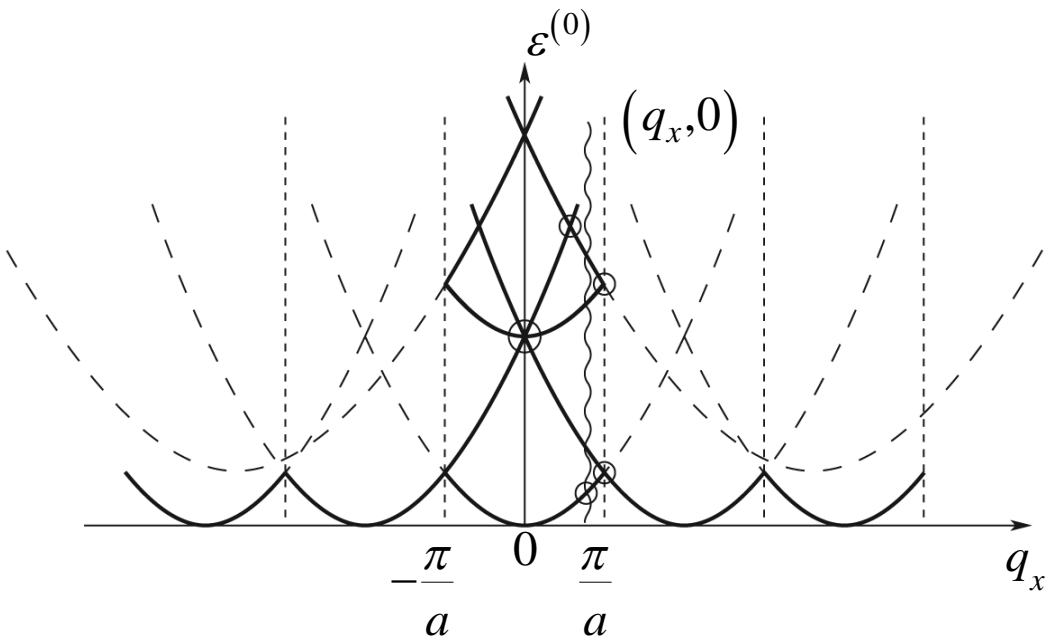
Таким образом, поправка к энергии возникает только во втором порядке теории

возмущений:

$$\boxed{\varepsilon^{(2)}(\vec{q} + \vec{G}_1) = - \sum_{\vec{G} \neq 0} \frac{|U(\vec{G})|^2}{\varepsilon^{(0)}(\vec{q} + (\vec{G}_1 - \vec{G})) - \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_1)}}$$

$\vec{G}' \neq \vec{G}_1$ позволяет найти $C^{(2)}$, но оно нам уже не нужно.

Ограничимся первой ячейкой обратной решетки; положение $q_y = 0$ означает проведение плоскости через q_x и $\varepsilon^{(0)}$.



Каждый кусок параболы, пересекающий первую ячейку, отвечает своему \vec{G}_1 (т.е. своей зоне – своему n).

Изменение энергии во втором порядке теории возмущений идет в меру разности энергии невозмущенных состояний.

$$\varepsilon_n(\vec{q}) \equiv \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_1) = \frac{\hbar^2(\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m}$$

$$\varepsilon_{\vec{G}_1}^{(0)}(\vec{q})$$

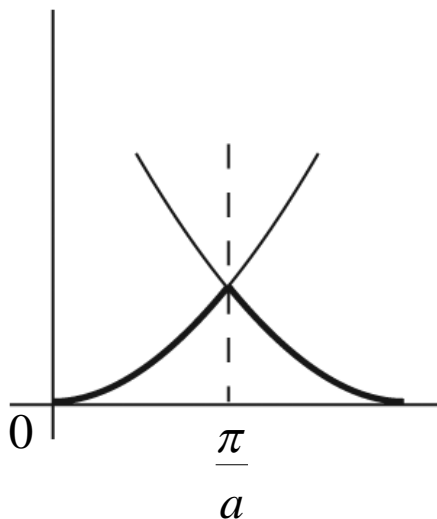
В точках \odot встречаются параболы, отвечающие разным \vec{G}_1 , то есть возникает вырождение (энергии совпадают), следовательно, ноль в знаменателе, следовательно, бесконечные поправки.

Надо исключить эти \vec{q} (выделить эти вырожденные состояния).

$$\left[\frac{\hbar^2(\vec{q} + \vec{G}_1)^2}{2m} - \varepsilon \right] C(\vec{q} + \vec{G}_1) = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) C(\vec{q} + \vec{G}_1 - \vec{G})$$

$$\vec{q} \rightarrow \vec{q}_* \longrightarrow \varepsilon^{(0)}(\vec{q}_*) \equiv \varepsilon^{(0)}(\vec{q}_* + \vec{G}_*)$$

$$\left. \begin{array}{l} C(\vec{q}_*) \\ C(\vec{q}_* + \vec{G}_*) \end{array} \right\} \rightarrow \infty!$$



$$\varepsilon^{(0)}\left(\frac{\pi}{a}\right) = \varepsilon^{(0)}\left(\frac{\pi}{a} + \left(-\frac{2\pi}{a}, 0\right)\right)$$

$$\left[\varepsilon^{(0)} - \varepsilon \right] C(\vec{q}_*) = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) C(\vec{q}_* + 0 - \vec{G}) = -U(-\vec{G}_*) C(\vec{q}_* + \vec{G}_*) -$$

$$- \sum_{\vec{G} \neq 0, -\vec{G}_*} U(\vec{G}) C(\vec{q}_* - \vec{G})$$

Для всех членов этой суммы – теория возмущений прекрасно работает.

Получаем первую пару уравнений:

$$\left[\varepsilon^{(0)} - \varepsilon \right] C(\vec{q}_*) \approx -U(-\vec{G}_*) C(\vec{q}_* + \vec{G}_*)$$

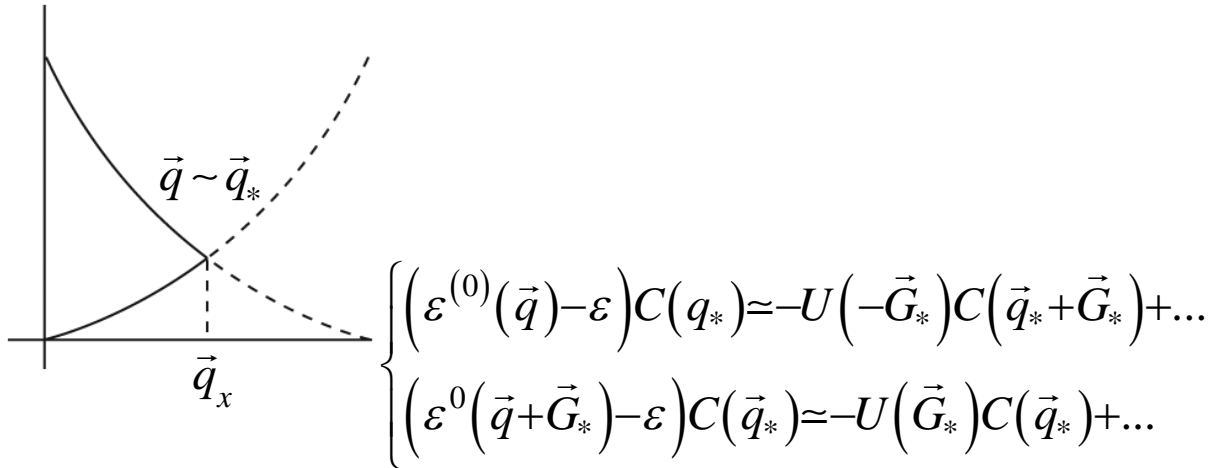
$$\left[\varepsilon^{(0)} - \varepsilon \right] C(\vec{q}_* + \vec{G}_*) = - \sum_{\vec{G} \neq 0} U(\vec{G}) C(\vec{q}_* + \vec{G}_* - \vec{G}) =$$

$$= -U(\vec{G}_*) C(\vec{q}_*) - \sum_{\vec{G} \neq 0, \vec{G}_*} U(\vec{G}) C(\vec{q}_* + \vec{G}_* - \vec{G})$$

Второе уравнение для тех же амплитуд:

$$\left[\varepsilon^{(0)} - \varepsilon \right] C(\vec{q}_* + \vec{G}_*) \approx -U(\vec{G}_*) C(\vec{q}_*)$$

Таким образом, мы получили систему для $\vec{q} \sim \vec{q}_*$:



Или окончательно :

$$\boxed{\begin{cases} \left(\varepsilon^{(0)}(\vec{q}) - \varepsilon \right) C(q_*) + U(-\vec{G}_*) C(\vec{q}_* + \vec{G}_*) \approx 0 \\ U(\vec{G}_*) C(\vec{q}_*) + \left(\varepsilon^0(\vec{q} + \vec{G}_*) - \varepsilon \right) C(\vec{q}_* + \vec{G}_*) \approx 0 \end{cases}}$$

Для существования решения необходимо, чтобы определитель был равен нулю

$$\begin{vmatrix} \varepsilon^{(0)}(\vec{q}) - \varepsilon & U(-\vec{G}_*) \\ U(\vec{G}_*) & \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_*) - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 ;$$

Получаем квадратное уравнение:

$$\varepsilon^2 - \varepsilon \left[\varepsilon^{(0)}(\vec{q}) + \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_*) \right] + \left[\varepsilon^{(0)}(\vec{q}) \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_*) - |U(\vec{G}_*)|^2 \right] = 0$$

И, соответственно, решение для энергии:

$$\varepsilon_{1,2}(\vec{q} \sim \vec{q}_*) = \frac{\varepsilon^{(0)}(\vec{q}) + \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_*)}{2} \mp \sqrt{\frac{[\varepsilon^{(0)}(\vec{q}) - \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_*)]^2}{4} + |U(\vec{G}_*)|^2}$$

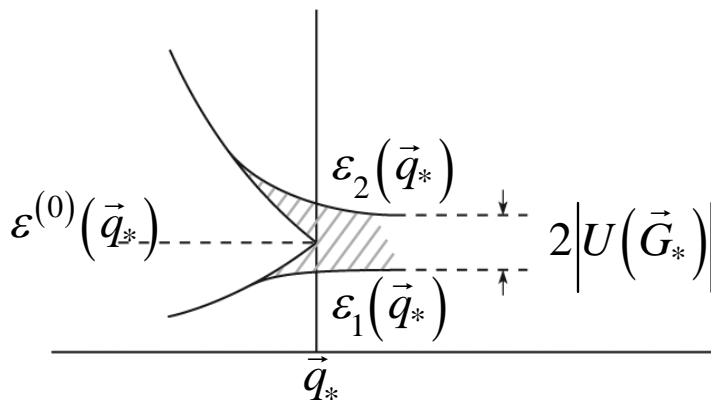
Разность энергий нулевого приближения мала.

$$\frac{\varepsilon^{(0)}(\vec{q}) - \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_*)}{2} \ll_{|\vec{q} \sim \vec{q}_*} |U(\vec{G}_*)| ;$$

Поэтому

$$\varepsilon_{1,2}(\vec{q} \sim \vec{q}_*) = \frac{\varepsilon^{(0)}(\vec{q}) + \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_*)}{2} \mp \left\{ |U(\vec{G}_*)| + \frac{1}{8} \frac{[\varepsilon^{(0)}(\vec{q}) - \varepsilon^{(0)}(\vec{q} + \vec{G}_*)]^2}{|U(\vec{G}_*)|^2} \right\}$$

В случае $\vec{q} = \vec{q}_* \rightarrow \varepsilon_{1,2}(\vec{q}_*) = \varepsilon^{(0)}(\vec{q}_*) \mp |U(\vec{G}_*)|$



В спектре возникает щель.

Главным требованием было ✓

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon^{(0)}(\vec{q}_*) &\equiv \varepsilon^{(0)}(\vec{q}_* + \vec{G}_*) \\ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{q}_*)^2 &\equiv \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{q}_* + \vec{G}_*)^2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \vec{G}_* \left(\vec{q}_* + \frac{\vec{G}_*}{2} \right) = 0$$

То есть условие возникновения энергетической щели совпадает с условием чисто упругого брегговского рассеяния.

Сколько бы малым не было \vec{q}_x , макроскопичность числа рассеивателей гарантирует изменение состояния (в данном случае – возникновение щели в спектре).

Рассмотрим поведение волновой функции.

$$\psi_{1,2} \Big|_{\vec{q} \approx \vec{q}_*} \approx e^{i\vec{q}\vec{r}} C_{1,2}(\vec{q}_*) + e^{i(\vec{q} + \vec{G}_*)\vec{r}} C_{1,2}(\vec{q}_* + \vec{G}_*)$$

Выберем для удобства рассмотрения частный случай -

$$\vec{G}_* = (0, 0, G_*)$$

$$\vec{q} = (\vec{q}_\perp, q_z)$$

Тогда волновая функция примет следующий вид :

$$\psi_{1,2} \Big|_{\vec{q} \approx \vec{q}_*} \approx e^{i\vec{q}_\perp \vec{\rho}} C_{1,2}(\vec{q}_*) \left\{ e^{iq_z z} + \frac{C_{1,2}(\vec{q}_* + \vec{G}_*)}{C_{1,2}(\vec{q}_*)} e^{i(q_z + G_*)z} \right\}$$

При этом

$$\frac{C_{1,2}(\vec{q}_* + \vec{G}_*)}{C_{1,2}(\vec{q}_*)} = \frac{-U(-\vec{G}_*)}{\varepsilon^{(0)}(\vec{q}_*) - \varepsilon_{1,2}(\vec{q}_*)} =$$

верхний знак отвечает первому корню

$$= \frac{|U(-\vec{G}_*)|}{\varepsilon^{(0)}(\vec{q}_*) - \varepsilon^{(0)}(\vec{q}_*) \pm |U(\vec{G}_*)|} = \pm 1$$

$$\psi_1 \Big|_{\vec{q} \approx \vec{q}_*} \approx e^{i\vec{q}_\perp \vec{\rho}} C_1(\vec{q}_*) \left\{ e^{iq_z z} + e^{i(q_z + G_*)z} \right\}$$

При $q_z \rightarrow \frac{\pi}{a}$, $G_* \rightarrow -\frac{2\pi}{a}$ получаем:

$$\psi_{1, \vec{q} \approx \vec{q}_*} \approx e^{i \vec{q}_\perp \vec{\rho}} C_1 \left\{ e^{i \frac{\pi}{a} z} + e^{i \left(\frac{\pi}{a} - \frac{2\pi}{a} \right) z} \right\} = e^{i \vec{q}_\perp \vec{\rho}} A_1 \cos \left(\frac{\pi}{a} z \right)$$

$$\psi_{2, \vec{q} \approx \vec{q}_*} \approx e^{i \vec{q}_\perp \vec{\rho}} C_2(\vec{q}_*) \left\{ e^{i \frac{\pi}{a} z} + e^{i \left(\frac{\pi}{a} - \frac{2\pi}{a} \right) z} \right\} = e^{i \vec{q}_\perp \vec{\rho}} A_2 \sin \left(\frac{\pi}{a} z \right)$$

В результате получили стоячую волну вдоль z (вместо бегущих плоских волн)

Если $z = a \cdot n_z$ (a - размер ячейки, $n_z \in \mathbb{Z}$), то

$$\frac{\pi}{a} z = \frac{\pi}{a} a n_z = \pi n_z, \text{ тогда}$$

$$\psi_1(a n_z) \sim \cos(\pi n_z) \sim (-1)^{n_z}$$

$$\psi_2(a n_z) \sim \sin(\pi n_z) = 0 ! \text{ вторая волновая функция в узлах решетки обращается}$$

в ноль, т.е. вероятность попасть туда равна нулю.

Если применить этот результат к нейтронной волне, то в случае ψ_1 (на отдельном ядре)

нейтрон поглощается ядром, для ψ_2 - вообще не взаимодействует (на решетке), т.е.

возможно подавление канала ядерной реакции.

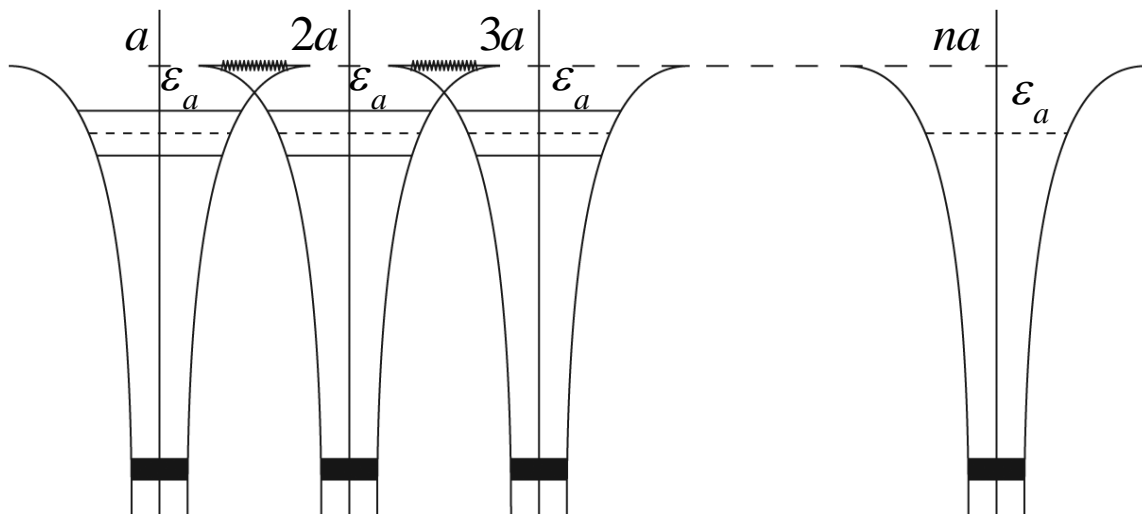
Это называется радикальной перестройкой состояний.

Определим поведение каждого из корней $\varepsilon_{1,2}(\vec{q} \sim \vec{q}_*)$ в окрестности точки \vec{q}_* . Для

этого вычислим производную:

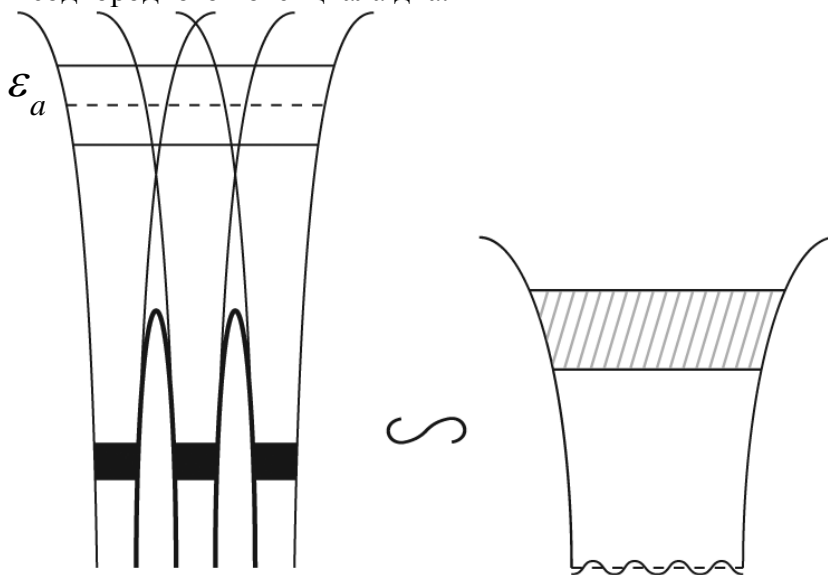
$$v_z^{1,2} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{1,2}}{\partial q_z} = \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\mathcal{Z}} \left\{ \underbrace{q_z \cdot \mathcal{Z} + \mathcal{Z}(q_z + G_*)}_{\frac{\pi}{a} + \frac{\pi}{a} - \frac{2\pi}{a}} \right\} \Bigg|_{q_z \sim \frac{\pi}{a}} = 0$$

То есть \mathcal{Z} - нормальная составляющая групповой скорости обращается в ноль (стоячая волна).



Происходит расщепление за счет перекрытия (возникает потенциальный барьер).
Такие же стенки потенциала (далеко отстоит), ϵ_a - тот же уровень.

В результате все большего сближения возникает полоса разрешенной энергии на фоне неоднородного потенциала дна.



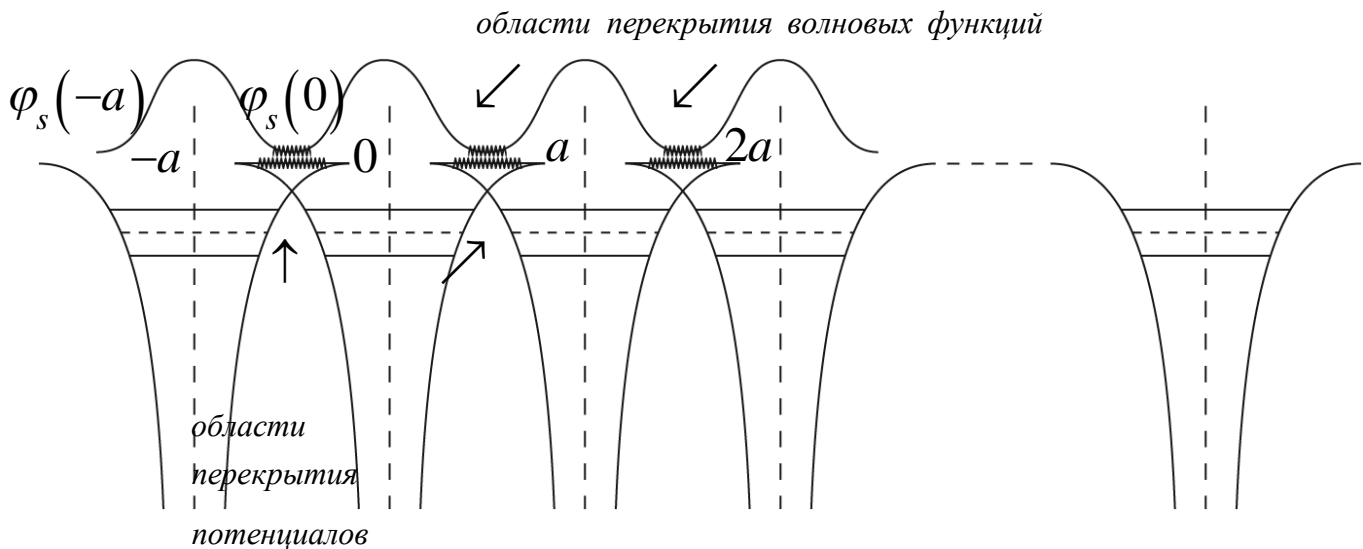
Таким образом, приближение ПСЭ хорошо работает в тех металлах, где перекрытие оболочек сильное.

Рассмотрим теперь противоположное приближение – когда перекрытие слабое.

Лекция 13.

Приближение сильной связи. Характер перекрытия волновых функций атомов. Интеграл перекрытия. Эффективная масса электронов в приближение сильной связи. Зависимость ширины зоны от количества ближайших соседей. Спектр возбуждений для простой, ОЦК и ГЦК решеток

Приближение узкой зоны.



Волновые функции электронов идентичны для любого узла \mathbf{n} , следовательно, есть вырождение по номеру узла.

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} C_{\vec{n}} \varphi_s(\vec{r} - \vec{n})$$

Будем искать решение в виде линейной комбинации

узельных функций. Все узлы одинаковы (в силу решеточного устройства), следовательно,

$$1. |C_{\vec{n}}|^2 = |C|^2 = \frac{1}{N}!$$

$$2. \psi(\vec{r} + \vec{n}_1) \equiv e^{i\vec{q}\vec{n}_1} \psi(\vec{r})$$

- волновая функция должна иметь блоховский вид
(т.к. это волновая функция электрона)

Выберем $C_{\vec{n}} = \frac{e^{i\vec{q}\vec{n}}}{\sqrt{N}}$

Тогда первое условие автоматически выполняется, второе – тоже

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} \frac{e^{i\vec{q}\vec{n}}}{\sqrt{N}} \varphi_s(\vec{r} - \vec{n})$$

$$\psi(\vec{r} + \vec{n}_1) = \sum_n \frac{e^{i\vec{q}\vec{n}}}{\sqrt{N}} \varphi_s(\underbrace{\vec{r} + \vec{n}_1 - \vec{n}}_{\vec{r} - (\vec{n} - \vec{n}_1)}) =$$

$$\underbrace{\vec{r} - (\vec{n} - \vec{n}_1)}_{\vec{n}'}$$

$$(\vec{n} = \vec{n}' + \vec{n}_1)$$

$$= \sum_{\vec{n}'} \frac{e^{i\vec{q}(\vec{n}' + \vec{n}_1)}}{\sqrt{N}} \varphi\left(\vec{r} - \vec{n}'\right) = e^{i\vec{q}\vec{n}_1} \psi(\vec{r})$$

Домножим уравнение Шредингера слева на $\psi^*(\vec{r})$ и проинтегрируем

$$\int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \hat{H} \psi(\vec{r}) = E \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}); \text{ получим:}$$

$$\int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \hat{H} \psi(\vec{r}) = E \underbrace{\int d\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2}_{1} = E,$$

$$E = \int d\vec{r} \underbrace{\sum_{\vec{n}_1} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{n}_1}}{\sqrt{N}} \varphi_s^*(\vec{r} - \vec{n}_1)}_{\psi^*(\vec{r})} \hat{H} \underbrace{\sum_{\vec{n}_2} \frac{e^{-i\vec{q}\vec{n}_2}}{\sqrt{N}} \varphi_s(\vec{r} - \vec{n}_2)}_{\psi(\vec{r})} =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}_1} \sum_{\vec{n}_2} e^{i\vec{q}(\vec{n}_2 - \vec{n}_1)} \int d\vec{r} \underbrace{\varphi_s^*(\vec{r} - \vec{n}_1)}_{\varphi_s^*\left(\vec{r}' + \underbrace{\vec{n}_2 - \vec{n}_1}_{\vec{n}}\right)} \hat{H} \underbrace{\varphi_s(\vec{r} - \vec{n}_2)}_{\varphi_s(\vec{r}')}$$

(Обозначим $\vec{r}' \equiv \vec{r} - \vec{n}_2$)

$$= \frac{1}{N} \left(\underbrace{\sum_{\vec{n}_1} 1}_N \right) \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{q}\vec{n}} \int d\vec{r}' \varphi_s^*(\vec{r}' + \vec{n}) \hat{H} \varphi_s(\vec{r}')$$

При этом мы учли, что $\widehat{H}\Big|_{\vec{r}} = \widehat{T} + U(\vec{r})$; $\widehat{H}\Big|_{\vec{r}+\vec{n}} = \widehat{T} + U(\vec{r})$,
 $U(\vec{r}+\vec{n}) \equiv U(\vec{r})$

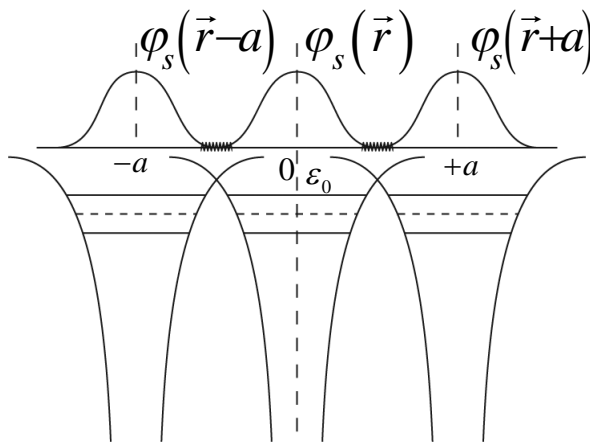
\widehat{T} -это ∇^2 , не меняется из-за сдвига на постоянный вектор.

В результате получим:

$$E = \underbrace{\int d\vec{r} \varphi_s^*(\vec{r}) \widehat{H} \varphi_s(\vec{r})}_{\varepsilon_a \cdot 1} + \underbrace{\sum_{n \neq 0} e^{i\vec{q}\vec{n}} \int d\vec{r} \varphi_s^*(\vec{r}+\vec{n}) \widehat{H} \varphi_s(\vec{r})}_{\sum_{\vec{g}} e^{i\vec{q}\vec{g}} (-t_{\vec{g}})}$$

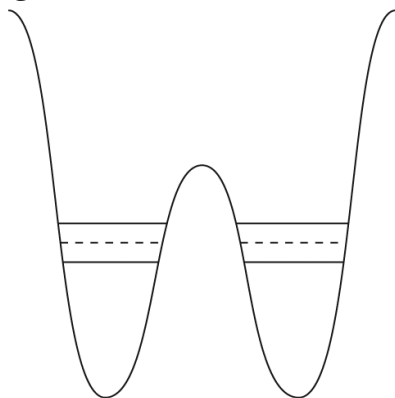
ε_a отличается от электронного уровня в изолированном атоме, так как учитывает искажение потенциала.

Второй интеграл дает не ноль только в областях перекрестия волновых функций, ближайших к нулевому узлу.



$-t_{\vec{g}} \equiv \int d\vec{r} \varphi_s^*(\vec{r}+\vec{g}) \widehat{H} \varphi_s(\vec{r})$ - интеграл перекрытия

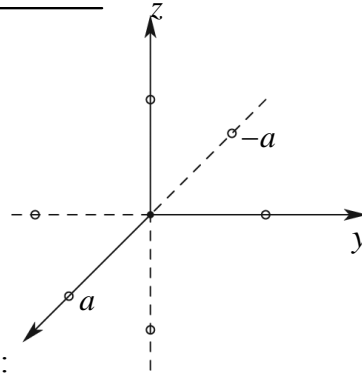
\vec{g} отличается от \vec{n} выборкой ближайших к $\vec{n}=\vec{0}$ соседей.



Посмотреть задачу про штаны Лифшица (в Ландау), там явно вычислена величина расщепления.

Написав $-t_{\vec{g}}$, мы учитываем только нижний уровень (основное состояние) – он единственно возможен.

В итоге получаем $\boxed{\varepsilon(\vec{q}) \approx \varepsilon_a - \sum_{\vec{g}} e^{i\vec{q}\vec{g}} t_{\vec{g}}}$ - спектр в приближении сильной связи.



Для простой кубической решетки (ПК):

$$\vec{g} = \begin{cases} (\pm a, 0, 0) \\ (0, \pm a, 0) \\ (0, 0, \pm a) \end{cases} t_{\vec{g}} \equiv t \quad \text{- одна и та же для всех направлений.}$$

Тогда в сумме по \vec{g} всего 6 слагаемых;

$$E(\vec{q}) \approx \varepsilon_a - t \left(e^{iq_x a} + e^{-iq_x a} + e^{iq_y a} + e^{-iq_y a} + e^{iq_z a} + e^{-iq_z a} \right) = \underline{\varepsilon_a - 2t(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a)}$$

Получилась явная аналитическая форма закона дисперсии для этой задачи.

$$E\left(\vec{q} + \frac{2\pi}{a}(m_1, m_2, m_3)\right) \equiv E(\vec{q}) \rightarrow -\frac{\pi}{a} < q_\alpha \leq \frac{\pi}{a}$$

Таким образом автоматически подтверждается периодичность, \vec{q} - квазиволновой вектор

$$\left. \begin{aligned} E(0) &= \varepsilon_a - 6t = E_{\min} \\ E\left(\frac{\pi}{a}(1,1,1)\right) &= \varepsilon_a + 6t = E_{\max} \end{aligned} \right\} E_{\min} \leq E(\vec{q}) \leq E_{\max}$$

Все значения энергии E образуют сплошную энергетическую зону.

1) Будем рассматривать электронные состояния вблизи минимума энергии:

$$\vec{q} \sim 0 \rightarrow \underbrace{\cos q_\alpha a}_{\ll 1} \approx 1 - \frac{1}{2}(q_\alpha a)^2$$

$$E(\vec{q} \sim 0) \approx \varepsilon_a - 2t \left(1 - \frac{a^2}{2} q_x^2 + \dots + 1 - \frac{a^2}{2} q_y^2 + \dots + 1 - \frac{a^2}{2} q_z^2 + \dots \right) \approx$$

$$\approx (\varepsilon_a - 6t) + a^2 t (q_x^2 + q_y^2 + q_z^2) = E_{\min} + a^2 t q^2$$

$$E(\vec{q} \sim 0) \approx E_{\min} + \frac{\hbar^2}{2m^*} q^2, \text{ где } \frac{\hbar^2}{2m^*} \equiv a^2 t \rightarrow \boxed{m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 t}}$$

Поскольку t - интеграл перекрытия, по мере уменьшения области перекрывания эффективная масса m^* растет, следовательно, взаимодействие падает (вся динамика сходит на нет), и наоборот.

2) Рассмотрим поведение энергии на границе зоны.

$$E\left(\vec{q} \sim \frac{\pi}{a}(1,1,1)\right) \approx \varepsilon_a - 2t \left(\cos\left(\frac{\pi}{a} - \delta_x\right) a + \cos\left(\frac{\pi}{a} - \delta_y\right) a + \cos\left(\frac{\pi}{a} - \delta_z\right) a \right)$$

$$\cos(\pi - a\delta_\alpha) = -\cos \delta_\alpha a \approx -1 + \frac{a^2}{2} \delta_\alpha^2$$

δ_α - мало

$$\text{Тогда } E \approx \varepsilon_a - 2t \left\{ -1 + \frac{a^2}{2} \delta_x^2 - 1 + \frac{a^2}{2} \delta_y^2 - 1 + \frac{a^2}{2} \delta_z^2 \right\} =$$

$$= (\varepsilon_a + 6t) - \frac{a^2}{2} \cdot 2t (\delta_x^2 + \delta_y^2 + \delta_z^2) = E_{\max} - a^2 t \left(\frac{\pi}{a}(1,1,1) - \vec{q} \right)^2$$

δ_α - компоненты вектора

$$\boxed{E\left(\vec{q} - \frac{\pi}{a}(1,1,1)\right) \approx E_{\max} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \delta^2}$$

Эффективная масса стала отрицательной, сохранив свою величину.

Мы все это уже получали из общих соображений, а теперь получили явно.

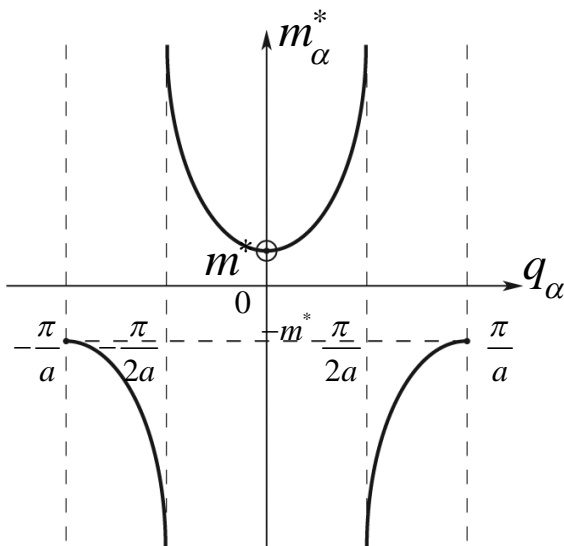
$$\left(\frac{1}{m^*}\right)^{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial E(\vec{q})}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} (-2t) (\dots + \cos q_\beta a + \dots)$$

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)^{\alpha\beta} = \frac{\delta^{\alpha\beta}}{m^*} \cos q_\alpha a; m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}$$

Если определить $m_\alpha^* \equiv \left[\left(\frac{1}{m^*}\right)^{\alpha\alpha}\right]^{-1} = \frac{m^*}{\cos q_\alpha a^2}$

(здесь $\alpha\alpha$ - диагональные компоненты, суммирования нет).

Обращение косинуса в ноль происходит внутри первой ячейки и есть области, где эффективной массы не существует.



$$\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 12t \equiv 2t \cdot z$$

У нас $z = 6$ - число ближайших соседей.

$$\Delta E = 2t \cdot z$$

- это общая формула.

Чем меньше величина перекрытия, тем меньше ширина зоны (эффективная масса m^* возрастает).

Рассмотрим кубическую решетку; вставляем в нее такую же, размещая вершины в центрах главных диагоналей. Получаем объемно-центрированную решетку; 8 ближайших соседей;

расстояние до них равно половине главной диагонали, т.е. $\frac{a}{2}\sqrt{3}$.

ОЦК $\rightarrow \vec{g} = \frac{\sqrt{3}}{2}a(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$; (задача для самостоятельного решения --получить

E_{\min} и E_{\max}). $z = 8$, Найти ΔE (будет такая же)

Аналогично, для ГЦК решетки :

$$\text{ГЦК} \rightarrow \vec{g} = \frac{\sqrt{2}}{2} a \begin{cases} (\pm 1, \pm 1, 0) \\ (\pm 1, 0, \pm 1) \\ (0, \pm 1, \pm 1) \end{cases} \quad 12 \text{ соседей } (z=12)$$

$$\Delta E = 2t \cdot z$$

Лекция 14.

Термодинамика электронных возбуждений в металлах. Теплоемкость и тепловое расширение электронной системы. Магнитная восприимчивость. Конкуренция парамагнетизма и диамагнетизма.

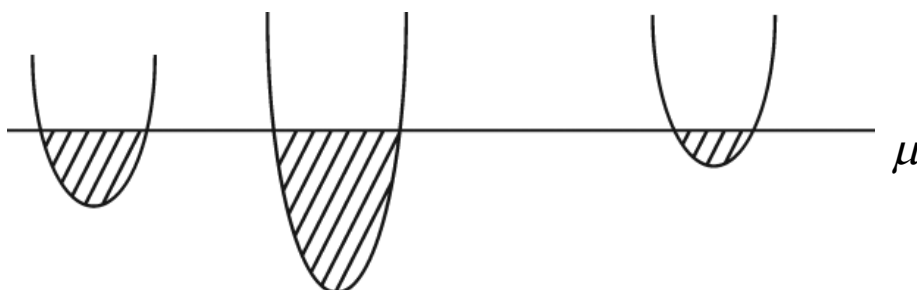
Термодинамика электронов металла.

Первоначально мы хотим найти теплоемкость. Различные термодинамические потенциалы описывают систему при определенных параметрах.

Мы имеем специфическую систему; электроны описываются распределением Ферми, следовательно, существует обрезающая энергия или химический потенциал. μ - параметр задачи;

$$\Omega(T, V, \mu) = -kT \sum_n \sum_{\sigma} \sum_{\vec{q}} \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - E_n(\vec{q})}{kT}} \right) =$$

Сумма по n обозначает перечисление всех тех зон, где есть занятые состояния:



$$= -kT \int_0^{\infty} d\varepsilon N_e \left\{ \underbrace{\frac{1}{N_e} \sum_{\vec{q}} \sum_{\sigma} \sum_n \delta(\varepsilon - E_n(\vec{q}))}_{g(\varepsilon) = Vg^{(1)}(\varepsilon)} \right\} \varepsilon \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}} \right) =$$

(Здесь $g(\varepsilon)$ - функция плотности, $g^{(1)}(\varepsilon)$ - удельная функция плотности.)

$$= -kTN_e V \int_0^{\infty} \underbrace{d\varepsilon g^{(1)}(\varepsilon)}_{dZ^{(1)}(\varepsilon)} \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}} \right) =$$

(Возьмем интеграл по частям; $Z^{(1)}(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} d\varepsilon' g^{(1)}(\varepsilon')$ - плотность состояний.)

$$= -kTN_e V \left\{ Z^{(1)}(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}} \right) \right\} \Big|_0^\infty - \int_0^\infty z^{(1)}(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}}} e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}} \left(-\frac{1}{kT} \right) \Big|_0^\infty =$$

(На нижнем пределе $Z^{(1)}(0) = 0$, по определению, на верхнем - $\ln 1 = 0$)

$$= -kTN_e V \frac{1}{kT} \int_0^\infty d\varepsilon \bar{n}(\varepsilon) Z^{(1)}(\varepsilon), \quad \text{где } \bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1}$$

$$\Omega = -N_e V \int_0^\infty d\varepsilon \bar{n}(\varepsilon) z^{(1)}(\varepsilon) \quad \text{общим свойством Ферми - распределения для}$$

$$\mu \gg kT$$

реальных металлов является условие

$$\downarrow \quad \downarrow 10^{-2} \text{ ev.}$$

$$10 \text{ ev}$$

Рассмотрим интеграл вида $I = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{F(\varepsilon)}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1} =$

(Введем $z = \frac{\varepsilon - \mu}{kT} \rightarrow \varepsilon = \mu + z \cdot kT \quad d\varepsilon = kT dz$)

$$= kT \int_{-\frac{\mu}{kT} \gg 1}^\infty dz \frac{F(\mu + kTz)}{e^z + 1} = kT \left\{ \int_0^\infty dz \frac{F(\mu + kT \cdot z)}{e^z + 1} + \int_{-\frac{\mu}{kT}}^0 dz \frac{F(\mu + kT \cdot z)}{e^z + 1} \right\}$$

Заменим в этом интеграле $z \rightarrow -z$

$$\frac{1}{e^{-z} + 1} = \frac{e^z + 1 - 1}{e^z + 1} = 1 - \frac{1}{e^z + 1} \quad \rightarrow \int_0^{\frac{\mu}{kT}} dz \frac{F(\mu - kT \cdot z)}{e^{-z} + 1}$$

с экспоненциальной точностью

$$I = kT \left\{ \int_0^{\infty} dz z \frac{F(\mu + kT \cdot z)}{e^z + 1} + \int_0^{\mu/kT} dz F(\mu - kT \cdot z) - \int_0^{\mu/kT} dz \frac{F(\mu - kT \cdot z)}{e^z + 1} \right\} \approx \underbrace{\int_0^{\mu} d\varepsilon F(\varepsilon)} + kT \int_0^z dz \frac{F(\mu + kTz) - F(\mu - kTz)}{e^z + 1}$$

обратным преобразованием от $kT \int_0^{\mu/kT} dz F(\mu - kTz)$.

Учитываемые (дающие основной вклад) z в интеграле не превышают единицы, следовательно, в аргументе F идет сравнение μ и $\pm kT$. При относительно невысоких температурах

$$F(\mu \pm kTz) \Big|_{z \leq 1} \approx F(\mu) + F'(\mu)(\pm kT \cdot z) + \dots$$

$$I \approx \int_0^{\mu} d\varepsilon F(\varepsilon) + (kT)^2 2F'(\mu) \underbrace{\int_0^{\infty} dz \frac{z}{e^z + 1}}_{\pi^2/12} + \dots$$

табличный интеграл, вычисленный с помощью коэффициентов Бернулли

Таким образом, выражение для интеграла приближенно равно

$$I \approx \int_0^{\mu} d\varepsilon F(\varepsilon) + \frac{\pi}{6} (kT)^2 F'(\mu) + \dots ;$$

в результате $\Omega(T, V, \mu)$ приобретает вид:

$$\Omega(T, V, \mu) \approx \underbrace{-N_e V \int_0^{\mu} d\varepsilon z^{(1)}(\varepsilon)}_{\Omega_0(0, V, \mu = \varepsilon_F)} - N_e V \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \cdot g^{(1)}(\mu \sim \varepsilon_F) + \dots$$

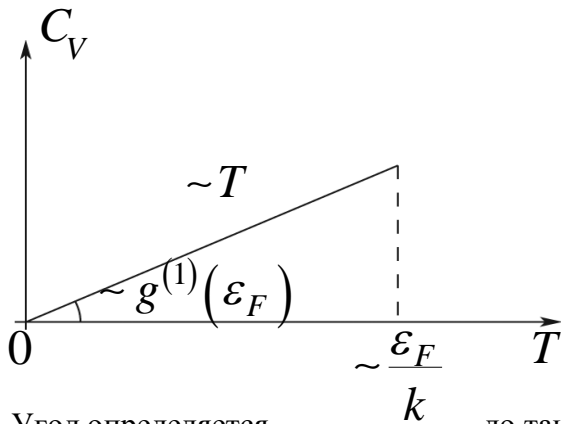
учет температурной зависимости μ , отличие его от ε_F , здесь несущественно.

Параметр разложения - $-\frac{kT}{\mu} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right) \approx 10^{-3}$. μ отличается от ε_F в меру $\frac{kT}{\mu}$.

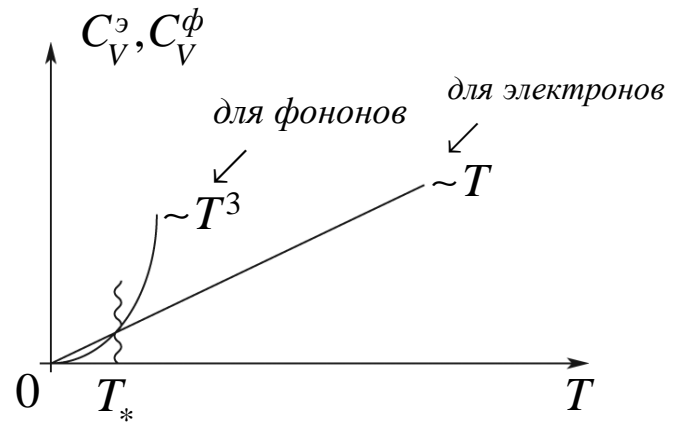
Энтродпия $S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \Big|_{N_e, V} = k \cdot N_e V \frac{\pi}{3} \cdot kT g^{(1)}(\varepsilon_F)$

В соответствии с теоремой Нерста $S(T \rightarrow 0) \rightarrow 0$ электроны распределяются так, как должно.

$C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = k N_e V \frac{\pi^2}{3} kT g^{(1)}(\varepsilon_F)$



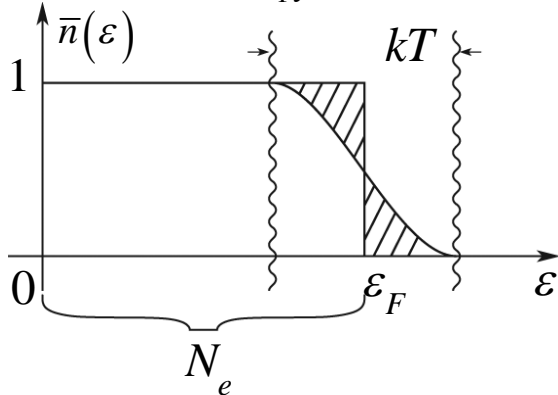
Угол определяется функцией плотности электрических состояний на поверхности Ферми



до таких температур можно пользоваться полученным выражением

т.о., начиная греть металл, мы в первую очередь разогреваем электроны

Электронная теплоемкость определяет поведение металла при низких температурах и остается линейной функцией вплоть до точки плавления.



Только в полоске шириной kT электроны могут это kT «подобрать» и перепрыгнуть в состояние с большей энергией..

Такие «перескоки» возможны только вблизи \mathcal{E}_F . Получим результат для теплоемкости из качественных соображений. Число электронов, которые могут изменить свои состояния

$$\Delta N_e \sim N_e \frac{kT}{\mathcal{E}_F}$$

$$\Delta E_e \sim kT (\Delta N_e) \sim N_e \frac{(kT)^2}{\mathcal{E}_F}$$

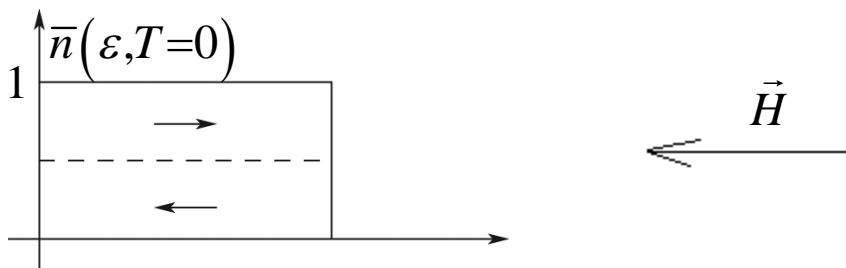
$$C_{V,e} = \frac{\partial \Delta E_e}{\partial T} \sim k N_e \frac{kT}{\mathcal{E}_F}$$

Этот результат повторяет точно полученное выражение с точностью до числового множителя.

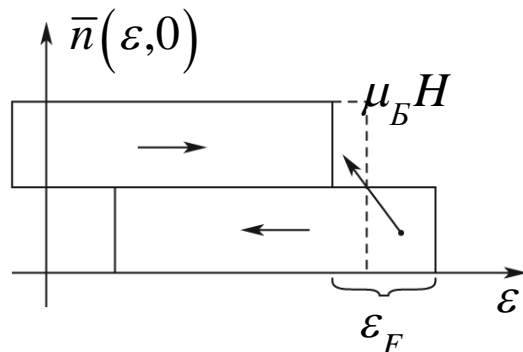
$g^{(1)}(\mathcal{E}_F) \sim k N_e \frac{kT}{\mathcal{E}_F}$ - это можно проверить, взяв интеграл

$$\frac{1}{N_e} \sum_{\vec{k}, \sigma} \delta(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}(\vec{k})); \quad \mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

Следующее, что мы хотим исследовать – это магнитная восприимчивость.



Разобьем условно на две части с разными спинами.



Добавка к энергии $-\left(\vec{\mu}\vec{H}\right)\sim +\left(\vec{S}\vec{H}\right)\mu_B$ из соображения энергетической выгоды освобожденные состояния заставят часть электронной поменять проекцию спина, тогда восстановится граница \mathcal{E}_F , но изменится «баланс» спинов.

Число электронов со спином против поля возрастет, появится дополнительный магнитный момент по полю. Поляризация носит парамагнитный характер.

$$\frac{\mu_B H}{\mathcal{E}_F} \sim \left(10^{-9} : 10^{-8}\right) [H] \quad [H] \sim 10^4 \text{ магниты с медными обмотками,}$$

$$\sim 10^5 \text{ сверхпроводящая обмотка}$$

→ доля таких электронов (по энергии) ничтожна по сравнению с \mathcal{E}_F ;

$$\Delta N_e \sim N_e \frac{\mu_B H}{\mathcal{E}_F}$$

$$\Delta M_e \sim \mu_B \Delta N_e \sim N_e \frac{\mu_B H}{\mathcal{E}_F} \mu_B \text{ каждый «перепрыгнувший» электрон несет } \mu_B.$$

$$\boxed{\chi_n = \frac{\partial \Delta M_e}{\partial H}} \sim +N_e \frac{\mu_B}{\mathcal{E}_F} > 0 \quad - \text{ парамагнитная восприимчивость}$$

Теперь найдем точно:

$$N_e(\mu) \Big|_{H=0} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} + 1} g^{(1)}(\varepsilon) = \sum_\sigma \sum_{\vec{q}} n(\varepsilon(\vec{k}))$$

||
1 до \mathcal{E}_F все состояния заняты с вероятностью 1
(при $T=0$)

$$N_{e,+} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon+\mu_B H-\mu}{kT}} + 1} g^{(1)}(\varepsilon) = \frac{1}{2} N_e(\mu - \mu_B H) \text{ - это для}$$

электронов с положительной проекцией спина.

$$N_{e,-} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu_B H-\mu}{kT}} + 1} g^{(1)}(\varepsilon) = \frac{1}{2} N_e(\mu + \mu_B H) \text{ - аналогично -}$$

для электронов с отрицательной проекцией спина.

Тогда суммарный магнитный момент определяется выражением:

$$M = \mu_B (N_{e,-} - N_{e,+}) = \frac{\mu_B}{2} \{ N_e(\mu + \mu_B H) - N_e(\mu - \mu_B H) \}.$$

При характерных значениях поля имеем:

$$\mu \sim \varepsilon_F, \quad \frac{\mu_B H}{\varepsilon_F} \sim 10^{-4} \cdot 10^{-5}. \quad \text{Теперь}$$

$$N_e(\mu \pm \mu_B H) = N_e(\mu) (\pm \mu_B H) + \dots$$

$$M = \mu_B \frac{1}{2} \cdot \cancel{2} N'_e(\mu) \mu_B H = N'_e(\mu) \mu_B^2 H$$

$$\boxed{\chi_{II} = \frac{\partial M}{\partial H} = N'_e(\mu) \mu_B^2}; \quad N'_e(\mu) \sim \frac{N_e}{\varepsilon_F}$$

↑

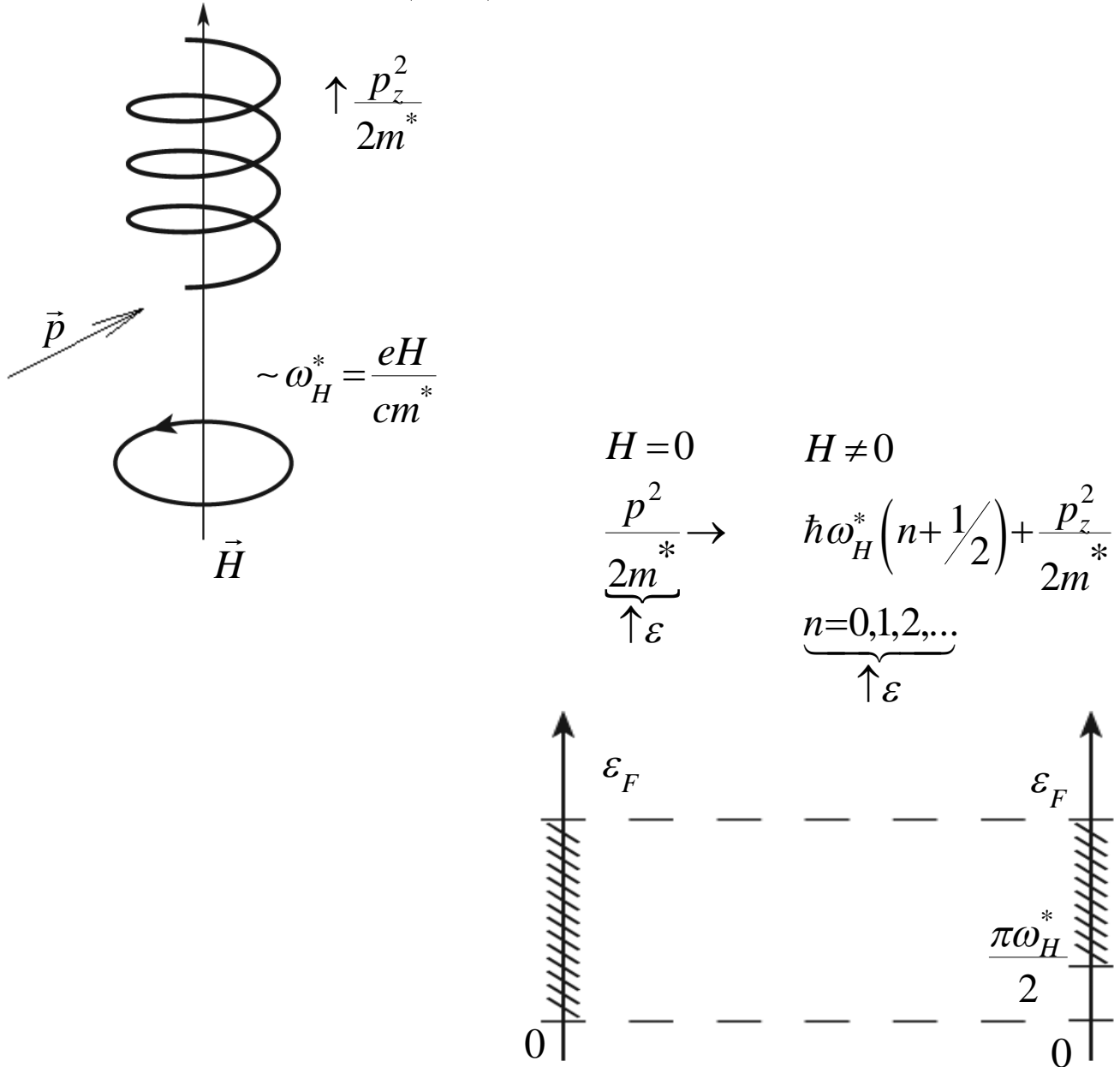
$$\sim \frac{N_e}{\mu \sim \varepsilon_F}$$

Точное и оценочное выражения совпадают.

Лекция 15.

Уровни Ландау. Особенности плотности состояний. Осцилляции термодинамических величин в магнитном поле. Эффект де-Гааза-Ван-Альфена. Диамагнетизм Ландау.

Гигантские магнитные осцилляции.



Энергия системы электронов увеличивается, следовательно, это диамагнетик. Изменение характера движения электронов приводит к диамагнитному вкладу в магнитную восприимчивость χ .

$$\begin{aligned} \Delta E_e &\sim +(\Delta N_e) \hbar \omega_H^* \sim +N_e \frac{\hbar \omega_H^*}{\varepsilon_F} \hbar \omega_H^* \sim N_e \frac{\hbar^2}{\varepsilon_F} \frac{eH^2}{c^2 m^{*2}} \sim \\ &\sim N_e \frac{1}{\varepsilon_F} \left(\frac{\hbar e}{m_e c} \right)^2 H^2 \left(\frac{m_e}{m^*} \right)^2 \sim N_e \frac{\mu_B H^2}{\varepsilon_F} \left(\frac{m_e}{m^*} \right)^2 \\ M &= -\frac{\partial E_e}{\partial H} \sim -N_e \frac{\mu_B H}{\varepsilon_F} \left(\frac{m_e}{m^*} \right)^2 \\ \chi_D &= \frac{\partial M}{\partial H} \sim -N_e \frac{\mu_B}{\varepsilon_F} \left(\frac{m_e}{m^*} \right)^2 \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \chi = \chi_{\Pi} + \chi_D \\ \uparrow \end{array}$$

Полная магнитная восприимчивость

Чем конкретно (пара- или диамагнетиком) будет кусок металла в магнитном поле определяется отношением циклотронной и обычной масс.

Если $\frac{m_e}{m^*} \approx 1$, то $\chi_D = -\frac{1}{3} \chi_{\Pi}$ и свободный электронный газ - парамагнетик.

Но может быть $\frac{m_e}{m^*} \approx 10^2$, тогда сильные диамагнитные свойства.

Рассмотрим отличие в описании при наличии и отсутствии магнитного поля.

$$\begin{array}{ll} H=0 & H \neq 0 \\ \frac{\hat{p}^2}{2m^*} \Psi^{(0)} = E^{(0)} \Psi^{(0)} & \frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m^*} \Psi = E \Psi \rightarrow \\ \downarrow \hat{p}' = -i\hbar \nabla & \vec{A} = -(Hy, 0, 0) \\ \downarrow E^{(0)} = \frac{p^2}{2m^*} & \text{калибровка Ландау} \end{array}$$

Уравнение Шредингера в магнитном поле имеет вид:

$$\rightarrow \left(\frac{\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

$$\hat{H} \rightarrow [\hat{p}_x \hat{H}] = 0, [\hat{p}_z \hat{H}] = 0$$

Гамильтониан коммутирует с \hat{p}_x и \hat{p}_z , следовательно эти величины не меняются (сохраняющиеся величины);

Подставим в гамильтониан волновую функцию $\Psi(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + zp_z)} \varphi(y)$.

$$\cancel{e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + zp_z)}} \left\{ \frac{\left(p_x + \frac{eH}{c} y \right)^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*} \right\} \varphi(y) = E \cdot \cancel{e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + zp_z)}} \varphi(y)$$

Учтем, что

$$\frac{\left(p_x + \frac{eH}{c} y \right)^2}{2m^*} = \frac{(y - y_0)^2}{2m^*} \left(\frac{eH}{c} \right)^2 = \frac{\omega_H^{*2} m^{*2} (y - y_0)^2}{2}$$

$$y \equiv -\frac{cp_x}{eH}$$

В результате уравнение приобрело следующий вид:

$$\left[\frac{\hat{p}_y^2}{2m^*} + \frac{m^* \omega_H^{*2} (y - y_0)^2}{2} \right] \varphi(y) = \left(E - \frac{p_z^2}{2m^*} \right) \varphi(y)$$

Мы получили уравнение для гармонического осциллятора с частотой ω_H^* и со смещенным центром

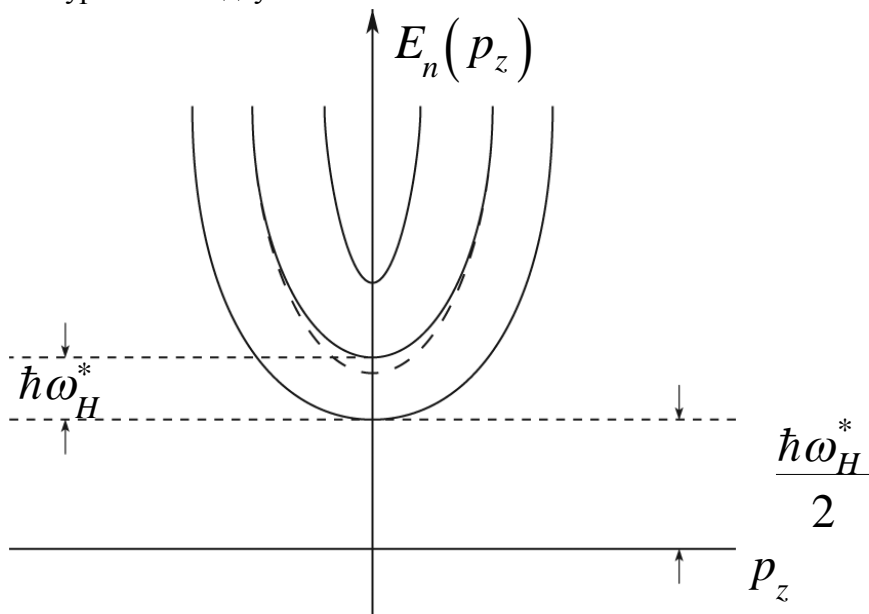
$$\rightarrow \left(E - \frac{p_z^2}{2m^*} \right) = \hbar \omega_H^* \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_n(p_z) = \hbar \omega_H^* \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m^*} \quad n=0,1,\dots$$

Всего три квантовых числа - p_x, p_z и n .

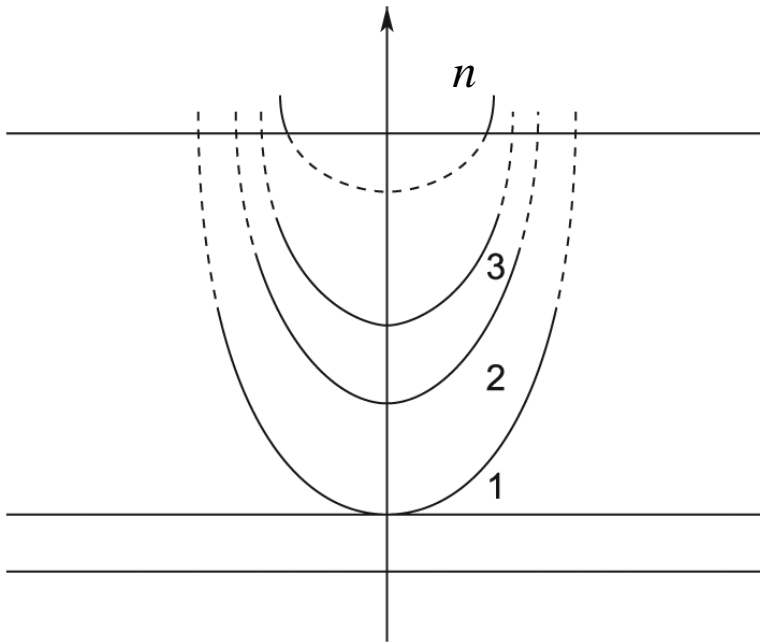
E не зависит от p_x , по p_x есть вырождение (полное)

Это уровни Ландау.



В импульсном пространстве электроны – это некие «блины»

$$\varphi_n(y) \sim e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{y-y_0}{\lambda_H} \right)^2} H_n \left(\frac{y-y_0}{\lambda_H} \right)$$



Ниже \mathcal{E}_F все состояния заняты, выше – все свободны. При включении магнитного поля хвосты парабол поползут вверх, значит электроны будут уплотняться (по ρ_z).

В момент, когда n_0 сравняется с \mathcal{E}_F , плотность состояний обращается в бесконечность, и все термодинамические потенциалы испытают скачок (квантовые осцилляции термодинамических величин в магнитном поле).

Возникнут эффекты де-Гааза – Ван Альфена – гигантские осцилляции магнитной восприимчивости;

де-Гааза – Шубникова - гигантские осцилляции

магнитосопротивления;

$$\Delta E \sim \cos\left(2\pi^2 \frac{\mathcal{E}_F}{\mu_B H} - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$\frac{\mathcal{E}_F}{\mu_B H} \sim 10^5 - 10^4$$

$$\begin{cases} M \sim \frac{\partial \Delta E}{\partial H} \sim \frac{\mathcal{E}_F}{\mu_B H} \sin\left(2\pi^2 \frac{\mathcal{E}_F}{\mu_B H} - \frac{\pi}{4}\right) \\ \chi = \frac{\partial M}{\partial H} \sim \left(\frac{\mathcal{E}_F}{\mu_B H}\right)^2 \cos\left(2\pi^2 \frac{\mathcal{E}_F}{\mu_B H} - \frac{\pi}{4}\right) \end{cases}$$

амплитуда осцилляций χ в 10^{10} раз больше, чем амплитуда осцилляций ΔE . Такие эффекты могут проявляться только при очень низких температурах.

Программа итогового экзамена по курсу “Теоретическая физика твердого тела” для групп Т8 и Е8.

(*) (7 семестр)

Фононное представление оператора смещения атома в кристалле. Матричные элементы и типы смещений при разных значениях волновых функций кристалла.

(**) (7 семестр)

1. Обменное взаимодействие электронов незаполненных внутренних оболочек как источник упорядочения спинов.
 2. Гамильтониан обменного взаимодействия через операторы спинов.
 3. Спектр спиновых волн.
 4. Термодинамика спиновых волн.
 5. Неустойчивость магнетиков пониженной размерности.
 6. Приближение среднего поля и поведение магнитного момента вблизи T_c .
 7. Переход “ферромагнетик – парамагнетик” как частный случай фазового перехода 2 – го рода.
-

(***) (8 семестр)

1. Электрон – ионная система простого металла, условие электронейтральности.
2. Энергия ионной решётки с компенсированным зарядом.
3. Представление чисел заполнения для электронных операторов.
4. Энергия и уравнение состояния газа свободных электронов.
5. Обменное взаимодействие электронов и его вклад в полную энергию.
6. Оператор плотности электронов.
7. Коррелятор “плотность – плотность”, возникновение “обменной дырки”.
8. Общее представление для корреляционной энергии электронов.
9. Электрон – ионное взаимодействие и его вклад в полную энергию. Гамильтониан Фрёлиха.
10. “Нулевая модель” простого металла, возможность существования металлической фазы атомарного водорода.
11. Собственные функции и собственные значения энергии в строго периодическом потенциальном поле, функции Блоха и энергетические зоны.
12. Операторы координаты и скорости для электрона в периодическом поле.
13. Движение электрона металла во внешнем электрическом поле. Эффективные массы и вид траектории в одномерном случае.
14. Движение электрона металла во внешнем магнитном поле. Годографа и циклотронные массы. Резонансные эксперименты.
15. Спектр электронов в приближении почти свободных электронов, возникновение щелей и поведение эффективных масс.
16. Приближение “узкой зоны”. Электронный спектр и эффективные массы.
17. Термодинамика электронного газа металла – теплоёмкость и парамагнетизм Паули.
18. Квантование движения электрона в магнитном поле. Плотность состояний. Диамагнитная восприимчивость.