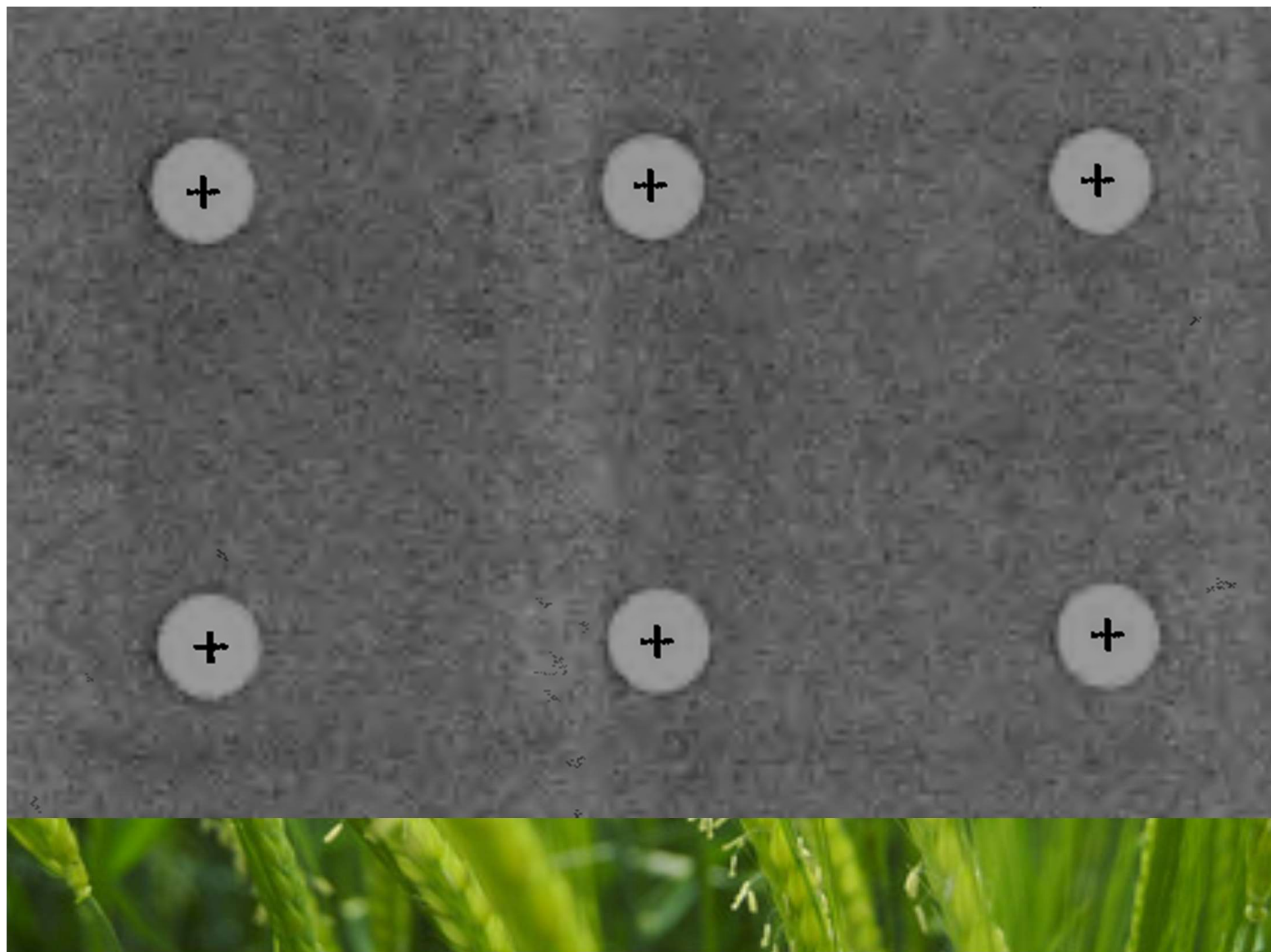


Chapter Six

FREE ELECTRON FERMI GAS

ما می توانیم خواص فیزیکی زیادی از فلزات (نه تنها فلزات ساده بلکه فلزات پیچیده) را بر حسب مدل الکترون آزاد درک و بررسی کنیم.

بر طبق این مدل الکترونیهای ظرفیت اتمهای تشکیل دهنده بلور به الکترونیهای هدایت تبدیل می شوند و آزادانه در حجم فلز حرکت می کنند.





Paul Karl Ludwig Drude
([July 12, 1863](#)-[July 5, 1906](#))

رفتار الکترونها در بلورهای فلزی

مدل کلاسیکی درود (Drude)

در این مدل فرض می شود که الکترونها ذراتی کلاسیکی هستند که از نظریه جنبشی گازها پیروی می کنند.

الکترونهاي مورد بحث در نظريه درود فقط الکترونهاي والانس می باشند.

سایر الکترونها الکترونهاي مقید یا کر هستند که با هسته یون را در فلز تشکیل می دهند.

در مدل درود الکترونهاي ظرفیت همچون کرات صلبی در نظر گرفته می شوند که فقط در برخورد مستقیم متاثر می شوند.

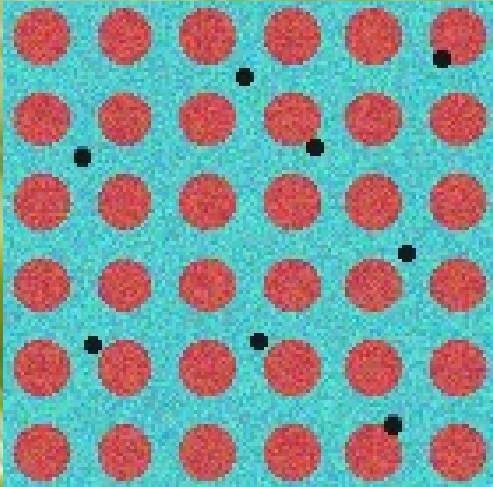
نکته فوق معادل فرض عدم وجود برهمکنشهای الکترون-الکترون و الکترون-یون است.

sodium



www.webelements.com

تفاوت فلز درود با گاز ایده آل

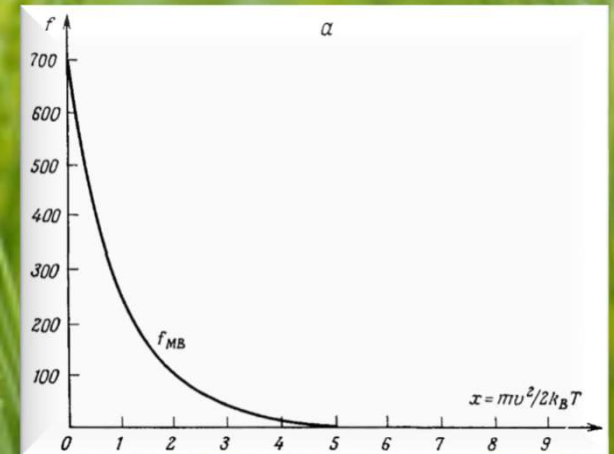


در مدل درود الکترونها تمایز پذیر فرض می شوند.

فرض تمایز پذیری ایجاب می کند که الکترونها از آمار ماکسول-بولتزمن پیروی کنند.

در مدل درود فرض می شود که الکترونها در مسیر خودشان فقط با یونها برخورد می کنند.

$$\exp(-\beta E) = e^{-1/2 m v^2 / k_B T}$$



فلز درود

تابع توزیع
ماکسول-بولتزمن

در این مدل از برخورد الکترونها بایکدیگر صرف نظر می شود.

Independent electron approximation

تقریب الکترونهای مستقل

برهمکنش الکترون - الکترون

Free electron approximation

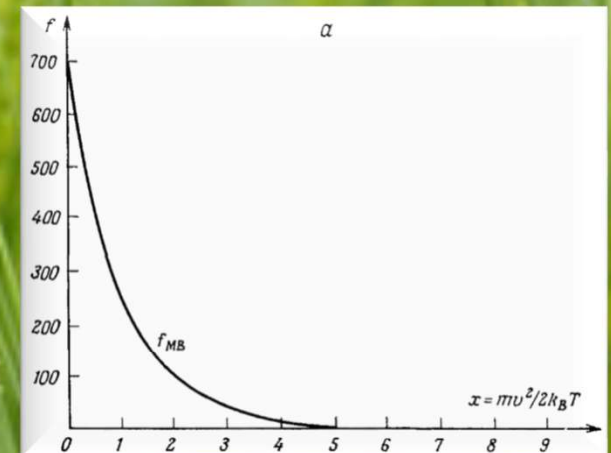
تقریب الکترونهای آزاد

برهمکنش الکترون - یون

صرف نظر
کردن از:

نتایج مدل درود

الف) محاسبه گرمای ویژه الکترونها



اصل همپارش انرژی

انرژی میانگین هر الکترون =

$$\frac{3}{2} k_B T$$

$$\bar{E} = N_A \frac{3}{2} k_B T$$

= انرژی میانگین هر مول =

$$\bar{E} = \frac{3}{2} R T$$

$$N_A k_B = R$$

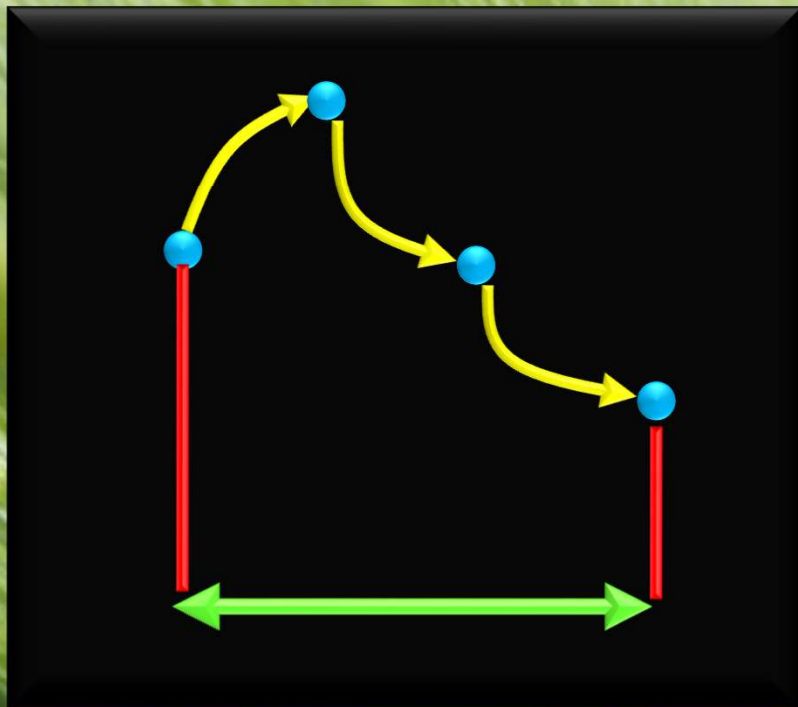
$$C_{el} = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{3}{2} R$$

$$\neq C^{\text{Experiment}} \approx 0.01 \times \frac{3}{2} R$$

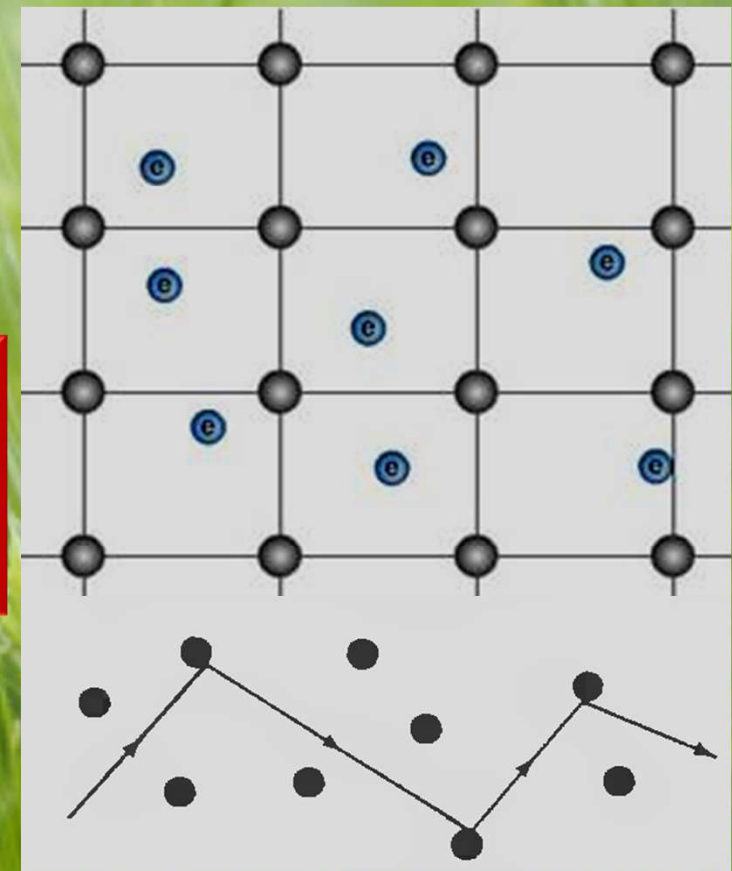


این در حالی است که تجربه در دماهای معمولی خیلی کمتر از این مقدار را به دست می دهد.

(ب) رسانندگی الکتریکی بلورهای رسانا



در غیاب این میدان الکتریکی جا به جایی کل برابر صفر است.



میانگین جا به جایی بعد از اعمال میدان الکتریکی

اگر برخوردها در بلور فلزی وجود نمی داشت ذرات تا رسیدن به سرعت بینهایت شتاب می یافتند.

$$m_e \frac{dv}{dt} = e\varepsilon$$

در حضور برخورد ها سرعت الکترون ها به طور نامحدود نمی تواند اضافه شود.

در حضور برخورد ها الکترون ها به یک سرعت ثابت به نام سرعت رانشی پس از گذشت یک زمان که به آن زمان واهلش گویند خواهند رسید.

$$V = V_0 - \frac{e\mathcal{E}}{m_e} t$$

زمان بین آخرین برخورد تا لحظه فعلی

سرعت پس از آخرین برخورد

حال روی تمام الکترون ها میانگین گیری انجام می دهیم:

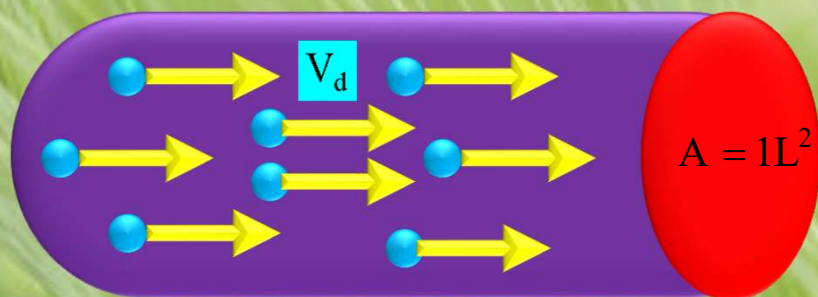
$$\bar{V} = \bar{V}_0 - \frac{e\mathcal{E}}{m_e} \bar{t}$$



$$V_d = 0 - \frac{e\mathcal{E}}{m_e} \tau$$

سرعت رانشی یا دریفت

زمان واهلش یا زمان متوسط بین دو برخورد



$$\mathbf{J} = -en\mathbf{V}_d$$

$$\mathbf{V}_d = \frac{e\boldsymbol{\varepsilon}}{m_e} \tau$$

چگالی
الکترونها

$$\mathbf{J} = -\frac{ne^2\tau}{m_e} \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\mathbf{J} = \sigma \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e}$$

ضریب
رسانندگی

$$\bar{l} = V_d \tau$$

$$\tau = \frac{m_e}{ne^2 \rho}$$

$$\rho = \sigma^{-1} = \frac{m_e}{ne^2 \tau}$$

مقاومت ویژه

$$\frac{1}{2} m_e V_d^2 = \frac{3}{2} k_B T$$

$$\bar{l} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_e}} \frac{m_e}{ne^2 \rho} = \frac{\sqrt{3m_e k_B T}}{ne^2 \rho}$$

مسافت آزاد میانگینی که درود پیدا کرد چیزی در حدود یک تا ده آنگستروم بود، که با تجربه در توافق است زیرا فاصله بین اتمها در یک فلز هم در همین مرتبه می باشد.

ج) ضریب هدایت گرمایی فلزات

فرض شد که فقط الکترونها در هدایت گرمایی نقش داشته باشند

که البته فرض درستی نیست

اما با این فرض خواهیم داشت

$$K = \frac{1}{3} n V_d C_v$$

$$\bar{l} = V_d \tau$$

$$K = \frac{1}{3} V_d^2 \tau C_v$$

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m_e}$$

$$\frac{1}{2} m_e V_d^2 = \frac{3}{2} k_B T$$

$$C_v = \frac{3}{2} R = \frac{3}{2} n K_B$$



قانون
ویدمان
فرنتس -

$$\frac{K}{\sigma} = \frac{\frac{1}{3} V_d^2 \tau C_v}{\frac{ne^2 \tau}{m_e}} = \frac{m_e V_d^2 \tau C_v}{3ne^2 \tau} = \frac{3}{2} \frac{k_B}{e} T$$

$$\frac{K}{\sigma} = \frac{3}{2} \frac{k_B}{e} T$$

اگر چه مدل درود موفق به باز تولید قانون فرنس-ویدمان شد:

اما باید توجه کرد که این توفیق به طور شانسى اتفاق افتاده است.

زیرا مدل درود قادر به پیش بینی صحیح ضریب رسانندگی الکتریکی و نه ضریب رسانندگی گرمایی نبوده است.

در واقع این مدل به طور اتفاقی از طریق حذف خطاهای موجود در ضرایب رسانندگی‌های الکتریکی و گرمایی قانون فرانتس-ویدمان را پیش بینی کرده است!

باید بپذیریم که مدل درود واقعا نواقص زیادی دارد و بسیاری از پدیده‌ها هست که نمی‌توانیم با این مدل به توصیف آنها پردازیم.

اولین اشکال در نظر گرفتن الکترون‌ها به صورت کلاسیکی است که در نتیجه آن از آمار ماکسول-بولتزمن استفاده کردیم.

مدل سامر فلد (Sommerfeld)

مدل سامرفلد نسبت به مدل درود یک مدل کوانتومی محسوب می شود.

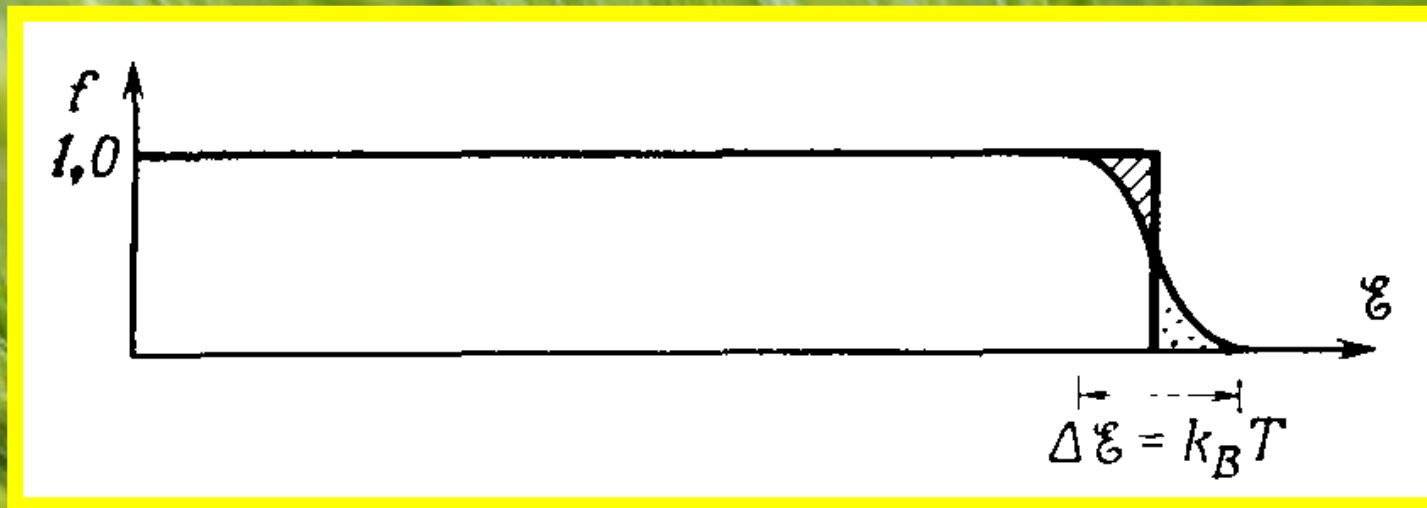
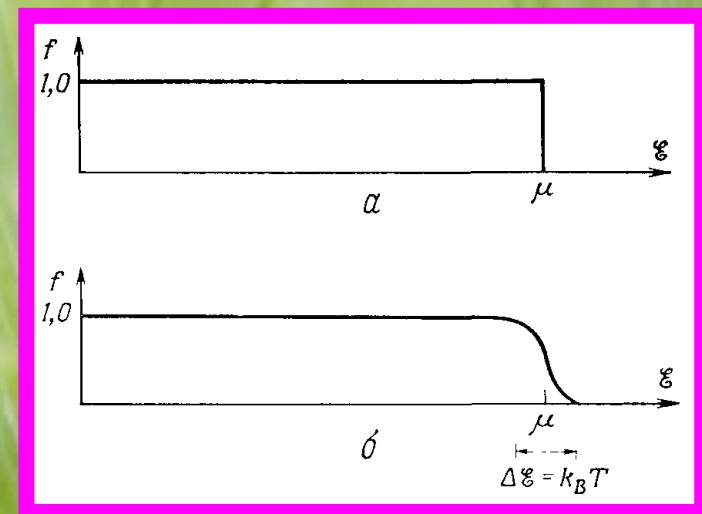
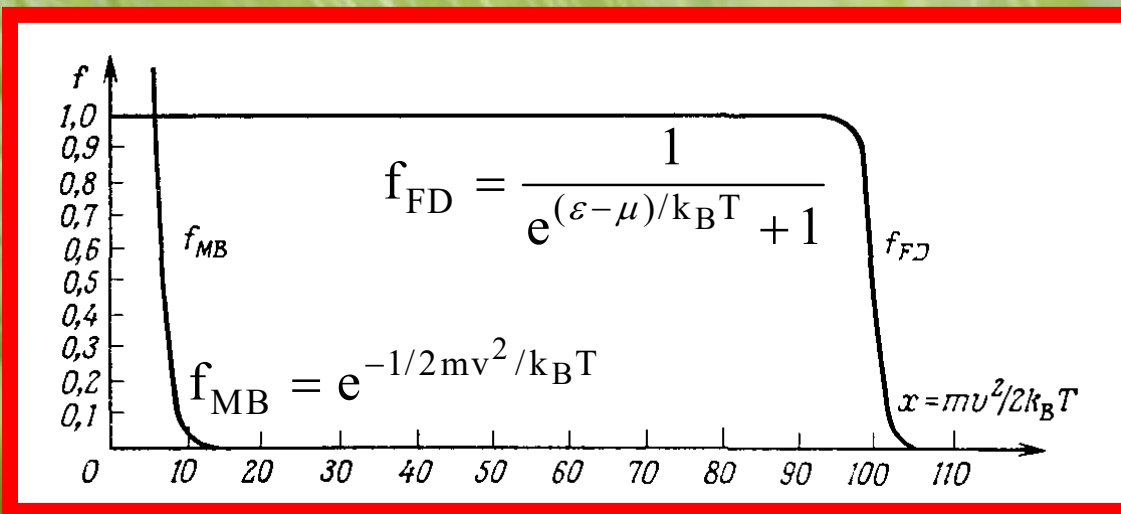
در مدل درود الکترونها تمایز پذیر فرض می شدند و از آمار ماکسول-بولتزمن پیروی می کردند و اصل طرد پاولی را رعایت نمی کردند و قضیه همپارش انرژی برای آنها صادق بود.

Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld
(December 5, 1868 - April 26, 1951)

یعنی الکترونها در این مدل به عنوان ذرات فرمیونی در نظر گرفته می شوند، که در نتیجه از اصل طرد پاولی پیروی می کنند.

هیچیک از موارد فوق صحیح نمی باشد.

مبنای محاسبات در مدل سامرفلد این است که الکترونها در این مدل به عنوان ذرات تمایز ناپذیر در نظر گرفته می شوند.



$$C_V = \gamma T + AT^3$$

سهم الکترونی

سهم فونونی

در مدل سامرفلد همچون مدل درود از برهمکنش الکترون-الکترون صرف نظر می شود.

در مدل سامرفلد همچون مدل درود از برهمکنش الکترون-یون صرف نظر می شود.

اما دو محدودیت روی بلورها در این مدل اعمال می شود:

الف) الکترونها از بلور نمی توانند خارج شوند.

ب) الکترونها از اصل طرد پاولی پیروی می کنند.

محدودیت (الف) یعنی عدم خروج از بلور ایجاب می کند که به طور ضمنی یک برهمکنش بین الکترونها و یونها وجود داشته باشد زیرا دیواره های بلور عملاً توسط یونها به وجود آمده است.

Quasi free electron approximation

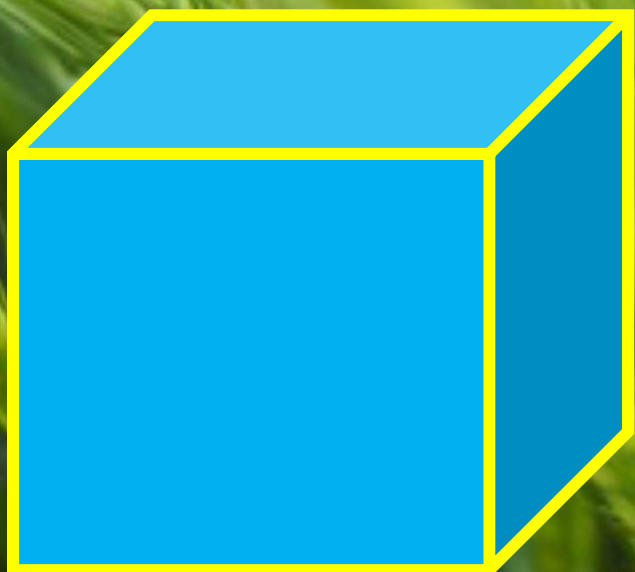
پس محدودیت (الف) به معنای الکترون شبه مستقل است.

محدودیت (ب) یعنی پیروی از اصل طرد پاولی ایجاب می کند که به طور ضمنی برهمکنش الکترون-الکترون وجود داشته باشد زیرا طبق این اصل الکترونها با اسپین یکسان در یک حالت کوانتومی نمی توانند کنار هم قرار بگیرند.

Quasi independent
electron
approximation

پس محدودیت (ب) به معنای الکترون شبه آزاد است.

معادله شرودینگر یک الکترون را در یک جعبه حل می کنیم و ترازهای انرژی را به دست می آوریم و سپس برای چیدن الکترونها بعدی از اصل طرد پاولی استفاده می کنیم.



$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 \\ \infty \end{cases}$$

درون جعبه

روی دیواره ها و خارج
جعبه

شرایط مرزی دوره ای

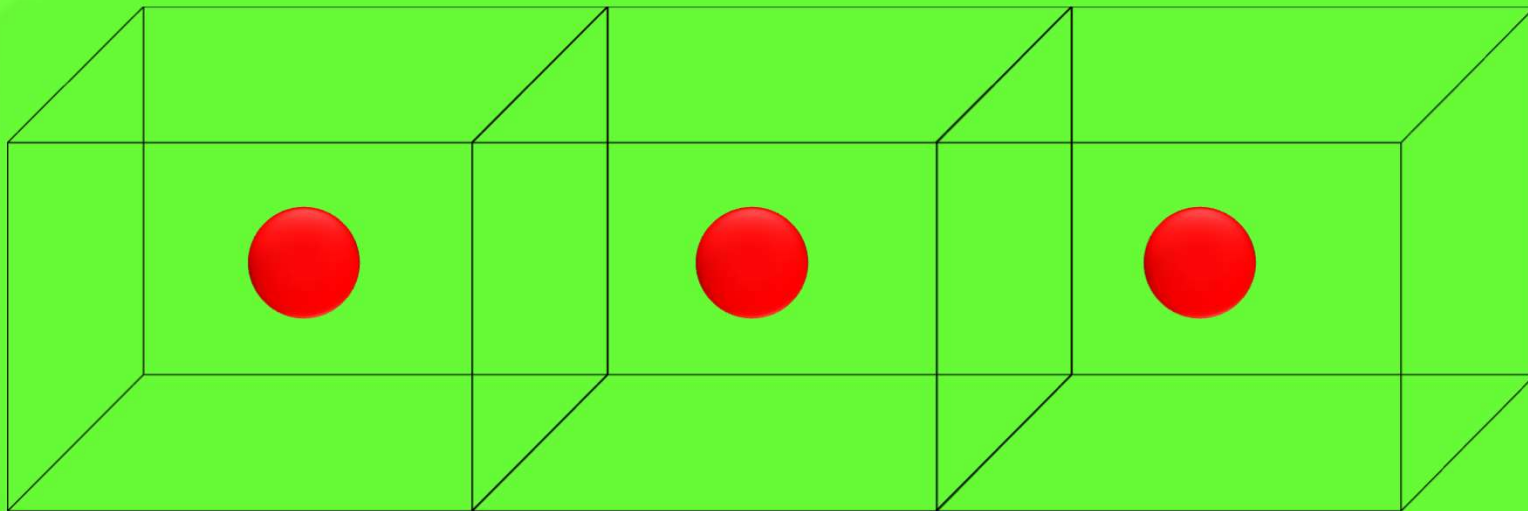
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\Psi(\mathbf{r})$$

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

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

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

Periodic Boundary Conditions



$$\Psi(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = Ae^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}$$

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

$$Ae^{ik_x(x+L)} = Ae^{ik_x x}$$

$$e^{ik_x L} = 1 = e^{2\pi n_x i}$$

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

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

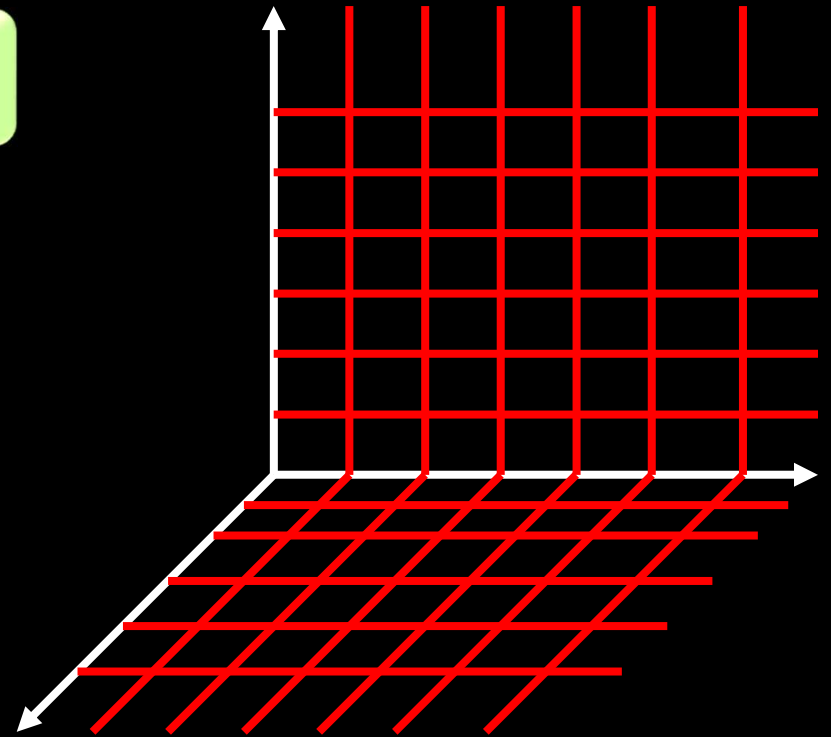
تعداد
الکترونها

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

حجم وابسته به یک
نقطه k

$$\frac{(2\pi)^3}{\Omega} \frac{N}{2} = \frac{4}{3} \pi k_F^3$$

حجم کره
فرمی



$$\Omega(E) \propto \delta E$$

$$\Omega(E) = \rho(E) \delta E$$



Density Of States (DOS)

$\Omega(E) =$ تعداد حالتی با انرژی بین E , $E + \delta E$

$\Phi(E) =$ تعداد حالتی که انرژی آنها کمتر از E است

$\Phi(E + \delta E) =$ تعداد حالتی که انرژی آنها کمتر از $E + \delta E$ است

$$\Phi(E + \delta E) - \Phi(E) = \Omega(E) = \rho(E) \delta E$$

$$\Phi(E + \delta E) - \Phi(E) = \frac{d\Phi}{dE} \delta E = \rho(E) \delta E \quad \Rightarrow \quad \rho(E) = \frac{d\Phi(E)}{dE}$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}$$

$$\Phi(E) = ?$$

$$\Phi(E) = n$$

$$n = \frac{L}{\pi \hbar} (2m\varepsilon)^{1/2} = \Phi(\varepsilon)$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{d\Phi(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{L}{2\pi \hbar} (2m)^{1/2} \varepsilon^{-1/2}$$

$$\Omega(\varepsilon) = \rho(\varepsilon) \delta\varepsilon = \frac{L}{2\pi \hbar} (2m)^{1/2} \varepsilon^{-1/2} \delta\varepsilon$$

_____ E_0

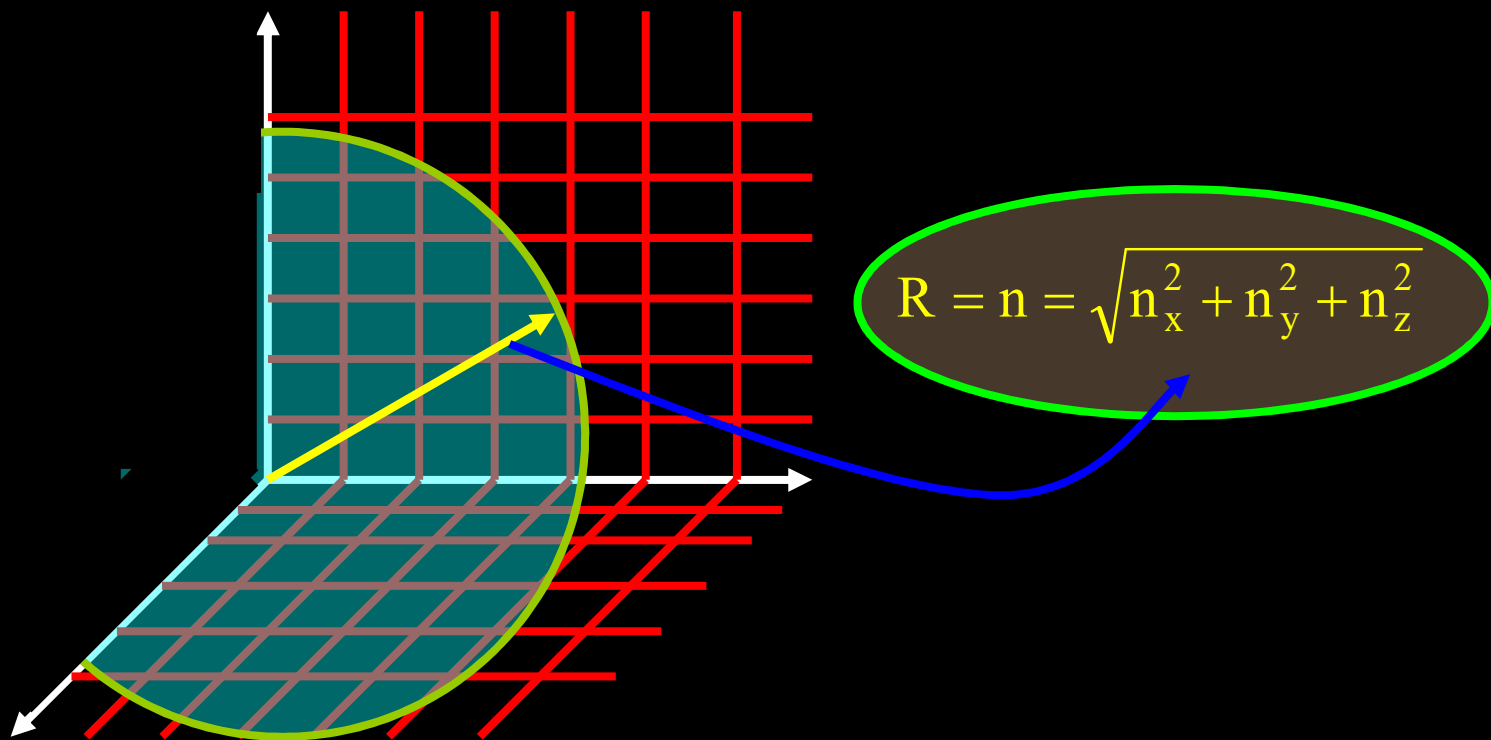
_____ **n=4**

_____ **n=3**

_____ **n=2**

_____ **n=1**

$$\Omega(\varepsilon) \propto L$$



$$\Phi(\varepsilon) = \frac{1}{8} \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2mL^2 \varepsilon}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{\pi}{6} \left(\frac{2mV^{2/3} \varepsilon}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \quad ; V = L^3$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$R = n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \left(\frac{L}{\pi \hbar} \right) (2m\varepsilon)^{1/2}$$

$$\Phi(\varepsilon) = \frac{1}{8} \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2mL^2 \varepsilon}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{\pi}{6} \left(\frac{2mV^{2/3} \varepsilon}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} \quad ; V = L^3$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{d\Phi(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \left(\frac{2m\hbar^{-2}V^{2/3}}{\pi^2} \right)^{3/2} \frac{3}{2} \varepsilon^{1/2}$$

$$\Omega(\varepsilon) = \rho(\varepsilon) \delta\varepsilon = \left(\frac{2m\hbar^{-2}V^{2/3}}{\pi^2} \right)^{3/2} \frac{3}{2} \varepsilon^{1/2} \delta\varepsilon$$

$$\rho(\varepsilon) = g(\varepsilon)$$

$$\Omega(\varepsilon) \propto V$$

یعنی با افزایش انرژی تراکم انرژی بیشتر می شود.

آخرین تراز پر یعنی جایگاه الکترونها یا تمام شده است (در مورد رساناها) یا اولین تراز خالی را تراز فرمی می گوئیم.

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar k_F^2}{2m}$$

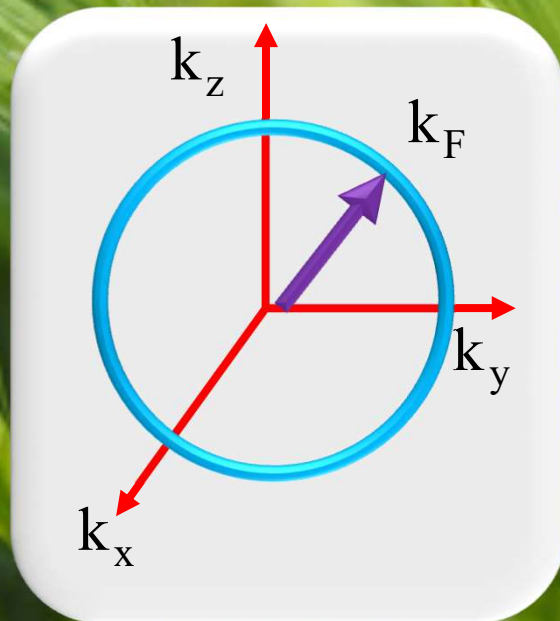
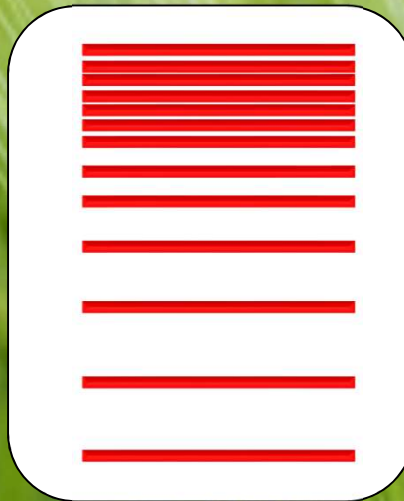
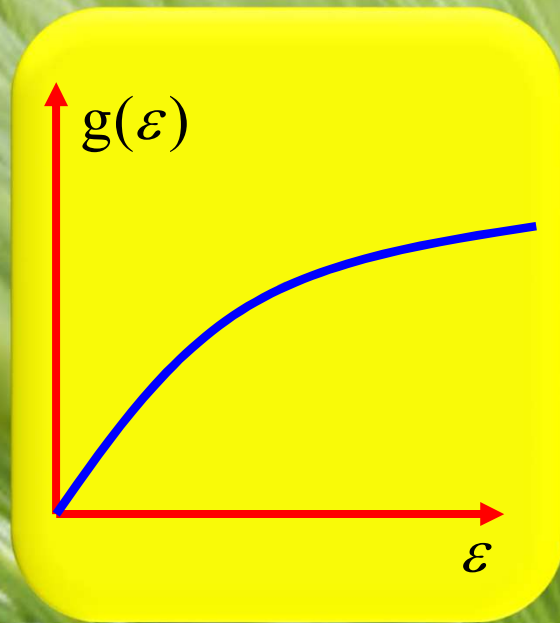
همه حالتها درون کره فرمی پر و خارج آن خالی اند

تعداد کل الکترونها رسانش داخل بلور =

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

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

شعاع کره فرمی =



$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \propto \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

انرژی فرمی =

$$\frac{N}{V} = n$$

چگالی
رسانش الکترونی

در دماهای پایین موثرترین الکترونها در رسانش نزدیکترین الکترونها به سطح فرمی اند.

$$mv_F = \hbar k_F$$

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$$

$$v_F = 10^8 \text{ cm / sec} \approx 1 / 300 \text{ C}$$

$$\frac{1}{2}mv_F^2 = \frac{3}{2}k_B T$$

$$T = 0 \Rightarrow v_F = 0$$

در مدل درود در دمای صفر سرعت هر الکترون را با استفاده از اصل همپاری صفر به دست آوردیم:

ولی در مدل سامرفلد حتی در دمای صفر با الکترونیایی مواجه هستیم که سرعتی خیلی بالا دارند.

انرژی کل در حالت پایه

$$E = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\sum \longrightarrow \int$$

$$E = 2 \int \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{dk}{\frac{(2\pi)^3}{V}}$$

$$E = \frac{V \hbar^2}{2m \pi^2} \int_0^{k_F} k^4 dk$$

$$= \frac{V \hbar^2}{2m \pi^2} \frac{k_F^5}{5}$$

انرژی کل گاز الکترونی در دمای صفر زیرا فرض می کنیم که فقط تا انرژی فرمی الکترون داریم

$$\frac{E}{V} = \frac{\hbar^2}{2m \pi^2} \frac{k_F^5}{5}$$

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

$$\varepsilon_F = k_B T_F$$

$$\frac{E}{N} = \frac{\frac{E}{V}}{\frac{N}{V}}$$

$$= \frac{\frac{\hbar^2}{2m \pi^2} \frac{k_F^5}{5}}{\frac{k_F^3}{3\pi^2}}$$

$$= \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m}$$

$$= \frac{3}{5} \varepsilon_F$$

$$= \frac{3}{5} k_B T_F$$

تراکم پذیری (K) و مدول انبوه (B)

$$B = \frac{1}{K} = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T,N}$$

تراکم پذیری و مدول انبوه عکس یک دیگرند.

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_N$$

نحوه محاسبه فشار در دمای صفر

در دمای غیر صفر جمله دیگری نیز باید اضافه شود

$$E = 3/5 N \varepsilon_F$$

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

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

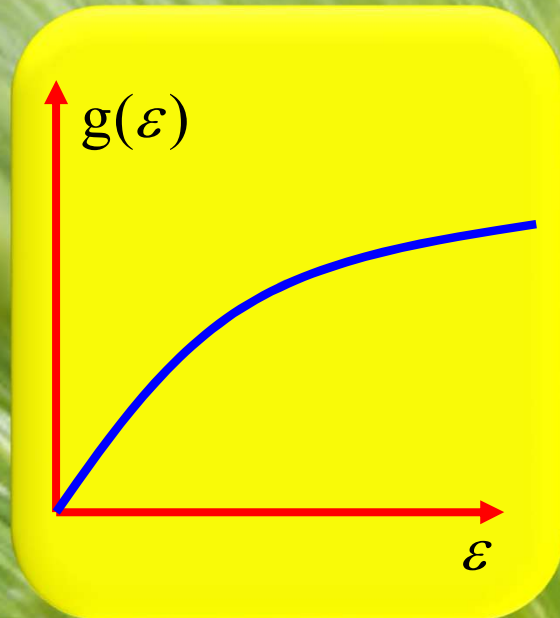
$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} = \frac{5}{3} P = \frac{10}{9} \frac{E}{V} = \frac{2}{3} n \varepsilon_F$$

$$E = 3/5 N \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$$

از آنجایی که این رابطه با تجربه توافق دارد، معلوم می شود که یک بخش قابل توجه از بالک مدول واقعی نیز توسط همین الکترونها ایجاد می شود.

نحوه توزیع الکترونها در ترازهای انرژی

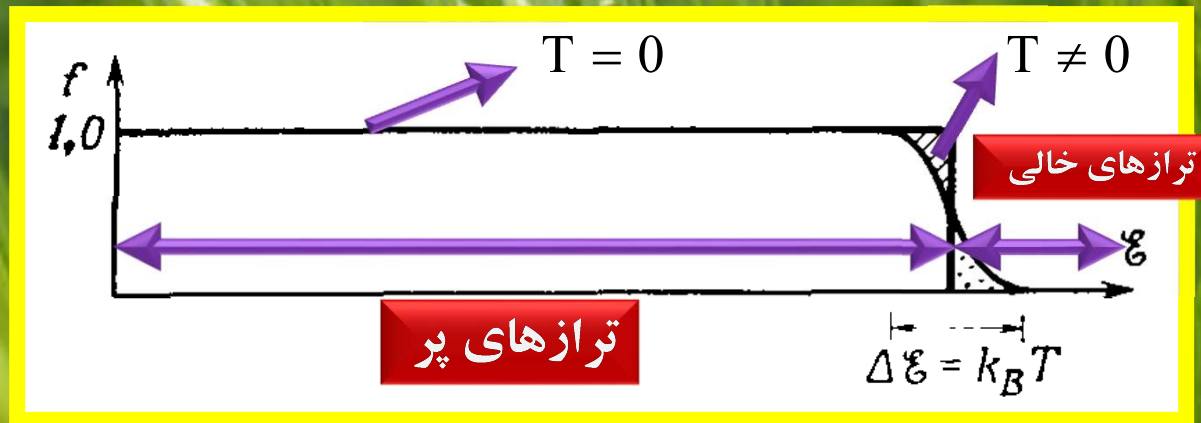
اما باید احتمال آن که یک تراز انرژی در یک دمای معین پر شود را نیز در نظر گرفت.



منحنی چگالی حالت‌های الکترونی

$$f_{FD} = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1}$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} f(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \varepsilon < \mu \\ 0 & \varepsilon > \mu \end{cases}$$



$$\lim_{T \rightarrow 0} \mu = \varepsilon_F$$

$$F = U - TS$$

انرژی آزاد هلمهولتز

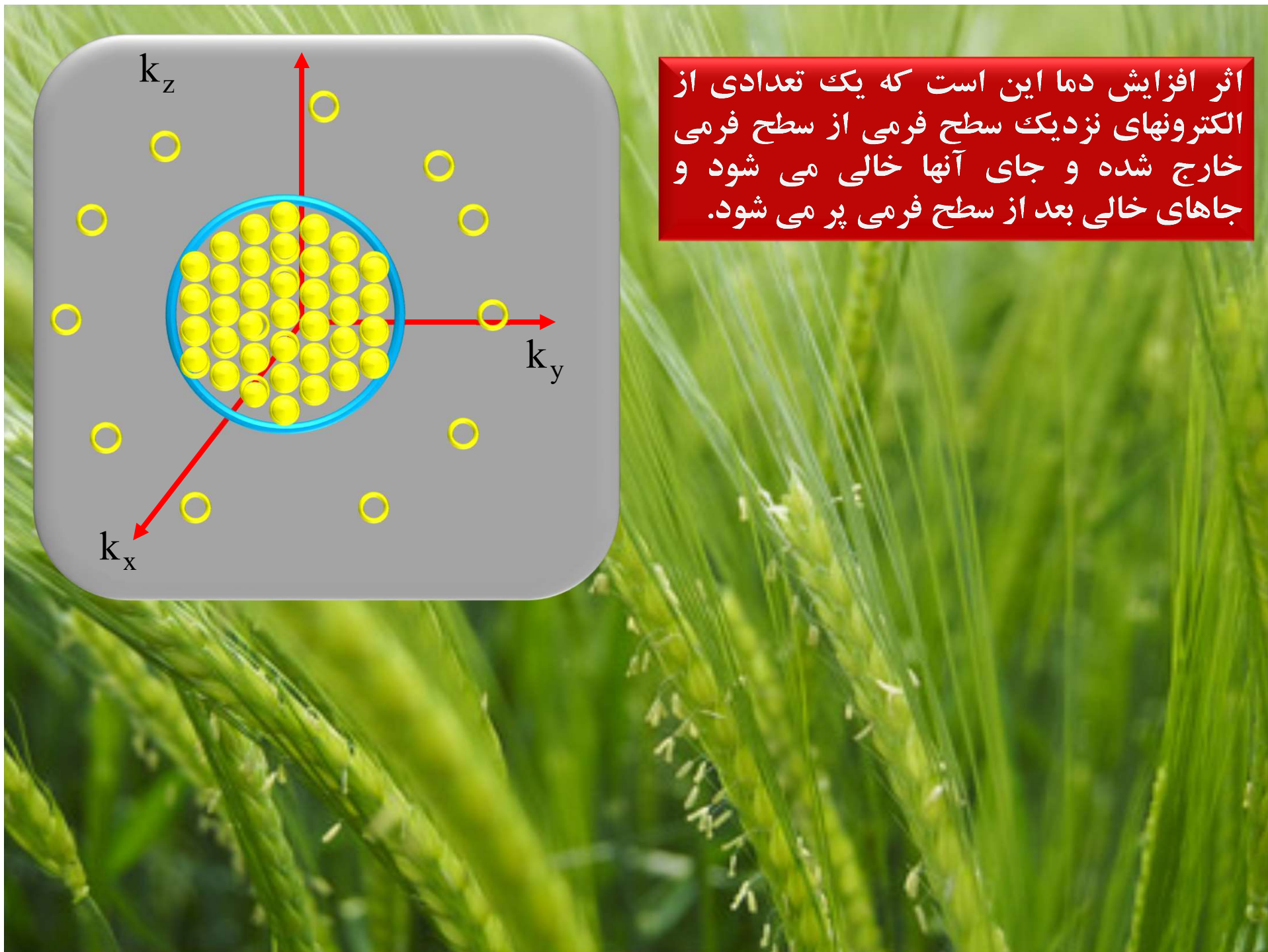
$$F_{N+1} - F_N = \mu$$

دستگاه N الکترونی

F_N

دستگاه N الکترونی

F_N



ظرفیت گرمایی ویژه

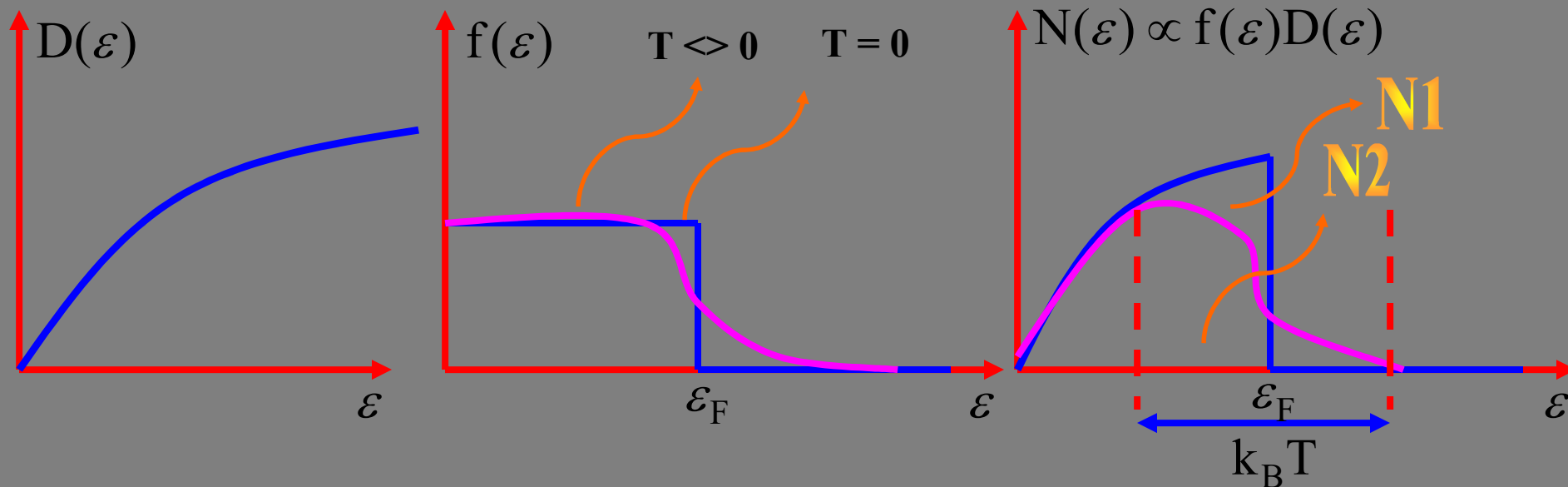
$$u = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \varepsilon(\mathbf{k}) f(\varepsilon(\mathbf{k}))$$

$$n = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} f(\varepsilon(\mathbf{k}))$$

$$u = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) \varepsilon f(\varepsilon)$$

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) f(\varepsilon)$$

$$g(\varepsilon) = \frac{m}{\hbar^2 \pi^2} \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}, \quad \varepsilon > 0;$$
$$= 0, \quad \varepsilon < 0.$$



$$N1 + N2 = N$$

$$\frac{N1}{N} = \frac{k_B T}{\varepsilon_F}$$

$$N1 = N \frac{k_B T}{\varepsilon_F}$$

$$U = N \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \frac{3}{2} k_B T$$

$$C_{el} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{3 N k_B^2}{\varepsilon_F} T$$

$$C_{el} = \gamma T$$



حال بیایید ظرفیت گرمایی الکترونی را به طور کمی محاسبه نماییم.

فرض می کنیم که دما پایین باشد:

$$k_B T \ll \varepsilon_F$$

$$\Delta U = U(T) - U(0)$$

افزایش انرژی کل وقتی که از دمای صفر به اندازه T بالا برویم:

$$\Delta U = \int_0^\infty \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$U(T)$$

$$U(0)$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1}$$

$$f(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \varepsilon \leq \varepsilon_F \\ 0 & \varepsilon \geq \varepsilon_F \end{cases}$$

$$N = \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon$$

حال طرفین اتحاد زیر را

در انرژی فرمی ضرب می کنیم تا به دست آوریم:

$$\int_0^{\infty} \varepsilon_F D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon_F D(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon_F D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\infty} \varepsilon_F D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon_F D(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon_F D(\varepsilon) d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon_F D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon - \int_{\varepsilon_F}^{\infty} \varepsilon_F D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = 0$$

+

$$\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon = \Delta U$$

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\varepsilon_F}^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon + \\
 & \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon_F D(\varepsilon) d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon_F D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon - \int_{\varepsilon_F}^{\infty} \varepsilon_F D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \\
 & = \Delta U + 0 = \Delta U
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta U &= \int_{\varepsilon_F}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \\
 &+ \int_0^{\varepsilon_F} (\varepsilon - \varepsilon_F) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_F} (\varepsilon - \varepsilon_F) D(\varepsilon) d\varepsilon
 \end{aligned}$$

$$\Delta U = \int_{\varepsilon_F}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon + \int_0^{\varepsilon_F} (\varepsilon_F - \varepsilon) D(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon)] d\varepsilon$$

حال دو انتگرال فوق را تعبیر می کنیم:

$$\int_{\varepsilon_F}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

انتگرال اول (یعنی انتگرال فوق) انرژی لازم برای جدا کردن همه الکترونها از سطح فرمی و بردن آنها به انرژیهای بالاتر از انرژی فرمی است.

$$\int_0^{\varepsilon_F} (\varepsilon_F - \varepsilon) D(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon)] d\varepsilon$$

انتگرال دوم (یعنی انتگرال فوق) انرژی لازم برای آوردن الکترونها از انرژیهای کمتر از انرژی فرمی به انرژی فرمی است.

$$\int_{\epsilon_F}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$$

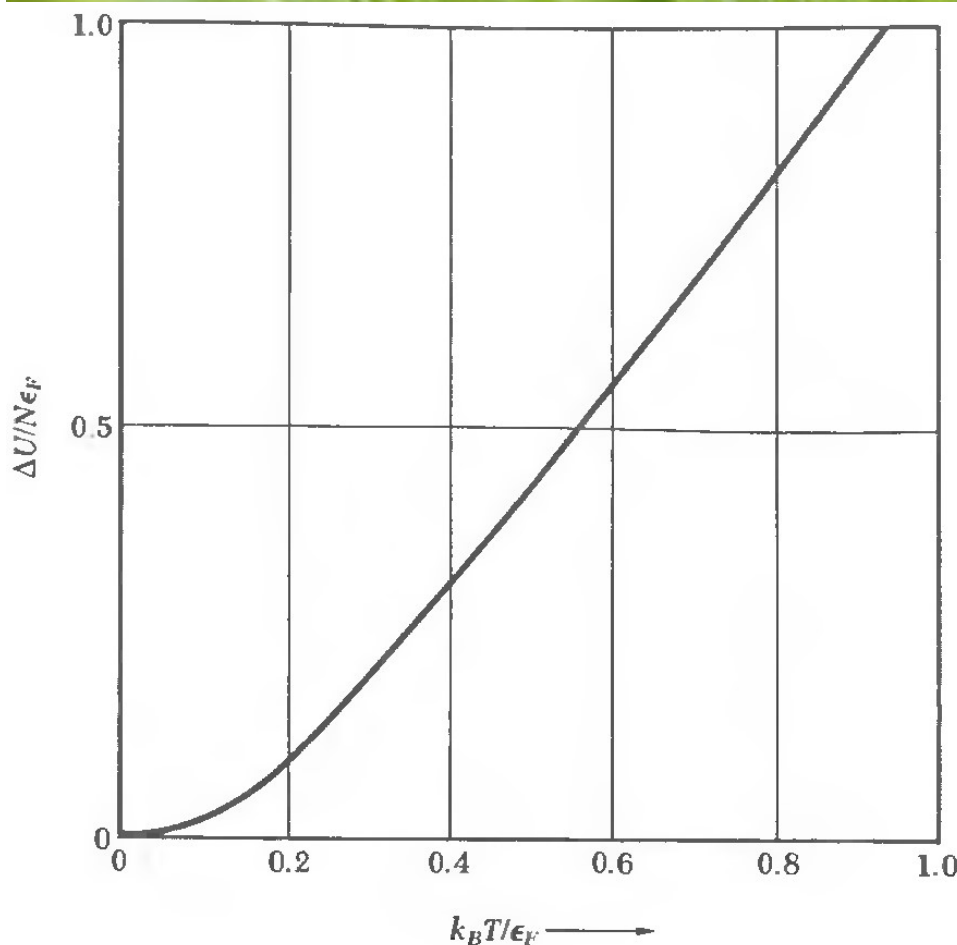
تعداد الکترونهاى آورده شده به اوربیتالهايى در بازه ϵ تا $\epsilon + d\epsilon$

$$\int_0^{\epsilon_F} (\epsilon_F - \epsilon) D(\epsilon) [1 - f(\epsilon)] d\epsilon$$

احتمال آن که یک الکترون از اوربیتالى با انرژی ϵ حذف شود.

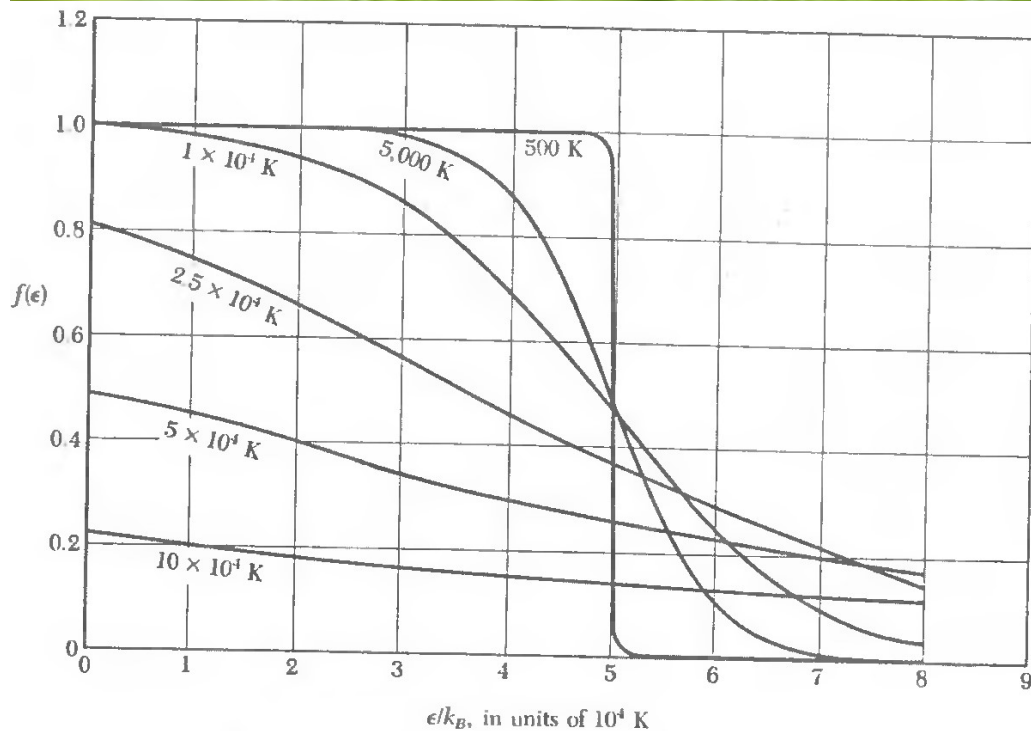
برای فلزات تقریباً داریم که:

$$T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B} \cong 50,000K$$



$$C_{el} = \frac{dU}{dT} = \int_{\varepsilon_F}^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) D(\varepsilon) \frac{df(\varepsilon)}{dT} d\varepsilon + \int_0^{\varepsilon_F} (\varepsilon_F - \varepsilon) D(\varepsilon) \left[0 - \frac{df(\varepsilon)}{dT} \right] d\varepsilon$$

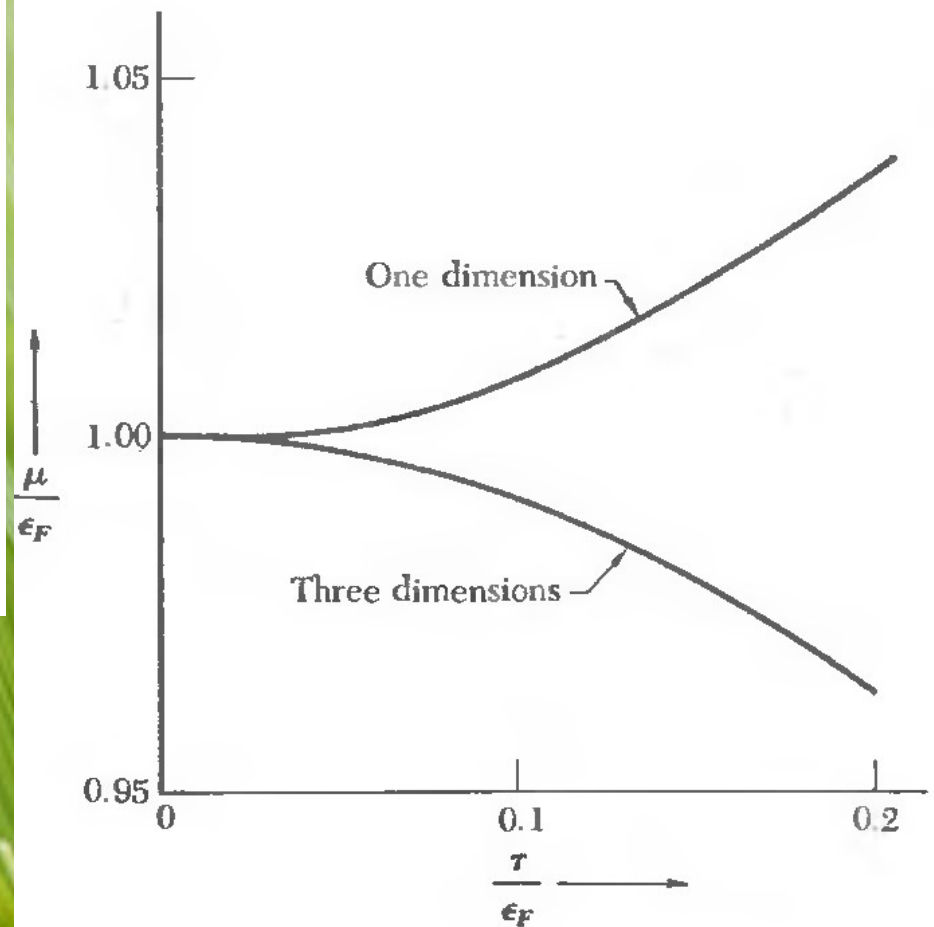
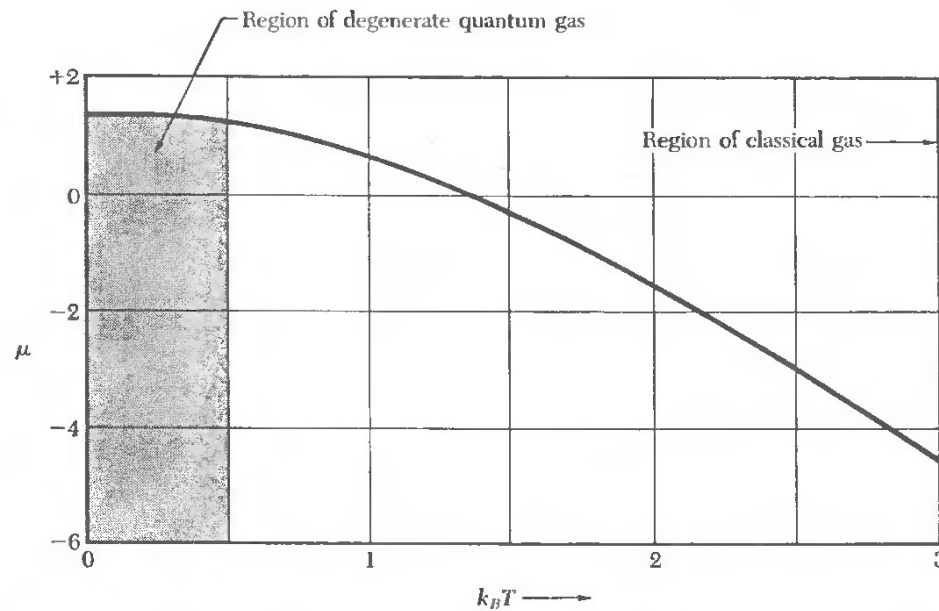
$$C_{el} = \int_0^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) D(\varepsilon) \frac{df(\varepsilon)}{dT} d\varepsilon$$



در دماهای مورد علاقه در فلزات (مثلا دمای اتاق یا دماهای پایین) تابع $f(\varepsilon)$ به صورت زیر است:

بنابراین df/dT فقط در نزدیکی سطح فرمی مقدار بزرگ دارد و در بقیه نواحی کوچک است، لذا $D(\varepsilon)$ را در سطح فرمی ارزیابی می کنیم و آن را از زیر انتگرال بیرون می آوریم.

$$C_{el} = D(\varepsilon_F) \int_0^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{df(\varepsilon)}{dT} d\varepsilon$$



$$\begin{aligned} \frac{k_B T}{\epsilon_F} &= \frac{T}{\epsilon_F / k_B} \\ &= \frac{T}{50,000\text{K}} \\ &= \frac{300\text{K}}{50,000\text{K}} \cong 0.01 \end{aligned}$$

در فلزات معمولی $\tau/\epsilon_F = 0.01$ در دمای اتاق می باشد، بنابراین پتانسیل شیمیایی حتی در دمای اتاق بسیار نزدیک به انرژی فرمی می شود.

$$\frac{df}{dT} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T^2} \cdot \frac{\exp[(\varepsilon - \varepsilon_F)/T]}{\{\exp[(\varepsilon - \varepsilon_F)/T] + 1\}^2}$$

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{T} = x$$

$$C_{el} = D(\varepsilon_F) \int_0^\infty (\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{df(\varepsilon)}{dT} d\varepsilon$$

$$C_{el} = D(\varepsilon_F) \int_{-\frac{\varepsilon_F}{k_B T}}^\infty k_B T dx \cdot k_B T x \frac{\frac{x}{T} e^x}{(e^x + 1)^2}$$

$$= k_B^2 T D(\varepsilon_F) \int_{-\frac{\varepsilon_F}{k_B T}}^\infty dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2}$$

در دمای اتاق (یا بالاتر) این حد را می توان $-\infty$ اختیار کرد زیرا عامل e^x در $x = -\varepsilon_F/k_B T$ قابل صرف نظر کردن است. پس:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{3}$$

انتگرال غیر مشهور:

برای محاسبه انتگرال فوق می توان از انتگرال زیر نسبت به پارامتر **a** مشتق گرفت:

$$\frac{d}{da} \int_0^{\infty} dx \frac{x}{e^{ax} + 1} = \frac{d}{da} \left(\frac{\pi^2}{12a^2} \right)$$

انتگرال مشهور:

$$\int_0^{\infty} dx \frac{-x e^{ax} x}{(e^{ax} + 1)^2} = \frac{-2a\pi^2}{12a^3} = \frac{-\pi^2}{6a^2}$$

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^2 e^{ax}}{(e^{ax} + 1)^2} = \frac{\pi^2}{6a^2}$$

$$a = 1 \Rightarrow \int_0^{\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} = 2 \times \frac{\pi^2}{6} = \frac{\pi^2}{3}$$

$$C_{el} = k_B^2 T D(\varepsilon_F) \int_{-\frac{\varepsilon_F}{k_B T}}^{\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2}$$

$$C_{el} = k_B^2 T D(\varepsilon_F) \frac{\pi^2}{3}$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

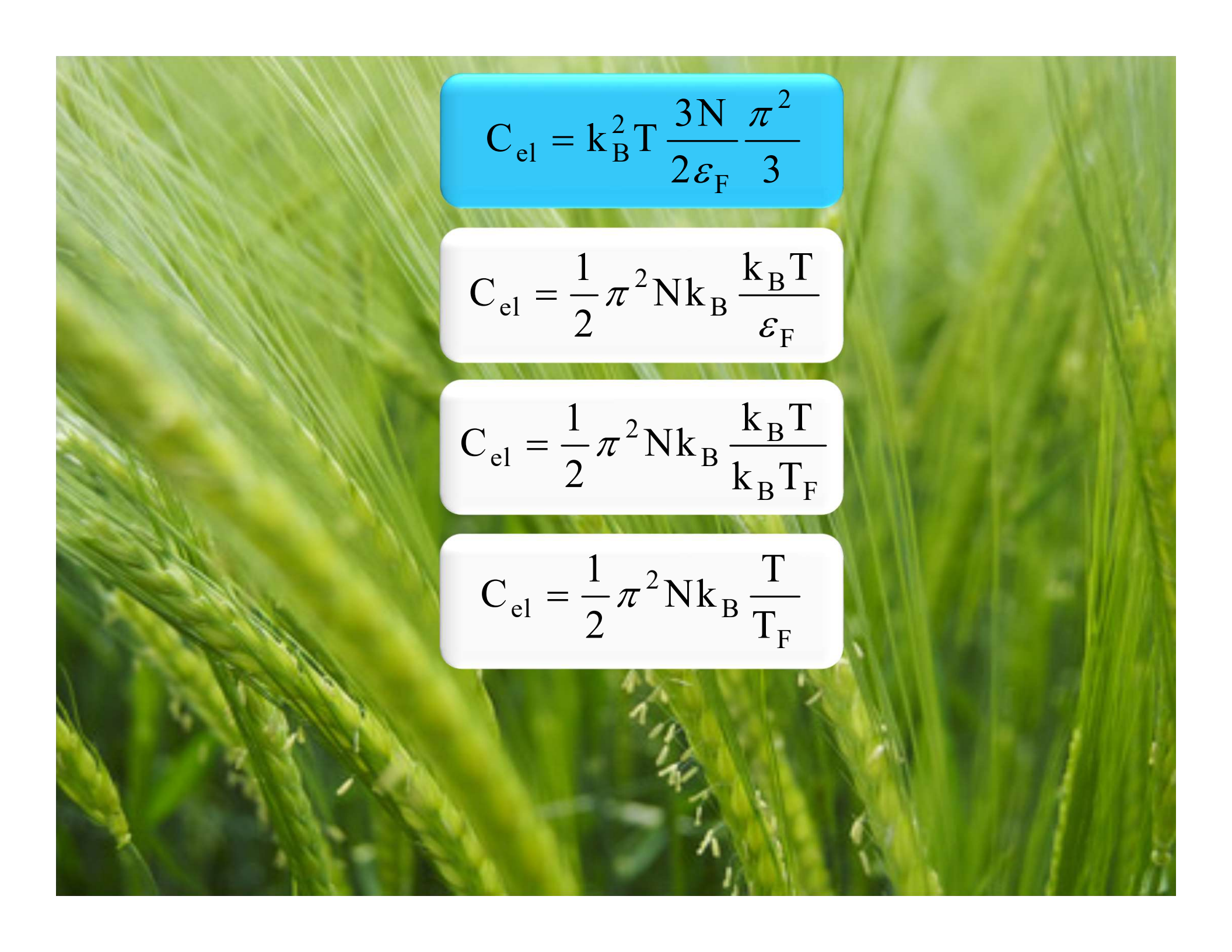
$$D(\varepsilon_F) = \frac{3N}{2\varepsilon_F}$$

$$R = n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \left(\frac{L}{\pi \hbar} \right) (2m\varepsilon)^{1/2}$$

$$\Phi(\varepsilon) = \frac{1}{8} \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2mL^2 \varepsilon}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} = \frac{\pi}{6} \left(\frac{2mV^{2/3} \varepsilon}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} = N \quad ; V = L^3$$

$$C_{el} = k_B^2 T \frac{3N}{2\varepsilon_F} \frac{\pi^2}{3}$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{d\Phi(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \left(\frac{2m\hbar^{-2} V^{2/3}}{\pi^2} \right)^{3/2} \frac{3}{2} \varepsilon^{1/2} = \frac{3N}{2\varepsilon}$$


$$C_{\text{el}} = k_{\text{B}}^2 T \frac{3N}{2\varepsilon_{\text{F}}} \frac{\pi^2}{3}$$

$$C_{\text{el}} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_{\text{B}} \frac{k_{\text{B}} T}{\varepsilon_{\text{F}}}$$

$$C_{\text{el}} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_{\text{B}} \frac{k_{\text{B}} T}{k_{\text{B}} T_{\text{F}}}$$

$$C_{\text{el}} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_{\text{B}} \frac{T}{T_{\text{F}}}$$

ظرفیت گرمایی تجربی فلزات

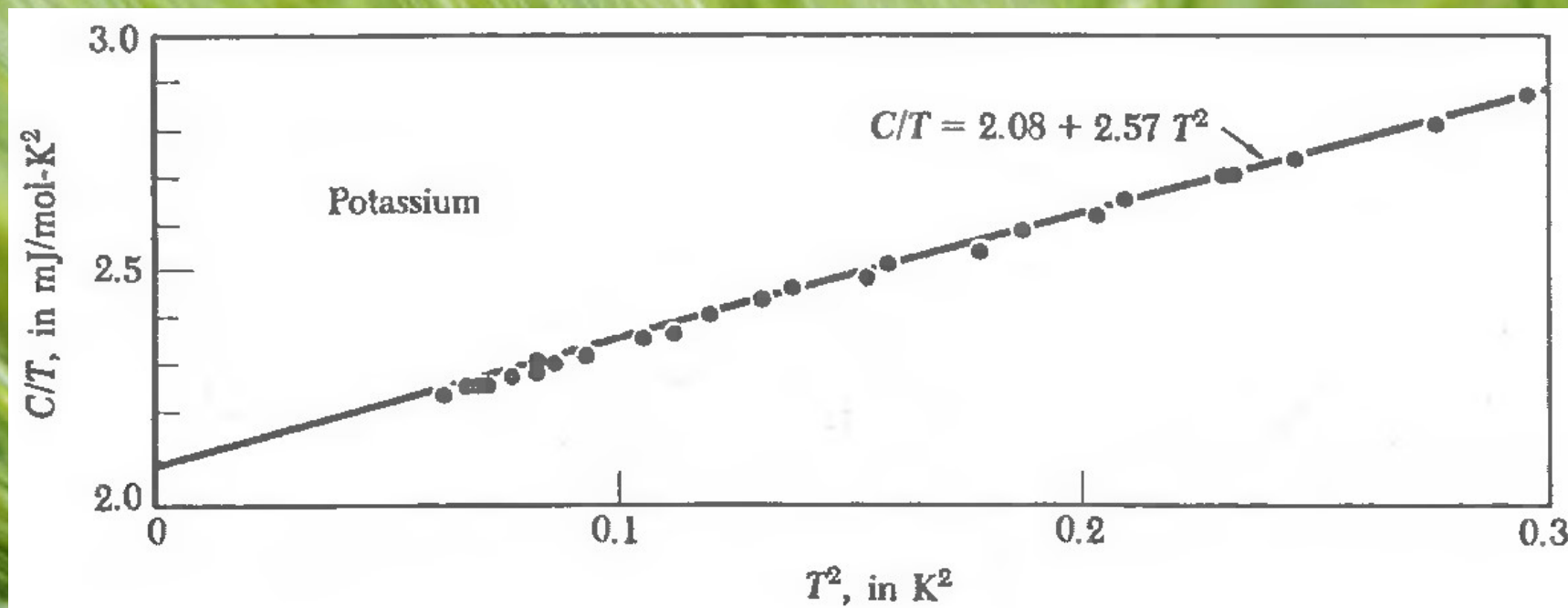
در دماهایی خیلی زیر دمای دیبای و دمای فرمی، ظرفیت گرمایی فلزات می تواند به صورت جمع سهمهای الکترونی و فونونی نوشته شود:

$$C = \gamma T + AT^3$$

که در آن γ و A ثابتهایی هستند که به نوع فلز مورد نظر بستگی دارند.

جمله الکترونی نسبت به T خطی است و در دماهای به اندازه کافی پایین از اهمیت بیشتری برخوردار است، زیرا در دماهای پایین ارتعاشات شبکه و بنابراین سهم فونونی بسیار کم می باشد.

مرسوم است که مقادیر تجربی C به صورت C/T بر حسب تابعی از T^2 رسم شود. در شکل زیر این منحنی برای پتاسیم رسم شده است:



$$\frac{C}{T} = \gamma + AT^2$$

به این ضریب پارامتر سامرفلد گویند.

$$\gamma = \frac{C_{el}}{T} = \frac{1}{3} \pi^2 k_B^2 D(\epsilon_F)$$

پارامتر سامرفلد برای گاز الکترون آزاد عبارت است از:

مقادیر تجربی پارامتر سامرفلد با مقادیر مدل الکترون آزاد سازگار است، اما حالاتی نیز وجود دارند که در آنها مقادیر تجربی سازگاری کمتری با مدل الکترون آزاد یعنی ذراتی با جرم الکترون در فضای آزاد دارند.

اغلب نسبت پارامتر سامرفلد تجربی را به پارامتر سامرفلد الکترون آزاد را به صورت نسبت جرم موثر حرارتی **thermal effective mass** به جرم الکترون آزاد نمایش می دهند:

$$\frac{m_{th}}{m} = \frac{\gamma(Experimental)}{\gamma(Free electron)}$$

$$\gamma = \frac{C_{el}}{T} = \frac{1}{3} \pi^2 k_B^2 D(\epsilon_F)$$

$$\gamma = \frac{C_{el}}{T} = \frac{1}{3} \pi^2 k_B^2 \frac{3N}{2\epsilon_F}$$

پارامتر سامرفلد متناسب با جرم است زیرا از یک سو انرژی فرمی متناسب با عکس جرم است و از سوی دیگر چگالی حالتها متناسب با عکس انرژی فرمی است.

$$\gamma \propto \frac{1}{\epsilon_F} \propto m$$

از یک (واحد) سه دلیل عمده
دارد:

$$\frac{m_{th}}{m} = \frac{\gamma(Experimental)}{\gamma(Free\ electron)}$$

انحراف

الف) برهمکنش الکترونهاى هدایت با پتانسیل تناوبی شبکه بلوری جامد.

جرم موثر یک الکترون در این شبکه جرم موثر نواری نامیده می شود، و بعداً مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

ب) برهمکنش الکترونهاى هدایت با فونونها.

یک الکترون تمایل دارد که شبکه را در نزدیکی خود قطبیده یا مختل کند.

الکترونهاى در حال حرکت سعی می کنند در نزديكیهای یونها مقاومت بیشتری در مقابل حرکت از خود نشان دهند.

این مقاومت بیشتر الکترونها سبب افزایش جرم موثر الکترونها می شود.

ج) برهمکنش الکترونهاى هدایت با خودشان.

یک الکترون در حال حرکت سبب یک برهمکنش توام با اینرسی بیشتر در اطراف گاز الکترونی است که سبب افزایش جرم موثر الکترون می شود.

فرمیونهای سنگین:

چندین ترکیب فلزی تا کنون کشف شده اند که مقادیر بزرگی، دو یا سه مرتبه بزرگی بیش از مقدار طبیعی، از ظرفیت گرمایی الکترونی از خود نشان می دهند.

ترکیبات CeAl_3 ، UBe_{13} و CeCu_2Si_2 نمونه هایی از ترکیبات فرمیونی سنگین می باشند.

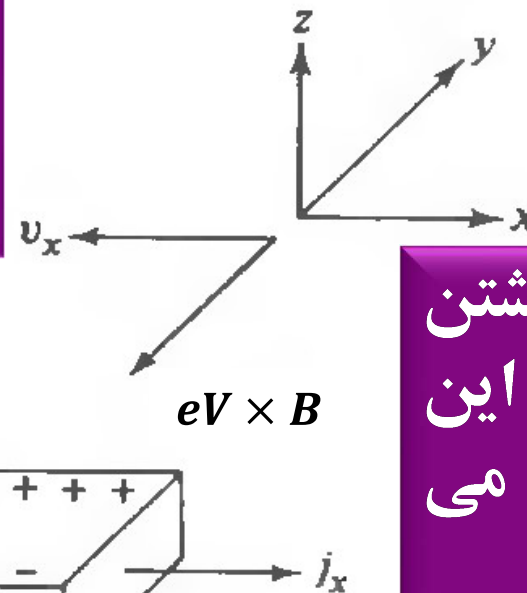
این ترکیبات دارای الکترونهای f می باشند.

جرم الکترونهای f در یک ترکیب فرمیونی سنگین می تواند حتی بزرگتر از $1000m_e$ باشد، زیرا توابع موج الکترونهای f یونهای همسایه با هم همپوشانی بسیار اندکی دارند.

اثر هال

شکل زیر با فرض این که حاملهای جریان الکترونها باشند کشیده شده است، یعنی فرض کرده ایم که:

$$e < 0$$



حال در نوشتن معادلات زیر این فرض را کنار می گذاریم

یعنی تعیین علامت بار الکترون را به عهده تجربه می گذاریم، یعنی e در معادلات زیر می تواند مثبت یا منفی باشد

$$\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{k}}$$

$$E_y \propto BJ_x$$

$$E_y = R_H BJ_x$$

$$\mathbf{J} = J_x \hat{\mathbf{i}}$$

$$\mathbf{F} = e\mathbf{V} \times \mathbf{B}$$

$$J_x = \sigma E_x$$

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{F} - \frac{m}{\tau} \mathbf{V}$$

معادله حرکت ذره در داخل فلز:

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = e\mathbf{E} + e\mathbf{V} \times \mathbf{B} - \frac{m}{\tau} \mathbf{V}$$

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = e(E_x \hat{\mathbf{i}} + E_y \hat{\mathbf{j}}) + e(V_x \hat{\mathbf{i}}) \times B \hat{\mathbf{k}} - \frac{m}{\tau} V_x \hat{\mathbf{i}}$$

$$\mathbf{J} = J_x \hat{\mathbf{i}}$$

$$J_x = \rho V_x = en V_x$$

$$V_x = J_x / en$$

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = 0$$

در حالت تعادل داریم
که:

$$0 = e(E_x \hat{\mathbf{i}} + E_y \hat{\mathbf{j}}) + e\left(\frac{J_x}{en}\right) B(-\hat{\mathbf{j}}) - \frac{m}{en\tau} J_x \hat{\mathbf{i}}$$

$$eE_x = \frac{m}{en\tau} J_x$$

$$eE_y = \frac{J_x B}{n}$$

$$eE_x = \frac{m}{en\tau} J_x$$

$$J_x = \frac{ne^2\tau}{m} E_x$$

$$J_x = \sigma E_x$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

$$eE_y = \frac{J_x B}{n}$$

$$E_y = \frac{1}{en} J_x B$$

$$E_y = R_H B J_x$$

$$R_H = \frac{1}{en}$$

چون ضریب هال به بار حامل جریان بستگی دارد، هال به طور تجربی نتیجه گرفت که حاملها باید الکترون باشند، زیرا:

چون میدان عرضی هال و در نتیجه اختلاف پتانسیل هال (که به طور تجربی قابل اندازه گیری است) به این ضریب وابسته به بار بستگی دارند

$$E_y = R_H B J_x$$

Resistive Forces

- **Linear Case**

$$\mathbf{F} = -b\mathbf{v}$$

- **Terminal Velocity**

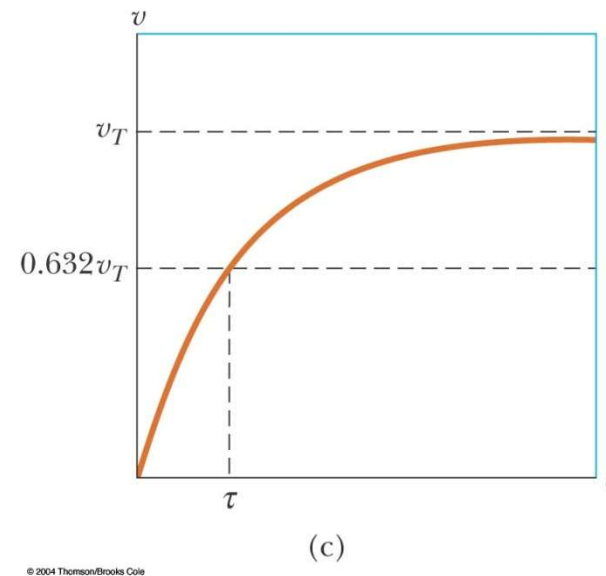
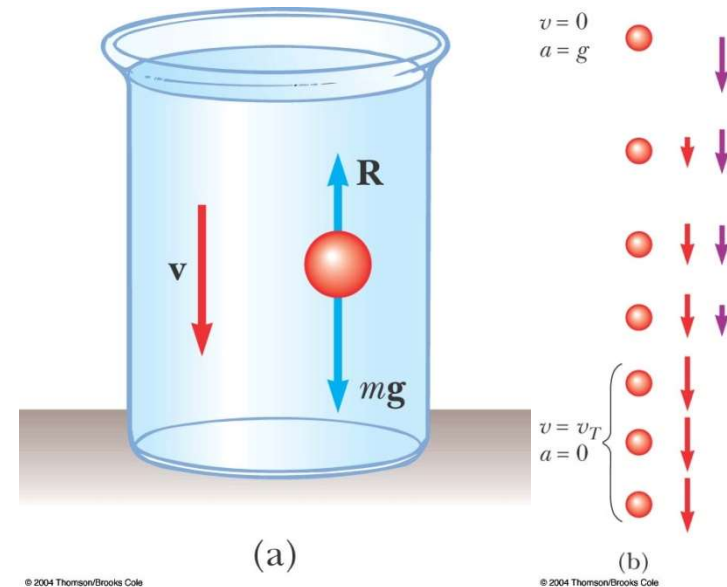
$$ma = mg - bv = 0$$

$$v_T = \frac{mg}{b}$$

- **Solution for $\mathbf{v}_0 = 0$**

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{b}{m}v$$

$$v = \frac{mg}{b} \left(1 - e^{-bt/m}\right) = v_T \left(1 - e^{-t/\tau}\right)$$



$$F = ma$$

$$mg = ma$$

$$g = a$$

$$g = \frac{dv}{dt}$$

$$dv = gdt$$

$$\int_{v_0}^v dv = g \int_0^t dt$$

$$v - v_0 = gt$$

$$v = v_0 + gt$$

$$\frac{dx}{dt} = v_0 + gt$$

$$dx = (v_0 + gt)dt$$

$$\int_0^x dx = \int_0^t (v_0 + gt)dt$$

$$x = v_0 \int_0^t dt + g \int_0^t t dt$$

$$x = v_0 t + \frac{1}{2} gt^2$$

$$F = ma$$

$$-bv + mg = ma$$

$$-\frac{b}{m}v + g = a$$

$$-\frac{b}{m}v + g = \frac{dv}{dt}$$

$$\left(\frac{b}{m}v - g\right)dt = -dv$$

$$\frac{dv}{\left(\frac{b}{m}v - g\right)} = -dt$$

$$\int_{v_0}^v \frac{dv}{\left(\frac{b}{m}v - g\right)} = -\int_0^t dt$$

$$\int_{v_0}^v \frac{dv}{\left(\frac{b}{m}v - g\right)} = -\int_0^t dt$$

$$\frac{b}{m}v - g = u$$

$$\frac{b}{m}dv = du$$

$$\int \frac{du}{u^n} = \begin{cases} \frac{u^{-n+1}}{-n+1} & n \neq 1 \\ \ln u & n = 1 \end{cases}$$

$$\int \frac{\frac{m}{b}du}{u} = -\int_0^t dt$$

$$\frac{m}{b} \int \frac{du}{u} = -\int_0^t dt$$

$$\frac{m}{b} \ln u = -t$$

$$\frac{m}{b} \ln \left(\frac{b}{m}v - g \right) \Big|_{v_0}^v = -t$$

$$\frac{m}{b} \left\{ \ln \left(\frac{b}{m} v - g \right) - \ln \left(\frac{b}{m} v_0 - g \right) \right\} = -t$$

$$\frac{m}{b} \ln \left| \frac{\frac{b}{m} v - g}{\frac{b}{m} v_0 - g} \right| = -t$$

$$\ln \left| \frac{\frac{b}{m} v - g}{\frac{b}{m} v_0 - g} \right| = -\frac{b}{m} t$$

$$\frac{\frac{b}{m} v - g}{\frac{b}{m} v_0 - g} = e^{-\frac{b}{m} t} = \exp \left\{ -\frac{b}{m} t \right\}$$

$$\ln a = b \equiv \log_e a = b$$



$$a = e^b$$

$$\frac{b}{m} v - g = \left(\frac{b}{m} v_0 - g \right) e^{-\frac{b}{m} t}$$

$$v - \frac{m}{b} g = v_0 e^{-\frac{b}{m} t} - \frac{m}{b} g e^{-\frac{b}{m} t}$$

$$v = v_0 e^{-\frac{b}{m} t} + \frac{m}{b} g - \frac{m}{b} g e^{-\frac{b}{m} t}$$

$$v = v_0 e^{-\frac{b}{m} t} + \frac{m}{b} g \left(1 - e^{-\frac{b}{m} t} \right)$$

$$v = \frac{m}{b} g \left(1 - e^{-\frac{b}{m} t} \right)$$

$$v = \tau g \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right)$$

$$v = v_T \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right)$$