

Statystyka Fermiego-Diraca : potencjał chemiczny, energia Fermiego, powierzchnia Fermiego, wypełnienie pasma

Rachunek Fermiego-Diraca określa średnią liczbę cząstek w stanie $|k, \alpha\rangle$ (α jest nutem spinu)

$$n_{k, \alpha} = \frac{1}{e^{(E_{k, \alpha} - \mu)/k_B T} + 1}$$

gdzie $k_B =$ jest stałą Boltzmanna, a T jest temperaturą bezwzględną; μ jest potencjałem chemicznym verte

Dla stanów spinowo-zdegenerowanych $E_{k, \alpha} = E_k$,

$$n_k = n_{k, \alpha} = \frac{1}{e^{(E_k - \mu)/k_B T} + 1}$$

jest obsadzeniem stanu $|k\rangle$ o ustalonym dowolnym nucie spinu.

Przyjmujemy $|k\rangle \equiv |k, \alpha\rangle$ i rozróżnienie ze względu na nut spinu będziemy uwzględniać dopiero wtedy gdy będzie ono istotne.

Jeśli przez $f(E_k)$ oznaczamy prawdopodobieństwo tego, że stan $|k\rangle$ jest obsadzony to zgodnie z zakazem Pauliego otrzymujemy

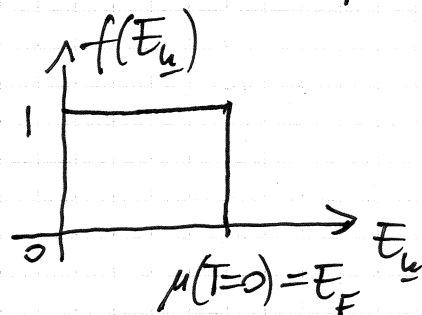
$$n_k = 1 \cdot f(E_k) + 0 \cdot (1 - f(E_k)) = f(E_k),$$

czyli $f(E_k) = n_k$ jest prawdopodobieństwem zapełnienia stanu $|k\rangle$.

→ $\mu = \mu(T)$ jest energią, o jaką wzrasta energia wewnętrzna układu gdy dodawana jest do niego jedna cząstka, czyli jest to koszt energetyczny dodania jednej cząstki.

Stan podstawowy układu to stan zajmowany przez układ w $T=0$, jest on zdefiniowany przez rozkład Fermiego - Diraca w $T=0$ ten.

$$f_0(E_k) = \lim_{T \rightarrow 0} f(E_k) = \Theta(\mu(T=0) - E_k)$$



który pokazuje, że w stanie podstawowym gazu Fermiego wszystkie stany $E_k \leq \mu(T=0) = E_F$ są obsadzone z prawdopodobieństwem równym 1, a stany o energii $E_k > \mu(T=0)$ pozostają nieobsadzone.

$E_F = \mu(T=0)$ nazywamy energiją Fermiego - jest to najwyższa energia cząstki w stanie podstawowym.

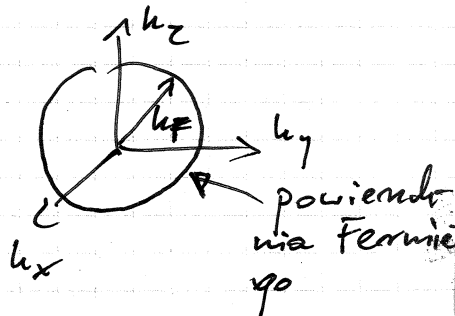
Stany $\{ |k_F\rangle : E_{k_F} = E_F \}$ tworzą powierchnię Fermiego (FS), która w $T=0$ oddziela w p.p. odwrotnej stany zajęte od stanów niezajętych. Kwazipśd cząstek z FS, $\bar{p}_F = \hbar k_F$, nazywamy pśdem Fermiego.

Przykład: Powierchnia i pśd Fermiego układu izotropowego, dla którego $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{p^2}{2m^*}$, m^* - masa efektywna

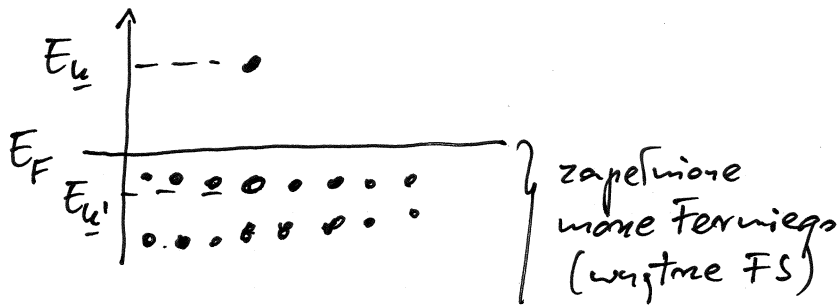
$$E_{k_F} = E_F, \text{ czyli } \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} = E_F \text{ ten. powierchnia}$$

Fermiego jest sferą o promieniu $k_F = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* E_F}$, pśd Fermiego to $p_F = \sqrt{2m^* E_F}$

Dla gazu swobodnych elektronów $m^* = m$ - masa elektronu



Elementarna zmiana energii układu polega na wzbudzeniu pojedynczych cząstek w stanie podstawowym, które są przenoszone z zajętych stanów na ^{i poniżej} powierzchnię Fermiego do wolnych stanów powyżej powierzchni Fermiego.



Zmiana energii układu na skutek takiego pojedynczego wzbudzenia

$$\Delta E = E_k - E_{k'} =$$

$$(E_k > E_F$$

$$E_{k'} < E_F)$$

Zmiana energii układu jest równa sumie energii wzbudzeń elementarnych - wzbudzeń jedno cząstkowych

$$\sum_k = \begin{cases} \sum_k^P, & E_k > E_F \text{ (cząstka)} \\ -\sum_k^h, & E_k < E_F \text{ (dziura)} \end{cases}$$

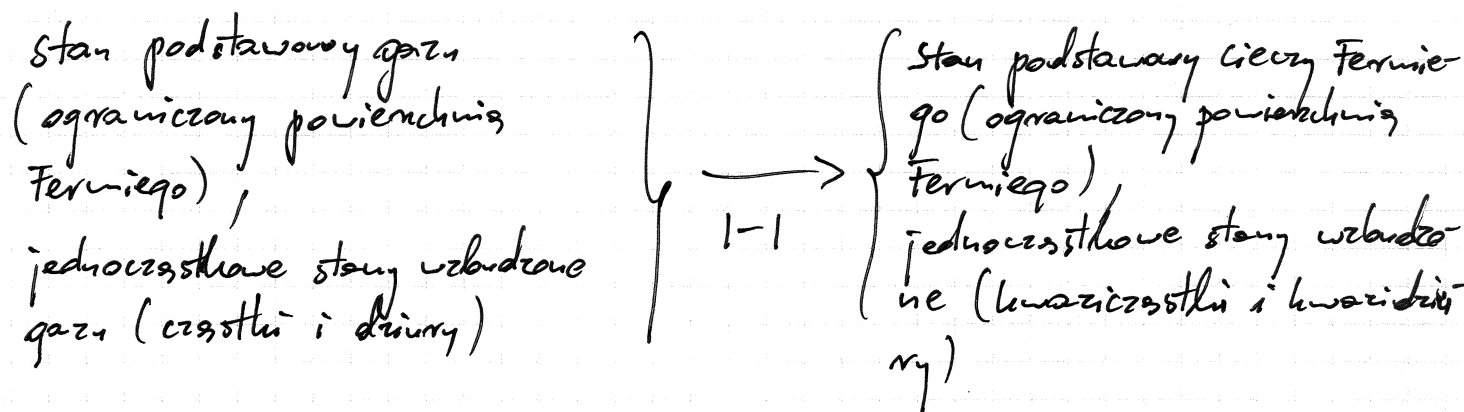
$$= \underbrace{\sum_k^P}_{\sum_k^P} + \underbrace{\mu - E_{k'}}_{-\sum_{k'}^h} =$$

$$= \sum_k^P - \sum_{k'}^h = |\sum_k^P| + |\sum_{k'}^h|$$

Każdy stan wzbudzony nieoddziałujących fermionów może być utworzony ze stanu podstawowego przez zabranie cząstki ze stanu $|k| < |k_F|$ czyli wytworzenie dziury i dodanie cząstki o $|k| > |k_F|$. Mówiąc, że stan wzbudzony powstaje ze stanu podstawowego poprzez powstawanie wzbudzeń elementarnych.

Uzpełnienie : Układ oddziałujących fermionów jest opisany, poza przypadkami granicznymi, przez teorię Landaua cieczy Fermiego. Polega ona na konstrukcji stanu podstawowego i stanów wzbudzonych układu z oddziaływaniami na podstawie analogicznych stanów układu bez oddzia-

Tytuł. Teoria Landaua cieczy Fermiego zakłada istnienie równowartościowego odzworowania, które przeprowadza stan gazu (układ bez oddziaływań między cząstkami) w stan cieczy (układ z oddziaływaniami) i z powrotem.



Stan wzbudzony cieczy Fermiego powstaje ze stanu podstawowego przez kreację kwazicząstek i kwazidziur, których prawdopodobieństwo wystąpienia jest opisywane funkcją rozkładu Fermiego-Diraca.

Stany wzbudzone cieczy Fermiego są stanami o odpowiedniej liczbie kwazicząstek i kwazidziur odpowiadającym stanom gazu Fermiego z taką samą liczbą wzbudzeń cząstkowych i dziurowych.

Energia wzbudzenia jednoznaczowego to

$$\epsilon_k = E_k - E_{k_F} = E_{k_F} + \left. \frac{\partial E_k}{\partial p} \right|_{\bar{p}_F} \cdot (\bar{p} - \bar{p}_F) - E_{k_F} = \bar{v}_F \cdot (\bar{p} - \bar{p}_F)$$

jest określona jedynie w pobliżu powierzchni Fermiego tzn. dla $|\bar{p} - \bar{p}_F| \ll p_F$. Wzbudzenia jednoznaczowe powstają jedynie w pobliżu FS.

□

Energia Fermiego, E_F , oraz poziom Fermiego, $\bar{E}_F$, są określone przez całkowitą liczbę cząstek w układzie, N_c ,

$$N_c = 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \Theta(E_F - E_{\underline{k}})$$

(zakładamy degenerację spinową)

lub równoważnie przez zapełnienie pał-a $n = \frac{N_c}{N}$,
gdzie N jest liczbą stanów (węzłów sieci)

$$n = \frac{N_c}{N} = \frac{2}{N} \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \Theta(E_F - E_{\underline{k}}), \quad 0 \leq n \leq 2$$

Używając ciągłych wartości wektora falowego możemy napisać

$$N_c = \frac{2V_d}{(2\pi)^d} \int_{\text{RBZ}}^d \Theta(E_F - E_{\underline{k}}) d^d \underline{k}$$

$$n = \frac{N_c}{N} = \frac{2V_d}{(2\pi)^d} \int_{\text{RBZ}}^d \Theta(E_F - E_{\underline{k}}) d^d \underline{k}$$

gdzie $d=1,2,3$ jest wymiarnością układu, V_d jest objętością układu, a v_d jest objętością prymitywnej komórki elementarnej.

W przypadku układów izotropowych wygodnie jest określić E_F przez koncentrację cząstek $n_c = \frac{N_c}{V_d}$:

$$n_c = \frac{2}{(2\pi)^d} \underbrace{\int \int \int}_{\text{RBZ}} \theta(E_F - E_{\underline{k}}) d^d k$$

Przykład: Energia Fermiego i pśd Fer-iego układu izotropowego ($d=3$)

$$n_c = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \int \int_{\underline{k} < k_F} d^3 k = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3$$

$$\left[k_F = (3\pi^2 n_c)^{1/3} \right], \left[p_F = \hbar k_F = \hbar (3\pi^2 n_c)^{1/3} \right], \left[E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n_c)^{2/3} \right]$$

Komentarz: Powyższe zależności są także prawdziwe w cieczy Fermiego, czyli po uwzględnieniu oddziaływań między elektronami.

Przykład: Energia Fermiego sieci kwadratowej z najbliższymi sąsiadami ($d=2$), tzn. $E_{\underline{k}} = -2t(\cosh_x a + \cosh_y a)$.

$$\text{Zapełnienie } n=0 : \sum_{\underline{k}} \theta(E_F - E_{\underline{k}}) = 0 \quad \text{wisc}$$

$$E_F = \inf E_{\underline{k}} = -4t$$

$$n=2 : \sum_{\underline{k}} \theta(E_F - E_{\underline{k}}) = N \quad \text{wisc}$$

$$E_F = \sup E_{\underline{k}} = 4t$$

określił się, że w $x=0$ nieciągła fga $\Theta(x)$:

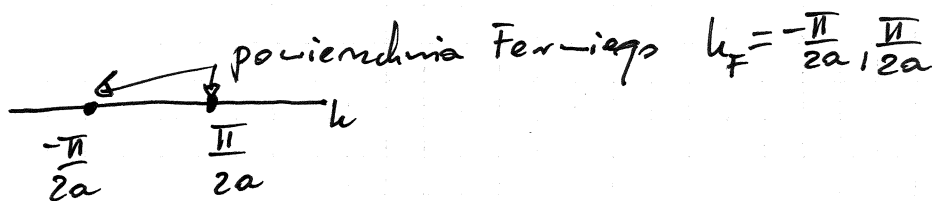
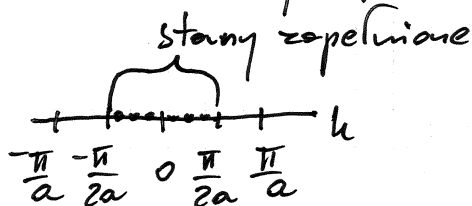
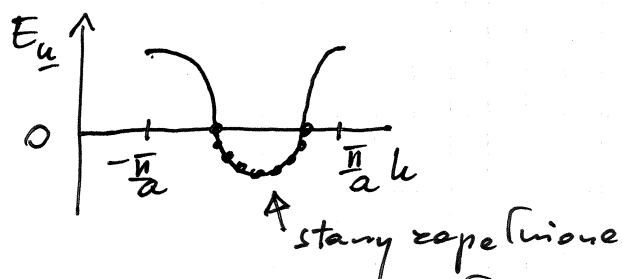
$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \Theta(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow 0^-} \Theta(x) = 0$$

$n=1$:
(zapełnienie
połówkowe)

$$\sum_{\underline{k}} \Theta(E_F - E_{\underline{k}}) = \frac{N}{2} \quad \text{czyli} \quad E_F = 0.$$

Przykład: Powierzchnia Fermiego dla pasma ciasnego wiązania
o zapełnieniu połówkowym.

$d=1$: $E_{\underline{k}} = -2t \cos ka$, $E_F = 0$



$$\frac{\text{liczba stanów zapełnionych}}{\text{całkowita liczba stanów}} = \frac{\left(\frac{2}{2\pi}\right) (\text{miara wnętrza FS})}{\left(\frac{2}{2\pi}\right) (\text{miara RBZ})} =$$

$$= \frac{\frac{\pi}{a}}{2\frac{\pi}{a}} = \frac{1}{2}$$

$$2^o \quad d=2: E_k = -2t(\cosh_k x a + \cosh_k y a), \quad E_F = 0$$

$$0 = E_F = E_{k_F} = -2t(\cosh_k x a + \cosh_k y a) - \text{równanie określające położenie Fermiego}$$

zn.

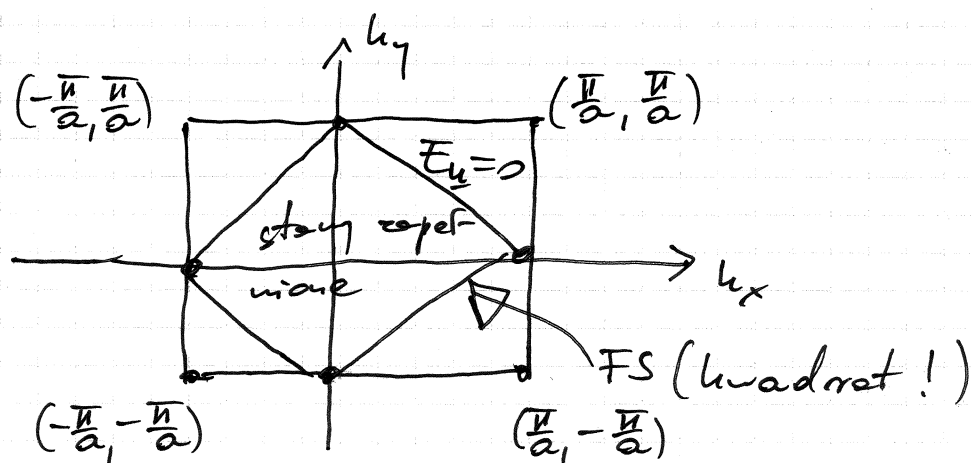
$$\cosh_k y a = -\cosh_k x a$$

zn.

$$k_y a = \pm \pi + k_x a, \quad k_y a = \pm \pi - k_x a$$

zn.

$$k_y = \pm \frac{\pi}{a} + k_x, \quad k_y = \pm \frac{\pi}{a} - k_x - \text{FS}$$



$$\frac{\text{liczba stanów zapełnionych}}{\text{całkowita liczba stanów}} = \frac{\left(\frac{\pi}{a}\sqrt{2}\right)^2}{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2} = \frac{1}{2}$$

Tak jak w $T=0$ całkowita liczba cząstek określa energię Fermiego
 tak w temperaturze $T>0$ całkowita liczba cząstek w paśmie
 (zakładamy jedno pasmo) określa potencjał chemiczny μ :

$$N_c = 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \frac{1}{e^{(E_{\underline{k}} - \mu)/k_B T} + 1} = 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \frac{1}{e^{\xi_{\underline{k}}/k_B T} + 1}$$

gdzie $\xi_{\underline{k}} = E_{\underline{k}} - \mu$ jest energią wzbudzenia jednocząstkowego.

Obliczmy $x = \frac{\xi_{\underline{k}}}{2k_B T}$, wtedy

$$\frac{1}{e^{\xi_{\underline{k}}/k_B T} + 1} = \frac{1}{e^{2x} + 1} = \frac{e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = \frac{e^{-x} - e^x}{e^x + e^{-x}} + \frac{e^x}{e^x + e^{-x}} =$$

$$= -\tanh x + 1 - \frac{e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = -\tanh x + 1 - \frac{1}{e^{2x} + 1}$$

czyli

$$\frac{1}{e^{2x} + 1} = -\tanh x + 1 - \frac{1}{e^{2x} + 1} \quad \text{a stąd} \quad \frac{1}{e^{2x} + 1} = \frac{1}{2}(1 - \tanh x)$$

więc

$$\frac{1}{e^{\xi_{\underline{k}}/k_B T} + 1} = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{\xi_{\underline{k}}}{2k_B T} \right)$$

otrymujemy

$$N_c = 2 \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{\xi_{\underline{k}}}{2k_B T} \right) = N - \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \tanh \frac{\xi_{\underline{k}}}{2k_B T}$$

↑
 całkowita liczba stanów w paśmie $E_{\underline{k}}$
 z ustalonym dowolnym nurtem spinu, czyli
 liczba węzłów sieci

$$\frac{N_c}{N} = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \text{th} \frac{\epsilon_{\underline{k}}}{2k_B T}$$

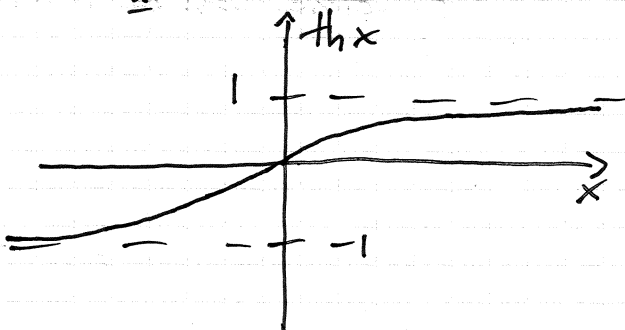
Definiując zapełnienie pasma, $n = \frac{N_c}{N}$, $0 \leq n \leq 2$, możemy napisać równanie określające potencjał chemiczny μ pasma o zapełnieniu n , $\mu = \mu(n, T)$:

$$n = 1 - \frac{1}{N} \sum_{\underline{k} \in \text{RBZ}} \text{th} \frac{E_{\underline{k}} - \mu}{2k_B T}$$

Szczególным przypadkiem jest zapełnienie półowe, $n=1$, tzn. gdy na każdy węzeł sieci przypada jedna cząstka, wtedy

$$\frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} \text{th} \frac{E_{\underline{k}} - \mu}{2k_B T} = 0$$

Jak wcześniej to zauważyliśmy energia $E_{\underline{k}}$ jest określona z dokładnością do stałej (patrz metoda ciążnego wieszania) i jeśli stała zostanie wybrana tak, że $E_{\underline{k}}$ przyjmuje tylko wartości dodatnie i ujemne, np. $E_0 = 0$ i $E_k = -2t \cos ka$, to $\sum_{\underline{k}} \text{th} \frac{E_{\underline{k}}}{2k_B T} = 0$ ponieważ $\text{th} x$ jest funkcją nieparzystą.



Jeśli dodatkowo $\sum_{\underline{k}} \text{th} \frac{E_{\underline{k}} - \mu}{2k_B T} = 0$ (zapełnienie półowe) to

$\mu = 0$ niezależnie od temperatury.

$\rightarrow$ Możemy zapisać $\sum_k \hbar \frac{E_k}{2k_B T} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{RBZ}} \hbar \frac{E_k}{2k_B T} d^3k = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \hbar \left(\frac{E}{2k_B T} \right) v(E) dE$
 $= \int_{-E_{\max}}^{E_{\max}} \hbar \left(\frac{E}{2k_B T} \right) v(E) dE = 0$ jeśli $v(E) = v(-E)$
 (symetria cząstka-dziura)