

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ  
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

А.И.Морозов

**ЭЛЕКТРОННАЯ ФЕРМИ-ЖИДКОСТЬ В МЕТАЛЛЕ**

Москва 2016

## 1. Электронный газ. Модель желе

На первом этапе будем пренебрегать кулоновским взаимодействием электронов друг с другом. Для начала рассмотрим модель желе. Согласно этой модели, положительный заряд ионных остовов, каждый из которых представляет собой ядро атома в окружении электронов внутренних заполненных оболочек, предполагается размазанным по объему кристалла с постоянной плотностью. Такой положительный фон обеспечивает электронейтральность кристалла, не нарушая его однородности даже на микроуровне. Для электронов внешних частично заполненных оболочек кристалл представляет в модели желе трехмерную потенциальную яму.

Состояния электрона в этой яме характеризуются волновым вектором  $\vec{k}$  и описываются волнами де-Бройля:

$$\psi = c \exp(i\vec{k}\vec{r} - i\frac{\varepsilon(\vec{k})t}{\hbar}), \quad (1)$$

где  $\varepsilon(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$  - энергия электрона,  $m$  - его масса,  $\vec{r}$  и  $t$  - координата и время,  $\hbar$  - постоянная Планка. Аналогично случаю теплового излучения в полости, используем периодические граничные условия для волн де-Бройля. В результате получим разрешенные значения волновых векторов. В случае кристалла в форме прямоугольного параллелепипеда с размерами  $L_x, L_y, L_z$

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} l; k_y = \frac{2\pi}{L_y} n; k_z = \frac{2\pi}{L_z} p, \quad (2)$$

где  $l, n, p$  - целые числа.

Электроны являются ферми-частицами со спином  $1/2$  (в единицах  $\hbar$ ). В отсутствие внешнего магнитного поля и магнитного упорядочения состояние электронов с заданным волновым вектором  $\vec{k}$  оказывается двукратно вырожденным по величине проекции спина на выделенную ось  $z$ :  $s_z = \pm 1/2$ . Число состояний  $dN$ , приходящихся на объем  $d^3\vec{k}$  в пространстве волновых векторов равно

$$dN_{\vec{k}} = \frac{V d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} (2s + 1), \quad (3)$$

где  $V$  - объем кристалла.

Если перейти от волнового вектора к импульсу электрона  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ , то для числа состояний в объеме  $d^3 \vec{p}$  в пространстве импульсов получим

$$dN_{\vec{p}} = \frac{V d^3 \vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} (2s + 1). \quad (4)$$

Поскольку энергия свободного электрона  $\varepsilon = p^2 / 2m$ , то после замены переменной  $p = (2m\varepsilon)^{1/2}$  в (4) получаем число электронных состояний в интервале энергий от  $\varepsilon$  до  $\varepsilon + d\varepsilon$ .

$$dN_{\varepsilon} = V \frac{(2m^3 \varepsilon)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} d\varepsilon, \quad (5)$$

здесь учтено, что  $2s + 1 = 2$ .

Введем понятие плотности электронных состояний  $\nu(\varepsilon)$ :

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{V} \frac{dN_{\varepsilon}}{d\varepsilon} = \frac{(2m^3 \varepsilon)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3}. \quad (6)$$

Она представляет собой число электронных состояний, приходящееся на единичный интервал энергий в кристалле единичного объема.

Рассмотрим теперь, как заполнены электронные состояния при  $T=0$ . Для ферми-частиц справедлив принцип Паули, который гласит: в данном состоянии, задаваемом полным набором квантовых чисел, может находиться не более одной частицы.

При температуре, равной нулю, система находится в основном состоянии, то есть в состоянии с наименьшей энергией. Есть простейший рецепт получения этого состояния: будем последовательно заполнять электронами состояния, начиная с состояния с наименьшей энергией. Поскольку энергия электрона монотонно возрастает с величиной волнового

вектора (импульса), то к моменту, когда электроны иссякнут, окажутся заполненными все состояния с волновым вектором  $|\vec{k}| \leq k_F$ , где величину  $k_F$  называют фермиевским волновым вектором электронов, а соответствующую величину импульса  $p_F = \hbar k_F$  - фермиевским импульсом. В пространстве волновых векторов окажутся заполненными все состояния внутри сферы радиусом  $k_F$ , называемой сферой Ферми (напомним, что мы рассматриваем модель желе с изотропным законом дисперсии). Граничная энергия, разделяющая заполненные и пустые состояния, называется энергией Ферми:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{p_F^2}{2m}. \quad (7)$$

Найдем связь этой энергии с концентрацией свободных электронов в кристалле  $n_e$ .

Число состояний с энергией  $\varepsilon \leq \varepsilon_F$  в единице объема равно  $\int_0^{\varepsilon_F} \nu(\varepsilon) d\varepsilon$ .

Поскольку оно равно концентрации электронов  $n_e$ , то

$$\frac{(2m^3)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = n_e, \quad (8)$$

откуда

$$\frac{(2m\varepsilon_F)^{3/2}}{\hbar^3} = 3\pi^2 n_e \quad (9)$$

и

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n_e)^{2/3}. \quad (10)$$

Характерное значение  $n_e$  в металле равно  $3 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ , и из (10) получаем оценку для величины  $\varepsilon_F$ :  $\varepsilon_F \sim 3 \text{ эВ}$ .

Эта энергия намного превосходит тепловую энергию  $T$  во всей области существования кристаллического состояния (вплоть до температуры

плавления  $T_0 \sim 0,1 \text{ эВ}$ ). Поэтому электронный газ в металле называют сильно вырожденным. Характерные значения  $k_F$ ,  $p_F$  и фермиевской скорости электронов  $v_F = p_F / m$  равны, соответственно

$$k_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3} \approx 10^{10} \text{ м}^{-1},$$

$$p_F = \hbar k_F \approx 10^{-24} \text{ кг м/с},$$

$$v_F = p_F / m \approx 10^6 \text{ м/с}.$$

Найдем связь между плотностью электронных состояний на поверхности Ферми  $\nu(\varepsilon_F)$  и величинами  $\varepsilon_F$  и  $n_e$

$$\nu(\varepsilon_F) = \frac{(2m^3 \varepsilon_F)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{3n_e}{2\varepsilon_F}. \quad (11)$$

## 2. Теплоемкость электронного газа

При температуре  $T \neq 0$  равновесное распределение электронов по состояниям описывается распределением Ферми-Дирака. Среднее число фермионов в состоянии с энергией  $\varepsilon$   $F_0(\varepsilon)$ , оно же вероятность заполнения этого состояния, равно

$$F_0(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{T}\right) + 1}, \quad (12)$$

где  $\mu(T)$  - химический потенциал электронов. Зависимость  $\mu$  от температуры находится из условия нормировки. Действительно, величина  $\nu(\varepsilon)d\varepsilon$  - число состояний с энергией в интервале  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$  в единице объема кристалла, а

$$dn_e = F_0(\varepsilon)\nu(\varepsilon)d\varepsilon$$

- число электронов в данном интервале энергий. Интегрируя по всем значениям энергии, получим полное число электронов в единице объема:

$$n_e = \int_0^{\infty} F_0(\varepsilon) \nu(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (13)$$

Выражение (13) представляет собой условие нормировки, определяющее неявную зависимость  $\mu(T)$ . При  $T \rightarrow 0$

$$F_0(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & \text{если } \varepsilon < \mu, \\ 0, & \text{если } \varepsilon > \mu. \end{cases} \quad (14)$$

Следовательно,  $\mu(T=0) = \varepsilon_F$ . Характерная зависимость  $F_0(\varepsilon)$  приведена на рис.1. Легко видеть, что при  $T \ll \varepsilon_F$  происходит слабое размытие ферми-ступеньки на ширину порядка  $T$ , то есть электроны из состояний, лежащих ниже  $\varepsilon_F$ , возбуждаются в состояния с энергией, превосходящей  $\varepsilon_F$ .

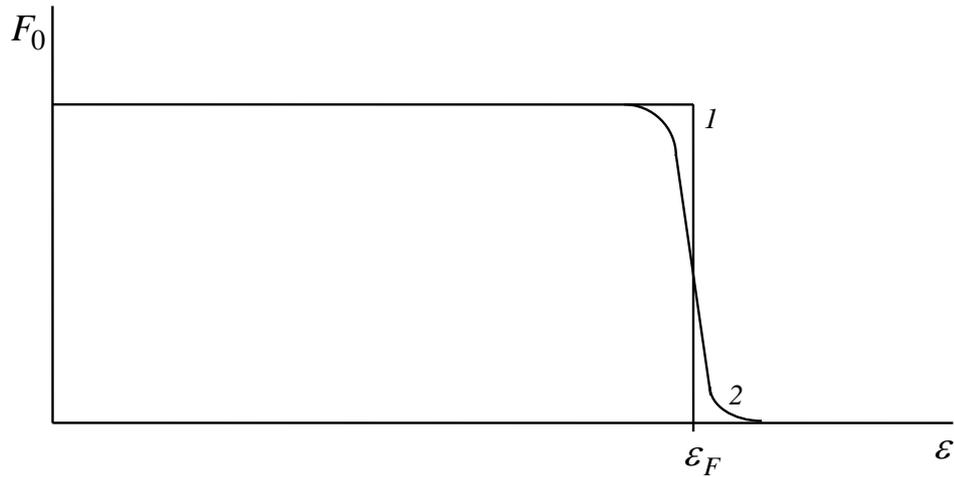


Рис.1. Распределение Ферми-Дирака. Кривые 1 и 2 соответствуют случаям  $T=0$  и  $T \neq 0$ .

Доля электронов, повышающих свою энергию, составляет по порядку величины  $T/\varepsilon_F$ . Каждый из них увеличивает свою энергию на величину порядка  $T$ . Потому увеличение энергии единицы объема  $\Delta E$  порядка

$$\Delta E \approx T \frac{T}{\varepsilon_F} n_e \approx \frac{n_e T^2}{\varepsilon_F}. \quad (15)$$

Исходя из этой формулы, оценим величину теплоемкости единицы объема электронного газа

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \approx \frac{T n_e}{\varepsilon_F}, \quad (16)$$

и удельную теплоемкость

$$c_V = C_V / \rho \approx \frac{T n_e}{\rho \varepsilon_F}, \quad (17)$$

где  $\rho$  - плотность вещества кристалла.

Удельная теплоемкость классического одноатомного газа с той же концентрацией частиц равна

$$\tilde{c}_V = 3n_e / 2\rho.$$

Таким образом, рассчитанная в рамках квантовой теории теплоемкость электронного газа по порядку величины оказывается в  $T/\varepsilon_F$  раз меньше предсказанной классической физикой.

Если предположить, что на каждый атом металла приходится один свободный электрон, то теплоемкость металла в расчете на один атом в области температур  $T \gg \theta_D$  ( $\theta_D$  - температура Дебая), согласно предсказаниям классической теории, должна была бы в полтора раза превосходить соответствующее значение для диэлектрика.

Однако ничего подобного в эксперименте не наблюдается. Именно это послужило одним из аргументов в пользу необходимости описания электронного газа на языке квантовой физики.

Формула (16) дает только оценку по порядку величины для электронного вклада в теплоемкость кристалла. Для получения численного коэффициента потребуются существенно более громоздкие математические выкладки. В результате получаем следующее выражение для электронной теплоемкости единицы объема:

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} \nu(\varepsilon_F) T. \quad (18)$$

### 3. Парамагнитная восприимчивость электронного газа

Рассмотрим магнитную восприимчивость электронного газа, обусловленную спиновыми магнитными моментами электронов. Наличие у электрона собственного механического момента (спина) сопряжено с наличием у него собственного магнитного момента. В силу того, что электрон заряжен отрицательно, магнитный момент направлен антипараллельно спину. Проекция  $M_z$  магнитного момента электрона на выделенную ось  $z$  может принимать значения  $\pm \mu_B$ , где  $\mu_B = |e|\hbar / 2m_e = 9,27 \cdot 10^{-24}$  Дж/Тл - магнетон Бора.

Поместим электронный газ в однородное магнитное поле, параллельное оси  $z$  выбранной системы координат. Взаимодействие магнитного момента с полем приведет к возникновению добавки к потенциальной энергии, равной  $-M_z B$ , где  $B$  - индукция магнитного поля. Вид возникших законов дисперсии электронов приведен на рис.2. Энергия электронов с магнитным моментом, параллельным полю, уменьшится (правая часть рисунка 2), а с моментом, антипараллельным полю – увеличится (левая часть рисунка 2), что, в свою очередь, приведет к снятию вырождения по спину электронных состояний.

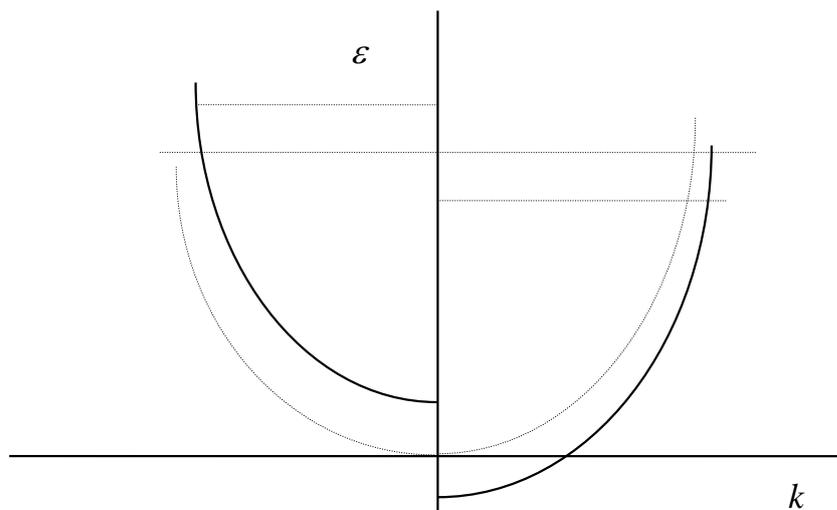


Рис.2. Раздвижка электронных спиновых подзон в магнитном поле.

Для всех реально достижимых в земных условиях величин постоянных магнитных полей  $\mu_B B \ll \varepsilon_F$ . Это позволяет легко подсчитать число ранее незаполненных электронных состояний с  $M_z = +\mu_B$ , энергия которых после приложения поля оказалась ниже  $\varepsilon_F$ .

$$dn_e = \frac{v(\varepsilon_F)}{2} \mu_B B, \quad (19)$$

где множитель  $1/2$  возник из-за того, что мы рассматриваем плотность электронных состояний для одной проекции спина.

Точно такое же число заполненных электронных состояний с  $M_z = -\mu_B$  после включения поля имеет энергию, превосходящую  $\varepsilon_F$ . Поэтому энергетически выгодно, чтобы электроны, находящиеся в этих состояниях, изменили свой магнитный момент на противоположный и перешли в незаполненные состояния, лежащие ниже  $\varepsilon_F$ . После этого все состояния с  $\varepsilon < \varepsilon_F$  окажутся заполненными, а состояния с  $\varepsilon > \varepsilon_F$  - пустыми.

В отсутствие магнитного поля магнитный момент системы был равен нулю. После включения поля и после того, как  $dn_e$  электронов в единице объема изменят свой магнитный момент с  $-\mu_B$  на  $+\mu_B$ , то есть на величину  $2\mu_B$ , возникнет намагниченность  $I$ , равная

$$I = 2\mu_B dn_e = \mu_B^2 v(\varepsilon_F) B = \mu_B^2 \mu_0 v(\varepsilon_F) H, \quad (20)$$

где  $H$  - величина напряженности приложенного магнитного поля. Но, как известно,  $I = \chi H$ , где  $\chi$  - магнитная восприимчивость системы. Следовательно, паулиевская парамагнитная восприимчивость электронного газа (названная по имени физика В. Паули) равна

$$\chi_P = \mu_B^2 \mu_0 v(\varepsilon_F). \quad (21)$$

Мы рассчитали ее величину при температуре  $T$ , равной нулю. Но при  $T \ll \varepsilon_F$  она практически не зависит от  $T$ . Восприимчивость классического газа

частиц той же концентрации  $n_e$ , обладающих таким же магнитным моментом  $\mu_B$ , описывается законом Кюри и равна

$$\chi_C = \frac{\mu_B^2 \mu_0 n_e}{3T}. \quad (22)$$

Легко видеть, что данное выражение расходится при  $T \rightarrow 0$ .

Отношение  $\chi_P / \chi_C$  с учетом (11) равно

$$\frac{\chi_P}{\chi_C} = \frac{9}{2} \frac{T}{\varepsilon_F} \ll 1.$$

Классическая физика предсказывала существенно большую магнитную восприимчивость металлов и ее рост при понижении температуры, что противоречило экспериментальным результатам. Именно это, наряду с экспериментами по теплоемкости металлов, послужило толчком к созданию квантовой теории металлов.

#### 4. Понятие эффективной массы в ферми-жидкости

В результате дифракции электронов, описываемых волнами де-Бройля, на кристаллической ионной решетке возникают разрывы их закона дисперсии на границах зоны Бриллюэна, то есть запрещенные зоны, которые разделяют электронные зоны. В каждой электронной зоне содержится  $2N$  состояний, ( $N$  - число элементарных ячеек в кристалле), так как в зоне Бриллюэна  $N$  различных разрешенных значений волнового вектора  $\vec{k}$ , а фактор 2 возникает за счет вырождения состояния с заданным  $\vec{k}$  по проекции спина электрона.

В металле уровень Ферми (значение  $\mu(T=0)$ ) расположен внутри электронной зоны и, вообще говоря, проходит вдали от потолка или дна зоны. Основной вклад в отклик электронной системы на внешнее воздействие или изменение температуры связан с электронными состояниями, лежащими вблизи уровня Ферми. Поэтому вводить тензор

обратных эффективных масс через вторые производные от закона дисперсии, взятые в точке минимума (максимума) закона дисперсии, как это делается в полупроводнике, не имеет смысла.

Для случая изотропной ферми-жидкости в теории Ландау эффективная масса вводится как коэффициент пропорциональности между импульсом Ферми и фермиевской скоростью:

$$p_F = m^* v_F. \quad (23)$$

Напомним, что  $v_F$  представляет собой модуль групповой скорости электрона на поверхности Ферми, то есть определяется градиентом закона дисперсии, а не его вторыми производными.

В изотропном случае плотность электронных состояний на поверхности Ферми выражается через эффективную массу как

$$\nu(\varepsilon_F) = \frac{m^* p_F}{\pi^2 \hbar^3}. \quad (24)$$

В большинстве реальных металлов поверхность Ферми существенно анизотропна (рис. 3).

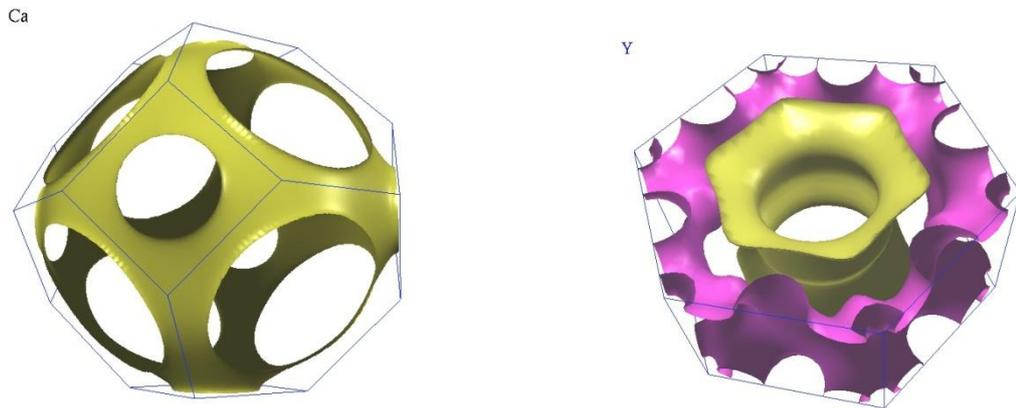


Рис.3. Поверхности Ферми кальция и иттрия.

Для такой поверхности Ферми введение эффективной массы с помощью уравнения (23) не имеет смысла, она будет изменяться от одной

точки поверхности к другой. В этом случае удобнее пользоваться плотностью состояний  $\nu(\varepsilon_F)$ , определяемой как

$$\nu(\varepsilon_F) = \int_{FS} \frac{d^2 \vec{k}'}{4\pi^3 |\nabla_{\vec{k}'} \varepsilon(\vec{k}')|}, \quad (25)$$

интегрирование ведется по поверхности Ферми.

Действительно, в случае произвольного закона дисперсии  $\varepsilon(\vec{k})$  плотность электронных состояний определяется как

$$\nu(\varepsilon) = 2 \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \delta[\varepsilon - \varepsilon(\vec{k})], \quad (26)$$

где  $\delta(x)$  - дельта-функция Дирака. Представим элемент объема  $d^3 \vec{k}$  в виде  $d^2 \vec{k} dk_{\perp}$ , где  $d^2 \vec{k}$  - элемент площади изоэнергетической поверхности в пространстве волновых векторов, а  $dk_{\perp}$  - приращение волнового вектора в направлении, перпендикулярном этой поверхности. Перпендикулярно изоэнергетической поверхности направлен и вектор групповой скорости электрона  $\hbar^{-1} \nabla_{\vec{k}'} \varepsilon(\vec{k}')$ . После замены переменной  $d\varepsilon = dk_{\perp} |\nabla_{\vec{k}'} \varepsilon(\vec{k}')|$  приходим к выражению (25).

## 5. Циклотронная масса. Циклотронный резонанс

При описании конкретных физических явлений в металле вводится соответствующая данному явлению эффективная масса. Познакомимся с одной такой массой – циклотронной.

Для начала рассмотрим поведение электрона в постоянном магнитном поле в квазиклассическом приближении. Свободный электрон, как известно, совершает движение по спирали. Однако в кристалле, с учетом взаимодействия электрона с периодическим ионным потенциалом, его движение происходит по существенно более сложной траектории.

Уравнение движения электрона с волновым вектором  $\vec{k}$  имеет вид

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = q [\vec{v}, \vec{B}], \quad (27)$$

где  $q$  и  $\vec{v}$  - заряд и групповая скорость электрона, а  $\vec{B}$  - индукция действующего на электрон магнитного поля.

Поскольку сила Лоренца перпендикулярна магнитной индукции, составляющая  $k_{\parallel}$  вектора  $\vec{k}$ , параллельная  $\vec{B}$ , в процессе движения не изменятся. Кроме того, сила Лоренца не совершает работы, и энергия электрона остается постоянной. Поэтому изображающая точка, задающая состояние электрона в  $\vec{k}$ -пространстве, под действием силы Лоренца перемещается по изоэнергетической поверхности. Причем ее траектория, в силу условия  $k_{\parallel} = const$ , будет представлять собой линию пересечения этой поверхности и плоскости, проходящей через начальное положение изображающей точки и перпендикулярной направлению магнитной индукции.

Обозначим через  $v_{\perp}$  составляющую скорости электрона, перпендикулярную  $\vec{B}$ . Тогда

$$\left| q [\vec{v}, \vec{B}] \right| = ev_{\perp} B. \quad (28)$$

С учетом (28) получим из (27):

$$\frac{dk}{dt} = \frac{ev_{\perp} B}{\hbar}, \quad (29)$$

где модуль изменения волнового вектора  $dk = \left| d\vec{k} \right|$  представляет собой элементарный участок траектории изображающей точки.

Ограничимся случаем, когда эта траектория представляет собой замкнутую кривую (рис.4). Найдем период  $T$  обращения изображающей точки по этому контуру. В реальном пространстве за это время электрон проходит один виток модифицированной спирали. Величина  $T$  равна

$$T = \oint \frac{\hbar dk}{ev_{\perp}(\vec{k})B}, \quad (30)$$

где интегрирование происходит по траектории изображающей точки. Для свободного электрона период обращения равен

$$T_0 = \frac{2\pi m_e}{eB}, \quad (31)$$

где  $m_e$  - масса свободного электрона.

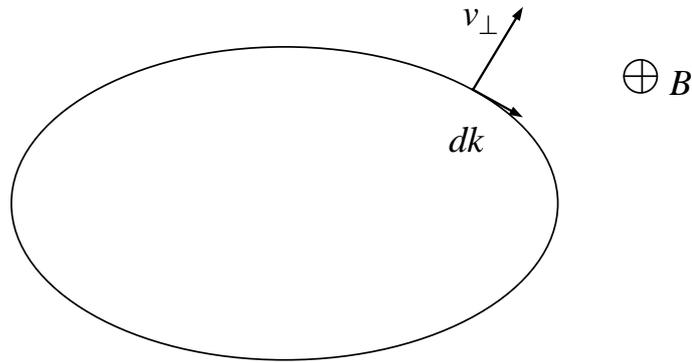


Рис.4. Траектория изображающей точки в пространстве волновых векторов.

По аналогии с (31) можно ввести понятие «циклотронной массы»  $m^*$

$$m^* = \frac{\hbar}{2\pi} \oint \frac{dk}{v_{\perp}(\vec{k})}. \quad (32)$$

Величины  $m^*$ , и  $T$  зависят, вообще говоря, от сечения изоэнергетической поверхности. Одинаковы они для всех параллельных сечений только в случае эллипсоидальной изоэнергетической поверхности.

При нормальном падении электромагнитной волны на поверхность металла ее амплитуда экспоненциально спадает по мере удаления в глубину металла на характерном расстоянии  $\delta$ , называемом глубиной проникновения, или глубиной скин-слоя.

Пусть к металлу приложено постоянное магнитное поле, направленное параллельно его поверхности, а величина магнитного поля достаточно

велика, чтобы радиус  $r$  спирали, по которой движется электрон в магнитном поле (ларморовский радиус), был бы намного меньше длины свободного пробега электрона  $l$ . Кроме того, пусть  $r \gg \delta$ . Тогда электрон попадает в область существования высокочастотного поля (в скин-слое) с периодом, равным периоду его вращения (рис.5).

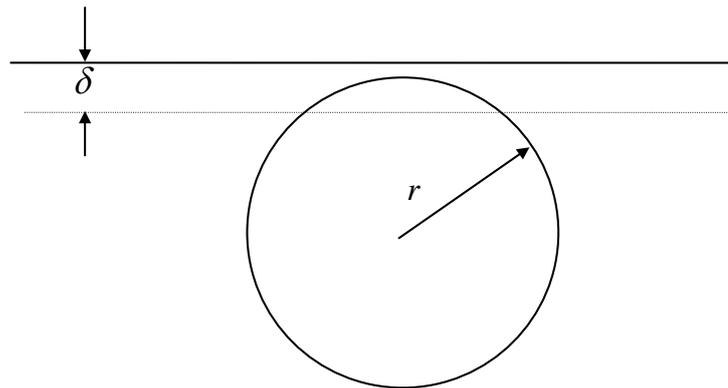


Рис.5. Квазиклассическая траектория электрона.

За это время поле электромагнитной волны изменяется. Если частота вращения электрона в магнитном поле совпадает с частотой электромагнитной волны, то каждый раз на электрон, попадающий в скин-слой, действует одно и то же электрическое поле. Для электронов, у которых направление скорости совпадает с направлением действующей на них со стороны переменного поля силы, это приведет к ускорению электрона и увеличению его энергии, то есть электрон будет эффективно поглощать энергию электромагнитной волны. Это явление носит название циклотронного резонанса (резонанса Азбеля-Канера). Обычно в эксперименте изменяют величину магнитного поля при заданной частоте электромагнитной волны. В момент достижения резонанса наблюдается пик поглощения, которое измеряют путем сравнения интенсивности падающей и отраженной электромагнитных волн.

Таким образом, экспериментально можно определить период вращения электрона в магнитном поле (30), а, следовательно, и циклотронную массу  $m^*$  (32) на поверхности Ферми. Но циклотронная масса различна для разных сечений поверхности Ферми. Поэтому максимум поглощения будет уширен. В эксперименте наблюдается значение  $m^*$ , отвечающее экстремальному сечению поверхности Ферми, поскольку вклад близких к нему сечений в поглощение является определяющим (имеется ввиду сечение поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной направлению магнитного поля). При наличии нескольких экстремальных сечений наблюдается несколько максимумов коэффициента поглощения.

## 6. Кулоновское взаимодействие между электронами

Расчет зонной структуры в приближении почти свободных электронов или в приближении сильной связи обычно излагают, не учитывая кулоновское взаимодействие между электронами. Такое приближение справедливо, если потенциальная энергия взаимодействия между электронами на характерных расстояниях намного меньше их кинетической энергии. В этом случае можно уточнить модель, учитывая влияние кулоновского взаимодействия в рамках теории возмущений.

Поскольку теплоемкость и магнитная восприимчивость электронной подсистемы, а также величина кинетических коэффициентов металла определяется электронными состояниями, лежащими вблизи поверхности Ферми, то характерная кинетическая энергия электронов имеет порядок  $\varepsilon_F$ . В модели желе энергия Ферми дается формулой (10).

Среднее расстояние между электронами  $\langle r \rangle$  можно оценить как  $n_e^{-1/3}$ . Действительно, на каждый электрон в кристалле приходится объем  $n_e^{-1}$ . Если представить, что электрон - это классическая частица, расположенная в центре куба с таким объемом, то получим искомое выражение.

Потенциальная энергия взаимодействия двух электронов на таком расстоянии равна

$$\langle V_{\text{кул}} \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle} = \frac{e^2 n_e^{1/3}}{4\pi\epsilon_0}. \quad (33)$$

Отношение

$$\alpha = \frac{\langle V_{\text{кул}} \rangle}{\epsilon_F} = \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 (3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 n_e^{1/3}} \propto n_e^{-1/3} \quad (34)$$

тем меньше, чем больше концентрация электронов.

Теория возмущений справедлива при  $\alpha \ll 1$ , то есть при больших плотностях электронов. Поэтому случай  $\alpha \ll 1$  называют приближением большой плотности. К сожалению, для реальных металлов  $2 < \alpha < 10$ . Поэтому пренебрегать кулоновским взаимодействием мы не имеем права. Но найти пси-функцию огромного числа взаимодействующих электронов путем точного решения уравнения Шредингера не представляется возможным, а приближенные методы, дающие хороший результат в области  $\alpha \ll 1$ , не применимы при  $\alpha \geq 1$ .

Следовательно, проблема корректного учета кулоновского взаимодействия при расчете зонной структуры остается открытой. Чтобы учесть корреляцию и обменное взаимодействие между электронами, порождаемые их кулоновским взаимодействием друг с другом, используют феноменологические выражения, достоверные в области  $\alpha \ll 1$  и приводящие к хорошему согласию между результатами расчета и экспериментальными данными для реальных значений  $\alpha$ .

## 7. Поверхность Ферми

Чтобы путем расчета определить основное состояние системы, сначала находят зависимость энергии одноэлектронного состояния от волнового вектора (или импульса) в системе взаимодействующих частиц. Потом заполняют эти состояния, начиная с наинизшего по энергии. В результате

получают границу между заполненными и незаполненными состояниями - поверхность Ферми.

Вид поверхности Ферми для конкретного металла или металлического соединения находится с учетом взаимодействия электронов друг с другом. В противном случае результаты расчета кардинальным образом отличались бы от действительности.

Введем классификацию возникающих поверхностей Ферми, справедливую для любых изоэнергетических поверхностей. Для этого периодически продолжим поверхность Ферми, возникающую в какой-либо электронной зоне, из первой зоны Бриллюэна на все обратное пространство.

Поверхность Ферми называется закрытой, если из заданной точки поверхности мы можем сместиться, двигаясь по ней, только на конечное расстояние в  $\vec{k}$ -пространстве. Пример такой поверхности, состоящей из периодически расположенных эллипсоидов, приведен на рис.6а.

Поверхность Ферми называется открытой, если по ней можно сместиться из заданной точки на сколь угодно большое расстояние хотя бы в одном направлении. Открытая поверхность Ферми типа «гофрированный цилиндр» изображена на рис.6б.

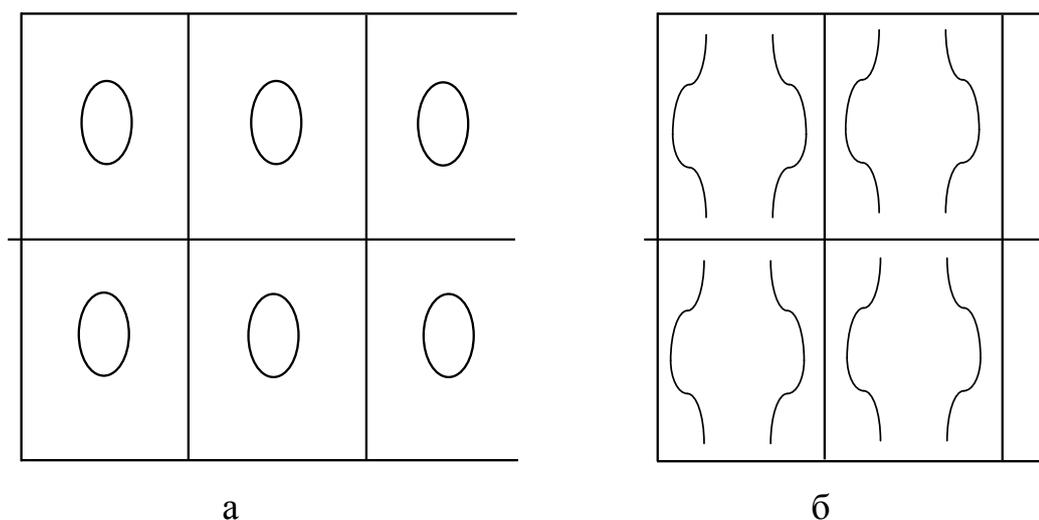


Рис.6. Пример закрытой (а) и открытой (б) поверхности Ферми.

Кроме этого введем понятия об электронной и дырочной поверхностях Ферми. Если при  $T=0$  заполненные электронные состояния находятся внутри поверхности, а незаполненные - снаружи, то такую поверхность называют электронной. В этом случае направление групповой скорости электрона  $\vec{v} = \hbar^{-1} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})$ , где  $\varepsilon(\vec{k})$  - закон дисперсии электронов, совпадает с направлением внешней нормали к поверхности Ферми.

Если же заполненные состояния расположены снаружи от поверхности, а незаполненные - внутри, то такую поверхность называют дырочной. В этом случае групповая скорость электронов антипараллельна направлению внешней нормали к поверхности. Термин «дырочная» возник потому, что отсутствие электронов внутри поверхности можно представить как наличие положительно заряженных частиц - дырок с зарядом  $+e$  внутри этой поверхности на фоне полностью заполненной электронной зоны. Подчеркнем, что в данном случае термины «электронная» и «дырочная» используются для характеристики основного состояния электронной системы и не имеют никакого отношения к квазичастицам.

## 8. Квазичастицы в Ферми-жидкости

В предыдущем параграфе мы описали процедуру получения основного состояния в системе взаимодействующих частиц. Слабо возбужденные состояния системы удобно описывать на языке квазичастиц, то есть представить отличие этого состояния от основного путем введения слабонеидеального газа элементарных возбуждений.

Введем такие возбуждения - квазичастицы для электронной подсистемы, предполагая, что они в системе взаимодействующих частиц такие же, как и в идеальном Ферми-газе с той же поверхностью Ферми. Вообще говоря, это не так. Но для корректного описания возбуждений в реальном металле необходимо решить проблему учета сильного кулоновского взаимодействия между электронами. В случае

высокотемпературных сверхпроводников, у которых параметр  $\alpha \gg 1$ , данная модель оказалась неприменимой.

Возбуждения в идеальной Ферми-системе бывают двух видов. Электронным возбуждением или просто электроном называют электрон, находящийся в состоянии с энергией  $\varepsilon(\vec{k}) > \varepsilon_F$ . Энергия такого возбуждения  $\xi_e$  равна

$$\xi_e = \varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon_F. \quad (35)$$

Действительно, переводя этот электрон из данного состояния в незанятое состояние с наименьшей энергией, то есть с энергией равной  $\varepsilon_F$ , мы получаем основное состояние и понижаем энергию системы на величину  $\xi_e$ . Заряд, спин и импульс такого возбуждения совпадают с таковыми у электрона.

Отметим, что для человека, начинающего изучать физику твердого тела, употребление термина «электрон» для обозначения как реальной частицы, присутствующей в кристалле, так и возбуждения, создает дополнительные трудности. Но такова установившаяся терминология.

Дырочным возбуждением или просто дыркой называется отсутствие электрона в состоянии с энергией  $\varepsilon(\vec{k}) < \varepsilon_F$ . Энергия дырочного возбуждения  $\xi_h$  равна

$$\xi_h = \varepsilon_F - \varepsilon(\vec{k}). \quad (36)$$

В самом деле, переводя электрон из заполненного состояния с наибольшей энергией, равной  $\varepsilon_F$ , в незаполненное состояние с энергией  $\varepsilon(\vec{k})$ , мы получаем основное состояние, понижая при этом энергию системы на  $\xi_h$ . Заряд, векторы спина и импульса дырки противоположны заряду, векторам спина и импульса отсутствующего электрона. Действительно, отсутствие электрона в данном состоянии мы представляем как присутствие двух частиц: электрона и дырки. Их суммарный заряд, спин и импульс должны

равняться нулю, так как «пустое место» не дает вклад в суммарный заряд, спин и импульс системы электронов. В результате получаем полностью заполненные электронами уровни энергии, лежащие ниже уровня Ферми (как это было в основном состоянии) и на их фоне положительно заряженную квазичастицу-дырку.

В основном состоянии системы квазичастицы отсутствуют. При возбуждении системы, например, светом или теплом возбуждения рождаются парами (рис. 7): возникают одновременно и электрон, и дырка (в соответствии с законом сохранения заряда). Говорят, что рождается электрон-дырочная пара (пары).

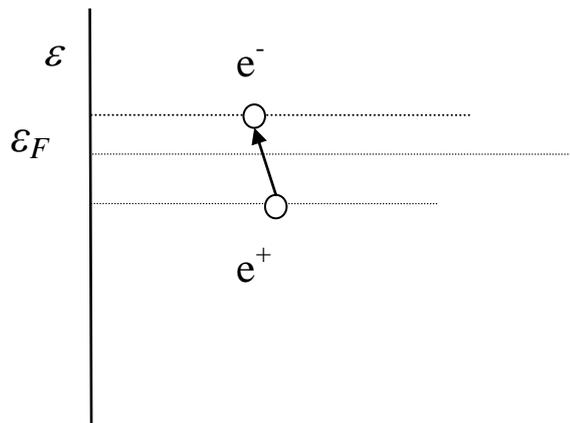


Рис. 7. Рождение электрон-дырочной пары в результате возбуждения реального электрона с уровня, лежащего ниже энергии Ферми в состояние с энергией  $\varepsilon > \varepsilon_F$ .

Можно обобщить выражение (35) и (36), введя единую форму для энергии возбуждений:

$$\xi = \left| \varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon_F \right|. \quad (37)$$

Квазичастицы являются слабозаимодействующими, если длина их свободного пробега намного больше их волны де Бройля. Это условие

выполнено, если  $\xi \ll \varepsilon_F$ , то есть система слабо возбуждена. Условие  $\xi \ll \varepsilon_F$  эквивалентно условию  $|p - p_F| \ll p_F$ .

В случае изотропной поверхности Ферми энергия возбуждений принимает вид

$$\xi = \hbar v_F |k - k_F| = v_F |p - p_F|, \quad (38)$$

где  $v_F$  и  $p_F$  - скорость и импульс электрона на поверхности Ферми,  $p$  - импульс квазичастицы.

Вид закона дисперсии возбуждений электронной системы изображен на рис.8. Для электронной поверхности Ферми часть закона дисперсии, расположенную при  $p < p_F$ , называют дырочной ветвью спектра, а часть, расположенную при  $p > p_F$ , - электронной. Легко видеть, что групповая скорость дырки противоположна таковой для электрона с тем же значением импульса. В случае дырочной поверхности Ферми электронная и дырочная ветви спектра меняются местами.

Подчеркнем еще раз, что два сорта квазичастиц (квазичастицы-электроны и квазичастицы-дырки) существуют как в случае электронной, так и в случае дырочной поверхности Ферми. Двойное использование терминов создает трудности в изучении курса, но кто сказал, что постигать науки легко?

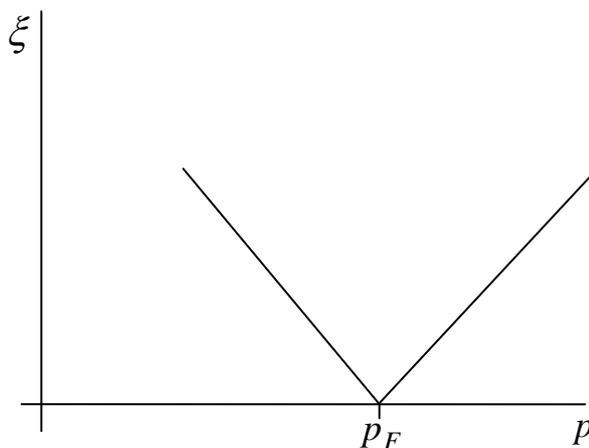


Рис.8. Закон дисперсии квазичастиц в Ферми-жидкости.