

Табл. 3. Плотность электронов проводимости n и энергия Ферми \mathcal{E}_F ряда металлов

Металл	Li	Na	Cu	Ag	Be	Ca	Zn	Al	Pb
$n, 10^{22} \text{ см}^{-3}$	4,7	2,65	8,45	5,85	24,2	4,6	13,1	18,6	13,2
$\mathcal{E}_F, 10^4 \text{ К}$	5,5	3,75	8,1	6,4	16,4	5,4	10,9	13,5	10,9

Природа металлического состояния. Мн. характерные свойства М. можно понять, считая, что электроны проводимости — идеальный вырожденный газ фермионов, а роль ионов сводится к созданию потенциальной ямы, в к-рой движутся электроны (модель Друде — Лоренца — Зоммерфельда; см. Друде теория металлов, Зоммерфельда теория металлов). Темп-ра вырождения T_F электронного газа в этой модели определяется энергией Ферми \mathcal{E}_F :

$$T_F = \mathcal{E}_F/k, \quad \mathcal{E}_F = \frac{(3\pi^2 n)^{2/3} \hbar^2}{2m}$$

(m — масса электрона). Темп-ра $T_F \approx 10^4 - 10^5 \text{ К}$. Поэтому практически при любой темп-ре T , при к-рой вещество существует в конденсированном состоянии, электронный газ в М. вырожден ($T < T_F$) (см. Вырождения темп-ра, Вырожденный газ).

Более полное и строгое объяснение свойств М. даёт зонная теория твёрдого тела. Зонная теория исходит из рассмотрения движения отд. электрона в периодич. поле сил $U(r)$, создаваемых ионами кристаллич. решётки и остальными электронами (одноэлектронное приближение):

$$U(r+a) = U(r),$$

где r — пространств. координата точки, a — период решётки (см. Блоховские электроны). Хотя энергия взаимодействия электронов друг с другом не меньше, чем энергия взаимодействия с ионами, одноэлектронное приближение имеет обоснование. Во-первых, $U(r)$ включает совокупное действие всех остальных электронов, кроме рассматриваемого, причём для качеств. выводов потенциал $U(r)$ можно не конкретизировать, используя только его свойства симметрии (прежде всего периодичность). Во-вторых, построив одноэлектронное приближение, можно обобщить его, учтя взаимодействие между электронами проводимости (на основании теории ферми-жидкости).

Периодичность $U(r)$ позволяет характеризовать стационарное состояние электрона проводимости квазиимпульсом $p = \hbar k$ (k — квазиволновой вектор), аналогичным импульсу частицы в свободном пространстве. Волновая ф-ция электрона в стационарном состоянии — решение Шрёдингера уравнения для электрона, отвечающая собств. значению энергии электрона \mathcal{E}_s . И волновая ф-ция и собств. значение энергии (в отличие от случая свободного электрона) — периодич. ф-ции квазиимпульса. Периодичность в импульсном пространстве — следствие полной физ. эквивалентности состояний с квазиволновыми векторами, отличающимися на $2\pi\hbar b$. Это означает, что для полного описания всех состояний достаточно использовать p из одной ячейки обратного пространства. Как правило, её выбирают в виде первой Бриллюэна зоны. Индекс s , нумерующий решения ур-ния Шрёдингера, наз. номером зоны, $\mathcal{E}_s(p)$ — законом дисперсии электронов или электронным спектром кристалла, соответствующим полю $U(r)$. В каждой разрешённой энергетич. зоне состояния электронов заполняют полосу между $\mathcal{E}_{\text{мин}}$ и $\mathcal{E}_{\text{макс}}$. Зоны могут перекрываться, но их индивидуальность при этом сохраняется. Перекрытие зон, как правило, не сопровождается вырождением. Вырождение наступает при совпадении энергий (из разных зон) и квазиимпульсов. Вырождение накладывает ограничение на структуру изоэнергетич. поверхности вблизи точки вырождения. С помощью законов дисперсии можно рассчитать плотность электронных состояний в зоне $\mathcal{E}_s(\mathcal{E})$.

Сходство и различие между свободными электронами и электронами проводимости иллюстрируется табл. 4.

Табл. 4.

Свободный электрон	Электрон проводимости
Стационарная волновая функция	$\Psi_s = u_s(r) \exp(ipr/\hbar)$ $U_s(r+a) = U_s(r)$
Энергия	$\mathcal{E}_s(p) = \mathcal{E}_s(p + 2\pi\hbar b)$, где b — вектор обратной решётки
Изоэнергетическая поверхность	периодич. поверхность $\mathcal{E}_s(p) = \text{const}$
Сфера $p^2 = 2m\mathcal{E}$	
Скорость	$v(p) = \frac{\partial \mathcal{E}(p)}{\partial p}$
Масса	тензор обратных эффективных масс $\left(\frac{1}{m}\right)_{ik} = \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial p_i \partial p_k}$ эффективная масса в магн. поле $H(H_x = H_y = 0, H_z = H)$ $m = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S(\mathcal{E}, p_x)}{\partial \mathcal{E}}$ (S — площадь сечения изоэнергетич. поверхности $\mathcal{E}(p) = \text{const}$ плоскостью $p_x = \text{const}$)
Закон сохранения при столкновении двух электронов	$\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 = \mathcal{E}'_1 + \mathcal{E}'_2$
$p_1 + p_2 = p'_1 + p'_2$	$p_1 + p_2 = p'_1 + p'_2 + 2\pi\hbar b$ (начальные p_1, p_2 и конечные p'_1, p'_2 — квазиимпульсы из первой зоны Бриллюэна)
Плотность состояний (V — объём кристалла)	$g(\mathcal{E}) = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \oint \frac{df}{v(p)}$ где df — элемент площади на поверхности $\mathcal{E}(p) = \mathcal{E}$, по которой ведётся интегрирование
Энергия Ферми	$\frac{\Omega_s(\mathcal{E}_F)}{4\pi^3 \hbar^3} = n_s$ (Ω_s — объём в p -пространстве листа поверхности Ферми в s -й зоне, n_s — плотность в ней электронов)

Зонный характер спектра и Паули принцип позволяют сформулировать принципиальное отличие М. от диэлектрика. Т. к. в каждую зону может «поместиться» не более $2N$ электронов (N — число ячеек в кристалле), то в зависимости от числа электронов, приходящихся на ячейку, и взаимного расположения зон могут осу-

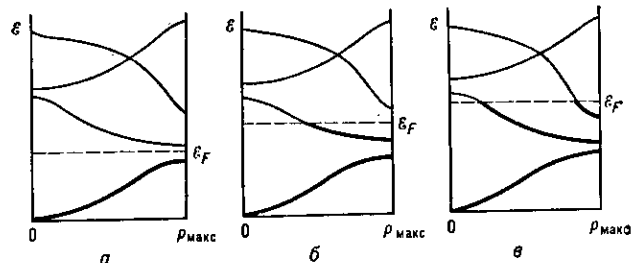


Рис. 1. Схема заполнения зон диэлектрика или полупроводника (а), металла (б), полуметалла (в). Жирные линии $\mathcal{E}(p)$ — заполненные состояния, тонкие — пустые; пунктир — уровень химического потенциала, совпадающий в металлах с энергией Ферми \mathcal{E}_F при $T = 0 \text{ К}$, $p_{\text{макс}}$ — максимальный квазиимпульс, соответствующий границе зоны Бриллюэна.