Глава 3

Лекция 3. Подсчет числа состояний

Полное описание системы требует знания волновых функций и энергий для всех ее состояний. Эта невыполнимая работа в общем случае, но в простейшем- может быть выполнена. Для многих целей, однако, вполне достаточно знать плотность состояний $N(E)$, которая определяется как число состояний в интервале от E до $E + \delta E$. Ясно, что эта величина не прибавит нам знаний о волновых функциях состояний, но даст нам понимание распределения состояний по энергии.

3.1 1D. Качественное рассмотрение на пальцах

Что делать с волновой функцией $\exp(ikx)$, которую нельзя нормализовать во всем пространстве ?
Простой способ - засунуть частицу в потенциальный ящик конечной длины L и затем, после вычислений, устремить $L \to \infty$. Поместив частицу в ящик, надо выбрать гран. условия. Часто используют два типа гран. условий:

1. Фиксированные граничные условия
$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \tag{3.1}$$

2. Периодические гран. условия
$$\psi(0) = \psi(L), \qquad \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{x=0} = \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{x=L}. \tag{3.2}$$

Фиксированные гран. условия - это мы уже проходили на примере частицы в потенциальном ящике. При этом выборе волновые функции являются стоячими волнами. Уровни энергии даются формулой $\varepsilon_0(k) = \hbar^2 k^2/2m$ и разрешенные значения k равны
$$k_m = \frac{\pi m}{L}, \qquad m = 1, 2, 3, ... \tag{3.3}$$
Они не переносят тока; допускаемые значения k - положительны.

Периодические гран. условия требуют другого выбора k. При этом выборе, вместо синусоидальных волн, можно использовать бегущие экспоненциальные волны и они должны удовлетворять условию $\exp(ikL) = \exp(ik0) = 1 = \exp(2\pi n i)$ (вспомним формулу Эйлера $\exp(i\phi) = \cos\phi + i\sin\phi$). Из условия на L получаем
$$k_n = \frac{2\pi n}{L}, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{3.4}$$
Эти значения в два раза больше, чем те что получаются из фиксированных гран. условий. В оправдание скажем, оба знака допустимы теперь для k и, т.о., энергетические уровни двукратно вырождены (за исключением $k = 0$) с противоположными направлениями k.

Q: а что, плотность состояний, которую мы хотим вычислить, зависит от выбора гран. условий ?
Конечно, результат нечувствителен к граничным условиям при $L \to \infty$. Обычно, используют периодические, а не фиксированные гран. условия.

Для того, чтобы теперь перейти от найденных разрешенных значений k и ε к плотности состояний определим точно плотность состояний в k-пространстве, так что $N_{1D}(k)\delta k$ есть число разрешенных состояний в интервале от k до $k + \delta k$.

$$N_{1D}(k)\delta k \equiv \left(\frac{dN}{dk}\right)\delta k = 2\frac{L}{2\pi}\delta k = \frac{L}{\pi}\delta k, \tag{3.5}$$

где коэффициент 2 введен для учета спина (двух проекций), $L/2\pi$ - плотность разрешенных состояний. Получаем $N_{1D}(k) = L/\pi$, т.е. плотность состояний пропорционально объему системы (длине), что имеет правильный физ. смысл. Часто поэтому рассматривают плотность состояний на единицу объемы (длины - в 1D) $N_{1D}(k) = N_{1D}(k)/L = 1/\pi$. Теперь надо плотность состояний по импульсу преобразовать в плотность состояний по энергии.

$$n_{1D}(E)\delta E = n_{1D}(E)\frac{dE}{dk}\delta k = 2n_{1D}(k)\delta k \tag{3.6}$$

Опять, коэффициент 2 добавлен, потому что имеются два направления движения $\pm k$. Таким образом,

$$n_{1D}(E) = \left(\frac{2}{\pi}\right)\frac{1}{d\varepsilon/dk}.$$

Можно это упростить для свободного электронного газа $\varepsilon = \hbar^2 k^2/2m$:

$$n_{1D}(E) = \frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}. \tag{3.7}$$

Как видно, плотность состояний в 1D расходится как E^{-1} при $E \to 0$. Поучительно записать то же самое через групповую скорость $v = d\omega/dk = (1/\hbar)(d\varepsilon/dk)$:

$$n_{1D}(E) = \frac{2}{\pi\hbar v(E)}. \tag{3.8}$$

Эта форма записи интересна, поскольку ток пропорционален произведению скорости на плотность состояний. Для случая 1D это произведение равно константе.

3.2 3D

В 3D электроны находятся в ящике объемом $\Omega = L_x \times L_y \times L_z$. Волновые функции - бегущие волны в трех направлениях и применяя периодические гран. условия в каждом из направлений получаем

$$\phi_{lnm} = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)] = \frac{1}{\Omega} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}). \tag{3.9}$$

трехмерного волнового вектора

Мы записали это как трехмерную плоскую волну. Точно так же как и раньше, разрешенные значения k можно собрать вместе и рассматривать как компоненты

$$k = \left(\frac{2\pi l}{L_x}, \frac{2\pi m}{L_z}, \frac{2\pi m}{L_z}\right), \qquad l, m, n = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{3.10}$$

Эти значения можно изобразить в 3-мерном $\mathbf{k}$-пространстве с осями (k_x, k_y, k_z) где они образуют прямоугольную сетку равноудаленных ячеек. Каждая ячейка содержит объем
$(2\pi/L_x)(2\pi/L_y)(2\pi/L_z) = (2\pi)^3/\Omega$. Таким образом, плотость

разрешенных состояний $N_{3D}(\mathbf{k}) = 2\Omega/(2\pi)^3$, где 2 опять учитывает спин. Соответственно, плотность состояний на единицу объема трехмерного пространства $N_{3D}(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^3$, а для произвольной размерности $N_d(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^d$.

Преобразуем теперь плотность состояний в функцию от энергии. Для этого надо нарисовать концентричные сферы радиуса k и $k + \delta k$. Объем пространства между этими сферами равен $\delta V(k) = \delta(4/3)\pi k^3 = 4\pi k^2 \delta k$. Число состояний в этой оболочке равно произведению $4\pi k^2 \delta k$ и $N_{3D}(\mathbf{k})$ и в результате получаем $(k^2/\pi^2)\delta k$. Интервал по импульсу δk соответствует итервалу по энергии

$$\delta E = \frac{dE}{dK}\delta k = \frac{\hbar^2 k}{m}\delta k \tag{3.11}$$

Теперь получим число состояний в той же оболочке в терминах энергии $n(E)\delta E$. Приравнивая два выражения получаем $n_{3D}(E)\delta E = n_{3D}(\hbar^2 k/m)\delta k = (k^2/\pi^2)\delta k$, и окончательно

$$N_{3D}(E) = \frac{mk}{\pi^2\hbar^2} = \frac{m}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2mE} \tag{3.12}$$

Квадратный корень - это результат для 3D. В отличие от 1D-мерного случая, здесь исчезла (или ослабилась) сингулярность $E^{-1/2}$ при $E = 0$.

3.3 Более формальное рассмотрение плотности состояний

Пусть состояния имеют энергию ε_n

$$N(E) = \sum_n \delta(E - \varepsilon_n) \tag{3.13}$$

Это полная плотность состояний, не нормализованная на объем. Проинтегрируем:

$$\int_{E_1}^{E_2} N(E)dE = \int_{E_1}^{E_2} \sum_n \delta(E-\varepsilon_n)dE = \sum_n \int_{E_1}^{E_2} \delta(E-\varepsilon_n)dE \tag{3.14}$$

δ функция при интегрировании дает нам 1 или 0, в зависимости от того, лежит ли состояние внутри интервала интегрирования $E_1 \leq \varepsilon_n \leq E_2$ или нет. Таким образом, функция (3.13) правильно подсчитывает все состояния и ее можно рассматривать как определение плотности состояний.

Проверим это, доведя вычисления до конца, но для простоты, в случае $1d$, для которого состояния можно пронумеровать с помощью их волнового вектора k

$$N(E) = g_s \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} \delta[E-\varepsilon_0(k)] \tag{3.15}$$

Коэффициент $g_s = 2$ учитывает спиновое вырождение. Заменим суммирование интегрированием. Плотность состояний в k-пространстве - это $L/(2\pi)$, поэтому

$$N(E) = \frac{g_s L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta[E-\varepsilon_0(k)]dk \tag{3.16}$$

Произведем замену переменных от k на $z = \varepsilon_0(k) = \hbar^2 k^2/2m$.

$$dk = \frac{dk}{dz}dz = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2z}}dz, \tag{3.17}$$

и получаем

$$N(E) = \frac{2L}{\pi\hbar} \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2z}}\delta(E-z)dz \tag{3.18}$$

Здесь двойка получилась из учета $+k$ и $-k$ состояний для одного и того же значения z. Теперь интегрирование тривиально и получаем окочательно

$$N(E)_{1D} = \frac{2L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}} = \frac{g_s L}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}} \tag{3.19}$$

Нетрудно получить таким же способом плотность состояний для случая 2D.

$$N(E)_{2D} = g_s\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tag{3.20}$$

Просуммируем полученные результаты

- Полезно помнить, что

$$N(k)_d = \frac{g_s}{(2\pi)^d} \tag{3.21}$$

- Сведем в одну таблицу результаты для различных размерностей d:

d	k_F	$N(E)$
1	$\frac{n\pi}{g_s}$	$\frac{g_s}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}$
2	$\sqrt{\frac{4\pi n}{g_s}}$	$g_s\frac{m}{2\pi\hbar^2}$
3	$\left(\frac{6\pi^2 n}{g_s}\right)^{1/3}$	$g_s\frac{m}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{2mE}$

3.4 Локальная плотность состояний

Локальная плотность состояний вводится для того чтобы описывать ситуацию когда электроны не являются свободными и не заполняют все пространство. Например, заполняют только полуплоскость $x > 0$. Тогда волновые функции $\propto \sin kx$ обращаются в 0 при $x = 0$. В локальной плотности состояний вклад каждого состояния умножается на вес, соответствующий плотности его $|\psi|$ в рассматриваемой точке.

$$n(E, x) = \sum_n |\psi_n(x)(E)|^2 \delta(E - \varepsilon_n) \tag{3.22}$$