10-3 Metallien vapaaelektronikaasumallin kvanttiteoria

Elektronirakenteen oikeanlaisen kuvaamisen tulee aina perustua kvanttimekaniikkaan.
Vapaaelektronikaasun elektronien Schrödingerin aaltoyhtälö on

$$(-\hbar^2/2m\, \nabla^2 + U)\, \psi = i\hbar\, \partial\psi/\partial t,$$

missä U on vakiopotentiaali. Tämän yksielektroniaaltoyhtälön ratkaisut ovat muotoa

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t) = A\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \pm B\, e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} = C\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t + \delta)} = D \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t) \pm F\, i \sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)$$

olevia *seisovia aaltoja* tai *eteneviä aaltoja*.

$$\boxed{k = \frac{2\pi}{\lambda}}$$

Todetaan tämä: 1D-tapaus

$$\Psi(x,t) = A\, e^{i(kx - \omega t)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2\Psi) + U\Psi = i\hbar(-i\omega\Psi)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U = \hbar\omega \qquad \text{(samoin 3D)}$$

kineettinen energia, pot. energia, kokonais-energia

$$E_{kin} + U = W$$

$$\Psi = \Psi(x,t)$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi$$

$$\frac{d\Psi}{dx} = ikA\, e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\Psi$$

Siis, $E_{kin}(p) = p^2/2m = \hbar^2k^2/2m$.
$= \frac{1}{2}(\hbar k)^2$