

# 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*.

Todetaan tämä: 1D-tapaus

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

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

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

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

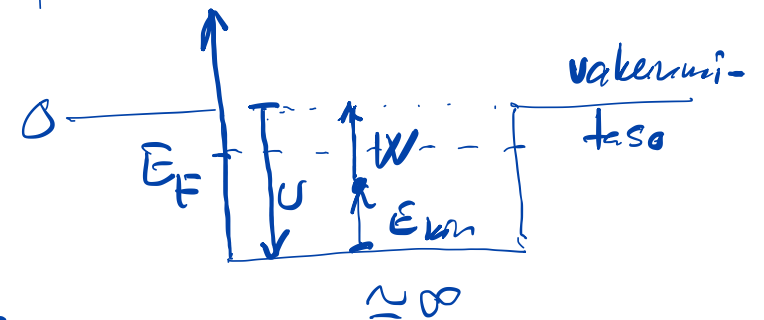
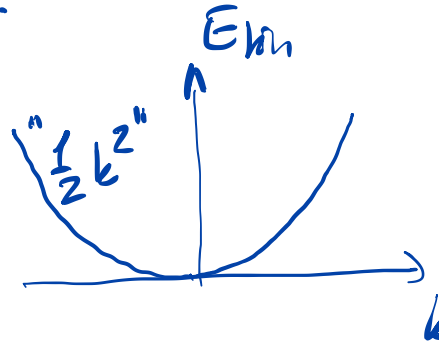
$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ik A e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi$$

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

$$\Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U = \hbar \omega \quad \left( \begin{array}{l} \text{samoin} \\ 3D \end{array} \right)$$

kinettinen energia  $E_{kin} + U = W$   
 pot. energia  $U$   
 kokonaisenergia  $W$



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

$$= \frac{1}{2}(\hbar k)^2$$