



<http://shop.rcd.ru>

- физика
  - математика
  - биология
  - техника
- 

**Журавлев В. А.**

Лекции по квантовой теории металлов. — Москва: Институт компьютерных исследований, 2002, 240 с.

Книга представляет собой курс лекций по электронной теории металлов, который читался для студентов старших курсов физических специальностей. Курс естественным образом вводит слушателей в систему современных представлений квантовой теории металлического состояния. Всюду можно видеть стремление автора в ясной форме представить все необходимые выкладки и вычисления, однако по замыслу этот курс призван дать лишь качественное описание только электронной структуры металлов и их свойств.

**ISBN 5-93972-124-9**

© В. А. Журавлев, 2002

© Институт компьютерных исследований, 2002

**<http://rcd.ru>**

# Содержание

---

<b>Предисловие</b> . . . . .	7
<b>Лекция 1</b> . . . . .	9
1.1. Предмет и метод квантовой теории металлов . . . . .	9
1.2. Квантово-механическая схематизация металлического состо- яния . . . . .	9
1.3. Проблема многих тел . . . . .	12
1.4. Адиабатическая гипотеза Борна–Оппенгеймера . . . . .	13
1.5. Адиабатическое приближение для электронно-ионной моде- ли металла . . . . .	15
1.6. Элементарные возбуждения . . . . .	19
<b>Лекция 2</b> . . . . .	20
2.1. Электронные состояния в металлах . . . . .	20
2.1.1. Общие положения . . . . .	20
2.2. Одноэлектронная модель . . . . .	21
2.2.1. Приближение Хартри . . . . .	21
2.2.2. Приближение Хартри–Фока . . . . .	24
2.2.3. Методы решения систем уравнений Хартри и Хар- три–Фока . . . . .	26
2.2.4. Аппроксимация уравнений Хартри–Фока . . . . .	26
<b>Лекция 3</b> . . . . .	28
3.1. Свободные электроны . . . . .	28
3.1.1. Формализм вторичного квантования и приближение свободных электронов в одноэлектронной модели . . .	35
3.1.2. Возбужденное состояние свободного электронного газа	39

<b>Лекция 4</b>	41
4.1. Взаимодействующий электронный газ	41
4.1.1. Возбужденное состояние взаимодействующего электронного газа. Квазичастицы	54
4.1.2. Корреляции в электронном газе	58
<b>Лекция 5</b>	60
5.1. Электронный газ в периодическом поле ионов металла	60
5.1.1. Теорема Блоха	61
5.1.2. Точечная и трансляционная симметрия идеальной кристаллической структуры	64
5.1.3. Элементарная ячейка кристаллической структуры. Ячейка Вигнера–Зейтца	64
5.1.4. Обратная решетка	65
5.1.5. Зоны Бриллюэна	67
5.1.6. Число электронных состояний в зоне Бриллюэна	68
<b>Лекция 6</b>	71
6.1. Энергетический спектр электрона в поле с периодическим потенциалом	71
6.1.1. Оператор Блоха в представлении операторов вторичного квантования	78
<b>Лекция 7</b>	83
7.1. Приближение Кронига–Пенни	83
<b>Лекция 8</b>	93
8.1. Методы расчета энергетической зонной структуры	93
8.1.1. Метод Вигнера–Зейтца (метод ячеек)	94
8.2. Силы сцепления в металлах	98
<b>Лекция 9</b>	104
9.1. Электронные полосы в приближении свободных электронов	104
9.2. Метод ортогонализированных плоских волн	108
<b>Лекция 10</b>	118
10.1. Метод псевдопотенциала	118
10.1.1. Формализация метода псевдопотенциала	122

10.1.2. Модельные псевдопотенциалы . . . . .	126
10.2. Другие методы расчета энергетических электронных полос в металлах . . . . .	128
<b>Лекция 11</b> . . . . .	130
11.1. Энергия Ферми. Поверхность Ферми . . . . .	130
11.1.1. Топология ферми-поверхности . . . . .	131
11.1.2. Построение поверхности Ферми в приближении свободных электронов . . . . .	139
<b>Лекция 12</b> . . . . .	142
12.1. Характеристики энергетической структуры электронных полос	142
12.1.1. Топология седловых точек . . . . .	149
<b>Лекция 13</b> . . . . .	152
13.1. Многоэлектронная модель . . . . .	152
13.1.1. Предпосылки многочастичного метода . . . . .	152
13.1.2. Различные формы многоэлектронной модели . . . . .	154
13.1.3. Экранирование дальнего действия кулоновского потенциала во взаимодействующем электронном газе . . . . .	156
<b>Лекция 14</b> . . . . .	163
14.1. Плазменные колебания и приближение хаотических фаз . . . . .	163
14.1.1. Объемные и поверхностные плазмоны . . . . .	170
<b>Лекция 15</b> . . . . .	175
15.1. Диэлектрическая функция в рамках приближения хаотических фаз ( <i>RPA</i> ) . . . . .	175
<b>Лекция 16</b> . . . . .	189
16.1. Дисперсионный закон для плазмонов . . . . .	189
<b>Лекция 17</b> . . . . .	200
17.1. Фотон-электронное взаимодействие в металлах . . . . .	200
17.2. Энергия основного состояния электронного газа . . . . .	201
17.2.1. Электронный газ низкой плотности (модель Вигнера) . . . . .	205
17.2.2. Корреляционная энергия электронного газа при плотностях, соответствующих металлам . . . . .	209

<b>Лекция 18</b> . . . . .	211
18.1. Плазма металлов . . . . .	211
18.2. Равновесные свойства металлов . . . . .	213
18.2.1. Сжимаемость, скорость звука . . . . .	213
18.2.2. Теплоемкость электронного газа . . . . .	217
18.3. Магнитные свойства металлов . . . . .	220
18.4. Энергия сцепления в металлах . . . . .	221
<b>Лекция 19</b> . . . . .	223
19.1. Некоторые эксперименты о связи электронной структуры с механическими свойствами металлов и полуметаллов . . . .	223
19.1.1. Изменение Ферми-поверхности при всесторонней и односторонней деформации металла. Переход Мотта .	223
19.2. Разупрочнение металла при сверхпроводящем переходе . . .	229
19.3. Затухание ультразвука в металлах при низких температурах .	232
19.4. Электропластический эффект . . . . .	233
19.5. Электронная эмиссия при пластической деформации и раз- рушении металла . . . . .	235
Литература к лекции 19 . . . . .	237
<b>Рекомендуемая литература</b> . . . . .	239