MŰEGYETEM 1782

Modern fizika vegyészmérnököknek

6. óra: Vezetési jelenségek kvantumosan: a Sommerfeld-modell

Budapest, 2022. október 25.

Emlékeztető: kvantummechanika, egy részecske: hullámfüggvény tartalmazza a részecskéről az összes hozzáférhető információt

elektron állapota:
komplex értékű hullámfüggvény $\Psi(\vec{r})$

helyének valószínűségeloszlása: $|\Psi(\vec{r})|^2$

hely komponensének várhatóértéke: $\langle x \rangle = \int d^3r \, |\Psi(\vec{r})|^2 \, x = \int d^3r \Psi(\vec{r})^* x \Psi(\vec{r})$

impulzus: $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$

impulzus várhatóértéke: $\langle \hat{p}_x \rangle = \int d^3r \Psi(\vec{r})^* \hat{p}_x \Psi(\vec{r})$

teljes energia: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$

időfejlődés a Schrödinger-egyenlet $i\hbar\partial_t \Psi = \hat{H}\Psi$

Energiasajátállapotok:
időfüggetlen Schrödinger-egyenlet $\hat{H}\psi = E\psi$

Azonos részecskék kvantummechanikája

Két egyrészecske állapotfüggvény $\varphi_a(\vec{r}, s),\ \varphi_b(\vec{r}, s)$

Kétrészecske hullámfüggvény, ha az egyik részecske φ_a a másik részecske φ_b állapotban van:

$$\psi(\vec{r}_1, s_1; \vec{r}_2, s_2) = \varphi_a(\vec{r}_1, s_1)\,\varphi_b(\vec{r}_2, s_2)$$

egyszerűsítő jelölés: $\psi(1,2) = \varphi_a(1)\,\varphi_b(2)$

Az általános kétrészecske hullámfüggvény a négy különböző lehetőség szuperpozíciója:

$$\boxed{\psi(1,2) = c_{aa}\,\varphi_a(1)\,\varphi_a(2) + c_{ab}\,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) + c_{ba}\,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2) + c_{bb}\,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2)}$$

A részecskék azonosságának elve:
Két részecske felcserélése semmilyen kísérlettel nem mutatható ki.

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2$$

$\Rightarrow$ A kétrészecske hullámfüggvény szimmetriája

$$\boxed{\psi(2,1) = \begin{cases} \psi(1,2) & \text{bozonok} \\ -\psi(1,2) & \text{fermionok} \end{cases}}$$

A két részecske felcserélése esetén a hullámfüggvény:

$$\boxed{\psi(2,1) = c_{aa}\,\varphi_a(2)\,\varphi_a(1) + c_{ab}\,\varphi_a(2)\,\varphi_b(1) + c_{ba}\,\varphi_b(2)\,\varphi_a(1) + c_{bb}\,\varphi_b(2)\,\varphi_b(1)}$$

Ha több azonos részecske van egy rendszerben, az együttes hullámfüggvényt szimmetrizálni/antiszimmetrizálni kell. vagy bozonok vagy fermionok.

$$\boxed{\psi(2,1) = \begin{cases} \psi(1,2) & \text{bozonok} \\ -\psi(1,2) & \text{fermionok} \end{cases}}$$

$$\boxed{\psi(1,2) = c_{aa}\,\varphi_a(1)\,\varphi_a(2) + c_{ab}\,\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) + c_{ba}\,\varphi_b(1)\,\varphi_a(2) + c_{bb}\,\varphi_b(1)\,\varphi_b(2)}$$

$$\boxed{\psi(2,1) = c_{aa}\,\varphi_a(2)\,\varphi_a(1) + c_{ab}\,\varphi_a(2)\,\varphi_b(1) + c_{ba}\,\varphi_b(2)\,\varphi_a(1) + c_{bb}\,\varphi_b(2)\,\varphi_b(1)}$$

$$\text{bozonok: } c_{ab} = c_{ba} \rightarrow \begin{cases} \varphi_a(1)\,\varphi_a(2) \\ \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) + \varphi_b(1)\,\varphi_a(2)\right) \\ \varphi_b(1)\,\varphi_b(2) \end{cases}$$

három lehetséges szimmetrikus kétrészecske állapot

$$\text{fermionok: } \begin{array}{c} c_{aa} = 0 \\ c_{ab} = -c_{ba} \\ c_{bb} = 0 \end{array} \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) - \varphi_b(1)\,\varphi_a(2)\right)$$

egy lehetséges antiszimmetrikus kétrészecske állapot

Az elektronok fermionok
Két elektron nem lehet azonos állapotban

Pauli-elv: Az elektronok fermionok, azaz a sokelektron hullámfüggvény előjelet vált két elektron felcserélése esetén (antiszimmerikus hullámfüggvény).

Wolfgang Ernst Pauli
(1900-1958)

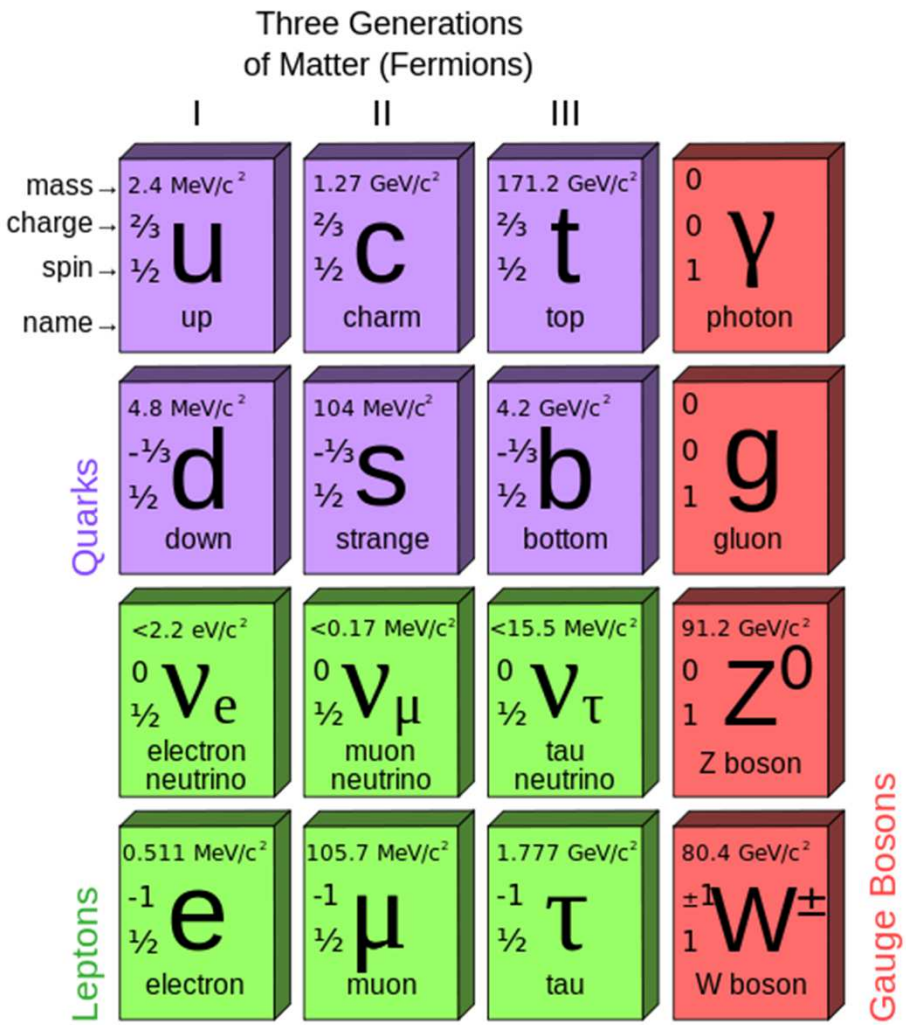
$$\text{fermionok:} \quad \begin{array}{c} c_{aa} = 0 \\ c_{ab} = -c_{ba} \\ c_{bb} = 0 \end{array} \quad \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\varphi_a(1)\,\varphi_b(2) - \varphi_b(1)\,\varphi_a(2)\right)$$

A fenti hullámfüggvény jól demonstrálja a nevezetes Pauli kizárási elvet:
Két elektron nem lehet ugyanabban az egyrészecske állapotban!
(Pauli 1924)

Minden kvantumos részecske vagy bozon, vagy fermion. Az elemi részecskék is

fermionok az anyag építőkövei

bozonok az erők közvetítői

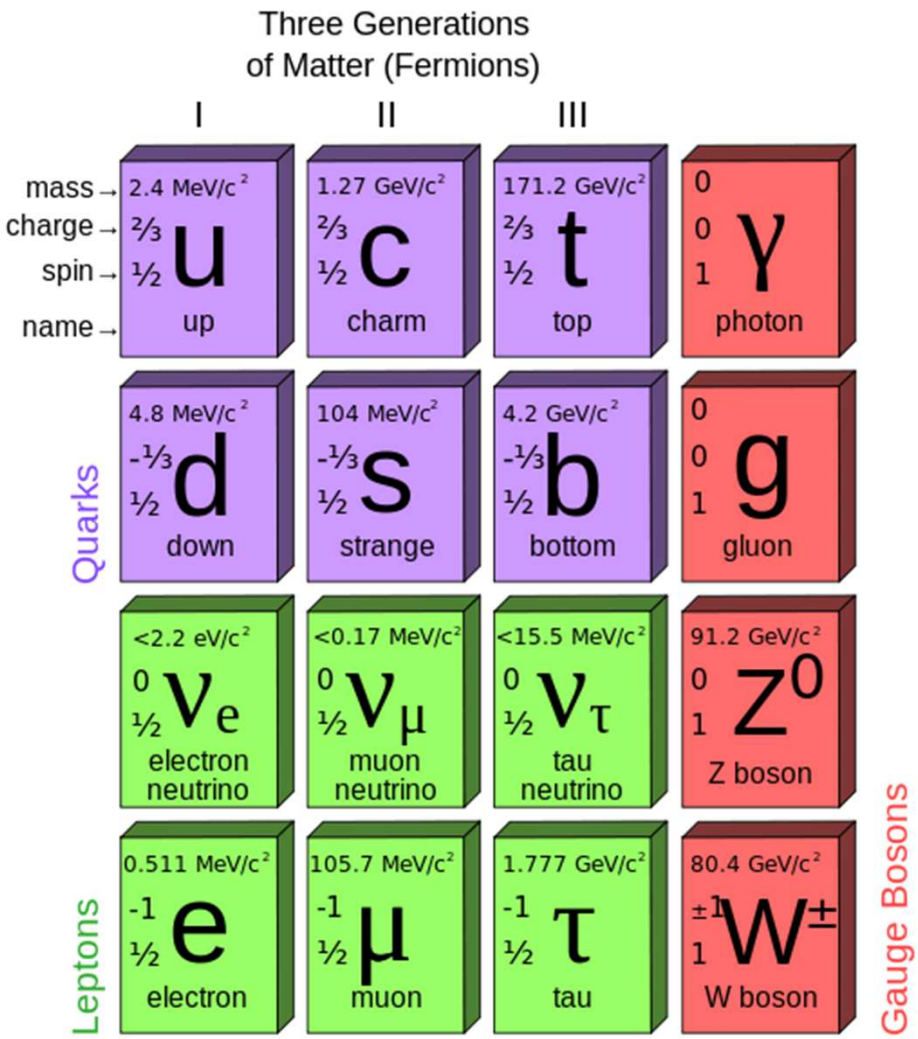


Fotonok,
(fononok,
magnonok, ...)

Az összetett részecskék:
Fermionok, ha páratlan sok fermion van bennük.
Bozonok, ha páros sok (pl. 0 vagy 2).

fermion:
proton = 3 kvark: 2u és 1d
neutron = 3 kvark: 2d és 1u

bozon:
pion = 1 kvark és 1 antikvark , lehet 3 féle:
u és anti-d, d és anti-u,
semleges pion:
(u és anti-u) + (d és anti-d)



~1920, elmélet: független részecskék gáza alacsony hőmérsékletre túlhűtve furcsán, kvantumosan viselkedne

Eloszlásfüggvény: egy kvantumállapot átlagos betöltöttsége $f_\alpha = \sum_{n_\alpha} n_\alpha \, \rho_\alpha(n_\alpha)$

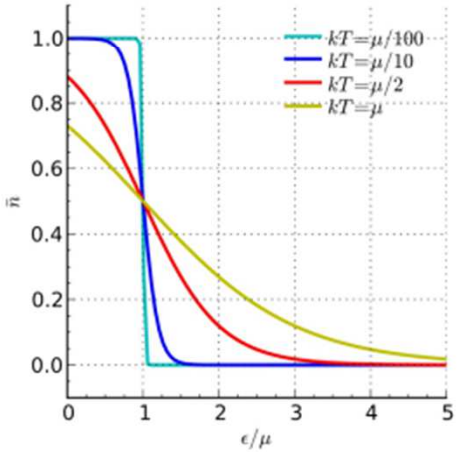
Fermionokra

$$f_{\mathrm{FD}}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_{\mathrm{B}}T}+1}$$

Fermi-Dirac eloszlás

Enrico Fermi
(1901-1954)

Paul A. M. Dirac
(1902-1984)

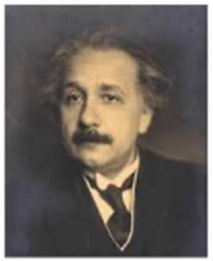


Bozonokra

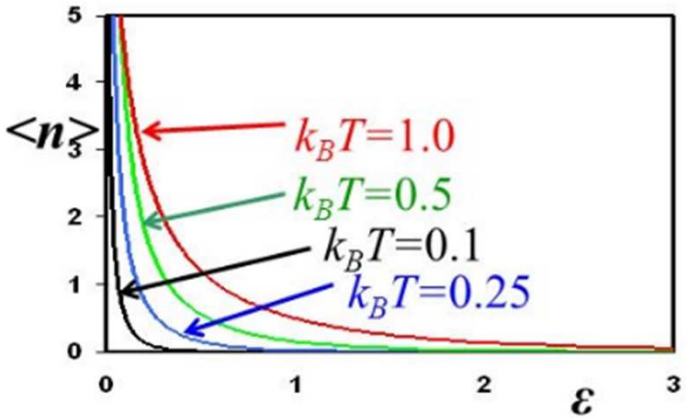
$$f_{\mathrm{BE}}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_{\mathrm{B}}T}-1}$$

Bose-Einstein eloszlás

Satyendra Nath Bose
(1894-1974)



Albert Einstein
(1879-1955)



Egyrészecske sajátállapotok

$$H\,\psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha \quad (\alpha \in \mathbb{N})$$

Egy állapotban lehetséges elektronok száma

$$n_\alpha = 0, 1$$

Annak a valószínűsége, hogy az α állapotban n_α elektron van $P_\alpha(n_\alpha)$

$$\sum_{n_\alpha=0,1} P_\alpha(n_\alpha) = 1$$

Az α állapot átlagos betöltöttsége, azaz átlagosan hány elektron van az α állapotban

$$f_\alpha = \langle n_\alpha \rangle = \sum_{n_\alpha=0,1} n_\alpha P_\alpha(n_\alpha) = P_\alpha(1)$$

A $P_\alpha(n_\alpha)$ valószínűség arányos a Boltzmann-faktorral

$$P_\alpha(n_\alpha) \sim e^{-\frac{n_\alpha \varepsilon_\alpha}{k_B T}}$$

Ha nagy az energia, akkor $P_\alpha(1) \to 0$, ha kicsi, akkor $P_\alpha(1) \to 1$:

$$\begin{array}{ll} \varepsilon_\alpha \gg \mu & P_\alpha(1) \to 0 \\ \varepsilon_\alpha \ll \mu & P_\alpha(1) \to 1 \end{array}$$

$$P_\alpha(n_\alpha) \sim e^{-\frac{n_\alpha(\varepsilon_\alpha - \mu)}{k_B T}}$$

$$P_\alpha(0) = \frac{1}{1 + e^{-\frac{\varepsilon_\alpha - \mu}{k_B T}}} \quad P_\alpha(1) = \frac{e^{-\frac{\varepsilon_\alpha - \mu}{k_B T}}}{1 + e^{-\frac{\varepsilon_\alpha - \mu}{k_B T}}} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_\alpha - \mu}{k_B T}} + 1}$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1}$$

Az elektronok száma megegyezik az átlagos betöltöttségek összegével az összes állapotra

$$N = \sum_\alpha \langle n_\alpha \rangle = \sum_\alpha \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_\alpha - \mu}{k_B T}} + 1} \to \mu(T)$$

1990-es évek: atomi gázok villámgyors lézeres túlhűtésével kísérletileg is kvantumos kondenzátumot állíthatunk elő

In 1995 (70 years after Einstein's prediction) teams in Colorado and Massachusetts achieved BEC in super-cold gas.This feat earned those scientists the 2001 Nobel Prize in physics.

S. Bose, 1924

A. Einstein, 1925

E. Cornell

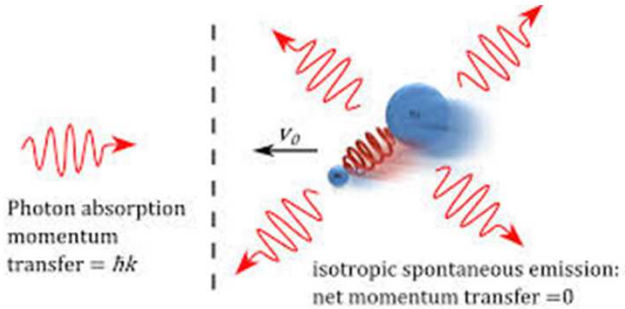
C. Wieman

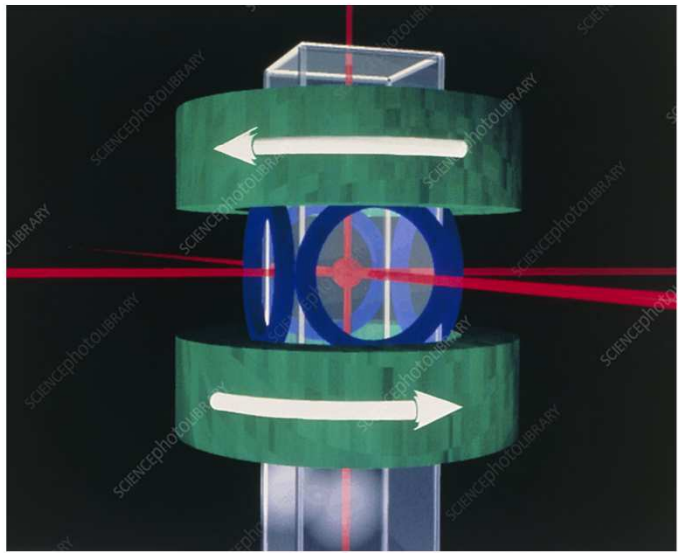
W. Ketterle

Light

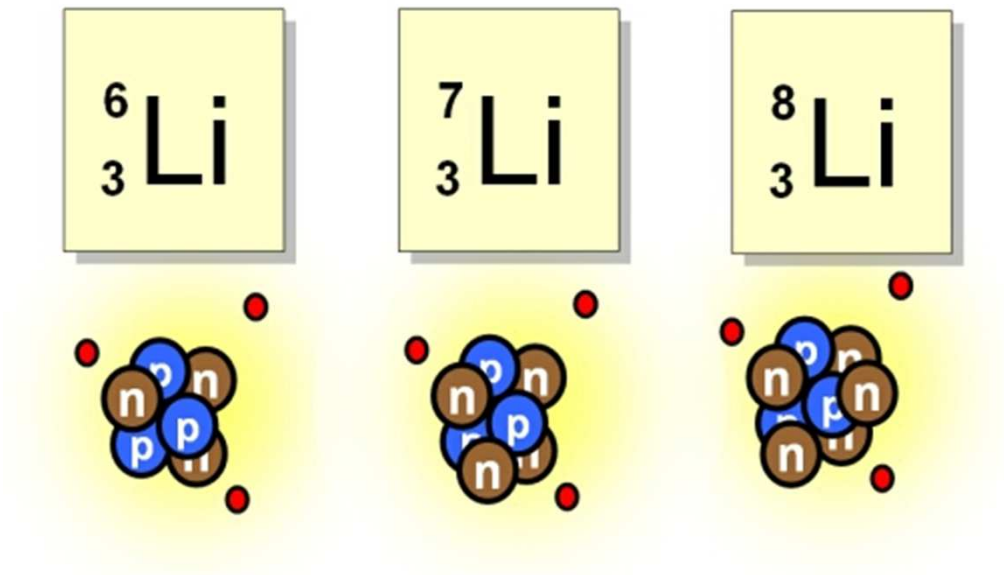
Atoms

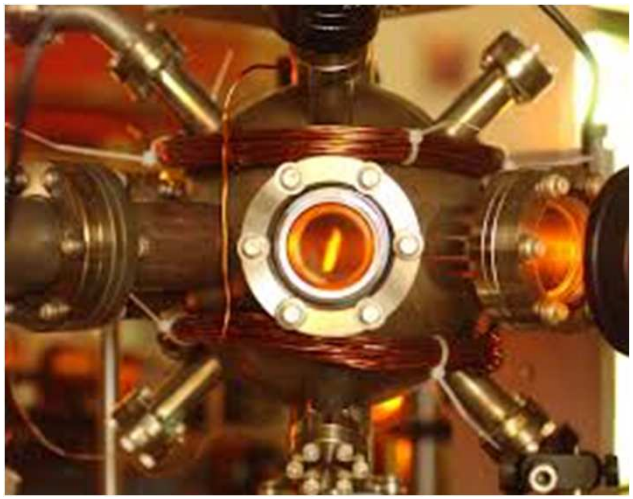
Using Rb and Na atoms





Kitérő: A lítium melyik izotópja bozonikus, melyikből lehet Bose-Einstein-kondenzátumot csinálni?





A) 6-os

B) 7-es

C) 8-as

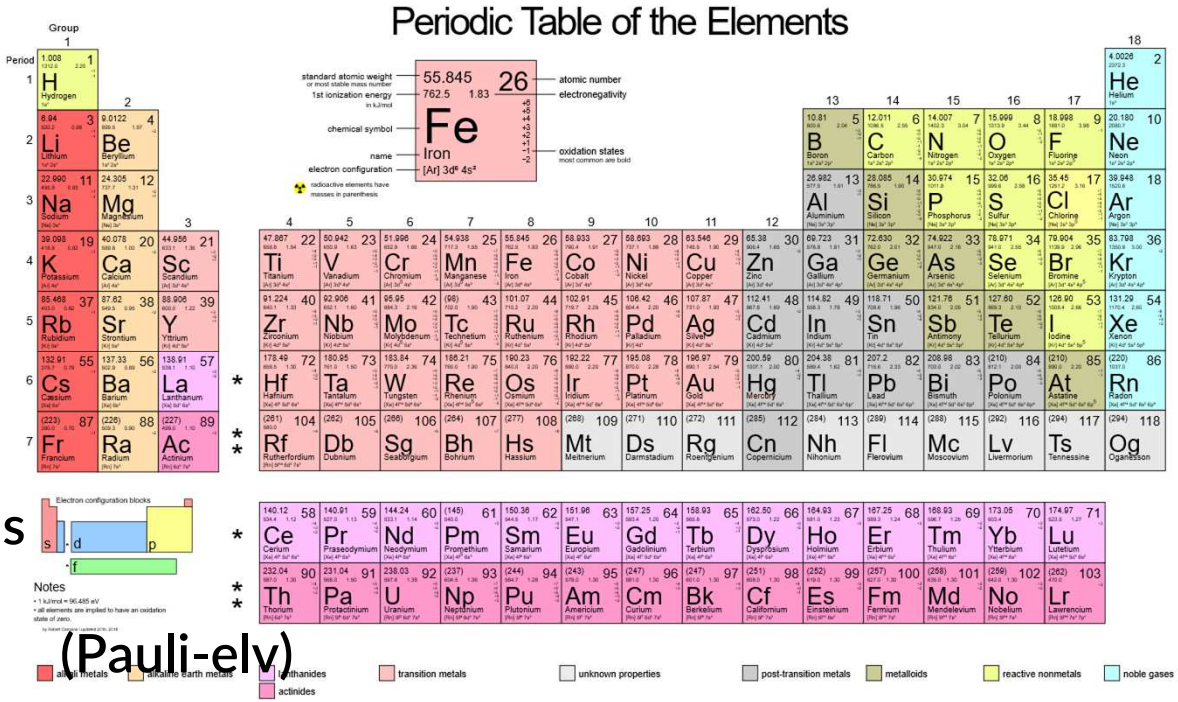
D) több is

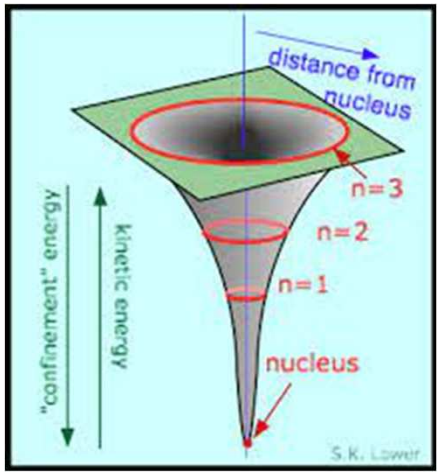
Emlékeztető: a Pauli-féle kizárási elv miatt van periódusos rendszer, kémia

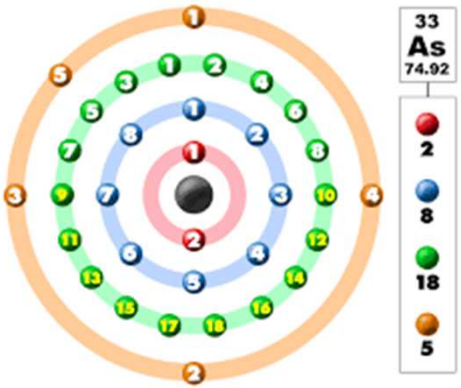
atom előállítása (elméleti recept):

1) vegyük az atommagot:
   N proton + A-N neutron,
2) ez létrehoz egy potenciálgödröt
3) ebbe tegyünk be egyesével
   N elektront
4) mindegyik a legalacsonyabb energiás
   még szabad állapotba megy

(Pauli-elv)

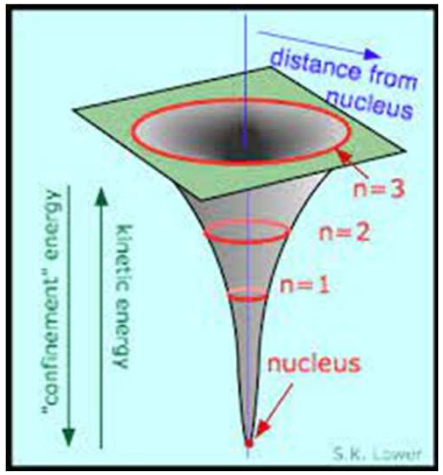




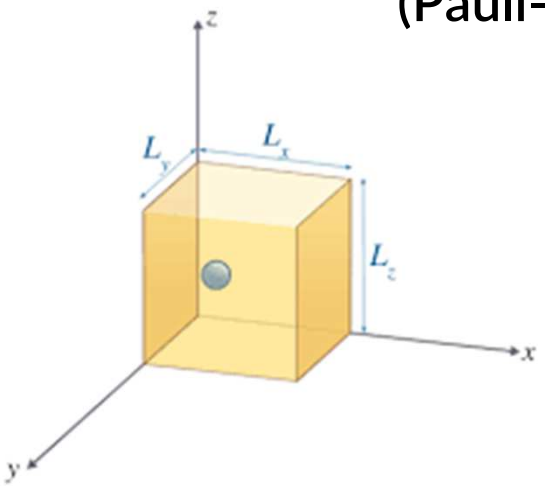


Sommerfeld-modell
Fém = atomtörzsek elkent háttere + vezetési elektronok síkhullám-állapotokban

atom előállítása (elméleti recept):
1) vegyük az atommagot:
N proton + A-N neutron,
2) ez létrehoz egy potenciálgödröt
3) ebbe tegyünk be egyesével
N elektront
4) mindegyik a legalacsonyabb energiás
még szabad állapotba megy
(Pauli-elv)

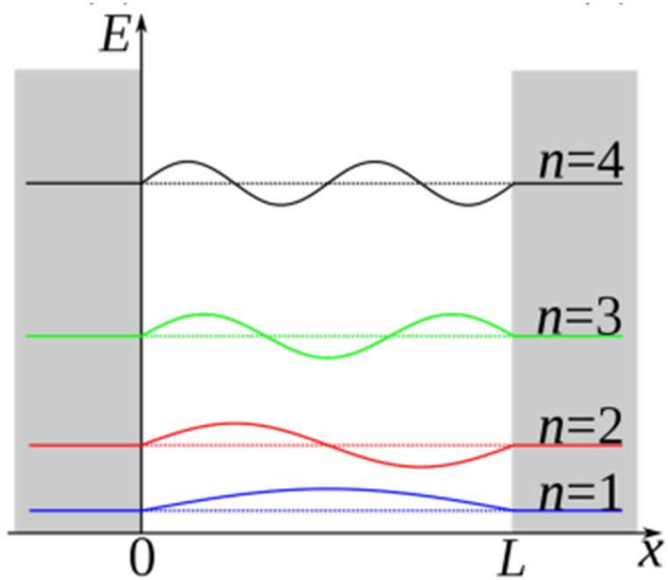


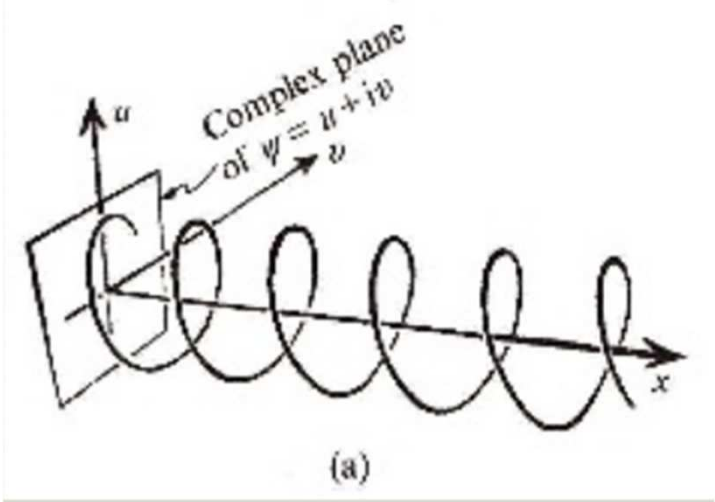
fémkristály előállítása (elméleti recept):
1) vegyünk ~6e23 atomtörzset:
(atommagok+törzselektronok)
2) ezek létrehoznak egy téglatest alakú
potenciálgödröt
3) ebbe tegyünk be egyesével
~ 6e23 elektront
4) mindegyik a legalacsonyabb energiás
még szabad állapotba megy
(Pauli-elv)



Számoláshoz praktikusabb doboz helyett periodikus határfeltételt venni. Sok részecske → felület kicsi a térfogathoz képest → határ mindegy

Egy dimenzióban:





Mint a két végén befogott húr rezgései

$$\psi_k(x) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{L}} \sin kx = \frac{1}{i\sqrt{2L}}(e^{ikx} - e^{-ikx}),$$

$$k = n\frac{\pi}{L}, \quad n = 1, 2, \ldots$$

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx},$$

$$k = n\frac{2\pi}{L}, \quad n = \ldots, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots$$

Sommerfeld-modell képletekkel 1 dimenzióban

Born-Kármán periodikus határfeltétel

$$\psi_n = A e^{\frac{i}{\hbar}(p_n x - \varepsilon_n t)}, \quad p_n = \hbar k_n$$

véges méret → „ciklikus" határfeltétel

$$e^{ikx} = A e^{ik(x+L)}$$

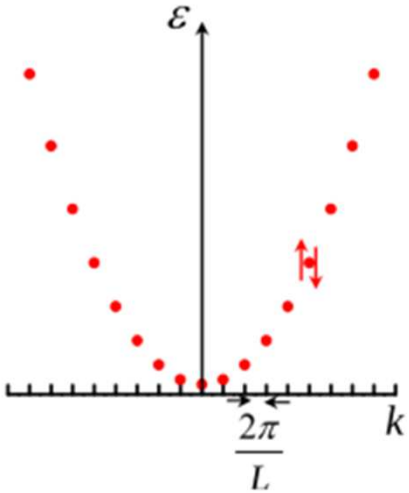
$$k = n\frac{2\pi}{L}, \quad \text{ahol } n = 0,1,2, \ldots \quad \text{egész számok}$$

A nívók betöltése N db. elektronnal (T=0 hőmérsékleten, alapállapotban)

érvényesül a Pauli-elv:

az elektronok egyre magasabb energiszintekre kerülnek

1d szemléltetés



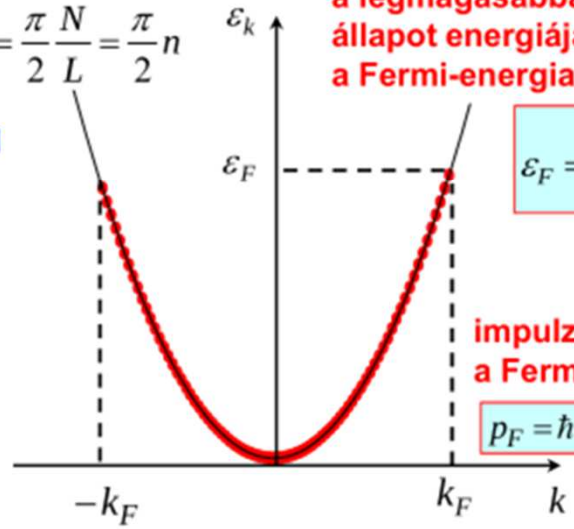
állapotsűrűség

hossz (térfogat)

$$N = 2\,\frac{L}{2\pi}\,2k_F$$

egy adott sajátállapotban csak 2 db. elektron lehet, ellentétes spinnel

$$k_F = \frac{\pi}{2}\frac{N}{L} = \frac{\pi}{2}n$$



Definiciók

a legmagasabban betöltött állapot energiája: a Fermi-energia

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

impulzusa: a Fermi-impulzus

$$p_F = \hbar k_F$$

A kvantummechanika a szabad elektronok leírására valószínűségi hullámfüggvényt alkalmaz: az elektron megtalálási valószínűsége a fémben egyenletes, $|\psi|^2$ miközben terjedését a $p = \hbar k$ impulzus és a j valószínűségi áramsűrűség jelzi (lásd pl. összefoglaló előadás 6. lapján az *A* amplitúdójú síkhullámra vonatkozó számolást).

Az elektronok lehetséges állapotait a hullámszámmal jellemezhetjük, amelyek egy véges méretű rendszerben – a Born-Kármán periodikus határfeltétel alkalmazásával – diszkrét k_n értékeket vehetnek fel. A hullámszám növekedésévek a hozzá tartozó energia-sajátállapotok értékei is növekszenek. Az N darab elektront tartalmazó alapállapotú (T=0 K) rendszerben, a magasabb energiájú nívók is betöltődnek, mivel a kvantummechanikai Pauli-elv* miatt azonos állapotban csak 2 db. elektron lehet (ellentétes spinnel). A legmagasabb betöltött nívó energiája az Fermi-energia, a hozzá tartozó hullámszám a Fermi-hullámszám.

Egy egydimenziós fém esetében könnyű leszámolni az állapotokat, és ennek segítségével meghatározni az L (lineáris) méretű dobozba helyezett N db. elektronhoz tartozó Fermi-energiát.

Az következő lapon a 2- és 3-dimenziós számolás látható. Itt felhasználjuk, hogy makroszkopikus méretű anyagra a k-térben az állapotok sűrűn helyezkednek el, és az állapotok száma a k-térbeli állapotsűrűség és a betöltött állapotokat jellemző gömb térfogatának szorzata adja.

A legmagasabb energiájú betöltött állapotok ekvienergiás felülete, a ***Fermi-felület***, fontos szerepet játszik a fémek tulajdonságainak leírásában. (Fermi-felület: azon k-térbeli pontok halmaza, amelyek ε_F energiával rendelkeznek).

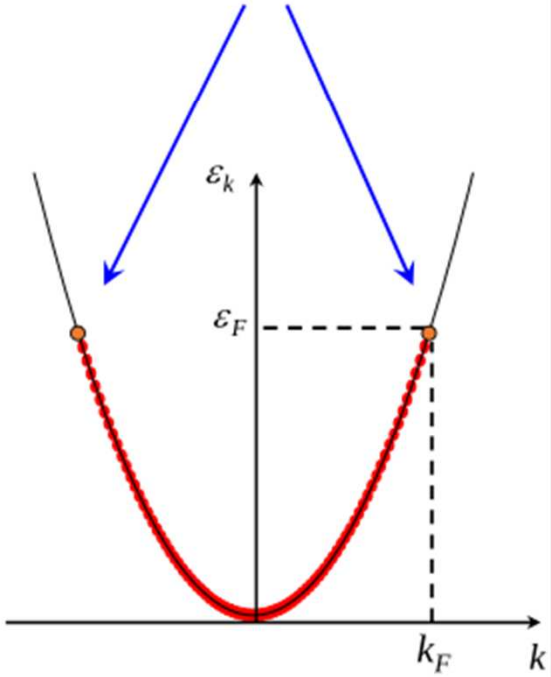
*A Pauli-elv szorosan kapcsolódik ahhoz, hogy ***az azonos részecskék megkülönböztethetetlenek***.

Sommerfeld-modell 2 és 3 dimenzióban

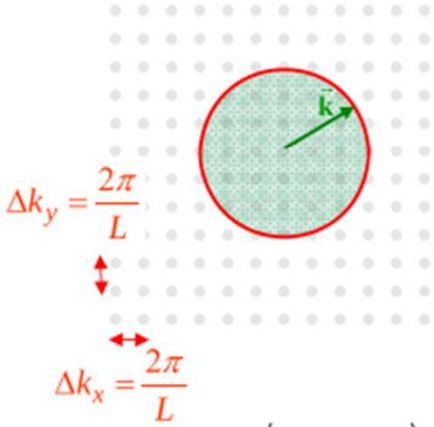
Fermi felület

Definició
a Fermi-energiához tartozó elektron-állapotok a k-térben:
Fermi-felület

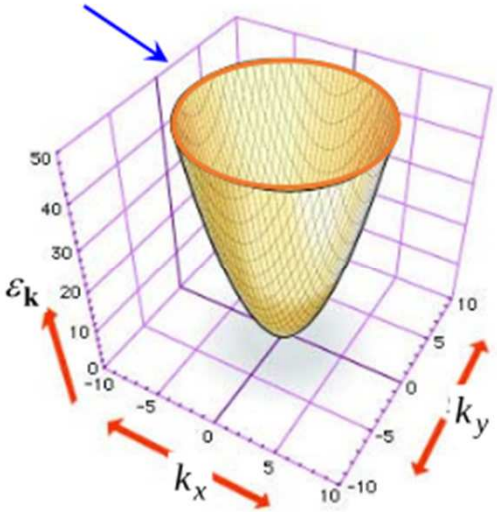
1 dimenzió
ekvienergiás felület a k-térben:
2 db. pont



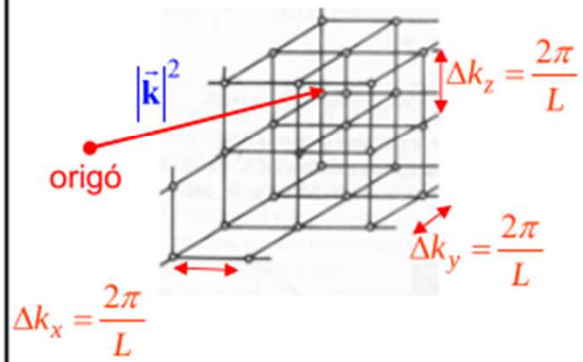
2 dimenzió
ekvienergiás felület a k-térben:
kör



$$\varepsilon(\vec{\mathbf{k}}) = \frac{\hbar^2\left(k_x^2 + k_y^2\right)}{2m} = \varepsilon_F$$

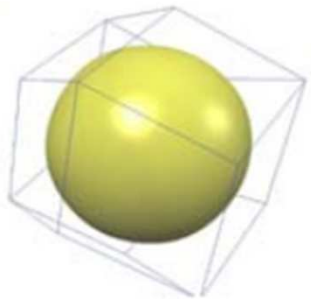


3 dimenzió
ekvienergiás felület a k-térben:
gömb



$$\varepsilon(\vec{\mathbf{k}}) = \frac{\hbar^2\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)}{2m} = \varepsilon_F$$

A kálium Fermi-felülete

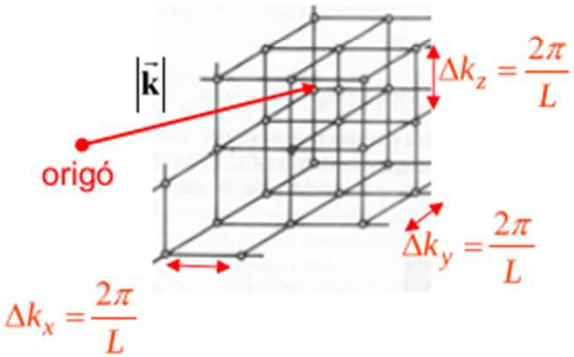


Fém = vezetési elektronok Fermi-gömbben

A nívók betöltése N db. elektronnal (3 dimenzió)
érvényesül a Pauli-elv: az elektronok
egyre magasabb energiszintekre kerülnek

Az $\frac{\hbar^2 \vec{\mathbf{k}}^2}{2m}$ energiánál kisebb energiájú
betöltött állapotok a reciprok térben egy

$|\vec{\mathbf{k}}|$ sugarú gömböm belül helyezkednek el



A k-térbeli állapotsűrűség
egyenletes:

$$N(\mathbf{k}) = \frac{V}{8\pi^3}$$

A Fermi-hullámszám meghatározása
az elektronűrűségből:

$$\frac{N}{V} = n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \rightarrow k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}$$

állapotsűrűség
térfogat

$$N = 2\,\frac{V}{8\pi^3}\,\frac{4\pi}{3}k_F^3$$

egy adott sajátállapotban
csak 2 db. elektron lehet,
ellentétes spinnel

A legmagasabban betöltött
állapot energiája:

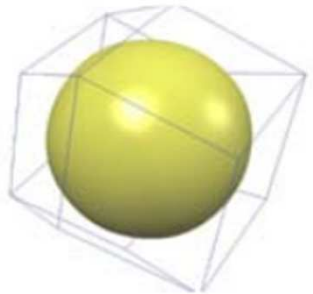
$$\boxed{\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}}$$

impulzusa:
a Fermi-impulzus

$$\boxed{\vec{\mathbf{p}}_F = \hbar \vec{\mathbf{k}}_F}$$

A Fermi-energiához tartozó
elektron-állapotok a k-térben:
Fermi-felület

a kálium Fermi-felülete



A Fermi-energiát a térfogategységre jutó
elektronok száma határozza meg:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt[3]{\left(3\pi^2 n\right)^2}$$

Tipikus értékek

A Fermi-paraméterek számszerű értékei

szabad elektron tömeggel, és tipikus elektronsűrűséggel számolva (6×10^{23} elektron/mol)

Tipikus értékek

Fermi-energia:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt[3]{\left(3\pi^2 n\right)^2}$$

$$\varepsilon_F \approx 5-8\,eV$$

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} \approx 60.000-100.000\,K$$

Fermi-hullámszám:

$$\frac{N}{V} = n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \rightarrow k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}$$

$$n = 10^{23}\frac{1}{cm^3} \rightarrow k_F = 10^8\,cm^{-1}$$

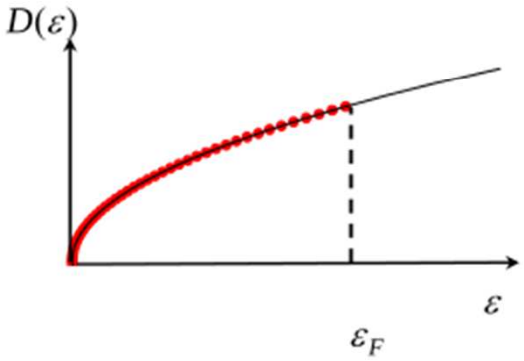
Fermi-sebesség: $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$

$$v_F = 10^8\,\frac{cm}{s}$$

Állapotsűrűség

$$D(\varepsilon)d\varepsilon = N(\mathbf{k})d^3\mathbf{k} = N(k)\cdot 4\pi k^2 dk$$

izotróp rendszer



$$D(\varepsilon) = 2\frac{V}{8\pi^3}4\pi k^2\left(\frac{d\varepsilon}{dk}\right)^{-1} =$$

$$= \frac{V}{\pi^2}\frac{m}{\hbar^2}k = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{\frac{2}{3}}\sqrt{\varepsilon}$$

$$D(\varepsilon_F) = 2\times10^{23}\,\frac{\text{nívó}}{eV\text{mól}}$$

nívótávolság:

$$\approx 5\times10^{-24}eV \approx 5\times10^{-20}K$$

folytonos spektrum!

Mekkora az elektronok Fermi-energiája, hőmérséklete, hullámszáma, hullámhossza, és sebessége rézben?

Adatok: $n = 0.8492 \cdot 10^{29} \frac{1}{\mathrm{m}^3}$ $\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$ $m = 9.109 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}$ $k_\mathrm{B} = 1.381 \cdot 10^{-23} \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}}$

Fermi-energia $\varepsilon_\mathrm{F} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$

$$\boxed{\varepsilon_\mathrm{F}} = \frac{\left(1.0546 \times 10^{-34}\right)^2}{2 \times 9.109 \times 10^{-31}} \left(29.61 \times 0.8492 \times 10^{29}\right)^{2/3} = 1.1289 \times 10^{-18}\,\mathrm{J} = \frac{1.1289 \times 10^{-18}}{1.602 \times 10^{-19}}\mathrm{eV} = \boxed{7.05\,\mathrm{eV}}$$

Fermi-hőmérséklet $T_\mathrm{F} = \frac{\varepsilon_\mathrm{F}}{k_\mathrm{B}}$ $\boxed{T_\mathrm{F}} = \frac{1.1289 \times 10^{-18}}{1.381 \cdot 10^{-23}}\mathrm{K} = \boxed{81745\,\mathrm{K}}$

Fermi-hullámszám $k_\mathrm{F} = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3}$ $\boxed{k_\mathrm{F} = 1.3598 \times 10^{10} \frac{1}{\mathrm{m}}}$

Fermi-hullámhossz $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_\mathrm{F}}$ $\boxed{\lambda_F} = 4.6207 \times 10^{-10}\,\mathrm{m} = \boxed{0.462\,\mathrm{nm}}$

Fermi-sebesség $v_\mathrm{F} = \frac{\hbar k_\mathrm{F}}{m}$ $\boxed{v_\mathrm{F}} = \frac{1.0546 \cdot 10^{-34} \times 1.3598 \times 10^{10}}{9.109 \cdot 10^{-31}} \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} = \boxed{1.5743 \times 10^6 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}}$

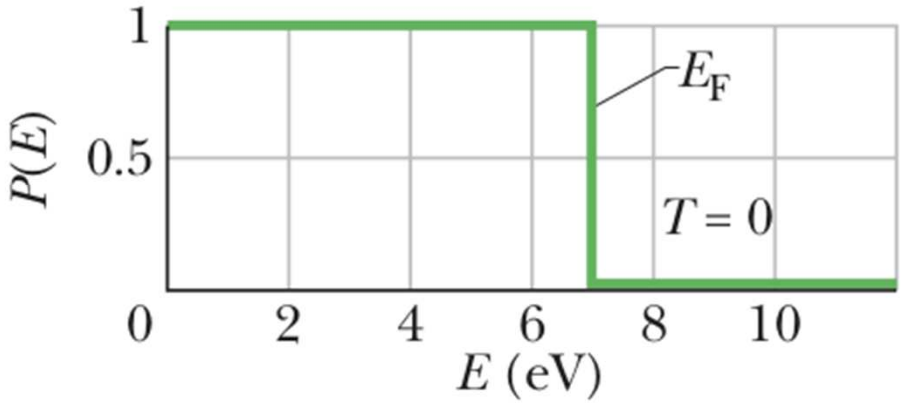
Az energiasajátállapotok betöltési valószínűségét a Fermi-Dirac-eloszlás adja meg

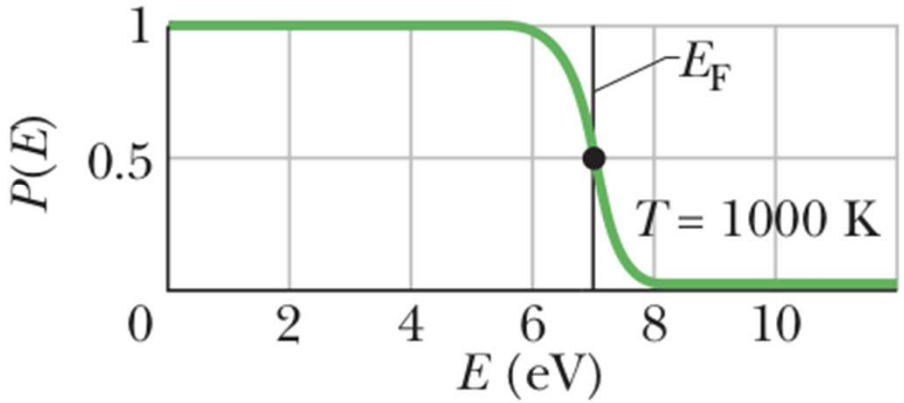
$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1}$$

μ: kémiai potenciál ≈ E_F Fermi-energia

T=0K hőmérséklet: éles határ betöltött és be nem töltött állapotok között

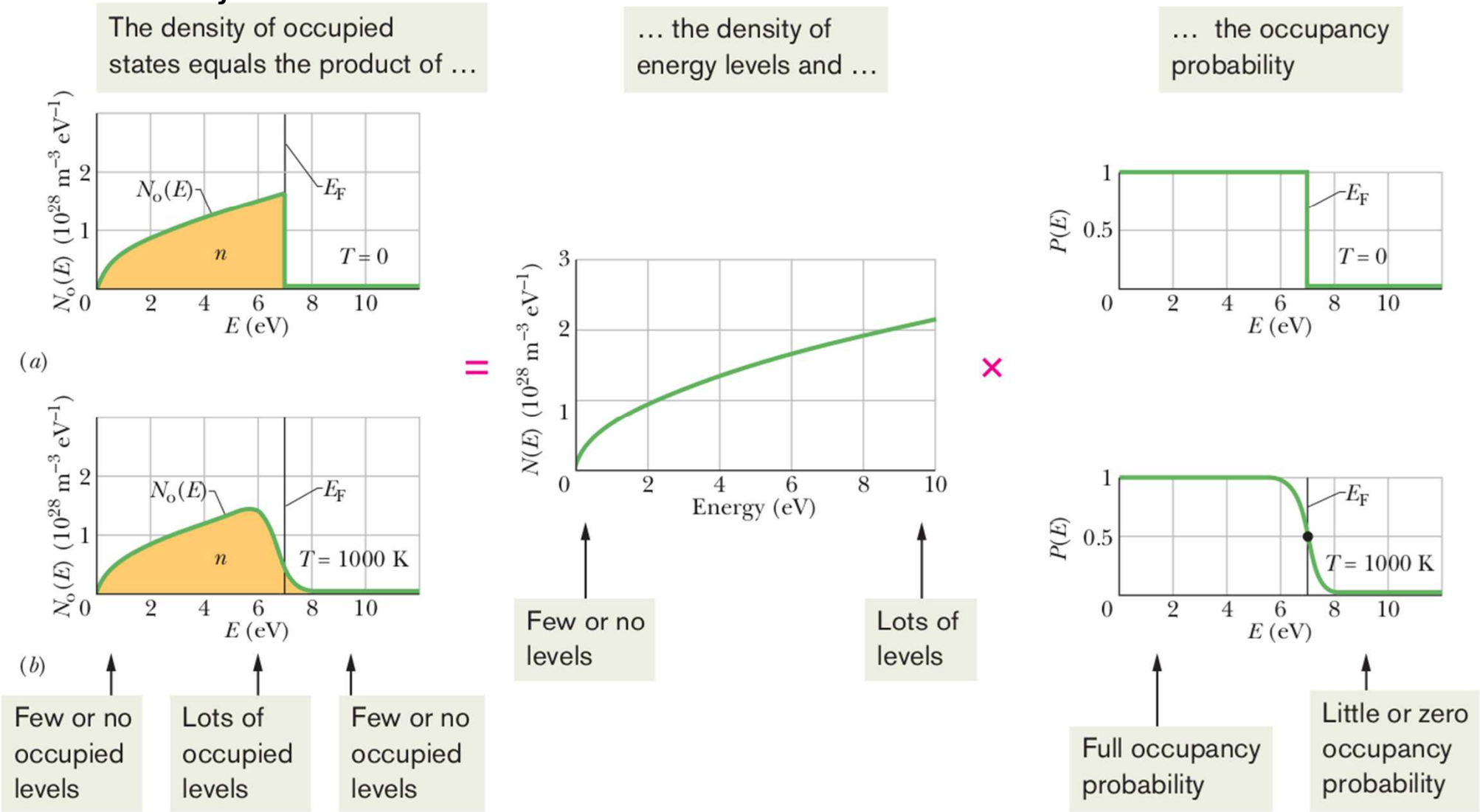
Hőmérséklet miatt a határ kiszélesedik, $k_B T$ tartományban
(pl. 300K → 25.9 meV kiszélesedés)



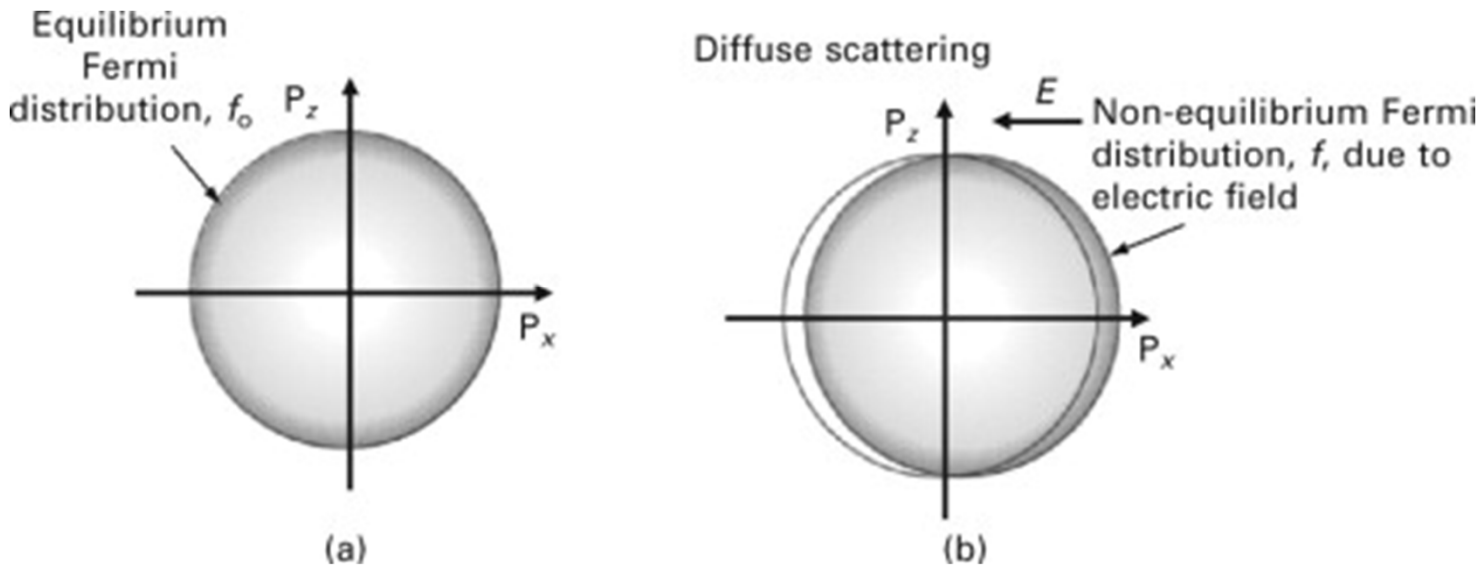


Elektronok száma = (állapotok száma) × (betöltöttségi valószínűség)

Pl. sáv aljához közel:



Elektromos vezetés szemléletes magyarázata a Sommerfeld-modellben: Fermi-gömböt elektromos tér eltolja



Vezetési jelenségek (kiegészítő anyag)

Elektromos vezetés

Időfüggő Schrödinger egyenlet: szabad elektron külső elektromos térben

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\vec{r},t\right)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+e\,\vec{E}\cdot\vec{r}\right]\psi\left(\vec{r},t\right)$$

Megoldás $\psi\left(\vec{r},t\right)=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}(t)\cdot\vec{r}}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\frac{\hbar^2}{2m}k^2\left(t'\right)dt'\right\}$ ahol $\vec{k}\left(t\right)=\vec{k}-\frac{e}{\hbar}\vec{E}\,t$

„Időfüggő energia” $\varepsilon_{\vec{k}}\left(t\right)=\int d^3r\,\psi^*\left(\vec{r},t\right)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+e\,\vec{E}\cdot\vec{r}\right]\psi\left(\vec{r},t\right)=\frac{\hbar^2k^2\left(t\right)}{2m}$

Elektron sebessége $\vec{v}_{\vec{k}}\left(t\right)=\frac{\hbar\vec{k}\left(t\right)}{m}=\frac{\hbar\vec{k}}{m}-\frac{e}{m}\vec{E}\,t$

Töltésáram sűrűség $\vec{j}_{\vec{k}}\left(t\right)=-\frac{e}{V}\vec{v}_{\vec{k}}\left(t\right)=-\frac{1}{V}\frac{e\hbar\vec{k}}{m}+\frac{1}{V}\frac{e^2}{m}\vec{E}\,t$

Teljes töltésáram sűrűség $\vec{j}_e=\frac{V}{\left(2\pi\right)^3}\int_{BZ}d^3k\,f\left(\vec{k},t\right)\vec{j}_{\vec{k}}\left(t\right)$

ahol $f\left(\vec{k},t\right)$ *nem-egyensúlyi valószínűség eloszlás (betöltöttség)*

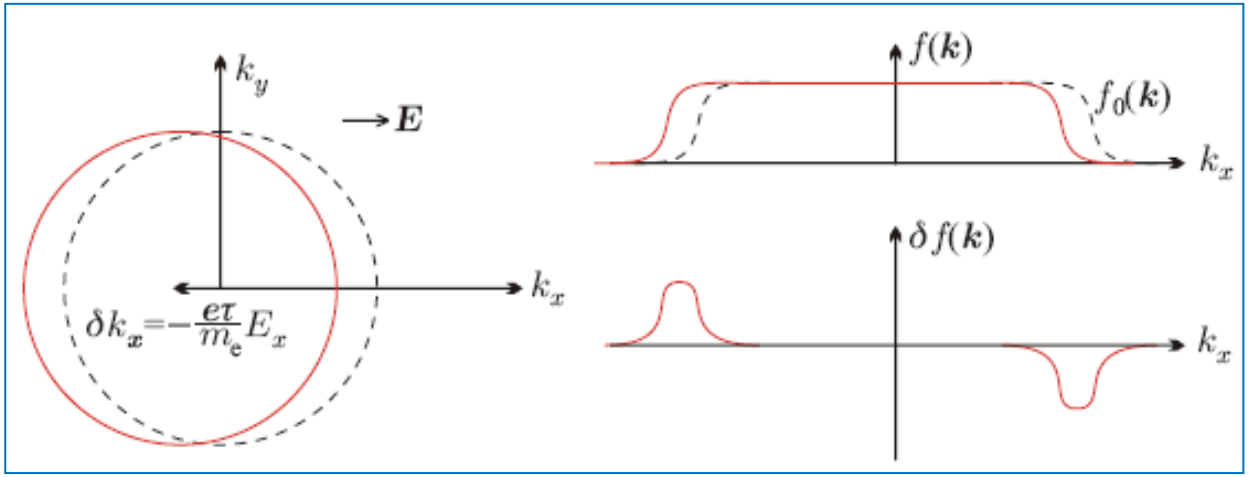
Probléma: egyenletesen gyorsuló elektronokat ír le (állandó tér hatására folyton növekvő áramsűrűség)
figyelembe kell venni a rácsmozgások és rácshibák miatt fellépő ütközéseket

Relaxációs idő közelítés

Relaxációs idő közelítés: az ütközések miatt csak egy átlagos τ ideig gyorsulnak az elektronok

$$\delta \vec{v}_{\vec{k}} = -\frac{e}{m}\vec{E}\,\tau \qquad \delta \vec{k} = -\frac{e}{\hbar}\vec{E}\,\tau$$

stacionárius (időben állandósult) állapot jön létre $\rightarrow$ $f\left(\vec{k}, \cancel{t}\right)$



$$f\left(\vec{k}\right) \simeq f_0\left(\vec{k} - \delta\vec{k}\right) = f_0\left(\vec{k} + \frac{e}{\hbar}\vec{E}\,\tau\right)$$
$$\simeq f_0\left(\vec{k}\right) + \frac{e\tau}{\hbar}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}\left(\frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}} \cdot \vec{E}\right)$$

Elektron sebessége:

$$\vec{v}_{\vec{k}} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \vec{k}}$$

$$f\left(\vec{k}\right) = f_0\left(\vec{k}\right) - e\tau\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}\right)\vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{E}$$

Az elektromos térrel arányos járulék:

$$\vec{j}_e = \frac{2e^2}{(2\pi)^3}\int d\varepsilon\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)\tau(\varepsilon)\int_{BZ} d^3k\,\delta\left(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon\right)\left(\vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{E}\right)\vec{v}_{\vec{k}}$$

Differenciális Ohm törvény

$$j_e^{\alpha} = \sum_{\beta = x,y,z} \sigma^{\alpha\beta} E^{\beta} \qquad (\alpha = x, y, z)$$

Fajlagos vezetőképesség

$$\sigma^{\alpha\beta} = \int d\varepsilon\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)\Sigma^{\alpha\beta}(\varepsilon) \quad \text{ahol} \quad \Sigma^{\alpha\beta}(\varepsilon) = \frac{e^2}{4\pi^3}\tau(\varepsilon)\int_{BZ} d^3k\,\delta\left(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon\right) v^{\alpha}_{\vec{k}}\, v^{\beta}_{\vec{k}}$$

alacsony hőmérsékleten

$$\sigma^{\alpha\beta} \underset{T\to 0}{=} \Sigma^{\alpha\beta}(\varepsilon_F) = \frac{e^2}{4\pi^3}\tau(\varepsilon_F)\int_{BZ} d^3k\,\delta\left(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_F\right) v^{\alpha}_{\vec{k}}\, v^{\beta}_{\vec{k}}$$

Hőáramlás

inhomogén kémiai potenciál és hőmérséklet $\rightarrow$ $\mu(\vec{r}),\ T(\vec{r})$ $\quad f(\vec{r},\vec{k})$

az előzőhöz hasonló okoskodással: $f(\vec{r},\vec{k}) = f_0(\vec{r} - \vec{v}_{\vec{k}}\tau, \vec{k})$ ahol $f_0(\vec{r},\vec{k}) = \dfrac{1}{e^{\frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})}{k_B T(\vec{r})}} + 1}$

összevonva az elektromos tér hatásával:

$$\boxed{f(\vec{r},\vec{k}) = f_0(\varepsilon_{\vec{k}}) + \tau\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}\right)\vec{v}_{\vec{k}}\cdot\left[-e\vec{E} + \vec{\nabla}\mu + \frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu}{T}\left(-\vec{\nabla}T\right)\right]}$$

Hőtan első főtétele $\rightarrow$ $dQ = dE - \mu dN$ $\rightarrow$ hőáram sűrűség

$$\boxed{\vec{j}_Q = \vec{j}_E - \mu\vec{j}_N = \vec{j}_E - \frac{\mu}{e}\vec{j}_e}$$

energiaáram sűrűség $\qquad$ részecskeáram sűrűség

Lineáris válasz:
(izotróp közegre)

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{j}_e &= \sigma\left(\vec{E} + \frac{\vec{\nabla}\mu}{e}\right) + \sigma_{12}\left(-\frac{\vec{\nabla}T}{T}\right)\\ \vec{j}_Q &= \sigma_{21}\left(\vec{E} + \frac{\vec{\nabla}\mu}{e}\right) + \sigma_2\left(-\frac{\vec{\nabla}T}{T}\right)\end{aligned}}$$

Onsager reláció: $\boxed{\sigma_{12} = \sigma_{21}} = -\int d\varepsilon\left(-\dfrac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)\Sigma(\varepsilon)(\varepsilon - \mu)$

$$\sigma_2 = \int d\varepsilon\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)\Sigma(\varepsilon)(\varepsilon - \mu)^2$$

$$\sigma \underset{T\to 0}{=} \Sigma(\varepsilon_F)$$

$$\sigma_{12} \underset{T\to 0}{=} \frac{\pi^2}{3e}(k_B T)^2 \left.\frac{d\Sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon_F}$$

$$\sigma_2 \underset{T\to 0}{=} \frac{\pi^2}{3e^2}(k_B T)^2 \Sigma(\varepsilon_F)$$

Tiszta hővezetés

hőáram hőmérsékleti gradiens hatására úgy, hogy nincs elektromos áram

$$\vec{j}_\epsilon = 0 \quad \Rightarrow \quad \sigma\left(\vec{E} + \frac{\vec{\nabla}\mu}{e}\right) = \sigma_{12}\left(\frac{\vec{\nabla}T}{T}\right) \quad \Rightarrow \quad \vec{j}_Q = \varkappa\left(-\vec{\nabla}T\right)$$

Hővezetési együttható (Wiedemann-Franz törvény)

$$\varkappa = \frac{1}{T}\left(-\frac{\sigma_{21}^2}{\sigma} + \sigma_2\right) \underset{T\to 0}{=} \underbrace{\frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2}}_{L} T\,\sigma$$

Lorenz-szám: L=2,45 • 10^{-8} V^2 K^{-2}

Seebeck effektus

Egy fém két pontja között hőmérsékleti gradiens hatására elektromos feszültség keletkezik

$$\vec{j}_\epsilon = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{E} + \frac{\vec{\nabla}\mu}{e} = S\,\vec{\nabla}T \quad \Rightarrow \quad S = \frac{1}{T}\frac{\sigma_{12}}{\sigma}$$

abszolút differenciális termofeszültség (Seebeck együttható)

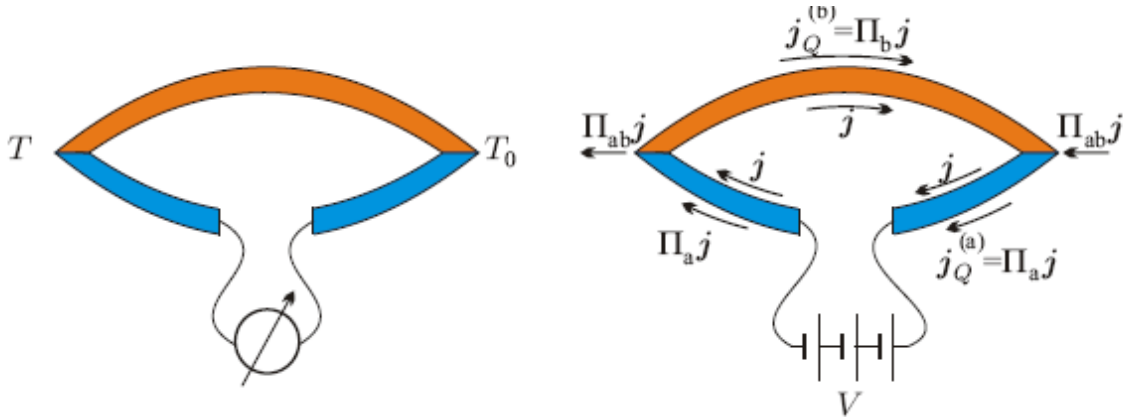
Peltier effektus

Egy fém két azonos hőmérsékletű pontja között elektromos áram csak úgy folyhat, hogy az egyik ponton hőt ad le, a másik ponton pedig hőt táplálunk be

$$\vec{\nabla}T = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{j}_Q = \frac{\sigma_{21}}{\sigma}\vec{j}_\epsilon = \Pi\,\vec{j}_\epsilon \quad \Rightarrow \quad \Pi = S\,T$$

Peltier együttható

Mérési elrendezések sematikus vázlata



Seebeck effektus

Peltier effektus