

Modern fizika vegyészmérnököknek

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

2022. 19.
Budapest, ~~2021.~~ Október 20.

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

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

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

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

bozonok: $c_{ab} = c_{ba} \rightarrow \begin{cases} \varphi_a(1) \varphi_a(2) \\ \frac{\sqrt{2}}{2}(\varphi_a(1) \varphi_b(2) + \varphi_b(1) \varphi_a(2)) \\ \varphi_b(1) \varphi_b(2) \end{cases}$ három lehetséges szimmetrikus kétrészecske állapot

fermionok: $\begin{matrix} c_{aa} = 0 \\ c_{ab} = -c_{ba} \\ c_{bb} = 0 \end{matrix} \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{2}(\varphi_a(1) \varphi_b(2) - \varphi_b(1) \varphi_a(2))$ egy lehetséges antiszimmetrikus kétrészecske állapot

Az elektronok fermionok, azaz a sokelektron hullámfüggvény előjelet vált két elektron felcserélése esetén (antiszimmetrikus hullámfüggvény).

Következmény: fermionokra érvényes a Pauli-féle kizárási elv. Két fermion nem lehet azonos állapotban.

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



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

Wolfgang Ernst Pauli
(1900-1958)

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

fermionok az anyag építőkövei

bozonok az erők közvetítői

Three Generations of Matter (Fermions)

	I	II	III	
mass →	2.4 MeV/c ²	1.27 GeV/c ²	171.2 GeV/c ²	0
charge →	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	0
spin →	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
name →	u up	c charm	t top	γ photon
	4.8 MeV/c ²	104 MeV/c ²	4.2 GeV/c ²	0
	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
Quarks	d down	s strange	b bottom	g gluon
	<2.2 eV/c ²	<0.17 MeV/c ²	<15.5 MeV/c ²	91.2 GeV/c ²
	0	0	0	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	ν_e electron neutrino	ν_μ muon neutrino	ν_τ tau neutrino	Z⁰ Z boson
	0.511 MeV/c ²	105.7 MeV/c ²	1.777 GeV/c ²	80.4 GeV/c ²
	-1	-1	-1	±1
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
Leptons	e electron	μ muon	τ tau	W[±] W boson

Gauge Bosons

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)

Three Generations of Matter (Fermions)

	I	II	III	
mass →	2.4 MeV/c ²	1.27 GeV/c ²	171.2 GeV/c ²	0
charge →	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	0
spin →	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
name →	u up	c charm	t top	γ photon
	4.8 MeV/c ²	104 MeV/c ²	4.2 GeV/c ²	0
	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	d down	s strange	b bottom	g gluon
	<2.2 eV/c ²	<0.17 MeV/c ²	<15.5 MeV/c ²	91.2 GeV/c ²
	0	0	0	0
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	ν_e electron neutrino	ν_μ muon neutrino	ν_τ tau neutrino	Z⁰ Z boson
	0.511 MeV/c ²	105.7 MeV/c ²	1.777 GeV/c ²	80.4 GeV/c ²
	-1	-1	-1	±1
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	e electron	μ muon	τ tau	W[±] W boson

Quarks

Leptons

Gauge Bosons

~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

$$f_{\text{FD}}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} + 1}$$

Fermi-Dirac eloszlás



Enrico Fermi
(1901-1954)



Paul A. M. Dirac
(1902-1984)

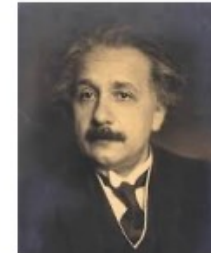
Bozonokra

$$f_{\text{BE}}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k_B T} - 1}$$

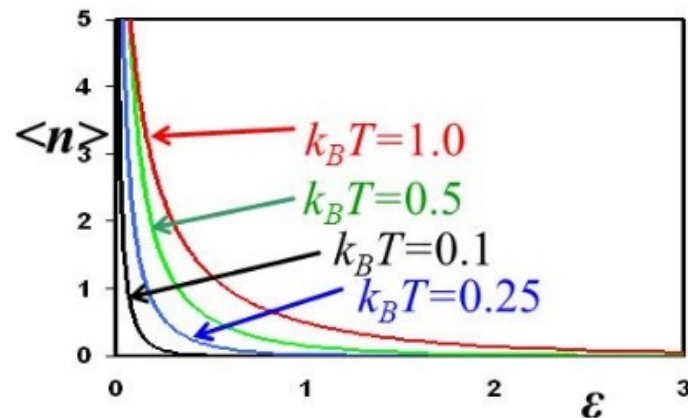
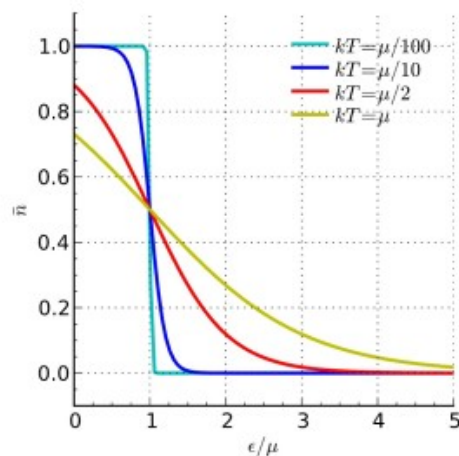
Bose-Einstein eloszlás



Satyendra Nath Bose
(1894-1974)



Albert Einstein
(1879-1955)



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

Magyarországon ilyesmi kísérlet: Wigner FK, Domokos Péter laboratóriuma

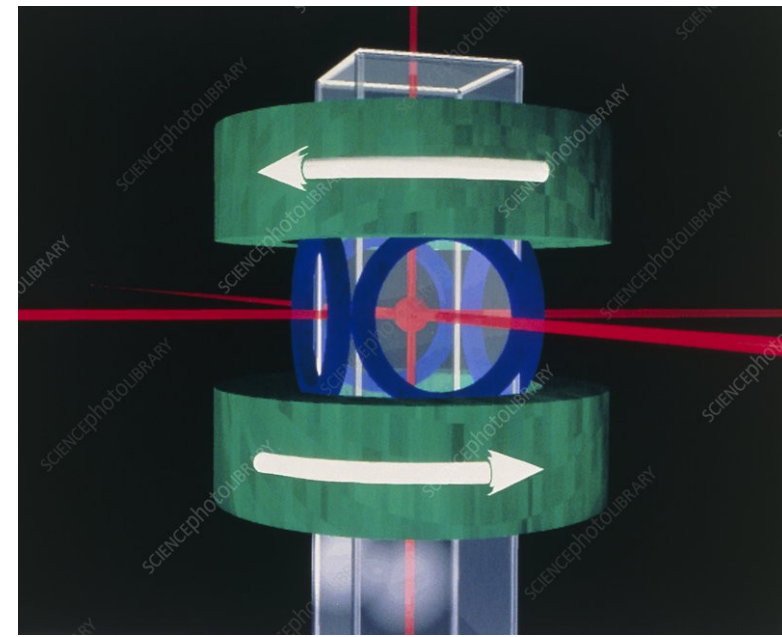
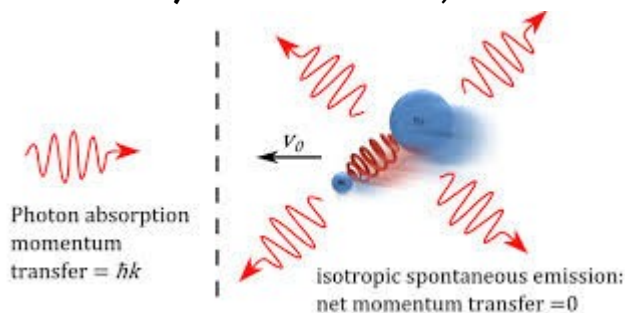
vákuumkamra, benne fémdarabka, áram hatására párolog

Light

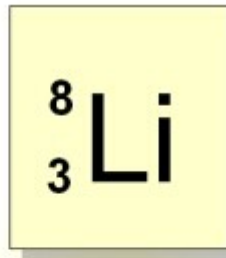
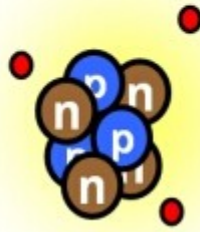
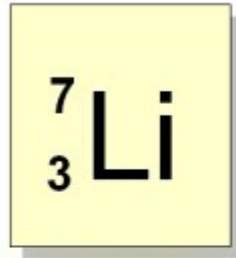
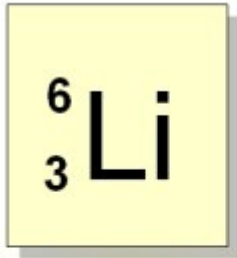
Atoms

Using Rb and Na atoms

lézeres túlhűtés (pl. Doppler-effektussal) $\rightarrow \sim 100$ nK, < 1 s alatt



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

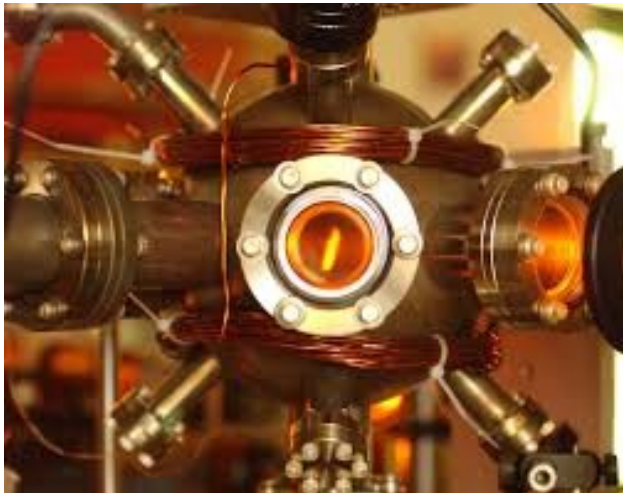


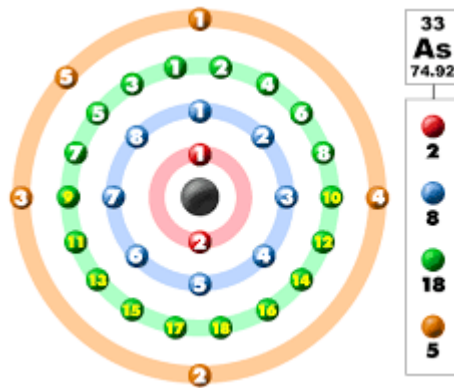
A) 6-os

B) 7-es

C) 8-as

D) több is

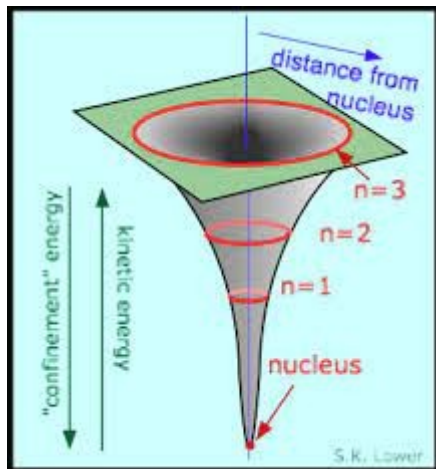




Sommerfeld-modell: Fém = atomtörzsek elkent háttere + vezetési elektronok síkhullám-állapotokban

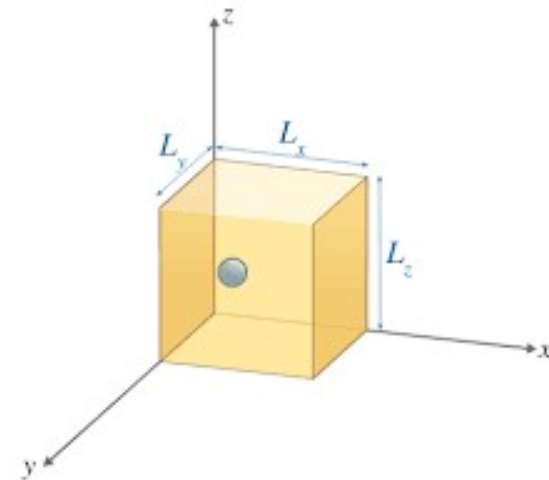
atom előállítás (elméleti recept):

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



fémkristály előállítás (elméleti recept):

- 1) vegyük $\sim 6e23$ atomtörzset:
(atommagok+törzselektronok)
- 2) ezek létrehoznak egy téglatest alakú
potenciálgödröt
- 3) ebbe tegyük be egyesével
 $\sim 6e23$ elektront
- 4) mindegyik a legalacsonyabb energiás
még szabad állapotba megy
(Pauli-elv)

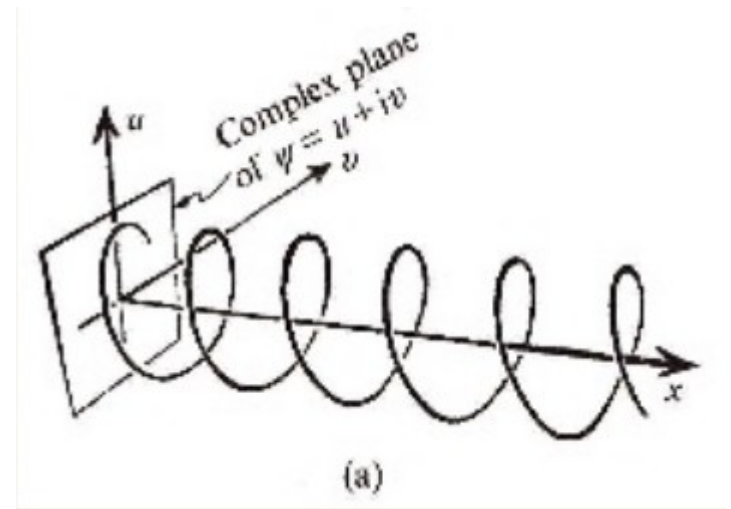
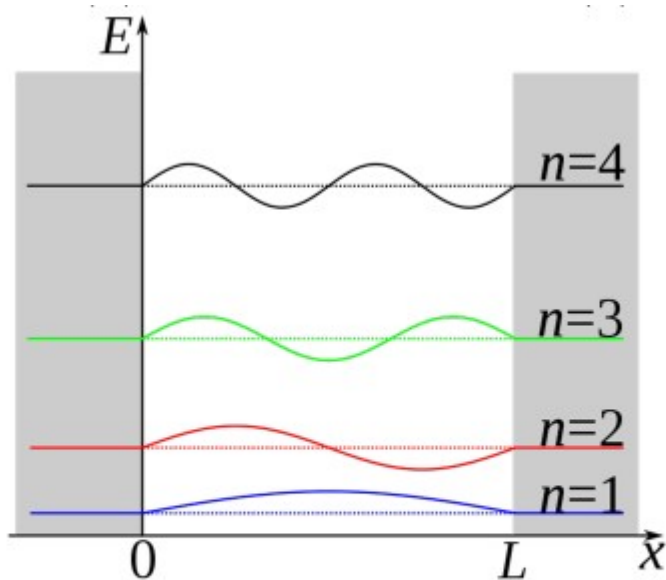


N db. nemkölcsönható elektronból alapállapot = minimális energiás állapot: “bedobáljuk a vödörbe”

Fémek legegyszerűbb modellje: N db. m
vegyértékű fématom egy téglatestben $\rightarrow$ Nm db.
elektron a téglatestben, periodikus határfeltétel

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

Egy dimenzióban:



Mint a két végén befogott húr rezgései

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

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

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

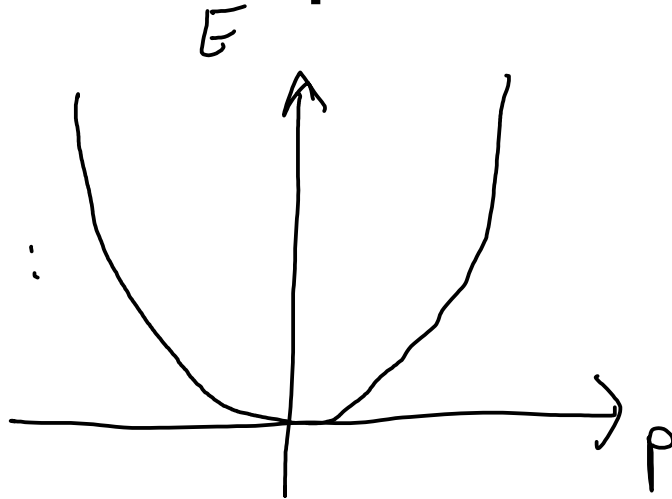
$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} (\cos kx + i \sin kx)$$

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

Emlékeztető: síkhullám diszperziós relációja, csoportsebesség, effektív tömeg

de Broglie

Elektron
vagy más
tömeges
részecske



$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega = hf$$

hullámhossz frekvencia

$$\frac{\omega}{k} = c \quad \text{fázis sebesség}$$

milyen sebességgel terjednek a hullámfrontok

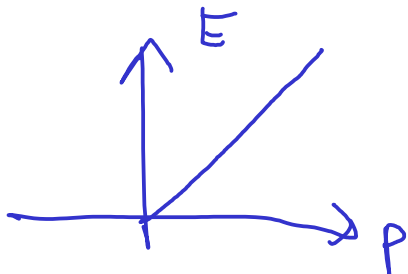
$$\frac{d\omega}{dk} = v \quad \text{csoportsebesség}$$

milyen sebességgel terjednek a hullámcsomagok

e sebesség

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} \left(\frac{E}{\hbar} \right) = \frac{d}{dk} \left(\frac{\hbar k^2}{2m} \right) = \frac{\hbar}{m} \cdot k = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \quad \checkmark$$

Fény:



$$E = \hbar \omega = hf$$

$$p = \hbar k$$

$$c = \frac{\lambda}{T} = \lambda f = \lambda \cdot \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\omega}{k}$$

minden hullámhosszhoz azonos fázissebesség tartozik -> csoportsebesség is c

A megengedett k hullámszámvektorok egy köbös rács pontjain vannak a k -térben

1D:

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} (\cos kx + i \sin kx)$$

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

3D:

$$\psi_{\vec{k}} = \frac{1}{V} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = \frac{1}{V} e^{i k_x x} e^{i k_y y} e^{i k_z z}$$

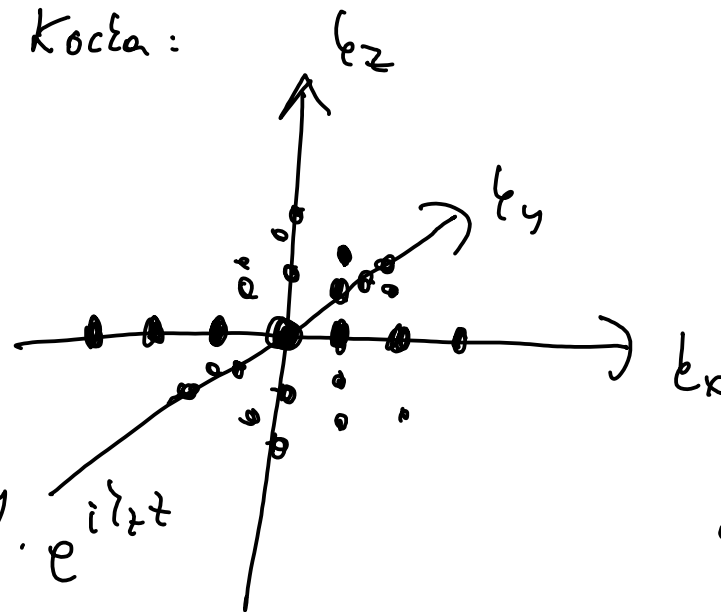
$$k_x = n_x \cdot \frac{2\pi}{L_x}$$

$$k_y = n_y \cdot \frac{2\pi}{L_y}$$

$$k_z = n_z \cdot \frac{2\pi}{L_z}$$

$$n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$$

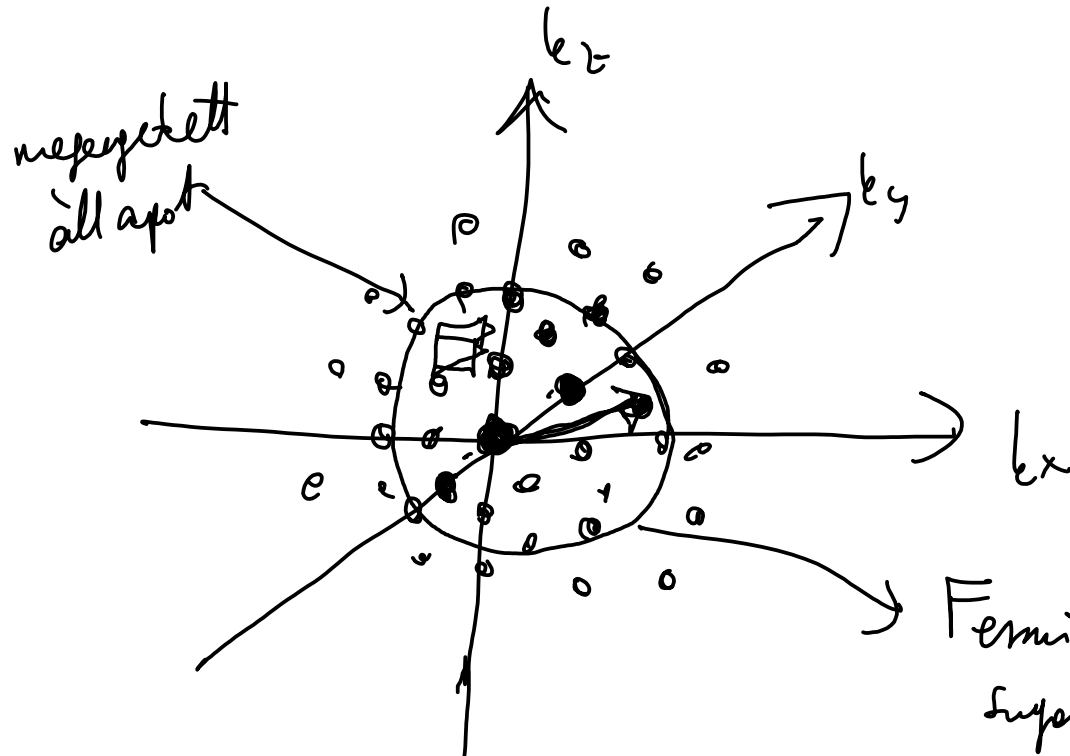
Kocka:



$$\vec{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L}$$

Fém Sommerfeld-modellje, alapállapot: Nm legalacsonyabb energiás egyrészecske-sajátállapot betöltve = Fermi-gömb. Többi üres.



$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}_{\text{térbeli térfogat}} \frac{1}{k}$$

reciprok térbeli térfogat, ami egy állapotra jut: $\int k^3 = \frac{8\pi^3}{L^3}$

$$V_{\text{Fermi}} = N \cdot m \cdot \frac{\int k^3}{2} = \frac{4}{3} k_F^3 \pi$$

Sommerfeld-modell Képletekkel, 1 dimenzióban

Born-Kármán periodikus határfeltétel

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

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

véges méret → „ciklikus” határfeltétel

$$e^{i k x} = A e^{i k (x+L)}$$

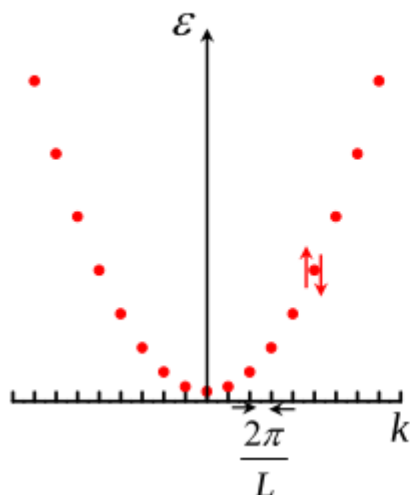


A nívók betöltése N db. elektronnal (T=0 hőmérsékleten, alapállapotban)

érvényesül a Pauli-elv:

az elektronok egyre magasabb energiszintekre kerülnek

1d szemléltetés

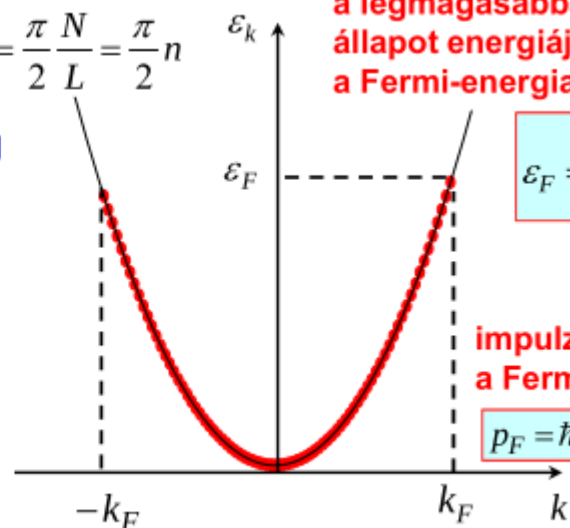


állapotsűrűség
hossz
(térfogat)

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

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

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



Definíciók

**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 fémekben 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 növekedésével 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**.

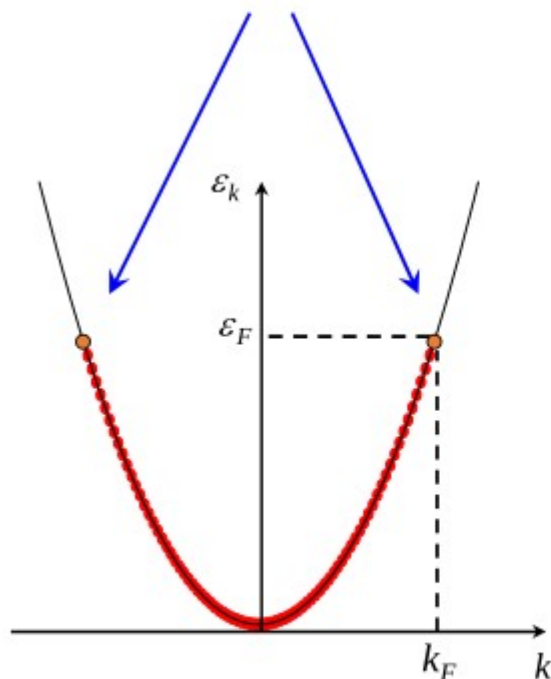
Sommerfeld-modell 2 és 3 dimenzióban

Fermi felület

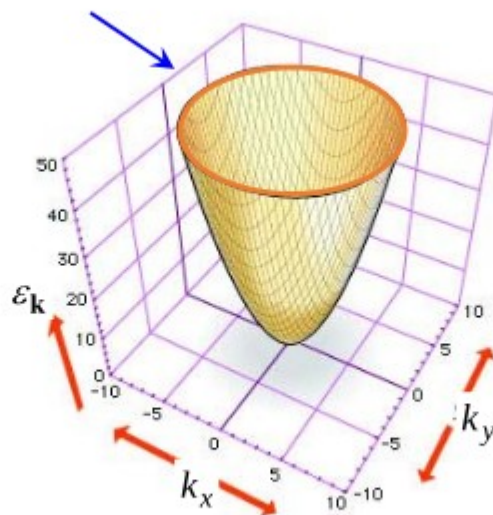
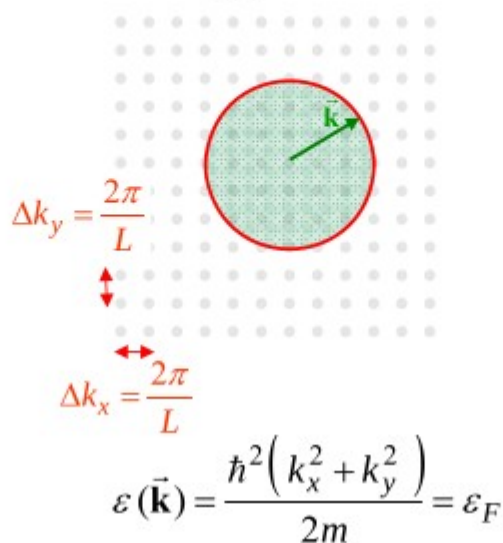
Definíció

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

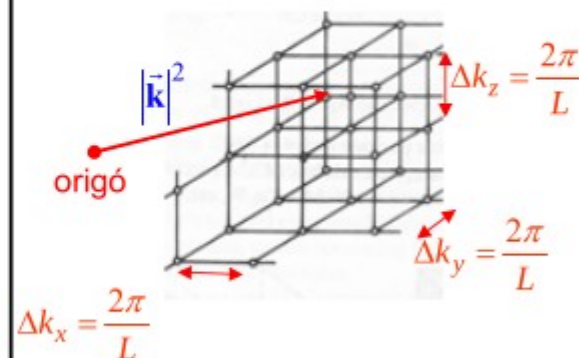
1 dimenzió
ekvienergiás felület a k-térben:
2 db. pont



2 dimenzió
ekvienergiás felület a k-térben:
kör

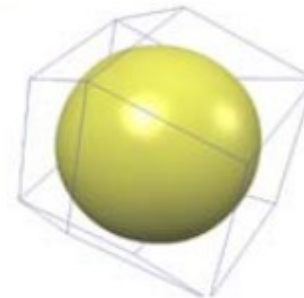


3 dimenzió
ekvienergiás felület a k-térben:
gömb



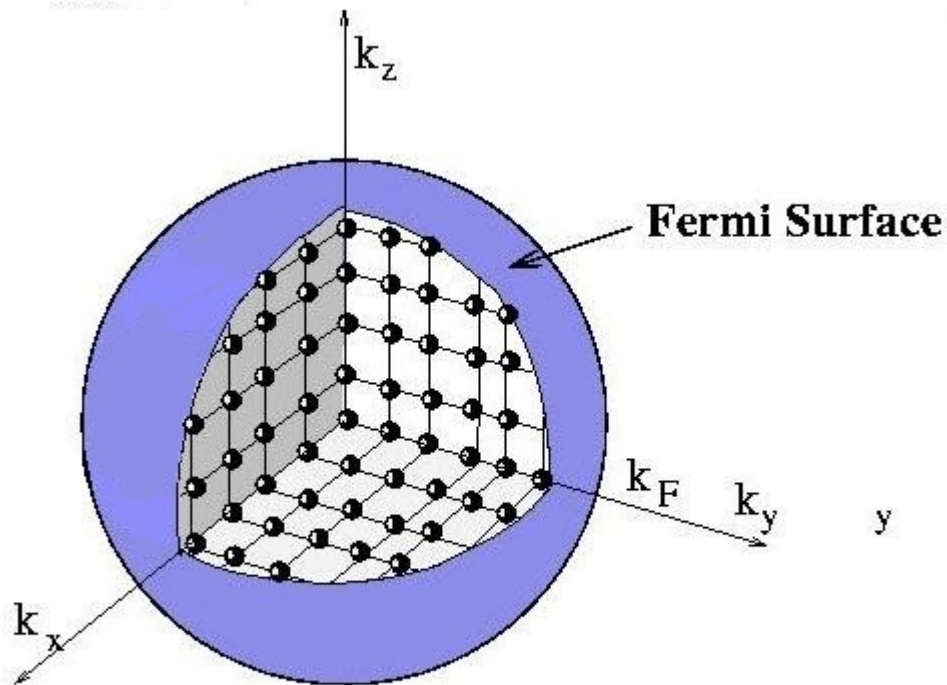
$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} = \varepsilon_F$$

A kálium Fermi-felülete



A megengedett k hullámszámvektorok egy köbös rács pontjain vannak a k -térben

Fém Sommerfeld-modellje, alapállapot: Nm legalacsonyabb energiás egyrészecske-sajátállapot betöltve = Fermi-gömb. Többi üres.



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

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

Sommerfeld-modell: Fém=vezetési elektronok Fermi-gömbben

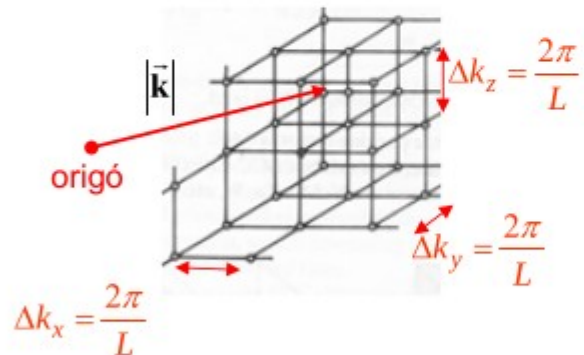
A nívók betöltése N db. elektronnal (3 dimenzió)

érvényesül a Pauli-elv: az elektronok egyre magasabb energiszintekre kerülnek

Az $\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$ energiánál kisebb energiájú

betöltött állapotok a reciprok térben egy

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



A k-térbeli állapotsűrűség egyenletes:

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

A Fermi-hullámszám meghatározása az elektronűrűségből:

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

A legmagasabban betöltött állapot energiája:

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

impulzusa:
a Fermi-impulzus

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

állapotsűrűség
térfogat

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

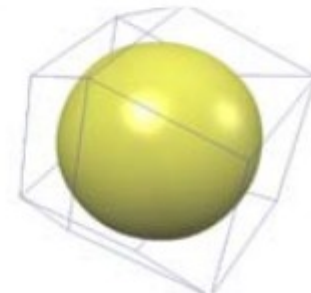
egy adott sajátállapotban csak 2 db. elektron lehet, ellentétes spinnel

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

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

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

a kálium Fermi-felülete



kis számolás: tipikus értékek

A Fermi-paraméterek számszerű értékei

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

Tipikus értékek

Fermi-energia:

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

$$\varepsilon_F \approx 5 - 8 \text{ eV}$$

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

Fermi-hullámszám:

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

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

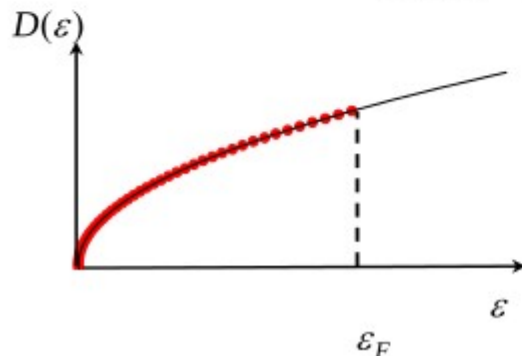
Fermi-sebesség: $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$

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

Állapotsűrűség

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

izotróp rendszer



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

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

$$D(\varepsilon_F) = 2 \times 10^{23} \frac{\text{nívó}}{\text{eVmol}}$$

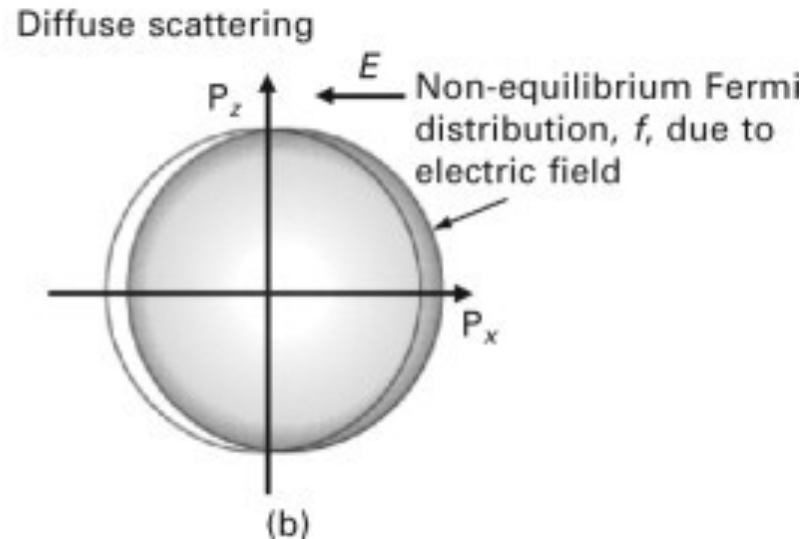
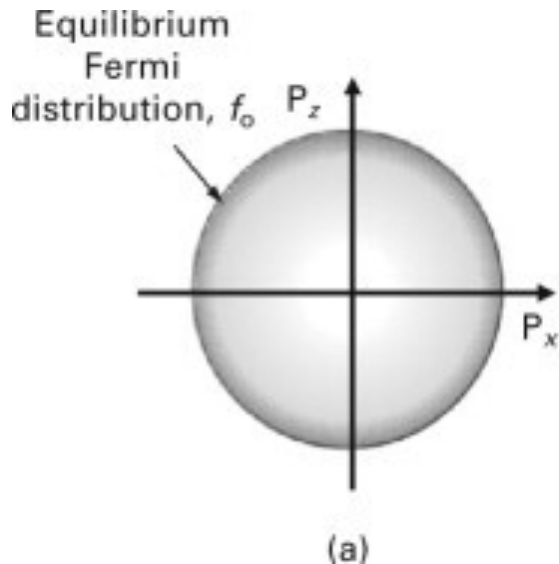
nívótávolság:

$$\approx 5 \times 10^{-24} \text{ eV} \approx 5 \times 10^{-20} \text{ K}$$

folytonos spektrum!

Példaszámolás: milyen gyorsak a Cu leggyorsabb
vezetési elektronjai?

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

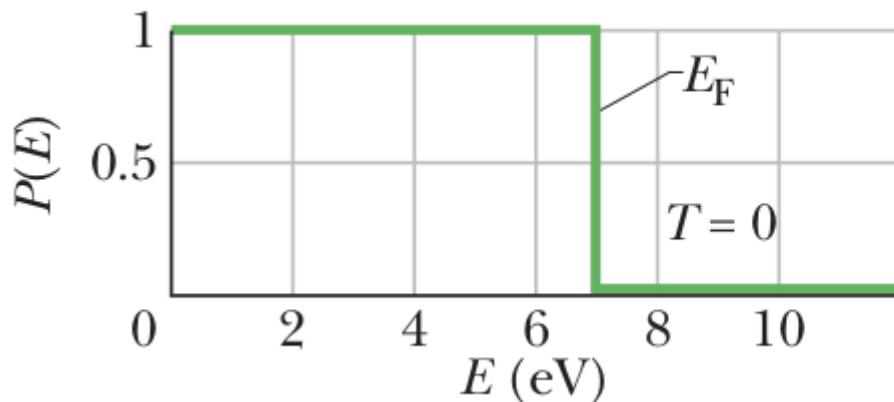


Hőmérséklet hatása: Fermi-gömb felszíne (Fermi-felület) elmosódik, $\sim k_B T$ energiával elektronok bentről kigerjesztődnek. Termikus egyensúlyban Fermi-Dirac-eloszlás

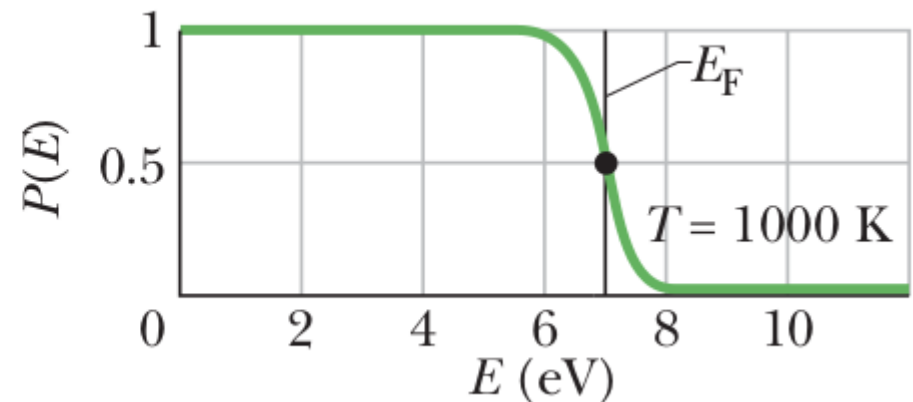
$$P(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$$

μ : kémiai potenciál $\approx E_F$ Fermi-energia

$T=0\text{K}$ hőmérséklet: éles határ betöltött és be nem töltött állapotok között



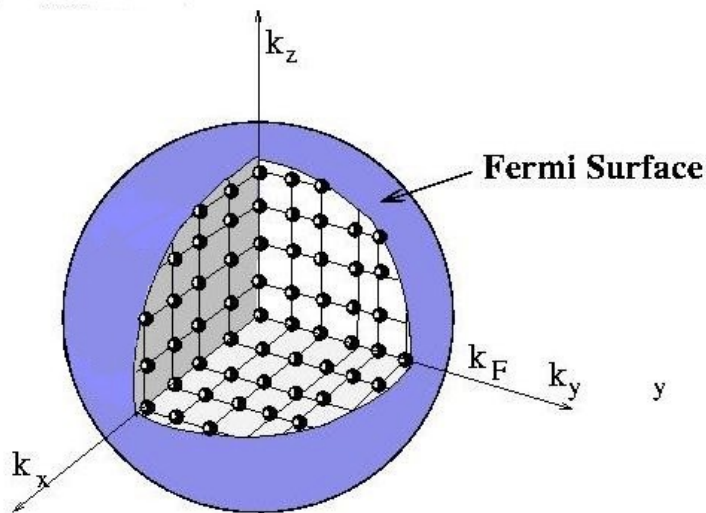
Hőmérséklet miatt a határ kiszélesedik, $k_B T$ tartományban (pl. $300\text{K} \rightarrow 25.9\text{ meV}$ kiszélesedés)



Sommerfeld-modell rövid összefoglalása

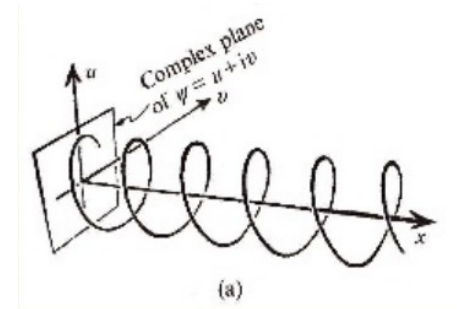
Drude-modell: fém=atomtörzsek között pattogó elektronok

Sommerfeld-modell: fém
= szabad (síkhullám) elektronok egy téglatest alakú potenciálgödörben
= Fermi-gömb



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

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



H-atom

Ha az elektron tömegét gondolatban 10-edrészére csökkentem, hányszorosára változik a H-atombeli elektron alapállapotú energiája?

- A) 10
- B) 100
- C) 1/10
- D) 1/100