

8. statisztikus fizika gyakorlat

0. Ideális kvantumgázok

- Állapotsűrűség: Tetszőleges fizikai mennyiség átlagos értékének meghatározásánál összegeznünk kell egy a Hilbert-téren vett tetszőleges bázis sajátállapotaira, amely során az adott mérhető mennyiség értékeit súlyozzuk az adott állapotok átlagos betöltési számaival, vagyis fermionok esetén a Fermi-függvénnyel, bozonok esetén a Bose-függvénnyel:

$$\langle F \rangle = \sum_{\mathbf{p}, s} \langle n(\mathbf{p}) \rangle F(\mathbf{p}), \quad \langle n(\mathbf{p}) \rangle \equiv \frac{1}{\exp(\beta(\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu)) + \Theta}, \quad (1)$$

ahol $\Theta = 1$ esetén $\langle n(\mathbf{p}) \rangle$ a Fermi-függvény, illetve $\Theta = -1$ esetén a Bose-függvény, amely megadja a vizsgált állapot (jelen esetben impulzus és spin sajátállapot) átlagos betöltési számát. Az előadáson tanultak alapján, az energia és impulzus közötti diszperziós reláció alapján, speciálisan $d = 3$ dimenzióban klasszikusan, $\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$, áttérhetünk az energia szerinti összegzésre, ami végsősoron az

$$\langle F \rangle = \int_0^\infty F(\varepsilon) \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle d\varepsilon \quad (2)$$

integrálra vezet, ahol először az impulzusokra való összegzésnél áttértünk a $\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{V}{h^3} \int d^3\mathbf{p}$ integrálásra (ahol V a vizsgált rendszer térfogata) és elvégeztük az $\varepsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ diszperziós reláció segítségével a ε energia szerinti integrálásra való áttérést:

$$\frac{Vg}{h^3} d^3\mathbf{p} = \frac{Vg}{h^3} 4\pi dp p^2 = \rho(\varepsilon) d\varepsilon \implies \rho(\varepsilon) = \frac{4\pi g V \sqrt{2m^3}}{h^3} \sqrt{\varepsilon} \equiv A\sqrt{\varepsilon}, \quad (3)$$

ahol $g = 2S + 1$ a spin állapotokhoz tartozó degenerációs szám, ha (legtöbbször ez az eset) spin függetlennek tételezzük fel a Hamilton operátort. Kiemelünk két fontos példát, az átlagos energia és az átlagos részecskeszámot megadó energia integrálokat:

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty \varepsilon \varrho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle d\varepsilon, \quad \langle N \rangle = \int_0^\infty \varrho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle d\varepsilon. \quad (4)$$

- Nagykanonikus potenciál: Az előadáson tanultak alapján ehhez először a \mathcal{Z} nagykanonikus állapotösszeget számítjuk ki a következő módon: először az egyes állapotok nagykanonikus állapotösszegeit adjuk meg, majd vesszük ezek szorzatát:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{n_j\}} e^{-\beta \sum_j (n_j \varepsilon_j - \mu n_j)} = \prod_j \sum_{n_j=0}^{n_{max}} e^{-\beta(n_j \varepsilon_j - \mu n_j)} = \prod_j \left(1 + \Theta e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)}\right)^\Theta, \quad (5)$$

ahol fermionok esetén ($\Theta = 1$) $n_{max} = 1$, az összegzést minden j állapot esetén csak az $n_j = 0, 1$ részecskeszámokra, illetve bozonok esetén ($\Theta = -1$) $n_{max} = \infty$, mivel tetszőleges számú részecske tartózkodhat egy adott állapotban. Véve a fenti kifejezés logaritmusát és ismét áttérve az energia szerinti integrálásra, a következő összefüggés adódik a nagykanonikus potenciálra:

$$\Phi = -\Theta k_B T \int_0^\infty \rho(\varepsilon) \ln\left(1 + \Theta e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}\right) d\varepsilon = -pV. \quad (6)$$

Parciálisan integrálva a kifejezést a peremtag eltűnik, illetve kihasználva, hogy d dimenzióban és

$\varepsilon(\mathbf{p}) = c|\mathbf{p}|^\gamma$ esetén $\rho(\varepsilon) = A\varepsilon^{d/\gamma-1}$, végeredményben a következő kifejezés adódik (lásd 10. előadás jegyzet):

$$\Phi = -\frac{\gamma}{d} \int_0^\infty \varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \implies pV = \frac{\gamma}{d} \langle E \rangle. \quad (7)$$

1. Klasszikus limesz kvantumkorrekciói

Határozzuk meg a nem relativisztikus S spinű, fermionikus ideális kvantumgáz állapotegyenletének, kémiai potenciáljának és nyomásának kvantumkorrekcióját a klasszikus limeszhez képest!

- Határozzuk meg az energia-állapotsűrűséget!
- Írjuk fel az átlagos részecskeszámot meghatározó integrált!
- Fejtsük ki a kémiai potenciált a részecskesűrűséggel a klasszikus limeszben.
- Fejtsük sorba vezetőrendben az átlagos részecskeszámot a klasszikus limesz körül a $e^{\beta\mu}$ szerint.
- Innen pedig határozzuk meg a kémiai potenciál sorfejtését vezetőrendi a klasszikus limesz körül a $n = \frac{\langle N \rangle}{V}$ részecskesűrűség függvényében.
- Ismételjük meg a fenti sorfejtést a nagykanonikus potenciál esetén is az előző feladatban levezetett összefüggés segítségével
- Ennek segítségével határozzuk meg a nyomás kvantumkorrekcióját a klasszikus limeszhez képest a részecskesűrűség függvényében.
- Tegyük ezt meg az átlagos energiára is!
- Határozzuk meg a kettő hányadosából az állapotegyenletet és annak kvantumkorrekcióit!

Most $\varepsilon = c\mathbf{p}^2$, az állapotsűrűség pedig (3). Célunk a klasszikus határeset vezetőrendbeli kvantum korrekcióinak kiszámítása. Ehhez először sorba fejtjük az egyes energiaállapotok átlagos részecskeszámait a klasszikus limesz körül, ahol a részecskék sűrűsége a kicsi paraméter, $n = \frac{\langle N \rangle}{V} \ll 1$, mivel ekkor a ritka gázban a kvantumos effektusok elhanyagolhatóak. Az előző előadáson láttuk, hogy az ideális gáz részecskesűrűsége $n = \frac{\langle N \rangle}{V} = g\lambda_T^{-3} e^{\beta\mu}$. Látható, hogy esetünkben a megfelelő "kicsi" paraméter nem más mint $n \sim e^{\beta\mu} \ll 1$. $\langle n(\varepsilon) \rangle \approx e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}$ (ami a klasszikus Boltzmann-súllyal azonosítható). A kvantumos hatások vezetőrendbeli korrekciójához tehát úgy juthatunk el, ha $e^{\beta\mu}$ szerinti sorfejtésben megadjuk a következő tagot is:

$$f(\varepsilon) = \frac{e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \approx e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} (1 - e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu}). \quad (8)$$

A fenti sorfejtést behelyettesítve a részecske számot megadó energiaállapotokon végig menő integrálba és felhasználva a gamma-függvény definícióját

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt, \quad (9)$$

a következő adódik:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \approx \frac{gAV}{h^3} \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} (e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} - e^{-2\beta\varepsilon} e^{2\beta\mu}) d\varepsilon \\ &= \frac{gAV}{h^3} \left(e^{\beta\mu} \beta^{-3/2} \underbrace{\Gamma(3/2)}_{\sqrt{\pi}/2} - e^{2\beta\mu} (2\beta)^{-3/2} \Gamma(3/2) \right) \\ &= gV\lambda_T^{-3} e^{\beta\mu} \left(1 - \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu} \right), \end{aligned} \quad (10)$$

ahol ismét bevezettük a $\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}}$ termikus hullámhosszot. Ennek a mennyiségnek a függvényében

$$e^{\beta\mu_{kl}} = \frac{\lambda_T^3 \langle N \rangle}{gV} \equiv \frac{\lambda_T^3 n}{g} \quad (11)$$

Most megadjuk a kémiai potenciál kvantum korrekcióját is. Ehhez osszuk át a (10) egyenletet $(1 - \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu})$ -vel, majd ezt fejtjük sorba vezetőrendig a kis paraméter, $e^{\beta\mu} \ll 1$ szerint

$$\frac{\langle N \rangle}{1 - \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu}} \approx \langle N \rangle \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu} \right) = \frac{gV}{\lambda_T^3} e^{\beta\mu} \quad (12)$$

Innen már kitudjuk fejezni a kémiai potenciált a kicsi paraméter, $n\lambda_T^3 = \frac{\langle N \rangle}{V} \lambda_T^3$, függvényében:

$$e^{\beta\mu} = \frac{n\lambda_T^3}{g - \frac{1}{2^{3/2}}n\lambda_T^3} = \frac{\lambda_T^3 n}{g} + \frac{1}{2^{3/2}g^2} (\lambda_T^3 n)^2 = e^{\beta\mu_{\text{kl}}} + e^{\beta\delta\mu} \quad (13)$$

Vagy maguknak a kémiai potenciáloknak a nyelvén

$$\beta\mu \approx \ln\left(\frac{\lambda_T^3 n}{g}\right) + \ln\left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} \frac{\lambda_T^3 n}{g}\right) \approx \ln\left(\frac{\lambda_T^3 n}{g}\right) + \frac{1}{2^{3/2}} \frac{\lambda_T^3 n}{g} = \beta\mu_{\text{kl}} + \beta\delta\mu \quad (14)$$

ahonnan $\beta\delta\mu = \frac{1}{2^{3/2}} \frac{\lambda_T^3 n}{g}$.

Most nézzük a nagykanonikus potenciál általános alakját:

$$\begin{aligned} \Phi &= -\frac{2}{3} \frac{gAV}{h^3} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{3/2} f(\varepsilon) \approx -\frac{2}{3} \frac{gAV}{h^3} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{3/2} (e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} - e^{-2\beta\varepsilon} e^{2\beta\mu}) \\ &= -\frac{2}{3} \frac{gAV}{h^3} \left(e^{\beta\mu} \beta^{-5/2} \underbrace{\Gamma(5/2)}_{3\sqrt{\pi}/4} - e^{2\beta\mu} (2\beta)^{-5/2} \Gamma(5/2) \right) \\ &= -gV\lambda_T^{-3} k_B T e^{\beta\mu} \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} e^{\beta\mu} \right) = -pV. \end{aligned}$$

A klasszikus nyomás a fenti kifejezés első tagja, míg a másodikat sorba fejtjük ismét az $e^{\beta\mu}$ kis paraméter szerint, illetve még az $e^{\beta\mu}$ -nek is vennünk kell a klasszikus limesz körüli sorfejtését.

$$\begin{aligned} p &= g\lambda_T^{-3} k_B T e^{\beta\mu} \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} e^{\beta\mu} \right) = \frac{\langle N \rangle k_B T}{V} \frac{1 + \frac{1}{2^{5/2}} e^{\beta\mu}}{1 - \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu}} \approx p_{\text{kl}} \left(1 - \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}} \right) e^{\beta\mu} \right) \\ &\approx p_{\text{kl}} \left(1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}} \right) e^{\beta\mu_{\text{kl}}} \right) = p_{\text{kl}} + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}} \right) k_B T \frac{\lambda_T^3 n^2}{g}, \end{aligned} \quad (15)$$

ahol $p_{\text{kl}} = \frac{\langle N \rangle k_B T}{V}$

Most nézzük meg ugyanezt az átlagos energia segítségével is:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^\infty \varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \approx g \frac{VA}{h^3} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} (e^{-\beta\varepsilon} e^{\beta\mu} - e^{-2\beta\varepsilon} e^{2\beta\mu}) d\varepsilon \\ &= g \frac{VA}{h^3} \left(e^{\beta\mu} \beta^{-5/2} \underbrace{\Gamma(5/2)}_{3\sqrt{\pi}/4} - e^{2\beta\mu} (2\beta)^{-5/2} \Gamma(5/2) \right) \\ &= \frac{3}{2} gV\lambda_T^{-3} e^{\beta\mu} k_B T \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} e^{\beta\mu} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

A releváns közelítések hányadosából az egy részecskére jutó átlagos energia

$$\frac{\langle E \rangle}{\langle N \rangle} \approx \frac{3}{2} k_B T \frac{1 - \frac{1}{2^{5/2}} e^{\beta\mu}}{1 - \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu}} \approx \frac{3}{2} k_B T \left(1 - \frac{1}{2^{5/2}} e^{\beta\mu} \right) \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} e^{\beta\mu} \right) \approx \frac{3}{2} k_B T \left[1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}} \right) e^{\beta\mu} \right] \quad (17)$$

ahol az első tag ismét a klasszikus eredmény, így a második tag a vezető kvantumkorrekció. Ez utóbbi tag pedig ugyancsak vezető rendben $e^{\beta\mu}$ nulladrendű közelítéséből következik, vagyis vezető rendben

$$\frac{\langle E \rangle}{\langle N \rangle} \approx \frac{3}{2} k_B T \left[1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}} \right) e^{\beta\mu_{\text{kl}}} \right] = \frac{3}{2} k_B T \left[1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}} \right) \frac{\lambda_T^3 \langle N \rangle}{g V} \right]. \quad (18)$$

Az állapotegyenlet viszont a 2. feladat állításának értelmében

$$pV = \frac{\gamma}{d} \langle E \rangle = \frac{2}{3} \frac{\langle E \rangle}{\langle N \rangle} \langle N \rangle \approx \langle N \rangle k_B T \left[1 + \left(\frac{1}{2^{3/2}} - \frac{1}{2^{5/2}} \right) \frac{\lambda_T^3 \langle N \rangle}{g V} \right]. \quad (19)$$

Az első tag a klasszikus állapotegyenletet adná, a második tag ehhez a vezető kvantumkorrekció. Látható, hogy visszakaptuk a korábbi nagykanonikus potenciál segítségével levezetett eredményt, kiemelendő, hogy fermionikus természet miatt láthatóan érvényesül, hogy

$$p_{kl} < p_F, \quad (20)$$

vagyis fermion-gázok nyomása nagyobb, mint az azonos sűrűségű klasszikus gázé. Ezt a tendenciát szokás a kvantumgázok által kifejtett effektív taszításnak illetve effektív vonzásnak tulajdonítani.

2. Grafén sávsszerkezete alacsony hőmérsékleten

A grafén egy kétdimenziós, tiltott sáv nélküli félvezető. Megmutatható (például szoros kötésű közelítést felhasználva), hogy a Brillouin-zónában két nemekvivalens Dirac-pont van, amelyekben az energiasávok csúcuknál illeszkedő kúpokat alkotnak, azaz a diszperzió lineáris: $|\varepsilon(\mathbf{p})| = c|\mathbf{p} - \mathbf{p}_0|$ (a c meredekség mindkét Dirac-pontban ugyanaz). A semleges grafénben a Fermi-energia a Dirac-pontoknak megfelelő 0 energián van (a Fermi-energia alatti alsó elektronsáv teljesen be van töltve). Külső feszültség hatására azonban elektronok jelennek meg a felső sávban, azaz a Fermi-energia pozitív lesz. Az ennek a sávsszerkezetnek megfelelő kétdimenziós ultrarelativisztikus elektrongázt vizsgáljuk alacsony hőmérsékleten.

- (a) Alapállapotban az $\varepsilon_F = 0$ Fermi-energiáig töltve van minden állapot. Mi történik kvalitatíven a betöltésekkel, ha elkezdjük megemelni a hőmérsékletet?
 - (b) Egyetlen $\varepsilon(\mathbf{p}) = c|\mathbf{p} - \mathbf{p}_0|$ sávot figyelembe véve mekkora az ε energiájú állapot degenerációja?
 - (c) Határozzuk meg a $\rho(\varepsilon)$ állapotssűrűséget! Milyen az energiafüggés?
 - (d) Határozzuk meg nulla hőmérsékleten a kémiai potenciál (Fermi-energia) és a felső sávban lévő elektronsűrűség közötti kapcsolatot!
 - (e) Ismételjék át a Bethe–Sommerfeld sorfejtés lépéseit!
 - (f) A részecskeszámra felírt Bethe–Sommerfeld-sorfejtésből határozzuk meg a kémiai potenciál hőmérsékletfüggését $k_B T \ll \mu$ esetén!
 - (g) Határozzuk meg az átlagos energia hőmérsékletfüggését!
 - (h) Határozzuk meg az alacsony hőmérsékleti hőkapacitást! Milyen a hőmérsékletfüggés?
- (a) A Dirac-pontokban, a pontok kicsi környezetében jó közelítéssel kúpot alkot a diszperziós reláció. $T = 0$ hőmérsékleten csak az alsó kúp állapotai vannak betöltve, míg $T \neq 0$ hőmérsékleten a Fermifüggvény kiszélesedik a Dirac-pont körül és a felső kúpon is lesznek betöltött állapotok.
- (b) Elektronokról lévén szó, $S = \frac{1}{2} \rightarrow g = 2$, de mivel kettő nem-ekvivalens Dirac pontot vizsgálunk, és mindekkettő ugyanazzal a diszperziós relációval írható le közelítőleg \rightarrow a teljes degenerancia $2g = 4$. Mivel vizsgálódásunkat mostantól erre a tartományra összpontosítjuk, érdemes a spin degenerációs faktort $g = 4$ -el azonosítani.
- (c) Állapotsűrűség:
Mivel két dimenziós rendszerről van szó, egyszerűen felírjuk az infinitezimális térfogatok közötti egyenlőséget, felhasználva, hogy a Dirac-pontok környezetében érvényes az ultrarelativisztikus közelítés.

$$\rho(\varepsilon) d\varepsilon = g \frac{A}{h^2} 2\pi p dp, \quad (21)$$

ahol A a vizsgált minta felülete. Ezt követően kihasználva, hogy $\frac{dp}{d\varepsilon} = \frac{1}{c}$, a következő adódik az állapotssűrűsége:

$$\rho(\varepsilon) = g \frac{A}{h^2} \frac{2\pi}{c^2} \varepsilon \equiv B\varepsilon. \quad (22)$$

- (d) Kémiai potenciál és a felső sávban lévő elektronok $\langle N \rangle$ átlagos száma közötti kapcsolat, $T = 0$ hőmérsékleten:

$$\langle N \rangle_{T=0} = \int_0^\infty d\varepsilon \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \rho(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon B\varepsilon = B \frac{\varepsilon_F^2}{2}, \quad (23)$$

mivel $T = 0$ hőmérsékleten a kémiai potenciál megegyezik a Fermi energiával, $\varepsilon_F = \mu$. Innen már könnyen kifejezhetjük a kémiai potenciált/Fermi energiát, használva a B paraméter definícióját:

$$\varepsilon_F = \sqrt{\frac{h^2 c^2 \langle N \rangle_{T=0}}{g\pi} \frac{1}{A}}. \quad (24)$$

- (e) Bethe–Sommerfeld sorfejtés:

Tekintsünk egy tetszőleges függvényt, $r(\varepsilon)$, majd végezzünk el egy parciális integrálási lépést:

$$\int_0^\infty d\varepsilon r(\varepsilon) f(\varepsilon) = R(\varepsilon)f(\varepsilon)\Big|_0^\infty + \int_0^\infty d\varepsilon R(\varepsilon) \frac{\beta}{4 \cosh^2\left(\frac{\beta(\varepsilon-\mu)}{2}\right)}, \quad R(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon d\varepsilon' r(\varepsilon'). \quad (25)$$

Az első tag zérus, a másodiknál térjünk át az $\omega = \varepsilon - \mu$ változóra és fejtjük sorba $R(\varepsilon)$ -t μ körül másodrendig:

$$\int_{-\mu}^\infty d\omega \left[R(\mu) + R'(\mu)\omega + \frac{1}{2}R''(\mu)\omega^2 \right] \frac{\beta}{4 \cosh^2\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)}. \quad (26)$$

Ekkor alacsony hőmérsékleten $k_B T \ll \mu$, az integrálási határok vehetőek végtelenben, mivel az $1/\cosh^2(\beta\omega)$ ekkor gyorsan levágja az integrandust. Ekkor az első rendű tag kiesik, a megmaradó tagok pedig a következőt adják:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\varepsilon r(\varepsilon) f(\varepsilon) &\approx \int_{-\infty}^\infty d\omega \left[R(\mu) \frac{\beta}{4 \cosh^2\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)} + R''(\mu)\omega^2 \frac{\beta}{8 \cosh^2\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)} \right] \\ &= R(\mu) + R''(\mu)(k_B T)^2 \int_{-\infty}^\infty \frac{x^2}{8 \cosh^2\left(\frac{x}{2}\right)} dx = \int_{-\infty}^\mu d\varepsilon r(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} r'(\mu)(k_B T)^2 \end{aligned} \quad (27)$$

- (f) Kémiai potenciál hőmérsékletfüggése a $k_B T \ll \mu$ alacsony hőmérsékletű limeszben.

A Bethe-Sommerfeld sorfejtés segítségével most felírjuk az átlagos részecskeszámot a kis hőmérsékletű limeszben:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \int_0^\infty d\varepsilon \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle \approx \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \rho(\varepsilon) + \int_{\varepsilon_F}^\mu d\varepsilon \rho(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho'(\mu) \approx \dots \\ \dots &\approx \langle N \rangle_{T=0} + (\mu - \varepsilon_F) \rho(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho'(\varepsilon_F), \end{aligned} \quad (28)$$

ahol a derivált állapotsűrűség igazából csak szemléletesen rendelkezik argumentummal, hiszen esetünkben ez egy konstans. Felhasználva, hogy a részecskeszám nem függhet a hőmérséklettől és átrendezve az utolsó összefüggést, a következő kifejezés adódik a kémiai potenciálra:

$$\mu \approx \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\rho'(\varepsilon_F)}{\rho(\varepsilon_F)} = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]. \quad (29)$$

- (g) Energia hőmérsékletfüggése:

A részecskeszámhoz hasonlóan ismét kiszámítjuk $T = 0$ hőmérsékleten a felső sáv elektronjainak átlagos energiáját, ahol ismét kihasználjuk, hogy a Fermi függvény ε_F -ig konstans 1, azon felül pedig zérus, illetve ismét, mivel a diszperziós relációban az impulzus nagysága jelenik meg, az energia, $\varepsilon > 0$, nem vehet fel negatív értékeket.

$$\langle E \rangle_{T=0} = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon B \varepsilon^2 = g \frac{A}{h^2} \frac{2\pi}{3c^2} \varepsilon_F^3. \quad (30)$$

Ennek ismeretében ismét használva a Bethe-Sommerfeld sorfejtést, illetve felhasználva a kémiai potenciálra kapott alacsony hőmérsékletű (29) kifejezést, felírhatjuk az átlagos energia hőmérsékletfüggését, a $k_B T \ll \mu$ alacsony hőmérsékletű limeszben:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_0^\infty d\varepsilon \underbrace{\varepsilon \rho(\varepsilon)}_{r(\varepsilon)} f(\varepsilon) \\ &\approx \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) + \underbrace{(\mu - \varepsilon_F) \varepsilon_F \rho(\varepsilon_F)}_{-\frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \underbrace{[\rho(\varepsilon_F) + \varepsilon_F \rho'(\varepsilon_F)]}_{r'(\varepsilon_F) = 2\rho(\varepsilon_F)} = \dots \\ \dots &= \langle E \rangle_{T=0} - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \rho(\varepsilon_F) = \langle E \rangle_{T=0} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho(\varepsilon_F). \end{aligned} \quad (31)$$

- (h) Ennek ismeretében meghatározhatjuk a hőkapacitás alacsony hőmérsékletű viselkedését, ahol csak behelyettesítjük a definíciót az alacsony hőmérsékletű limeszben kapott eredményre:

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \approx \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \rho(\varepsilon_F) T \propto T. \quad (32)$$

3. Pauli-féle paramágneses szuszceptibilitás

Tekintsük a háromdimenziós (és nem relativisztikus) szabad elektrongázt külső B mágneses térben!

- Írjuk fel (z irányú mágneses teret feltételezve) a kétféle spinvetületű elektronok E_{\pm} energiáját!
 - Határozzuk meg adott hőmérséklet és kémiai potenciál mellett a kétféle spinvetületű elektronok N_{\pm} darabszámát!
 - Számoljuk ki az M átlagos mágnesezettséget!
 - Magas hőmérsékleten milyen a χ szuszceptibilitás hőmérsékletfüggése?
 - Mit mondhatunk ugyanerről alacsony hőmérsékleten?
- (a) A Pauli tag az egyrészecske Hamilton operátorban:

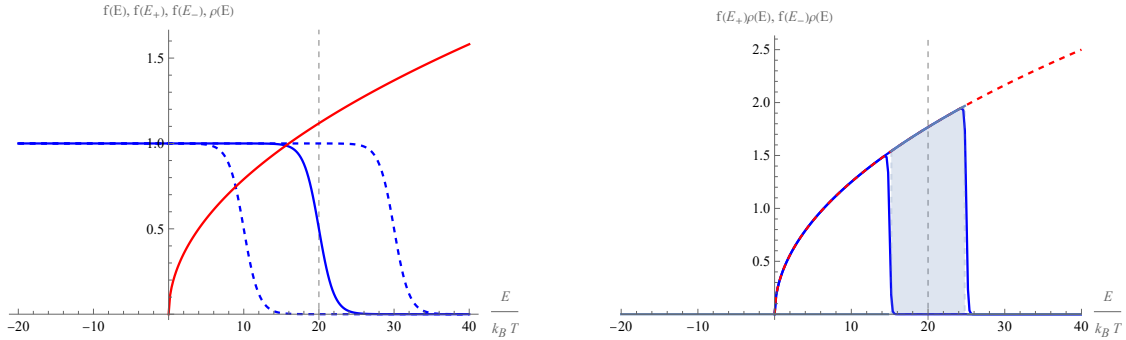
$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{\mu_B B}{\hbar} \hat{S}_z, \quad (33)$$

ahonnan a korábbi ε energiák $\mp \frac{\mu_B B}{2}$ -vel fognak eltolódni, azaz $E_{\pm} = \varepsilon \mp \frac{\mu_B B}{2}$

- (b) Most tekintsük a mágneses tér nélküli állapotsűrűséget, $\rho_0(\varepsilon)$, ami azt adja meg, hogy milyen sűrűn vannak az állapotok ε energia körül. Ha bekapcsoljuk a mágneses teret és eltoljuk az eredeti energiákat, akkor ennek megfelelően kell eltolnunk az állapotsűrűség argumentumát, $\rho_0(\varepsilon) \rightarrow \frac{1}{2}\rho_0(E_{\pm})$, ahol az $\frac{1}{2}$ faktor az eredetileg 2-szeres spin degeneráció felhasadása miatt jelent meg. Az adott fel és le spin állapotú elektronok számában ekkor az eltoló állapotsűrűség fog megjelenni, viszont a Fermi-függvényben továbbra is az eredeti, tér nélküli energiákat kell tekintenünk. Teljesen analóg módon megtehetjük azt is, hogy maradunk az eredeti állapotsűrűségnél, viszont ekkor cserébe a Fermi függvényben kell eltolnunk a 'másik irányba' az energiákat, ami egyszerűen az előző felírásban csak egy integrál változó cseréjeként felel meg. Ekkor

$$N_{\pm} = \int d\varepsilon \frac{1}{2} \rho_0(E_{\pm}) f(\varepsilon - \mu) \equiv \int d\varepsilon \frac{1}{2} \rho_0(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon \pm \mu_B B/2 - \mu)} + 1}, \quad (34)$$

ahol az utolsó eredmény úgy is értelmezhető, mint szabad elektronok egy effektív kémiai potenciál jelenlétében, $\mu_{\pm} = \mu \pm \mu_B B/2$. Bár jelenleg általános állapotsűrűséggel dolgozunk, háromdimenziós nemrelativisztikus elektronok esetén $\rho_0(\varepsilon) = 2 \frac{4\pi V \sqrt{2m^3}}{h^3} \sqrt{\varepsilon}$, ha $\varepsilon > 0$. Itt pontosan a gyökjel alatt lévő energiák fognak eltolódni E_{\pm} -el, illetve az eredetileg meglévő $g = 2$ spindegenerációs faktor is eltűnik, mivel spinfüggő lesz a Hamilton operátor!



1. ábra. Bal oldali ábra: az ellentétes spinű állapotokban lévő részecskék $\rho(\varepsilon)$ állapotszáma és az $f(E_{\pm})$ Fermi-függvények eltolódása a mágneses tér hatására véges T hőmérsékleten. Jobb oldali ábra: A kétféle spinű állapotok állapotszámának és betöltési számának szorzata, azaz az adott irányba mutató részecskék száma az energia függvényében. A kitöltött terület a felfelé és lefelé mutató spinek számának különbségét adja meg. A skálák csak tájékoztató jellegűek.

- (c) Az átlagos mágnesezettség sűrűség a korábban tanultak alapján:

$$M = \mu_B \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}. \quad (35)$$

Eddig teljesen általánosan dolgoztunk, mostantól a korábban is felírt állapotsűrűséggel fogunk tovább dolgozni, $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$, illetve $\rho_0(\varepsilon) = 2 \frac{4\pi V \sqrt{2m^3}}{h^3} \sqrt{\varepsilon} \equiv A\sqrt{\varepsilon}$, ha $\varepsilon > 0$. Ekkor a következő adódik a számunkra releváns számlálóra a mágnesezettség kifejezésében:

$$N_+ - N_- = \frac{A}{2} \int_0^{\infty} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu_B B/2 - \mu)} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon + \mu_B B/2 - \mu)} + 1} \right) \quad (36)$$

- (d) Most a magas hőmérsékletű limeszben, szokásos módon az $e^{\beta\mu} \ll 1$ kis paraméter segítségével $\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon \mp \mu_B B/2 - \mu)} + 1} \approx e^{-\beta(\varepsilon \mp \mu_B B/2 - \mu)}$, ahonnan a mágnesezettség egyszerűen

$$M = \mu_B \tanh(\beta\mu_B B/2). \quad (37)$$

Erre az egyszerű eredmény úgy jutottunk el, hogy kihasználtuk, hogy a részecskeszámokban lévő integrál $N_{\pm} = A \int_0^{\infty} d\varepsilon \sqrt{\varepsilon} e^{-\beta(\varepsilon \mp \mu_B B/2 - \mu)} = A \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\beta\mu} e^{\pm\beta\mu_B B/2}$ ugyanolyan konstansokat tartalmaz mind a nevezőben, mind a számlálóban, amik így kiegyeszerűsödnek és csak az exponenciálisok maradnak meg. Ekkor a szuszceptibilitáshoz legegyszerűbben a $\tanh(x) = x + o(x^3)$ elsőrendű közelítéssel jutunk el,

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial B} \right|_{B=0} = \beta\mu_B^2/2, \quad (38)$$

ami a Curie-szuszeptibilitás.

- (e) Az alacsony hőmérsékletű limeszben használjuk a Bethe-Sommerfeld sorfejtést a $\mu_{\pm} = \mu \pm \mu_B B/2$ kémiai potenciálok nyelvén

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^y f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{\mu^{y+1}}{y+1} \left[1 + \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \binom{y+1}{2} \frac{\pi^2}{3} + \dots \right] \quad (39)$$

$$\xrightarrow{y=1/2} = \frac{2}{3} \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right], \quad (40)$$

azaz a számláló a mágnesezettség kifejezésében

$$N_+ - N_- = \frac{A}{3} \left(\mu_+^{3/2} - \mu_-^{3/2} + \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{8} (\mu_+^{-1/2} - \mu_-^{-1/2}) \right). \quad (41)$$

Most a szuszceptibilitás meghatározásához a fenti kifejezés vezetőrendbeli sorfejtésére van szükségünk a kisterű limeszben, ahol továbbra is $\mu_{\pm} = \mu \pm \mu_B B/2$:

$$N_+ - N_- \approx \frac{A}{6} \left(3\mu^{1/2} \mu_B - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{8\mu^{3/2}} \mu_B \right) B. \quad (42)$$

Az átlagos mágnesezettség ekkor a következő:

$$M = \frac{A\mu_B^2}{6N} \left(3\varepsilon_F^{1/2} - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{8\varepsilon_F^{3/2}} \right) B, \quad (43)$$

ahol az utolsó lépésben átírhattunk minden μ kémiai potenciált a Fermi energiára, mivel a köztük lévő eltérés kicsi T -ben, $\mu_{\pm} - \varepsilon_F \sim (k_B T)^2$. Vagyis az alacsony hőmérsékletű szuszceptibilitás:

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial B} \right|_{B=0} = \frac{A\mu_B^2}{N} \left(\frac{\varepsilon_F^{1/2}}{2} - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{48\varepsilon_F^{3/2}} \right). \quad (44)$$

A $T = 0$ esetben a teljes szuszceptibilitás

$$N\chi(T=0) = \frac{1}{2} \rho_0(\varepsilon_F) \mu_B^2, \quad (45)$$

mely az 1. ábra alapján a következőképp szemléltethető: Elegendően kis hőmérséklet és mágneses tér esetén a felfelé és lefelé mutató spinek számának különbsége (a sátirozott terület) $\rho(\varepsilon_F) \mu_B B$, és minden nem kompenzált felfelé mutató spin μ_B járulékot ad a teljes mágnesezettséghez. Összeszorozva és B szerint deriválva adódik (45).