

9. statisztikus fizika gyakorlat

1. 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 csúcsuknál 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 $\rho(\varepsilon)$ állapotsűrűséget! 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 kőkapacitást! Milyen a hőmérsékletfüggés?
- (a) A Dirac pontokban, ahol a pontok kicsi környezetében jó közelítéssel kúpot alkotnak és így érvényes az ultrarelativisztikus közelítés. Elektronokról réven szó, $S = \frac{1}{2} \rightarrow g = 2$, de mivel kettő nem-ekvivalens Dirac pontot vizsgálunk, és mindeketty ugyanazzal diszperziós relációval írható le közelítőleg \rightarrow a teljes degenerancia $g^2 = 4$. Mivel vizsgálódásunkat mostantól erre a tartományra összpontosítjuk, érdemes a spin degenerációs faktort $g = 4$ -el azonosítani.
- (b) Állapotsűrűség:
Mivel két dimenziós rendszerről van szó, egyszerűen felírjuk az infinitezimális térfogatok közötti egyenlőséget:

$$\rho(\varepsilon) d\varepsilon = g \frac{A}{h^2} 2\pi p dp, \quad (1)$$

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

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

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

$$\langle N \rangle_{T=0} = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \rho(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon B\varepsilon = B \frac{\varepsilon_F^2}{2}, \quad (3)$$

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:

$$\varepsilon_F = \sqrt{\frac{h^2 c^2 \langle N \rangle_{T=0}}{g\pi} \frac{1}{A}}. \quad (4)$$

(d) Bethe–Sommerfeld sorfejtés:

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

$$\int_0^\infty d\varepsilon r(\varepsilon) f(\varepsilon) = R(\varepsilon)f(\varepsilon)\Big|_0^\infty + \int_0^\infty d\varepsilon R(\varepsilon) \frac{\beta}{4 \cosh^2(\beta(\varepsilon - \mu))}, \quad R(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon d\varepsilon' r(\varepsilon'). \quad (5)$$

Míg az első tag zérus a másodikonál térjünk át az $\omega = \varepsilon - \mu$ változóra és fejtsük sorba $R(\varepsilon)$ -t μ körül másodrendig:

$$\int_{-\mu}^\infty d\omega [R(\mu) + R'(\mu)\omega + R''(\mu)\omega^2] \frac{\beta}{4 \cosh^2(\beta\omega)}. \quad (6)$$

Ekkor alacsony hőmérsékleten $k_B T \ll \mu$, az integrálási határok vehetőek végtelenben, aminek következtében az első rendű tag kiesik a megmaradó tagok pedig a következők adják:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^\infty d\varepsilon r(\varepsilon) f(\varepsilon) &\approx \int_{-\infty}^\infty d\omega R(\mu) \frac{\beta}{4 \cosh^2(\beta\omega)} + R''(\mu)\omega^2 \frac{\beta}{8 \cosh^2(\beta\omega)} \\ &= R(\mu) + R''(\mu)(k_B T)^2 \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{8 \cosh^2(x)} = \int_{-\infty}^\mu d\varepsilon r(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} R''(\mu)(k_B T)^2 \end{aligned} \quad (7)$$

(e) 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:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \int_{-\infty}^\infty d\varepsilon \rho(\varepsilon) \langle n(\varepsilon) \rangle \approx \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \rho(\varepsilon) + \int_{\varepsilon_F}^\mu d\varepsilon \rho(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho'(\mu) \approx \dots \\ \dots &\approx \langle N \rangle_{T=0} + (\mu - \varepsilon_F) \rho(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho'(\varepsilon_F), \end{aligned} \quad (8)$$

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:

$$\mu \approx \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\rho'(\varepsilon_F)}{\rho(\varepsilon_F)} = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]. \quad (9)$$

(f) 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 lehet negatív értékeket.

$$\langle E \rangle_{T=0} = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon B \varepsilon^2 = g \frac{A}{h^2} \frac{2\pi}{3c^2} \varepsilon_F^3. \quad (10)$$

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

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &\approx \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) + (\mu - \varepsilon_F) \varepsilon_F \rho(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 [\rho(\varepsilon_F) + \varepsilon_F \rho'(\varepsilon_F)] = \dots \\ \dots &= \langle E \rangle_{T=0} - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \rho(\varepsilon_F) = \langle E \rangle_{T=0} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \rho(\varepsilon_F). \end{aligned} \quad (11)$$

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

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \approx \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \rho(\varepsilon_F) T \propto T. \quad (12)$$

5. Fotongáz, mint lineáris diszperziójú ideális bozonrendszer

- (a) Fotongáz esetén a következő megfeleltetéssel élünk: T hőmérsékleten $\mu = 0$ kémiai potenciálú ideális bozongáznak tekintjük. Erre a következő formális magyarázat adható, a fotongázban a részecskék száma külső forrás hiányában sem állandó (ez úgy értelmezhető, mint a fotonok egy saját számunkra jelenleg irreleváns megfontolásból származó sajátosságának), viszont egyensúlyban az az állapota valósul meg a fotongáznak, ahol a szabadenergiának minimuma van, ami a

$$\frac{\partial F}{\partial N} = 0 = \mu \quad (13)$$

egyenletre vezet, ha a szabadenergia részecskeszám szerinti szélsőértékét vizsgáljuk. A diszperziós relációt a következő alakban írhatjuk fel:

$$\varepsilon = c|\mathbf{p}|, \quad (14)$$

továbbá kihasználva kihasználva tudásunkat a fotonok energiája és a frekvenciája közötti összefüggésről, $\varepsilon = h\nu$, kifejezhetjük a impulzust az frekvencia segítségével, $|\mathbf{p}| = \frac{h\nu}{c}$.

- (b) Planck-féle sugárzási törvény:

Célunk $[\nu, \nu + d\nu]$ frekvencia ablakban található állapotok számának megadása és így az energia (egyséni térfogatra jutó hányadának) spektrális sűrűségének kifejezése. Ehhez először felírjuk az átlagos részecskeszámot, azaz a Bose-függvényt, most a frekvenciával paraméterezve:

$$\langle n(\nu) \rangle = \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1}. \quad (15)$$

Majd a "szokásos módon" felírjuk az infinitezimális impulzus térbeli térfogatelembe eső állapotok számát, ahol áttérünk gömbi-koordinátákra és használjuk az impulzus és frekvencia közötti összefüggést, $|\mathbf{p}| = \frac{h\nu}{c}$:

$$d\langle N(\nu) \rangle = \frac{8\pi V}{c^3} \frac{\nu^2}{e^{\beta h\nu} - 1} d\nu, \quad (16)$$

ahol expliciten figyelembe vettük, hogy fotonok esetén $g = 2$, mivel két lehetséges polarizációjú állapot valósul meg adott energián. Ennek ismeretében a térfogategységre jutó energiasűrűséget úgy kapjuk meg, hogy a fenti kifejezést súlyozzuk az adott ν frekvenciájú állapotot a hozzátartozó energiával, $\varepsilon(\nu) = h\nu$:

$$\frac{d\langle E(\nu) \rangle}{V} = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\beta h\nu} - 1} d\nu \equiv u(\nu) d\nu, \quad (17)$$

ahol $u(\nu)$ a spektrális sűrűség, a fenti egyenlet pedig a **Planck-féle sugárzási törvény, (1900)**.

Érdekes megvizsgálni, hogy hol éri el ez az eloszlás a maximumát, vagyis milyen frekvencián legintenzívebb a sugárzás. Ehhez vennünk kell az eloszlás deriváltját és meg kell néznünk, milyen frekvencián válik zérussá. Összességében tehát az $\frac{x^3}{e^x - 1}$ típusú függvény maximumát kell megtalálnunk. A deriválás elvégzése után a következő egyenlet adódik:

$$\frac{3x^2}{e^x - 1} - \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} = 0 \rightarrow 3 - 3e^{-x} = x, \quad (18)$$

amely egy transzcendens egyenlet, nem oldható meg zárt alakban, viszont numerikusan igen, amiből közelítőleg $x \approx 2.82$, visszaírva az eredeti változókat, látható hogy $x = \beta h\nu \rightarrow h\nu_{max} \approx 2.82k_B T$. Ez az eredmény először Wilhelm Wien által lett kimutatva, ez a **Wien-féle eltolódási törvény**. Továbbá érdemes megvizsgálni a kis és a nagy frekvenciás határeseteket, először az előbbivel kezdünk. Ha $\nu \ll 1$, a nevezőt vezetőrendben sorbafejtve az kiesik a számláló által, ahol végső soron $\sim \nu^2$ marad:

$$u(\nu) \approx \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2. \quad (19)$$

Ez nem más mint a klasszikus határeset, a **Rayleigh-Jeans törvény**, ami klasszikusan a következő módon értelmezhető: $\frac{8\pi}{c^3} \nu^2 d\nu$ adja meg a $[\nu, \nu + d\nu]$ ablakba eső klasszikus egydimenziós harmonikus oszcillátorok számát, illetve az ekvpartívió tételnek megfelelően minden oszcillátor $k_B T$ energia járulékkal rendelkezik.

Most megvizsgáljuk a nagy frekvenciás limeszt, $\nu \gg 1$. Ekkor a domináns tag az exponenciális kifejezés, $e^{\beta h\nu} \gg 1$, melyet kiemelünk a nevezőből és a reciprokát használjuk mint "kis paramétert", azaz $\frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1} = e^{-\beta h\nu} + e^{-2\beta h\nu} + \dots \approx e^{-\beta h\nu}$ vezetőrendben. Összességében pedig a következőt kapjuk a spektrális sűrűségre:

$$u(\nu) \approx \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h\nu e^{-\beta h\nu}. \quad (20)$$

Ez a **Wien-féle sugárzási törvény**, amit úgy interpretálhatunk, hogy a fotonok klasszikus, $\varepsilon(\nu) = h\nu$ diszperziós relációval rendelkező, részecskék, amik Boltzmann-eloszlás követnek, ahol ismét $\frac{8\pi}{c^3}\nu^2$ az energia/frekvencia szerinti állapotsűrűség.

(c) Átlagos részecskeszám és átlagos energia:

Definíció szerint felírjuk az átlagos energiát és részecskeszámot definiáló energia, illetve ez esetben frekvencia integrálokat. Először bevezetjük új integrálási változónak a $\eta = \beta h\nu$. Az energia átlagos értékének vizsgálatával kezdünk:

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty d\nu u(\nu) = \frac{8\pi V (k_B T)^4}{c^3 h^3} \int_0^\infty d\eta \frac{\eta^3}{e^\eta - 1}, \quad (21)$$

ahol az utolsó integrál értéke $\Gamma(4)\zeta(4) = \frac{\pi^4}{15}$, ami összességében a következő eredményt adja az egységnyi térfogatra viszonyított energiára:

$$\frac{\langle E \rangle}{V} = \frac{4}{c} \sigma T^4, \quad (22)$$

ami a **Stefan-Boltzmann törvény**, vagyis az egységnyi térfogatra eső energia a hőmérséklet negyedik hatványával arányos, illetve ahol $\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} \approx 5.67 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$, ami nagyon pontosan meg egyezik a fenomenologikusan, kísérleti úton meghatározott értékkel. Innen könnyen megkaphatjuk a fotongáz hőkapacitását is:

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{16}{c} \sigma T^3, \quad (23)$$

ahol a $\sim T^3$ egy karakterisztikus viselkedés, lineáris diszperziójú, nem megmaradó bozonok esetén, nagyon hasonlóan az akusztikus fononok esetéhez, ahogyan tanulhattuk szilárdtestfizikából. Most a részecskeszámot vizsgáljuk meg, hasonlóképpen áttérve az $\eta = \beta h\nu$ változóra:

$$\langle N \rangle = \frac{8\pi V}{c^3} \left(\frac{k_B T}{h} \right)^3 \int_0^\infty d\eta \frac{\eta^2}{e^\eta - 1}, \quad (24)$$

ahol ismét az utolsó integrál értéke $\Gamma(3)\zeta(3) \approx 2.404$.