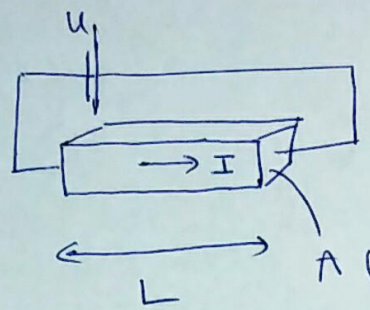
Fizika M1, 6. előadás, 2017/10/09

II. Elektronok

II.G. Elektromos vezetés fémekben: a klasszikus Drude-modell

• 

Ⓐ makroszkopikus (integrális) Ohm-tv:

ellenállás $\rightarrow R = \frac{U}{I}$ ← feszültség, ← áram

Ⓑ mikroszkopikus (differenciális) Ohm-tv: $j = \sigma \cdot E$

áramsűrűség $\left(\frac{I}{A}\right)$ (3D: $[j] = \frac{A}{m^2}$)

fajlagos vezetőképesség

elektromos tér $\left(\frac{U}{L}\right)$

Ⓒ geometriai Ohm-tv: $R = \rho \cdot \frac{L}{A}$

fajlagos ellenállás, $\rho \equiv \frac{1}{\sigma}$

→ pl: Cu (réz): $17\,n\Omega \cdot m$

• elemi fémek, pl. Li, $3e^-$ $\begin{cases} 1 \text{ vegyértékű-e} \rightarrow \text{vezetési e (ve)} \\ 2 \text{ törzsi e} \rightarrow \text{nem vezet} \end{cases}$

• Drude-modell feltevései:

(i) ve-ok klasszikus mechanika szerint mozognak

(ii) ve-okat E-tér gyorsítja

(iii) ve-ok sűrűsége n_e, $[n_e] = 1/m^3$

(iv) ve-ok átlagosan τ időnként ütköznek, véletlenszerűen irányt váltanak, átlagsebességük nullázódik.

(τ: "ütközési idő", "relaxációs idő")

• <u>áll</u> (fajlagos vezetőképesség a Drude-modellben):

$$\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e}$$

"drift-sebesség"

<u>biz</u> ① mikroszkopikus Ohm-tv $\rightarrow \sigma = \frac{j}{E} = \frac{-e n_e v_{átl}}{E}$

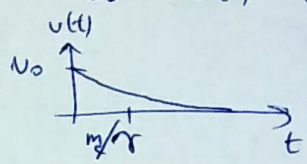
② $v_{átl} = ?$ Newton II, 1D gyorsuló-csillapított mozgás:

$$m_e a = F \rightarrow m_e \dot{v} = -eE - \gamma v \rightarrow \text{stac. áll.: } 0 = -eE - \gamma v \rightarrow$$

$$\rightarrow v_{átl} = \frac{-eE}{\gamma} \rightarrow \sigma = \frac{n_e e^2}{\gamma}$$

③ γ és τ kapcsolata? Csillapodás: $m_e \dot{v} = -\gamma v \rightarrow v(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m_e} t}$

tehát $\tau = \frac{m_e}{\gamma}$, ezért



$$\boxed{\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e}} \checkmark$$

• diszkusszió: (i) $\sigma \propto n_e$: több e^-, jobb vezetőképesség

(ii) $\sigma \propto \tau$: ritkább ütközés, jobb vezetőképesség

(iii) hőmérsékletfüggés? τ-n keresztül:

magasabb $T \rightarrow$ intenzívebb rácsrezgések $\rightarrow$

erősebb szóródás $\rightarrow$ rövidebb $\tau \rightarrow$ rosszabb vezetőképesség

(pl: Cu: $\rho(77K) \cong 2\,n\Omega\cdot m$, $\rho(273K) \cong 17\,n\Omega\cdot m$

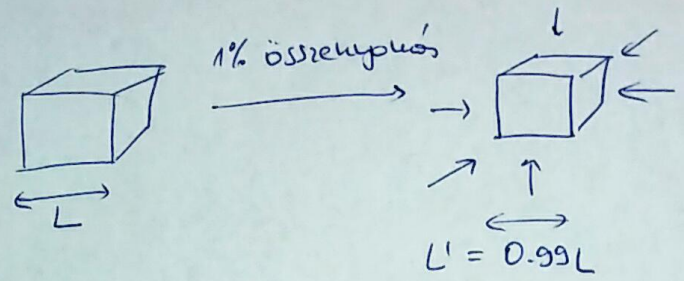
(félvezetőkben n_e is T-függő)

(iv): Drude-modell: egyszerű, szemléletes, de messze van a valóságtól; kvantummechanikai leírás szükséges

II. H Geometriai piezorezisztivitás

- összenyomás / tágulás hatására a fém ellenállása megváltozhat
  → nyomásmérés, erőmérés elektromos jellel.

- fém:



ellenállás: R <u>kérdés</u>: $R' = ?$ (Ohm + Drude)

<u>válasz</u>:

$$R \underset{\text{geom. Ohm-tv}}{=} \rho \cdot \frac{L}{A} = \frac{1}{\sigma} \cdot \frac{L}{A} \underset{\text{Drude}}{=} \frac{1}{\frac{n_e e^2 \tau}{m_e}} \cdot \frac{L}{A} = \frac{m_e L}{\frac{N_e}{L \cdot A} e^2 \tau A} =$$

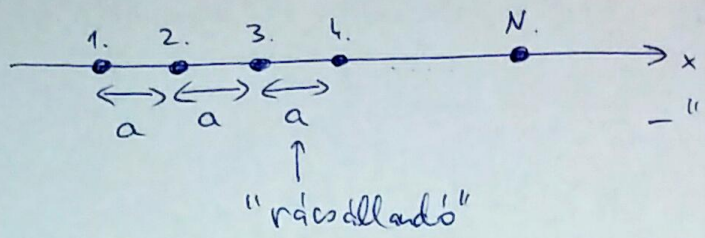
$$= \frac{m_e L^2}{N_e e^2 \tau}$$

$$R' = \frac{m_e L'^2}{N_e e^2 \tau} = \frac{m_e (1 - \overset{0.01}{\varepsilon})^2 L^2}{N_e e^2 \tau} \approx \frac{m_e L^2}{N_e e^2 \tau} (1 - 2\varepsilon) \approx \underline{\underline{0.98 R}}$$

1% összenyomás hatására R kb. 2%-kal csökken.

II.I A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

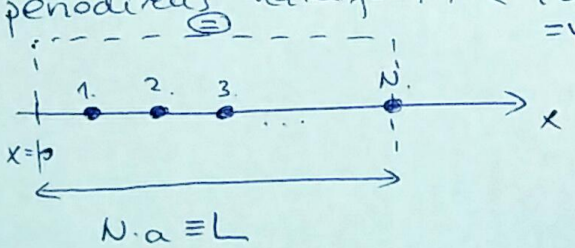
- fém egyszerű modellje (1D)



- ionok
  - "kristályos" (periodikus) szerkezet
  - e-e-kölcsönhatást elhanyagoljuk
  - 1 ve/atom (pl: Li)

- kérdések: ① melyek a stacionárius állapotok (energiasajátállapotok) és a vonatkozó energiák?
  ② mekkora áramot visznek a stac. állapotok?
  ③ zérus hőmérsékleten, zérus feszültségnél ($T=0, U=0$) mely stac. állapotok vannak betöltve?
  ④ $T=0, U=0$: mekkora áram folyik?

- válaszok: Sommerfeld-modell: feltevések:
  (i) iontörzsek Coulomb-potenciálját elhanyagoljuk ("üresrács-közelítés") $\rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2$
  (ii) periodikus határfeltétel: $\psi(x=0) = \psi(x=L)$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2\psi(x) = E\psi(x)$



  (iii) $N \rightarrow \infty$ (vagy $L \rightarrow \infty$) határesetben a határfeltétel úgysem számít.

① időfgtl SE megoldása: $\psi(x) \equiv \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

↑ normálási faktor

<u>biz</u>: $\hat{H}\psi_k(x) =$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\partial_x\left(\partial_x \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\partial_x\left(\frac{1}{\sqrt{L}} ike^{ikx}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{\sqrt{L}} ik(ik)e^{ikx} =$$

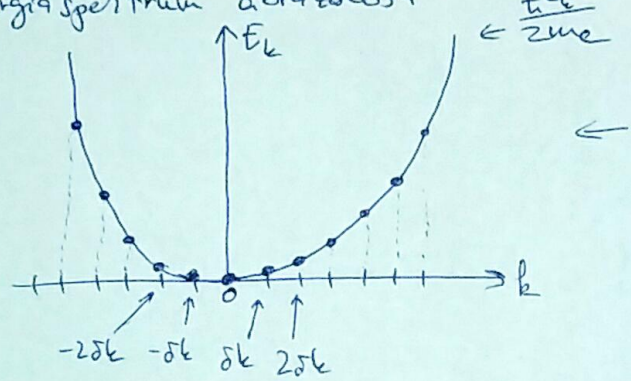
$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}\psi_k(x).$$

<u>elnevezés</u>: $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$: "szabad elektronok diszperziós relációja"

<u>megj</u>: a k hullámszám nem lehet tetszőleges a periodikus h.f. miatt: $\psi_k(x=0) = \psi_k(x=L) \rightarrow e^{ik\cdot 0} \equiv 1 = e^{ikL} \rightarrow$

$$\rightarrow kL = 2\pi \cdot m \quad (m \in \mathbb{Z}) \rightarrow k = \underbrace{\frac{2\pi}{L}}_{=:\delta k,\ \text{"hullámszám-kvantum"}} \cdot m = \delta k \cdot m$$

energiaspektrum ábrázolása:



← minden • a spin miatt 2× degenerált.

② <u>áll</u>: k hullámszámú állapot árama/áramsűrűsége (ez a két mennyiség 1D-ban ugyanaz!):

$$I_k = j_k = -\frac{e}{L} v_k = -\frac{e}{L}\frac{\hbar k}{m_e}$$

↑ csoportsebesség: $v_k = \frac{1}{\hbar}\frac{dE_k}{dk} = \frac{\hbar k}{m_e}$

③ Pauli-elv, energiaminimum elve

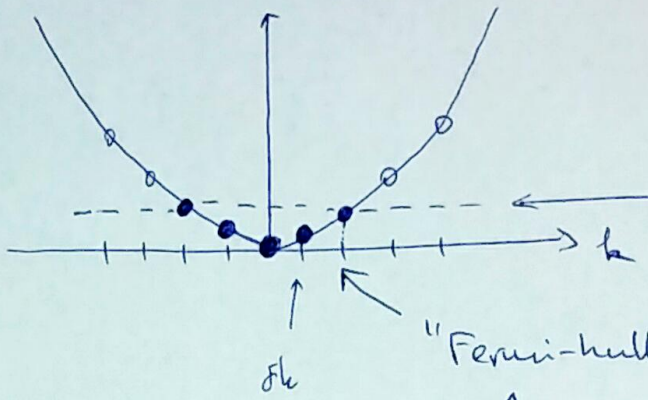
példa: $N = 10$ atom, $1e/\text{atom} \rightarrow N_e = 10$

$$\delta k = \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{10 \cdot a}$$

o: üres állapotok

● betöltött állapotok

(10 db, a spin miatt)



"Fermi-energia", ε_F

↑

legmagasabb energiájú betöltött állapot energiája

"Fermi-hullámszám", k_F

↑

legmagasabb energiájú betöltött állapot hullámszáma

("Fermi-sebesség" $v_F = \frac{\hbar k_F}{m_e}$)

④ áll áram $= 0$. $(T=0, \mu=0)$

bizi: $I = \sum_{k \in \text{betöltött}} I_k = \sum_{k \in \text{bet.}} \left(-\frac{e}{L}\right) v_k = 0$

$v_k = -v_{-k}$

• feladat: 1D Sommerfeld-modell, $1e^-/\text{atom}$, $N = N_e \rightarrow \infty$, $a = 2\text{Å}$.

a) $k_F = ?$ b) $\varepsilon_F = ?$ c) $v_F = ?$

a) N_e e-t kell elhelyezni a $[-k_F, k_F]$ intervallumban.

spin-"↑" állapotok száma a $[-k_F, k_F]$ intervallumban: $\frac{2k_F}{\delta k} = \frac{2k_F}{\left(\frac{2\pi}{Na}\right)} = \frac{k_F a N}{\pi}$

↑ és ↓ ——— " ——— : $\frac{2k_F a N}{\pi}$

elektronok száma: $N_e = \frac{2k_F a N}{\pi} \rightarrow k_F = \frac{\pi}{2a} \approx 7.85 \frac{1}{nm}$

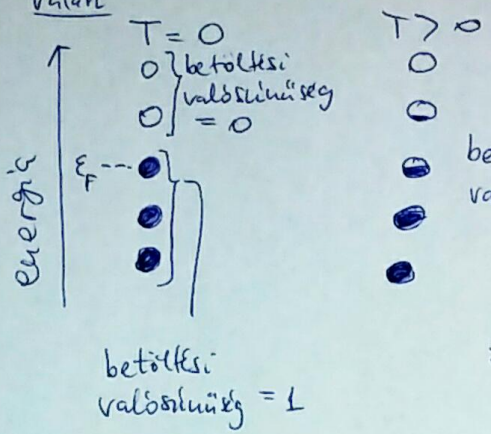
b) $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} \approx 2.35\,eV$

megj: ε_F, k_F, v_F az $N \rightarrow \infty$ határesetben jól definiált.

c) $v_F = \frac{\hbar k_F}{m_e} \approx 9.1 \times 10^5 \frac{m}{s}$

• **kérdés**: (5) $T>0$, $U=0$; mely stacionárius állapotok vannak betöltve? mekkora áram folyik?

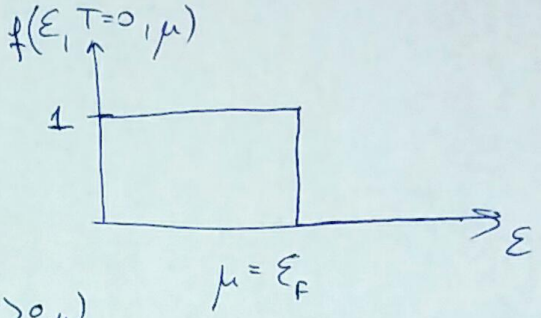
válasz:

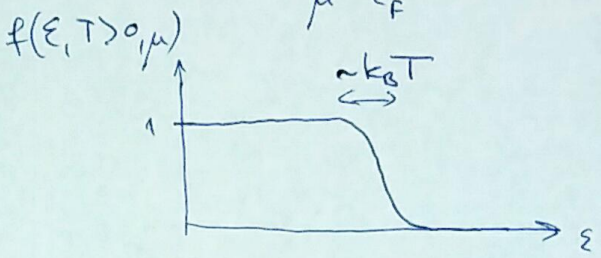


"kémiai potenciál"

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

"Fermi-Dirac-függvény"



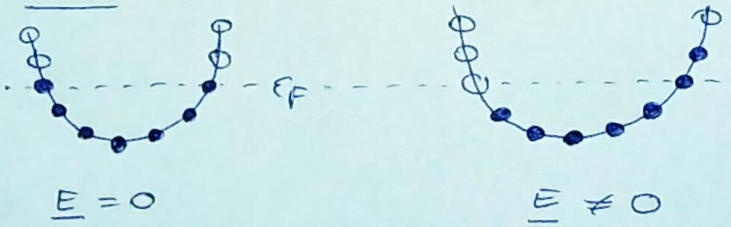


áram: $$I = \sum_k f(\varepsilon_k, T, \mu) \cdot I_k = -\frac{e}{L} \sum_k f(\varepsilon_k, T, \mu) v_k = 0$$

mert $v_k = -v_{-k}$ és $f(\varepsilon_k) = f(\varepsilon_{-k})$.

• **kérdés**: (6) $T=0$, $U>0$: mely stac. állapotok vannak betöltve? mekkora áram folyik?

válasz: E-tér "átrendezi" a betöltési fvt → folyik áram.



$$f(\varepsilon_k) \neq f(-\varepsilon_k)$$

$$\Downarrow$$

$$I = \sum_k f(\varepsilon_k) \cdot I_k \neq 0$$