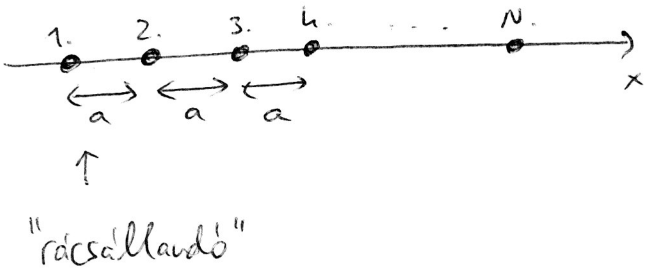
Fizika M1, 5. ea, 2018/10/01

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

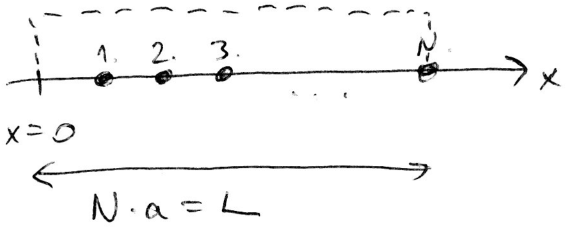
1. fém egyszerű modellje (1D)



- • ionok
- "kristályos" (periodikus) szerkezet
- e-e kch-t elhanyagoljuk
- 1 ve/atom (pl. Li)

2. kérdések:
   - a) melyek a stacionárius állapotok (energiasajátállapotok)? mik a vonatkozó energiák?
   - b) mekkora áramot visznek a stac. állapotok?
   - c) zérus hőm-en, zérus feszültségnél ($T=0, U=0$) mely stac. állapotok vannak betöltve?
   - d) $T=0, U=0$: mekkora áram folyik?

3. válasz: Sommerfeld-modell, feltevések
   - (i) iontörzsek Coulomb-potenciálját elhanyagoljuk ("üresrács-közelítés") $\rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m_e}\partial_x^2 \psi(x) = E\psi(x)$
   - (ii) periodikus határfeltétel: $\psi(x=0) = \psi(x=L)$ (a.k.a. Born-Kármán hf)



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

ⓐ időfggtl 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 "síkhullám"

biz: $\hat{H}\Psi_k(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\partial_x\left(\partial_x \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}\right) =$

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

elnevezés: $\underbrace{E_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m_e}}$

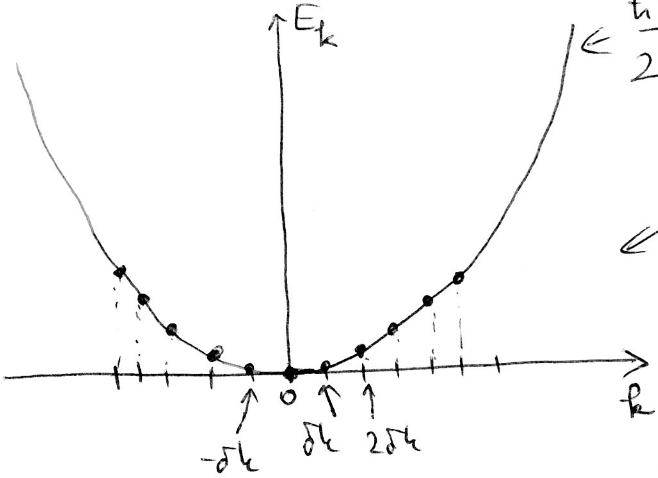
"szabad elektronok diszperziós relációja"

megj: a k hullámszám nem lehet tetszőleges a periodikus hf. miatt: $\Psi_k(x=0) = \Psi_k(x=L) \to e^{ik0} = 1 = e^{ikL} \to$

$$\to kL = 2\pi m \ (m\in\mathbb{Z}) \to k = \underbrace{\frac{2\pi}{L}}_{\delta k} m \equiv \delta k \cdot m$$

δk, "hullámszám-kvantum"

energiaspektrum ábrázolása:



$\frac{\hbar^2k^2}{2m_e}$

minden • 2x degenerált (spin)

1D-ben ugyanaz!

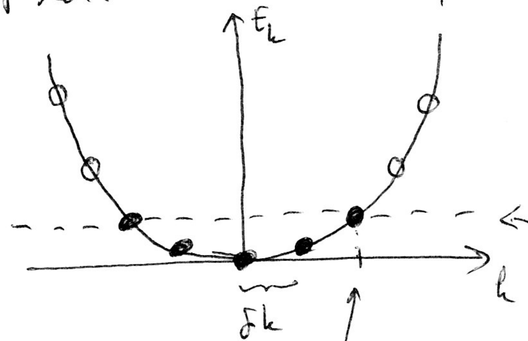
ⓑ áll: k hullámszámú állapot árama/áramsűrűsége:

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

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

(c) Pauli-elv, energiaminimum elve

példa: $N=10$ atom, $1e^-/$atom $\rightarrow N_e = 10 \rightarrow \delta k = \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{10a}$



∘ üres állapotok

• betöltött állapotok (10 db, spin miatt)

"Fermi-energia", ε_F

↑

legmagasabb energiájú betöltött állapot energiája

"Fermi-hullámszám", k_F

legmagasabb energiájú betöltött állapot hullámszáma

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

(d) áll: áram = 0 $\quad (T=0, u=0)$

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

$\uparrow$

$v_{-k} = -v_k$

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

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

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

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

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

e^--ok száma: $N_e = \frac{2k_F a N}{\pi} \rightarrow k_F = \frac{\pi}{2a} \approx 7.85 \frac{1}{\text{nm}}$

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

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

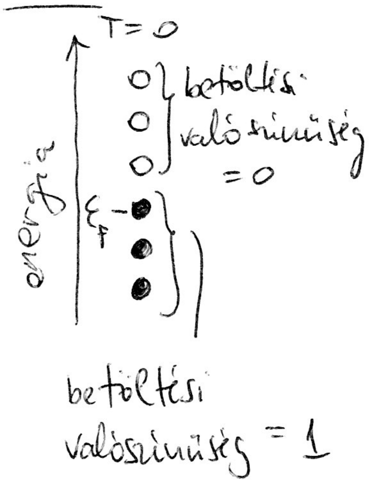
megj: ε_F, k_F, v_F az $N \rightarrow \infty$ határesetben jól definiált

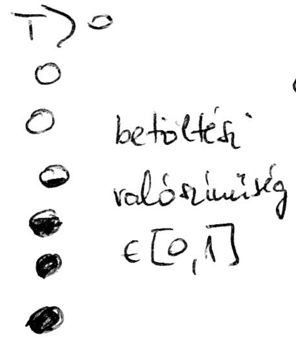
⑤ **kérdés**: $T>0$, $U=0$: mely stac. állapotok vannak betöltve? mekkora áram folyik?

„kémiai potenciál"

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

válasz:

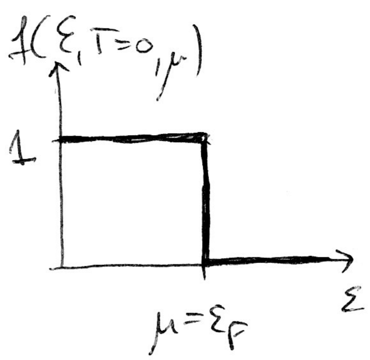


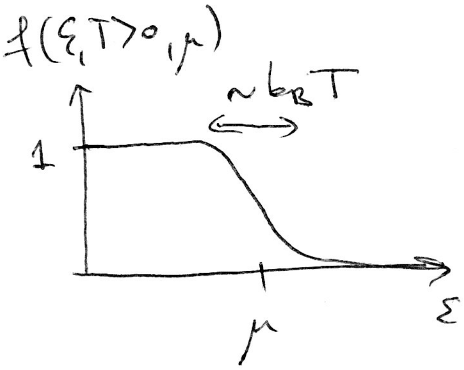


„Fermi-Dirac-függvény"

k_B: Boltzmann-állandó

$$k_B \approx 1{,}4 \times 10^{-23} \frac{m^2 kg}{s^2 K}$$





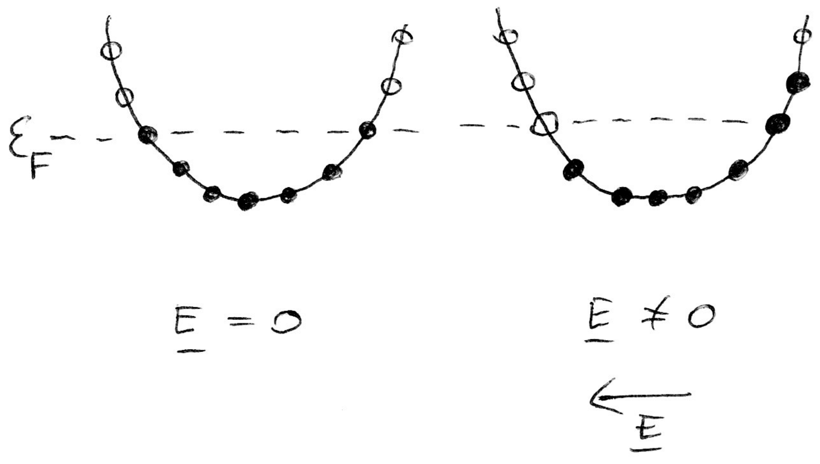
áram: $I = \sum_k f(\varepsilon_k, T, \mu) \cdot I_k = -\frac{e}{L} \sum_k f(\varepsilon_k, T, \mu) v_k = 0$

mert $v_{-k} = -v_k$

és $f(\varepsilon_k) = f(-\varepsilon_k)$

⑥ **kérdés**: $T=0$, $U>0$: mely stac. állapotok vannak betöltve? áram = ?

válasz: $\underline{E}$-tér átrendezi a betöltési f-et → folyik áram:



$$f(\varepsilon_k) \neq f(\varepsilon_{-k})$$

$$\Downarrow$$

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

(7) klasszikus vs kvantumos: melyik jobb

kvantumos: $C_V^{(e)} \propto T^1$

klasszikus: $C_V^{(e)} \propto T^0$

e-ok járuléka az állandó V-n vett fajhőhöz

II/D Elektronok az egyatomos láncban

(1) Sommerfeld-modell: szabad e-ok

(2) egyatomos lánc: "szoroskötésű modell"

rácson ugráló e-ok

e-e-kcht elhanyagoljuk

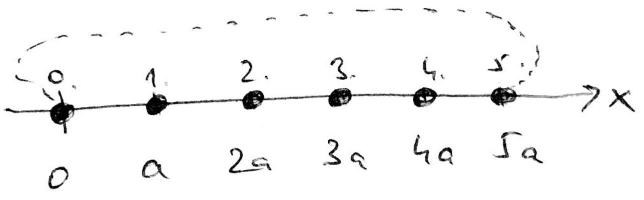
1D kristály (itt)

egyfajta atomból áll

minden atomon 1 pályát veszünk figyelembe (pl: 1s)

periodikus határfeltétel → 0. és 5. atom ua.

atomok száma ↓ pl: $N_a = 5$



↑ rácsállandó

(3) állapotjelző: hullámfv, itt: 5 komplex szám:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \psi(3) \\ \psi(4) \\ \psi(5) \end{pmatrix} \quad \text{normált: } 1 = \langle\psi|\psi\rangle \equiv \sum_{m=1}^{5} |\psi(m)|^2$$

Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & t \\ t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 & t \\ t & 0 & 0 & t & 0 \end{pmatrix}$$

t: "átugrási mátrixelem", "alagutazási mátrixelem", "hopping"

④ dinamika: időfüggő SE:

$$\frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix}\dot\psi(1)\\ \dot\psi(2)\\ \dot\psi(3)\\ \dot\psi(4)\\ \dot\psi(5)\end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & t\\ t & 0 & t & 0 & 0\\ 0 & t & 0 & t & 0\\ 0 & 0 & t & 0 & t\\ t & 0 & 0 & t & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(1)\\ \psi(2)\\ \psi(3)\\ \psi(4)\\ \psi(5)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}$$

⑤ stacionárius állapotok: időfgtl SE: $\hat{H}\psi = E\psi$

E	$2t$	$2t\cos\left(\frac{2\pi}{5}\right)$	$2t\cos\left(\frac{4\pi}{5}\right)$	$2t\cos\left(\frac{6\pi}{5}\right)$	$2t\cos\left(\frac{8\pi}{5}\right)$
ψ	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}e^{i\frac{2\pi}{5}}\\ e^{2i\frac{2\pi}{5}}\\ e^{3i\frac{2\pi}{5}}\\ e^{4i\frac{2\pi}{5}}\\ e^{5i\frac{2\pi}{5}}\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}e^{i\frac{4\pi}{5}}\\ e^{2i\frac{4\pi}{5}}\\ e^{3i\frac{4\pi}{5}}\\ e^{4i\frac{4\pi}{5}}\\ e^{5i\frac{4\pi}{5}}\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}e^{i\frac{6\pi}{5}}\\ e^{2i\frac{6\pi}{5}}\\ e^{3i\frac{6\pi}{5}}\\ e^{4i\frac{6\pi}{5}}\\ e^{5i\frac{6\pi}{5}}\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}e^{i\frac{8\pi}{5}}\\ e^{2i\frac{8\pi}{5}}\\ e^{3i\frac{8\pi}{5}}\\ e^{4i\frac{8\pi}{5}}\\ e^{5i\frac{8\pi}{5}}\end{pmatrix}$

1

"diszkrét síkhullámok"

⑥ általában (N_a tetszőleges):

$$k \in \{0, \delta k, 2\delta k, \dots, (N_a-1)\delta k\} \qquad \delta k = \frac{2\pi}{N_a \cdot a}$$

$$\left.\begin{aligned} E_k &= 2t\cos(ka)\\ \psi_k(m) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}}e^{ik(ma)}\end{aligned}\right\} \quad N_a \text{ különböző sajátérték-sajátvektor pár}$$

hullámszám

(7) áll: k és $k' = k + N_a \delta k \cdot l$ ekvivalens sé-su-párt indexel.

$\uparrow$ egész

biz: $E_{k'} = E_{k+N_a \delta k \cdot l} = 2t\cos\left[(k + N_a \delta k \cdot l)a\right] =$

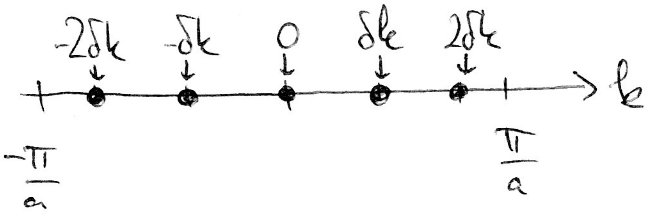
$$= 2t\cos\left(ka + N_a \frac{2\pi}{N_a a} \cdot l \cdot a\right) = 2t\cos(ka + 2\pi l) = 2t\cos(ka) = E_k \checkmark$$

$$\psi_{k'}(m) = \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{ik'ma} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{i(k+N_a \delta k \cdot l)ma} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{ikam} \underbrace{e^{iN_a \frac{2\pi}{N_a a} l m a}}_{e^{i2\pi} = 1} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{ikma} = \psi_k(m) \checkmark$$

(8) a (sé, su) párokat a $\left]-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ intervallumból szokás választani

$\nwarrow$ (első) Brillouin-zóna



$\leftarrow$ pl: $N_a = 5$

(9) E_k "diszperziós reláció": pl: $t<0$, $N_a = 5$