



Kondenzált anyagok fizikája

Elektron periodikus térben

Groma István

ELTE

November 14, 2019





Elektron peiodikus potenciál

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\underline{r}) \right] \psi = E\psi$$

Periodikus potenciál

$$V(\underline{r} + \underline{R}_n) = V(\underline{r})$$

Azonban

$$\psi(\underline{r} + \underline{R}_n) \neq \psi(\underline{r})$$

Ha

$$\psi(\underline{r} + \underline{R}_n) = e^{i k \underline{R}_n} \psi(\underline{r})$$

Várható érték

$$\int \psi^*(\underline{r}) A(\underline{r} + \underline{R}_n) \psi(\underline{r}) dV = \int \psi^*(\underline{r} + \underline{R}_n) A(\underline{r} + \underline{R}_n) \psi(\underline{r} + \underline{R}_n) dV$$

Elektron periodikus potenciál

így

$$\langle A(\underline{R}_n) \rangle = \langle A \rangle$$

Transzlációs operátor

$$T(\underline{R}_n)\psi(\underline{r}) = \psi(\underline{r} + \underline{R}_n)$$

$$T(\underline{R}_n) \{H(\underline{r})\psi(\underline{r})\} = H(\underline{r} + \underline{R}_n)\psi(\underline{r} + \underline{R}_n) = H(\underline{r})T(\underline{R}_n)\psi(\underline{r})$$

így

$$[T(\underline{R}_n)H(\underline{r})] = 0$$

Közös sajátfüggvény rendszer!



Eltolási operátor

$$T(\underline{R})\phi(\underline{r}) = C(\underline{R})\phi(\underline{r})$$

Mivel

$$T(\underline{R}_1)T(\underline{R}_2) = T(\underline{R}_2)T(\underline{R}_1)$$

A különböző eltolásoknak van közös sajátfüggvénye!

Valamint

$$T(\underline{R}_1)T(\underline{R}_2) = T(\underline{R}_1 + \underline{R}_2)$$

Így

$$C(\underline{R}_1)C(\underline{R}_2) = C(\underline{R}_1 + \underline{R}_2)$$

Ezért

$$C(\underline{R}_n) = e^{i\underline{k}\underline{R}_n}$$

\underline{k} benne van a Brilluen zónában!

Bloch egyenlet

Sajátfüggvény

$$\psi(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}} u(\underline{r})$$

ahol

$$u(\underline{r}) = u(\underline{r} + \underline{R}_n)$$

periodikus függvény.

$$\nabla \left\{ e^{i\underline{k}\underline{r}} u(\underline{r}) \right\} = \left\{ i\underline{k} u(\underline{r}) e^{i\underline{k}\underline{r}} + e^{i\underline{k}\underline{r}} \nabla u(\underline{r}) \right\} = e^{i\underline{k}\underline{r}} (i\underline{k} + \nabla) u(\underline{r})$$

Bloch egyenlet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} (i\underline{k} + \nabla)^2 + V(\underline{r}) \right] u_{\underline{k},n}(\underline{r}) = E_n(\underline{k}) u_{\underline{k},n}(\underline{r})$$

$$\text{Kvantáltság} \longleftrightarrow u_{\underline{k},n}(\underline{r}) = u_{\underline{k},n}(\underline{r} + \underline{R}_l)$$

Különböző \underline{k} -hoz tartozó Bloch függvények ortogonálisak

$$\int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) dV = \int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r} + \underline{R}_l) \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r} + \underline{R}_l) dV = e^{i(\underline{k}_1 - \underline{k}_2)\underline{R}_l} \int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) dV$$

Periodikus határfeltétel

$$\psi(\underline{r} + N_i \underline{a}_i) = \psi(\underline{r}) \quad i = 1, 2, 3$$

Nincs fáziskülönbség!

$$\psi(\underline{r}) = e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}} u(\underline{r})$$

Legyen

$$\underline{k} = k_1 \underline{b}_1 + k_2 \underline{b}_2 + k_3 \underline{b}_3$$

Mivel

$$k N_i b_i = 2\pi k_i$$

kapjuk, hogy

$$k_i = \frac{n_i}{N_i} \quad i = 1, 2, 3$$

$$|\Delta \underline{k}| = \frac{(\underline{b}_1 \times \underline{b}_2) \underline{b}_3}{N_1 N_2 N_3} = \frac{(2\pi)^3}{v_c N}$$



Kváziszabad elektron

Gyenge potenciál

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}(\underline{i}\underline{k} + \nabla)^2 u_{\underline{k}}(\underline{r}) = E(\underline{k})u_{\underline{k}}(\underline{r})$$
$$u(\underline{r}) = u(\underline{r} + \underline{R}_I)$$

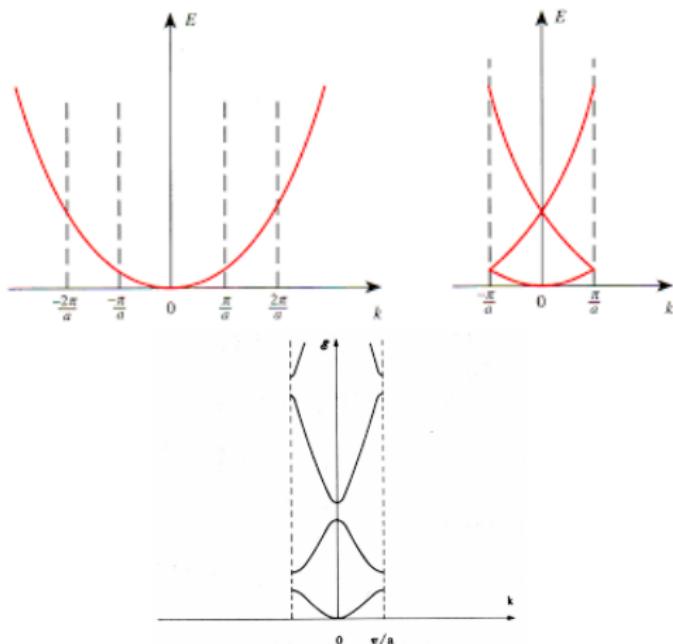
Megoldás

$$u(\underline{r}) = e^{i\underline{G}_I \underline{r}}$$

Energia

$$E_I(\underline{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_e}(\underline{k} + \underline{G}_I)^2$$

Kváziszabad elektron



Sok elektron rendszer

Nincs elektron elektron kölcsönhatás ezért lehetne

$$\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N) = \psi_1(\underline{r}_1)\psi_2(\underline{r}_2)\dots\psi_N(\underline{r}_N)$$

Pauli elv

$$\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_i, \dots, \underline{r}_j, \dots, \underline{r}_N) = -\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_j, \dots, \underline{r}_i, \dots, \underline{r}_N)$$

Slater determináns

$$\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \dots, \underline{r}_N) = \begin{vmatrix} \psi_1(\underline{r}_1), & \psi_1(\underline{r}_2) & \dots & \psi_1(\underline{r}_N) \\ \psi_2(\underline{r}_1), & \psi_2(\underline{r}_2) & \dots & \psi_2(\underline{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_N(\underline{r}_1), & \psi_N(\underline{r}_2) & \dots & \psi_N(\underline{r}_N) \end{vmatrix}$$

Ezért ha $i \neq j$ nem lehet, hogy

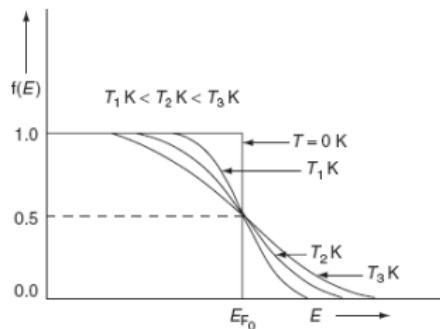
$$\psi_i(\underline{r}) = \psi_j(\underline{r})$$

Így két elektron nem lehet azonos kvantumállapotban!

Ha a spin nem számít akkor 2 lehet azonosban.

Fermi-Dirac eloszlás

$$f_0(E_n(\underline{k})) = \frac{1}{e^{\frac{E_n(\underline{k}) - \mu(T)}{k_B T}} + 1}$$



ahol $\mu(T)$ a kémiai potenciál, amely

$$2 \sum_{\underline{k}} \sum_n f_0(E_n(\underline{k})) = N$$

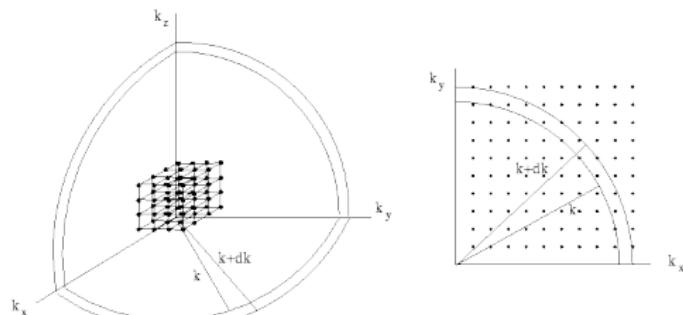
feltételből kapható meg.

Fermi-Dirac eloszlás

Várható érték

$$\sum_{\underline{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k$$

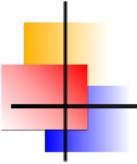
Állapotsűrűség



$$\Delta N = \rho(E) \Delta E$$

Innen

$$\sum_n \sum_{\underline{k}} g(E_n(\underline{k})) = \sum_n \frac{V}{(2\pi)^3} \int g(E_n(\underline{k})) d^3k = V \int g(E) \rho(E) dE$$



Állapotsűrűség, kváziszabad elektron



$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2 \quad \longrightarrow \quad k = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} E}$$

Térfogat

$$dN = 4\pi k^2 dk$$

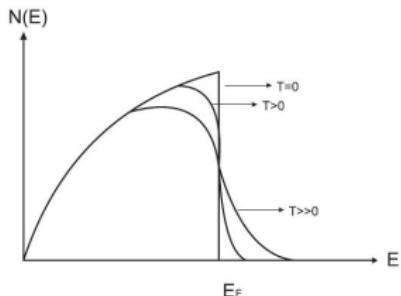
Innen

$$\rho(E) = 2 \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{2m_e}{\hbar^2} E \cdot \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}}}{\sqrt{E}}$$

Azaz

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$$

Fermi energia, kváziszabad elektron



$$N = V \int_0^{E_f} \rho(E) dE$$

Innen

$$\frac{N}{V} = n_e = \frac{2}{3} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_f^{3/2}$$

$$n_e = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} E_f \right)^{3/2}$$



Fermi energia, kváziszabad elektron

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$$

Véges hőmérséklet

$$n_e = \int_0^\infty \frac{\sqrt{E}}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} dE$$

$$n_e = 2 \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} F_{1/2} \left(\frac{\mu}{k_B T} \right)$$

ahol

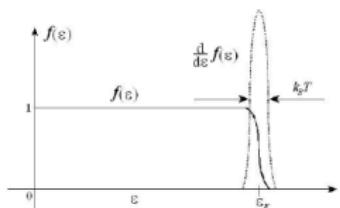
$$F_{1/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{y^{1/2}}{\exp(y-x)+1} dy \approx \frac{4}{3\sqrt{\pi}} x^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \frac{1}{x^2} \right]$$

$$\mu(T) = E_f \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_f} \right)^2 \right], \quad k_B T_f = E_f$$

Sommerfeld sorfejtés

$$\int_0^\infty g(E) f_0(E) dE = \int_0^\infty G(E) \left(-\frac{df_0}{dE} \right) dE$$

ahol $G' = g$ és $G(0) = 0$



$$G(E) \approx G(\mu) + (E - \mu) G'(\mu) + \frac{1}{2} (E - \mu)^2 G''(\mu) + \dots$$

Vezető két tag

$$\langle g \rangle \approx G(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 G''(\mu) + \dots$$

$$\langle g \rangle \approx \int_0^\mu g(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{dg}{dE} \right|_\mu + \dots$$



Elektron energiája

$$\frac{< E >}{V} = \int_0^{\mu} E \rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{d}{dE} (E \rho(E)) \right|_{\mu}$$

Mivel

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$$

Adódik

$$\frac{< E >}{V} = \frac{1}{5\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mu^{5/2} + \frac{1}{8} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^2 \mu^{1/2}$$

Elektron hőkapacitás

$$c_V^e(T) = \gamma T$$

Teljes

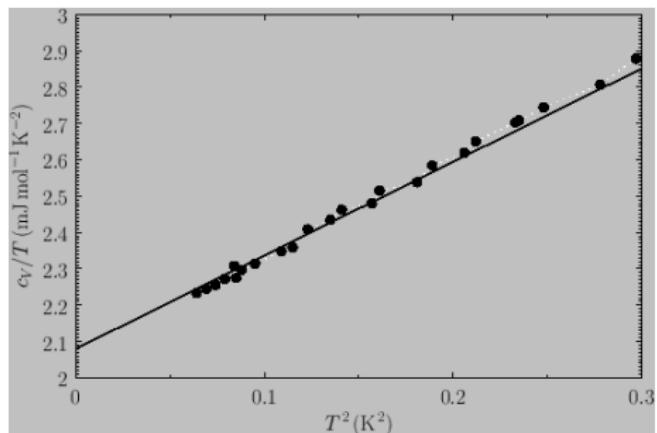
$$c_V(T) = c_V^e(T) + c_V^l(T) = \gamma T + AT^3$$



Elektron energiája



$$\frac{c_V(T)}{T} = \gamma + AT^2$$



Pauli szuszceptibilitás

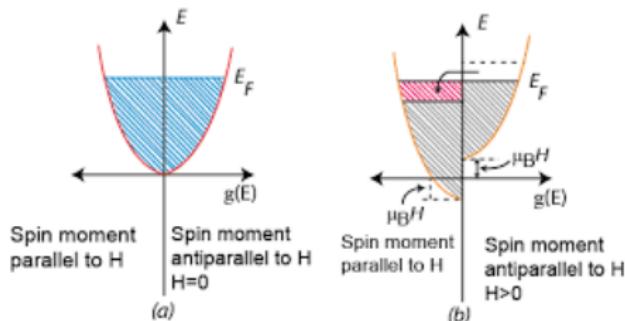
Energia mágneses térben

$$\Delta E = \pm \frac{1}{2} g_e \mu_B B$$

Ekkor az állapotsűrűség

$$\rho_{\downarrow}(E) = \frac{1}{2} \rho(E + \frac{1}{2} g_e \mu_B B)$$

$$\rho_{\uparrow}(E) = \frac{1}{2} \rho(E - \frac{1}{2} g_e \mu_B B)$$



Pauli szuszceptibilitás

Kis mágneses tér esetén

$$\rho_{\downarrow}(E) = \frac{1}{2}\rho(E + \frac{1}{2}g_e\mu_B B) \approx \frac{1}{2}\rho(E) + \frac{1}{4}g_e\mu_B B \frac{d\rho(E)}{dE}$$
$$\rho_{\uparrow}(E) = \frac{1}{2}\rho(E - \frac{1}{2}g_e\mu_B B) \approx \frac{1}{2}\rho(E) - \frac{1}{4}g_e\mu_B B \frac{d\rho(E)}{dE}$$

Innen a betöltött állapotok száma a két irányban

$$n_{\downarrow\uparrow} = \int \rho_{\downarrow\uparrow}(E) f_0(E) dE$$
$$= \frac{1}{2} \int \rho(E) f_0(E) dE \pm \frac{1}{4} g_e \mu_B B \int \frac{d\rho(E)}{dE} f_0(E) dE$$

Mivel

$$n = n_{\downarrow} + n_{\uparrow} = \int \rho(E) f_0(E) dE$$

A kémiai potenciál nem változik

Pauli szuszceptibilitás

A mágnesezettség

$$M = \frac{1}{2}g_e\mu_B(n_\downarrow - n_\uparrow) = \frac{1}{4}g_e^2\mu_B^2 B \int \frac{d\rho(E)}{dE} f_0(E) dE$$

Innen

$$M = \frac{1}{4}g_e^2\mu_B^2 B \int \rho(E) \left(-\frac{df_0(E)}{dE} \right) dE = \frac{1}{4}g_e^2\mu_B^2 B \rho(E_f)$$

Tehát

$$\chi_P = \frac{1}{4}g_e^2\mu_B^2\mu_0\rho(E_f)$$

Amely

$$\chi_P = \frac{3}{8}\mu_0 \frac{g_e^2 n_e \mu_B^2}{E_f}$$