Kondenzált anyagok fizikája

Elektron vezetés

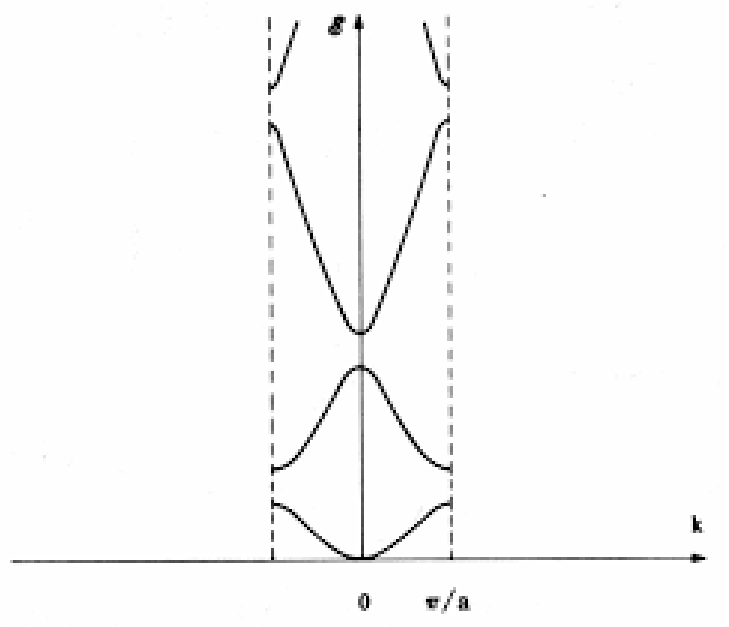
Groma István

ELTE

November 21, 2019

Drude modell

Sávszerkezet



Drude

$$\left.\begin{array}{c} \underline{j} = \sigma \underline{E} \\ \underline{j} = en < \underline{v} > \end{array}\right\} \longrightarrow < \underline{v} > \propto \underline{E}$$

Relaxációs idő τ

$$< \underline{v} > = \frac{1}{2}\underline{a}\tau = \frac{e}{2m_e}\underline{E}\tau, \qquad \sigma = \frac{e^2}{2m_e}n\tau$$

Eloszlásfüggvény

Liouville tétel

$$f(t+dt,\underline{r},\underline{p}) = f(t,\underline{r}-\underline{v}dt,\underline{p}-\underline{F}dt)$$

Impulzus (kvázi impulzus)

$$\underline{p} = \hbar\underline{k}$$

sebesség

$$\underline{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{d\underline{k}}$$

Kapjuk

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \underline{k}}\dot{\underline{k}} + \frac{\partial f}{\partial \underline{r}}\underline{v} = 0$$

ahonnan

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \underline{k}}\frac{\underline{F}}{\hbar} + \frac{\partial f}{\partial \underline{r}}\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{d\underline{k}} = 0, \qquad \underline{F} = -e\underline{E} - e\underline{v}\times\underline{B} + \delta\underline{F}$$

ahol $\delta\underline{F}$ a hely szerint gyorsan fluktuálva változik

Boltzmann egyenlet

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{e}{\hbar}(\underline{E} + \underline{v} \times \underline{B})\frac{\partial f}{\partial \underline{k}} + \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{d\underline{k}}\frac{\partial f}{\partial \underline{r}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$$

Relaxációs idő közelítés

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

Ha nincs külső erő

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

$$f(t) = f_0 + Ae^{-\frac{t}{\tau}}$$

Boltzmann egyenlet

Legyen csak homogén elektromos tér. Stacionárius megoldás

$$-\frac{e}{\hbar}\underline{E}\frac{\partial f}{\partial \underline{k}} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

Intuitíven

$$f\left(\underline{k} - \frac{\tau e \underline{E}}{\hbar}\right) = f_0(\underline{k})$$

Ahonnan

$$f(\underline{k}) = f_0\left(\underline{k} + \tau\frac{e\underline{E}}{\hbar}\right)$$

Így

$$f(\underline{k}) = f_0(\underline{k}) + \tau\frac{e\underline{E}}{\hbar}\frac{df_0}{d\underline{k}}$$

τ-ban lineáris tagokig jó a megoldás!

Boltzmann egyenlet

Mivel f_0 csak E keresztül függ k-tól

$$f(\underline{k}) = f_0(\underline{k}) + \tau \frac{e\underline{E}}{\hbar} \frac{df_0}{dE} \frac{dE}{d\underline{k}}$$

és

$$\underline{v}_k = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\underline{k}}$$

$$f(\underline{k}) = f_0(\underline{k}) + \tau e \underline{v}_k \frac{df_0}{dE} \underline{E}$$

Célszerű

$$f(\underline{k}) = f_0(\underline{k}) + \left(-\frac{df_0}{dE}\right) \underline{v}_k (-e\underline{E})\tau$$

Általános eset

$$\left[-\frac{e}{\hbar}(\underline{E}+\underline{v}\times\underline{B})\frac{\partial f}{\partial \underline{k}}+\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{d\underline{k}}\frac{\partial f}{\partial \underline{r}}\right]\tau = f_0 - f$$

Bevezetve

$$D = -\frac{e}{\hbar}(\underline{E}+\underline{v}\times\underline{B})\frac{\partial}{\partial \underline{k}}+\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{d\underline{k}}\frac{\partial}{\partial \underline{r}}$$

operátort

$$\tau D f = f_0 - f$$

Megoldás

$$f = \sum_{n=0}^{\infty}(-\tau D)^n f_0$$

Behelyettesítve

$$\sum_{n=1}^{\infty}(-\tau D)^n f_0 = \sum_{n=0}^{\infty}(-\tau D)^n f_0 - f_0$$

Lineáris közelítés

Helyfüggés

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

Lineáris közelítés és $\underline{B} = 0$.

$$f(\underline{k},\underline{r}) = f_0 - \tau D f_0 = f_0 - \tau \underline{v}\frac{dT}{d\underline{r}}\frac{\partial f_0}{\partial T} - \tau \underline{v}\frac{d\mu}{d\underline{r}}\frac{\partial f_0}{\partial \mu} - \frac{\tau e}{\hbar}\underline{E}\frac{\partial f_0}{\partial \underline{k}}$$

Bevezetve

$$x = \frac{E(\underline{k}) - \mu(\underline{r})}{k_B T(\underline{r})}$$

ezzel

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{\partial f_0}{\partial x}\frac{dx}{dE} = \frac{1}{k_B T}\frac{\partial f_0}{\partial x}$$

Lineáris közelítés

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial T} = -\frac{\partial f_0}{\partial E}\left(\frac{E-\mu}{T}\right)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mu} = \frac{\partial f_0}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \mu} = -\frac{\partial f_0}{\partial E}$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial \underline{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \underline{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial E}\frac{\partial E}{\partial \underline{k}} = \hbar \underline{v}\frac{\partial f_0}{\partial E}$$

Innen

$$f(\underline{k}) = f_o(\underline{k}) + \tau\left(-\frac{df_0}{dE}\right)\underline{v}\left[-e\left(\underline{E} + \frac{\nabla\mu}{e}\right) + \frac{E-\mu}{T}(-\nabla T)\right]$$

Áramok

Részecskeáram

$$\underline{J}_n = \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}} \underline{v}(\underline{k})f(\underline{k}) = \frac{1}{4\pi^3}\int \underline{v}(\underline{k})f(\underline{k})d^3k$$

Elektromos áram

$$\underline{J} = -e\underline{J}_n$$

Energiaáram

$$\underline{J}_E = \frac{1}{V}\sum_{\underline{k}} \underline{v}(\underline{k})E(\underline{k})f(\underline{k}) = \frac{1}{4\pi^3}\int \underline{v}(\underline{k})E(\underline{k})f(\underline{k})d^3k$$

Hőáram?

$$dA = d\left(\frac{A}{V}\right)V + \frac{A}{V}dV = daV + \frac{A}{V}dV$$

Felhasználva

$$dU = TdS - pdV + \mu dN, \quad ill. \quad U = TS - pV + \mu N$$

Áramok

$$du = Tds + \mu dn$$

innen

$$J_Q = j_E - \mu J_n$$

$$J_Q = \frac{1}{4\pi^3} \int \underline{v}(\underline{k})[E(\underline{k}) - \mu] f(\underline{k}) d^3k$$

Behelyettesítve

$$\begin{aligned} j &= K_0 \left(\underline{E} + \frac{\nabla \mu}{e} \right) - K_1 \left(\frac{\nabla T}{T} \right) \\ j_Q &= -K_1 \left(\underline{E} + \frac{\nabla \mu}{e} \right) + K_2 \left(\frac{\nabla T}{T} \right) \end{aligned}$$

$$K_n = e^{2-n} \frac{1}{4\pi^3} \int \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \tau \frac{1}{3} v(\underline{k})^2 \left[E(\underline{k}) - \mu \right]^n d^3k$$

Onsager relációk

$$ds = \frac{1}{T} du - \frac{\mu}{T} dn$$

Entrópia produktum

$$\dot{S} = \int \left[\frac{1}{T} \dot{u} - \frac{\mu}{T} \dot{n} \right] dV$$

Mérlegegyenletek,
részecskeszám

$$\dot{n} + div(\underline{j}_n) = 0$$

Energia

$$\dot{u} + div(\underline{j}_E) = \underline{E}\underline{j}$$

Ezeket felhasználva

$$\dot{S} = \int \left[-\frac{1}{T} div(\underline{j}_E) + \frac{1}{T} \underline{E}\underline{j} + \frac{\mu}{T} div(\underline{j}_n) \right] dV$$

Onsager relációk

Parciális integrálás után

$$\dot{S} = \int \left[\nabla \left(\frac{1}{T} \right) \underline{j}_E + \frac{1}{T} \underline{E} \underline{j} - \nabla \left(\frac{\mu}{T} \right) \underline{j}_n \right] dV$$

Felhasználva, hogy

$$\underline{j}_Q = \underline{j}_E + \mu \underline{j}_n$$

$$\underline{j} = -e \underline{j}_n$$

$$\dot{S} = \int \frac{1}{T} \left[\left(\underline{E} + \frac{\nabla \mu}{e} \right) \underline{j} - \frac{\nabla T}{T} \underline{j}_Q \right] dV$$

Vegyük fel

$$\begin{aligned} j &= L_{11} \left(E + \frac{\nabla \mu}{e} \right) + L_{12} \left(-\frac{\nabla T}{T} \right) \\ j_Q &= L_{21} \left(E + \frac{\nabla \mu}{e} \right) + L_{22} \left(-\frac{\nabla T}{T} \right) \end{aligned}$$

Onsager relációk

$$\dot{s} = \frac{1}{T} \begin{pmatrix} E + \frac{\nabla \mu}{e} \\ -\frac{\nabla T}{T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E + \frac{\nabla \mu}{e} \\ -\frac{\nabla T}{T} \end{pmatrix} \geq 0$$

$\hat{L}$ szimmetrikus és positive szemidefinit kell legyen!

Vezetőképességek

Elektromos ellenállás $\bigtriangledown T = 0$ és $\bigtriangledown \mu = 0$

$$\underline{j} = \sigma \underline{E}$$

Így

$$\sigma = K_0 = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

Hővezető képesség $\underline{j} = 0$ és $\underline{E} = 0$. Ami a

$$0 = K_0 \left(\underline{E} + \frac{\bigtriangledown \mu}{e} \right) - K_1 \left(\frac{\bigtriangledown T}{T} \right)$$

összefüggésből

$$\frac{\bigtriangledown \mu}{e} = \frac{K_1}{K_0} \left(\frac{\bigtriangledown T}{T} \right)$$

Így

$$j_Q = -K_1 \left(\underline{E} + \frac{\bigtriangledown \mu}{e} \right) + K_2 \left(\frac{\bigtriangledown T}{T} \right) = \left(K_2 - \frac{K_1^2}{K_0} \right) \left(\frac{\bigtriangledown T}{T} \right)$$

Vezetőképességek

$$j_Q = -\kappa \bigtriangledown T$$

Azaz

$$\kappa = \frac{1}{T}\left(\frac{K_1^2}{K_0} - K_2\right) = \frac{\pi^2 k_B^2 n T}{3m^*}\tau$$

Wiedemann–Franz törvény

$$\frac{\kappa}{T\sigma} = L = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2}$$

Thermofeszültség

$$-\frac{1}{e} \bigtriangledown \mu = S \bigtriangledown T, \qquad \underline{j} = 0$$

innen

$$S = -\frac{1}{eT}\frac{K_1}{K_0}$$

Hall effektus

Másodrendű közelítés

$$f \approx -\tau D f_0 + \tau^2 D^2 f_0$$

ahol homogén rendszerre

$$D = -\frac{e}{\hbar}(\underline{E} + \underline{v} \times \underline{B})\frac{\partial}{\partial \underline{k}}$$

Fellép egy olyan tag, hogy (a többi nem ad járulékot)

$$\frac{e^2\tau}{\hbar}(\vec{v} \times \underline{B})\frac{\partial}{\partial \underline{k}}\left(\tau\frac{\partial f_0}{\partial E}\underline{vE}\right)$$

Innen

$$\underline{j} = \sigma\underline{E} + \hat{\hat{A}}(\underline{E} \circ \underline{B})$$

Ahol

$$A_{ijl} = \frac{e^3}{4\pi^3\hbar}\tau^2 \int \frac{\partial f_0}{\partial E} v_i (\underline{v} \times \frac{\partial}{\partial \underline{k}})_j v_l d^3k$$

Hall effektus

$$\underline{j}_0 = \sigma \underline{E}_0$$

$$\underline{j}_H = \hat{\hat{A}}(\underline{E}_0 \circ \underline{B}) = \frac{1}{\sigma}\hat{\hat{A}}(\underline{j}_0 \circ \underline{B})$$

Amit mérünk

$$\underline{E}_H = \frac{1}{\sigma}\underline{j}_H = \frac{1}{\sigma^2}\hat{\hat{A}}(\underline{j}_0 \circ \underline{B})$$

Egyszerű izotrop esetre

$$\underline{E}_H = R\underline{j}_0 \times \underline{B}, \qquad R = \frac{1}{en}\frac{|m^*|}{m^*}$$