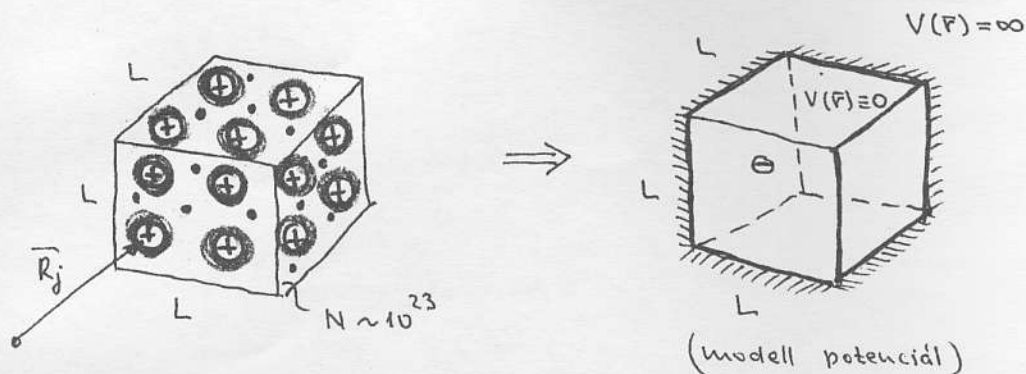


2. SZILÁRDTESTFIZIKA

2.1. A fémek szabadelektron elmélete

2.1.1. A SOMMERFELD féle fémmodell



N elektrontól álló rendszer \rightarrow egy-elektron közelítés \rightarrow
 egy-elektron állapotok \rightarrow
 egy-elektron Hamilton operátor

$$\hat{H}_i \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \underbrace{\sum_{j=1}^N V_c(\vec{r}_i, \vec{r}_j)}_{\text{az iontörzsek hatása}} + \underbrace{\sum_{j \neq i}^N U_j(\vec{r}_i)}_{\text{a többi elektron hatása}} \quad (i=1,2,3,\dots,N)$$

$V(\vec{r}_i)$ modell potenciál (minden elektrorra ugyanaz) \rightarrow potenciál doboz (SOMMERFELD)

(csak egy egyenlet van:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right] \psi = \varepsilon \psi \quad (+ \text{PAULI elv})$$

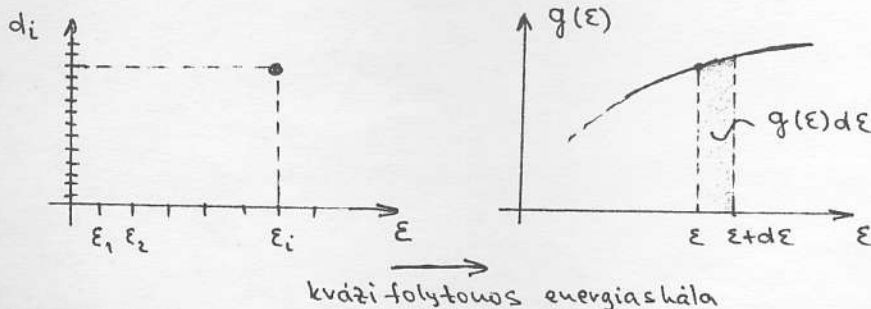
A már megismert megoldások:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{L} \cdot \sin \frac{n_z \pi z}{L}$$

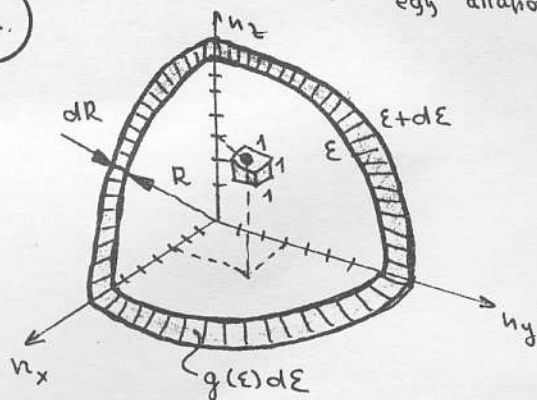
$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$(n_x, n_y, n_z) = 1, 2, 3, 4, \dots$$

(degeneráció)



2.

egy állapot $\rightarrow (n_x, n_y, n_z)$ (pálya állapot!)

$$\varepsilon_i = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{2m}{\hbar^2 \pi^2} L^2 \cdot \varepsilon \equiv R^2$$

$$\mathcal{N}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{8} 4\pi R^2 dR$$

$$\left. \begin{aligned} R &= \text{all.} \cdot L \cdot \sqrt{\varepsilon} \\ dR &= \text{all.} \cdot \frac{L}{\sqrt{\varepsilon}} d\varepsilon \end{aligned} \right\} \rightarrow R^2 dR = \text{all.} \cdot L^3 \cdot \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon$$

$$\mathcal{N}(\varepsilon) d\varepsilon = A \cdot L^3 \cdot \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon$$

pálya állapot sűrűség

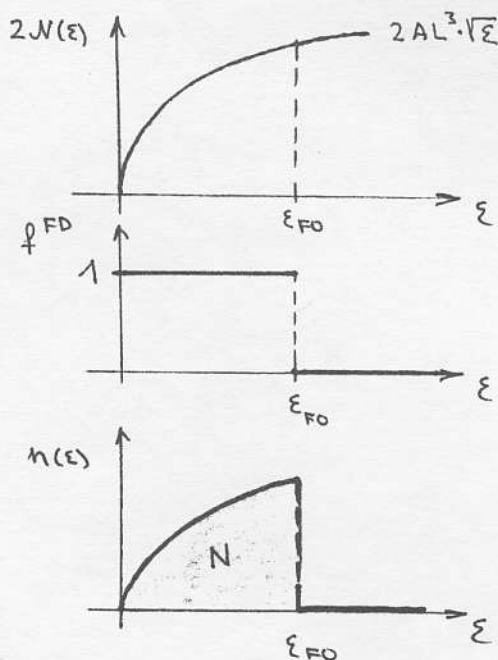
$$\mathcal{N}(\varepsilon) = A L^3 \cdot \sqrt{\varepsilon}$$

 $d_i \rightarrow$ spin-pálya állapot sűrűség

$$g(\varepsilon) = 2 \cdot \mathcal{N}(\varepsilon)$$

Az állapotok betöltése: FERMI-DIRAC statisztika

$$f^{FD} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} + 1}$$

 $\varepsilon_F(T)$ meghatározható
($N = \text{állandó}$ feltételből)Az elektrongáz alapállapotban van ha $T=0$.

$$\begin{aligned} N &= \int_0^{\infty} n(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\infty} 2\mathcal{N}(\varepsilon) f^{FD}(\varepsilon, 0) d\varepsilon = \\ &= \int_0^{\varepsilon_{F0}} 2\mathcal{N}(\varepsilon) d\varepsilon = 2AL^3 \int_0^{\varepsilon_{F0}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = \frac{2}{3} \varepsilon_{F0}^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

$$N = \frac{4}{3} AL^3 \varepsilon_{F0}^{\frac{3}{2}}$$

$$\varepsilon_{F0} = \text{all.} \left(\frac{N}{L^3} \right)^{\frac{2}{3}}$$

a fémekben lévő (vezetési)
szabad elektronok
sűrűsége.

3

Az elektronok átlagos energiája:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{E}{N} = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} \epsilon u(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{N} \int_0^{\epsilon_{F0}} 2\epsilon \mathcal{N}(\epsilon) d\epsilon = \frac{2AL^3}{N} \underbrace{\int_0^{\epsilon_{F0}} \epsilon \sqrt{\epsilon} d\epsilon}_{\frac{2}{5} \epsilon_{F0}^{\frac{5}{2}}}$$

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{4}{5} \frac{A \cdot L^3}{N} \epsilon_{F0}^{\frac{5}{2}} = \frac{3}{5} \epsilon_{F0}$$

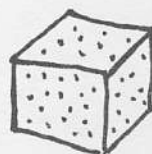
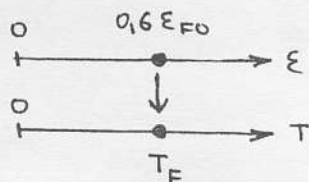
$$\uparrow$$

$$N = \frac{4}{3} AL^3 \epsilon_{F0}^{\frac{3}{2}}$$

$$\langle \epsilon \rangle = 0,6 \epsilon_{F0}$$

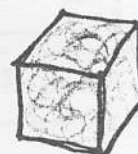
Az alapállapotban lévő (0 Kelvin fohos) elektrongáz átlagos energiája.

Nagyságrendi becsléséknél hasznos fogalom : A FERMI hőmérséklet



$T = T_F$
ideális gáz

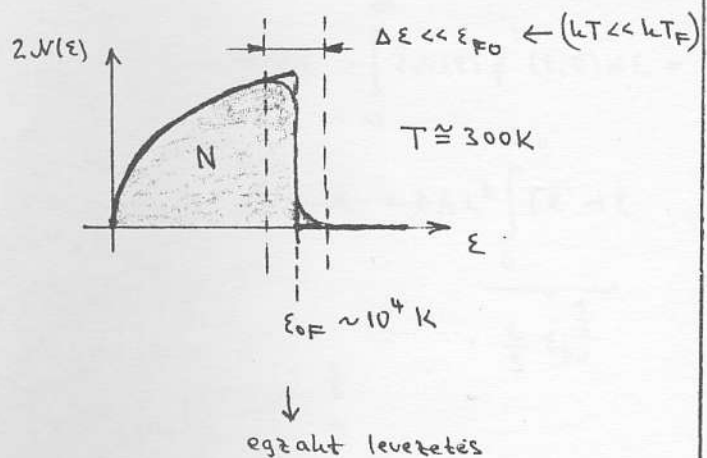
$$\langle \epsilon \rangle_g = \frac{3}{2} kT_F$$



$T = 0 K$
elektron gáz

$$\langle \epsilon \rangle_e = 0,6 \epsilon_{F0}$$

$$\langle \epsilon \rangle_g = \langle \epsilon \rangle_e \rightarrow T_F \approx 10^4 K$$

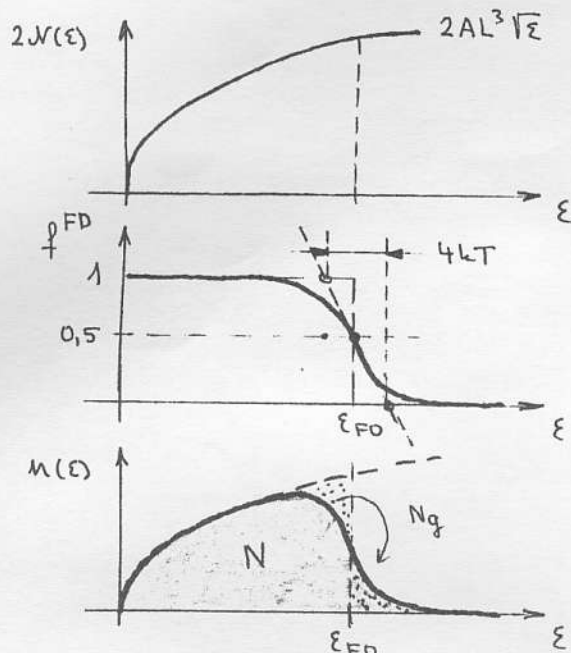


4

2.1.2. A szabad-elektron modell alkalmazásai

2.1.2.1. A szabad elektrongáz fajhője

Elektrongáz $T > \phi_K$ hőmérsékleten.



$$\varepsilon_F(T) = \varepsilon_{F0} \left[1 - \underbrace{\frac{\pi^2}{15} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2}_{\ll 1} \right] + \dots$$

↓

$$\varepsilon_F(T) \approx \varepsilon_{F0}$$

$$\left[\frac{d}{d\varepsilon} f^{\text{FD}} \right]_{\varepsilon_F} = \left[\frac{-1}{\left(e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} + 1 \right)^2} \cdot e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} \cdot \frac{1}{kT} \right]_{\varepsilon_F} = -\frac{1}{4kT}$$

$$N_g \approx N \frac{2kT}{\varepsilon_{F0}}$$

$$\rightarrow \boxed{N_g \approx N \frac{T}{T_F}}$$

a gerjesztődött elektronok száma T hőmérsékleten.

Az elektrongáz energiája T hőmérsékleten tehát

$$\boxed{E \approx E_0 + N_g \cdot kT}$$

Az elektrongáz fajhője (moláris hőkapacitás)

$$C_{ve} = \left[\frac{dE}{dT} \right]_v$$

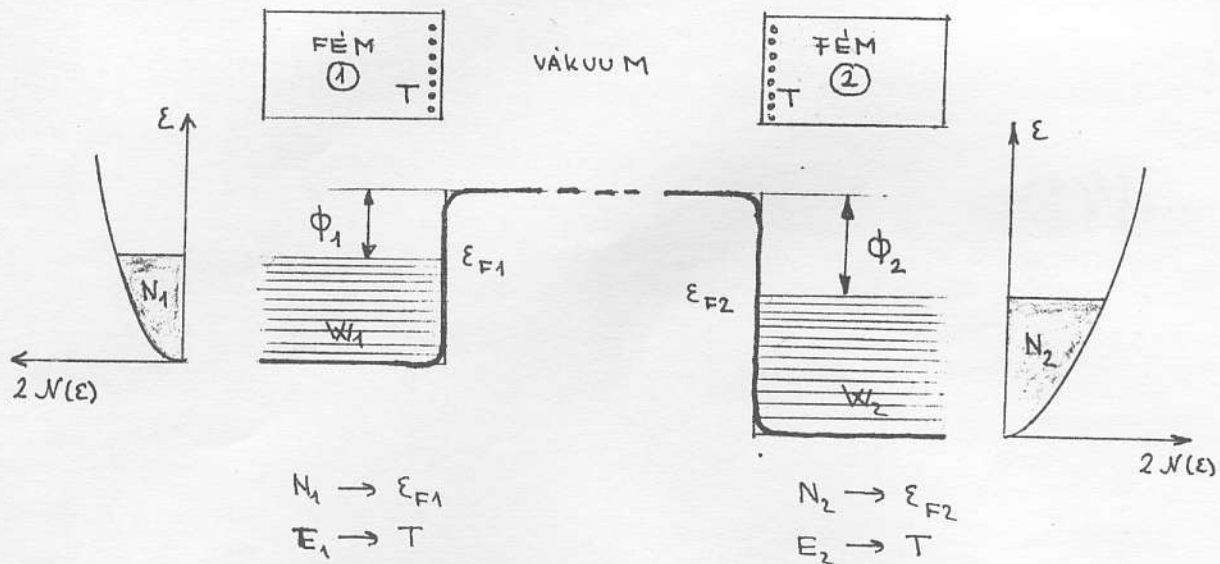
$$\text{ahol } E \approx E_0 + \underbrace{Nk}_{R} \frac{T^2}{T_F}$$

$$C_{ve} \approx 2R \frac{T}{T_F} \ll R$$

Tehát szilárd testek fajhőjének számításakor $T \approx 300 \text{ K}$ -on

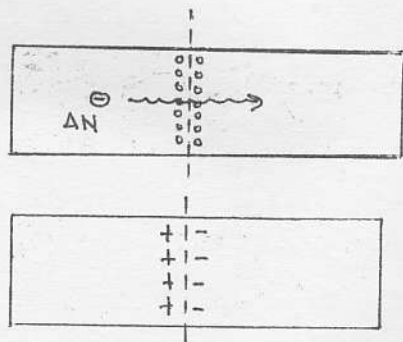
$$C_v = \underbrace{C_{vi}}_{\text{iontörzsek rezgéséből adódó}} + C_{ve} \approx 3R + \underbrace{C_{ve}}_{\ll R} \approx 3R$$

Dulong-Petit törvény



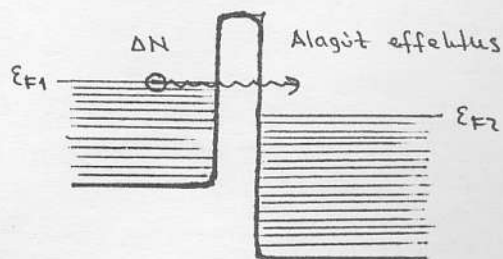
$$W = W_1 \cdot W_2$$

$$W = \max$$



$$E = E_1 + E_2 \rightarrow T$$

$$N = N_1 + N_2 \rightarrow \varepsilon_F$$



Ha $\Delta N \ll N_1, N_2$

akkor

$\varepsilon_{F1}, \varepsilon_{F2}$ helyzete
állandónak tekinthető
(az adott fémhez
képest)

↓
 $N = \text{állandó}$

ε_F a RENDSZER
FERMI szintje

$$\varepsilon_{F1} = \varepsilon_{F2} = \varepsilon_F$$

A Fermi szintek
kiegyenlítődnek!

$$W = \max$$

$$e\Delta u \equiv \Phi_2 - \Phi_1$$

