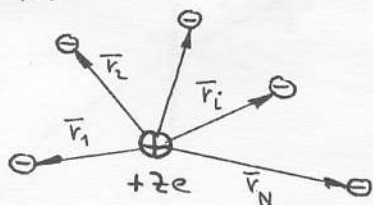


1.5. Sok (azonos) részecskéből álló rendszer vizsgálata

1.5.1. A \hat{H} operátor és az állapotfüggvény

pe:

Klasszikus mechanika:

$$\{\vec{r}_i, \vec{p}_i\}_{i=1}^N \quad (\text{alapmennyiségek})$$

A Hamilton függvény:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{elektronok közötti kölcsönhatás (Coulomb)}}$$

Kvantummechanika:

(II. Axióma:)

$$\left\{ \hat{x}_i, \hat{y}_i, \hat{z}_i, \hat{p}_{xi}, \hat{p}_{yi}, \hat{p}_{zi} \right\}_{i=1}^N$$

\downarrow x_i \downarrow $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$

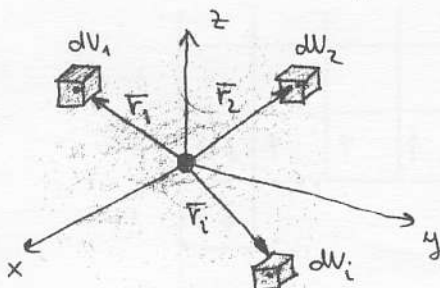
$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right\} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{(spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk)}}$$

\downarrow $\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$

(III. Axióma) A rendszer összenergiája

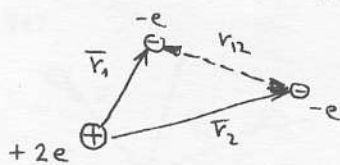
$$\hat{H} \Psi = E \Psi \rightarrow \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \neq \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_N(\vec{r}_N)$$

A megoldása matematikailag nagyon bonyolult

↓
KÖZELÍTÉSEK kellenek↓
egy-részecske közelítésA Ψ állapotfüggvény fizikai tartalma:

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)|^2 dV_1 dV_2 dV_3 \dots dV_N$$

1.5.2 A HARTREE közelítés és az SCF módszer

Példa modell: He atom ($Z=2, N=2$)Csak a pályá-állapotokkal foglalkozunk.
A spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk.

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(r_1) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(r_2) \right] + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{\substack{\text{kölcsönhatás} \\ \equiv W(r_{12})}}$$

\uparrow $\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$

 $\equiv \hat{H}_0$ (a kölcsönhatás mentes elektronrendszer Hamilton operátora)

A feladat:

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rightarrow \text{megoldása nagyon bonyolult}$$

Durva közelítés: Az elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagoljuk: $W(r_{12}) \cong 0$

$$\hat{H}_0 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_0 \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Szeparálható megoldás: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_i(\vec{r}_1) \cdot \psi_j(\vec{r}_2)$

jelölési megállapodás:

$\psi_i(\vec{r}_k)$
 \uparrow az állapotfüggvény azonosítója \nwarrow az elektron azonosítója

Adódik a következő (Feladat: bizonyítás)

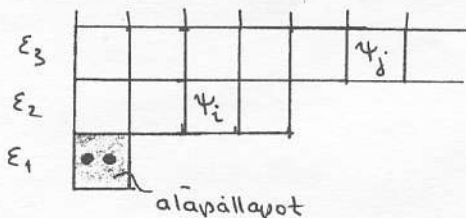
$$\left. \begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(r_1) \right] \psi_i(\vec{r}_1) &= \epsilon_i \psi_i(\vec{r}_1) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(r_2) \right] \psi_j(\vec{r}_2) &= \epsilon_j \psi_j(\vec{r}_2) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Két független} \\ \text{egyenlet.} \\ \text{Matematikai alakjuk} \\ \text{pontosan ugyanolyan.} \end{array}$$

↓

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_c(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = \epsilon \psi(\vec{r})$$

Matematikailag ez ekvivalens egy egyenlettel

Megoldások:



Az alapállapot:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_1(\vec{r}_2)$$

$$E = 2\epsilon_1$$

A Hartree közelítés:

megoldandó a: $\hat{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$

$$E = \langle \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{H} | \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = E_{\text{mért}}$$

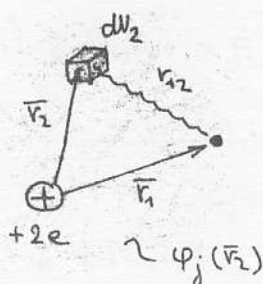
közelítés:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \approx \tilde{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \varphi_i(\vec{r}_1) \varphi_j(\vec{r}_2)$$

$$\tilde{E} = \underbrace{\langle \tilde{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{H} | \tilde{\Psi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle}_{?} \rightarrow E_{\text{mért}}$$

legyen:

$$\left. \begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(r_1) + U_2(\vec{r}_1) \right] \varphi_i(\vec{r}_1) &= \tilde{E}_i \varphi_i(\vec{r}_1) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(r_2) + U_1(\vec{r}_2) \right] \varphi_j(\vec{r}_2) &= \tilde{E}_j \varphi_j(\vec{r}_2) \end{aligned} \right\} \text{csatolt} \\ \text{egyenletek}$$



↑
az elektronok közötti kölcsönhatást
veszi (közelítőleg!) figyelembe.

↓
HARTREE javaslata a következő volt:

$$U_2(\vec{r}_1) = \int_{\infty} \frac{e^2 |\varphi_j(\vec{r}_2)|^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_2$$

$$g_j(\vec{r}_2) \equiv -e |\varphi_j(\vec{r}_2)|^2 \quad (\text{a második elektron mint töltésfelhő})$$

Adódik tehát:

$$\left. \begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 + V_c(r_1) + \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\varphi_j(\vec{r}_2)|^2 dV_2 \right] \cdot \varphi_i(\vec{r}_1) &= \tilde{E}_i \varphi_i(\vec{r}_1) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + V_c(r_2) + \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\varphi_i(\vec{r}_1)|^2 dV_1 \right] \cdot \varphi_j(\vec{r}_2) &= \tilde{E}_j \varphi_j(\vec{r}_2) \end{aligned} \right\}$$

csatolt integro-differenciál egyenlet rendszer.

SCF (Self Consistent Field) megoldásokat keresünk.

Megoldás módstere: iteráció (Ha konvergál \rightarrow sokszor NEM)

$$0: \varphi_j(\vec{r}_2)^{(0)} \rightarrow \varphi_i(\vec{r}_1)^{(0)}$$

$$1: \varphi_j(\vec{r}_2)^{(1)} \rightarrow \varphi_i(\vec{r}_1)^{(1)}$$

$$2: \varphi_j(\vec{r}_2)^{(2)} \rightarrow \varphi_i(\vec{r}_1)^{(2)}$$

$$\downarrow \text{stb...} \quad \text{SCF ha} \quad \left\{ \begin{aligned} \varphi_j^{(n)} &\approx \varphi_j^{(n+1)} \\ \varphi_i^{(n)} &\approx \varphi_i^{(n+1)} \end{aligned} \right\}$$

75

Általában : N db elektronból álló rendszer esetén

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_c(r_i) + \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} |\varphi_j(\vec{r}_j)|^2 dV_j \right] \varphi_i(\vec{r}_i) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r}_i) \quad (i=1,2,3,4,\dots,N)$$

$$\sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N U_j(\vec{r}_i)$$

KÖZELÍTÉS

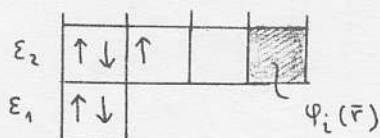
$$\equiv U(\vec{r}_i)$$

minden elektróra pontosan ugyanolyan alakú kifejezés (valójában N db teljesen egyforma egyenletünk van)

Így csak egyetlen egyenlet maradt

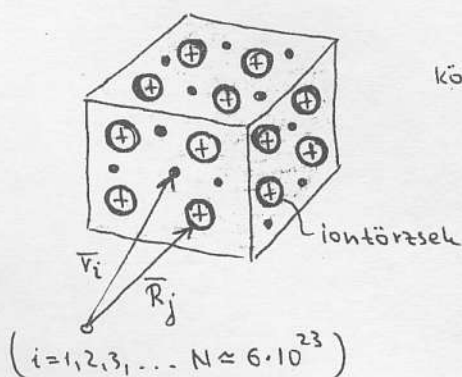
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_c(r) + U(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r})$$

$\equiv V(\vec{r})$ (u.n. modell potenciál, ettől függ a közelítés jósága!)



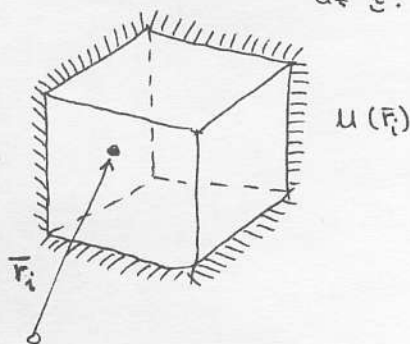
Példa (a szilárdtestfizikában használt egyszerű fémmodell)

az i . elektron



N db (vegyérték) elektróból áll a rendszer

KÖZELÍTÉS



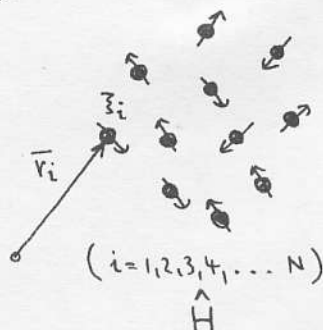
$$\sum_{j=1}^N V_c(\vec{r}_i; \vec{R}_j) + \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N U_j(\vec{r}_i) \equiv U(\vec{r}_i)$$

az iontörzsek hatása

a többi elektron hatása

potenciál doboz

↓
SOMMERFELD fémmodell



N db azonos részecskéből álló rendszer.

A rendszer energiája:

$$\hat{H}\Phi = E\Phi$$

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_N)$$

$$\bar{x}_i \equiv (\bar{r}_i, \bar{z}_i)$$

A részecskék NEM KÜLÖNBÖZTETHETŐK MEG:

$$\left| \Phi(\dots \bar{x}_i \dots \bar{x}_j \dots) \right|^2 = \left| \Phi(\dots \bar{x}_j \dots \bar{x}_i \dots) \right|^2$$

Tehát

$$\Phi(\dots \bar{x}_i \dots \bar{x}_j \dots) = c \cdot \Phi(\dots \bar{x}_j \dots \bar{x}_i \dots) = \underbrace{c \cdot c}_{c^2=1} \cdot \Phi(\dots \bar{x}_i \dots \bar{x}_j \dots)$$

$$c^2=1 \Rightarrow \boxed{c=\pm 1}$$

PAULI elv (áttalánosítva!)

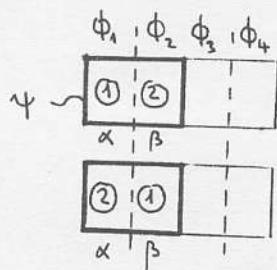
$$c = \begin{cases} -1 & \text{feles spinű részecskék} \rightarrow \text{fermionok} \rightarrow \text{FERMI-DIRAC stat.} \\ +1 & \text{egész spinű részecskék} \rightarrow \text{bozonok} \rightarrow \text{BOSE-EINSTEIN stat.} \end{cases}$$

Következmények

1. Fermionrendszer (pl $N=2$, elektronok $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$)

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \approx \tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) \neq \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1) = -\tilde{\Phi}(\bar{x}_2, \bar{x}_1)$$

(Ez így NEM jó)



$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) - \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1) \right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi_1(\bar{x}_1) & \phi_1(\bar{x}_2) \\ \phi_2(\bar{x}_1) & \phi_2(\bar{x}_2) \end{vmatrix}$$

Áttalánosítás \downarrow

$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) \equiv \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \phi_1(\bar{x}_1) & \phi_1(\bar{x}_2) & \dots & \phi_1(\bar{x}_N) \\ \phi_2(\bar{x}_1) & \phi_2(\bar{x}_2) & \dots & \phi_2(\bar{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\bar{x}_1) & \phi_N(\bar{x}_2) & \dots & \phi_N(\bar{x}_N) \end{vmatrix} \quad \Leftrightarrow$$

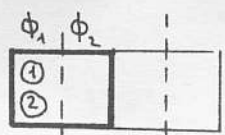
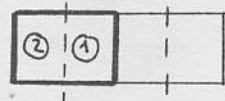
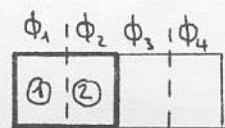
(u.n. determináns hullámfüggvény)

(-1)

Tehát: csak egy részecske lehet ugyanabban a spin-pálya állapotban.

2. Bozonrendszer (pl: $N=2$)

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \approx \tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \underbrace{\phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) \neq \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1)}_{(\text{Ez így NEM jó!})} = \tilde{\Phi}(\bar{x}_2, \bar{x}_1)$$



$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(\bar{x}_1)\phi_2(\bar{x}_2) + \phi_1(\bar{x}_2)\phi_2(\bar{x}_1)]$$

DE LEHET az alábbi is !

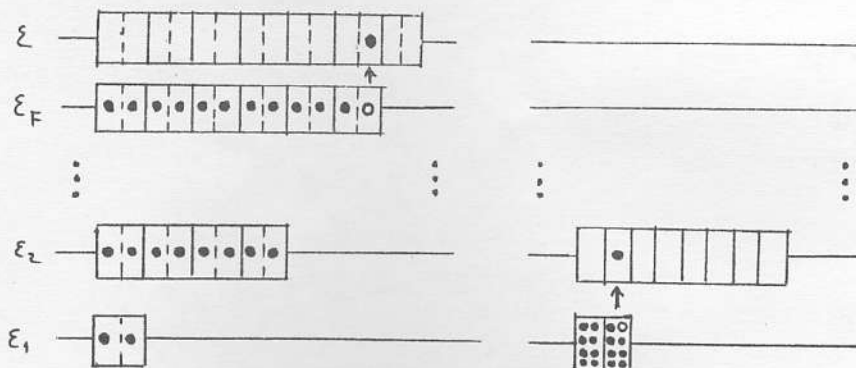
$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = \phi_1(\bar{x}_1)\phi_1(\bar{x}_2) = \tilde{\Phi}(\bar{x}_2, \bar{x}_1)$$

Tehát egynél több részecske is lehet ugyanabban a spin-pályán állapotban

↓ Általánosítás

$$\tilde{\Phi}(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) = \underbrace{C \sum \hat{O}}_{\text{}} (\phi_{i_1}(\bar{x}_1)\phi_{i_2}(\bar{x}_2) \dots \phi_{i_N}(\bar{x}_N))$$

Fermion és bozon rendszer alapállapotainak az összehasonlítása:

Alapállapot ($T=0$)

↓ gerjesztés

ELTÉRŐ MAKROSKÓPIKUS VISELKEDÉS → MÉRÉSSSEL ellenőrizhető!

↓

Nagyszámú részecske esetén ($N \approx 6 \cdot 10^{23}$)

Statisztikus módszerek kellenek → Kvantumstatistikák

1.5.4. Kvantumstatistikák

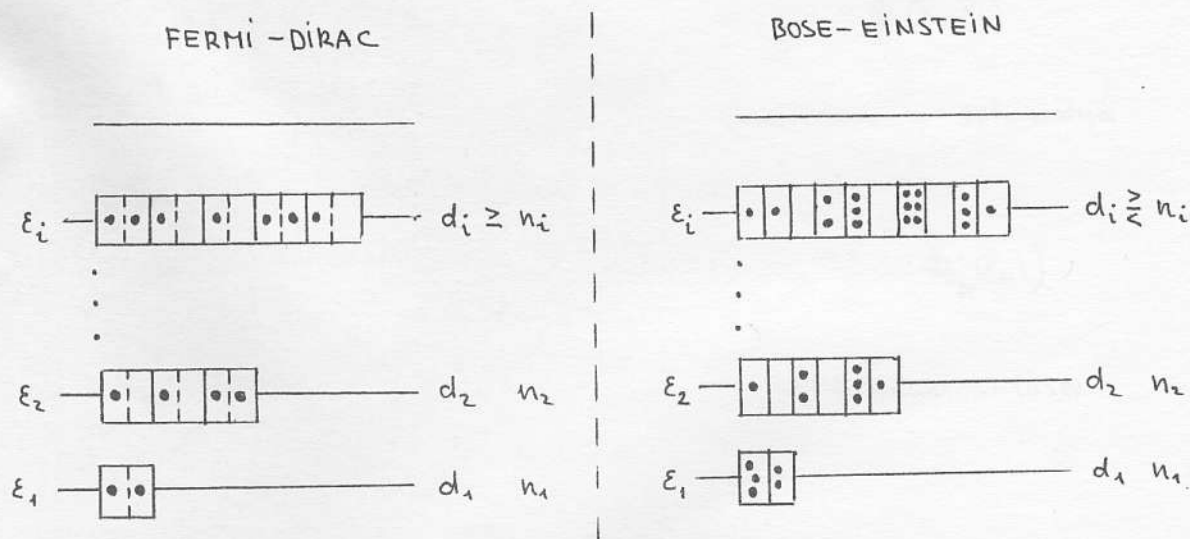
N db részecskéből álló rendszer : $\begin{cases} \text{bozonok} \\ \text{fermionok} \end{cases}$

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_j, \dots, \bar{x}_N) = \pm \Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_j, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_N)$$

Egy-részecske közelítés

$$\Phi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_i, \dots, \bar{x}_N) \cong \underbrace{C \sum \hat{O}}_{\text{egy-részecske állapotok}} (\underbrace{\phi_{i_1}(x_1) \cdot \phi_{i_2}(x_2) \cdots \phi_{i_N}(x_N)}_{\text{egy-részecske állapotok}})$$

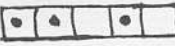
$N \gg 1 \rightarrow$ statisztikai módszerek.

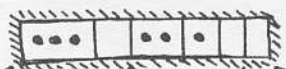


Termodinamikai állapot (T) \rightarrow makroállapot : $\{n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\}$
 \downarrow
 mikroállapot
 termodinamikai valószínűség : W

$$W(n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots) = \begin{cases} \prod_i \binom{d_i}{n_i} = \prod_i \frac{d_i!}{n_i! (d_i - n_i)!} & \text{(F-D)} \\ \prod_i \frac{(d_i + n_i - 1)!}{n_i! (d_i - 1)!} \approx \prod_i \frac{(d_i + n_i)!}{n_i! d_i!} & \text{(B-E)} \end{cases}$$

Magyarázat: kombinatorikai modell:

(F-D)  $\binom{d_i}{n_i}$

(B-E) 
 rögzített fal mozgatható fal rögzített fal

a mozgatható falak száma : $(d_i - 1)$

Feladat:

$$X/(\underbrace{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots}_2) = \max; \text{ feltéve, hogy: } \sum_i n_i = N$$

$$\sum_i \varepsilon_i n_i = E$$

Megolais :

Feltételes szélsőérték feladat \rightarrow közönséges szélsőérték feladat
LAGRANGE (módszer)

$$W(\dots n_i \dots) \rightarrow S = k \cdot \ln W \rightarrow S = \ln W$$

$$\left. \begin{aligned} \sum_i n_i &= N & \rightarrow & N - \sum_i n_i = 0 \\ \sum_i \varepsilon_i n_i &= E & \rightarrow & E - \sum_i \varepsilon_i n_i = 0 \end{aligned} \right\} \text{ mellékfeltételek}$$

$$K(n_1, n_2, \dots, n_i, \dots) \equiv S + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{kesőbb meghatározható}}}{\alpha} (N - \sum_i n_i) + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{állandók}}}{\beta} (E - \sum_i \epsilon_i n_i)$$

$$\boxed{\frac{\partial K}{\partial u_i} = 0} \quad (u_i) \text{ közönséges (feltétel nélküli) szélső érték}$$

$$\frac{\partial K}{\partial n_i} = \frac{\partial}{\partial n_i} \ln W + \alpha(\phi-1) + \beta(\phi-\varepsilon_i) = \underbrace{\frac{\partial}{\partial n_i} \ln W}_{(\text{B-E}) \text{ vagy } (\text{F-D})} - \alpha - \beta \varepsilon_i = 0$$

$$\ln W = \begin{cases} \sum_i \ln d_i! + \sum_i [-\ln(d_i - n_i)! - \ln n_i!] & (F-D) \\ \sum_i [\ln(d_i + n_i)! - \ln n_i!] - \sum_i \ln d_i! & (B-E) \end{cases}$$

STIRLING közelítés (matematika): $\ln x! \approx x \ln x - x$ ha $x \gg 1$
($n_i \gg 1$ általában, ha $N \gg 1$)

$$\ln W \approx \begin{cases} \sum_i \left\{ -(d_i - u_i) \ln(d_i - u_i) + (d_i - u_i) - u_i \ln u_i + u_i \right\} + \sum_i \ln d_i! & \text{(F-D)} \\ \sum_i \left\{ (d_i + u_i) \ln(d_i + u_i) - (d_i + u_i) - u_i \ln u_i + u_i \right\} - \sum_i \ln d_i! & \text{(B-E)} \end{cases}$$

azaz

$$\ln W \approx \begin{cases} \sum_i \left\{ -(d_i - u_i) \ln (d_i - u_i) - u_i \ln u_i \right\} & + \text{allando} & (F-D) \\ \sum_i \left\{ (d_i + u_i) \ln (d_i + u_i) - u_i \ln u_i \right\} & + \text{allando} & (B-E) \end{cases}$$

80

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_i} = \begin{cases} \left[+\ln(d_i - n_i) - \frac{(d_i - n_i)}{(d_i - n_i)}(-1) - \ln n_i - \frac{n_i}{n_i} \right] & \text{(F-D)} \\ \left[+\ln(d_i + n_i) + \frac{(d_i + n_i)}{(d_i + n_i)} - \ln n_i - \frac{n_i}{n_i} \right] & \text{(B-E)} \end{cases}$$

$$\frac{\partial \ln W}{\partial n_i} = \begin{cases} \ln\left(\frac{d_i}{n_i} - 1\right) & \text{(F-D)} \\ \ln\left(\frac{d_i}{n_i} + 1\right) & \text{(B-E)} \end{cases} = \ln\left(\frac{d_i}{n_i} \mp 1\right)$$

Tehát

$$\frac{\partial K}{\partial n_i} = \ln\left(\frac{d_i}{n_i} \mp 1\right) - \alpha - \beta \varepsilon_i = 0$$

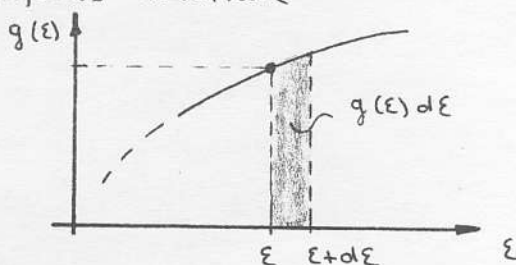
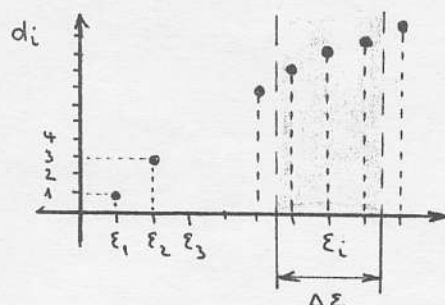
$$\frac{d_i}{n_i} \mp 1 = e^{\alpha + \beta \varepsilon_i}$$

$$\frac{d_i}{n_i} = e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} \pm 1$$

$$n_i = \frac{d_i}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} \pm 1} \equiv d_i \cdot \underbrace{f(\varepsilon_i; \alpha, \beta)}_{\text{elosztásfüggvény}}$$

$$\sigma = \begin{cases} +1 & \text{FERMI-DIRAC} \\ 0 & \text{MAXWELL-BOLTZMANN (!)} \\ -1 & \text{BOSE-EINSTEIN} \end{cases}$$

$N \gg 1$ esetén a Heves u.n. kvázifolytonos közelítésre



d_i (\equiv degeneráció azaz a spin-pálya állapotok száma)



$g(\varepsilon)$ (\equiv az állapotsűrűség)

$$\rightarrow g(\varepsilon) \equiv d_s \cdot \mathcal{N}(\varepsilon)$$

$\underbrace{\hspace{1cm}}_{\text{spin állapotok száma}} \cdot \underbrace{\hspace{1cm}}_{\text{pálya állapot sűrűség}}$

Tehát:

kvantált energiaszintek \rightarrow (kvázi) folytonos energiaszintek

$$d_i \rightarrow g(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$n_i \rightarrow n(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$\varepsilon_i \rightarrow \varepsilon$$

$$n_i = d_i f(\varepsilon_i; \alpha, \beta) \rightarrow n(\varepsilon) d\varepsilon = g(\varepsilon) \cdot f(\varepsilon; \alpha, \beta) d\varepsilon$$

$$n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \frac{1}{e^{\alpha + \beta \varepsilon} + \sigma}$$

 β meghatározása:

$$\sum_i \varepsilon_i n_i = E \quad (= \text{állandó})$$

$$E = E(T) \rightarrow \beta = \beta(T) \quad f(\varepsilon) \rightarrow f^{\text{M.B.}}(\varepsilon) \quad (\text{ha } \varepsilon \gg \varepsilon_1)$$

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\alpha + \beta \varepsilon} + \sigma} \rightarrow \frac{e^{-\alpha - \beta \varepsilon}}{1 + \sigma e^{-\alpha - \beta \varepsilon}} = f^{\text{M.B.}}(\varepsilon) = \text{all.} \cdot e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}$$

$$\boxed{\beta = \frac{1}{kT}}$$

 α meghatározása:

$$\sum_i n_i = N \rightarrow \int n(\varepsilon) d\varepsilon = \int \underbrace{g(\varepsilon)}_{\text{ismerni kell!}} f(\varepsilon; T, \alpha) d\varepsilon = N = \text{állandó}$$

$$\alpha \equiv -\frac{\mu}{kT} \quad (\mu \text{ u.n. kémiai potenciál} \rightarrow \text{termodinamika})$$

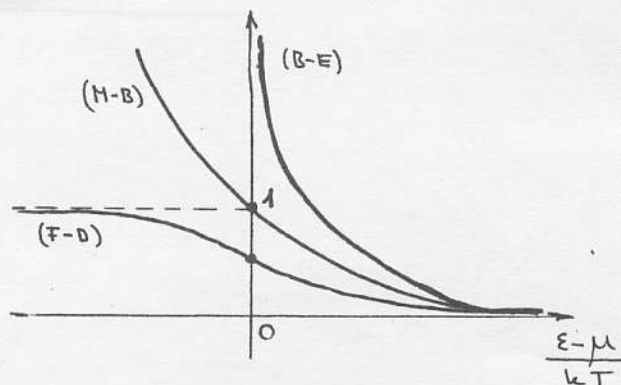
$$\boxed{N = \text{állandó} \rightarrow \mu}$$

Tehát:

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

$$\sigma = \begin{cases} +1 & \text{FERMI-DIRAC} \\ 0 & \text{MAXWELL-BOLTZMANN} \\ -1 & \text{BOSE-EINSTEIN} \end{cases}$$

Szemléltetése közös ábrán

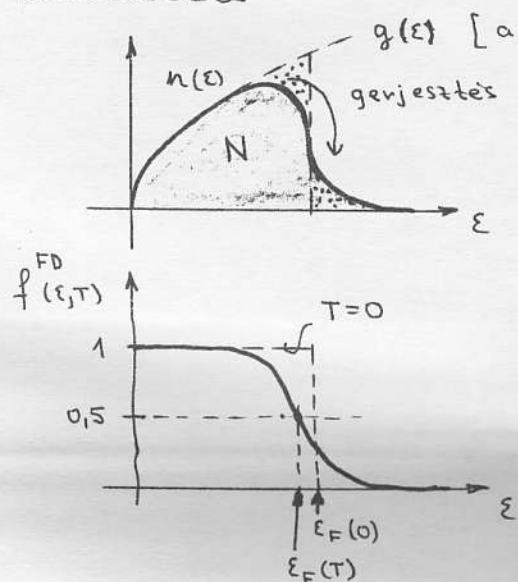


$$\boxed{n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT} + \sigma} + \sigma}}$$

A végtelenek energiaszerinti eloszlás függvénye

A μ kémiai potenciál meghatározása:

FERMI-DIRAC statisztika esetén:



$$\mu(T) \equiv \varepsilon_F(T) \quad (\text{heve: FERMI energia})$$

$$n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \cdot f^{FD}(\varepsilon, T)$$

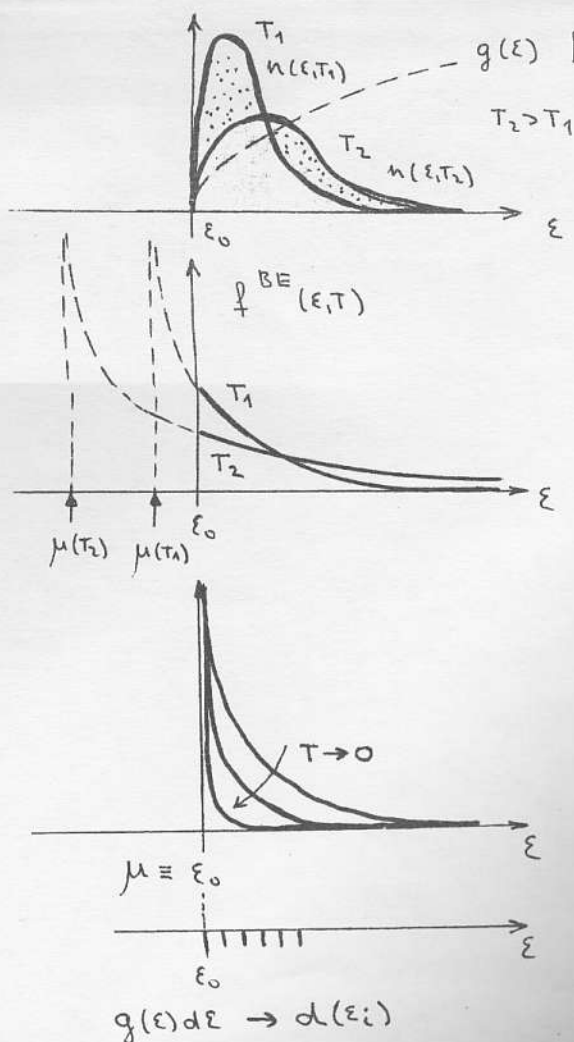
$$N = \int_0^{\infty} n(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \cdot f^{FD}(\varepsilon, T) d\varepsilon =$$

$N = \text{állandó!}$

\downarrow

$\varepsilon_F(T)$

BOSE-EINSTEIN statisztika esetén:

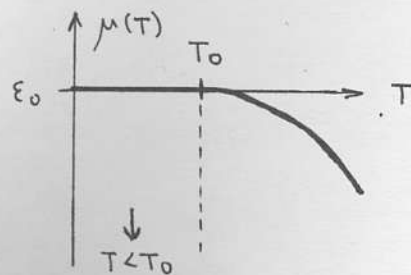


$$n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \cdot f^{BE}(\varepsilon, T)$$

$$N = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) f^{BE}(\varepsilon, T) d\varepsilon = \text{állandó}$$

$\rightarrow \mu(T)$

$$f^{BE} \geq 0 \quad \text{ha} \quad \mu(T) \leq \varepsilon_0$$



$$N = \underbrace{N_0(T)}_{\varepsilon_0} + \underbrace{N_g(T)} = \text{állandó}$$

MODELL: A bozonok száma változik
[$N = N(T)$]

Elektromágneses
hullámok

FOTONOK

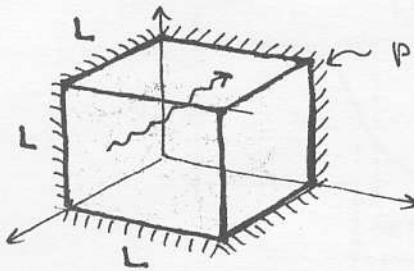
Rugalmas közegben
fellépő hullámok

FONONOK

KLASSZIKUS
FIZIKAKVANTUM
FIZIKA

BOZONOK

Modell:

peremfeltételek \rightarrow állóhullámok \rightarrow módusok

$$\vec{k} (k_x, k_y, k_z)$$

$$\omega = ck \quad \text{diszperziós reláció}$$

$$c = \frac{\omega}{k} = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = A \cdot \underbrace{\sin\left(n_x \frac{\pi}{L} x\right)}_{\equiv k_x} \underbrace{\sin\left(n_y \frac{\pi}{L} y\right)}_{\equiv k_y} \underbrace{\sin\left(n_z \frac{\pi}{L} z\right)}_{\equiv k_z}$$

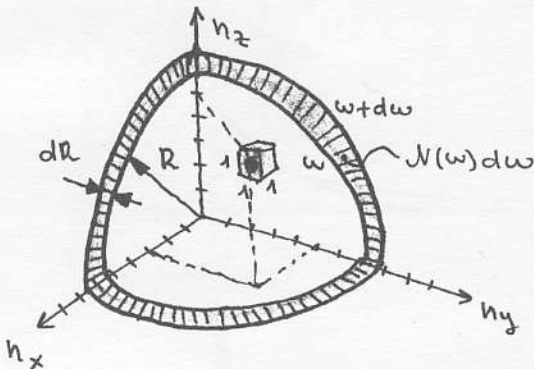
$$\omega^2 = c^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$\omega^2 = c^2 \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\text{módus} \Rightarrow (n_x, n_y, n_z)$$

módussűrűség (\equiv állapotsűrűség)

$$g(\omega) = d_p \cdot \mathcal{N}(\omega)$$

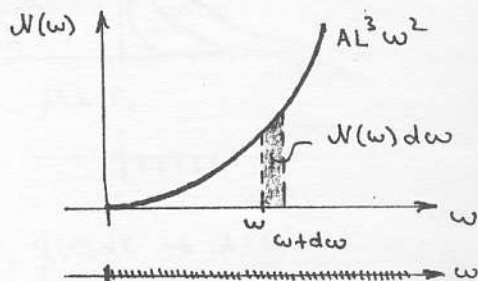
↑ térbeli állapotsűrűség
polarizációk száma

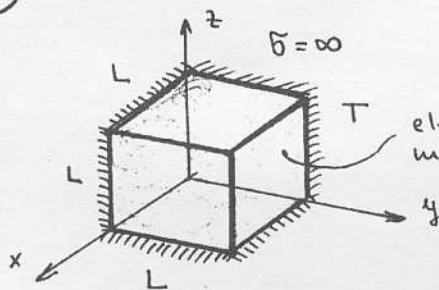
$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{L^2}{c^2 \pi^2} \omega^2 \equiv R^2$$

$$dR = \frac{L}{c\pi} d\omega$$

$$\mathcal{N}(\omega) d\omega = \frac{1}{8} 4\pi R^2 dR = \frac{\pi^2}{2} \frac{L^2 \omega^2}{c^2 \pi^2} \cdot \frac{L}{c\pi} d\omega = A \cdot L^3 \omega^2 d\omega$$

$$\mathcal{N}(\omega) = A \cdot L^3 \cdot \omega^2$$



elektromágneses
mező (\vec{E}, \vec{B})

→ állóhullámok → módusok

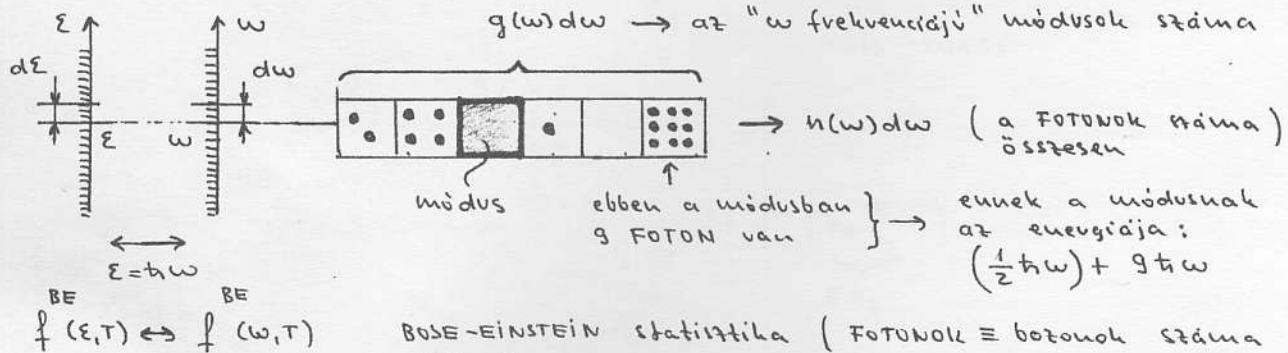
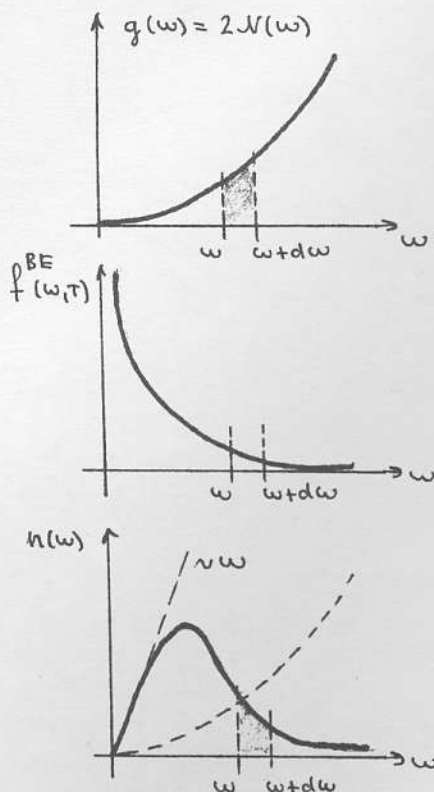
az ω frekvenciájú módusok
száma:

$$g(\omega) d\omega = \underbrace{d_p \cdot N(\omega) d\omega}_{2 \cdot A L^3 \omega^2}$$

Egy ω frekvenciájú módus energiája:

Modell

$$\varepsilon_{\text{mod}} = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \omega}_{\text{nullaponti energia}} + \underbrace{n \cdot \hbar \omega}_{\text{FOTON}} \quad (n=0,1,2,\dots)$$

FOTON \equiv "energia adag (kvantum)"Egy ω frekvenciájú módus "n (db) FOTONT tartalmaz"BOSE-EINSTEIN statisztika (FOTONOK \equiv bozonok száma
változik: $\mu \equiv 0$, a nullaponti energiától eltekintünk)

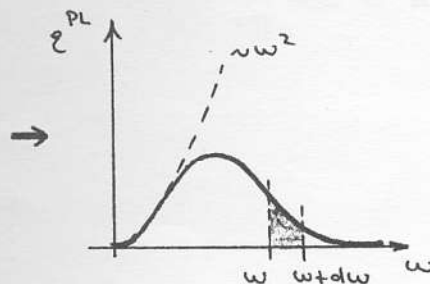
Az összenergia:

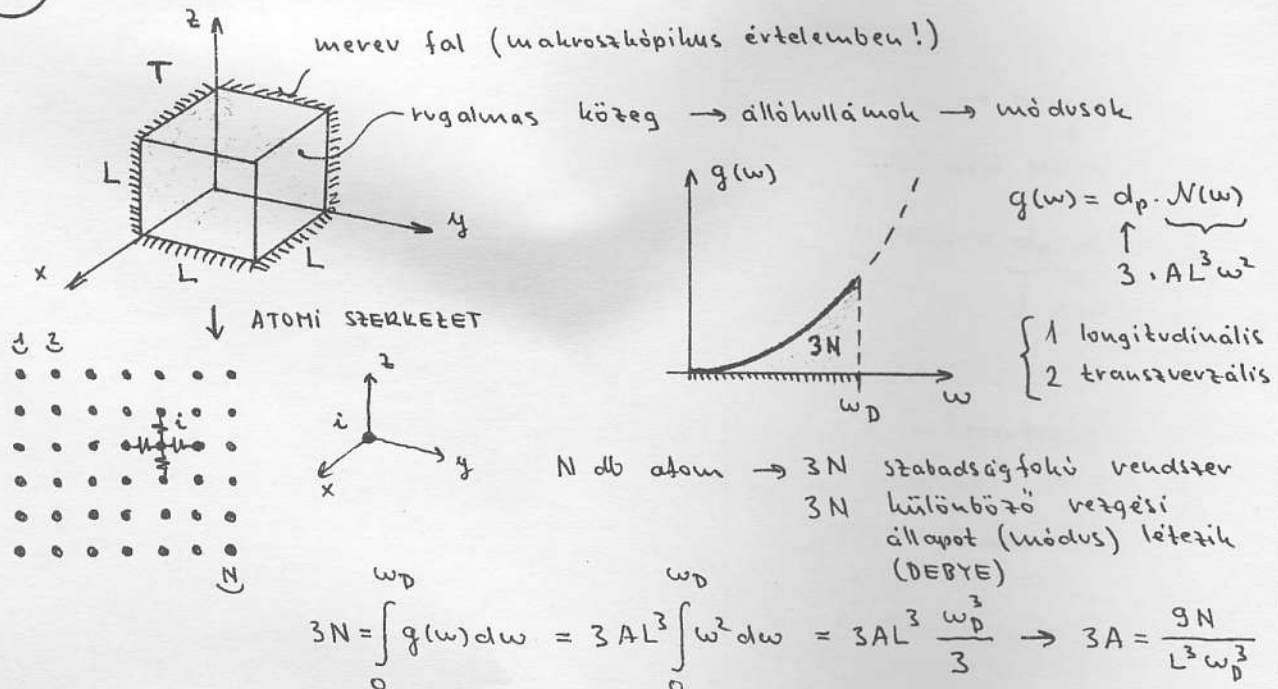
$$E = \int_0^\infty (\hbar \omega) \cdot n(\omega) d\omega = \int_0^\infty (\hbar \omega) \cdot g(\omega) f^{\text{BE}}(\omega, T) d\omega =$$

$$= \int_0^\infty \hbar \omega \cdot 2AL^3 \omega^2 \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} d\omega \equiv L^3 \int_0^\infty g(\omega) d\omega$$

azaz

$$g(\omega) = 2A \frac{\hbar \omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \sim \xi^{\text{PL}}(\omega) \quad (\text{PLANCK})$$

Fekete test
(hőmérsékleti)
sugárzása.

1.5.5.2. Fonongáz

Tehát:

$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{9N}{L^3 \omega_D^3} \omega^2 & \text{ha } \omega \leq \omega_D \\ 0 & \text{ha } \omega > \omega_D \end{cases}$$

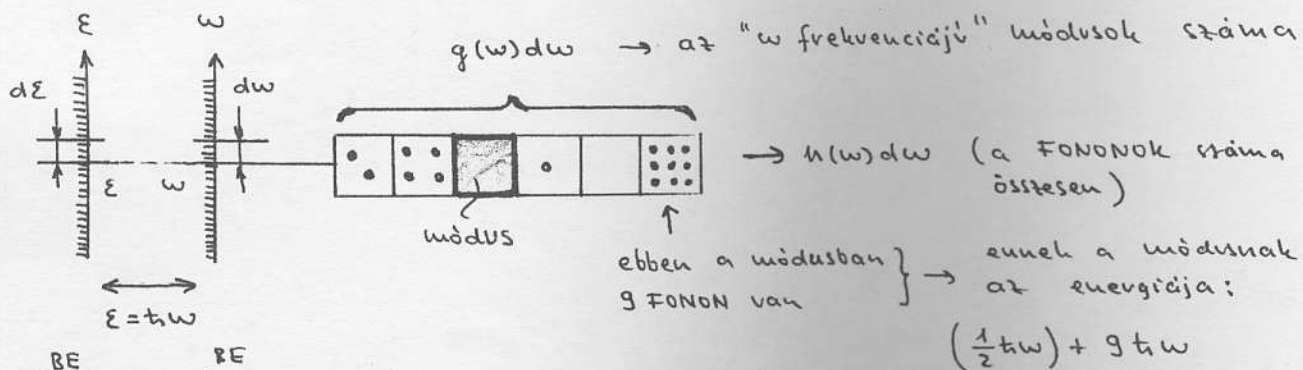
Kvantummechanika

kvantálás:

Egy ω frekvenciájú módus energiája:

Modell

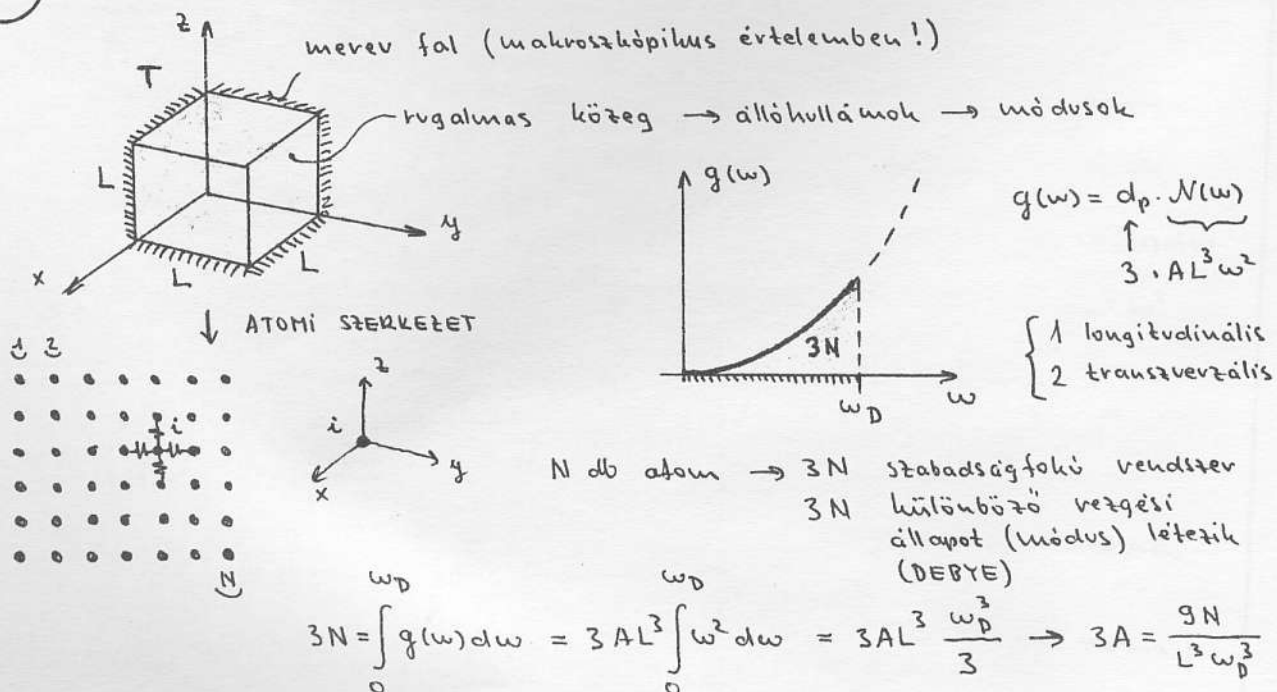
$$\epsilon_{\text{mod}} = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \omega}_{\text{nullaponti energia}} + n \cdot \hbar \omega \quad (n=0,1,2,3,\dots)$$

"FONON" \equiv "energia adag (kvantum)"Egy ω frekvenciájú módus " n (db) FONONT tartalmaz"

$$\overset{\text{BE}}{f(\epsilon, T)} \leftrightarrow \overset{\text{BE}}{f(\omega, T)}$$

BOSE-EINSTEIN statisztika:

(FONONOK \equiv bozonok száma változik: $\mu \equiv 0$;
 a nullaponti energiától eltekinthünk)

1.5.5.2. Fonongáz

Tehát:

$$g(\omega) = \begin{cases} \frac{9N}{L^3 \omega_D^3} \omega^2 & \text{ha } \omega \leq \omega_D \\ 0 & \text{ha } \omega > \omega_D \end{cases}$$

Kvantummechanika

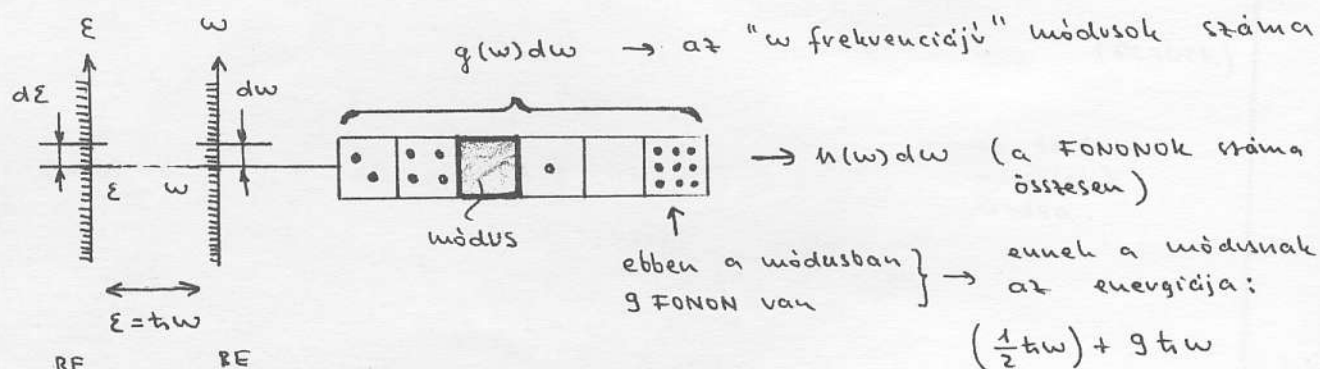
kvantálás:

Egy ω frekvenciájú módus energiája:

Modell

$$\epsilon_{\text{mod}} = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \omega}_{\text{nullaponti energia}} + n \cdot \hbar \omega \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots)$$

"FONON" \equiv "energia adag (kvantum)"

Egy ω frekvenciájú módus " n (db)" FONONT tartalmaz

BOSE-EINSTEIN statisztika:

(FONONOK \equiv bozonok száma változik: $\mu \equiv 0$;
 a nullaponti energiától eltekinthünk)

A rendszer összenergiája:

$$E_R = \int_0^{\infty} (\hbar\omega) n(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} (\hbar\omega) \cdot g(\omega) f^{BE}(\omega, T) d\omega =$$

$$= \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \left(9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3} \right) \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = 9N \frac{\hbar}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_Z$

matematika:

$$x \equiv \frac{\hbar\omega}{kT} \rightarrow dx = \frac{\hbar}{kT} d\omega$$

$$x_D \equiv \frac{\hbar\omega_D}{kT} \rightarrow \boxed{\hbar\omega_D \equiv k\theta_D}$$

θ_D : DEBYE hőmérséklet

$$E_R = 9N \frac{\hbar}{\omega_D^3} \left(\frac{kT}{\hbar} \right)^4 \cdot \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

A rendszer teljes (vezgési) energiája így függ a hőmérséklettől.

Legyen

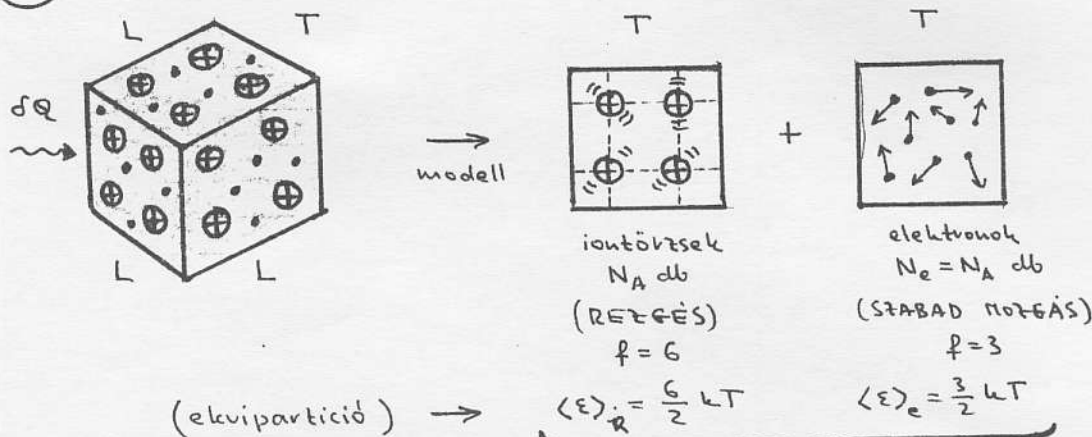
$$T \ll \theta_D \quad \text{azért} \quad \frac{\theta_D}{T} \rightarrow \infty$$

$$E_R(T) = \underbrace{9NkT}_{\substack{\uparrow \\ \text{mólus-} \\ \text{esetén} \\ R=Nk}} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx}_{\frac{\pi^4}{15}} \rightarrow E_R(T) \approx 3RT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \cdot \frac{\pi^4}{5}$$

$\text{ha } T \ll \theta_D$

Jellegetes θ_D adatok:

	Pb	Ag	Zn	Cu	Al	C
θ_D [K]	88	215	308	345	398	1850



A rendszer energiája: $E = N_A \langle \epsilon \rangle_R + N_e \langle \epsilon \rangle_e = N_A kT \left(3 + \frac{3}{2}\right) = RT \left(3 + \frac{3}{2}\right)$

A fajhő (mólaris hőkapacitás) fogalma

$\delta Q \rightsquigarrow dU \equiv dE \xrightarrow{T} \delta W = p dV$
 $m = M$
 (mólyi mennyiség)

$\delta Q = dE + p dV \quad | \quad dV = 0$

$\delta Q = c_v M dT$

$dE = c_v M dT \equiv C_v dT \rightarrow$

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

A klasszikus fizikai modell:

$E = RT \left(3 + \frac{3}{2}\right) \rightarrow C_v = \left(3 + \frac{3}{2}\right) R$

MÉRÉS: $C_v = 3R \quad T \approx 300K$

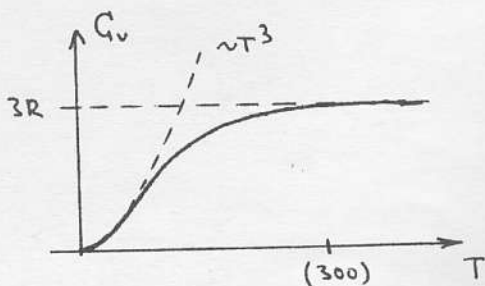
Dulong Petit törvény

A kvantummechanikai modell esetén:

$C_v = C_{vR} + C_{vE}$

$C_{vR} = \frac{dE_R}{dT} = \begin{cases} 3R \frac{4\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 & [ha \quad T \ll \theta_D] \end{cases}$

$f^{BE} \rightarrow f^{MB}$ (ekvipartíció tétel) $E_R = 3RT \quad [T \gg \theta_D]$



MÉRÉS

$C_v \approx C_{vR} = 3R \cdot F(T) \Rightarrow \begin{cases} \sim \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 & T \ll \theta_D \\ = 3R & T \gg \theta_D \end{cases}$

$C_{vE} \approx 0$

szabad elektrongát fajhője

(?)