



Az Információ-technika és a Bionika Fizikája

Statisztikus fizika 2

2016 Tavasz

Dr. Csurgay Árpád István

„Mikro” állapot és „Makro” állapot

Tankönyv: 5. rész/ 281 – 300 oldalak

Ha egy rendszer hullámfüggv $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ akkor a rendszer

$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ *mikro-állapotban van*

Általában az energia sajátértékek „elfajulóak”.

Az ***E energiaszinten*** több (sok) különböző hullámfüggvény van

Egy testben az elektronok különböző energiákon helyezkednek el.

Az $N(E)$ a rendszer *makro-állapota*.

Energia sajátértékek

$E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$

A mikro-állapotok száma

az $1, 2, \dots, N$, energiaszinten

$Z_1, Z_2, \dots, Z_n, \dots$

Elektron populáció (tényleges)

az $1, 2, \dots, N$, energiaszinten

$N_1, N_2, \dots, N_n, \dots$

A Fermi függvény – Betöltési valószínűség

Egyensúlyi makro állapotban az elektronok száma (populációja) az E_i energiaszinten :
$$N_i^{\text{FD}} = \frac{Z_i}{e^{\alpha + \beta E_i} + 1}$$

Az α és β helyett vezessük be az alábbi jelöléseket:

$$\beta = \frac{1}{k_B \cdot T} \quad T \quad \text{Abszolút hőmérsékletnek nevezzük el}$$

$$\text{Boltzmann állandó: } k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ Ws/K}$$

$$\alpha = -\frac{E_F}{k_B \cdot T}, \quad E_F \quad \text{Fermi energia szintnek nevezzük.}$$

$$N_i^{\text{FD}} = \frac{Z_i}{e^{\alpha + \beta E_i} + 1} \rightarrow N_i^{\text{FD}} = Z_i \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{k_B T}} + 1}$$

$$N_i^{\text{FD}} = Z_i \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{k_B T}} + 1} = Z_i f(E_i)$$

Az E_i energiaszinten betölthető mikroállapotok száma Z_i

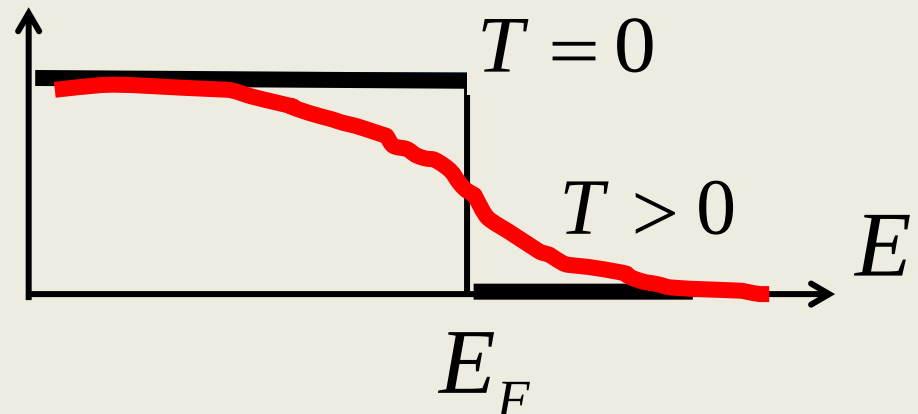
Az E_i energiaszint betöltési valószínűsége $f(E_i) = \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{k_B T}} + 1}$

$$T = 0 \rightarrow f_{T \rightarrow 0}(E_i) = \begin{cases} 1 & E_i < E_F \\ 0 & E_i > E_F \end{cases}$$

Fermi függvény

$$T > 0 \rightarrow f(E) =$$

$$= \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{k_B T}} + 1}$$



Az energia szintek “kvázi folytonosak”

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{h^2}{8ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad n_1 = 1, 2, \dots; \quad n_2 = 1, 2, \dots; \quad n_3 = 1, 2, \dots$$

A nagy dobozban két energia szint közötti különbség

$$\Delta E \sim E_0 = \frac{h^2}{8ma^2}$$

Egy $a = 1$ cm doboz esetén $\Delta E = 0,6 \cdot 10^{-33}$ J $= 4 \cdot 10^{-15}$ eV

Egy $a = 1$ cm oldalú fémdobozban a Fermi szint 6,95 eV.
A $8,24 \cdot 10^{22}$ „darab” elektron a 0 és ~ 7 eV között „kvázi folytonosan” helyezkedik el.

A Fermi szintet abszolút nulla fokon számoltuk ki:

$$E_{F_0} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3}{\pi} n \right)^{2/3}$$

Megmutatható, hogy $T \neq 0$ K E_F sorba fejthető (váltakozó előjelű sorba):

$$E_F = E_{F_0} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_{F_0}} \right)^2 \pm \dots \right]$$

E_{F_0} nagyon jó közelítése E_F -nek néhány ezer K-ig, $T \approx 5000$ – 10000 K-ig.

Vegyük észre, hogy ha

$$\frac{N}{V} \frac{h^3}{2m^2} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \ll 1$$

akkor a Fermi-Dirac statisztika
közelítőleg átmegy
a Maxwell-Boltzmann
statisztikába.

A Maxwell-Boltzmann statisztika jó közelítés, ha.

$T > 10000$ K; a részecskesűrűség $N/V \ll 1$;

vagy a részecske tömege $m \gg m_{\text{electron}}$

A Fermi-Dirac statisztika sűrűségfüggvényei

Láttuk, hogy amíg $T = 0$ esetén $E < E_F$

$$\text{addig } N(E) = na^3 = \frac{\pi}{3} \frac{1}{E_0^{3/2}} E^{3/2}$$

számú elektron energiája kisebb, mint E .

$N(E)$ ismeretében kiszámítható az $(E, E + dE)$ intervallumba eső energiájú elektronok száma:

$$dN = N(E + dE) - N(E) = \frac{dN}{dE} dE = \frac{\pi}{2E_0^{3/2}} E^{1/2} dE$$

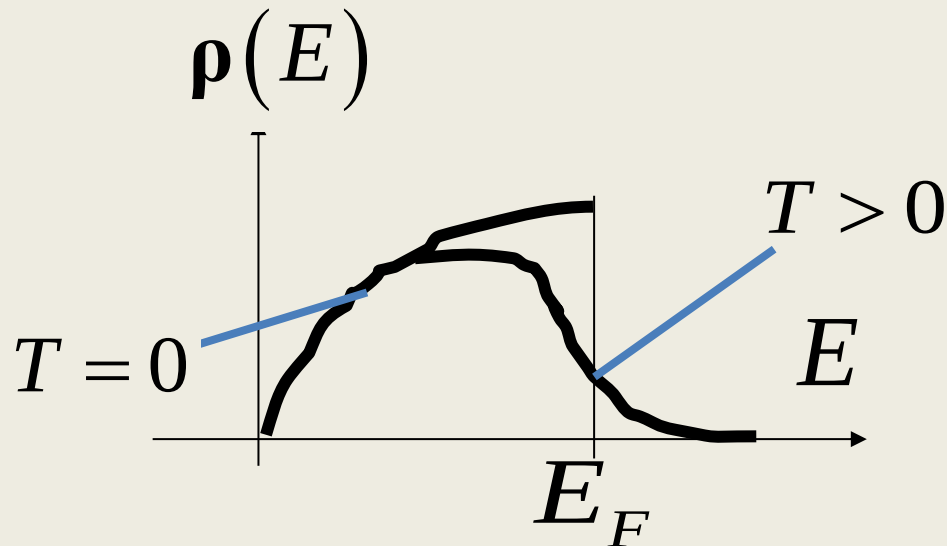
$$dN = \begin{cases} \frac{\pi}{2E_0^{3/2}} E^{1/2} dE & \text{ha } E < E_F \\ 0 & \text{ha } E > E_F \end{cases} \quad E_0 = \frac{h^2}{8ma^2}$$

Ha $T > 0$

$$dN = \rho(E)dE = \frac{\pi}{2E_0^{3/2}} \frac{E^{1/2}}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE$$

$$E_0 = \frac{h^2}{8ma^2}$$

$$dN = \rho(E)dE = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{E^{1/2}}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dE$$



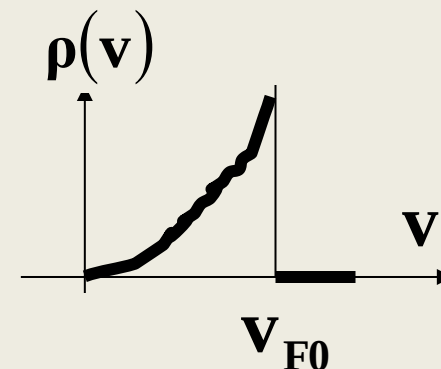
A nagy dobozban az elektronok erőmentes térben mozognak

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2}mv^2 + 0 \rightarrow dE = mv dv$$

A $(v, v + dv)$ intervallumba eső sebességű elektronok száma

$$dN = \left\{ \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \frac{E^{1/2}}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dE \right\}_{\substack{E = \frac{1}{2}mv^2 \\ dE = mv dv}} = 8\pi V \left(\frac{m}{h} \right)^3 v^2 \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dv = \rho(v) dv$$

$$\rho(v) = 8\pi V \left(\frac{m}{h} \right)^3 v^2 \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$

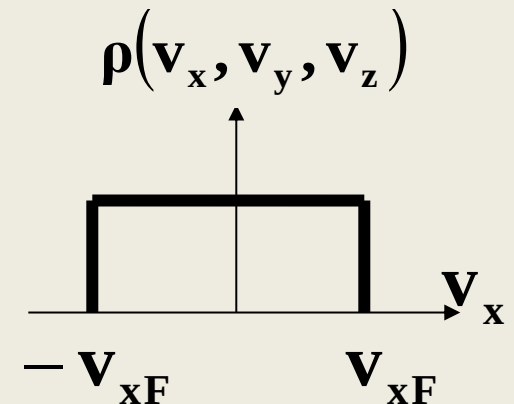


$$dN = \left\{ 8\pi V \left(\frac{m}{h} \right)^3 v^2 \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dv \right\}_{\substack{v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \\ \rho(v)dv = 4\pi v^2 \rho(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z}}$$

$$\rho(v) dv = 4\pi v^2 \rho(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z$$

$$\rho(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = 2V \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dv_x dv_y dv_z$$

$$\rho(v_x, v_y, v_z) = 2V \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$



A Fermi-Dirac Statisztika sűrűségfüggvényei - Summary

Az elektronok eloszlása a sebesség komponensek függvényében

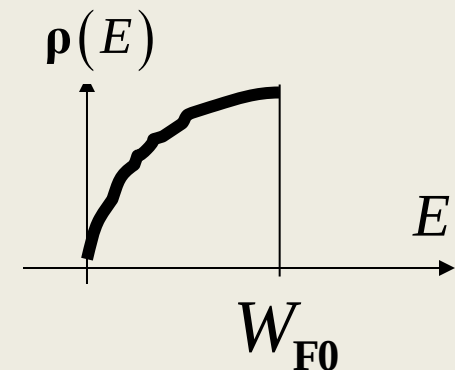
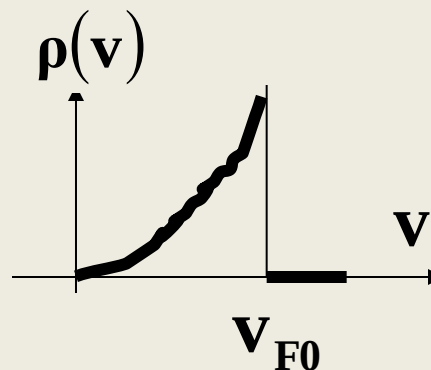
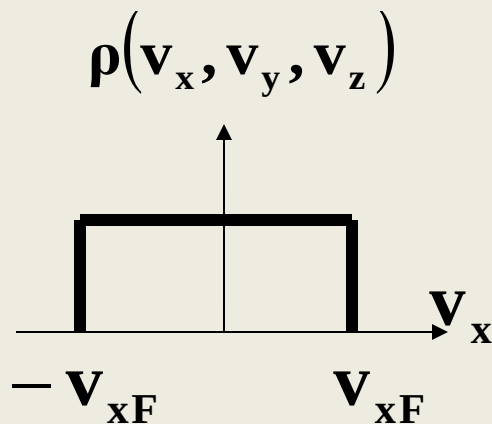
$$\rho(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z = 2V \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dv_x dv_y dv_z$$

A v és $v + dv$ közé eső sebességű elektronok száma

$$dN = \rho(v) dv = 8\pi V \left(\frac{m}{h} \right)^3 v^2 \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dv$$

Az E és $E + dE$ közé eső energiájú elektronok száma

$$dN = \rho(E) dE = \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \frac{E^{1/2}}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE$$



Vegyük észre, hogy a Fermi függvény
a Z_i -vel arányos :

$$Z_i = 2V \left(\frac{m}{h} \right)^3 dv_x dv_y dv_z$$

Ha definiálunk egy hat dimenziós teret az x, y, z térkoordinátákból
és a három lendület koordinátából $p_x = mv_x, p_y = mv_y, p_z = mv_z$

(„Fázis tér” PHASE space).

E „fázis tér”
„elemi cellája”

$$Vm^3 dv_x dv_y dv_z = dx dy dz dp_x dp_y dp_z$$

Z_i a h^3 fázis térbeli cellák számának kétszerese

A fázis térben minden h^3 cellába két elektront
(egy $+1/2$ és egy $-1/2$ spin)

A fázis tér elemi cellája nem lehet kisebb h^3 -nél

Fémek, dielektrikumok és félvezetők kvalitatív anyag modelljei

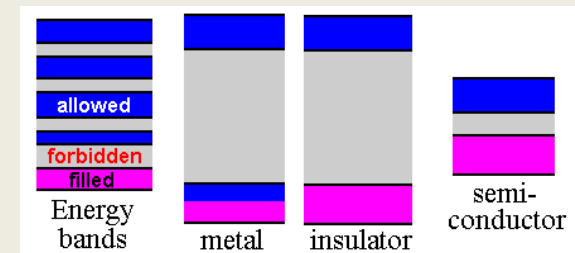
Az anyagok ATOMMAGOKBÓL és ELEKTRONOKBÓL állnak

1. Szivattyúzzunk ki minden ATOMMAGOK „CSONTVÁZA” elektront az anyagból

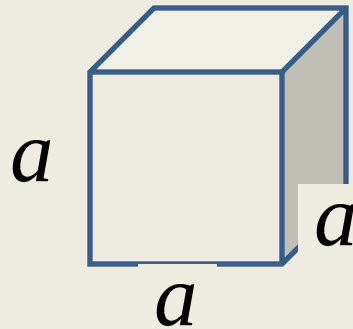
2. Oldjuk meg az EGY ELEKTRON PROBLÉMÁT.

$$\mathbf{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E_{pot}(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \cdot \psi(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \rightarrow E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$$
$$\psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r}), \dots, \psi_n(\mathbf{r}), \dots$$



Eredmény: „SÁV STRUKTÚRA” $E(\mathbf{k}) = E(k_x, k_y, k_z)$



$$dN = \rho(E)dE = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{E^{1/2}}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE =$$

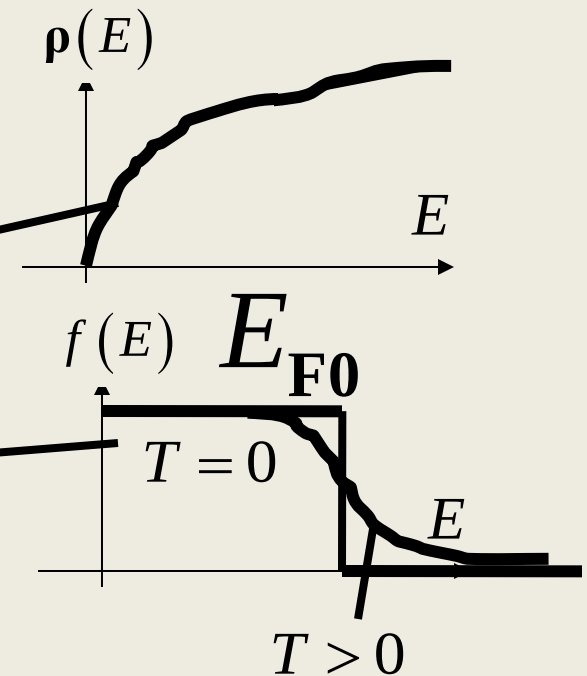
$$= \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE = g(E) \cdot f(E) \cdot dE$$

$$g(E) = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2}$$

$$dN = g(E) \cdot f(E) \cdot dE$$

Elektron-al betölthető
szintek száma

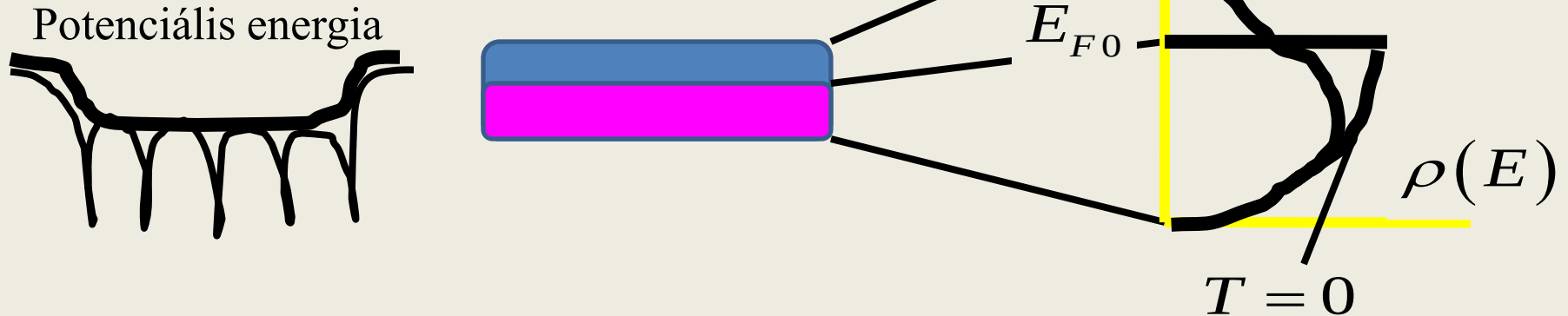
A betöltés
valószínűsége



ELECTRON „POPULATION”

Sommerfeld féle fém modell (Jó vezető)

“Bath tub” „Kád-modell”

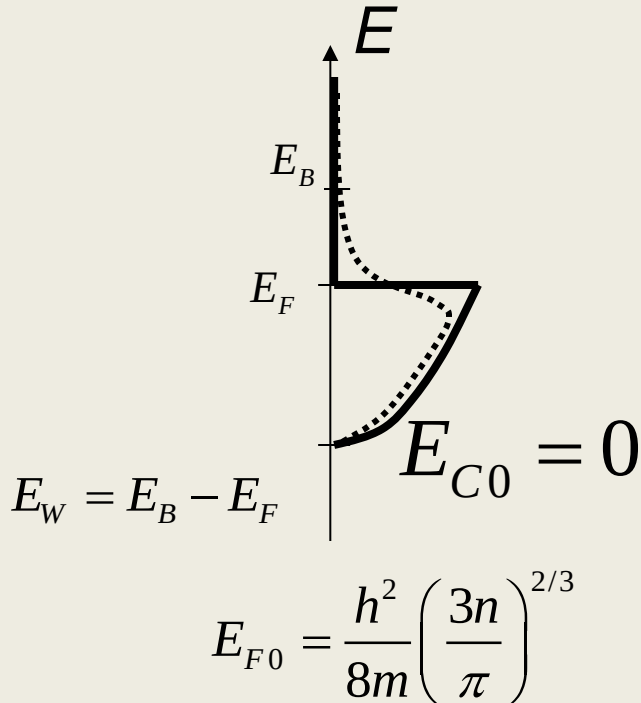


“SZABAD” ELEKTRONOK A VEZETÉSI SÁVBAN

$$dN = g(E) \cdot f(E) \cdot dE$$

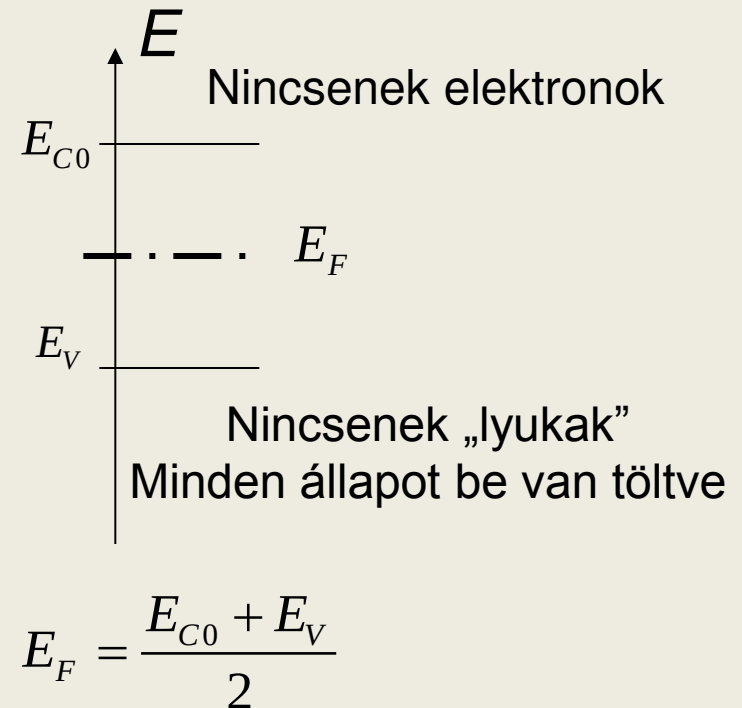
Szilárd fémek és szigetelők

Vezetők
(fémek)



Sommerfeld
"kád" modell

Szigetelők
(dielektrikumok)



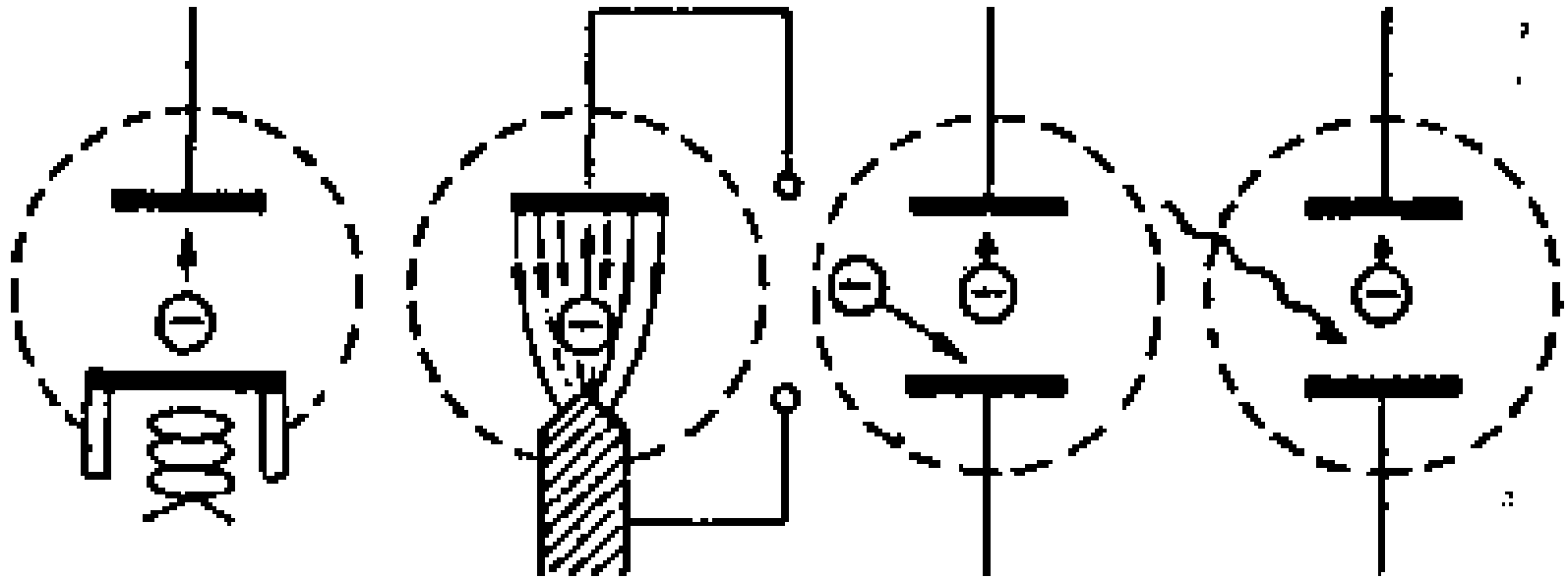
ELEKTRON EMISSZIÓ

TERMIKUS

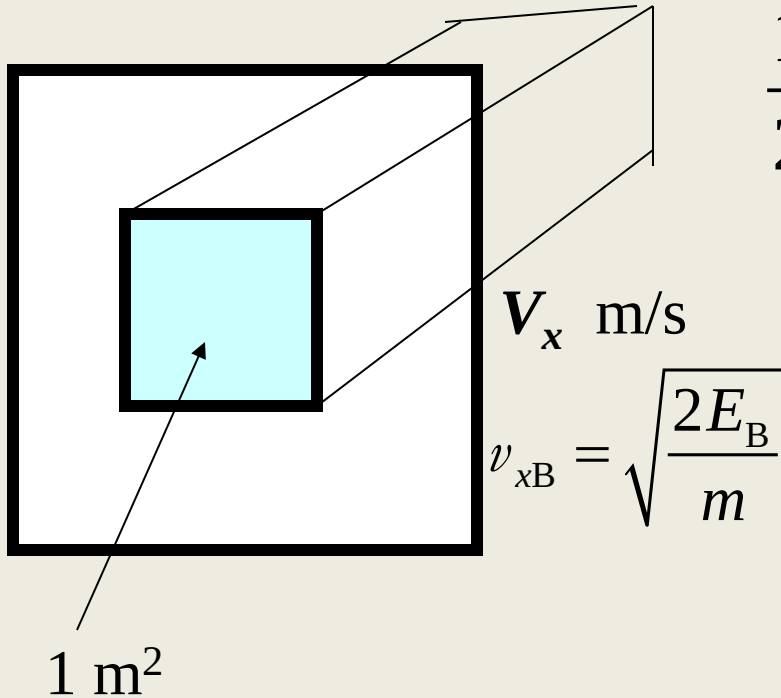
HIDEG

SZEKONDER

FOTO EMISSZIÓ



TERMIKUS ELEKTRON EMISSZIÓ



$$\frac{1}{2}mv_x^2 \geq E_B$$

A fém határfelületén válasszunk ki egységnyi felületet.

Ezt 1 s alatt a fémbe levő összes v_x sebesség-összetevővel rendelkező elektronok közül azok az elektronok érik el, amelyek egy v_x hosszúságú hasáb belsejében vannak.

$$J_t = Ne$$

Felületegységen idő-egység alatt kilépő elektronok száma

Elektronok kilépése fémekből

Sommerfeld féle „kád-modell”: E_B E_F E_W

Elektronok száma egységnyi térfogatban:

$$\frac{1}{2}m v_x^2 \geq W_B \quad dN_{(V=1)} = \frac{2m^3}{h^3} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dv_x dv_y dv_z$$

Elektronok száma a v_x térfogatban: $dN_x = v_x \frac{2m^3}{h^3} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dv_x dv_y dv_z$

Felületegységen idő-egység alatt
kilépő elektronok száma:

$$N = \frac{2m^3}{h^3} \int_{v_x=v_{xB}}^{+\infty} \int_{v_y=-\infty}^{+\infty} \int_{v_z=-\infty}^{+\infty} \frac{v_x}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} dv_x dv_y dv_z = \frac{4\pi k^2 m}{h^3} T^2 e^{-\frac{E_B - E_{F0}}{k_B T}}$$

A termikus elektron-emisszió Richardson-Dushman formulája

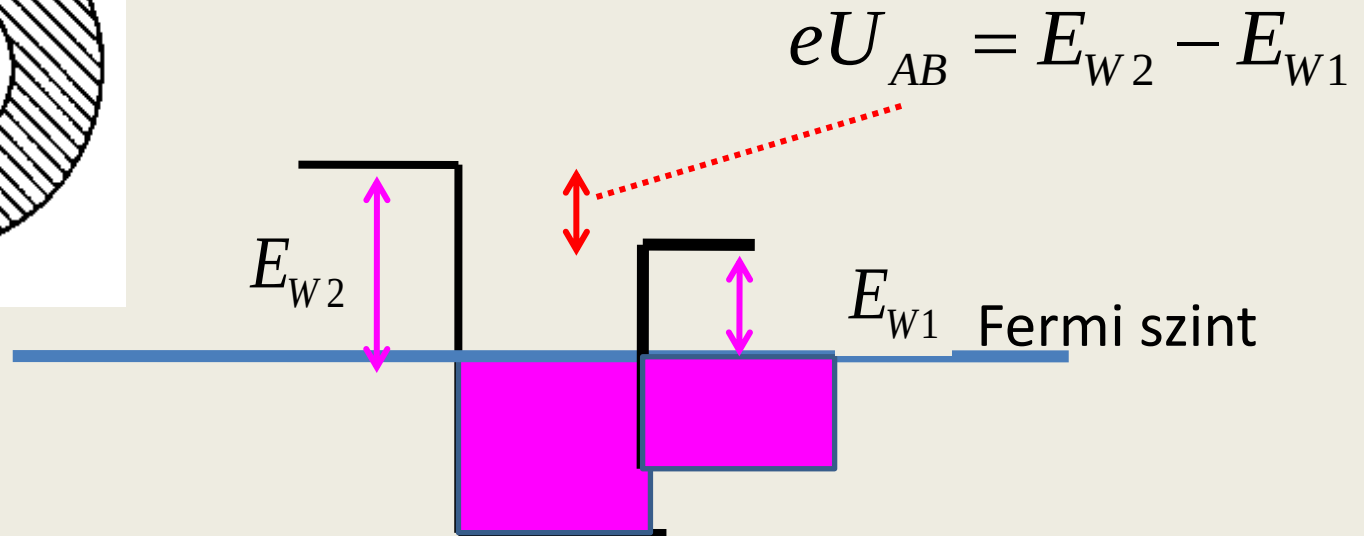
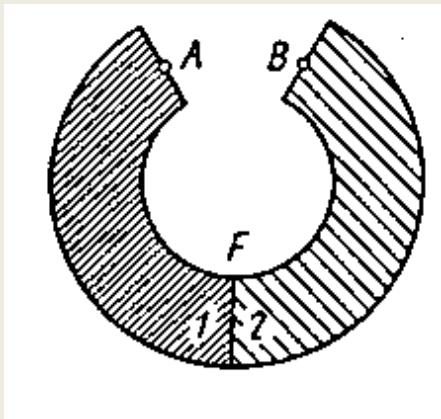
$$J_{term} = \frac{4\pi k^2 m e}{h^3} T^2 e^{-\frac{E_B - E_{F0}}{k_B T}}$$

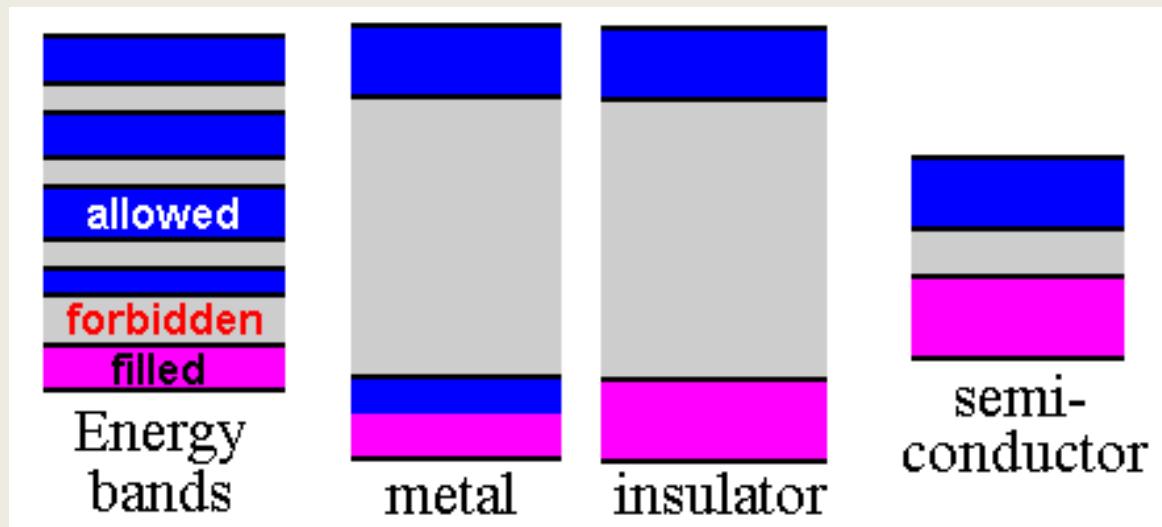
A fékező („retardáló”) tér hatása:

$$J_{term}^{ret} = A_0 T^2 e^{-\frac{E_B + E_{ret} - E_{F0}}{kT}}$$

$$J_{term}^{ret} = J_{term} e^{-\frac{E_{ret}}{k_B T}}$$

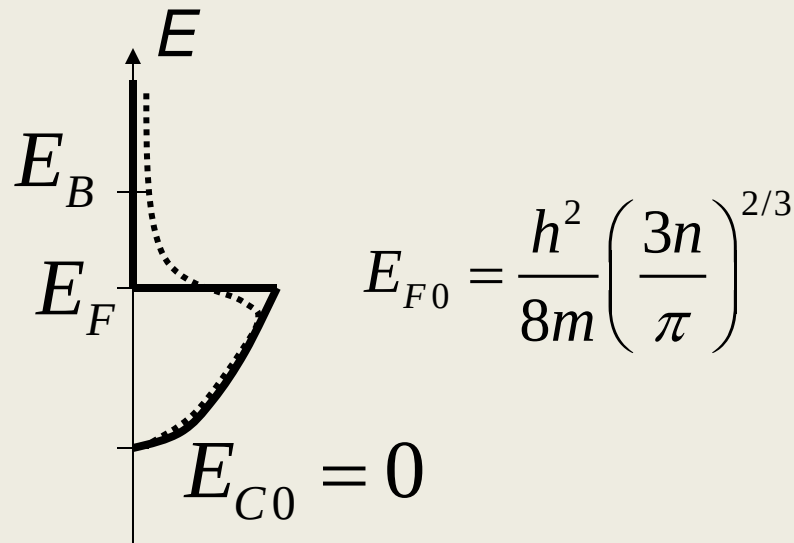
Kontakt potenciál





Vezetők
(metals)

Szigetelők
(dielectrics)



$$E_W = E_B - E_F$$

