
Kondenzált anyagok fizikája

Tételkidolgozás

2022. december 21. 19:21:03

Tartalomjegyzék

1. Rácsrezgések	5
1.1. Egyatomos lineáris lánc rezgései	5
1.1.1. Visszavezetés sajátérték-problémára	6
1.1.2. Megoldás diszkrét módusokra	8
1.1.3. A probléma kontinuum-mechanikai értelmezése	10
1.2. Kéttatomos lineáris lánc	13
1.2.1. Egyenletek	13
1.2.2. Értelmezés	15
1.3. Rácsrezgések általános elmélete	17
1.3.1. A mozgásegyenlet felírása	17
1.3.2. A mozgásegyenlet alakítása	19
1.3.3. A mozgásegyenlet megoldása	20
1.3.4. Elemi gerjesztések	21
1.3.5. Harmonikus rezgések statisztikus fizikai megfontolásai	22
1.3.6. Összetett rezgő rendszer energiái	24
1.4. Kristály fajhője	25
1.4.1. Debye-közelítés	25
1.4.2. Fajhő számítása	27
1.4.3. Közelítések a hőmérsékletben	28
1.4.4. Hőtágulás becslése	29
2. Mágnesség	30
2.1. Diamágnesség	30
2.1.1. Elektron energiája mágneses térben	30
2.1.2. Termodinamikai megközelítés	32

2.2.	Paramágnesség	34
2.2.1.	Klasszikus közelítés	34
2.2.2.	Kitekintő: a Langevin-függvény	36
2.2.3.	Kvantummechanikai modell	37
2.3.	Ferromágnesség	39
2.3.1.	Alapjelenségek	39
2.3.2.	Weiss-féle átlagtér-elmélet	41
2.3.3.	Ferromágnesség kritikus hőmérsékleten	43
2.3.4.	Landau-elmélet	44
2.3.5.	Skálatörvények	47
2.4.	Kitekintések a ferromágnességből	48
2.4.1.	Ginzburg–Landau-elmélet	48
2.4.2.	További mágneses jelenségek	49
3.	Atomi vezetéselmélet	50
3.1.	Elektron periodikus térben	50
3.1.1.	Schrödinger-egyenlet	50
3.1.2.	Transzláció szerepe	50
3.1.3.	Határfeltételek	53
3.2.	Sávszerkezet	53
3.2.1.	Kváziszabad elektron	53
3.2.2.	Perturbált megoldás	55
3.2.3.	Sokelektron-rendszer	56
3.3.	Statisztikus elektronvezetés	57
3.3.1.	Fermi–Dirac-eloszlás	57
3.3.2.	Kváziszabad eset állapotsűrűsége	58
3.3.3.	Sommerfeld-sorfejtés	61

3.3.4.	Pauli-féle szuszceptibilitás	63
4.	Anyagi vezetélmélet	64
4.1.	Fémek vezetése	64
4.1.1.	Drude-modell	64
4.1.2.	Boltzmann-egyenlet	65
4.1.3.	Áramlások rendezései	70
4.1.4.	Termodinamikai megfontolások	71
4.1.5.	Áramok további tulajdonságai	73
4.1.6.	Hall-effektus	74
4.2.	Félvezetők	76
4.2.1.	Jelenségi áttekintő	76
4.2.2.	Töltéshordozók száma	77
4.2.3.	Dópolt félvezető	80
4.3.	Szupravezetők	80
4.3.1.	Alapjelenségek; Meissner-effektus	80
4.3.2.	Szupravezető vortexek	82
4.3.3.	Egyenletek	82
4.3.4.	Vortexek	84
4.3.5.	Fluxuskvantum	85
4.3.6.	Ginzburg–Landau-elmélet újra	86

Bevezetés

A jegyzet a 2022 és 2017 őszi félévi Kondenzált anyagok fizikája (Groma István, Tichy Géza) előadásai alapján készült. Az egyes alfejezetek külön tételek, az alpontok az egyes tétel struktúráját segítenek átlátni, míg a fejezetek a tételeket helyezik el az anyagtudomány kutatási területeiben.

Kondenzált anyagok alatt legegyszerűbben szilárd és/vagy folyékony fázisban levő anyagokat értünk, azaz szorosabb kölcsönhatásokat vizsgálunk, mint a termodinamika fluidumra vonatkozó megállapításai. Minden elmélet megállapításakor alapelv lesz, hogy mikroszkopikus megfontolások alapján megmagyarázzunk makroszkopikusan is fellépő jelenségeket.

1. Rácsrezgések

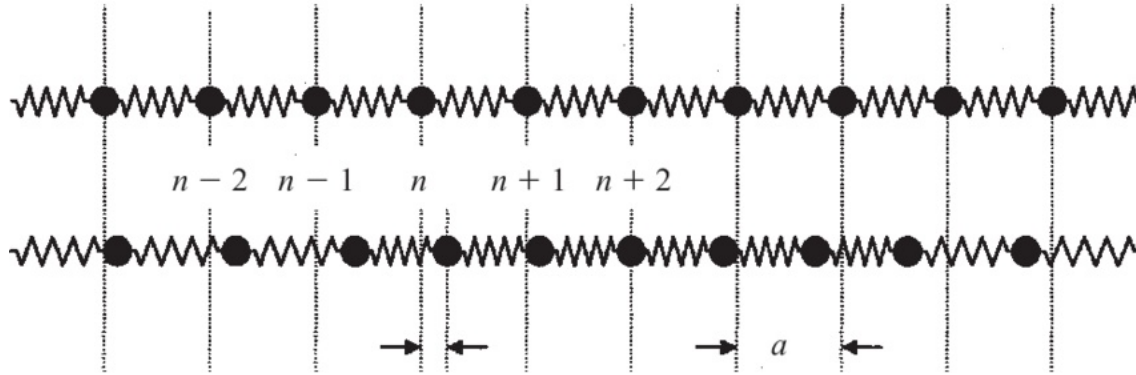
Elsőként tekintünk néhány fejezetet a **rezgéselméletből**. Ezek a megfontolások nem minden kondenzált anyagra érvényesek (pl. üvegre sem); alapvetően **kristályos** anyagok rezgéseit vizsgáljuk.

1.1. Egyatomos lineáris lánc rezgései

Atomi rezgések vizsgálatának azért látunk neki, mert hiába tudjuk, hogy $\varepsilon = \frac{1}{2}k_B T$ energia jut egy termodinamikai rendszer minden szabadsági fokára, **nem tudjuk**, mit tekintünk szabadsági foknak ahhoz, hogy kristályok rácsrezgéseinek energiáit, és ebből következőleg például anyagok fajhőjét számíthassuk.

Először tekintünk egy egyszerű rendszert: atomokat modellező pontszerű egyforma **tömegeket**, melyek közül a szomszédosakat egyforma **rugókkal** kötjük össze.

Jelölje u_n az n -edik tömeg **elmozdulásának függvényét** annak egyensúlyi helyétől; M az atom tömegét, D az atomi rugóállandót, és majd később a a rácsállandót, ami két szomszédos atom távolsága. Felírjuk Newton II. törvényét az n -edik atomra. A rugó megnyúlása két dologból tevődhet össze: pozitív irányba nyújt (negatív irányú erőt eredményez) az adott atom kitérése, míg negatív irányú megnyúlást (vagy összenyomást) az atomok szomszédainak pozitív irányú kitérései okoznak.



1. ábra. Egyatomos lineáris lánc modellje.

$$M\ddot{u}_n = D[(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})], \quad \text{vagyis} \quad (1.1)$$

$$M\ddot{u}_n = -D(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}). \quad (1.2)$$

1.1.1. Visszavezetés sajátérték-problémára

Feltesszük, hogy a megoldásnak lesz **periodicitása**, hiszen az egész rendszerben van egy nagy periodicitás. Így a próbafüggvény, amelyet behelyettesítünk:

$$u_n := A_n \cdot e^{j\omega t}, \quad (1.3)$$

ahol $j^2 = -1$ az imaginárius egységre.

Elvégezve a behelyettesítést az alábbi összefüggést kapjuk:

$$-\omega^2 \cdot A_n = -\omega_0^2 (2A_n - A_{n+1} - A_{n-1}), \quad (1.4)$$

ahol $\omega_0^2 = D/M$.

A próbafüggvény előnyös tulajdonsága (azontúl, hogy magát az egyenletet is megoldja), hogy a rendszer mozgásegyenletéből **eltüntettük az időfüggést**. Ilyen rezgő rendszerek esetén feladatunk most megtalálni a rezgés **normál-módusait**.

A_n -eket ($n = 1, 2, \dots, N$) egy oszlopvektorba rendezve

$$\omega^2 \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} = \omega_0^2 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & ? \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \\ \vdots & & & \ddots & & \\ ? & & \dots & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

egy sajátérték-problémához jutottunk. Felmerül azonban a kérdés: hogyan viselkedik a **lánc vége**? Mit írhatunk a kérdőjelek helyére, amikor az (1.4) egyenletben "túlindexelünk"?

A válasz: úgy, **ahogy mi meghatározzuk**; a **határfeltétel** dönt róla. Mi egy nagyon speciális határfeltételt teszünk fel: a lánc eleje és vége is periodikus kapcsolatban van, azaz $u_{N+1} = u_1$.

E kiegészítéssel az (1.5) az alábbi alakot ölti:

$$\omega^2 \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} = \omega_0^2 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \\ \vdots & & & \ddots & & \\ -1 & & \dots & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

1.1. Megjegyzés. Egyéb határfeltételt az (1.5) egyenletbe illesztve az egzakt megoldás lényegesen bonyolultabb lenne.

Ezzel a probléma általánosságát lecsökkentettük ugyan, de analitikusan megoldhatóvá is tettük. Az egyenletben szereplő mátrix fontos tulajdonsága ugyanis, hogy sorai ciklikusan eltolhatók.

1.2. Megjegyzés. Sok részecskét tekintve, azaz ha $N \gg$, a határfeltételek jelentősége csekély; olyat célszerű választanunk, ami a problémának megfelelő. Szilárdtest-fizikában gyakran alkalmaznak periodikus határfeltételeket, most mi is így tettünk.

1.1.2. Megoldás diszkrét módusokra

Oldjuk meg a továbbiakban az (1.3) egyenletet, elhagyva a mátrixos alakot. Keressük A_n -eket a következő alakban:

$$A_n := A_q \cdot e^{jqan}, \quad (1.7)$$

ahol a a rácsállandó. Ezzel egy **térben hullám** jellegű megoldást vezetünk be rájuk, ahol a szomszédos golyók qa fáziskülönbséggel rendelkeznek.

1.3. Megjegyzés. Látszólag szükségtelen új paramétert hoztunk be: n mellett megjelent q is. Ennek oka az a praktikum, mely szerint egy rácsállandó jellegű mennyiség szerepel az exponensben, melyet 2π -re egy hullámszám-szerű mennyiség egészít ki. Emlékeztetőül: egy kristályban az elemi rác- és reciprokrácsvektorok ortogonálisak, és 2π -re normáltak voltak, hogy az exponensben j -vel való szorzatuk 1-et adjon. A változók bevezetésével a szabadsági fokok vizsgálatára külön ki kell térnünk.

Az (1.4) egyszerűsítések után a következőképp alakul:

$$\omega^2 = \omega_0^2 (2 - e^{jqa} - e^{-jqa}). \quad (1.8)$$

Ismerjük fel a koszinuszfüggvény exponenciális alakját az egyenlet jobb oldalán, és végezzünk el egy trigonometrikus átalakítást:

$$\omega^2 = 2\omega_0^2(1 - \cos qa) = 4\omega_0^2 \sin^2 \frac{qa}{2}, \quad (1.9)$$

ahonnan

$$\omega = 2\omega_0 \cdot \left| \sin \frac{qa}{2} \right|. \quad (1.10)$$

Ezzel megkaptuk a rendszer $\omega(q)$ **diszperziós relációját**. Az így leírt rendszer szabadsága viszont túl nagy: kontinuum sok q írható az (1.8) egyenletbe.

Nem használtuk még ki azonban a **periodikus határfeltételt**, ami az első és az utolsó atom közti kapcsolatot adta meg. Ez az (1.8) egyenlet miatt:

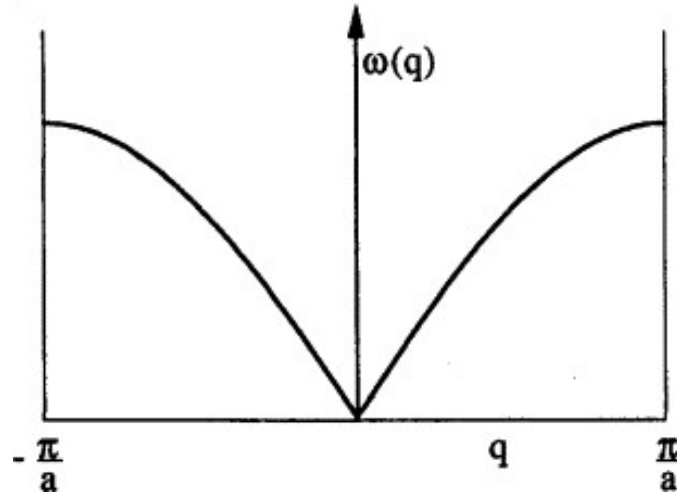
$$1 = e^{jqaN} \implies q_m = m \cdot \frac{2\pi}{Na} \quad (m \in \mathbb{N}). \quad (1.11)$$

Ezzel meghatároztuk a megengedett q -kat, amelyből még mindig megszámlálhatóan végtelen van, nem N darab. Ezt úgy védjük ki, hogy (1.7) szerint q -nak magától is van szimmetriája: $2\pi/a$ egész számú többszörösének hozzáadásával (1.8) értéke **nem változik** az argumentum periodicitása miatt. Kiválaszthatunk tehát egy intervallumot (például a $[\frac{-\pi}{a}; \frac{\pi}{a}]$ -t), amelyben q -t tekintjük. Ezzel m -et maximalizáljuk úgy, hogy legfeljebb N -féle értéket vehet fel.

Voltaképpen ezzel azt fogalmazzuk meg, hogy az általunk választott q -nak, ami egy hullámszám-jellegű mennyiség, a **Brillouin-zónán** belül kell maradnia.

1.4. Megjegyzés. Emlékeztetőül, kristályban az elemi rácsvektorok felezősíkjait behúzva, egy atomot a Wigner-Seitz-cella vesz körbe, a reciprokrács W - S -cellája pedig a Brillouin-zóna.

A diszperziós relációt egy ábrán alább közöljük.

2. ábra. $\omega(q)$ diszperziós reláció diszkrét értelmezésből.

1.1.3. A probléma kontinuum-mechanikai értelmezése

Az (1.3) egyenletet tekintjük újra, a^2 -tel szorozva és osztva:

$$M\ddot{u}_n = Da^2 \frac{\frac{u_{n+1}-u_n}{a} - \frac{u_n-u_{n-1}}{a}}{a} \approx Da^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_n, \quad (1.12)$$

mely közelítést megtehetünk, ha a differencihányados kellően megközelíti a differenciálhányadost, vagyis a elég kicsi.

Bevezethetünk a kontinuum-mechanikából ismert, jelen probléma tárgyalásánál valódi jelentéssel nem bíró mennyiségeket.

$$M = \rho a A \quad E = \frac{Da}{A}$$

Ezekkel a fenti egyenlet:

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = E \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t). \quad (1.13)$$

Ez pedig a már ismert egydimenziós **hullámegyenletet** adta vissza. Ennek megoldását **síkhullám** alakjában keressük:

$$u(x, t) = u_0 \cdot e^{j(\omega t + qx)},$$

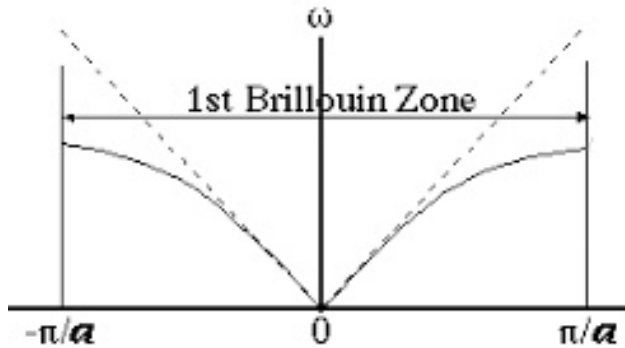
amely behelyettesítéssel a bevezetett ω és q közt az

$$\omega = \sqrt{\frac{D}{M}} a |q| = \omega_0 a |q| \quad (1.14)$$

összefüggést adja. Ez a **kontinuum-megközelítés** diszperziós relációja.

1.5. Megjegyzés. Fontos látnunk, hogy itt nincsenek már diszkrét golyók, így q -ra sem teszünk megkötést; elméletileg bármekkora értéket felvehet. Ez a későbbiekben fontos szerepet játszik, most pedig egyszersmind korlátot ad a kontinuum-elmélet alkalmazhatóságára.

Egymásra helyezve a diszkrét és folytonos megoldásokból következő diszperziós relációkat, az alábbi ábrát kapjuk:



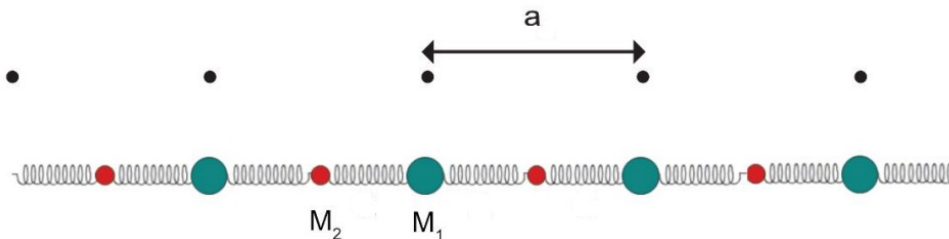
3. ábra. A kétféle megközelítés diszperziós relációja egy ábrán. A szaggatott vonal a Brillouin-zónán tetszőlegesen túlmegy.

Ebből látszik, hogy kis q -ra, azaz **nagy hullámhosszra** a két modell **ugyanazt adja**. Amennyiben ugyanis a rácsállandóval nem összemérhető hullámhosszú módust tekintünk, valóban mindegy, hogy diszkrétizált, vagy folytonos esettel közelítjük a rugalmas lánc problémáját.

1.2. Kéttomos lineáris lánc

1.2.1. Egyenletek

A második érintett problémakörünk az előző modell módosított változata: **kétféle** atom váltakozik a lineáris láncban.



4. ábra. Kéttomos lineáris lánc modellje.

Jelölje az atomok tömegét rendre M_1 és M_2 , kitéréseik függvényét u_n és v_n ($n = 1, 2, \dots, N$), a rácsállandó (amely most két legközelebbi azonos atom távolsága) a , a továbbra is azonos rugók rugóállandója pedig D . Newton II. törvénye a kétféle atomra

$$M_1 \cdot \ddot{u}_n = -D \left[2u_n - v_n - v_{n-1} \right], \quad \text{valamint} \quad M_2 \cdot \ddot{v}_n = -D \left[2v_n - u_{n+1} - u_n \right]. \quad (1.15)$$

A határfeltételeket ismét **periodikusnak** választjuk:

$$u_{N+1} = u_1, \quad \text{és} \quad v_{N+1} = v_1. \quad (1.16)$$

A próbafüggvények szintén az egyatomos esetnek megfelelően

$$u_n := u(q) \cdot e^{j(\omega t + qan)}, \quad v_n := v(q) \cdot e^{j(\omega t + qan)}. \quad (1.17)$$

Ezekből az alábbi mozgásegyenletek származnak:

$$-\omega^2 M_1 u(q) = -2Du(q) + D(1 + e^{-jq a})v(q), \quad -\omega^2 M_2 v(q) = -2Dv(q) + D(1 + e^{jq a})u(q). \quad (1.18)$$

Ha bevezetjük az (u, v) vektort, a fenti egyenletek egy homogén lineáris **egyenletrendszerre** vezetnek. Ahhoz, hogy ennek legyen a triviálistól különböző megoldása, az alábbi **determinánsnak** kell eltűnnie:

$$\det \begin{pmatrix} 2D - \omega^2 M_1 & -2De^{-jq a/2} \cos \frac{qa}{2} \\ -2De^{jq a/2} \cos \frac{qa}{2} & 2D - \omega^2 M_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (1.19)$$

Ez egy ω^2 -re másodfokú egyenlet. Ezzel máris **könnyebb problémához** jutottunk, mivel már nem egy $2n \times 2n$ -es mátrix determináns-egyenletét kell megoldanunk, hanem egy 2×2 -esét, n helyen.

A megoldások:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{D}{M_1 M_2} \left((M_1 + M_2) \pm \sqrt{(M_1 + M_2)^2 - 4M_1 M_2 \sin^2 \left(\frac{qa}{2} \right)} \right). \quad (1.20)$$

1.2.2. Értelmezés

Bevezetünk **kéttestproblémák** vizsgálatakor szokásos mennyiségeket:

$$\omega_0^2 = 2D \cdot \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \quad \gamma^2 = 4 \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \leq 1$$

1.6. Megjegyzés. Egyenlőség a tömegek egyenlősége esetén áll fenn.

Ezen konstansokkal a diszperziós reláció szemléletesebben előáll, ugyanis

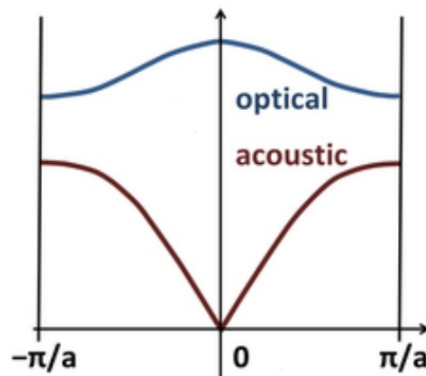
$$\omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \omega_0^2 \left(1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{qa}{2}} \right) \quad (1.21)$$

Tekintsük meg, hogyan viselkedik a megoldás a Brillouin-zóna **határain!** Ide behelyettesítve a $q = 0$ -t, kapjuk, hogy ω_+ az ω_0 -t, ω_- pedig a 0 -t veszi fel. A $q = \pi/a$ helyen a két ág (ω_+ és ω_-) két **különböző**, pozitív értéket vesz fel. A bevezetett q -ban rejlő szabadság természetesen ezúttal is **megengedi**, hogy $q \in \left[\frac{-\pi}{a}; \frac{\pi}{a} \right]$ módon válasszunk, az (1.11) egyenlettel analóg módon.

A diszperziós reláció grafikonja a következő oldalon található.

1.7. Megjegyzés. A felső ágot **optikai** ágnak, az alsót **akusztikus** ágnak szokás nevezni. A nevezéktan motivációja, hogy a hang frekvenciája a fényénél alacsonyabb.

Láthatóan a két ág a zóna határain más értéket vesz fel; keletkezett a diszperziós relációban egy "gap".



5. ábra. Kétatomos lineáris lánc diszperziós relációja.

A megoldás értelmezésében segít, ha az egyatomos esetet a kétatomos probléma **határeseteként** tekintjük: $M_1 = M_2$. Ekkor, mivel $\omega_{\pm}^2 = (2M/D) \cdot (1 \pm \cos(qa/2))$, szintén kétágú megoldást kapunk:

$$\omega_+ = 2\sqrt{\frac{D}{M}} \left| \cos\left(\frac{qa}{4}\right) \right| \quad \text{és} \quad \omega_- = 2\sqrt{\frac{D}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{4}\right) \right| \quad (1.22)$$

Ez a fentebbi, kétágú ábra szerint annak az esetnek felel meg, amikor a két ág a Brillouin-zóna határain **összeér**. Mivel azonban így a kitérésfüggvények számozása N -ig kétszer is elért (u és v is N -ig volt indexelve), q kétszer annyi értéket vehet fel, mint előbb. Ezért választunk egy olyan megoldást, amikor q két Brillouin-zónában vehet fel értékeket, és az előbbi kétágú függvényt egyszerűen "kihajtogatjuk". Ekkor pontosan **ugyanazt** az $\omega(q)$ relációt fogjuk látni az ábrán, mint az egyatomos esetben. Valóban: az egyatomos esetet kétatomosnak tekintve nemcsak a számozásban van eltérés, hanem a rácsállandót is **kétszer olyan hosszúnak** vettük.

1.8. Megjegyzés. Ez a vizsgálat arra is rávilágított, hogy egy periodikus rendszerben a periódus nagyságának megválasztása nem korlátoz minket a legkisebb periódus választására.

Mindebből az is következik, hogy a kétatomos eset nem abban különbözik az egyatomostól, hogy két ágat látunk, hanem a **"gap"** megjelenésében. Valóban: az eltérés mértékét γ határozta meg, ami a tömegek különbözősége folytán bevezetett mennyiség volt.

1.3. Rácsrezgések általános elmélete

Mindezekon túlmenően az atomi rezgések **általánosítását** három dimenziós esetre nem spórolhatjuk meg.

1.3.1. A mozgásegyenlet felírása

Tekintsünk tehát egy N^3 cellából álló rezgő rendszert. A kölcsönhatások általános vizsgálata miatt engedjük meg minden tömeg **különbözőségét**, illetve, hogy ne csupán a szomszédos atomok legyenek rugóval összekötve.

Koordinátázzunk a **Bravais-rácsvektorok** mentén, azaz vezessük be az \mathbf{R}_m vektorokat, melyek az adott Wigner–Seitz-cella központi helyére mutatnak! Meg kell engednünk azonban azt is, hogy egy cellában **több atom** foglaljon helyet. Ezáltal egy μ -vel indexelt atom helyét az alábbi egyenlet adja meg:

$$\mathbf{r}^\mu = \mathbf{R}_m + \mathbf{r}_\mu + \mathbf{u}^\mu(\mathbf{R}_m, t) \quad (1.23)$$

Ebben az egyenletben:

- μ megy 1-től p -ig, ahol összesen p atom van egy Wigner–Seitz-cellában. Ez tehát a **cellán belül** indexel.
- μ felső indexe az atom **pillanatnyi** helyét, míg az alsó indexes \mathbf{r}_μ az **egyensúlyi** (atomon belüli) helyet írja le.
- \mathbf{u} a kitérésfüggvény, ami koordinátázásfüggő is, az időfüggése mellett.
- m a cellák számozása; 1-től N -ig megy.

A **kitérésfüggvényekből** meghatározzuk a **potenciálfüggvényt**, melyet **másodrendig** fejtünk sorba. Elsőrendű tag sorfejtéskor **nem jelentkezik**, hiszen annak gradiensekor konstans erőt kapnánk, és \mathbf{u} -kat úgy állítjuk be, hogy zérus kitérésre erőmentes esetet kapjunk.

A másodrendű tagban minden atom minden más atommal való kölcsönhatására **összegezni kell**, így

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_{m,n; \alpha, \beta; \mu, \nu} \frac{1}{2} D_{\alpha, \beta}^{\mu, \nu}(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_n) \cdot u_{\alpha}^{\mu}(\mathbf{R}_m) \cdot u_{\beta}^{\nu}(\mathbf{R}_n) \quad (1.24)$$

1.9. Megjegyzés. Természetesen a valóságban ezek a kölcsönhatások rövid távúak. Néha elegendő valóban csupán a szomszédos eseteket tekintenünk, de például a nyírás leírásához már nem.

Ebben az egyenletben az előbbieik jelölése mellett analóg módon jelent meg ν és n , továbbá $\alpha, \beta \in \{1, 2, 3\}$ a három dimenzió miatt. Átírjuk az (1.24) egyenlet kvadratikus részét úgy, hogy a gradiens képzése könnyebb legyen.

$$\Phi = \Phi_0 - \sum_{m,n; \alpha, \beta; \mu, \nu} \frac{1}{4} D_{\alpha, \beta}^{\mu, \nu}(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_m) \cdot [u_{\alpha}^{\mu}(\mathbf{R}_m) - u_{\alpha}^{\nu}(\mathbf{R}_m)] [u_{\beta}^{\mu}(\mathbf{R}_m) - u_{\beta}^{\nu}(\mathbf{R}_m)] \quad (1.25)$$

E formula egyes tényezői ugyanis u felső indexének megegyezése esetén **nullát adnak**, míg a kibontásból a tényezők első (vagy rendre második) tagjainak összegzése épp ezt **pótolja**.

1.10. Megjegyzés. Külön figyeljünk a szumma cseréje miatti formális előjelváltásra.

Ebből képzünk **gradienst**:

$$- \sum_{n, \nu, \beta} D_{\alpha, \beta}^{\mu, \nu} u_{\beta}^{\nu}(\mathbf{R}_n) = F_{\alpha}^{\mu}(\mathbf{R}_m) \quad (1.26)$$

1.11. Megjegyzés. A negatív előjel forrása: az (1.25) előjelcseréje, a két u különbsége miatt megjelenő $(-)$, illetve, hogy a potenciális energiából negatív gradienst képzünk.

Egy fontos kikötést máris tehetünk a rugóállandókra: a rendszer **merev test-szerű elmozdulásakor** (vagyis, amikor minden u megegyezik) nem praktikus, ha erő ébred. Ezt egyenlet formájában u kiemelésével fogalmazhatjuk meg:

$$\sum_{m,\nu} D_{\alpha,\beta}^{\mu,\nu}(\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_n) = 0. \quad (1.27)$$

Ebből már származtatható a mozgásegyenlet még egy fontos megkötéssel: a rugóállandók a periodicitás miatt nem függhetnek az adott cellától egyesével, hanem csak a cellák **távolságától**; hiszen az első és az n -edik cellákon belüli atomok egyes kölcsönhatásai nem térhetnek el a második és az $n+1$ -edik atomok ugyanolyan kölcsönhatásától, mert az a periodicitás sérülését eredményezné: máshol kezdett számozás nem ugyanazt az eredményt adja.

$$M_\mu \cdot \ddot{u}_\alpha^\mu(\mathbf{R}_m) = - \sum_{n,\nu,\beta} D_{\alpha,\beta}^{\mu,\nu}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n) \cdot u_\beta^\nu(\mathbf{R}_n) \quad (1.28)$$

1.12. Megjegyzés. A tömeget ismét a periodicitás miatt indexeltük csupán a Wigner–Seitz-cellán belül: az egyes cellák egymástól nem térhetnek el.

1.3.2. A mozgásegyenlet alakítása

Határfeltételül a már megszokott **periodikus** esetet választjuk: az első eset az $N+1$ -edikkel azonos eredményre vezessen, lásd (1.16).

A próbafüggvényt az (1.17) módján alkotjuk meg:

$$u_\alpha^\mu(\mathbf{R}_m) = \frac{1}{\sqrt{M_\mu}} e^{j\omega t} e^{j\mathbf{q}\mathbf{R}_m} \cdot u_\alpha^\mu(\mathbf{q}), \quad (1.29)$$

ahol \mathbf{q} -val egy fix **fázistolást** adunk minden kitérésnek, u pedig **amplitúdó** jellegű szerepet vesz fel. A konstrukció megint olyan, hogy \mathbf{q} elegendő, ha a **Brillouin-zónában** foglal helyet.

Ezt helyettesítjük az (1.28) egyenletbe, ezzel:

$$\omega^2 \sqrt{M_\mu} e^{j\omega t} e^{j\mathbf{q}\mathbf{R}_m} \cdot u_\alpha^\mu(\mathbf{q}) = \sum_{n,\mu,\beta} D_{\alpha,\beta}^{\mu,\nu}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n) \frac{1}{\sqrt{M_\nu}} e^{j\omega t} e^{j\mathbf{q}\mathbf{R}_n} \cdot u_\beta^\nu(\mathbf{q}). \quad (1.30)$$

Bevezetünk egy **effektív rugóállandót**:

$$\overline{D}_{\alpha,\beta}^{\mu,\nu}(\mathbf{q}) := \frac{1}{\sqrt{M_\mu M_\nu}} \sum_n D_{\alpha,\beta}^{\mu,\nu}(\mathbf{R}_n) \cdot e^{j\mathbf{q}\mathbf{R}_n}, \quad (1.31)$$

amellyel \mathbf{R} eltüntethető:

$$\omega^2 u_\alpha^\mu(\mathbf{q}) = \sum_{\nu,\beta} \overline{D}_{\alpha,\beta}^{\mu,\nu}(\mathbf{q}) \cdot u_\beta^\nu(\mathbf{q}). \quad (1.32)$$

Amennyiben \mathbf{q} -t **rögzítjük**, (1.32) egy közönséges **sajátérték-egyenlet**. A fenti átalakítások haszna abban állt, hogy egy $3p \cdot N \times 3p \cdot N$ -es mátrix helyett "csupán" egy $3p \times 3p$ -s mátrix sajátértékegyenletét kell megoldanunk.

1.13. Megjegyzés. A sajátértékeken túl \mathbf{q} Brillouin-zónába való "beszorulása" nem adja meg a megfelelő számú egyenletet a megoldásokhoz. Mint alább azonban látszik, ez a degeneráció nem fog fennakadást okozni.

1.3.3. A mozgásegyenlet megoldása

A **sajátértékegyenlet**, amelyre jutottunk:

$$\det \left(\overline{D}_{\alpha,\beta}^{\mu,\nu}(\mathbf{q}) - \omega^2 \cdot \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} \right) = 0 \quad (1.33)$$

A sajátértékeket $\omega_\lambda^2(\mathbf{q})$ -tel, a sajátvektorokat $e_{\mu,\alpha}^{(\lambda)}(\mathbf{q})$ módon indexeljük.

1.14. Megjegyzés. Emlékezzünk vissza a lineáris lánc modelljére! A diszperziós relációban megjelent egy **kettéválás**: az addig ismert, 0-ból induló akusztikus ág mellett egy optikai ág is. Megmutatható, hogy amennyiben $p > 3$, akkor is mindig lesz a rendszernek 3 akusztikus ága 3 dimenzióban.

Rögtön látjuk, hogy $\omega_\lambda^2(\mathbf{q}) = \omega_\lambda^2(-\mathbf{q})$, hiszen az ellenkező irányban felvett rezgések frekvenciáját **nem különböztethetjük meg** (pongyolábban: a rugók **szimmetrikusak** a kitérésre nézve). Ezzel meg is oldottuk a degenerációt, hiszen ez további N feltétel.

1.3.4. Elemi gerjesztések

Ezzel megkaptuk az ún. **normálmódusokat**, amelyek tetszőleges lineáris kombinációval rezeghet a rendszer. A teljes megoldáshoz visszaírjuk a sajátvektorokat az (1.29) egyenletbe:

$$u_\alpha^\mu = \frac{1}{\sqrt{M_\mu}} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} e_{\mu, \alpha}^{(\lambda)} \cdot e^{j\mathbf{q}\mathbf{R}_m} \cdot Q_\lambda(\mathbf{q}, t), \quad (1.34)$$

ahol a sajátrezgés amplitúdóját Q -val jelöltük. Mindezt pedig az (1.28) egyenlebe helyettesítve, és az eddigi egyenleteinket felhasználva (melyek szerint az eddig bevezetett függvényalkotók **automatikusan megoldják** ezeket), a feltétel az amplitúdókra:

$$\ddot{Q}_\lambda(\mathbf{q}, t) = -\omega_\lambda^2(\mathbf{q}) \cdot Q_\lambda(\mathbf{q}, t), \quad (1.35)$$

amely a jól ismert (kanonikus koordinátákkal leírt) **harmonikus oszcillátor** egyenlete! Eddigi fáradozásaink tehát sikerrel jártak: csatolt rezgések normálmódusai helyett a normálmódusaink **harmonikus rezgőmozgást** végeznek.

Mivel azonban kis méretben dolgozunk (kristályok atomi szerkezetének modelljeként használjuk ezeket), nem hagyhatjuk figyelmen kívül a kvantummechanikát, amely az energiákat **diszkrétizálja**. A harmonikus oszcillátor esetében ez valóban előáll, az általunk közölt energia $\hbar\omega$ -nak csak egész számú többszöröse lehet. Ezen kvantummechanikai rezgő rendszer is rendelkezik egy **elemi gerjesztéssel**: ezt **fononnak** nevezzük.

1.3.5. Harmonikus rezgések statisztikus fizikai megfontolásai

Ezen a ponton feltehetjük a kérdést: mi hasznunk van ebből a tárgyalásból? Négy fejezet után kihámoztuk a harmonikus oszcillátor egyenletét egy általános rezgéselméleti feltevésből, amelyet kristályokra kívánunk alkalmazni, de a rezgésből származó konkrét energiákról még semmit nem tudunk!

Szerencsére a **statisztikus fizika** a segítségünkre siet.

Tudjuk ugyanis, hogy többféle energiákkal rendelkezni tudó rendszer energiájának **várható értéke** a következő módon adódik:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n E_n \cdot e^{-\beta E_n}}{\sum_n e^{-\beta E_n}}, \quad (1.36)$$

ahol $\beta = 1/k_B T$, a hőmérséklet és a Boltzmann-állandó szorzatának reciproka; ezzel adott hőmérsékleten kiszámíthatjuk 1 db oszcillátor egyenletét.

Az (1.36) egyenletben szereplő ún. **állapotösszeget**, melyet alább kifejtünk, azonban nem egyszerű kiszámítani, így egy trükkhöz folyamodunk. Nevezzük tehát Z -nek az állapotösszeget, amely a fenti kifejezés **nevezője**. Számítsuk ki a β szerinti deriváltját Z természetes alapú logaritmusának! Ekkor kapjuk, hogy

$$-\frac{d}{d\beta} \ln Z(\beta) = \langle E \rangle. \quad (1.37)$$

1.15. Megjegyzés. Jelen kidolgozás keretein túlmutat a deriválás pontról pontra való elvégzése. Vázlatosan: *logaritmusfüggvény deriváltja a lineáris törtfüggvény, így a nevezőbe kerül az állapotösszeg; a számlálóba pedig az állapotösszeg szummájában minden tag szorozódik az exponens β -t nem tartalmazó részével, ami esetünkben $-E_n$.*

A harmonikus oszcillátorról kvantummechanikai ismereteinkből tudjuk, hogy

$$E_n = n\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (1.38)$$

ahol a második taggal, a nullponti energiával egyelőre szükségtelen foglalkozunk.

Beírva az állapotösszegbe, egy **mértani sort** kapunk: a sor minden következő tagja szorozva van a kvócienssel, melynek értéke $e^{-\beta\hbar\omega}$.

$$Z = \sum_n e^{-\beta(n\hbar\omega + \hbar\omega/2)} = \frac{e^{\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \quad (1.39)$$

Ezt beírva az (1.37) egyenletbe, már adódik is a harmonikus oszcillátor energiájának várható értéke:

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}. \quad (1.40)$$

Ezt az eloszlást nevezik **Bose–Einstein-eloszlásnak**.

1.16. Megjegyzés. *A nullponti energiáról néhány szót: hogyan jelenik ez meg fizikai valójában, és ki lehetne-e nyerni? Ha megváltoznak a rugók, amelyeket a modellbe írtunk, természetesen az itt közölt energiák nagysága is megváltozik; ilyen módszerrel a nullponti energia kinyerhető. A rugók megváltozása azonban egyenértékű az anyag belső szerkezetének megváltoztatásával, ami például egy másodrendű fázisátalakulással mehet végbe.*

1.17. Megjegyzés. *Ha β kicsi, azaz nagy hőmérsékleten tekintjük a rendszert, a kapott megoldásunk a klasszikus fizikával egyezik. Az első rendig történő sorfejtést az olvasóra bízuk.*

1.3.6. Összetett rezgő rendszer energiái

Az általunk vizsgált rendszerben (ami továbbra is egy kristály) alkalmazhatjuk a fentieket, bár hozzátesszük, hogy nekünk $3p \times N$ db harmonikus oszcillátorunk van. Ezek egyszerű összegzését azonban az energiákban elvégezzük: \mathbf{q} szerint **nem tüntetünk ki** egyetlen rezgési módust sem.

Ha rezgő rendszer energiáját az (1.40) szerint vizsgáljuk, egy olyan egyenlethez jutunk az előző fejezet tanulságai szerint, amelyben az **összegést** \mathbf{q} szerint kell elvégeznünk egy olyan függvényre, amely \mathbf{q} -tól csak annak egy függvényén, nevezetesen az $\omega(\mathbf{q})$ **diszperziós reláción keresztül** függ. Ezt a függését a továbbiakban ki fogjuk használni.

Mivel sok rezgési módusunk van, a \mathbf{q} szerinti összegzést **integrálra** írjuk át. Ilyen áttéréskor valójában egy kis térfogatelemet közelítünk infinitezimálisra. Egy cella térfogatára igaz, hogy

$$\Delta^3 \mathbf{q} = (2\pi)^3 / V, \quad (1.41)$$

a reciprok-rácsvektorok 2π -re való normáltsága miatt.

Valamely általános, egy paramétertől csak közvetetten függő függvény összegzését tehát az alábbiak szerint írjuk át integrálra (itt még ezen közvetett függést nem használjuk):

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} f(\omega_\lambda(\mathbf{q})) \approx \sum_{\lambda} \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} f(\omega_\lambda(\mathbf{q})). \quad (1.42)$$

Ez az integrál azonban **nem függhet** attól, hogyan integrálunk \mathbf{q} szerint; csak az $\omega(\mathbf{q})$ relációnak lehet szerepe benne! Ilyen módon átalakítjuk a \mathbf{q} szerinti "térfogati" integrált csupán ω szerintivé.

A kettő közti függvénykapcsolat formálisan

$$\Delta V_\omega = g(\omega) d\omega, \quad (1.43)$$

melynek jelentése: a \mathbf{q} paramétertérben való infinitezimális térfogat előáll $d\omega$ és egy hiperfelület szorzataként. Ez utóbbi szemléletesen azt mutatja, két közel levő ω közti eltérés mekkora térfogatváltozást eredményez \mathbf{q} paraméterterében. A g -vel jelölt függvény neve: állapotűrűség.

Ennek segítségével felírjuk a **folytonosított** (1.42) egyenletet:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} f(\omega_\lambda(\mathbf{q})) \approx \sum_{\lambda} \int g(\omega_\lambda) f(\omega_\lambda(\mathbf{q})) d\omega_\lambda. \quad (1.44)$$

1.4. Kristály fajhője

Megjegyzésen kívüli megjegyzés: Nem egyértelmű, hogy az előző és a jelen tétel között hol érdemes a tagolási határt meghúzni. Hogy a tételek között ne legyen túl nagy hossz- és nehézség-beli különbség, ez egy logikus vágásnak tűnt, mivel bizonyos specifikációk innentől csak kristályenergetikára vonatkozhatnak.

Feladatunk először az állapotűrűséget meghatároznunk, amely, mivel ω és \mathbf{q} közti áttérést jelentett, szemléletünk szerint is kapcsolatban lesz a diszperziós relációval.

1.18. Megjegyzés. Klasszikusan a fajhőre konstanszt kaptunk, a termodinamika harmadik főtétele alapján azonban valamilyen, a 0 hőmérsékleten 0-ba tartó függvényt várunk.

1.4.1. Debye-közelítés

A diszperziós reláció közelítésére a **kontinuum-mechanikai** értelmezésből adódó **lineáris közelítést** használjuk, egy fontos kiegészítéssel: a függvényt a **Brillouin-zóna határainál "levágjuk"**, vagyis azon kívül eső \mathbf{q} -kra nem értelmezzük. Ez **Debye** feltevése.

1.19. Megjegyzés. Természetesen ez kissé durva közelítés, mivel ahogyan azt a 3 ábra is mutatja, a lineáris közelítés a határookra nem vízszintes érintővel érkezik.

1.20. Megjegyzés. Korábban tárgyaltuk, hogy mindig vannak akusztikus módusai a kristálynak, legfeljebb megjelennek optikaiak is; így a közelítést megtehetjük, hiszen $\mathbf{q} \approx 0$ körül jónak bizonyul.

A diszperziós reláció az (1.14) egyenletből következőleg:

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = c_\lambda \cdot |\mathbf{q}|. \quad (1.45)$$

Mivel pedig 3 dimenzióban a q körüli infinitezimális "gömbhéj" térfogata, vagyis az (1.42) egyenletben levő integrációs térfogat:

$$\Delta V = \frac{4\pi q^2 dq}{(2\pi)^3}, \quad (1.46)$$

ebből

$$g(\omega_\lambda) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{c_\lambda^3} \omega_\lambda^2. \quad (1.47)$$

Korábban tárgyaltuk az akusztikus ágak létét egy **többmódusú** rendszernél, és megállapítottuk, hogy hármát mindenképpen találunk. Ezt célszerű felírunk **két transzverzális**, és egy **longitudinális** összetevővel, ezáltal:

$$g(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{c_L^3} + 2 \cdot \frac{1}{c_T^3} \right) =: \frac{3}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c_D^3}. \quad (1.48)$$

Célunk továbbra is az (1.44) kiszámítása. Ehhez az integrációs határokat ki kell jelölnünk, immáron ω szerint. A kettő közt a Debye által bevezetett c_D teremt kapcsolatot a következő módon:

$$\rightarrow \omega_D := c_D q_D$$

$\rightarrow c_D$ -t a **Debye-közelítések**ből kaptuk a három akusztikus ág **összegzésével**.

$\rightarrow \omega_D$ -ig, a Debye-frekvenciáig kell (nullától) integrálnunk; ez felelne meg a fenti egyenlőség szerint q **határának**.

$\rightarrow q$ -ra pedig azt mondjuk, hogy a q_D sugarú gömb térfogata egyezzen meg egy **reciprok-rácsvektor** elemi cellájának térfogatával.

Mivel pedig V az ösztérfogat, és összesen N részecskénk van:

$$\frac{4\pi}{3} q_D^3 = \frac{(2\pi)^3}{V/N}. \quad (1.49)$$

Ezzel mindent tudunk, hogy az integrált elvégezzük.

1.4.2. Fajhő számítása

Az energia várható értékét (1.40) alapján, (1.48) felhasználásával, az imént meghatározott határig (1.44) szerint vett integrállal kell kiszámítanunk.

$$\langle E \rangle = V \cdot \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \cdot \frac{3}{2\pi^2 c_D^3} d\omega \quad (1.50)$$

Bevezetve az $x = \beta\hbar\omega$ változót, egy integrálra vezethető vissza az energia.

$$\langle E \rangle = V \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3} \frac{3}{2\pi^2 c_D^3} \int_0^{\hbar\omega_D/k_B T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad (1.51)$$

Általános tárgyalásban ennél többet **nem tudunk** mondani.

1.4.3. Közelítések a hőmérsékletben

Kis hőmérsékletre $\langle E \rangle$ -re a hőmérséklet **negyedik** hatványával menő függvényt kapunk; mivel pedig a fajhő (hőkapacitás) az energia hőmérséklet szerinti parciális deriváltja: $c \sim T^3$. Ez valóban egy **0-ba tartó** függvény, amelyet vártunk.

Nagy hőmérsékletre az integrandust csak kis értékekkel tudjuk kiértékelni a határ miatt. Az integrált x^2 -tel közelítjük, vagyis:

$$\langle E \rangle = V k_B T \frac{q_D^3}{2\pi^2} = 3k_B N T \quad (1.52)$$

1.21. Megjegyzés. A kiértékelés vázlatosan: A hőmérséklet negyedik hatványából hármat kiejt a kiintegrált másodfokú függvény a felső határon. Az integrandus \hbar -okat éppúgy kiejti, mint az abban szereplő ω_D a c_D -ket; utóbbik állnak össze q_D térfogattá.

Pontosan a **klasszikus fizika** szerint kapható eredmény; a Dulong–Petit-szabálynak megfelelő fajhő ugyanis:

$$c_V = 3k_B N.$$

1.22. Megjegyzés. Ezen modellből az energetikán túlmenően más is számítható, például egy kristály ellenállása. A modell azonban nem teljesen általános: mint alább látjuk, például hőtágulás leírására nem alkalmas.

1.4.4. Hőtágulás becslése

Ahogy az előző fejezetben említettük, az energia harmonikus közelítésében e modell szerint nem kapunk eredményt a hőtágulásra.

Menjünk tovább a potenciál sorfejtésében a kitérés szerint! Ekkor

$$\Phi(u) = \Phi_0 + \frac{D}{2}u^2 - \gamma u^3 + \dots \quad (1.53)$$

Ezt a sorfejtést beírjuk a kitérés várható értékére (amely, ha nem 0, hőtágulást jelent).

$$\langle u \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} u \cdot e^{-\beta Du^2/2} (1 + \beta \gamma u^3) du}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta Du^2/2} (1 + \beta \gamma u^3) du} \quad (1.54)$$

Az integrálokba a **páros függvények** adnak járulékot, mivel a $]-\infty; \infty[$ -n integrálunk.

$$\langle u \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} u^4 \cdot e^{-\beta Du^2/2} \beta \gamma du}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta Du^2/2} du} \quad (1.55)$$

Az eredményünk eddig az anharmonicitást leíró γ -val **arányos**: ez kezdetnek jó jel.

Új változó bevezetésével az integrálok elvégezhetőek, és eredményül kapjuk, hogy

$$\langle u \rangle = \frac{\gamma}{D^2} C k_B T, \quad (1.56)$$

amelyből a hőtágulásra egy **konstans** érték adódik.

Ezzel **áttekintettük** a kristályok rezgésmélettéből leszűrhető legalapvetőbb következményeket.

2. Mágnesség

A következő jelenségek, amivel foglalkozunk, a különféle anyagi mágneses jelenségek. Ezek elemi okait klasszikus fizikai megfontolásokból **nem tudjuk leszűrni**, így néhol ismét kvantummechanikai módszereket alkalmazunk.

2.1. Diamágnesség

A legrövidebb mágneses jelenségeként a diamágnességet tartjuk számon: valamely köráram által létrehozott mágneses momentum keltette bármely hatás (például mágnesezettség) **ellene kíván tenni** a kiváltó hatásnak; ez **Lenz törvénye**.

2.1.1. Elektron energiája mágneses térben

Modellünk szerint az anyag atomjaiban levő "delokalizált" elektronok **mágneses momentuma** okoz effektust, amennyiben az atomot mágneses térbe helyezük. Az általunk vizsgált rendszer épp ezért legyen egy **mágneses térbe helyezett elektron!** A mágneses teret a **vektorpotenciállal** jellemezzük, amely e tárgyalásban a Coulomb-mérték szerint határozza meg egyértelműen \mathbf{B} -t.

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m_e v^2 + qv_i A_i(\mathbf{r}(t), t) - q\phi(\mathbf{r}(t), t). \quad (2.1)$$

Az elektron töltése $q = -e$. Az energia előáll a **Hamilton-függvény** képzésével:

$$\mathcal{H} = \mathbf{p}\dot{\mathbf{r}} - \mathcal{L} = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \quad (2.2)$$

Legyen most az elektromos potenciál 0! **Homogén** mágneses térben azt mondhatjuk, hogy

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}.$$

Ekkor, kifejtve az előbbi egyenletet, az energiára

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e} p^2 + \frac{e}{2m_e} \mathbf{p}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) + \frac{e^2}{8m_e} (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2. \quad (2.3)$$

Tudjuk, hogy klasszikus fizikában az **impulzusmomentumot** $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ módon vezettük be. A fenti egyenletben egy **ciklikus permutációt** végrehajtva a második tagban, szintén kapunk egy ilyen mennyiséget. Mivel azonban kvantummechanikai megfontolásokat is teszünk a számolás során, egy **dimenziótlant impulzusmomentumot** definiálunk: $L := \hbar \cdot \mathbf{l}$.

A (2.3) egyenlet második tagjának konstansait egybegyűjtjük:

$$\mu_B := \frac{\hbar e}{2m_e},$$

és **Bohr-magnetonnak** nevezzük.

A (2.3) egyenlet harmadik tagjában felismerjük, hogy a vektoriális szorzat négyzete **merőleges vetületet** jelent. Emiatt az elektron energiája:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e} p^2 + \mu_B \mathbf{l} \mathbf{B} + \frac{e^2}{8m_e} B^2 \mathbf{r}_\perp^2. \quad (2.4)$$

A modell teljességéhez még két módosítást teszünk. Egyfelől, a kvantummechanika bevezetett a pályaimpulzusmomentum mellett egy sajátimpulzusmomentumhoz hasonló mennyiséget, a **spint**. Így mi is kiegészítjük az impulzusmomentumot: \mathbf{l} helyébe $\mathbf{l} + g_e \mathbf{s}$ -t írunk, ahol g_e az ún. giromágneses faktor; értéke 2. (Bővebben: Einstein–de Haas-kísérlet.)

Másfelől a vizsgált anyagban **több elektron** található. Ennek összenergiáját most úgy közelítjük, hogy egyszerűen **összeadjuk** az egyes elektronok energiáját. Ezzel az elektronok közti esetleges **kölcsönhatást nem vesszük figyelembe**.

Az energia tehát:

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[\frac{1}{2m_e} p_i^2 + \mu_B (\mathbf{l}_i + g_e \cdot \mathbf{s}_i) \mathbf{B} + \frac{e^2}{8m_e} B^2 r_{\perp i}^2 \right]. \quad (2.5)$$

2.1.2. Termodinamikai megközelítés

Ezen a ponton ismét a statisztikus fizikát hívjuk segítségül.

Egy rendszerben, ahol ismét **többféle állapot lehetséges** az energiában (például a mágneses tértől függően), a mágnesezettség **várható értéke**

$$M = \frac{1}{V} \frac{\sum_i m_i e^{-E_i/k_B T}}{\sum_i e^{-E_i/k_B T}}. \quad (2.6)$$

Bevezetünk egy mennyiséget, ami a termodinamikából ismert **szabadenergia** lesz:

$$F = -k_B T \ln \left(\sum_i e^{-E_i/k_B T} \right). \quad (2.7)$$

Látjuk, hogy ebben hasonló kifejezések (negatív előjel, logaritmus) jelentek meg, mint amit az állapotösszegeknél is láttunk. Mivel m -nek épp **az energia** B szerinti **deriváltját** nevezhetjük (lásd például a dipólról: $E = -mB$):

$$\frac{dF}{dB} = -VM. \quad (2.8)$$

Ezzel:

$$M = -\frac{1}{V} \frac{dF}{dB}. \quad (2.9)$$

A **szuszeptibilitás** a **tér hatására** kialakult anyagi mágnesezettséget jellemzi, ezért:

$$\chi' = \left. \frac{dM}{dB} \right|_{B=0}, \quad \text{és } \chi = \mu_0 \chi'. \quad (2.10)$$

Írjuk most be az energia helyébe a (2.5) egyenlet vonatkozó tagját!

$$F = -kT \ln \left(\sum_i e^{-\frac{e^2}{8m_e} \frac{B^2 r_{\perp i}^2}{kT}} \right) \quad (2.11)$$

Kis B térre az exponenciális függvényt **sorbafejtjük**, és feltételezzük, hogy elegendő az **alapállapotot** tekintenünk; ezzel az összegzést a különböző energiaállapotokra elhagyhatjuk:

$$F \approx \frac{e^2}{8m_e} B^2 \langle r_{\perp} \rangle^2. \quad (2.12)$$

Egyfajta összegzés mégis kerül a rendszerbe: bár az elektronra most megmondtuk, hogy csak az alapállapotban nézzük, több elektronunk is lehet. Ezekre egyszerűen úgy összegzünk, hogy N -nel szorozzuk az eddigi szabadenergiát:

$$F \approx N \cdot \frac{e^2}{8m_e} B^2 \langle r_{\perp} \rangle^2. \quad (2.13)$$

Elvégezzük a (2.9) és (2.10) egyenletek deriválásait, ahonnan

$$\chi' = -\frac{e^2}{4m_e} \frac{N \langle r_{\perp} \rangle^2}{V}. \quad (2.14)$$

Az előjelviszonyokat tekintve azt kaptuk, amit vártunk: a diamágnesség **negatív szuszceptibilitást** eredményezett. A kiátlagolt r_{\perp}^2 gömbszimmetrikus esetben a vetítés nélküli r^2 **kétharmada**:

$$\chi' = -n \frac{e^2}{6m_e} a_0^2. \quad (2.15)$$

2.2. Paramágnesség

Mint korábban említettük, a paramágnességhez **kvantummechanikai** modell szükséges. Elsőként azonban tehetünk egy "félklasszikus" közelítést, pusztán a szemlélet kedvéért.

2.2.1. Klasszikus közelítés

A klasszikus határesetben egy μ mágneses momentumot tekintsünk adott \mathbf{B} külső mágneses térben. Ennek **kialakulását nem kérdezzük**, csupán elfogadjuk: "valami miatt" létrejöhetett ez a momentum ebben a térben. Jelölje ϑ a két vektor közti szöget!

Ekkor ismét felírhatjuk a korábban Z -vel jelölt **állapotösszeget**, melyben az energiákra való összegzés ezúttal térszög szerinti **integrálként** jelenik meg:

$$Z = \int e^{\frac{\mu \mathbf{B}}{kT}} d\Omega, \quad (2.16)$$

mivel adott mágneses momentum mágneses energiája $E = -\mu \mathbf{B}$.

Az azimut szög szerinti integrál könnyen elvégezhető, a polárszög szerint pedig

$$Z = 2\pi \cdot \int_0^\pi e^{\mu B \cos \vartheta / kT} \sin \vartheta \, d\vartheta, \quad (2.17)$$

melyet átírunk $x = \sin \vartheta$ szerinti integrálra. Ekkor a trigonometrikus kifejezések x -be és dx -be beolvadnak. Így az állapotösszeg

$$Z = 2\pi \cdot \int_{-1}^1 e^{\frac{\mu B}{kT} x} dx = 4\pi \cdot \frac{kT}{\mu B} \cdot \operatorname{sh} \left(\frac{\mu B}{kT} \right). \quad (2.18)$$

Ebből a szabadenergiát annak definíciója szerint kapjuk, lásd (2.7) egyenletet:

$$F_1 = -k_B T \ln Z. \quad (2.19)$$

Ebből a mágnesezettség (2.9) szerint adódik:

$$M = \frac{N}{V} \mu \frac{d}{dx} \ln \left(\frac{1}{x} \cdot \operatorname{sh} x \right) \quad (2.20)$$

Kis mágneses tér esetén az $\operatorname{sh}()$ függvény sorbafejthető: $\operatorname{sh} x \approx x + \frac{x^3}{6} + \dots$, ezzel

$$\ln \left(\frac{\operatorname{sh} x}{x} \right) \approx \frac{x^2}{6}. \quad (2.21)$$

Emiatt a szabadenergia csupán **egy tagból** áll:

$$F = -N \frac{\mu^2 B^2}{6kT}, \quad (2.22)$$

innen pedig a szuszceptibilitás B szerinti kétszeres deriválással:

$$\chi = \mu_0 n \frac{\mu^2}{3kT}. \quad (2.23)$$

Ez az eredmény a paramágnességet jól leírja. Egyrészt, összehasonlítva a diamágnességgel, χ nagyságrendje eggyel **nagyobb**, ami a kísérleti tapasztalattal egyezik. Másfelől előjele **pozitív**, és valóban, az adódó mágneses térrel **megegyező irányú** mágnesezettséget akartunk kapni.

2.1. Megjegyzés. A Hamilton-függvényben szereplő diamágneses tag mindig jelen van, ezt azonban láthatóan a paramágnességet okozó tag "legyőzi". Diamágnességet akkor tapasztalunk tehát, ha μ 0-nak adódik.

2.2.2. Kitekintő: a Langevin-függvény

Az előző fejezetben felbukkanó függvényt (lásd például (2.20) egyenlet) **Langevin-függvénynek** hívják. Definíciója, majd kifejtése a következő:

$$L(x) := \frac{d}{dx} \ln \left(\frac{\operatorname{sh} x}{x} \right) = -\frac{1}{x} + \operatorname{cth}(x). \quad (2.24)$$

Ezzel már **tetszőlegesen nagy** B -re kaphatjuk a mágneses momentum várható értékét:

$$\langle \mu \rangle = \mu \cdot L\left(\frac{\mu B}{kT}\right), \quad (2.25)$$

ahol μ egy "hipotetikus" mágnesezettsége egy elektronnak; össze-vissza állhatnak, de **átlagosan** ilyenek adott hőmérsékleten.

A Langevin-függvény tulajdonsága, hogy nagy argumentum esetén adott értékhez **konvergál**, "telítésbe megy". Valóban: követve a modellt, mely szerint az atomban mágneses momentumok adják a paramágnességet, ha minden kis dipól befordul B irányába, nem tud tovább növekedni az eredő momentum.

2.2.3. Kvantummechanikai modell

A paramágnességre (amely klasszikus fizikai szemléletünk szerint Lenz törvényével ellentétes) teljesebb képet a **kvantummechanika** segítségével kaphatunk. A Hamilton-függvényből már tudjuk, melyik tag okoz paramágnességet az anyagban. Az ebből származó egyenlet megoldása azonban nem egyszerű feladat.

A Hamilton-függvény (2.5) egyenletéből elnevezzük **teljes impulzusmomentumnak**, j -nek $l + g_e s$ -t. Ezen j -k azonban **nem lehetnek akármekkora**k a kvantummechanika szerint. Állítsuk B -t a z tengely irányába, ekkor a skaláris szorzat vetülete miatt **legendő** j_z -vel foglalkoznunk, amelyről azt tudjuk, hogy adott J -re $2J + 1$ -féle értéket vehet fel. Ezeket J_z -vel indexeljük, az indexszel arányos mennyiség pedig legyen g_J .

Ezzel az általunk vizsgálni kívánt energia-tag:

$$\mathcal{H} = \mu_B g_J J_z B, \quad (2.26)$$

ahol $J_z = -J, \dots, J$ valamely rögzített J -re.

A **Wigner-tétel** azt mondja ki, hogy a fenti indexelés elvégezhető, azaz ismerve l és s kvantáltságát, az ezek lineáris kombinációjaként előálló J_z is **ilyen értékekkel** rendelkezik.

Írjuk most fel az állapotösszeget!

$$Z = \sum_{J_z=-J}^J e^{-\beta E_0} e^{-\beta g_J \mu_B J_z B}, \quad (2.27)$$

ahol E_0 a fenti, (2.5) egyenlet általunk nem vizsgált tagja miatt került bevezetésre. A fenti egyenlet egy **mértani sorozat**, amelynek összegzését elvégezzük:

$$Z = e^{-\beta E_0} e^{\beta g_J \mu_B J_z B} \cdot \frac{e^{\beta g_J \mu_B B(2J+1)} - 1}{e^{\beta g_J \mu_B B} - 1} \quad (2.28)$$

Az állapotösszegben szereplő tört számlálóját, és nevezőjét is osztjuk kettővel, és a benne szereplő exponens felével, ezzel trigonometrikus átalakítást végzünk a következőképp:

$$Z = e^{-\beta E_0} \frac{\text{sh}\left(\beta g_J \mu_B B\left(J + \frac{1}{2}\right)\right)}{\text{sh}\left(\beta g_J \mu_B \frac{B}{2}\right)}. \quad (2.29)$$

Ebből a mágnesezettséget egy speciális függvény bevezetésével kapjuk meg:

$$M = n g_J \mu_B J \mathcal{B}_j(x = \beta g_J \mu_B J B), \quad (2.30)$$

ahol a **Brillouin-függvény**:

$$\mathcal{B}_j(x) = \frac{2J+1}{2J} \text{cth}\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \text{cth}\left(\frac{1}{2J}x\right). \quad (2.31)$$

2.2. Megjegyzés. Belátható, hogy $J \rightarrow \infty$ határesetben a Brillouin-függvény a Langevin-függvényhez tart. Ez a modellünket igazolja, hiszen a \hbar 0-hoz, és $J \infty$ -hez való tartása ($\hbar J$ szorzat állandósága mellett) éppen a klasszikus határeset: van valamilyen mágneses momentum, de ennél többet nem mondunk.

Végül B kis B -re határozzuk meg a szuszceptibilitást! A Brillouin-függvény kis argumentumra sorbafejthető

$$\mathcal{B}_J(x) \approx \frac{J+1}{J} \frac{x}{3}, \quad (2.32)$$

ahonnan a szuszceptibilitás:

$$\chi = n\mu_0 \frac{\beta g_J^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3 k_B T}. \quad (2.33)$$

2.3. Ferromágnesség

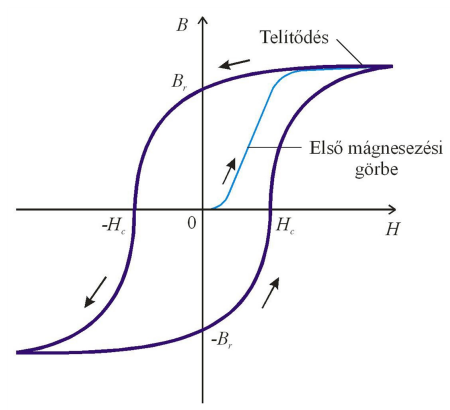
A ferromágneses alapjelenség, hogy valamekkora B tér jelenlétében egy **nagy mágnesezettség** jelenik meg az anyagban; az eddigiekkel ellentétben a szuszceptibilitás **100-1000 nagyságrendű**.

A mágnesség eddigi tárgyalásában ezt nem tudjuk mivel magyarázni. Ez nem is csoda, hiszen kiemeltük, hogy az **elektron-elektron kölcsönhatást** nem vesszük figyelembe, márpedig a ferromágnesség okozója épp ez.

2.3. Megjegyzés. A másik magyarázat az elektronok közti ún. kicserélődési kölcsönhatás; ezt csak röviden érintjük majd.

2.3.1. Alapjelenségek

Valamely távol állandó H térbe helyezett anyagban M mágnesezettség (vagy mérhető B tér) alakul ki az alábbi ábra szerint:



6. ábra. Hiszterézis-görbe.

A nevezéktan: az ábra jelöléseivel B_r a **remanens mágnezettség** (az anyagot felmágnesezve őt ismét 0 térbe helyezük, és megmérjük, mekkora tere "maradt"), H_c a **koercitív erő** (amekkora külső tér alkalmazásával "vissza tudjuk szorítani" a hiszterézis maradék mágneses teret).

Szemléletes, hogy a hiszterézis görbe **területe** arányos azzal a munkával, amit oda-vissza mágnesezéssel végeznünk kell egy anyagnál.

- Ha a terület kicsi, az anyagot **lágymágnesnek** nevezzük. Alkalmazása a villamosenergetika **transzformátorházaiban**, állomásaiban van: a gyorsan változó B teret fel kell erősíteni.
- Nagy terület esetén **kemény mágnesről** beszélünk. Állandónak szánt mágnesek, illetve digitális **információ tárolására** használatos eszközök a felhasználási helyei.

Az xy -modell segítségével bemutatott kísérlet alapján sejtjük a felmágneseződés forrását: azonos irányba álló **mágneses momentum-területek**, ún. **domének** alakulnak ki.

2.3.2. Weiss-féle átlagtér-elmélet

A modell szerint az anyagban **nem egymástól függetlenül rendeződő** momentumokban kell gondolkodnunk. Az elektronok egymásra való hatását úgy modellezzük, hogy egy elektron szempontjából a többi elektron mágneses momentuma egy **"átlagteret"** eredményez, és ő csak ezt látja.

2.4. Megjegyzés. Az anyagfizikában nagyon gyakori modellek az átlagtér-elméletek.

Ezt matematikailag a következőképpen fogalmazzuk meg: vegyük a (2.30) egyenletet egy olyan helyen, ahol az elektron egy **effektív mágneses indukcióvektort** lát:

$$B_{\text{eff}} = \mu_0 H + \lambda M, \quad (2.34)$$

ahol λ valamilyen arányossági konstans; feltesszük tehát, hogy az effektív térben van egy, magával **a mágneszettséggel arányos** tag.

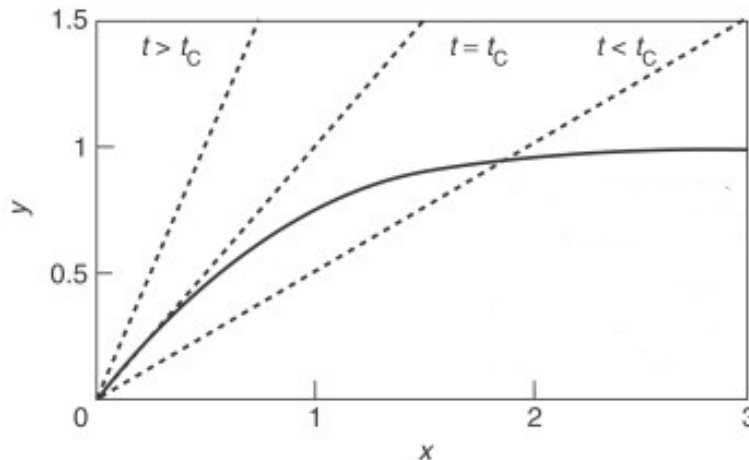
Tekintsük a $H = 0$ esetet! Ekkor M -re rögtön egy egyenletet kapunk:

$$M = n g_J \mu_B J \mathcal{B} \left(\lambda \frac{g_J \mu_B J}{kT} M \right). \quad (2.35)$$

2.5. Megjegyzés. Láthatóan a zérus mágneszettség triviálisan megoldja az egyenletet.

Az egyenlet jobb oldalán tehát egy Brillouin-függvény van: egy szigorúan monoton növvő (konkáv) függvény, amely nagyobb hőmérsékletre "laposabb".

Kérdés: van-e egyáltalán a (2.35) egyenletnek **nemtriviális** megoldása? Segítségül vázoljuk fel grafikusan!



7. ábra. A mágnesezettség a Brillouin-fv. argumentuma függvényében – változójának a hőmérsékletet tekintjük.

Az egyenletnek tehát bizonyos esetekben (specifikusan: ha a hőmérséklet bizonyos értéknél nagyobb), nincs megoldása. Van azonban egy **kritikus hőmérséklet**, amelynél az egyenes a Brillouin-függvény **érintőjévé** válik, majd pedig **metszi**; ekkor lesz megoldás. Ezzel tehát a modell **eredményes volt**: valóban magyarázza a ferromágnesség kialakulását. Ezt is tapasztaljuk: bizonyos hőmérséklet fölött nem mérhető a jelenség.

Kiszámítható, milyen T_c kritikus hőmérsékletnél válik érintővé a fenti függvény; egy adott anyagban pedig a kritikus hőmérsékletet megmérve (2.30) egy egyenletet ad λ paraméterre nézve. Sajnos azonban ez **nem a helyes arányossági tényező** B és M között: a modell tehát **kvantitatív eredményeket nem szolgáltat**.

2.6. Megjegyzés. Ezen kvantitatív hiányosságot a kvantummechanikában ismert kicserélődési kölcsönhatás okozza: egy extra kicserélődési tagot kell írni a Hamilton-függvénybe.

2.3.3. Ferromágnesség kritikus hőmérsékleten

A kvantitatív hiányosságok ellenére vizsgáljuk tovább, mi történik az átlagtér-elmélet szerint a mágnesezettséggel a **kritikus hőmérséklet környékén!**

2.7. Megjegyzés. Természetesen ez azt is jelenti, hogy a továbbiak csak kritikus hőmérséklethez közeli T -n lesznek érvényesek.

A kritikus hőmérsékleten a **Brillouin-függvényre** igaz, hogy

$$\left. \frac{dB_J}{dx} \right|_{x=0} = \frac{J+1}{3J} \implies n^2 g_J^2 \mu_B^2 J^2 \lambda \frac{J+1}{3J} \frac{1}{kT_c} = 1. \quad (2.36)$$

Fejtsük sorba 0 körül a Brillouin-függvényt a (2.32) egyenlet szerint, és ezt írjuk a (2.35) egyenletbe!

$$M = n g_J^2 \mu_B^2 J^2 \left[\frac{g_J \mu_B J}{kT} (\mu_0 H + \lambda M) \right] \frac{J+1}{3J} \quad (2.37)$$

Felismerjük az egyenlet első tagjában T_c kifejezett alakját, amit (2.36) miatt tudunk. Így a fenti egyenlet:

$$M = n \mu_0 g_J^2 \mu_B^2 J^2 \frac{J+1}{3J} \cdot H + \frac{kT_c}{kT} \cdot M. \quad (2.38)$$

Ezt pedig rendezni tudjuk $M \sim H$ -ra a **Curie-törvényt**:

$$M = n \frac{g_J^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3(T - T_c)} \cdot H. \quad (2.39)$$

Valóban: az $M \sim H$ a **paramágnesség**. Az együtttható ki is fejezhető, bár számértékre nem egyezik a kísérlettel. Végül nézzünk meg egy kvalitatív következményt: mi történik **a kritikus hőmérséklet alatt** a mágnesezettséggel? Az M -ben való sorfejtésben tovább megyünk **köbös rendig**. Ezzel a (2.38) alakja:

$$M = K \cdot H + \frac{T_c}{T} \cdot M + A \cdot M^3. \quad (2.40)$$

Hanyagoljuk most el a külső teret! Ekkor M -re történő rendezéssel kapjuk:

$$M \sim \sqrt{T_c - T}. \quad (2.41)$$

Továbbá $T = T_c$ esetben az M -ben **lineáris tag 0**, ezért

$$M \sim \sqrt[3]{H}. \quad (2.42)$$

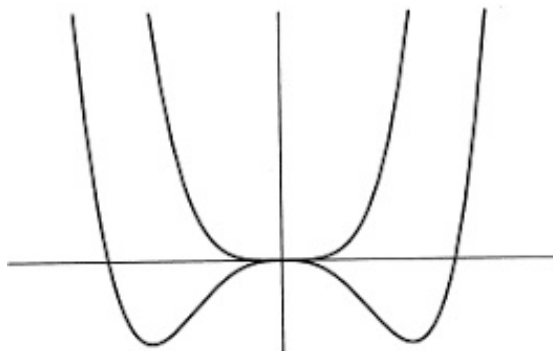
2.3.4. Landau-elmélet

Közelítsük meg most a ferromágnesség térelméletét **más szempontból!**

Korábban, szintén mágneseesség vizsgálatakor a **szabadenergia-függvény** használtuk. Mit tudunk elmondani a szabadenergiáról a mágnesezettség függvényében?

Általánosan csak annyit, hogy **nem tüntetünk ki** semmilyen szimpatizáns irányt (amennyiben a külső tér $H = 0$), így M -nél és $-M$ -nél felvett értéke meg kell egyezzen: tehát **páros függvény** kell legyen:

$$\frac{F}{V} = f_0 + A(T) \cdot M^2 + \frac{B(T)}{2} \cdot M^4. \quad (2.43)$$



8. ábra. A szabadenergia lehetséges egyensúlya a mágnesezettség függvényében.

Ez **Landau** javaslata: mondhatni pofonegyszerű. Látható, hogy a másodrendű tag előjelétől függően van, vagy nincs a **triviálistól különböző** megoldása F minimalizálásának.

A és B itt **hőmérsékletfüggő** konstansok. Begyünk egy egyszerű esetet: $A(T) := a(T - T_c)$, továbbá B legyen egy pozitív konstans.

Állandónak tartott nyomáson egy rendszer **szabadenergiája minimalizálódni** igyekszik, így egyensúlyban:

$$\frac{dF}{dM} = 0 \implies 2A(T)M + 2BM^3 = 0. \quad (2.44)$$

Ebből az egyensúlyi helyzet (minimum):

$$M = \pm \sqrt{\frac{-A(T)}{B}} \implies M \sim \sqrt{T_c - T}. \quad (2.45)$$

2.8. Megjegyzés. Az eredmény átlagtér-elmélettel való egyezése nem véletlen: sorfejtés során kaptuk mindkettőt.

2.9. Megjegyzés. Két alkalommal már használtuk a szabadenergia függvényét: akkor azonban nem használtuk ki azt a feltételt, mely szerint izobár rendszer szabadenergiája minimalizálódni igyekszik. Természetesen az ott kapott összefüggés ezzel konzisztens.

Ha pedig H jelenléte **kitüntet** egy irányt a szabadenergiában:

$$\frac{F}{V} = f_0 + A(T) \cdot M^2 + \frac{B(T)}{2} \cdot M^4 - \mu_0 M H. \quad (2.46)$$

Az egyensúly feltétele továbbra is a szabadenergia minimalizálódása:

$$2A(T) \cdot M + 2BM^3 - \mu_0 H = 0. \quad (2.47)$$

A kritikus hőmérséklet **fölött**

$$M \approx \frac{\mu_0 H}{2a(T - T_c)} \implies \chi = \frac{\mu_0}{2a(T - T_c)}, \quad (2.48)$$

amit az átlagtér-elméletből is kaptunk.

A kritikus hőmérséklet **alatt** pedig

$$2A(T) \cdot M + 2BM^3 = \mu_0 H. \quad (2.49)$$

Ezt H szerint deriválva a szuszceptibilitást kifejezhetjük:

$$\chi = \frac{\mu_0}{4a(T_c - T)}, \quad (2.50)$$

ami ismét megegyezik az eddigiekkel.

A kritikus hőmérsékleten sem A , sem B tagok nem számítanak, vagyis $M \sim \sqrt[3]{H}$ ismét.

Ez az egyszerű kiindulási alap tehát **ugyanolyan eredményekre** vezetett, mint az átlagtér-elmélet.

2.3.5. Skálatörvények

Ahogy korábban megállapítottuk, a ferromágnességre a modelljeink **kvalitatív eredményeket** adtak, de konkrét számításokat nem tudtunk velük végezni.

A legtöbb megállapításunk valamilyen **hatványfüggvény** szerinti viselkedést mutatott. A hatványfüggvények nem tartalmaznak skálaparamétert (például az exponenciális függvény argumentumában mindig van); nálunk dimenziótlan számok fejezik ki a viselkedést. Foglaljuk az eredményeket táblázatba!

$C(T)$	$ T - T_c ^{-\alpha}$	$\alpha = 0$
$\chi(T)$	$ T - T_c ^{-\gamma}$	$\gamma = 1$
$M(T)$	$ T - T_c ^\beta$	$\beta = 1/2$
$M(H)$	$H^{1/\delta}$	$\delta = 3$

1. táblázat. Skálaparaméterek összefoglalása. A jobb oszlop az általunk kapott eredményt adja.

Ezekből feírhatunk két egyenletet:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad \text{és} \quad \gamma = \beta(\delta - 1). \quad (2.51)$$

Érdekes és fontos tapasztalat, hogy a mérési eredményekkel meghatározott skálaparaméterek más értékekkel ugyan, de **kielégítik a fenti két egyenletet!** Ez azt sugallja számunkra, hogy valójában **nincs is 4 független mennyiségünk**, hanem csak 2.

Ezt termodinamikailag alá tudjuk támasztani. A szabadenergiáról ugyanis megmutatható, hogy egy furcsa "linearitást" teljesít:

$$F(\lambda^{a_1} \cdot t, \lambda^{a_2} \cdot H) = \lambda \cdot F(t, H), \quad (2.52)$$

ahol

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}.$$

Azt tudjuk, hogy **létezik két ilyen paraméter** (a_1 és a_2), melyekkel felírva ez teljesül, sőt: **nem tudunk más szabadenergia-függvényt felírni**, csak olyat, amelyekre ezek léteznek.

Ez két **kényszer** lesz a rendszerünkre nézve, amelyet a fenomenológián túl megalapoz az a tapasztalat, hogy a skálaparaméterek közt két egyenlet mindig teljesül.

2.4. Kitekintések a ferromágnességből

2.4.1. Ginzburg–Landau-elmélet

Az eddigieken túlmenő korrekció lehet, ha az egyirányba álló momentumok átlagterén kívül **számításba vesszük a doméneket**, és egy **extra energiát** adunk a rendszernek doménfal jelenlétében. Ezt matematikailag úgy tudjuk megfogalmazni, hogy a mágnesezettség **változása** jelentse a doménfal jelenlétét, és annak is a négyzetét kell tekintenünk, hogy irányfüggetlen legyen:

$$F = F_0 + \int \left[A(T)M^2 + \frac{B(T)}{2}M^4 + l^2 a (\nabla M)^2 \right] dV. \quad (2.53)$$

Ez egy **funkcionál**, ahol a funkcionális derivált, azaz $\delta F / \delta M$ eltűnése az egyensúly feltétele.

2.4.2. További mágneses jelenségek

Az eddig tárgyaltakon túl érdekes tulajdonság, hogy egy anyag lehet **antiferromágneses** is. Ez azt jelenti, hogy benne a szomszédos atomi mágneses momentumok **ellentétesen** helyezkednek el, és egyenlő nagyságúak. Ebből következőleg ez egy nehezen megfigyelhető tulajdonság, hiszen az anyagnak ilyen módon **eredő mágneses momentuma nincs**. A "tetten érhetőség" a kritikus hőmérsékletnél tapasztalt **másodrendű fázisátalakulásban** van: paramágneses lesz az anyag.

Sajátos "kombinációja" mindezeknek a **ferrimágnesség**, amelyben ellentétesen állóak a momentumok, de azok eltérő nagysága miatt mégis mérhetünk eredő momentumot.

Érdekes mérési eredményt kaphatunk, ha két dimenzióban ellentétes előjellel, azonos nagyságban mágneses momentumokat helyezünk el, és ezek kölcsönhatását vizsgáljuk: ez az ún. **Ising-modell**, mely konstrukciót meg is valósítottak. Ennek egyik jó tulajdonsága, hogy megoldása analitikusan is lehetséges: a Hamilton-függvényben a következőképp kell a szomszédos elektronok momentumainak **kölcsönhatását** figyelembe venni:

$$\mathcal{H}[S] = -J \cdot \sum_{i,j} s_i s_j + h \cdot \sum_i s_i. \quad (2.54)$$

3. Atomi vezetéslmélet

Az anyagfizika fontos vizsgálati területe a **fémek vezetése**, mivel számos technológiai alkalmazása teszi könnyebbé mindennapjainkat. Ehhez azonban a szokásos "elektronok utaznak a fémekben" modellnél többre lesz szükségünk.

3.1. Elektron periodikus térben

Vizsgáljuk egy **kristályban**, mint **periodikus szerkezetben** mozgó elektron kérdését!

3.1.1. Schrödinger-egyenlet

Az elektron állapotát legpontosabban a Schrödinger-egyenlet írja le:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi = E \cdot \psi, \quad (3.1)$$

ahol a kristály periodicitása miatt az általa keltett, az elektronra ható **potenciál is periodikus**: $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V(\mathbf{r})$, ahol \mathbf{R} -ek a rácsvektorok.

A hullámfüggvényre célszerűnek tűnik bevezetnünk ugyanazt a periodicitást, de ez szükségtelen: minden mérhető mennyiség a hullámfüggvény **abszolútérték-négyzetével** van összefüggésben, vagyis egy egységnyi abszolútértékű komplex számmal való szorzódás megengedhető. Praktikus alakban ez:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r}). \quad (3.2)$$

3.1.2. Transzláció szerepe

Vezessük be a **transzlációs operátort**, amely egy hullámfüggvényt **rácsvektornnyival** tol el!

$$\hat{T}(\mathbf{R}_n) \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \quad (3.3)$$

Könnyen belátható, hogy a translációs operátor és a Hamilton-operátorok **kommutálnak** ilyen potenciálnál. (Végezzük el mindkét irányban a hullámfüggvényre való hatásukat!) Vektoralgebrai tétel azonban, hogy ekkor a két operátornak **lesz közös sajátfüggvényrendszere**, azaz azon a téren, amelyen mindketten hatnak, ugyanazon függvények lesznek a sajátvektoraik. Feladatunk tehát az eltolás-operátor sajátértékeit megtalálni.

Az eltolás-operátor sajátértékegyenlete:

$$T(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r}) = C(\mathbf{R}) \cdot \phi(\mathbf{r}). \quad (3.4)$$

Az eltolásoperátorok azonban **saját magukkal is kommutálnak**, illetve a felcserélhetőségen túl a **felbonthatóság** is igaz:

$$T(\mathbf{R}_1)T(\mathbf{R}_2) = T(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2). \quad (3.5)$$

Mivel ezt a **sajátértékeknek is** tudniuk kell, a sajátérték függvényéül (\mathbf{R} -től való a függés) egy ilyen tulajdonságú függvénynt kell találnunk. Vektoralgebrai ismereteink az **exponenciális függvénycsaládot** adják:

$$C(\mathbf{R}_n) := e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}. \quad (3.6)$$

3.1. Megjegyzés. A kitevőt azért választottuk azonnal képzetesnek, hogy a hullámfüggvény normáltságán a sajátértékkel való szorzódás ne változtasson.

A **sajátérték periodicitása** szintén **szükséges**: egy rácsvektornyival való eltolás a hullámfüggvényen csak (3.2) szerint változtat; az eltolásoperátor sajátfüggvényeinél azonban ennek nem szabad számítania. Ezt úgy fogalmazhatjuk meg, hogy \mathbf{k} -ra megköveteljük, hogy **reciprok-rácsvektor** lesz.

3.2. Megjegyzés. A szokásos szabadsági fok kérdését érintve: természetesen \mathbf{k} a Brillouin-zónában van.

Keressük ezután a sajátfüggvényt a következő alakban:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u(\mathbf{r}). \quad (3.7)$$

Emellett jó választásnak tűnik, hogy u **periodikus** legyen \mathbf{R} szerint.

A Schrödinger-egyenlet felállításához már csak a **differenciáloperátor** hatását kell felírunk az így választott hullámfüggvényre:

$$\nabla[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u(\mathbf{r})] = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}(i\mathbf{k} + \nabla)u(\mathbf{r}). \quad (3.8)$$

Így a megoldandó egyenlet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}(i\mathbf{k} + \nabla)^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \cdot u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}). \quad (3.9)$$

Ez a **Bloch-egyenlet**.

3.3. Megjegyzés. Az u függvény rácsvektorok szerinti periodicitásának megkövetelése azért is megkönnyíti a megoldások megtalálását, mert lehetővé teszi számunkra, hogy csupán egy cellán belül kelljen a megoldást vizsgálnunk. Egyéb, nem periodikus esetben \mathcal{L}^2 -ből kellene valamilyen polinom \times gauss-jellegű függvényt keresnünk, és minden \mathbf{k} -ra megoldanunk.

3.1.3. Határfeltételek

Az egyenlet felállítására a **határfeltételek megfogalmazásával** ér véget. A szokásos periodikus határfeltétel szerint az **első** és az **utolsó utáni** helyen levő eset közt **nem teszünk különbséget**:

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

ahol \mathbf{a}_i az elemi rácsvektor, N_i pedig az elemi cellák száma az általunk vizsgált anyagban. (A **3 dimenziós eset** különböző irányai miatt ez 3 feltétel: $i \in \{1, 2, 3\}$.)

A szokott módon \mathbf{k} -nak **reciprok-rácsvektornak** kell lennie. Alkalmazva a $\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3$ felírást:

$$k_i = \frac{n_i}{N_i} \quad n_i = 1, 2, \dots, N_i. \quad (3.11)$$

Végül a későbbiekhez szükségünk lesz egy \mathbf{k} tér-beli **térfogatra** is:

$$|\Delta \mathbf{k}| = \frac{(2\pi)^3}{Nv}, \quad (3.12)$$

ahol v egy Brillouin-zóna térfogata, és $N = N_1 N_2 N_3$.

3.2. Sáv szerkezet

3.2.1. Kváziszabad elektron

A **Bloch-egyenlet** megoldásai közül először tekintsük a **kváziszabad elektront!** Ez azt jelenti, hogy **a potenciált első közelítésben elhanyagoljuk**, jelenlétét csupán a hullámfüggvény **speciális választásával** érzékeltetjük. Később kis potenciálra tekinthetünk a kváziszabad eset **perturbációjaként**.

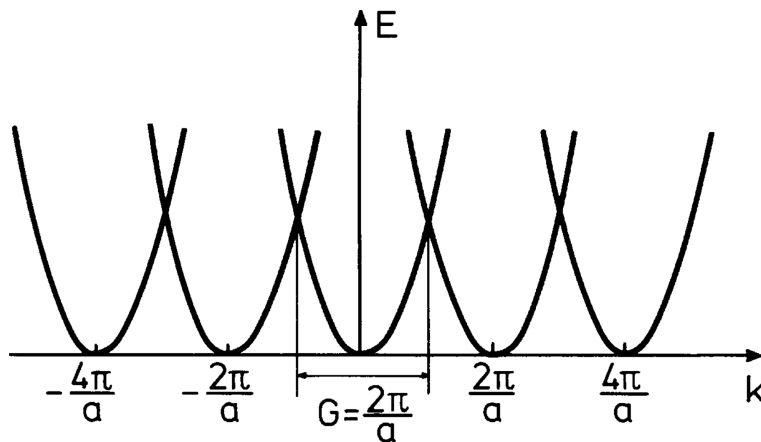
Ekkor u periodicitását a **Miller-index** segítségével írjuk fel:

$$u(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{r}\mathbf{G}_l}. \quad (3.13)$$

A Bloch-egyenlet **sajátértékei**:

$$E_l(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_e} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_l)^2. \quad (3.14)$$

Vázzoljuk fel az **$E(\mathbf{k})$ relációt!** (Természetesen csak 1 dimenziót tekintünk az ábrán.)

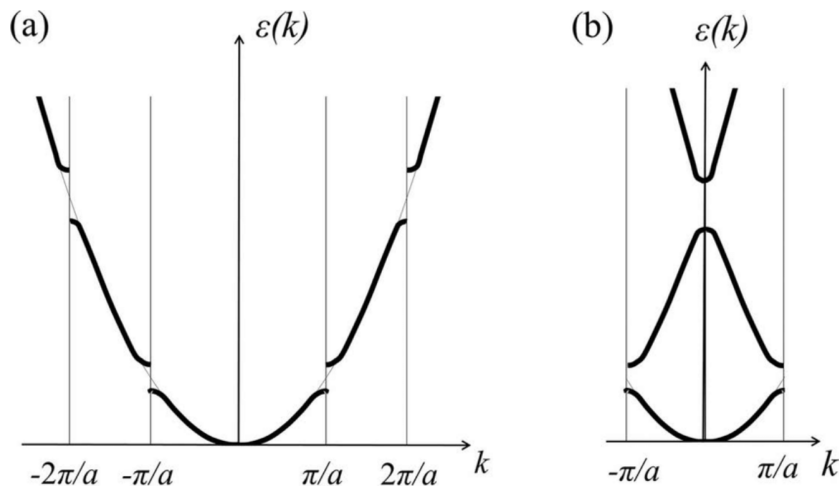


9. ábra. A kváziszabad elektron energia-hullámszám összefüggése.

Korábban azonban kikötöttük, hogy \mathbf{k} a Brillouin-zónában van! Ennélfogva minden ezen **túlmenő** periódusnál **vissza kell tolni** a grafikont a $\left[-\frac{\pi}{a}; \frac{\pi}{a}\right]$ intervallumba.

3.2.2. Perturbált megoldás

Végül pedig figyelembe vesszük a **perturbációt** (azaz a **jelen levő gyenge potenciált**), ami az **energiaszintek kettéválását, felhasadását** okozza ugyanúgy, mint amikor az egyatomos lineáris láncból kétatomos lett.



10. ábra. Kváziszabad elektron perturbált esete.

Az ábrán **sáv szerkezet** megjelenését látjuk. Eszerint ha egy elektront kis periodikus térbe helyezünk, **bizonyos energiával** rendelkezve **lesz megoldás**, a vezetés létrejöhet; de lesznek **tiltott sávok** is, amely energiákkal az elektron nem rendelkezhet a modell szerint.

3.4. Megjegyzés. A modell kis abszolút hőmérsékleten érvényes.

Ez **kiindulásként** szolgálhat számunkra **fémek vezetésének** vizsgálatához is.

3.2.3. Sokelektron-rendszer

A fentiekben **1 db elektron** viselkedését vizsgáltuk: fémek vezetésekor azonban **sokkal több** elektront kell tekintenünk. Egyszerű közelítés ilyenkor, hogy **elfeledkezve az elektronok közti kölcsönhatásról**, eredő hullámfüggvényül egyszerűen az **elemi hullámfüggvények szorzatát** vesszük:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_i \psi_i(\mathbf{r}_i). \quad (3.15)$$

Ennek nézzük egy kicsit bonyolított változatát. Az **"egyesével"** való vétel jelentse azt, hogy az egyes \mathbf{r}_i helyeken az elemi hullámfüggvényt egyesével **minden lehetséges energiával** vesszük; ebből szintén N darab van, lásd a (3.11) egyenletet. Hogy ne kerüljünk ismétlésbe, beírjuk ezeket egy **mátrixba**, és annak **determinánsát** vesszük, mivel determináns képzésekor az elemek ismétlés nélkül adódnak össze és szorozódnak n -szer.

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \det \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_1(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_1(\mathbf{r}_N) \\ \psi_2(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_2(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \psi_N(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Megmutatható, hogy ez, az ún. **Slater-determináns valóban megoldása** a Bloch-egyenletnek.

Van azonban ennek egy súlyos következménye. Két hullámfüggvény megegyezésekor a determináns két sora megegyezik; ez esetben viszont a determináns értéke 0, azaz a hullámfüggvény is azonosan 0. **Nem lehet tehát két elektron ugyanazon állapotban:** ez a **Pauli-elv**.

3.5. Megjegyzés. Mivel a spin-pálya kölcsönhatás általában kis effektus, a csupán ebben különböző elektronok állapotait vehetjük azonosnak, így mégis megengedjük, hogy energiánként két elektron (de nem több!) egyazon állapotban legyen.

3.3. Statisztikus elektronvezetés

3.6. **Megjegyzés.** A hosszú számolások csak ezután jönnek...

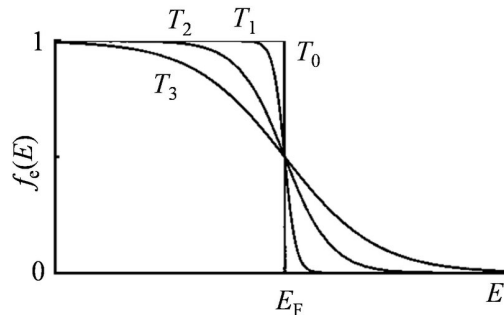
3.3.1. Fermi–Dirac-eloszlás

Az eddigiekben számba vettük a **kristály terében** levő elektronok energiáit és azok előfordulását. Hogy teljes képet kapjunk, ismét a **statisztikus fizikához** kell nyúlnunk, ugyanis a fent meghatározott energiák **nem egyforma valószínűséggel** fordulnak elő, hanem a **Fermi–Dirac eloszlás** szerint.

Jelölje f_0 az átlagos **számsűrűséget** (adott térfogatban levő adott energiájú elektronok száma), továbbá vezessünk be egy **szorzófaktor** szerepű μ mennyiséget, a **kémiai potenciált!** Ekkor a Fermi–Dirac eloszlás:

$$f_0(E_n(\mathbf{k})) = \frac{1}{e^{\frac{E_n(\mathbf{k}) - \mu(T)}{k_B T}} + 1}. \quad (3.17)$$

A függvény grafikonja különböző T hőmérsékletekre:



11. ábra. Fermi–Dirac-eloszlás grafikonja különböző hőmérsékletekre.

Láthatóan minden hőmérsékleten ugyanazon E_F **Fermi-energián** megy át a grafikon az $\frac{1}{2}$ ordinátájú ponton. **Normálhatjuk** a számsűrűséget N -re: ekkor, mivel minden energiát **kétszer** vehetünk figyelembe, a feltétel:

$$2 \cdot \sum_{\mathbf{k}} \sum_n f_0(E_n(\mathbf{k})) = N, \quad (3.18)$$

amely feltételből μ számolható, ami épp E_F !

3.7. Megjegyzés. Az egységes elnevezés kedvéért Fermi-energiának azt a μ -t tekintjük, amelyet a $T = 0$ eset normálásakor kapunk.

$T = 0$ esetben a függvény a Fermi-energiánál 1-ből levág 0-ba; egyéb esetben egy kT "szélességű" **energiasávban** zajlik az átmenet. (Ez az exponenciális függvény sorfejtésével könnyen meggondolható.)

3.3.2. Kváziszabad eset állapotsűrűsége

Az így megfogalmazott állításokat alkalmazzuk a **kváziszabad elektron** energia-hullámszám összefüggésére! Bevezetjük az **állapotsűrűséget**, melyre definíció szerint a k térben

$$\Delta N = \rho(E) \Delta E. \quad (3.19)$$

Az állapotsűrűség meghatározásához szükség van a (3.18) egyenlet műveleteinek elvégzésére. \mathbf{k} szerint az összegzést ismét **integrálra** írjuk át a (3.12) megállapítása szerint:

$$\sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k}. \quad (3.20)$$

Mivel a \mathbf{k} szerinti integrált ismét az $E(\mathbf{k})$ **reláció** határozza meg, **alkalmazhatjuk a korábbiakat**, például az (1.44) egyenletet:

$$\sum_n \sum_{\mathbf{k}} g(E_n(\mathbf{k})) = \sum_n \frac{V}{(2\pi)^3} \int g(E_n(\mathbf{k})) d^3\mathbf{k} = V \int g(E) \rho(E) dE, \quad (3.21)$$

ahol végül azt használtuk ki, hogy a k térben dN részecskét a $d^3k/(2\pi)^3$ térfogatban találunk.

A kváziszabad esetre a (3.19) egyenletet alkalmazzuk, mivel ismerjük az $E(\mathbf{k})$ relációt, továbbá tudjuk, hogy a k térben az infinitezimális térfogathoz tartozó részecskeszámot egy **gömbhéj mentén** írhatjuk fel: $dN = 4\pi k^2 dk$.

Az $E(k)$ relációt az **alsó energiaszinten parabolaívvel** közelítjük:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot k^2. \quad (3.22)$$

Felírjuk tehát $\rho(E)$ -t **közvetett differenciállal**:

$$\rho(E) = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{dE} = 2 \cdot \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{2m_e}{\hbar^2} E \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}} \frac{1}{\sqrt{E}} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \sqrt{E}. \quad (3.23)$$

3.8. Megjegyzés. A kettes szorzó a (3.18) egyenletből származik.

Híres eredményt kaptunk: az **állapotsűrűség** az **energia négyzetgyökével** arányos. Ezt az egyenlőséget még sokszor fogjuk használni a továbbiakban.

Kiszámíthatjuk még, **hány elektron** rendelkezik a Fermi-energiával. Ehhez a (3.21) egyenlet integrálját kell elvégeznünk. Szerencsénkre $T = 0$ hőmérsékleten a $g(E)$ függvény **lépcsőfüggvény**: a Fermi-energiáig 1, fölötte pedig 0, így

$$N = \int_0^{E_f} \rho(E) dE. \quad (3.24)$$

A térfogattal leosztva pedig:

$$\frac{N}{V} = \frac{2}{3} \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} E_f \right)^{3/2}. \quad (3.25)$$

3.9. Megjegyzés. Bár a fenti számolás csupán a kváziszabad elektronra igaz, valamilyen effektív tömeg behelyettesítésével néha más státuszú elektronra is tehetünk ilyen közelítést. Ennek magyarázata abban rejlik, hogy minden $E(k)$ reláció egy parabolával közelíthető a legegyszerűbben.

3.10. Megjegyzés. Véges hőmérséklet esetén f nem közelíthető lépcsőfüggvénnyel, így az integrált 0-tól ∞ -ig el kell végeznünk, beírva az eloszlás függvényét az integrandusba. Ennek könnyebb kezelésére szokás bevezetni az $F_{1/2}$ függvényt, amelynek sorfejtéséből numerikus eredményt kaphatunk. Alább ezt a sorfejtést fogjuk máshogyan megközelíteni.

3.3.3. Sommerfeld-sorfejtés

Végezzünk egy **formális átalakítást** a g függvényben! Legyen $G' = g$ oly módon, hogy az integrációs szabadságot a $G(0) = 0$ feltétel teljesítésére használjuk ki.

Ekkor **parciális integrált** végzünk:

$$\int_0^{\infty} g(E) f_0(E) dE = \int_0^{\infty} G(E) \left(-\frac{df_0}{dE} \right) dE, \quad (3.26)$$

mivel a **határokon** az integrál **kinullázódik**.

3.11. Megjegyzés. *Egyelőre nem használjuk ki, mi lehet a g függvény. Korábban valamilyen közvetett függvényt jelöltünk vele, például a (3.21) egyenletben. Most ahhoz az egyenlethez megtévesztő lehet visszanyúlnunk, mivel a közvetett függéséből ρ -t kihoztuk, itt pedig majd éppen ρ lesz ez az általános g . Bonyolult nevezéktan, nem szabad egyes fejezetek jelöléseit összevetnünk.*

Az $f(E)$ függvényről tudjuk, hogy a kezdetben 1 értékéről 0-ra egy kT szélességű **sávban vált**. Jó közelítés tehát f **deriváltját** egy **Gauss-görbével** közelíteni. G -ben **másodrendig** fejtünk Taylor-sorba a váltási érték (azaz μ) környékén:

$$G(E) \approx G(\mu) + (E - \mu)G'(\mu) + \frac{1}{2}(E - \mu)^2G''(\mu) + \dots \quad (3.27)$$

Hogyan fog kinézni ekkor (3.26)?

→ Az első tag egyszerűen egy **Dirac-deltával** konvolválódik, vagyis $G(\mu)$ lesz.

→ A második tag μ környékén páratlan, míg a Gauss páros, így a kettő szorzatának integrálja 0.

→ A harmadik tag kiszámítható: a számolás részleteit nem közöljük.

Ezen g függvény így súlyozott várható értéke tehát

$$\langle g \rangle = G(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 G''(\mu). \quad (3.28)$$

G definíciójából pedig következik, hogy

$$\langle g \rangle = \int_0^\mu g(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{dg}{dE} \Big|_\mu. \quad (3.29)$$

Ha g függvénynek az **állapotsűrűséget** tekintjük **energiára számítva**:

$$\frac{\langle E \rangle}{V} = \int_0^\mu E_\rho(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{d}{dE} E_\rho(E) \Big|_\mu = \frac{1}{5\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mu^{5/2} + \frac{1}{8} \left(\frac{m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (kT)^2 \mu^{1/2}. \quad (3.30)$$

Rövid **fenomenologikus áttekintéssel** ebből azt kapjuk, hogy a hőkapacitás T -nek **lineáris** függvénye az elektronvezetés jelenségéből. Korábbi eredményünk, a rácsrezgésekből következőleg (lásd (1.51) és az utána következő sorfejtés) egy T^3 -bel arányos tag. **Kis hőmérsékleten ez 0-hoz tart**: ennek mindenesetre örülhetünk.

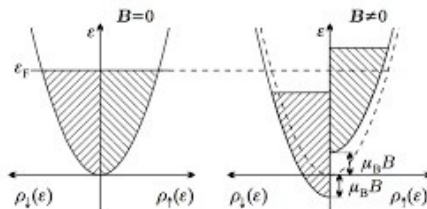
3.12. Megjegyzés. Ez azt jelentené, hogy $\frac{c_v(T)}{T}$ -t ábrázolva T^2 függvényében egy lineáris függvényt kapnánk. Ez a tendencia a kísérleti eredményekkel remekül egyezik.

3.13. Megjegyzés. Sajnos azonban a tendenciánál többet itt sem mondhatunk el: a fenti számolásból adódó együttműködés a kísérleti együttműködéssel nem egyeznek.

3.3.4. Pauli-féle szuszceptibilitás

Végül egy rövid számítást végzünk még a **szabad elektronnal** **mágneses térben**.

Pauli a **Zeeman-effektust** felhasználva korrigálta az elektron energiáját. A spin-függést eddig nem vettük figyelembe, most ezt hozzávesszük. Az eddig **parabolával** közelített $E(\rho)$ függvény **felhasad**.



12. ábra. Energia-felhasadás mágneses tér hatására.

A **korrigált állapotsűrűségek fel**, illetve **le** állapotokban:

$$\rho_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{2} \rho \left(E \pm \frac{1}{2} g_e \mu_B B \right). \quad (3.31)$$

Ha B kicsi, **sorfejtést** végezhetünk E körül. Ebből kiszámolhatjuk, hány elektron várható fel, illetve le állapotban, és mekkora ezek energiája. Mivel az **energiában való felhasadás abszolútértéke megegyezik**, a **Fermi-energiában nem lesz változás**.

Amikor azonban a **mágnesezettséget** számoljuk, a kétféle állapot számának **különbségét** kell vennünk. Ebből adódik egy B -vel arányos mágnesezettség, vagyis egy **extra paramágnesség**. A **szuszceptibilitást** levezetés nélkül közöljük.

$$\chi_p = \frac{3}{8} \mu_0 \frac{g_e^2 n_e \mu_B^2}{E_f} \quad (3.32)$$

4. Anyagi vezetésemélet

4.1. Fémek vezetése

A periodikus térben mozgó elektron energia-eloszlásáról tudjuk, hogy vannak olyan energiák, amelyekhez **semmilyen** k nem tartozik: ez alapján állítottuk fel a **sávmodell**t, amelyben **vezetési** és **tiltott** energiasávokban lehettek az elektronok. Alább ennek makroszkopikus, **anyagi** következményeit vizsgáljuk.

4.1.1. Drude-modell

Foglaljuk össze, milyen ismereteink voltak eddig a fémen belüli elektromos vezetésről!

Az elektromos áramot **töltéshordozók áramlásából** származtattuk, melyet a j **áramsűrűséggel** jellemeztünk. Ez töltésüktől (nagyságuk és számuk egyaránt számít), és az áramlás sebességétől is függ:

$$\mathbf{j} = en \langle \mathbf{v} \rangle . \quad (4.1)$$

A modell szerint a töltéshordozók egyenes vonalú, **egyenletesen gyorsuló** mozgást végeznek, amíg **akadályba** nem ütköznek; itt megállnak, és folytatják útjukat. Ez alapján feltehető, hogy a töltések áramlását előidéző térerősséggel egyenesen arányos **átlagsebességet** kapunk: $\langle \mathbf{v} \rangle \sim \mathbf{E}$.

Az ellenállást pedig a szerkezet hibáiból, azaz az ütközést előidéző akadályokból származtattuk. A vezetőképességet (vagyis az ellenállást) az előidéző tér, és a végül létrejövő töltésáram közötti egyenes arányosság jellemzi:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} . \quad (4.2)$$

Érdemes még egy ún. **relaxációs időparamétert** megvizsgálunk a modellből. Az egyenletesen gyorsuló, majd teljesen megálló töltéshordozók átlagsebességére ugyanis:

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{2} \mathbf{a} \tau \implies \sigma = \frac{e^2}{2m_e} n \tau . \quad (4.3)$$

4.1. Megjegyzés. Látszólag a Drude-modell, és az eddigi sáv szerkezeti ismereteink nem találkoznak.

4.1.2. Boltzmann-egyenlet

Vizsgáljuk az **1 vegyértékelektronnal** rendelkező atomok vezetését! Ez azt jelenti, hogy a sávmodell **legalsó** sávját kell tekintenünk.

Elméleti mechanikából ismert, hogy tetszőleges fázistérre megmaradó fázistérfogatot kapunk: ez **Liouville tétele**. (Lásd még Györgyi Géza: Elméleti mechanika jegyzet 15.10). Ez a valószínűségre is igaz: **a valószínűség időben megmarad**.

Vezessük be az $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ függvényt, amely annak valószínűségét mutatja, hogy adott időben az (\mathbf{r}, \mathbf{p}) fázishelyen van a részecske. Megmaradására felírhatjuk:

$$f(t + dt, \mathbf{r}, \mathbf{p}) = f(t, \mathbf{r} - \mathbf{v}dt, \mathbf{p} - \mathbf{F}dt). \quad (4.4)$$

Ismét bevezetünk egy **effektív impulzust**: $\mathbf{p} := \hbar \mathbf{k}$. Erre igaz, hogy :

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{d\mathbf{k}}. \quad (4.5)$$

A fázistér egyenletére tehát:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (4.6)$$

tovább alakítva

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \cdot \frac{\mathbf{F}}{\hbar} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\mathbf{k}} = 0. \quad (4.7)$$

Az **erő** származzon az elektromos és a mágneses térből, valamint e τ karakterisztikus idővel rendelkező **fluktuációból**:

$$\mathbf{F} = -e\mathbf{E} - e\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \delta\mathbf{F}. \quad (4.8)$$

Ebből kapjuk:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{e}{\hbar}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} + \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\mathbf{k}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}, \quad (4.9)$$

ahol a jobb oldalon álló kifejezés a hőmozgáson túli **rácszerű** hatás, azaz $\delta\mathbf{F}$ járuléka. Ennél többet nem mondunk róla.

Azt mondjuk, hogy valamely **erőmentes** rendszerre (nincs jelen \mathbf{E} , \mathbf{B} tér) valamilyen **meglökést** adunk. Ekkor a rendszer beállítását várjuk egy **egyensúlyi állapotra** valamilyen karakterisztikus idő alatt. Matematikailag:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} = \frac{f_0 - f}{\tau}. \quad (4.10)$$

4.2. Megjegyzés. ha a tér homogén, a "coll" ütközési index elhagyható: a sima parciális időderivált egyszerű differenciáhányadosba megy át.

Ennek megoldása:

$$f(t) = f_0 + A \cdot e^{-t/\tau}. \quad (4.11)$$

4.3. Megjegyzés. Mérnöki tervezésekkor $\bar{\tau}$ után mondhatjuk, hogy az egyensúly beállt.

f_0 -ról viszont tudjuk, hogy a **Fermi–Dirac-eloszlást** követi, ahogyan korábban levezettük.

Vigyük tovább ezt a relaxációs közelítést! Kapcsoljunk az eddig homogén térbe \mathbf{E} teret is. Ha ismerjük a relaxációs paramétert:

$$-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = \frac{f_0 - f}{\tau}. \quad (4.12)$$

Liouville tétele nyomán azonban:

$$f\left(\mathbf{k} - \frac{\tau e \mathbf{E}}{\hbar}\right) = f_0(\mathbf{k}). \quad (4.13)$$

Ebből egy egyszerű **változócserevel**

$$f(\mathbf{k}) = f_0\left(\mathbf{k} + \frac{\tau e \mathbf{E}}{\hbar}\right). \quad (4.14)$$

Végezzünk **sorfejtést** τ szerint!

$$f(\mathbf{k}) \approx f_0(\mathbf{k}) + \tau \frac{e \mathbf{E}}{\hbar} \frac{df_0}{d\mathbf{k}} \quad (4.15)$$

Mivel az f eloszlás **csak az energiától** függ (egyéb paramétereiktől csak az energián keresztül):

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + \tau e \mathbf{v}_k \frac{df_0}{dE} \mathbf{E}. \quad (4.16)$$

felhasználva a (4.5) egyenlet eredményét. Az egyenletbe "becsempészünk" két negatív előjelet: az egyiket $-e\mathbf{E}$ kapja: ebből egy erővel arányos tag származik. A másikat pedig a derivált, amely ha ilyen módon negatív, egy **lecsengést** eredményez f -re.

Ezen felbuzdulva továbbmehetünk: legyen jelen a rendszerben \mathbf{B} tér is! Az egyenlet ekkor:

$$\left[\frac{-e}{\hbar}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\mathbf{k}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right] \tau = f_0 - f. \quad (4.17)$$

A bal oldalon f -re **differenciáloperátorok** lineáris kombinációja hat: nevezzük az f -re ható részt D operátornak! Ezzel

$$\tau D f = f_0 - f. \quad (4.18)$$

Az általános megoldáshoz használt **próbafüggvény**

$$f := \sum_{n=0}^{\infty} (-\tau D)^n f_0. \quad (4.19)$$

4.4. Megjegyzés. Általában az első rendnél tovább nem szoktunk továbbmenni: a másodrendű közelítés elvégzésére később, a Hall-effektus miatt lesz szükség.

Egyelőre f_0 **nem tartalmaz helyfüggést**. Általánosan nem is tudunk ilyen függvényt mondani; egy szemléletes közelítést alkalmazunk. Azt mondjuk, hogy az idő- és helyfüggését csak a **termodinamikai mennyiségek** hely- és időfüggésén **keresztül** valósul meg:

$$f_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{e^{\frac{E(\mathbf{k}) - \mu(T(\mathbf{r}))}{kT(\mathbf{r})}} + 1}. \quad (4.20)$$

Térjünk át az **első rendű** sorfejtésre, és legyen a mágneses tér nulla!

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = f_0 - \tau \mathbf{v} \frac{dT}{d\mathbf{r}} \frac{\partial f_0}{\partial T} - \tau \mathbf{v} \frac{d\mu}{d\mathbf{r}} \frac{\partial f_0}{\partial \mu} - \frac{\tau e}{\hbar} \mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} \quad (4.21)$$

Vezessük be az **exponenst**, mint külön változót!

$$x = \frac{E(\mathbf{k}) - \mu(\mathbf{r})}{kT(\mathbf{r})} \quad (4.22)$$

Ezzel

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{dx}{dE} = \frac{1}{kT} \frac{\partial f_0}{\partial x} \implies \frac{\partial f_0}{\partial T} = -\frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \left(\frac{E - \mu}{T} \right) \quad (4.23)$$

Mivel pedig f_0 parciális deriváltja E és μ szerint csak egy negatív előjelben tér el:

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} = \hbar \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (4.24)$$

∇ -val jelölve a \mathbf{k} térben történő gradiens-képzést:

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v} \left[-e \left(\mathbf{E} + \frac{\nabla \mu}{e} \right) + \frac{E - \mu}{T} (-\nabla T) \right]. \quad (4.25)$$

Az eredmény szerint az idegen **térerősség jelenléte** és a **kémiai potenciál változása** (a részecske impulzusa miatt) kéz a kézben járnak.

4.1.3. Áramlások rendezései

Mérési eredményeink általában az **áramot** tudják mérni, így alkalmazzuk eddigi eredményeinket az áramokra! Részecskék áramlása sokféleképp lehetséges (eltérő valószínűségekkel a lendületben), így

$$\mathbf{J}_n = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}). \quad (4.26)$$

Ahogy korábban, a \mathbf{k} szerinti összegzést ismét **integrálra** játsszuk át:

$$\mathbf{J}_n = \frac{1}{4\pi^3} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k}. \quad (4.27)$$

A részecskeáramból triviális az elektromos áram, hiszen elektronok áramlását kell csak tekintenünk: $\mathbf{J} = -e\mathbf{J}_n$. **Energiaáram** felírásához az integrálban $E(\mathbf{k})$ -val szoroznunk kell az integrandust.

Hőáram felírásához egy termodinamikai trükkhöz folyamodunk. Tetszőleges A **extenzív** mennyiségre igaz, hogy

$$dA = d\left(\frac{A}{V}\right)V + \frac{A}{V}dV = daV + \frac{A}{V}dV. \quad (4.28)$$

Ennélfogva a termodinamikában már ismert állapotjelzőink változását áramlásokra is alkalmazhatjuk.

Ahogy például $U = TS + \mu N - pV$, most $J_Q = J_E - \mu J_n$.

Vagyis a hőáram:

$$\mathbf{J}_Q = \frac{1}{4\pi^3} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) (E(\mathbf{k}) - \mu) f(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k}. \quad (4.29)$$

Már csak be kell helyettesítenünk f -et a (4.25) egyenletből:

$$\mathbf{j}_n = K_0 \left(\mathbf{E} + \frac{\nabla\mu}{e} \right) - K_1 \left(\frac{\nabla T}{T} \right) \quad (4.30)$$

$$\mathbf{j}_Q = -K_1 \left(\mathbf{E} + \frac{\nabla\mu}{e} \right) + K_2 \left(\frac{\nabla T}{T} \right). \quad (4.31)$$

Érdekes eredményre jutottunk: a hőáramba **beleszól** a részecskeáramot okozó hatás, és fordítva; ráadásul **ugyanolyan mértékben** (a konstansok megegyeznek)! Ez a **kereszt effektus**.

4.1.4. Termodinamikai megfontolások

Ennek a termodinamika fényében is így kell lennie az **Onsager-relációk** miatt. Ugyanis a térfogatra eső entrópia infinitezimális mennyisége

$$ds = \frac{1}{T} du - \frac{\mu}{T} dn, \quad (4.32)$$

ahonnan az ún. **entrópia-produktum**:

$$\dot{S} = \int \left[\frac{1}{T} d\dot{u} - \frac{\mu}{T} \dot{n} \right] dV, \quad (4.33)$$

amely integrandus a termodinamika második főtétele folytán **nem csökkenhet**.

Folytonossági egyenletet írhatunk fel a részecske- és töltésáramokra:

$$\dot{n} + \operatorname{div} \mathbf{j}_n = 0 \quad \text{és} \quad \dot{u} + \operatorname{div} \mathbf{j}_E = \mathbf{E} \cdot \mathbf{j}, \quad (4.34)$$

ahol az utolsó tag a **Joule-hő**.

Ezzel az entrópia-produktum:

$$\dot{S} = \int \left[-\frac{1}{T} \nabla \cdot \mathbf{j}_E + \frac{1}{T} \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} + \frac{\mu}{T} \nabla \cdot \mathbf{j}_n \right] dV. \quad (4.35)$$

A parciális integrál segítségével teljes divergenciává alakítjuk az egyenletet, amely a határokon 0, így "áthárítjuk" a nablát a másik tagokra:

$$\dot{S} = \int \left[-\nabla \cdot \frac{1}{T} \mathbf{j}_E + \frac{1}{T} \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} + \nabla \cdot \frac{\mu}{T} \mathbf{j}_n \right] dV. \quad (4.36)$$

Végül alkalmaznunk kell a termodinamikai **áramösszefüggéseket**: $\mathbf{j}_Q = \mathbf{j}_E + \mu \mathbf{j}_n$ és $\mathbf{j} = -e \mathbf{j}_n$:

$$\mathbf{j}_n = L_{11} \left(\mathbf{E} + \frac{\nabla \mu}{e} \right) + L_{12} \left(-\frac{\nabla T}{T} \right) \quad (4.37)$$

$$\mathbf{j}_Q = L_{21} \left(\mathbf{E} + \frac{\nabla \mu}{e} \right) + L_{22} \left(-\frac{\nabla T}{T} \right). \quad (4.38)$$

Az entrópia-produktumot **bilineáris** formulára játszhatjuk át, amelyből az \mathbf{L} mátrix szimmetrikus, **pozitív szemi-definit** volta következik. Ezen L_{ij} mennyiségekre pedig a korábban felírt K -k stimmelnek.

4.1.5. Áramok további tulajdonságai

Vegyük szemügyre a vezetési jelenségeket **külön-külön** is!

Ha **nincs elektromos áram**:

$$0 = K_0 \left(\mathbf{E} + \frac{\nabla\mu}{e} \right) - K_1 \left(\frac{\nabla T}{T} \right) \implies \frac{\nabla\mu}{e} = \frac{K_1}{K_0} \frac{\nabla T}{T}. \quad (4.39)$$

A hőáramot így egyszerűbb alakra hozhatjuk:

$$\mathbf{j}_Q = \left(K_2 - \frac{K_1^2}{K_0} \right) \frac{\nabla T}{T}. \quad (4.40)$$

Vagyis a hőáram egyenesen arányos a **hőmérsékletgradienssel**. Egyfajta **hővezetőképességet** definiálhatunk így, az elektromos vezetőképesség **analogonját**:

$$\kappa = \frac{\pi^2 k_B^2 n T}{3m^*} \cdot \tau. \quad (4.41)$$

Ez a **Drude-modellt** igazolja számunkra: a karakterisztikus idővel arányos vezetőképességet kaptunk. Csupán a teljesség kedvéért, ekkor

$$L = \frac{\kappa}{T\sigma} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2}, \quad (4.42)$$

amely egy pozitív, **univerzális** konstans! Ez a **Wiedemann–Franz-törvény**, amely kísérletileg is igazolt.

4.5. Megjegyzés. *L* nem minden anyagra ugyanennyi pontosan, mivel kihasználtuk a számolás során, hogy kvázi-szabad elektronnal közelítünk.

Fontos következmény, hogy a **hővezetés** és az **elektromos vezetés** egymástól **nem független**. Anyagvizsgálatilag tehát nagyon nehéz jó hővezető, de rossz elektromos vezető (azaz szigetelő) tulajdonságú anyagot találni.

Ami a **termofeszültséget** illeti: válasszuk a töltésáramot 0-nak. Az arányosság:

$$-\frac{1}{e}\nabla\mu = S\nabla T \implies S = -\frac{1}{eT}\frac{K_1}{K_0}, \quad (4.43)$$

ahol S a **Seebeck-együttható**.

4.1.6. Hall-effektus

Tekintsük ismét a **Boltzmann-egyenletet**! A (4.19) megoldásfüggvény sorfejtésében menjünk tovább **másodrendig**!

$$f \approx -\tau D f_0 + \tau^2 D^2 f_0 \quad (4.44)$$

Homogén rendszerben az operátor:

$$D = -\frac{e}{\hbar}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}. \quad (4.45)$$

D első hatványa **nem ad járulékot**, és D^2 -ből is csak **egy tag**:

$$\frac{e^2\tau}{\hbar}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \left(\tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v} \mathbf{E} \right) \quad (4.46)$$

Ebből kapható, hogy \mathbf{j} \mathbf{E} -vel és \mathbf{B} -vel **lineáris tenzorkapcsolatban** van:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} + \underline{\underline{\mathbf{A}}}(\mathbf{E} \circ \mathbf{B}). \quad (4.47)$$

Ez mérés technikailag a következőt jelenti: **rákényszerítünk** egy $\mathbf{j}_0 = \sigma \mathbf{E}_0$ áramot a mintára; ekkor egy **Hall-áram** lép fel, mi pedig nem az eredeti \mathbf{E}_0 -t mérjük, hanem egy **módosítottat**, $\mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_H$ -t:

$$\mathbf{E}_H = \frac{1}{\sigma^2} \underline{\underline{\mathbf{A}}}(\mathbf{j}_0 \circ \mathbf{B}), \quad (4.48)$$

amit **izotróp esetre** könnyen kiszámíthatunk:

$$\mathbf{E}_H = R \mathbf{j}_0 \times \mathbf{B}, \quad (4.49)$$

ahol $R = \text{sgn}(m^*)/en$. R akkor nagy, ha a mozgóképes töltések száma kisebb.

4.6. Megjegyzés. Például félvezetőké kisebb, mint a közönséges fémeké, így a Hall-szondákat félvezetőkből készítik.

4.7. Megjegyzés. Az effektív tömeg előjelének a későbbiekben lesz szerepe.

4.2. Félvezetők

Anyagtudomány tárgyból az alapokat már áttekintettük – különleges vezetési tulajdonságokkal rendelkező anyagok. Most az eddigi vezetéseméleti megállapításainkat alkalmazzuk rájuk, hogy további kvantitatív eredményekre jussunk.

4.2.1. Jelenségi áttekintő

Félvezetők szerkezetében ún. **kovalens kötések** találunk az elektronjai között, amelyek **kellően szorosak** ahhoz, hogy ne legyenek benne delokalizált elektronok. Első közelítésben tehát a félvezetők **szigetelők**.

A sávmodell szerint félvezetőknek azon anyagokat tekintjük, ahol az optikai, majd a következő akusztikus ág közti (**tiltott**) **energia-sáv** nagysága 1,5 eV. (A legtöbb szigetelőnek ennél háromszor nagyobb.)

4.8. Megjegyzés. *A spin-kvantumszám elhanyagolása miatt ez azt jelenti, hogy 4 vegyértékelektronnal rendelkező anyagokról van szó.*

Ekkor ugyanis **véges valószínűsége** lesz annak a kvantummechanika szerint, hogy valamely elektron energiája **elérje** ezt az energiakülönbséget, és kellő energiával rendelkezzen ahhoz, hogy a következő, **vezetési sávba** soroljuk.

Így azonban keletkezik egy **szabad elektron** és egy **kötéshiány** is! Mindkettő **töltéshordozó**, így a szigetelőből vezető lett.

4.9. Megjegyzés. *A legnagyobb probléma, hogy a vezetés során az anyagon, mint ellenálláson hő fejlődik, ami növeli az anyag hőmérsékletét, energiáját, és (mint később látjuk), a töltéshordozók keletkezésének valószínűségét is; ez pedig az ellenállás csökkenése. Így kellő hűtés híján a félvezető könnyen elfűti magát.*

4.10. Megjegyzés. *A gyémánt lenne ilyen szempontból a legideálisabb, azonban azt nehéz "szennyezni", illetve az átugrási energiája is 2,5 eV.*

4.2.2. Töltéshordozók száma

Végezzünk számítást a félvezetőkben jelen levő **töltéshordozók számáról!**

Szennyezetlen félvezetőben töltéshordozó csupán **kötés felszakadásával**, azaz a **sajátvezetés** jelenségéből származhat. A sávmodell $E(k)$ relációjának két vonatkozó ágát **közelítsük parabolaívvel**, ami a vezetéshez közel levő ("gyanús") elektronok energiájához jó közelítés lesz. A kötéshiány **ugyanúgy töltéshordozónak** tekinthető.

Nevezéktan tekintetében c indexet a vezetési sávba tartozó töltéshordozók, v -t pedig a kötöttek kapnak. Az energiák szélsőértékét (a parabolaívek tengelypontjait) jelölje E_c és E_v ! Ezekkel:

$$\rho_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_n}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c}, \quad (4.50)$$

$$\rho_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E}. \quad (4.51)$$

4.11. Megjegyzés. A képletekben szereplő tömegek effektív tömegek: az adott közelítő parabolaiív meredeksége állítható velük. Az alsó parabolához negatív effektív tömeg szükséges: magyarázatot találtunk tehát a korábban felvetett kérdésre.

A töltéshordozók számát **Fermi–Dirac-eloszlással** határozzuk meg:

$$n(T) = \int_{E_c}^{\infty} \rho_c(E) \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} dE, \quad (4.52)$$

$$p(T) = \int_{-\infty}^{E_v} \rho_v(E) \left[1 - \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} \right] dE, \quad (4.53)$$

mivel szennyezetlen félvezetőben épp annyi elektron "szakad ki", mint amennyi töltéshiány keletkezik.

4.12. Megjegyzés. A kémiai potenciál meghatározásával később foglalkozunk.

Teszünk egy **közelítést** a (4.53) egyenletben:

$$p(T) = \int_{-\infty}^{E_v} \rho_v(E) \frac{1}{e^{\frac{\mu-E}{kT}} + 1} dE. \quad (4.54)$$

Ezután, hogy ugyanolyan alakot kapott az n , illetve p típusú töltéshordozó számsűrűség-egyenlete, **klasszikus közelítést** végzünk velük, mivel az energiaátmenetek a kT karakterisztikus energiánál sokkal **kisebkek**:

$$n(T) = \int_{E_c}^{\infty} \rho_c(E) e^{-\frac{E-\mu}{kT}} dE \equiv N_c(T) \cdot e^{-\frac{E_c-\mu}{kT}}, \quad (4.55)$$

ahol egy konstans kiemelésével az új integrál (E szerint):

$$N_c(T) = \int_{E_c}^{\infty} \rho_c(E) e^{-\frac{E-E_c}{kT}} dE. \quad (4.56)$$

Természetesen analóg módon $p(T)$ -vel hasonlóan járhatunk el.

Ez az integrál elvégezhető, mivel tudjuk, hogy az állapotsűrűség (ρ) az energia **négyszöggyökével** arányos, lásd a (3.23) egyenletet:

$$\int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

Ezzel a két mennyiségünk:

$$N_c(T) = 2 \cdot \left(\frac{m_e k T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad \text{és} \quad P_v(T) = 2 \cdot \left(\frac{m_p k T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (4.57)$$

Térjünk vissza μ tárgyalására! Eddigi alkalmazásokkor a kémiai potenciált a Fermi–Dirac-eloszlás szerint jelen lévő elektronok **száma** határozta meg, például a (3.18) egyenlet szerint. Itt azonban a mozgóképes töltéshordozóinkról nem tudunk ilyet mondani.

Egyfajta "normálási" feltétel azért mégis van: μ -t úgy kell megválasztanunk, hogy a negatív és pozitív töltéshordozók száma **megegyezzen**: $n(T) = p(T)$. A μ -re vonatkozó feltétel tehát, egyszerűsítések után:

$$\frac{P_v}{N_c} = e^{\frac{2\mu - (E_c + E_v)}{kT}}, \quad (4.58)$$

ahol az egyenlőség jobb oldalát ismerjük a (4.57) egyenletből. Az arányra láthatóan **minden kiesik**, csak a tömegek arányának hatványa marad.

Jó közelítéssel $m_e \approx m_p$, ahonnan

$$E_f = \frac{1}{2}(E_c + E_v). \quad (4.59)$$

A töltéshordozók száma tehát:

$$n(T) = 2 \left(\frac{m_e k}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} T^{3/2} e^{-\frac{E_f - E_v}{kT}}. \quad (4.60)$$

4.2.3. Dópolt félvezető

A szennyezett, azaz **dópolt** félvezetőknél a töltéshordozók számának egyenlősége **nem írható fel**, így a kémiai potenciál meghatározása jóval **nehezebb**.

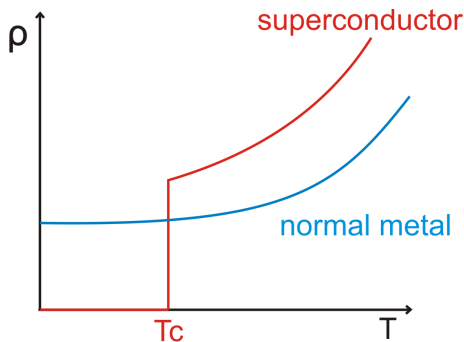
Gyors áttekintést adva: a töltéshordozók számának megváltozása a szennyezetlen esethez képest megváltoztatja az energiaállapotokat. Ezt úgy foghatjuk fel, mintha **virtuális energiaállapotok** jönnének létre. Jó közelítéssel azt mondhatjuk, hogy **4 kötött elektront** és egy $1/r$ -es **potenciált** kell néznünk.

4.3. Szupravezetők

4.3.1. Alapjelenségek; Meissner-effektus

Hagyományos (fém)vezetéskor tapasztaljuk, hogy az anyag ellenállása általában **monoton növő** kapcsolatban van a hőmérsékletével. Közel nulla abszolút hőmérsékleten általában nem tart 0-ba az ellenállás, hanem van egy maradék ellenállása, nem a hőmozgás miatt.

Van azonban egy speciális típusa a vezetőknek, a **szupravezetők**, ahol különleges az ellenállás-hőmérséklet függvénykapcsolat.



13. ábra. Szupravezető és normál vezető (fajlagos) ellenállásának hőmérsékletfüggése.

Láthatóan az ellenállás normál módon csökken a hőmérséklet csökkenésével egy **kritikus hőmérsékletig**; ott azonban **0-ba vág, és 0 is marad!**

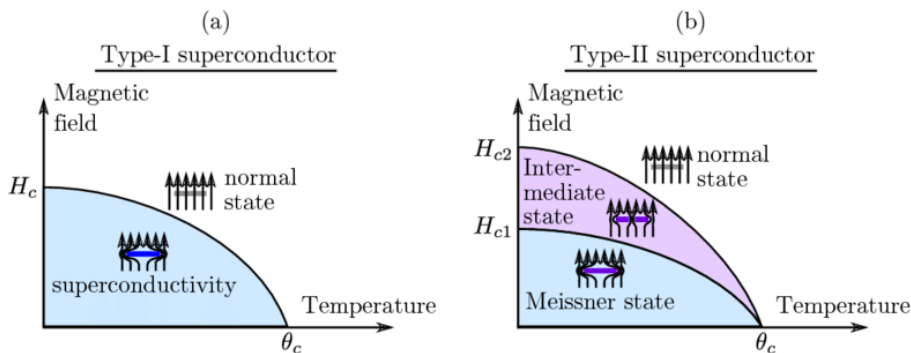
4.13. Megjegyzés. Felmerül a kérdés, hogy az ellenállás 0, vagy csak "elhanyagolhatóan" kicsi. A válasz: alapvetően teljesen 0.

A jelenség felfedezője, tanulmányozója **Heike Kommerligh Onnes** volt a Leideni egyetemről.

A kritikus hőmérséklet alatt a szupravezetők **ideális diamágnesként** viselkednek ($\chi \equiv -1$). Ez egyben azt is jelenti, hogy a mágneses indukcióvonalak "kiszorulnak" belőle: ha létrehozunk valamennyi **külső teret**, a **saját mágnesezettsége** fogja belül kiejteni annak hatását.

Ennek ékes példája a **Meissner-effektus**, melyben egy lehűtött szupravezető anyagba mágnest helyezve a mágnes **lebeg**: annak **H tere** ugyanis **M teret eredményez** a szupravezetőben.

Az effektus mentén találkozhatunk a szupravezetők két fajtájával. Fázisdiagramon szemléltetve ugyanis az adott hőmérsékleten elérhető **B tereket**, **kétféle** grafikont láthatunk:



14. ábra. Szupravezető anyagok kétféle fázisdiagramja.

Ne ijedjünk meg: a második típus ellenállása is 0 a kritikus hőmérséklet alatt, csak már "behatolhat" a mágneses indukció a szupravezetőbe.

4.3.2. Szupravezető vortexek

Tegyük fel a kérdést: hogyan valósulhat meg ez a másodfajú szupravezetés?

Mikroszkóppal közelítve egy ilyen anyagra, azt látjuk, hogy "pöttyös". Ez arra enged következtetni, hogy ezen pöttyökön kívül elsőfajú szupravezetővel van dolgunk, míg ezekbe behatol a mágneses indukció.

4.14. Megjegyzés. A kvantáltság itt is megjelenik: az adódó fluxus csak $\phi = h/2e$ lehet csak. Ez az ún. fluxuskvantum, melyet később fejtünk ki.

Ennek azonban súlyos következménye, hogy ezek a mágneses momentumok, vortexek mozognak a körülöttük folyó áram-áram kölcsönhatás miatt. Ezek pedig rácsrezgéseket keltenek, ami ellenállást eredményez. Szükséges tehát a szupravezetéshez szennyezés, amely akadályok a vortexek elmozdulását megakadályozzák.

4.3.3. Egyenletek

Vezetés vizsgálatakor mindig rendelkezésünkre állnak a Maxwell-egyenletek, amelyek azonban csak 2 független egyenletet jelentenek, míg nekünk \mathbf{E} , \mathbf{B} , \mathbf{j} : 3 mennyiséget kell meghatároznunk. Normál vezetésre a differenciális Ohm-törvényt fogalmazzuk meg ilyenkor, amelyet most azonban nem írhatunk fel, hiszen végtelen vezetőképességet kapnánk.

Állítsunk fel egyfajta mozgásegyenletet a töltésekre! A mozgás megváltozása a térerősség hatására jöhet létre szupravezetéskor is:

$$m\dot{\mathbf{v}} = -e\mathbf{E}, \quad (4.61)$$

míg az áramsűrűség $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}$. Ebből az áramsűrűséget és a térerősséget összekötő egyenlet:

$$\dot{\mathbf{j}} = \frac{ne^2}{m}\mathbf{E}. \quad (4.62)$$

Mivel pedig az indukciós törvény szerint

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}},$$

emiatt

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{m}{ne^2} \operatorname{rot} \mathbf{j} \right) = -\frac{d}{dt} \mathbf{B}. \quad (4.63)$$

Az idő szerinti differenciáloperátorral akár lehetne is "egyszerűsíteni", azonban a lényeg épp az integrációs konstansban van. A **kezdőfeltétel** kérdésében kell ugyanis eldöntenünk: megengedjük-e a \mathbf{B} tér befagyását? A kísérleti tapasztalat, hogy $\mathbf{B} = 0$ fenn kell, hogy álljon kezdetben és végig, azaz **nem engedjük meg**.

Ezzel tehát:

$$\operatorname{rot} \mathbf{j} = -\frac{ne^2}{m} \mathbf{B}. \quad (4.64)$$

Bár a vektorpotenciál bevezetésekor két mennyiség **rotációja** válik egyenlővé, ez még nem jelentené a két mennyiség egyenlőségét is. Coulomb-mértékben dolgozva, ahol $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$:

$$\mathbf{j} = -\frac{ne^2}{m} \mathbf{A}. \quad (4.65)$$

Vezessünk be egy $\lambda = \frac{m}{ne^2\mu_0}$ mennyiséget. Ezzel:

$$\mathbf{B} = -\mu_0\lambda^2 \operatorname{rot} \mathbf{j}. \quad (4.66)$$

Mivel pedig az Ampère-féle gerjesztési törvény értelmében $\text{rot } \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}$:

$$\text{rot rot } \mathbf{B} = -\frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B} \implies \Delta \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B}. \quad (4.67)$$

Ez a **London-egyenlet**. Ennek megoldása az **exponenciális függvénycsaládból** vehető.

→ $x < 0$ -ra valamilyen B_0 konstans értéket vesz fel: ez van a szupravezetőn kívül.

→ $x > 0$ -ra pedig exponenciális lecsengést kapunk: $B = B_0 \cdot e^{-x/\lambda}$.

Ez azt jelenti, hogy néhány λ hosszig a szupravezetőből **mégsem szorul ki** a mágneses tér; ezen a **felületen** folyik az áram.

4.3.4. Vortexek

Térjünk még vissza a vortexek tárgyalására!

Írjuk fel a London-egyenletet egy ilyen **vortexre!** Feltételezzük, hogy a probléma **hengersizmetrikus** (z irányban van a vortex "pötye", mint cső).

$$\frac{\lambda^2}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) B_z(r) = B_z(r), \quad (4.68)$$

és mellékfeltétel a vortexre:

$$\int \mathbf{B} d\mathbf{r} = \phi_0. \quad (4.69)$$

Ha a London-egyenleten **integrálunk** egyet, beírhatjuk a mellékfeltételbe:

$$-2\pi\lambda^2 \left(r \frac{d}{dr} \right) B_z(r) \Big|_{r=0} = \phi_0. \quad (4.70)$$

Ennek megoldása a K_0 nulladrendű módosított Bessel-függvénnyel felírva:

$$B_z(r) = \frac{\phi_0}{2\pi\lambda^2} \cdot K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right). \quad (4.71)$$

4.15. Megjegyzés. Kis argumentumra a módosított nulladrendű Bessel-függvény az $\ln(2x)$ függvénnyel közelíthető.

4.3.5. Fluxuskvantum

Elemezzük röviden, miképpen érthetjük a vortex tereként a fluxuskvantumot! Ehhez a klasszikus mechanikában **adiabatikus invariánsként**, a Sommerfeld–Wilson-féle ("régí") kvantummechanikában kvantálási feltételként ismert egyenletet írjuk fel:

$$\oint \mathbf{p} d\mathbf{s} = nh \quad n \in \mathcal{Z} \quad (4.72)$$

A kanonikus impulzus most $\mathbf{p} = m\mathbf{v} - e\mathbf{A}$, így

$$m \oint \mathbf{v} d\mathbf{s} - e \oint \mathbf{A} d\mathbf{s} = nh \quad (4.73)$$

Alkalmazzuk a **Stokes-tételt**, és legyen **belül az áram 0**. Ekkor

$$-e \int \text{rot } \mathbf{A} d\mathbf{F} = -e\phi_0 = nh, \quad (4.74)$$

ami épp a kvantálási feltétel!

4.16. Megjegyzés. Az eltérő kettes faktort egy Cooper nevű doktorandusz fedezte fel. Két elektront ugyanis ellenkező impulzussal véve egy vonzó kölcsönhatás alakulhat ki: ez a Cooper-pár. Ez az általuk keltett rácsrezgések összecsatolódását okozza, melynek folytán a vortex terére célszerű kételektronos kötött állapotként gondolnunk.

4.3.6. Ginzburg–Landau-elmélet újra

Korábban tárgyaltuk a **doménfalak energiakorrekcióját** a ferromágneses anyag szabadenergiájában. Most is tekintünk valami hasonló korrekciót: egy ún. **kinetikus tagot** adjunk hozzá a rendszerhez!

$$F = F_0 + \int \left[a(T)|\psi|^2 + \frac{B}{2}|\psi|^2 + \frac{1}{2m}|(-i\hbar\nabla - 2e\mathbf{A})\psi|^2 + \frac{B^2}{2\mu} \right] dV, \quad (4.75)$$

ahol az eddig ismert tagok a szokásosak.

A **funkcionális derivált eltűnését** mind ψ , mind \mathbf{B} szerint **előírjuk**. Az elsőből az **áramsűrűség** értéke számítható, a másikkól pedig egy egyenlet, amelynek megoldásai ψ -re **spontán örvénylések**, amelyek épp a kinetikus tag jóvoltából jelentek meg.

Utószó helyett

Ezzel a végére értünk. Pontosabban mégsem: a Tight-binding módszerről van még egy tétel, de azt nem ismertem annyira, hogy abból is összefoglalót készítek. Erre vonatkozólag építő jegyzetet vagy órafelvételt szívesen fogadok.

Sajnos fenntartom a jogot, hogy bármelyik képlehet elírhattam, mivel szakmai (és helyesírási) lektor nem nézte át. Szívesen veszem, és örülök neki, ha egy észrevett gépelési vagy elvi hiba eljut hozzám: legcélszerűbben talán a hamarffy@student.elte.hu címre.

2022. december 21.

Hamar D