III. Fizikus

Szilárdtestfizika gyakorlat 10-11.

(2005. IV. 27 - V.4.)

Állapotsűrűség

$$D(\omega) = \sum_i \delta(\omega - \omega_i)$$

Integrálisan:

$$D(\omega)\, \Delta\omega = \sum_{\omega < \omega_i < \omega + \Delta\omega} 1$$

$$\int_0^\infty D(\omega)\, d\omega = 3Ns = N_{módus}$$

<u>Fononok</u>

1 D -lánc *   /**k** rúgóállandó, **a** távolságban, **m** tömeg/*

A diszperziós reláció:

$\boldsymbol{\omega = (2\sqrt{k/m})\, \sin(qa/2)}$ ***; ha*** $\boldsymbol{q \ll (\pi/2a)}$ $\boldsymbol{\omega \approx (\sqrt{k/m})(qa)}$

$$\boldsymbol{(\omega/q) \approx (\sqrt{k/m})\, a = \mathrm{v} \approx (\partial\omega/\partial q)}$$

Hosszúhullámú limit (kontinuum modell):

$\boldsymbol{\rho(\partial^2 u/\partial t^2) = c\,(\partial^2 u/\partial x^2)}$ ***a hullámegyenlet***

$$\boldsymbol{\mathrm{v} = \sqrt{c/\rho}}$$

ahol $\boldsymbol{c = k\,a}$ *- rugalmassági modulus;* $\boldsymbol{\rho = m/a}$ *- tömegsűrűség*

<u>1D -ben</u>

$dN^{\omega,\omega+d\omega} = D(\omega)\, d\omega = (L/2\pi)\, dq \qquad \Leftarrow q_x L = n_x 2\pi\, ;\ (L/2\pi)\, dq_x = dn_x$

$$\boldsymbol{D(\omega) = (L/2\pi)/\{\partial\omega/\partial q\}}$$

<u>3D -ben</u>

$\boldsymbol{dN^{\omega,\omega+d\omega} = D(\omega)\, d\omega} = (L_x/2\pi)\, dq_x (L_y/2\pi)\, dq_y (L_z/2\pi)\, dq_z =$

$dN^{\omega,\omega+d\omega} = D(\omega)\, d\omega = [V/(2\pi)^3]\, dq^3 = Z(q)\, \{\partial q/\partial\omega\}\, d\omega =$

$= Z(q)\, d\omega/\{\partial\omega/\partial q\}$

/Z(q): q-térbeli állapotsűrűség /

$\boldsymbol{D(\omega) = Z(q)/\{\partial\omega/\partial q\}}$ */D(ω): ω-térbeli állapotsűrűség/*

$\boldsymbol{D(\omega) = \{\partial N/\partial\omega\}}$

ω(q) /skalár/ diszperziós reláció esetén:

$$Z(q) = \partial N/\partial q = V/(2\pi)^3\, [\partial/\partial q\, \{4\pi/3\, q^3\}_{gömb\ térf.}]$$

$$Z(q) = V/(2\pi)^3\, [4\pi q^2]_{gömb\ felsz.}$$

$$\boldsymbol{D(\omega) = V/(2\pi)^3\, [4\pi q^2]/\{\partial\omega/\partial q\}}$$

__1D__ -ben

$$D(\omega) = (L/2\pi) / \{\partial \omega / \partial q\}$$

$$\omega = (2\sqrt{k/m})\ \sin(qa/2)$$

$$\{\partial \omega / \partial q\} = (a\sqrt{k/m})\ \cos(qa/2)$$

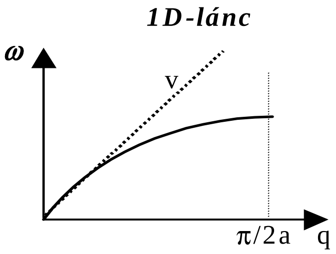
$$D(\omega) = (L/2\pi) / \{(a\sqrt{k/m})\ \cos(qa/2)\} =$$

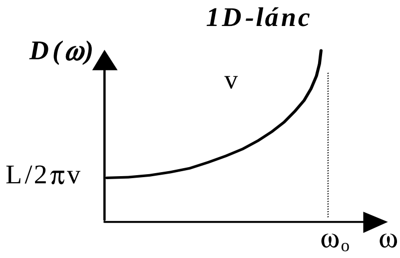
$$= (L/2\pi) / \{(a\sqrt{k/m})\ \sqrt{1-\sin^2(qa/2)}\} =$$

$$= (L/\pi a) / \sqrt{\omega_o^2 - \omega^2}\ ; \quad \text{ahol } \omega_o^2 = 4\,k/m$$

1 D*-ben* $D(\omega)$ *szinguláris / divergens/*

Diszperziós reláció *Állapotsűrűség*

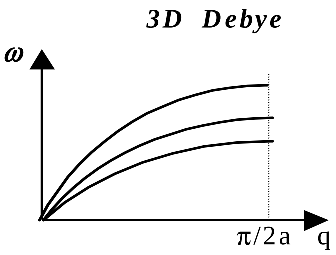


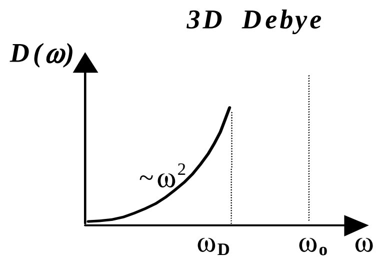


3 D*-ben már nem okvetlenül (van Hove szingularitások)*

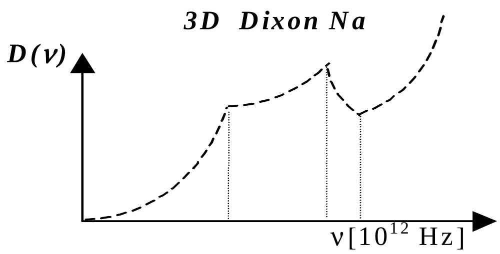
$\{\partial \omega / \partial q\} = 0$ a nevezőben, /pl. Brillouin zóna határon/

Diszperziós reláció *Állapotsűrűség*





Az állapotsűrűség folytonos, de a deriváltja szinguláris
Van Hove szingularitások



Elektronok

Diszperziós reláció:	*Állapotsűrűség:*
/skalár/	***/dN = D(E) dE/***
$\boldsymbol{E = (\hbar^2/2m^*)\, k^2}$	$\boldsymbol{D(E) = \partial N / \partial E}$

Integrálisan:

$$N(E) = \int_0^E D(E')\,F(E')\,dE' = \int_0^E D(E')\,dE'$$

F(E) : Fermi-Dirac eloszlásfüggvény, /θ függv. /

$$\boldsymbol{D(E) = V/(2\pi)^3\,[4\pi k^2]/\{\partial E/\partial k\} = V/(2\pi^2)\,[k^2]/\{(\hbar^2/2m^*)\,2k\}}$$

$$\boldsymbol{D(E) \sim k}$$

$$\boldsymbol{D(E) \sim \sqrt{E}}$$

(nem csak a diszperziós reláció, de az állapotsűrűség is parabolikus /fektetett parabola/)

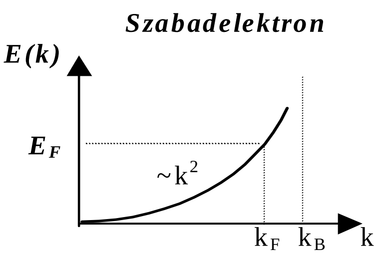
$$\boldsymbol{N(k) \sim k^3 = N(E) \sim (\sqrt{E})^3 \Rightarrow D(E) \sim (\sqrt{E})}$$

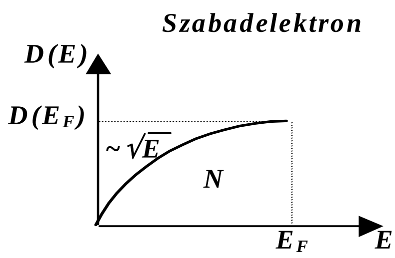
$$\boldsymbol{N^{\text{össz.}}} = N(E_F) = \int_0^{E_F} D(E')\,dE'$$

$$\boldsymbol{N = \underset{spin}{2}\,[V/(2\pi)^3]\,(4\pi/3)\,k_F^3 \Rightarrow k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 N/V}}$$

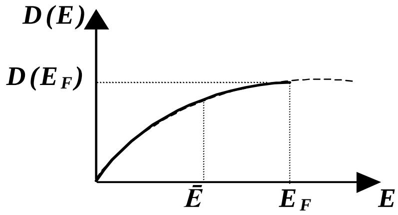
$$\boldsymbol{E_F = (\hbar^2/2m^*)\,k_F^{\,2}}$$

Diszperziós reláció	*Állapotsűrűség*





Átlagenergia



$$\bar{E} = \frac{1}{N}\int_0^{E_F} E\,dN = \frac{1}{N}\int_0^{E_F} E\,D(E)\,dE$$

$$N(E) = \alpha E^{3/2} \;;\; D(E) = 3/2\,\alpha E^{1/2}$$

$$\overline{E} = \frac{1}{N}\int_0^{E_F} E\;D(E)\;dE = \frac{1}{N}\int_0^{E_F} E\,(3/2)\alpha\sqrt{E}\;dE =$$

$$\frac{1}{N}(3/2)\alpha\int_0^{E_F} E^{3/2}\;dE = \frac{1}{N}(3/2)\alpha\frac{E_F{}^{5/2}}{5/2} = \frac{3}{5}E_F$$