

# KORREKCIÓ A FERMI-FÉLE KINETIKAI ENERGIÁKÉPLETBE

PAUNCZ REZSŐ

Bemutatta Gombás Pál r. tag az 1951. november 26-án tartott osztályülésen

## Bevezetés

Tekintsünk  $N$  szabad elektront igen mély hőmérsékleten  $V$  térfogatba bezárva (áthatolhatatlan falak). Az elektrongáz átlagos kinetikai energiáját kétféle módon számíthatjuk ki:

a) *Kvantummechanikai dobozmodell.* Legyen a  $V$  térfogat egy  $a$  élű kocka. A lehetséges energiaértékek a következők:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}{a^2} \quad \begin{matrix} n_x = 1, 2, \dots \\ n_y = 1, 2, \dots \\ n_z = 1, 2, \dots \end{matrix} \quad (1)$$

Az átlagos energiát (mely tisztán kinetikai energia, mert a doboz belsejében a potenciális energiát zérusnak vehetjük) oly módon határozhatjuk meg, ha a legmélyebb állapotokat szukcesszive betöltjük (a Pauli-elv figyelembe vételével minden kvantumállapotban csak két elektront helyezhetünk el, ellentétes spin-iránnyal) és az (1) felhasználásával számított összenergiát elosztjuk az elektronok számával ( $N$ ).

A következők szempontjából igen lényeges, hogy egyik kvantumszám sem lehet zérus. Ebben az esetben ugyanis a megfelelő saját-függvény

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin \frac{n_x \pi}{a} x \cdot \sin \frac{n_y \pi}{a} y \cdot \sin \frac{n_z \pi}{a} z \quad (2)$$

azonosan zérus lenne. (Cosinus-függvény viszont nem lehet saját-függvény, mert nem teljesíti a határfeltételeket.)

b) *Fermi—Dirac-statisztika.* Igen mély hőmérsékleten e módszer alapján  $N$  elektron átlagos kinetikai energiája a következőnek adódik:

$$\bar{E} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{3}{5} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{2/3} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \quad (3)$$

Összehasonlítás céljából emeljük ki mind az  $a$ , mind a  $b$  úton számított átlag-energia értékekből a közös

$$\frac{\hbar^2}{8m} \cdot \frac{1}{a^2} = \frac{\hbar^2}{8m} \cdot \frac{1}{V^{2/3}}$$

szorzó-faktort, a megmaradó rész mind két esetben kizárólag  $N$ -től függ. Ez utóbbi értékeit tartalmazza az I. táblázat.

A táblázat áttekintése azt mutatja, hogy a Fermi-féle képlet alapján számított értékek jóval kisebbek, mint a kvantummechanikai úton számított értékek (a százalékos eltérés még 1000-nél is 20 százalék körül van).

I. TÁBLÁZAT

N	Qu.	Fermi
1	3	0,59
10	6	2,70
20	8,10	4,28
30	9,93	5,61
40	11,40	6,80
50	12,80	7,89
100	18,50	12,53
1000	70,12	58,18

A következőkben kimutatjuk, hogy ez az eltérés szinte teljesen megszüntethető, ha a Fermi-féle levezetés gondolatmenetének megtartása mellett felhasználjuk azt a tényt, hogy egyik impulzuskomponens sem lehet zérus.

### Effektív impulzustérfogat

A kvantummechanikai dobozmodell tárgyalásával kapcsolatban már rámutattunk arra, hogy egyik kvantumszám értéke sem lehet zérus. Ábrázoljuk a lehetséges állapotokat egy olyan térben, melynek derékszögű koordinátái az  $n_x, n_y, n_z$  kvantumszámok legyenek. Minden egyes állapotnak egy rácspont felel meg, egész számú koordinátákkal. Megadott  $N$  esetén az összes betöltött állapotnak megfelelő rácspontok egy gömb belsejében lesznek (gömbnyolcad), melynek sugara a maximális  $r$ .

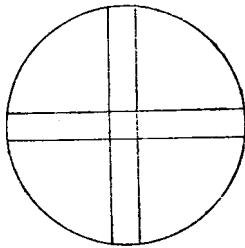
$$r^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2.$$

Figyelembe kell azonban venni az előbbieket alapján azt, hogy mindazok a rácspontok, amelyeknél bármelyik koordináta zérus, üres állapotot jelentenek. Ezek a rácspontok a három koordinátasíkon találhatóak.

Másrészt az impulzus  $x$  komponensének négyzetére a következő érték adódik:

$$p_x^2 = \frac{h^2}{4a^2} \cdot n_x^2. \quad (4)$$

Minthogy  $n_x^2$  nem lehet zérus, így  $p_x^2$  sem lehet az. Hasonló a helyzet  $p_y^2$  és  $p_z^2$ -tel.



Effektív impulzustérfogat

Azt a tényt, hogy egyik kvantumszám értéke sem lehet zérus, a Fermi-féle statisztikus levezetésnél oly módon vehetjük figyelembe, hogy a  $p_x = 0$ ,  $p_y = 0$ ,  $p_z = 0$  koordinátasíkok megfelelő vastagságú környezetét kivágjuk az impulzustérből és a megmaradó *effektív impulzustérfogattal* számolunk.

A legkitűnőbb egyezést a kvantummechanikai értékek akkor mutatják, ha a kivágandó rész vastagsága a legkisebb lehetséges impulzuskomponenssel egyenlő. A kivágandó rész vastagságát  $2d$ -vel jelölve:

$$2d = \frac{h}{2a} (n_x = 1). \quad (5)$$

A továbbiakban a Fermi-féle levezetés ismert gondolatmenetét követjük.

### A maximális energia kiszámítása

$N$  elektronnak megfelelő fázistérfogat a Fermi–Dirac-statisztika szerint (mély hőmérsékleten)  $N \frac{h^3}{2}$ , ennek egyenlőnek kell lenni a  $V$  térfogat és a  $V_{\text{eff}}$  effektív impulzustérfogat szorzatával:

$$V \cdot V_{\text{eff}} = N \cdot \frac{h^3}{2}. \quad (6)$$

Az effektív impulzustérfogatot az előbbiek alapján úgy nyerjük, ha a  $p_\mu$  maximális impulzussal leírható gömbből kivágunk három  $2d$  vastagságú réteget a koordinátasíkok mentén. A megmaradó effektív impulzustérfogat értéke (l. függelék)

$$V_{\text{eff}} = \frac{4}{3} \pi \left( p_\mu^3 - 4,5 p_\mu^2 d + 5,7295 p_\mu d^2 - 1,9098 \frac{d^4}{p_\mu} - 0,40986 d^3 \right). \quad (7)$$

Vezessük be a következő jelölést:

$$p_\mu = r \cdot d. \quad (8)$$

Ekkor  $V_{\text{eff}}$  a következőképp írható:

$$V_{\text{eff}} = \frac{4}{3} \pi d^3 \left( r^3 - 4,5 r^2 + 5,7295 r - 1,9098 \frac{1}{r} - 0,40986 \right). \quad (9)$$

Helyettesítsük be ezt a képletet a (6) egyenletbe és vegyük figyelembe, hogy (5) szerint:

$$d^3 = \frac{h^3}{64 a^3} = \frac{h^3}{64 V}. \quad (10)$$

A megfelelő egyszerűsítéseket elvégezve a következő egyenletet kapjuk  $r$ -re:

$$r^3 - 4,5 r^2 + 5,7295 r - \frac{1,9098}{r} - 0,40986 = \frac{24}{\pi} N. \quad (11)$$

$r = \sqrt[3]{\frac{24}{\pi}} \cdot x$  helyettesítéssel:

$$x^3 - 2,28485 x^2 + 1,4771 x - \frac{0,12693}{x} - 0,05365 = N. \quad (12)$$

A (12) egyenletet különböző  $N$  értékek mellett numerikusan megoldva megkapjuk  $x$ -t, mint  $N$  függvényét. A II. táblázatban megadunk néhány  $x$  értéket. A nyert számértékek kitűnően approximálhatók a következő kifejezés segítségével:

$$x = N^{1/3} + 0,7616 + \frac{0,081}{N^{1/3}} - \frac{0,031}{N^{2/3}}. \quad (13)$$

Behelyettesítve az  $r = \sqrt[3]{\frac{24}{\pi}} x$  és  $p_\mu = r \cdot d = r \frac{h}{4V}^{1/3}$

összefüggéseket a maximális impulzusra a következőt nyerjük:

$$p_\mu = \frac{h}{2} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \left( \frac{N}{V} \right)^{1/3} \left\{ 1 + \frac{0,7616}{N^{1/3}} + \dots \right\}. \quad (14)$$

Levezetésünk eredményeképpen tehát a Fermi-féle kifejezést kaptuk, korrekciós tagokkal kiegészítve.

II. TÁBLÁZAT

$N$	num.	$x$ approx
1	1,8118	1,8116
10	2,9466	2,9469
20	3,5015	3,5016
30	3,8917	3,8917
40	4,2027	4,2027
50	4,4655	4,4652
100	5,4195	5,4192
1000	10,7698	10,7697

## Az átlag-energia kiszámítása

Azon elektronok számát, amelyek impulzusa az effektív impulzustér-fogatban  $p$  és  $p + dp$  közé esik, a (6) összefüggés segítségével határozhatjuk meg. Ugyanis, ha az impulzuszömb sugarát  $dp$ -vel növeljük, a  $dV_{\text{eff}}$  effektív impulzustér-fogatváltozás a következő kapcsolatban van  $dN$  részecskeszám-változással:

$$V \cdot dV_{\text{eff}} = dN \cdot \frac{h^3}{2}. \quad (15)$$

$dV_{\text{eff}}$  értéke a (9) alapján:

$$dV_{\text{eff}} = \frac{4\pi}{3} dr^3 \left( 3r^2 - 9r + 5,7295 + \frac{1,9098}{r^2} \right) dr. \quad (16)$$

A (10) figyelembevételével a keresett elektronszámra a következőt nyerjük:

$$dN = \frac{\pi}{24} \left( 3r^2 - 9r + 5,7295 + \frac{1,9098}{r^2} \right) dr. \quad (17)$$

Az összenergiát a következő integrál szolgáltatja:

$$E = \int_{p_0}^{p_\mu} \frac{p^2}{2m} dN = \frac{d^2}{2m} \cdot \frac{\pi}{24} \int_{r_0}^{r_\mu} (3r^4 - 9r^3 + 5,7295r^2 + 1,9098) dr \quad (18)$$

$$= \frac{d^2}{2m} \cdot \frac{\pi}{24} \left( \frac{3}{5} r^5 - \frac{9}{4} r^4 + \frac{5,7295}{3} r^3 + 1,9098r - 2,3347 \right). \quad (19)$$

Behelyettesítve  $d$  (5) értékét, valamint az  $r = \sqrt[3]{\frac{24}{\pi}} x$  alapján a következőt nyerjük:

$$E = \frac{h^2}{8m} \cdot \frac{1}{V^{2/3}} \left( \frac{3}{5} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{2/3} x^5 - 1,107838x^4 + 0,47746x^3 + 0,123x - 0,076 \right). \quad (20)$$

Ebbe a képletbe kell behelyettesítenünk a (12) egyenlet numerikus megoldása útján nyert  $x$  értékeket,  $N$ -nel való osztás után nyerjük az átlagenergia értékeit. Az így nyert értékeket a III. táblázat *c.* oszlopában találjuk (num.).

Közelítő, approximációs képletet kaphatunk az átlagenergiára, ha a következő hányadost képezzük:

$$\bar{E} = \frac{E}{N} = \frac{h^2}{8m} \cdot \frac{1}{V^{2/3}} \frac{0,58183x^5 - 1,107838x^4 + 0,47746x^3 + \dots}{x^3 - 2,28485x^2 + 1,4771x - \dots} \quad (21)$$

$$= \frac{h^2}{8m} \frac{1}{V^{2/3}} \left\{ \frac{3}{5} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{2/3} (x^2 + 0,221556x + 0,124252 + \dots) \right\}. \quad (22)$$

( $N$  értékét a (12) egyenletből helyettesítettük). Behelyettesítve  $x$  approximációs kifejezését (13)-ból

$$E = \frac{h^2}{8m} \cdot \frac{1}{V^{2/3}} \left\{ \frac{3}{5} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{2/3} N^{2/3} + 1,1078 N^{1/3} + 0,725 \right\}. \quad (23)$$

A (23) alapján számított értékeket a III. táblázat *b* oszlopában láthatjuk (appr.). Az eredmények igen jól egyeznek a numerikusan nyert értékekkel.

III. TÁBLÁZAT

N	Fermi	Korrigált		Kvantum
	<i>a</i>	<i>b</i> appr.	<i>c</i> num.	<i>d</i>
1	0,58	2,41	2,61	3
10	2,69	5,80	5,82	6
20	4,29	8,02	8,03	8,10
30	5,62	9,78	9,80	9,93
40	6,80	11,32	11,33	11,40
50	7,90	12,70	12,72	12,80
60	8,92	13,98	13,99	14,10
70	9,88	15,17	15,18	15,17
80	10,80	16,30	16,31	16,37
90	11,68	17,37	17,38	17,46
100	12,53	18,40	18,41	18,50
1000	58,18	69,99	69,99	70,12

A táblázat áttekintéséből látható, hogy a korrigált energiaképlet igen jól megközelíti a kvantummechanikai értéket.

A korrigált képlet első tagja megegyezik az eredeti Fermi-féle képlettel, a tulajdonképpeni korrekciót tehát a következő tagok adják:

$$E_{\text{kor}} = \frac{h^2}{8m} \cdot \frac{1}{V^{2/3}} (1,1078 N^{1/3} + 0,725). \quad (24)$$

*Függelék.* Az effektív impulzustérfigat számítása. A  $p_\mu$  sugarú gömb  $\frac{4}{3} \pi p_\mu^3$  térfogatából le kell vonnunk három  $2d$  vastagságú gömbréteget a koordináta síkok mentén:

$$-6p_\mu^2 d + 2\pi d^3.$$

Ennél a levonásnál azonban kétszer vontuk le a gömbrétegek közös részeit, ez utóbbiak térfogatát tehát még hozzá kell adnunk. Két gömbréteg közös részének térfogatát olymódon nyerhetjük, ha a gömböt  $x = -d$   $x = +d$ ,  $y = -d$   $y = +d$  párhuzamos síkokkal metsszük. A közös rész térfogatát a következő integrál szolgáltatja:

$$I = 2 \int_{-d}^d \int_{-d}^d \sqrt{p_\mu^2 - x^2 - y^2} dx dy.$$

$$I = \frac{8}{3} \left\{ d^2 \sqrt{p_\mu^2 - 2d^2} + d(3p_\mu^2 - d^2) \arcsin \frac{d}{\sqrt{p_\mu^2 - d^2}} - p_\mu^3 \arcsin \frac{d}{p_\mu} - d^2 \right\}.$$

Nagyobb  $p_\mu$ -ekre (a négyzetgyök és az arc sinus sorba fejtésével) következő képletet nyerjük:

$$8d^2 p_\mu - \frac{8d^4}{3p_\mu} + \dots$$

Ennek az értéknek a háromszorosát kell vennünk:

$$24d^2 p_\mu - 8 \frac{d^4}{p_\mu}$$

A gömbrétegek levonásánál háromszor levontuk, a közös részeknél háromszor hozzáadtuk a legbelső  $8d^3$  térfogatú kockát. Az effektív térfogat kiszámításához tehát még ezt a  $8d^3$  értéket le kell vonnunk:

Az effektív impulzustérfogat értéke tehát:

$$V_{\text{eff}} = \frac{4}{3} \pi p_\mu^3 - 6p_\mu^2 d + 24p_\mu d^2 - 8 \frac{d^4}{p_\mu} + (2\pi - 8)d^3.$$

### Összefoglalás

A Fermi-féle kinetikus energiaképletet korigáltuk annak a feltevésnek alapján, hogy egyik impulzuskomponens értéke sem lehet zérus (kvantummechanikai dobozmodell). A korigált képlet igen jó egyezést mutat a kvantummechanikai dobozmodell alapján számított kinetikus energiaértékkel.

Hálás köszönetemet fejezem ki *Gombás Pál* akadémikus úrnak, aki értékes megjegyzéseivel és tanácsaival a dolgozat befejezését nagy mértékben elősegítette.

*Szegedi Tudományegyetem  
Elméleti Fizikai Intézete.*

### IRODALOM

- <sup>1</sup> *Gombás P.* Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen.