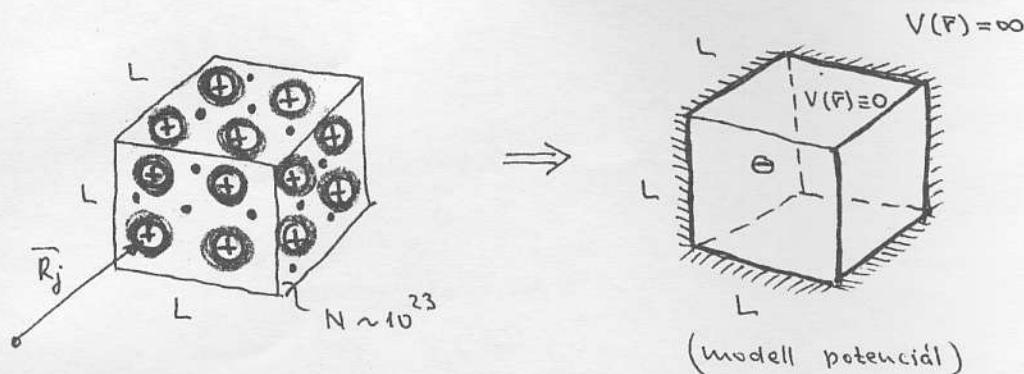


2. SZILÁRDTESTFIZIKA

2.1. A fémek szabadelektron elmélete

2.1.1. A SOMMERFELD féle fémmodell



N elektrontól álló rendszer $\rightarrow$ egy-elektron közelítés $\rightarrow$
 egy-elektron állapotok $\rightarrow$
 egy-elektron Hamilton operátor

$$\hat{H}_i \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \underbrace{\sum_{j=1}^N V_c(\vec{r}_i, \vec{r}_j)}_{\text{az iontörzsek hatása}} + \underbrace{\sum_{j \neq i}^N U_j(\vec{r}_i)}_{\text{a többi elektron hatása}} \quad (i=1,2,3,\dots,N)$$

$V(\vec{r}_i)$ modell potenciál (minden elektrorra ugyanaz) $\rightarrow$ potenciál doboz (SOMMERFELD)

(csak egy egyenlet van:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(F) \right] \psi = \varepsilon \psi \quad (+ \text{PAULI elv})$$

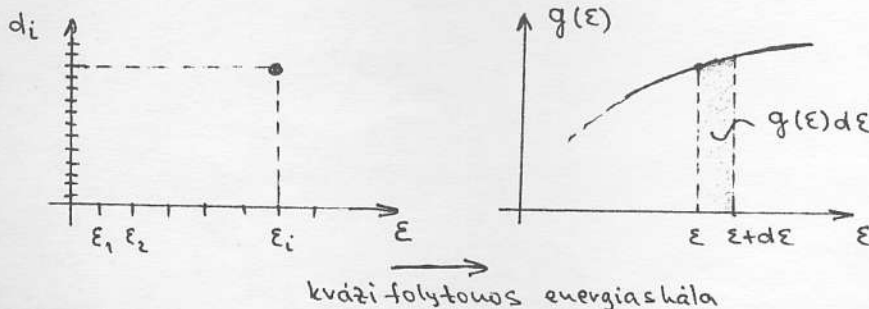
A már megismert megoldások:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \cdot \sin \frac{n_y \pi y}{L} \cdot \sin \frac{n_z \pi z}{L}$$

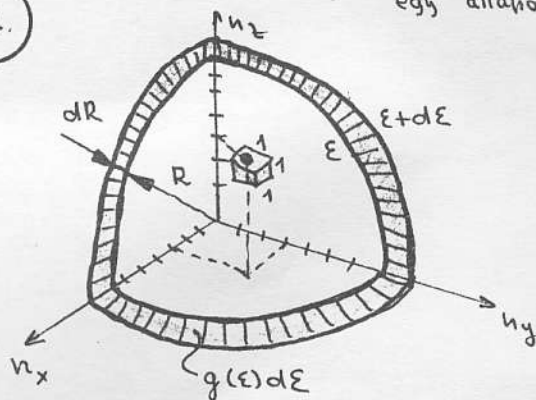
$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$(n_x, n_y, n_z) = 1, 2, 3, 4, \dots$$

(degeneráció)



2.

egy állapot $\rightarrow (n_x, n_y, n_z)$ (pálya állapot!)

$$\varepsilon_i = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{2m}{\hbar^2 \pi^2} L^2 \cdot \varepsilon \equiv R^2$$

$$\mathcal{N}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{8} 4\pi R^2 dR$$

$$\left. \begin{aligned} R &= \text{all.} \cdot L \cdot \sqrt{\varepsilon} \\ dR &= \text{all.} \cdot \frac{L}{\sqrt{\varepsilon}} d\varepsilon \end{aligned} \right\} \rightarrow R^2 dR = \text{all.} \cdot L^3 \cdot \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon$$

$$\mathcal{N}(\varepsilon) d\varepsilon = A \cdot L^3 \cdot \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon$$

pálya állapot sűrűség

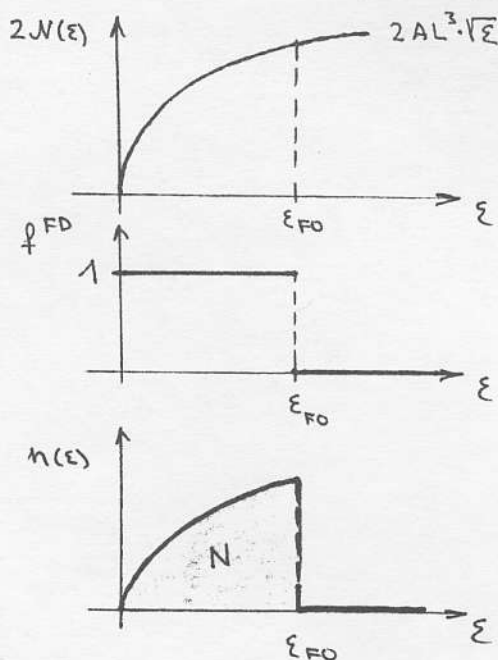
$$\mathcal{N}(\varepsilon) = AL^3 \cdot \sqrt{\varepsilon}$$

 $d_i \rightarrow$ spin-pálya állapot sűrűség

$$g(\varepsilon) = 2 \cdot \mathcal{N}(\varepsilon)$$

Az állapotok betöltése: FERMI-DIRAC statisztika

$$f^{FD} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} + 1}$$

 $\varepsilon_F(T)$ meghatározható
($N = \text{állandó}$ feltételből)Az elektrongáz alapállapotban van ha $T=0$.

$$\begin{aligned} N &= \int_0^\infty n(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\infty 2\mathcal{N}(\varepsilon) f^{FD}(\varepsilon, 0) d\varepsilon = \\ &= \int_0^{\varepsilon_{F0}} 2\mathcal{N}(\varepsilon) d\varepsilon = 2AL^3 \int_0^{\varepsilon_{F0}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = \frac{2}{3} \varepsilon_{F0}^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

$$N = \frac{4}{3} AL^3 \varepsilon_{F0}^{\frac{3}{2}}$$

$$\varepsilon_{F0} = \text{all.} \left(\frac{N}{L^3} \right)^{\frac{2}{3}}$$

a fémekben lévő (vezetési)
szabad elektronok
sűrűsége.

3

Az elektronok átlagos energiája:

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{E}{N} = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} \epsilon u(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{N} \int_0^{\epsilon_{F0}} 2 \epsilon \mathcal{N}(\epsilon) d\epsilon = \frac{2AL^3}{N} \underbrace{\int_0^{\epsilon_{F0}} \epsilon \sqrt{\epsilon} d\epsilon}_{\frac{2}{5} \epsilon_{F0}^{\frac{5}{2}}}$$

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{4}{5} \frac{A \cdot L^3}{N} \epsilon_{F0}^{\frac{5}{2}} = \frac{3}{5} \epsilon_{F0}$$

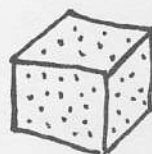
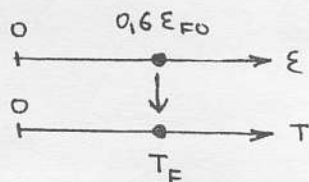
$$\uparrow$$

$$N = \frac{4}{3} AL^3 \epsilon_{F0}^{\frac{3}{2}}$$

$$\langle \epsilon \rangle = 0,6 \epsilon_{F0}$$

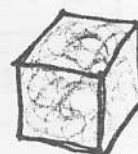
Az alapállapotban lévő (0 Kelvin fohos) elektrongáz átlagos energiája.

Nagyságrendi becsléseknél hasznos fogalom : A FERMI hőmérséklet



$T = T_F$
ideális gáz

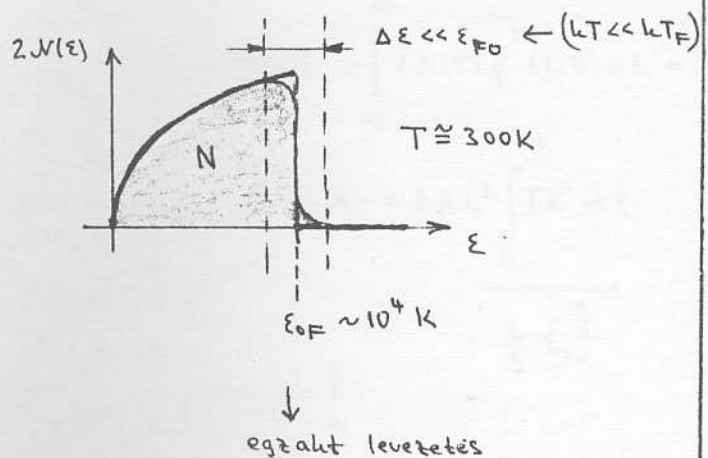
$$\langle \epsilon \rangle_g = \frac{3}{2} kT_F$$



$T = 0 \text{ K}$
elektron gáz

$$\langle \epsilon \rangle_e = 0,6 \epsilon_{F0}$$

$$\langle \epsilon \rangle_g = \langle \epsilon \rangle_e \rightarrow T_F \approx 10^4 \text{ K}$$

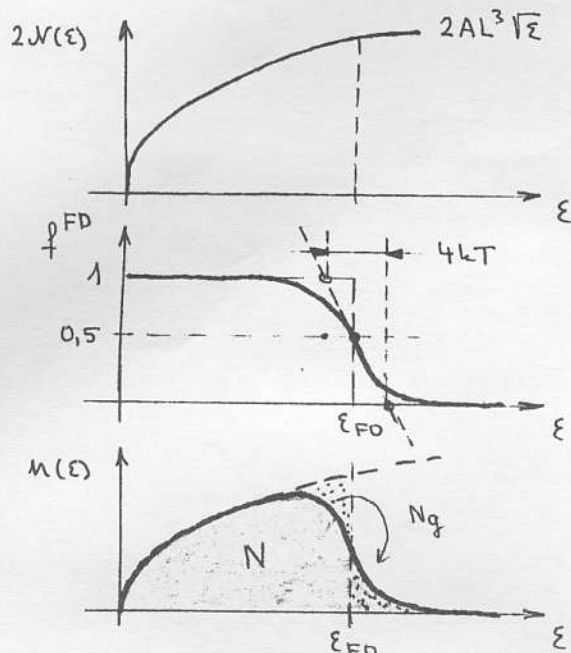


4

2.1.2. A szabad-elektron modell alkalmazásai

2.1.2.1. A szabad elektrongáz fajhője

Elektrongáz $T > \phi_K$ hőmérsékleten.



$$\varepsilon_F(T) = \varepsilon_{F0} \left[1 - \underbrace{\frac{\pi^2}{15} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2}_{\ll 1} \right] + \dots$$



$$\varepsilon_F(T) \approx \varepsilon_{F0}$$

$$\left[\frac{d}{d\varepsilon} f^{\text{FD}} \right]_{\varepsilon_F} = \left[\frac{-1}{\left(e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} + 1 \right)^2} \cdot e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} \cdot \frac{1}{kT} \right]_{\varepsilon_F} = -\frac{1}{4kT}$$

$$N_g \approx N \frac{2kT}{\varepsilon_{F0}}$$

$$\rightarrow \boxed{N_g \approx N \frac{T}{T_F}}$$

a gerjesztődött elektronok száma T hőmérsékleten.

Az elektrongáz energiája T hőmérsékleten tehát

$$\boxed{E \approx E_0 + N_g \cdot kT}$$

Az elektrongáz fajhője (moláris hőkapacitás)

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

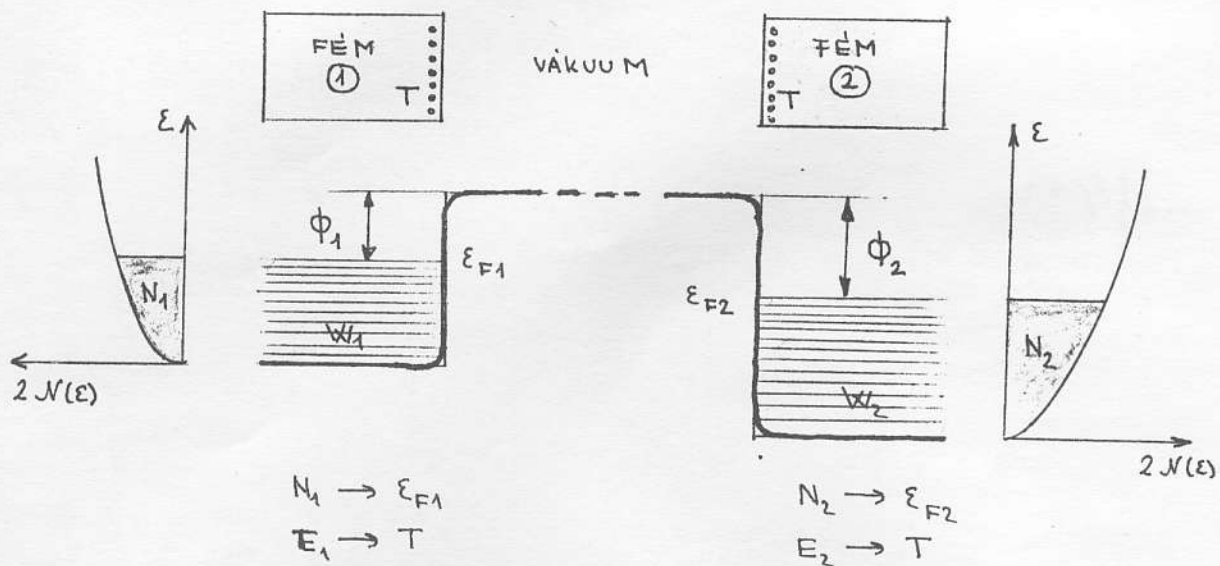
$$\text{ahol } E \approx E_0 + \underbrace{Nk}_{R} \frac{T^2}{T_F}$$

$$C_{ve} \approx 2R \frac{T}{T_F} \ll R$$

Tehát szilárd testek fajhőjének számításakor $T \approx 300 \text{ K}$ -on

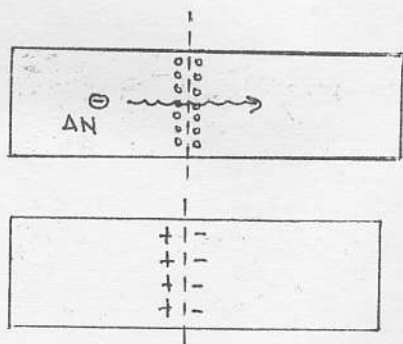
$$C_v = \underbrace{C_{vi}}_{\text{iontörzsek rezgéséből adódó}} + C_{ve} \approx 3R + \underbrace{C_{ve}}_{\ll R} \approx 3R$$

Dulong-Petit törvény



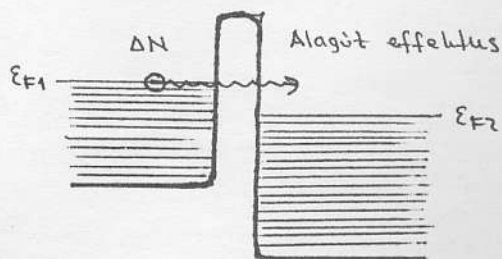
$$W = W_1 \cdot W_2$$

$$W = \max$$



$$E = E_1 + E_2 \rightarrow T$$

$$N = N_1 + N_2 \rightarrow \varepsilon_F$$



Ha $\Delta N \ll N_1, N_2$

akkor

$\varepsilon_{F1}, \varepsilon_{F2}$ helyzete
állandónak tekinthető
(az adott fémhez
képest)

$N = \text{állandó}$

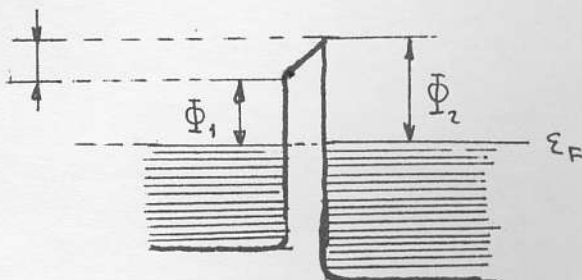
ε_F a RENDSZER
FERMI szintje

$$\varepsilon_{F1} = \varepsilon_{F2} = \varepsilon_F$$

A Fermi szintek
kiegyenlítődnek!

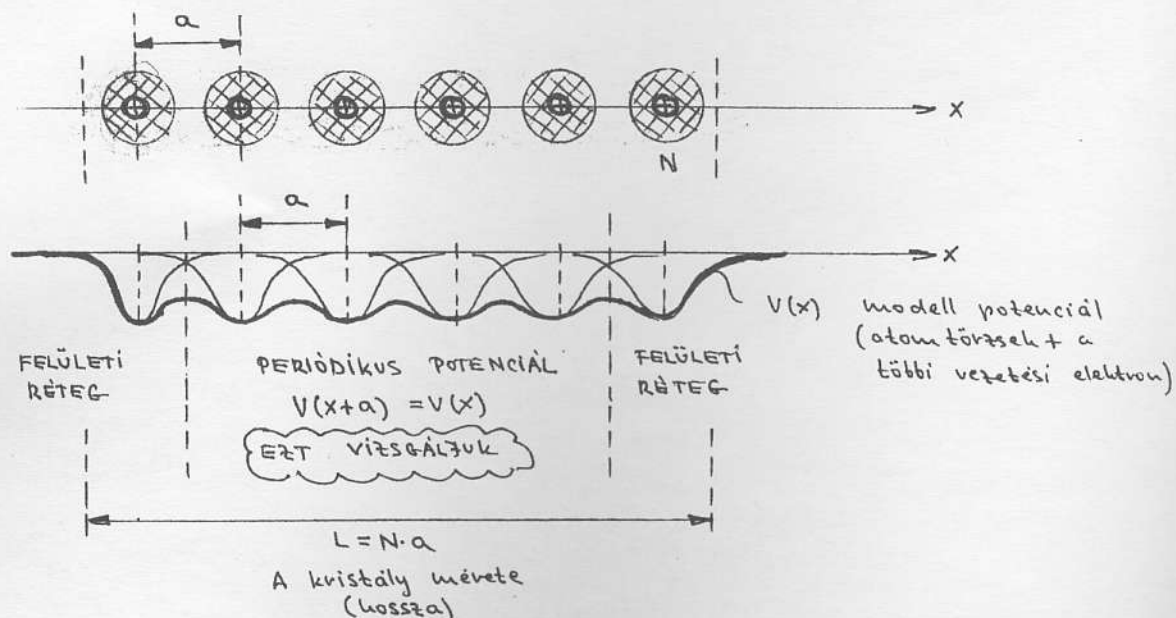
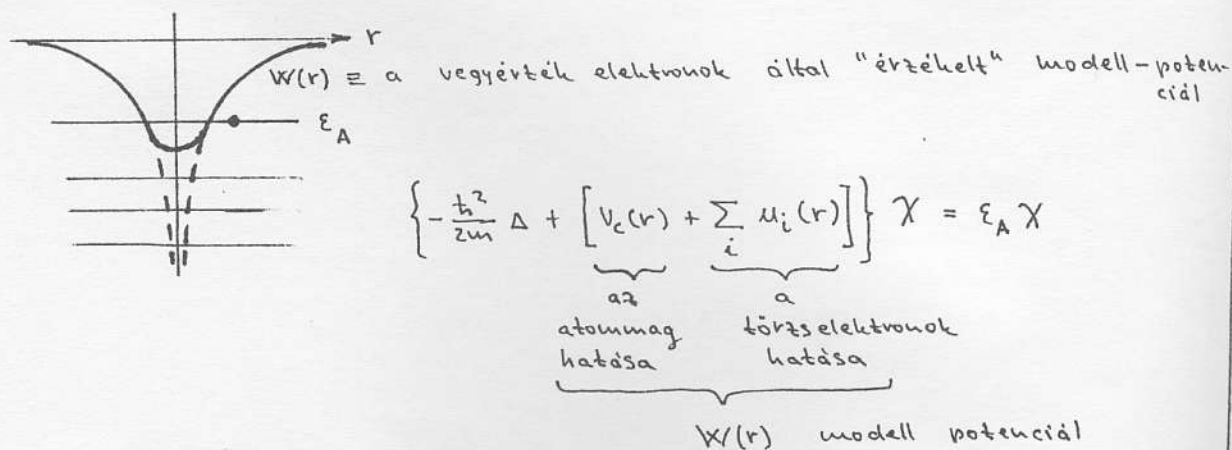
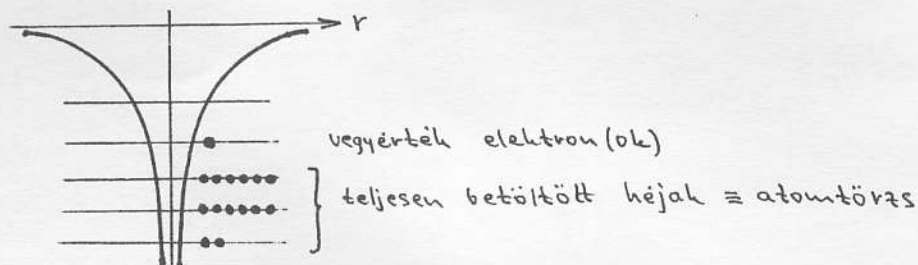
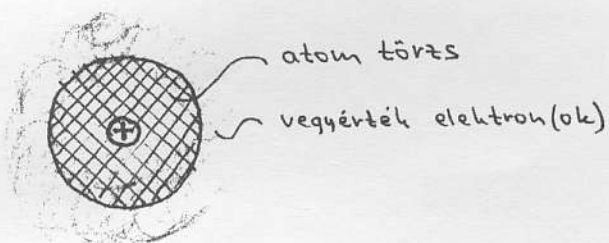
$$W = \max$$

$$e\Delta u \equiv \Phi_2 - \Phi_1$$



2.2. Szilárdtestek energiasáv elmélete

2.2.1. A periódikus potenciál tér egy-dimenziós modellje

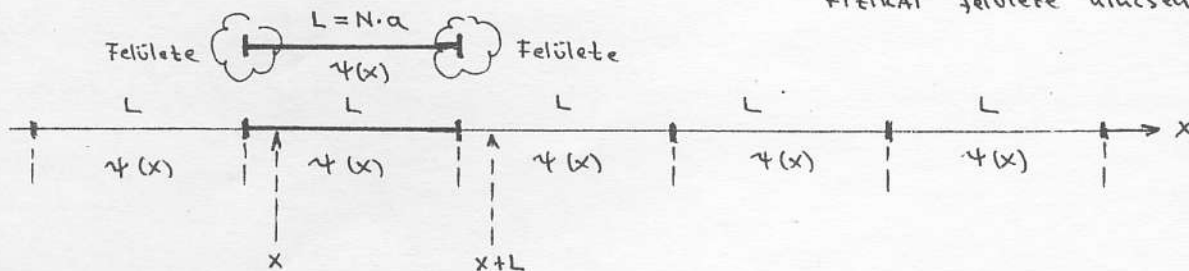


7

Véges hosszúságú kristály (Felülete van!)
($L = Na$)

↓ MODELALKOTÁS

Véges hosszúságú periódikus potenciál : geometriai határa van
Fizikai felülete nincs.



A végtelen hosszú kristály bármelyik L hosszúságú darabja modellezi az L hosszúságú reális kristályt.

— BORN-KÁRMÁN periódikus határfeltétele:

$$\psi(x+L) = \psi(x)$$

— Periódikus potenciál (TRANSLÁCIÓS SZIMMETRIA) hatása a $\psi(x)$ hullámfüggvényre:

$$V(x+a) = V(x) \rightarrow \underbrace{|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2}$$

↓

$$\psi(x+a) = c \cdot \psi(x)$$

$$|c| = 1$$

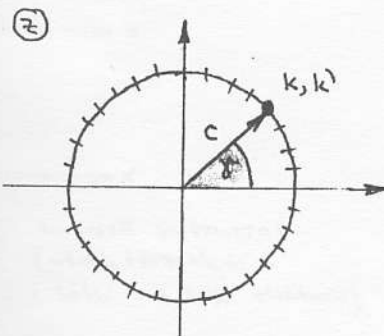
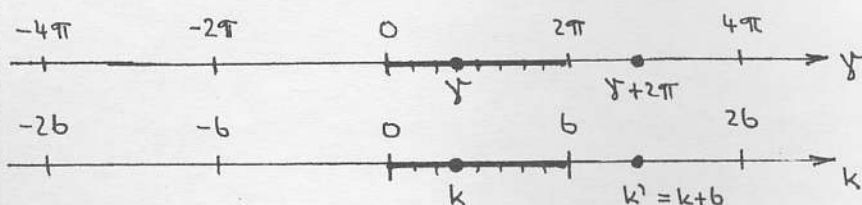
A "c" állandó meghatározható:

$$\psi(x+L) = \psi(x+N \cdot a) = \underbrace{c^N} \cdot \psi(x) = \psi(x)$$

$$c^N = 1 \rightarrow c = \sqrt[N]{1} \rightarrow$$

$$c = e^{j \frac{2\pi}{N} n}$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots, N$$



$$\gamma \equiv \frac{2\pi}{N} n = \underbrace{\frac{2\pi}{N \cdot a} n \cdot a}_{k} \equiv ka \rightarrow \gamma + 2\pi = ka + 2\pi = a \left(\underbrace{k + \frac{2\pi}{a}}_{k'} \right) \equiv a \cdot k'$$

$$k \equiv \underbrace{\frac{2\pi}{a} n}_{\equiv b} = b \frac{n}{N}$$

$$(k' = k + b)$$

8

Összefoglalva tehát:

$$\psi(x+a) = e^{jka} \cdot \psi(x) \quad (\text{BLOCH tétel})$$

$$k \equiv \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, N$$

$$a \cdot b = 2\pi \rightarrow b \equiv \frac{2\pi}{a} \quad (\text{neve: reciprok rácspon})$$

Elektron állapotok $\rightarrow$ BLOCH tételt kielégítő állapotfüggvények $\rightarrow$
 $\downarrow$
 BLOCH állapot(ok)

$$\psi(x) = u(x) \cdot e^{jkx} \quad (\text{amplitúdó modulált síkhullám})$$

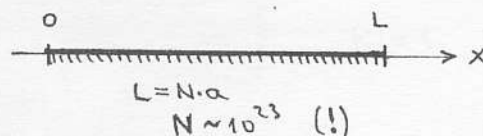
$$u(x+a) = u(x)$$

Bizonyítás: $\psi(x+a) = u(x+a) e^{jk(x+a)} = \underbrace{u(x) \cdot e^{jkx}}_{\psi(x)} \cdot e^{jka}$

Az elektron állapotok meghatározása:

$$\hat{H}\psi = \varepsilon \psi \quad (0 \leq x \leq L)$$

$\uparrow$
 $V(x+a) = V(x)$ periódikus potenciál



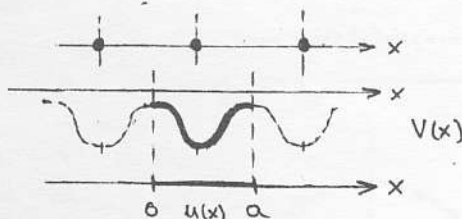
$\psi(x)$ értéket több mint N helyen (!) kell kiszámítani.

Ez NEM MEGOLDHATÓ!

A BLOCH állapotok meghatározása:

$$\psi(x) = \underbrace{u(x)}_{?} \cdot e^{jkx} \quad (0 \leq x \leq a)$$

$$\psi'' = (u'' + 2jku' - k^2 u) \cdot e^{jkx}$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V \cdot \psi = \varepsilon \psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (u'' + 2jku' - k^2 u) + V \cdot u = \varepsilon \cdot u$$

$$\frac{1}{2m} (\hat{p} + \hbar k)^2 \cdot u \quad (\text{Feladat: biz})$$

azaz

$$\left[\frac{(\hat{p} + \hbar k)^2}{2m} + V \right] u = \varepsilon u \quad 0 \leq x \leq a$$

$$k = \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N} \quad n = 1, 2, 3, \dots, N$$

Csak $x \in [0, a]$ -ban
 kell megoldani
 DE N db k esetén (!)



9

Tehát adott egy energia-sajátérték probléma:

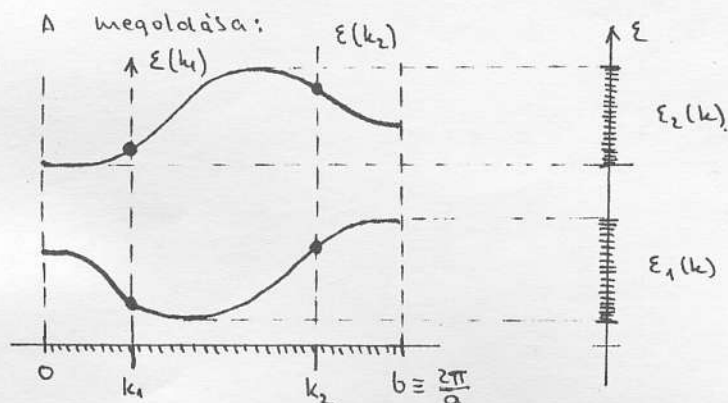
$$\hat{H}(k) \cdot u = \varepsilon \cdot u$$

$$k = k_1, k_2, k_3, \dots, k_N$$

$$(0 \leq x \leq a)$$

$$(k_n \equiv \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N})$$

A megoldása:



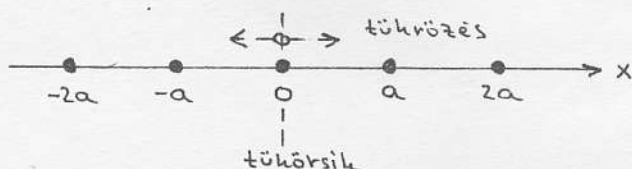
$$\rightarrow \varepsilon_v(k)$$

$$v=1, 2, 3, \dots$$

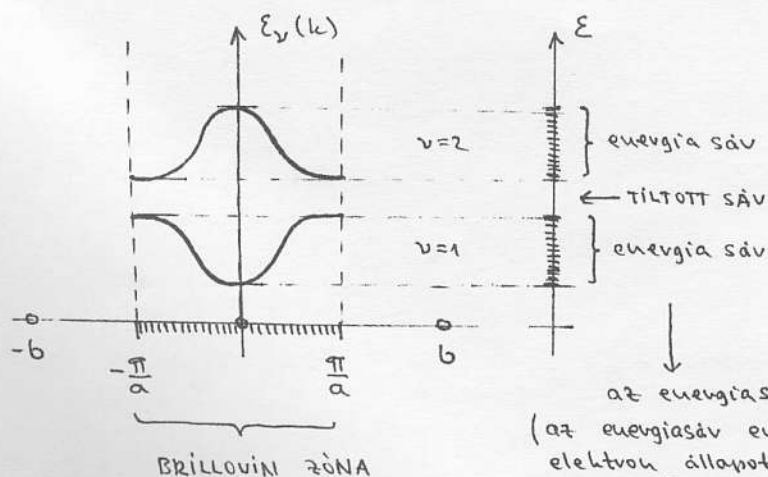
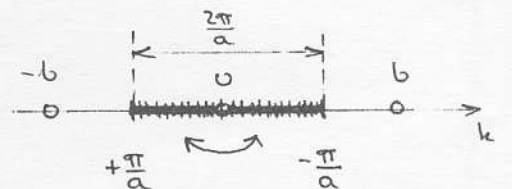
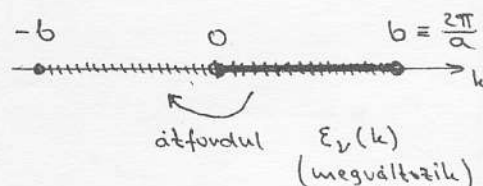
(sávindex)

A kvantált energiaszintek jól elkülöníthető sávokban helyezkednek el. Minden sávban N db energiaszint van ($N \sim 10^{23} \gg 1$).

(kvázi) folytonos

Az u_n "TÜKRÖZÉSI" szimmetria következménye

A pontváros önmagába transzformálódik
azaz $V(x) \rightarrow V(x)$



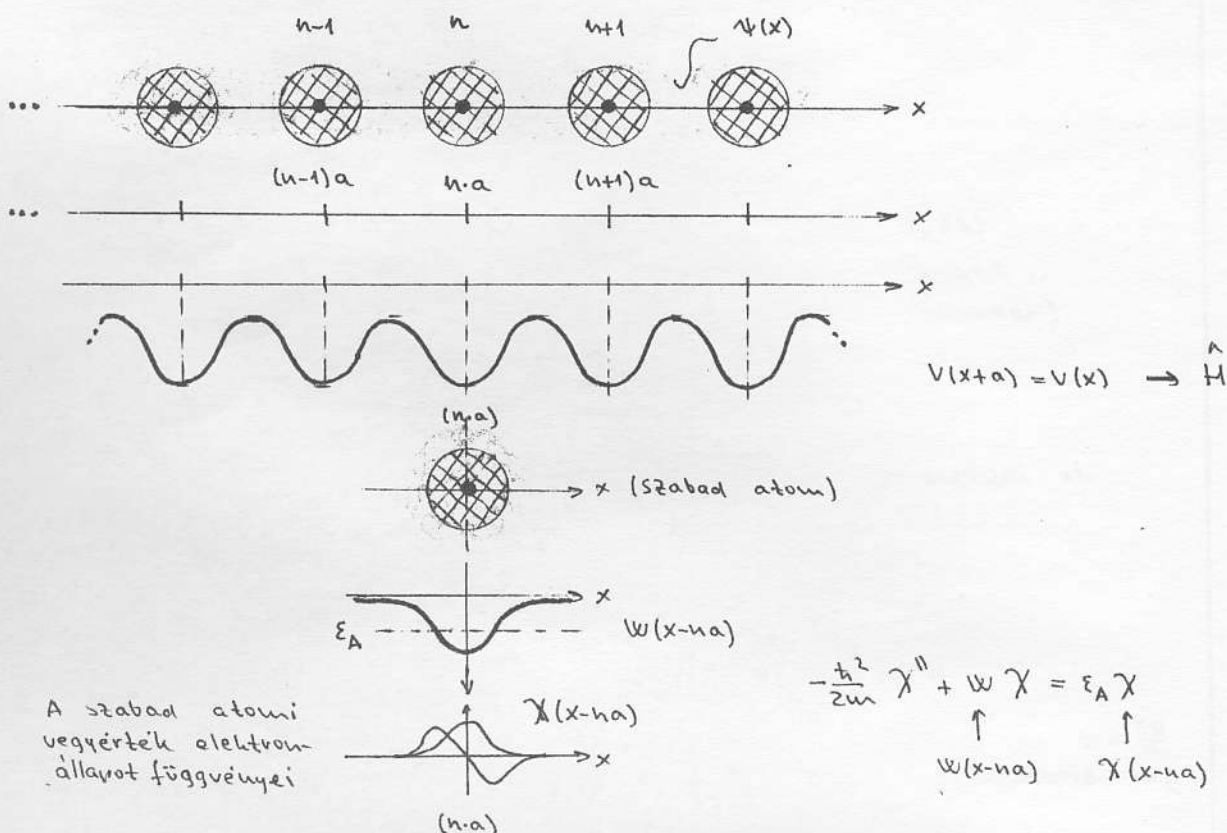
tulajdonsága:

- különböző Bloch állapotokat meghatározó k pontokat tartalmaz
- A pontváros tükrözésekor nem változik ($\rightarrow$ általánosítás 3 dim)

az energiasávok betöltése
(az energiasáv energiaszintjeihez tartozó
elektron állapotok betöltése)

PAULI elv $\rightarrow$ FERMI-DIRAC
statistika

2.2.2. Az energiasávok és az atomi energiaszintek kapcsolata



A szabad atomi
vegyérték elektron-
állapot függvényei

A N db atomból álló rendszerben a kötést létrehozó delokalizált elektronállapotokat kell meghatározni $\rightarrow$ egy elektron közelítés.

LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) módszer.

Megoldandó: $\hat{H}\psi = \epsilon\psi$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = \epsilon\psi$$

közelítő megoldás (LCAO) $\psi \approx \tilde{\psi} \equiv A \sum_n e^{jkna} \chi(x-na)$

$\tilde{\psi}$ Bloch állapot kell, hogy legyen; azaz

$$\tilde{\psi} = A \sum_n e^{jkna} \chi(x-na) = A \cdot e^{jkx} \cdot \underbrace{\sum_n e^{-jk(x-na)} \chi(x-na)}_{\equiv u(x)}$$

$\downarrow$
Bloch állapot, ha $u(x+a) = u(x)$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned}
 u(x+a) &= \sum_n e^{-jk([x+a]-na)} \chi([x+a]-na) = \\
 &= \sum_n e^{-jk(x-\underbrace{[n-1]}_{[n-1]}a)} \chi(x-\underbrace{[n-1]}_{[n-1]}a) = u(x)
 \end{aligned}$$

A normalizációs feltétel (I. Axióma)

$$\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = |A|^2 \sum_{n'} \sum_n \underbrace{e^{-jk(x-na-x+n'a)}}_{e^{-jk(n'-n)a}} \langle \chi(x-n'a) | \chi(x+na) \rangle = 1$$

A lehetséges energiaszintek tehát:

$$\hat{H} \psi = \varepsilon \psi \quad \longrightarrow \quad \varepsilon = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle \quad (\psi\text{-t kellenie tudni})$$

$$\text{közelítő megoldás} \quad \varepsilon \approx \underbrace{\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle}_{\downarrow} \quad (\text{IV. axióma})$$

$$\hat{H} \tilde{\psi} = A \sum_n e^{jkna} \hat{H} \chi(x-na) =$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - \underbrace{W(x-na) + W(x-na)}_{\equiv V_n(x)}}_{\equiv V_n(x)}$$

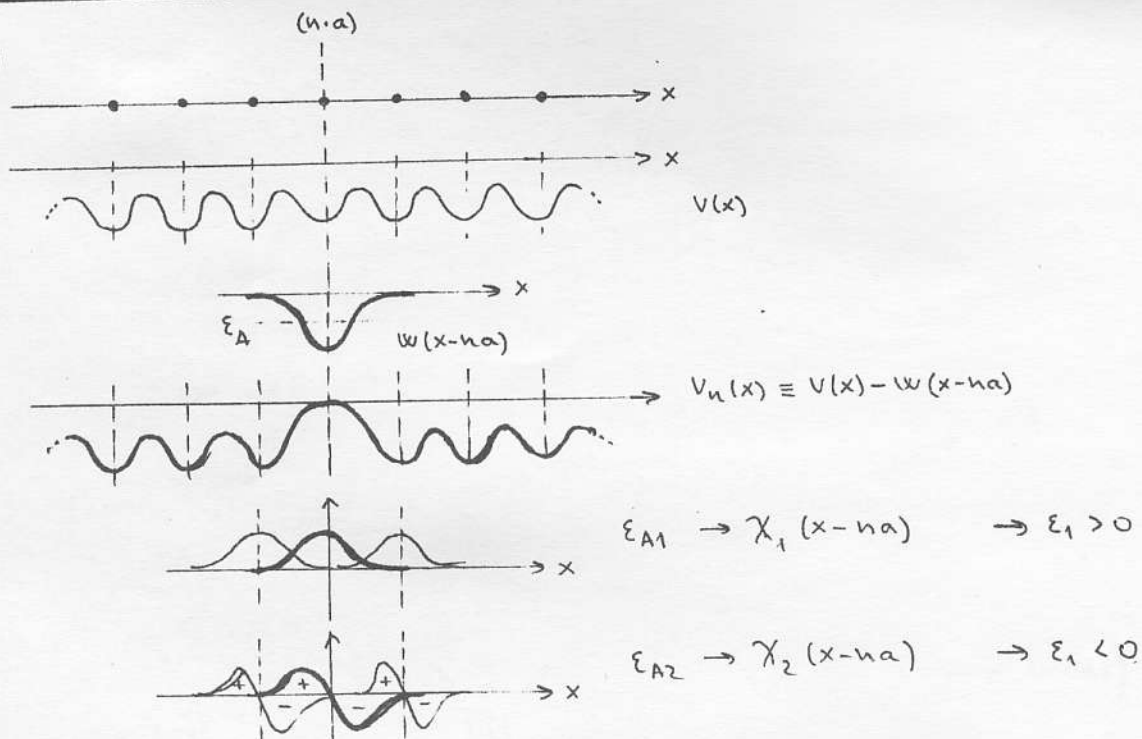
$$= A \sum_n e^{jkna} \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + W(x-na) \right] \chi(x-na)}_{\varepsilon_A \cdot \chi(x-na)} + A \sum_n e^{jkna} V_n(x) \chi(x-na) =$$

$$= \varepsilon_A \cdot \tilde{\psi} + A \sum_n e^{jkna} V_n(x) \chi(x-na)$$

Tehát:

$$\varepsilon \approx \langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle = \varepsilon_A \underbrace{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle}_1 + |A|^2 \sum_{n'} \sum_n e^{jk(n-n')a} \underbrace{\langle \chi(x-n'a) | V_n(x) | \chi(x-na) \rangle}_{\substack{\text{ez a skalár szorzat} \\ \text{csak } (n-n')\text{-től} \\ \text{függ.}}}$$

↓
egyszerűsítő feltevések

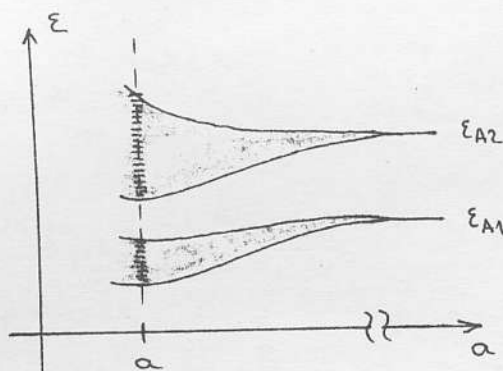


$$\langle \chi(x-na) | V_n(x) | \chi(x-na) \rangle = \begin{cases} \epsilon_1 & \text{ha } (n-n') = \pm 1 \\ \epsilon_0 & \text{ha } (n-n') = 0 \\ \emptyset & \text{egyébként} \end{cases}$$

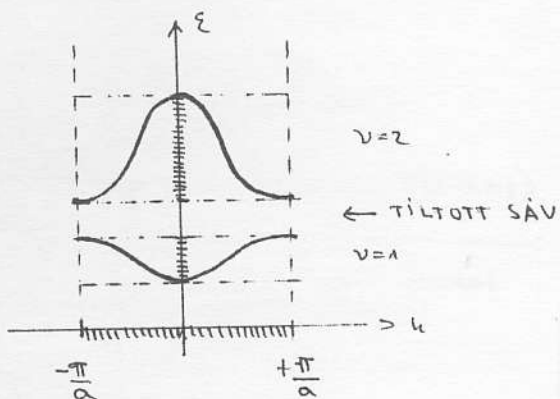
Tehát

$$\epsilon \approx \epsilon_A + N \cdot \epsilon_0 + N \cdot \epsilon_1 (e^{jka} + e^{-jka}) = \epsilon_A + \underbrace{N \epsilon_0}_{\equiv E_0} + \underbrace{2N \epsilon_1}_{\equiv E_1} \cos ka$$

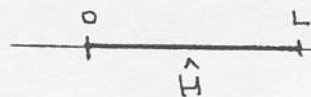
$$\boxed{\epsilon = \epsilon_A + E_0 + E_1 \cos ka} \quad \left(\lim_{a \rightarrow \infty} E_0 = 0 \quad \lim_{a \rightarrow \infty} E_1 = 0 \right)$$



↓
átalakosítás (3 dim)



2.2.3. Az energiasávok és a szabad elektronok kapcsolata



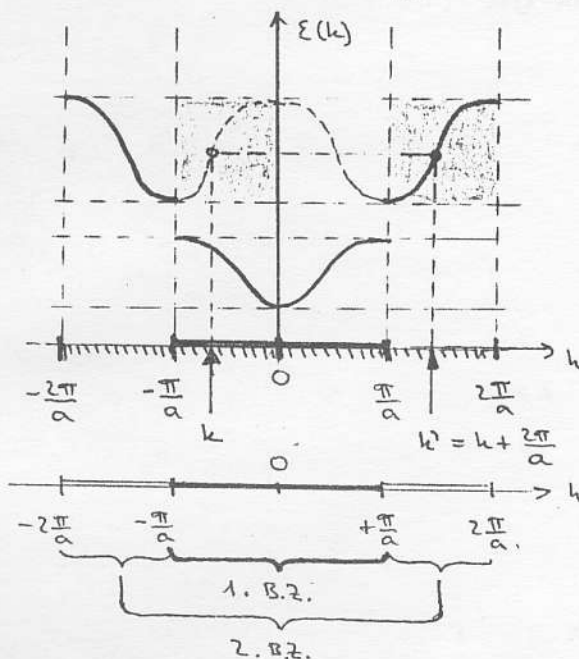
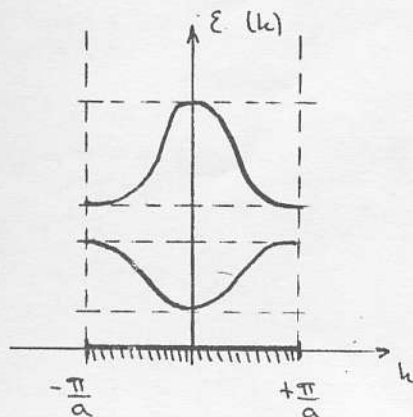
periódikus potenciál : $V(x+a) = V(x)$

Bloch állapotok : $\psi(x) = u(x) \cdot e^{j k x}$

az energia mintek : $\varepsilon(k)$

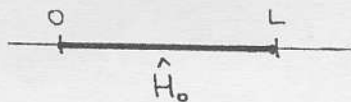
BRILLOVIN zóna

$$k' = k + \frac{2\pi}{a} \rightarrow \psi_{k'} \equiv \psi_k$$



A (kiterjesztett)
Brillouin zónák
(1. B.Z. $\equiv$ redukált B.Z.)

Az ÜRES-RÁCS modell (szabad elektronok)



állandó potenciál
síkhullám

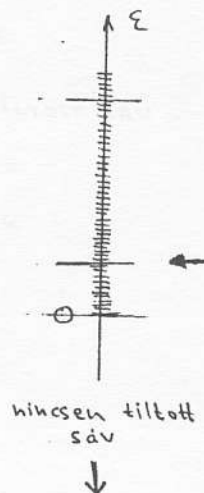
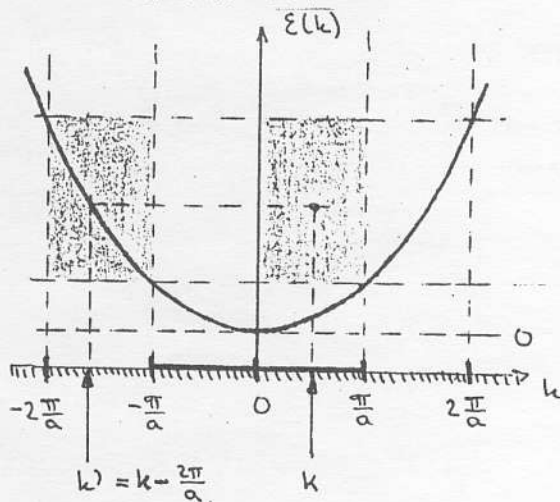
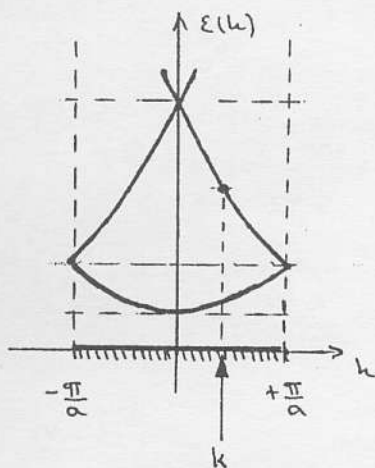
$$V(x) \equiv \varphi \quad [V(x+a) = V(x)]$$

$$\psi(x) = u_0 e^{j k x} \quad (u_0 = \text{áll.})$$

az energia mintek

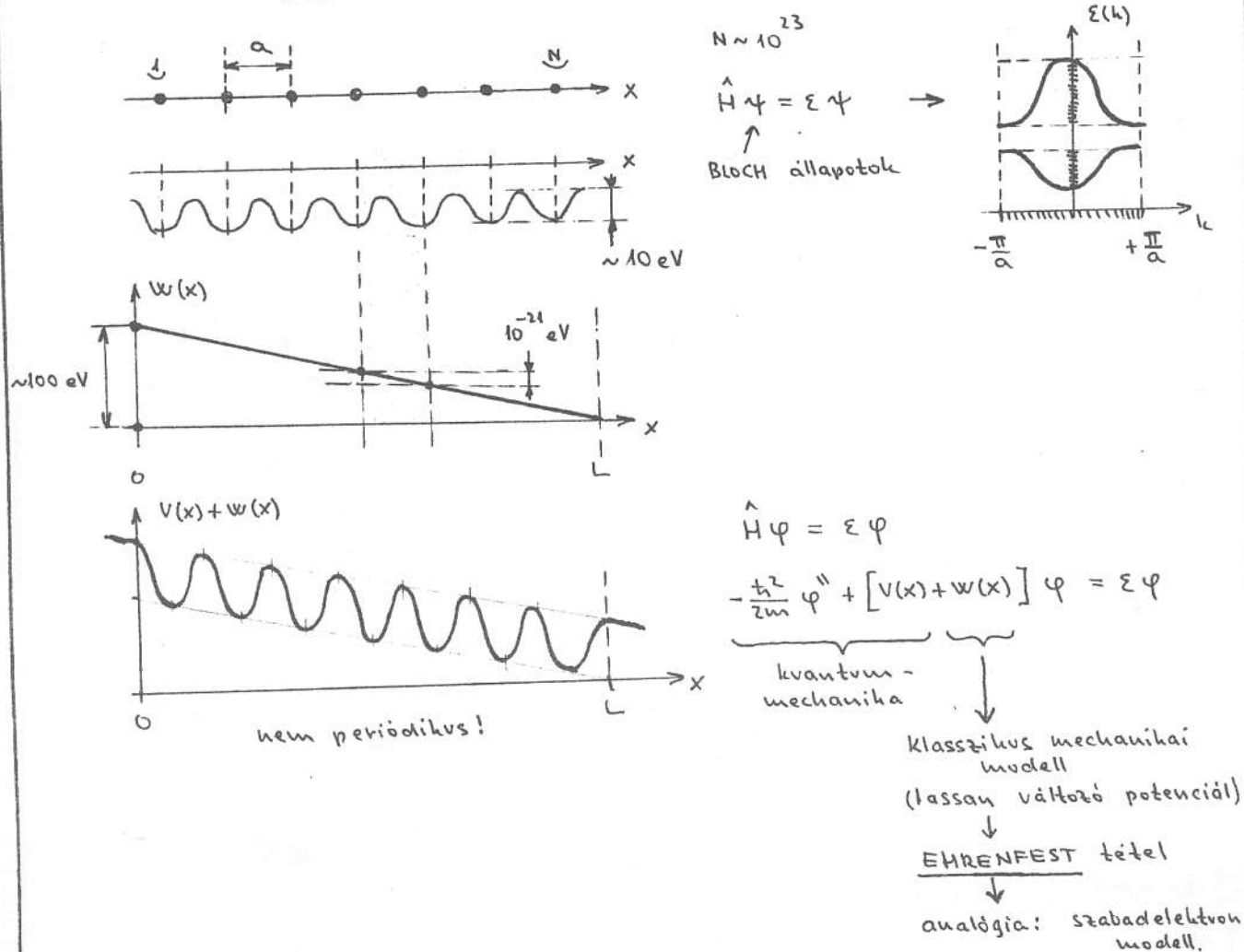
$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

BRILLOVIN zóna



2.3. Az "effektív tömeg" közelítés

2.3.1. Az effektív tömeg fogalma



Példa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + w(x)\psi = \varepsilon\psi$$

kvantum-mechanika

EHRENFEST

$$\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E_k\psi$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

← (szabadelektron)

klasszikus mechanika

$$\frac{dE_k}{dt} = F \cdot v$$

EHRENFEST

$$\frac{d}{dt} \langle E_k \rangle = \left[-\frac{dw}{dx} \right]_{\langle x \rangle} \cdot \frac{1}{m} \langle p \rangle$$

(1.2.6.2.)
Feladat

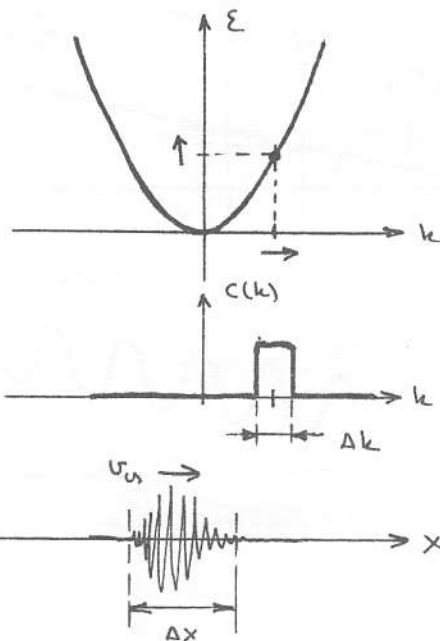
Szabadelektron állapotok

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\hat{H} \psi = \varepsilon \psi$$

$$\psi = A \cdot e^{jkx} \cdot e^{-j \frac{\varepsilon}{\hbar} t}$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \equiv \hbar \omega(k)$$



$$\Delta x \cdot \Delta k = \pi \rightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\Delta k}$$

BLOCH állapotok

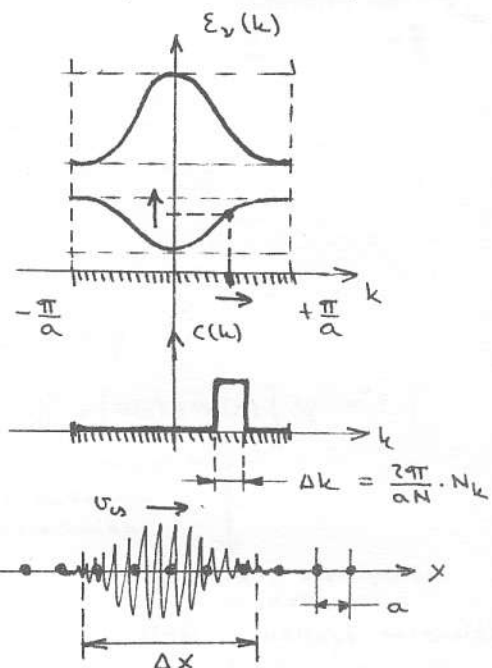
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

$$V(x+a) = V(x)$$

$$\hat{H} \psi = \varepsilon \psi$$

$$\psi = u(x) e^{jkx} \cdot e^{-j \frac{\varepsilon}{\hbar} t}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_v(k) \equiv \hbar \omega(k)$$



$$\Delta x \cdot \Delta k = \pi \rightarrow \Delta x = \frac{\pi}{\Delta k} = \frac{a}{2} \frac{N}{N_k}$$

"BLOCH csomag" : $a \ll \Delta x \ll L$

EHRENFEST tétel

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = F \cdot v_g \quad \left(F = -\frac{d\varepsilon}{dx}, \quad v_g \equiv \frac{d\varepsilon}{dk} \right)$$

$$\frac{d\varepsilon}{dk} \cdot \dot{k} = F \cdot \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$$

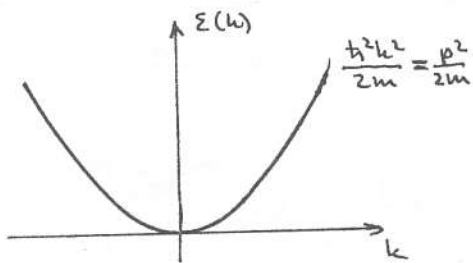
$$F = \hbar \cdot \dot{k}$$

a csoportgyorsulás:

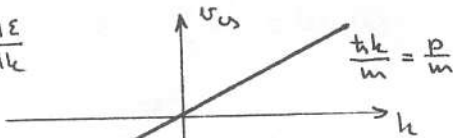
$$a_g \equiv \frac{d}{dt} v_g = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \cdot \dot{k} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \cdot \underbrace{\hbar \dot{k}}_F \equiv \frac{1}{m^*} \cdot F$$

az effektív tömeg:

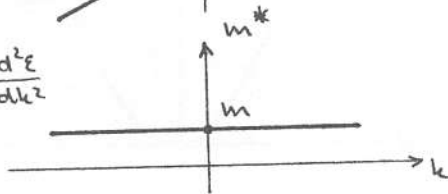
$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2}$$



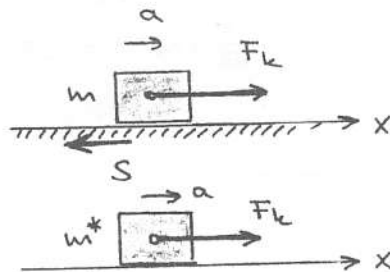
$$v_{cs} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$$



$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2}$$



Szemléltető példa:



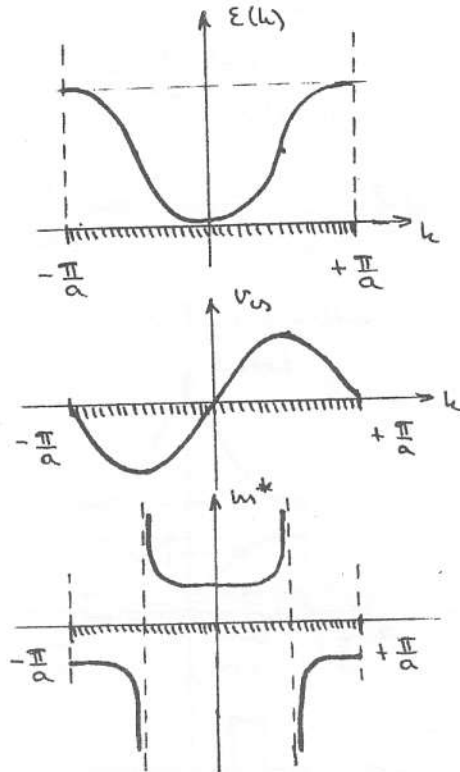
$$ma = F_k - S$$

$$ma + S = F_k$$

$$\equiv m^* a$$

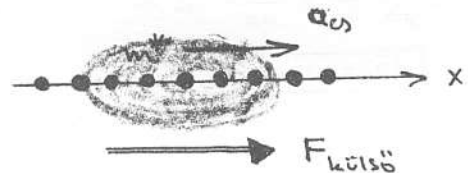
m^* tartalmazza az S erő hatását, mert az a gyorsulást csak az F_k erő hatásának tulajdonítottuk.

analógia

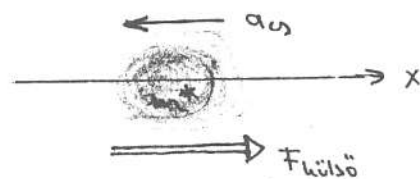


$$m^* a_{cs} = - \frac{dW}{dx} \equiv F_{\text{külső}}$$

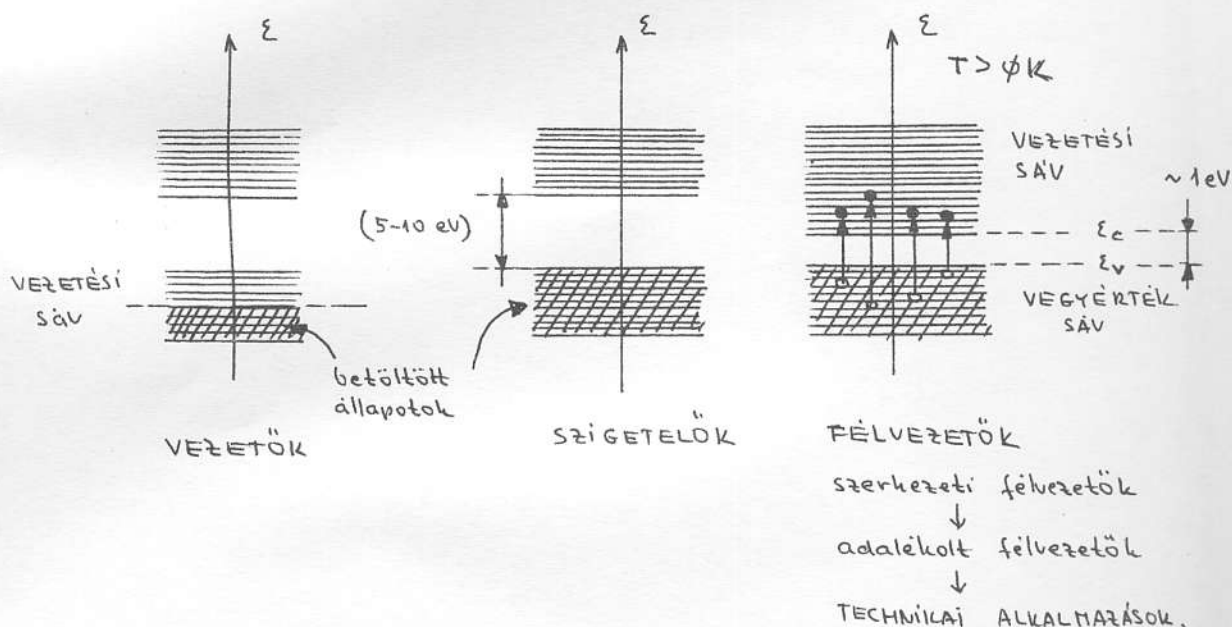
↑
az $\varepsilon(k)$ -n keresztül benne van a $V(x)$ potenciál hatása azaz az iontörzsekkel (kristállyal) való kölcsönhatás.



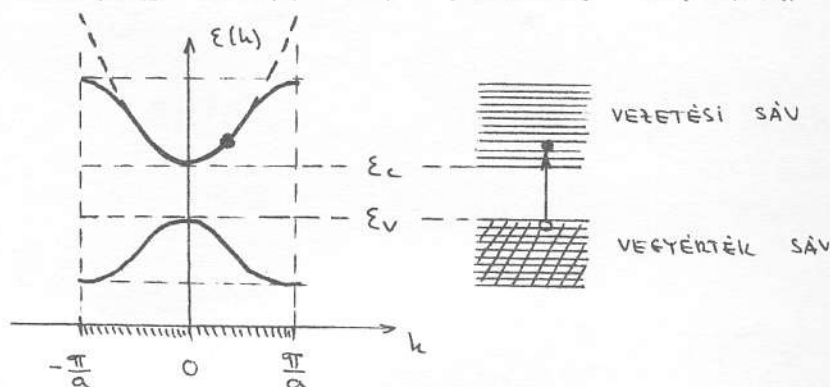
Ha $m^* < 0$



2.3.2. Szilárd testek sáv szerkezete és az elektromos vezetési tulajdonságok kapcsolata



A vezetési sávban lévő elektronok dinamikai modellje:



$$\varepsilon(k) \approx \varepsilon_c + \underbrace{\left[\frac{d\varepsilon}{dk} \right]_0}_{\emptyset} k + \frac{1}{2} \underbrace{\left[\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \right]_0}_{\equiv \frac{\hbar^2}{m^*}} k^2 + \dots \approx \varepsilon_c + \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}}_{m^* \text{ tömegű szabadon mozgó részecske}}$$

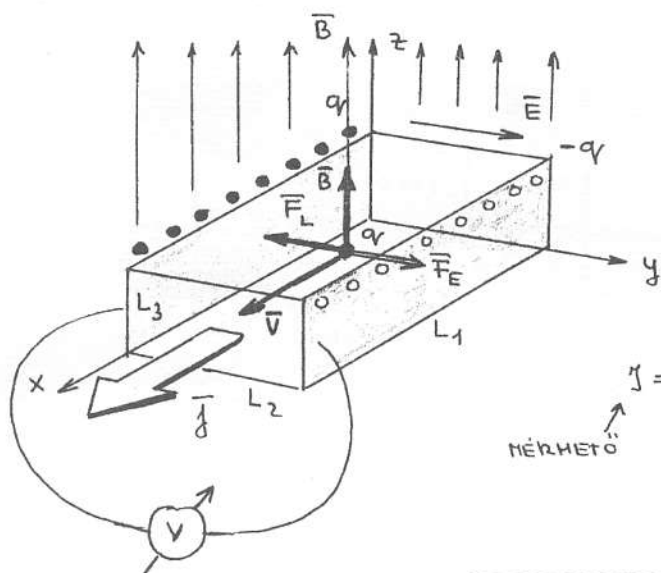
SZEMLELETES !

Ezen egyszerű klasszikus mechanikai tömegpont modell mögött azonban igen bonyolult kvantummechanikai effektusok vannak. Ezek az m^* effektív tömegben vannak "elrejtve".

↓
ez a MODELL ÉRVÉNYESSEGI KÖNÖT is megszatja !

2.4. Pozitív töltéshordozók szilárd testekben : a "lyukak"

2.4.1. A HALL effektus



egyensúlyi állapotban

$$F_L = F_E$$

$$qvB = qE$$

$$j = j L_2 \cdot L_3 \quad (\text{az ÁRAM})$$

$$j = q \cdot n \cdot v$$

$$j = q \cdot n \cdot v \cdot L_2 \cdot L_3 = q \cdot n \cdot \underbrace{v \cdot B}_E \cdot \frac{L_2 L_3}{B} =$$

$$\overset{\text{MÉRHETŐ}}{=} \frac{q \cdot n}{B} L_3 \cdot \underbrace{E \cdot L_2}_U = \frac{q n}{B} L_3 \cdot \underbrace{U}_{\text{MÉRHETŐ}}$$

$$U = \frac{B}{L_3 q n} \cdot j$$

$$\rightarrow U = R_H \cdot j$$

$\equiv R_H$ (HALL állandó)

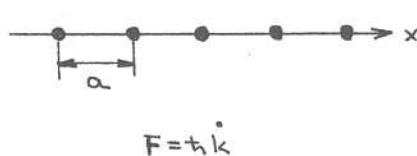
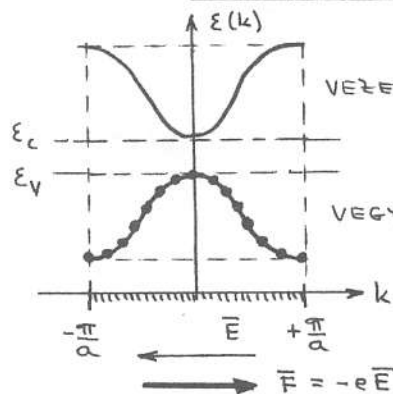
$$R_H \sim \frac{1}{q}$$

$$\rightarrow \begin{cases} < 0 \\ > 0 \end{cases}$$

elektronok ($q = -e$)

pozitív töltéshordozók
(Be, Cd, Zn, Pb, ...)

2.4.2. A "lyukak"



VEZETÉSI SÁV (ÜRES) :

VEGYÉRTÉK SÁV (TELE) :

$$\sum k = 0$$

$$\sum \epsilon(k) = \epsilon_0$$

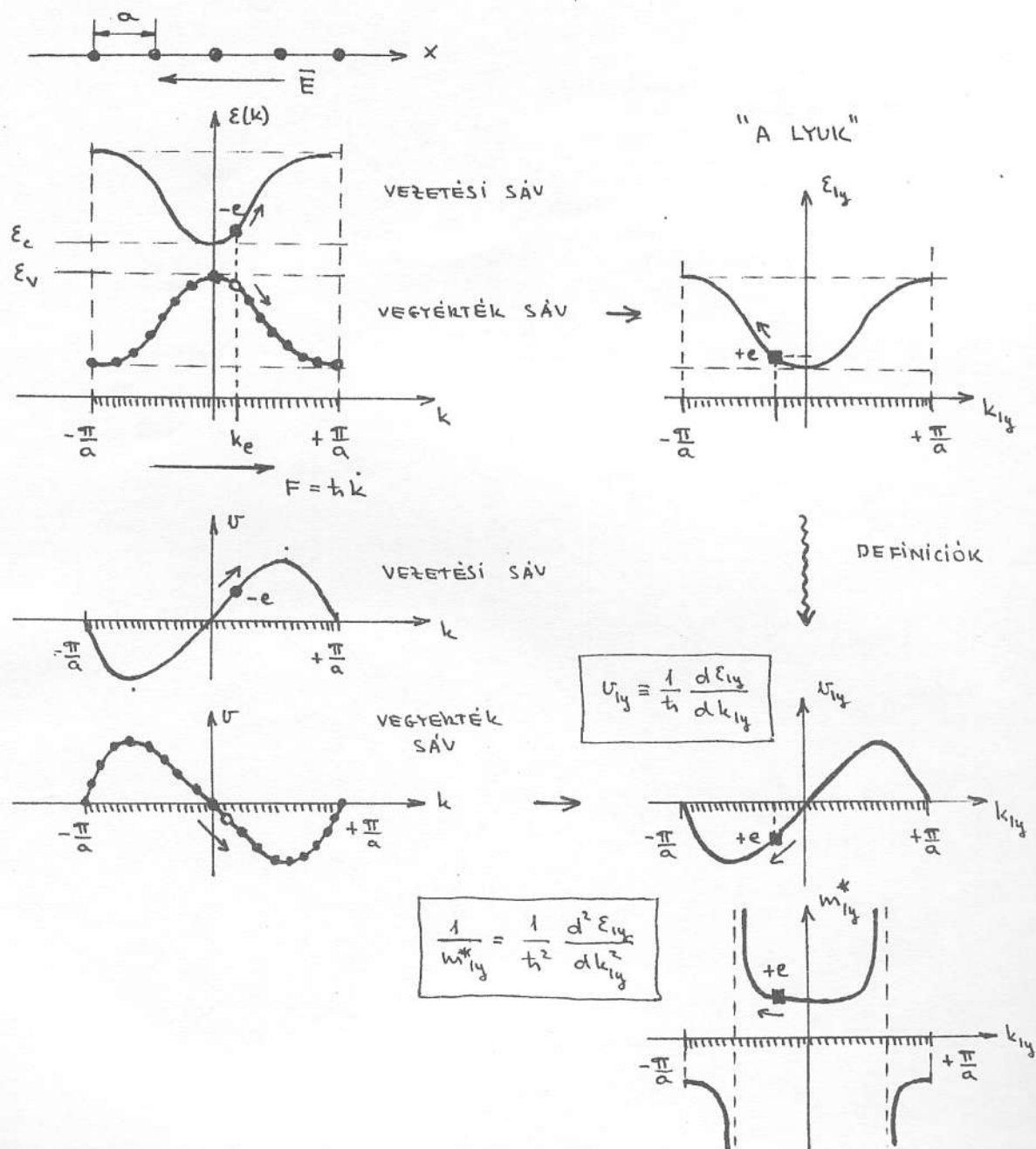
$$j = -e \sum_k v(k) \cdot \frac{1}{L}$$

$$\left(\text{legyen } L = 1 [\dots] \right) \frac{dj}{dt} = -e \sum_k \dot{v}(k) =$$

$$= -e \sum_k \underbrace{\frac{dv}{dk}}_{\frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk}} \dot{k} = -e \sum_k \frac{1}{\hbar \omega^*(k)} \hbar \dot{k} = +e^2 E \sum_k \frac{1}{\omega^*(k)}$$

19

A legalacsonyabb gerjesztett állapot:

VEZETÉSI SÁV

$$\sum_k k = k_e$$

$$\sum_k \varepsilon(k) = \varepsilon(k_e)$$

$$j = -e \sum_k v(k) = -e v(k_e)$$

$$\frac{dj}{dt} = +e^2 E \sum_k \frac{1}{m^*(k)} = +e^2 E \frac{1}{m^*(k_e)}$$

(egyetlen töltéshordozó -elektron- van a vezetési sávban)

$$\sum_k' k = \underbrace{\sum_k' k + k_e - k_e}_{\emptyset} = -k_e \equiv \underline{k_{ly}}$$

$$\sum_k' \varepsilon(k) = \underbrace{\sum_k' \varepsilon(k) + \varepsilon(k_e) - \varepsilon(k_e)}_{\equiv \varepsilon_0} = \varepsilon_0 - \underbrace{\varepsilon(k_e)}_{\varepsilon(-k_e)} \equiv \varepsilon_0 + \underline{\varepsilon_{ly}(k_{ly})}$$

$$f = -e \sum_k' v(k) = -e \underbrace{\sum_k' v(k) + v(k_e) - v(k_e)}_{\emptyset} = +e v(k_e) =$$

$$= +e [-v(-k_e)] \equiv +e \underline{v_{ly}(k_{ly})}$$

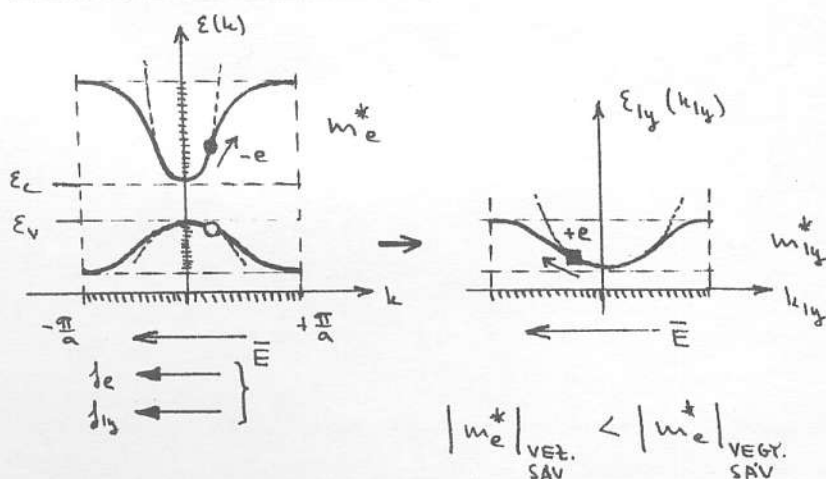
$$\frac{dj}{dt} = +e^2 E \sum_k' \frac{1}{m^*(k)} = +e^2 E \left[\underbrace{\sum_k' \frac{1}{m^*(k)} + \frac{1}{m^*(k_e)}}_{\emptyset} - \frac{1}{m^*(k_e)} \right] =$$

$$= +e^2 E \frac{-1}{m^*(-k_e)} \equiv e^2 E \frac{1}{\underline{m_{ly}^*(k_{ly})}}$$

$$m_{ly}^*(k_{ly}) \equiv -m^*(k_e)$$

(A vegyérték sávból lévő elektronok együttes viselkedésének a hatása modellezhető egyetlen $+e$ töltéshordozóval $\rightarrow$ neve: "lyuk")

Áramvezetés félvezetőkben:



$$|m_e^*|_{\text{VEZ. SÁV}} < |m_e^*|_{\text{VEGY. SÁV}} \rightarrow$$

$$m_e^* < m_{ly}^*$$

(A vezetésben résztvevő töltéshordozókra!)

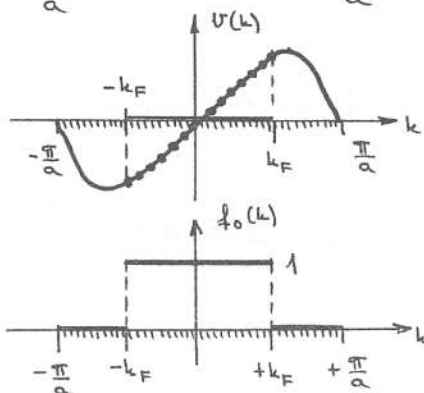
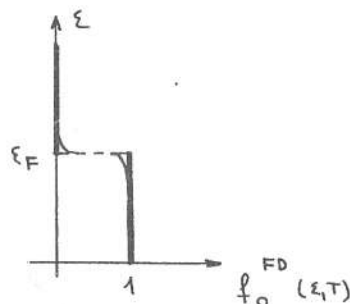
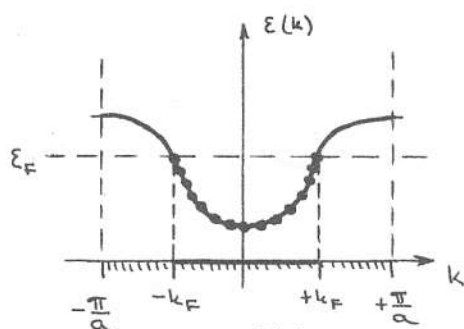
$$j = j_e + j_{ly} = -e v(k_e) + e v_{ly}(k_{ly})$$

$$\dot{j} = \dot{j}_e + \dot{j}_{ly} = e^2 E \frac{1}{m_e^*} + e^2 E \frac{1}{m_{ly}^*} > 0 \rightarrow \begin{aligned} &\text{az áram állandóan nő } v(k_e) = \\ &= \text{az ellenállás zérus} \end{aligned}$$

VALÓJÁRAN AZ ELLENÁLLÁS > 0

2.5. Az elektromos vezetés fizikai alapjai szilárd testekben. Az OHM törvény.

2.5.1. A relaxációs idő közelítés



$$f_0(k) = f_0^{\text{FD}}(\varepsilon(k))$$

Külső elektromos tér hiányában: $E=0$

az áramsűrűség (1dim! $\rightarrow$ általánosítható 3 dim)

$$j = -\frac{e}{L} \sum_k v(k) = 0$$

$$-e \underbrace{\frac{N}{L}}_{\equiv n} \cdot \underbrace{\frac{1}{N} \sum_k v(k)}_{\equiv \langle v \rangle}$$

általánosítás $\rightarrow$

$$j = -e \cdot n \cdot \langle v \rangle$$

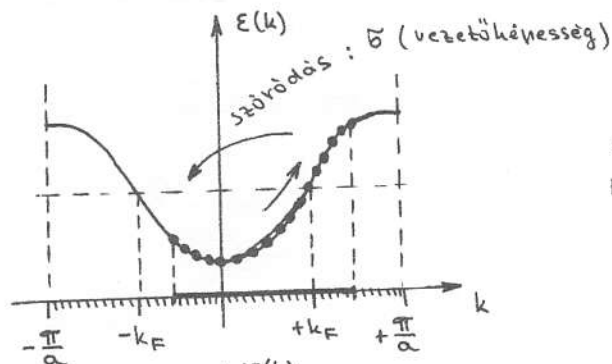
↑ ↑
elektron átlagos
sűrűség sebesség

$$j = -\frac{e}{L} \sum_k v(k) = -\frac{e}{L} \sum_k \underbrace{v(k)}_{\substack{\text{a szilárdtest} \\ \text{modelltől} \\ \text{függ}}} \cdot \underbrace{f_0(k)}_{\substack{\text{a külső elektromos} \\ \text{tértől és a hőmérséklettől} \\ \text{függ}}} = 0$$

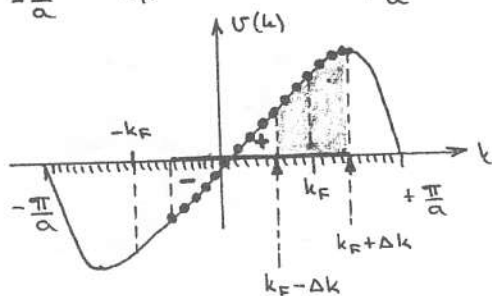
a szilárdtest
modelltől
függ

a külső elektromos
tértől és a hőmérséklettől
függ

Külső elektromos tér van ($E \neq 0$)

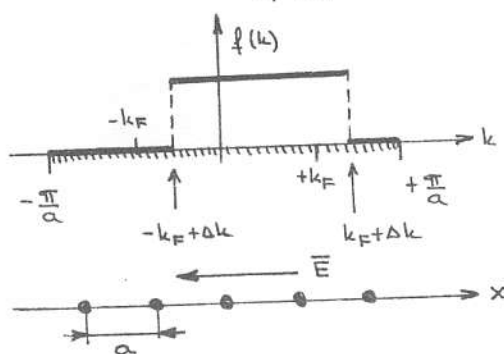


$$\left. \begin{aligned} F &= \hbar \dot{k} \\ F &= -eE \end{aligned} \right\} \dot{k} = -\frac{eE}{\hbar}$$



$$j = -\frac{e}{L} \sum_k v(k) > 0$$

(az eredő áramsűrűség nem zérus!)



$f(k)$: időben állandó (a transziensek már lezajlottak)

↓
egyensúlyi állapot

Egyensúlyi állapotban:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_E - \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\bar{E}} = 0$$

Tehát

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\bar{E}} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_E$$

$$\rightarrow \frac{F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_E$$

BOLTZMANN
egyenlet
(1 dim.)

$$\frac{\partial f}{\partial k} \cdot \dot{k} = \frac{F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k}$$

(stacionér állapot, homogén anyag)

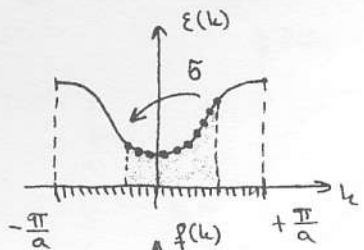
Megjegyzés:

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_E$$

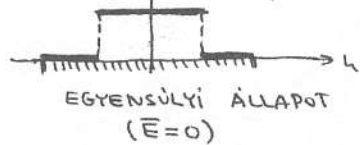
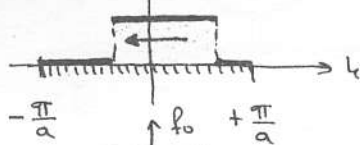
: fizikailag az f változási sebességet adja, matematikailag NEM DERIVÁCSI MŰVELETTEL lehet kiszámítani.

↓
követő meghatározása: RELAXÁCIÓS idő fogalma

A relaxációs idő :



külső tér nincsen : $\bar{E}=0 \rightarrow \bar{F}=0$



$$f(k, t) \rightarrow f_0(k)$$

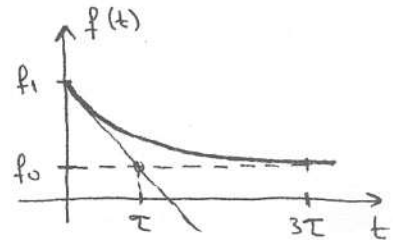
A rendszer
NINCSEN EGYENSÚLYBAN

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_E - \underbrace{\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_E}_{\equiv \phi}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_E \equiv \frac{f_0 - f}{\tau}$$

az u.n. RELAXÁCIÓS
idő definíciója

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$



A BOLTZMANN egyenlet ha külső tér is van ($E \neq 0$)

$$\frac{F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

$\rightarrow f(k)$ számítható : RELAXÁCIÓS idő közelítés

A relaxációs idő meghatározása:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots$$

pl: $\uparrow$ szennyezések hatása
 $\uparrow$ termikus hatás

Az $f(k)$ számítása:

$$\frac{F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

$$\rightarrow f = f_0 - \frac{\tau F}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k}$$

$$f = f_0 - \frac{\tau F}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial k}$$

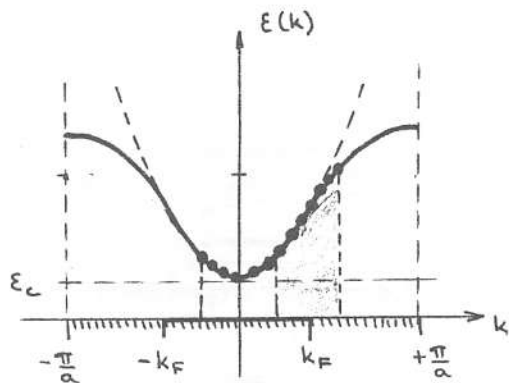
LINEÁRIS KÖZELÍTÉS

$\equiv \Delta k$ (bevezetésével)

$$f = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial k} (-\Delta k) \approx f_0(k - \Delta k)$$

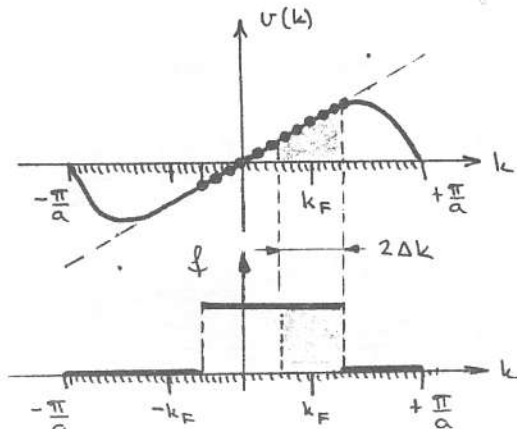
Tehát az $f_0(k)$
 Δk -val jobbra tolódik :

$$f \approx f_0(k - \Delta k) ; \Delta k \equiv \frac{\tau e |E|}{\hbar}$$



$$\varepsilon(k) \approx \varepsilon_c + \underbrace{\left[\frac{d\varepsilon}{dk} \right]_0}_{=0} \cdot k + \frac{1}{2} \underbrace{\left[\frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \right]_0}_{\frac{\hbar^2}{m^*}} k^2 + \dots$$

$$\varepsilon(k) \approx \varepsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{effektív tömeg közelítés})$$



$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} \approx \frac{\hbar k}{m^*}$$

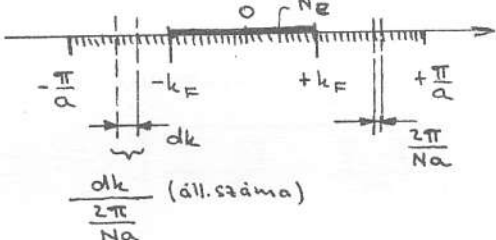
$$j = -\frac{e}{L} \sum_k v(k) = -\frac{e}{L} \sum_k f(k) v(k) =$$

$$= -\frac{e}{L} \frac{\hbar}{m^*} \sum_k k \cdot f(k)$$

(az áramsűrűség)

matematika:

$$\sum_k \dots \equiv \frac{Na}{2\pi} \int \dots dk$$



Tehát:

$$j = -\frac{e}{L} \frac{\hbar}{m^*} \cdot \frac{Na}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} k \cdot f(k) dk = -\frac{e}{L} \frac{\hbar}{m^*} \cdot \frac{Na}{2\pi} \int_{k_F-\Delta k}^{k_F+\Delta k} k \cdot dk$$

$$\left[\frac{k^2}{2} \right]_{k_F-\Delta k}^{k_F+\Delta k} = 2k_F \Delta k$$

$$j = -\frac{e}{L} \frac{\hbar}{m^*} \cdot \frac{Na}{2\pi} 2k_F \cdot \Delta k$$

$\equiv N_e$ (a vezetési sávban lévő elektronok száma)

$$j = -e \frac{N_e}{L} \cdot \frac{\hbar}{m^*} \Delta k = -e \frac{N_e}{L} \frac{\hbar}{m^*} \frac{\tau(-eE)}{\hbar} = + \frac{e^2 \tau}{m^*} \frac{N_e}{L} \cdot E = \frac{e^2 n_e \tau}{m^*} E$$

$\frac{\tau(-eE)}{\hbar} \equiv -\frac{\tau e E}{\hbar}$ $\frac{N_e}{L} \equiv n_e$ (a vezetési sávban lévő elektronok sűrűsége)

Tehát:

$$j = \frac{e^2 n_e \tau}{m^*} E \equiv \sigma E \quad (\text{OHM törvény differenciális alakja})$$

(1 dim $\rightarrow$ 3 dim)

$$\sigma = \frac{e^2 \tau n_e}{m^*}$$

(fajlagos) vezetőképesség

Az alkalmazott kötelitések:

STACIONER ÁLLAPOT
HOMOGEN ANYAG
RELAXÁCIÓS IDŐ
LINEÁRIS
EFFEKTÍV TÖMEG

A mozgékonyaság:

$$j = \sigma E \equiv -e \cdot n_e \cdot \langle v \rangle$$

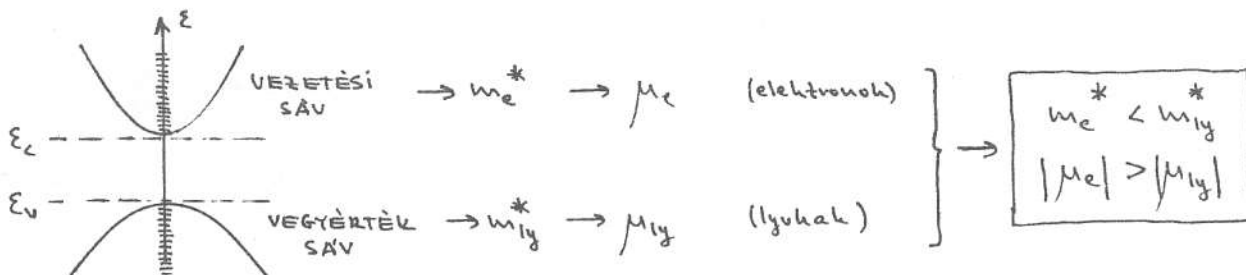
$$\frac{(-e)(-e)n_e \tau}{m^*} E = (-e)n_e \cdot \langle v \rangle \rightarrow \frac{(-e)\tau}{m^*} E = \langle v \rangle$$

$$\mu_e = \frac{(-e)\tau}{m^*}$$

 $\leftarrow$

$$\mu_e \cdot E = \langle v \rangle$$

a mozgékonyaság definíciója

Általánosítás félvezetőkre:

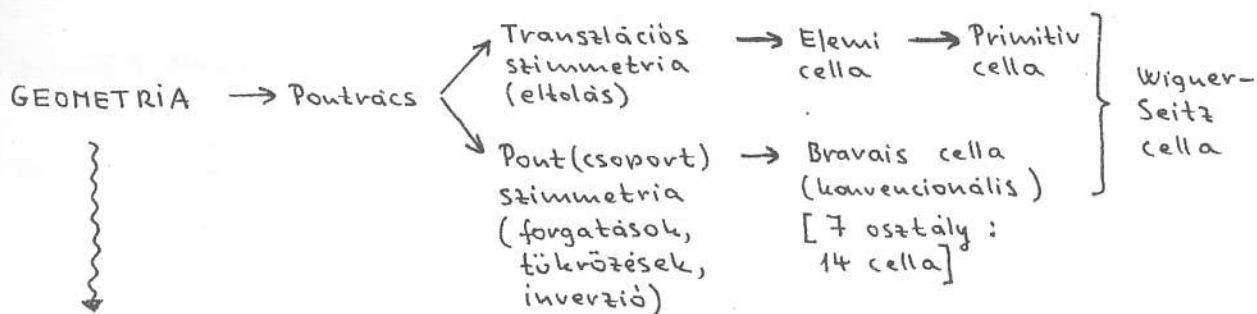
$$j = j_e + j_{ly} = (\sigma_e + \sigma_{ly}) E = +e \underbrace{(n_e \mu_e + n_{ly} \mu_{ly})}_{|n_e| \cdot |\mu_e|} E$$

$$j = e \left(\frac{|n_e| e \tau}{m_e^*} + \frac{n_{ly} e \tau}{m_{ly}^*} \right) \cdot E$$

$\frac{m^2}{Vs}$	$ \mu_e $	μ_{ly}
Ge	0,36	0,17
Si	0,18	0,04

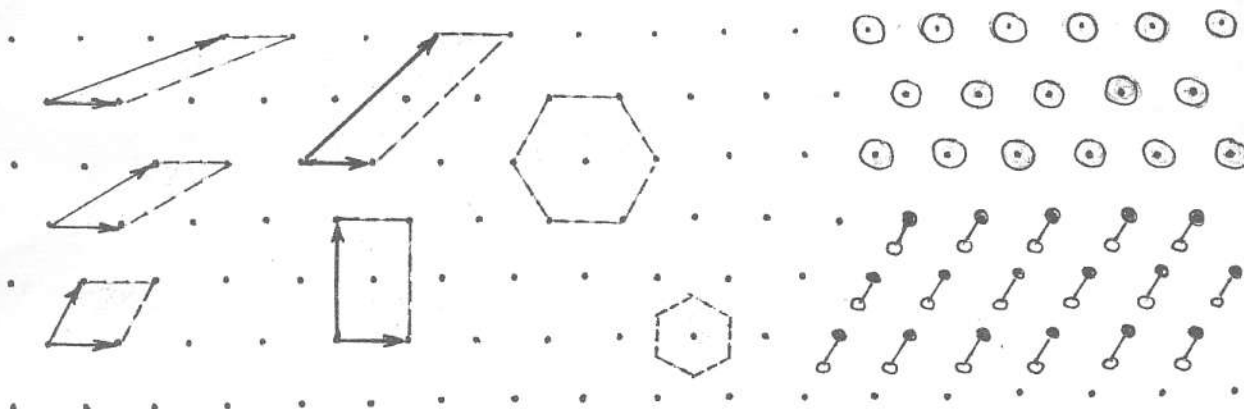
2.6. Szilárd testek háromdimenziós modellje

2.6.1. Ideális kristályok leírása

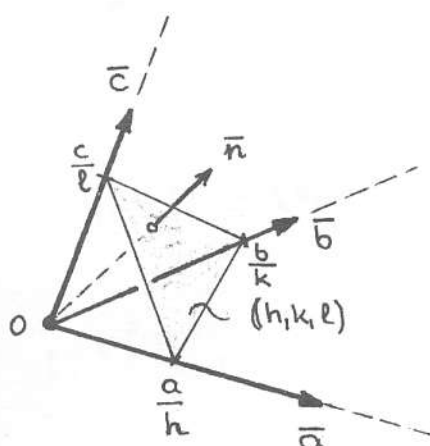


FIZIKA (Kristályszerkezetek) $\rightarrow$ Rácspont + atom(csoport)ok ($\equiv$ bázis)

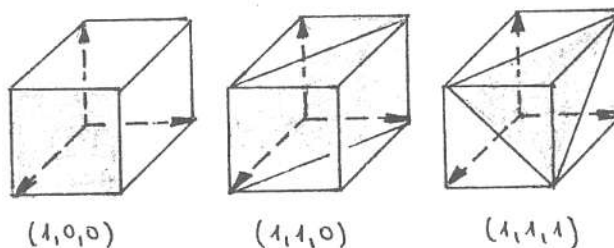
Példák: (2 dimenzió)



Kristály-síkok és irányok megadása: Miller indexek



(h, k, l : egész számok)

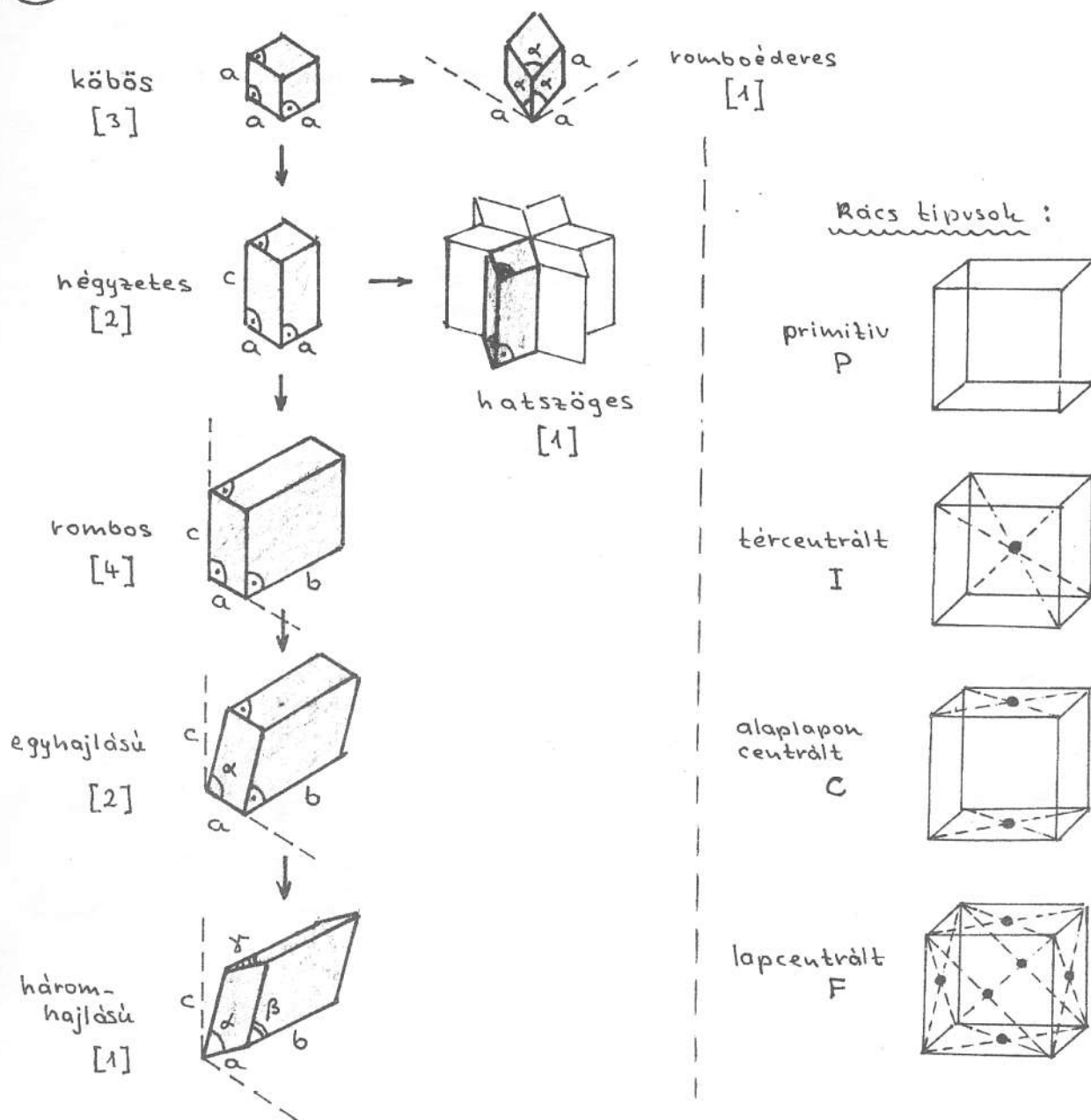


Irány kijelölése: $\bar{n}$, $|\bar{n}|=1$

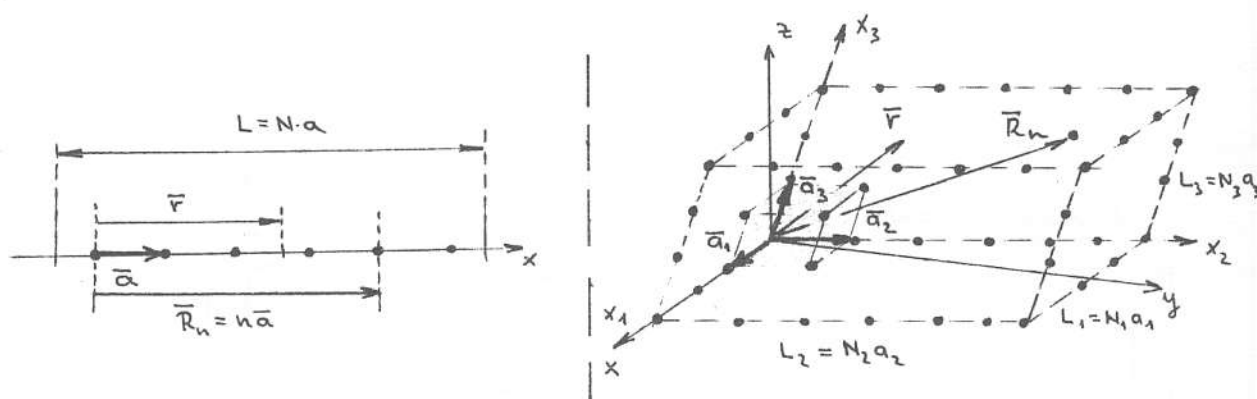
$$\left. \begin{array}{l} \bar{n} \cdot \bar{a} \rightarrow h \\ \bar{n} \cdot \bar{b} \rightarrow k \\ \bar{n} \cdot \bar{c} \rightarrow l \end{array} \right\} [h, k, l]$$

köbös rendszerben:

$[h, k, l]$ normálgas (h, k, l) -ve



Osztály	oldalak			szögek			típusok
köbös	a	a	a	90°	90°	90°	P, I, F
négyzetes	a	a	c	90°	90°	90°	P, I
rombos	a	b	c	90°	90°	90°	P, I, F, C
egyhajlású	a	b	c	α	90°	90°	I, C,
háromhajlású	a	b	c	α	β	γ	P
hatszögös	a	a	c	90°	90°	60°	P
romboéderekes	a	a	a	α	α	α	$P \equiv R$

Pontrács és elemi cella

$$\{\bar{a}\} \rightarrow a$$

$$\bar{R}_n \rightarrow na$$

$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

x

$$\{\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3\} \quad (\text{bázisvektorok})$$

$$\bar{R}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \bar{a}_i$$

$$n_i = 1, 2, 3, 4, \dots$$

 $\bar{r}$ A kristály (makroszkópikus) mérete

$$L = N \cdot a$$

N

(rácsponthok száma)

$$L_i = N_i a_i \quad (i=1, 2, 3)$$

$$N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$$

A transzlációs szimmetria

$$V(x+na) = V(x)$$

$$V(\bar{r} + \bar{R}_n) = V(\bar{r})$$

(BORN-KÁRMÁN) féle periódikus határfeltétel

$$\psi(x+Na) = \psi(x)$$

$$\psi(\bar{r} + N_i \bar{a}_i) = \psi(\bar{r}) \quad (i=1, 2, 3)$$

BLOCH tétel és a BLOCH állapotok

$$\psi(x+na) = e^{jkna} \psi(x)$$

$$\psi(x) = e^{jkx} \cdot u(x)$$

$$e^{jkNa} = 1$$

$$kNa = 2\pi n$$

$$ka = 2\pi \frac{n}{N}$$

$$k = \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N} \\ \equiv \underline{\underline{b \cdot \mathcal{K}}}$$

$$\psi(\bar{r} + \bar{R}_n) = e^{j\bar{k} \cdot \bar{R}_n} \cdot \psi(\bar{r})$$

$$\psi(\bar{r}) = e^{j\bar{k} \cdot \bar{r}} u(\bar{r})$$

$$e^{j\bar{k} \cdot N_i \bar{a}_i} = 1 \quad (i=1, 2, 3)$$

$$\bar{k} \cdot N_i \bar{a}_i = n_i \cdot 2\pi \quad (i=1, 2, 3)$$

$$\boxed{\bar{k} \cdot \bar{a}_i = 2\pi \frac{n_i}{N_i}} \quad (i=1, 2, 3)$$

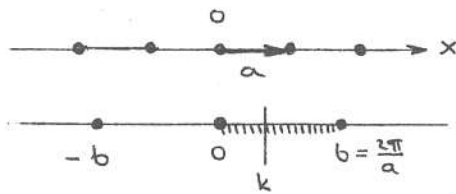
reciproch bázis: $\{\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3\}$

$$\bar{k} \equiv \sum_j \bar{b}_j \mathcal{K}_j$$

$$\sum_j \mathcal{K}_j \bar{b}_j \cdot \bar{a}_i = 2\pi \frac{n_i}{N_i} \quad (i=1, 2, 3)$$

$$\equiv 2\pi \delta_{ij}$$

$$\underline{\underline{\mathcal{K}_i = \frac{n_i}{N_i} \quad (i=1, 2, 3)}}$$

A reciprok pontrends

$$\{a\} \rightarrow \{b\}$$

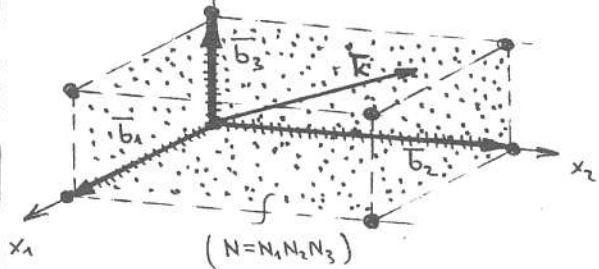
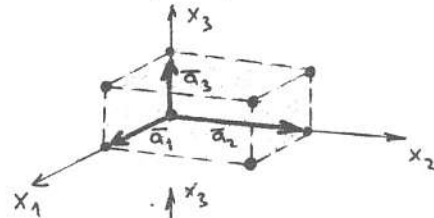
(definíció:) $a \cdot b = 2\pi$

$$b = \frac{2\pi}{a}$$

$$k_m = m \cdot b$$

$$\left. \begin{aligned} k' &= k + m \frac{2\pi}{a} \\ \psi_{k'} &\equiv \psi_k \end{aligned} \right\}$$

pl: (rombos rendszer)



$$\{\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3\} \rightarrow \{\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3\}$$

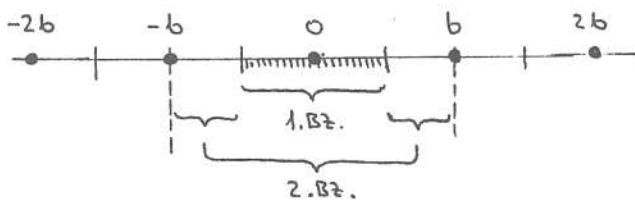
(definíció:) $\bar{a}_i \cdot \bar{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$

$$\downarrow$$

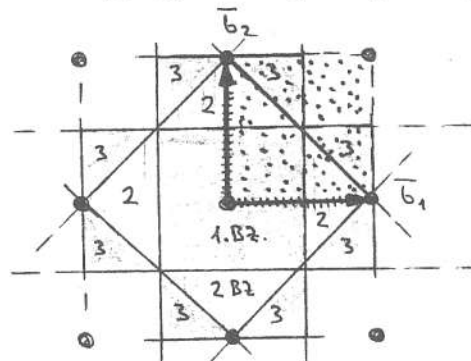
$$\left\{ \begin{aligned} \bar{b}_1 &= 2\pi \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot \bar{a}_2 \times \bar{a}_3} \\ \bar{b}_2 &= \dots \\ \bar{b}_3 &= \dots \end{aligned} \right.$$

$$\bar{K}_m \equiv \sum_j^3 m_j \bar{b}_j \quad (m_j = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \bar{k}' &= \bar{k} + \bar{K}_m \\ \psi_{\bar{k}'} &\equiv \psi_{\bar{k}} \end{aligned} \right.$$

Brillouin zóna

pl: (2 dim, négyzetes)

Az Bloch állapotok energiája

$$\epsilon_n(k)$$

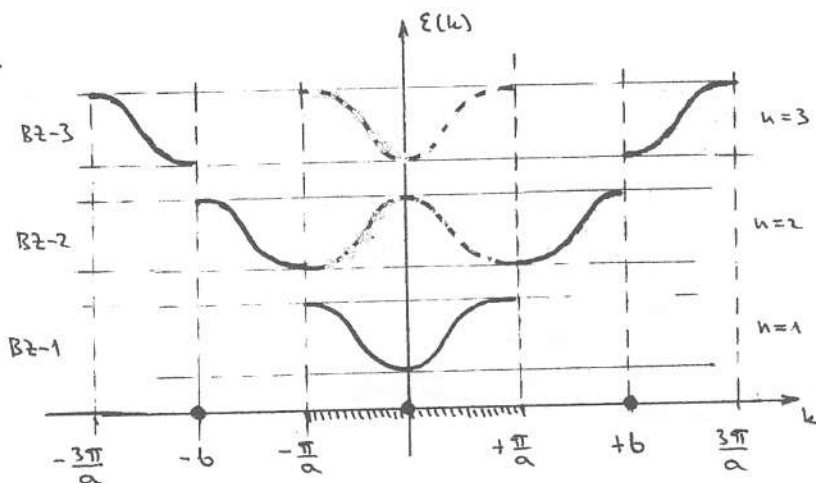
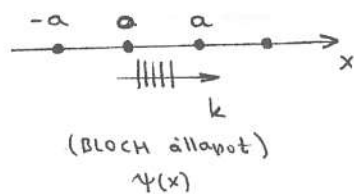
$$\left\{ \begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ k &\in Bz \end{aligned} \right.$$

$$\epsilon_n(\bar{k})$$

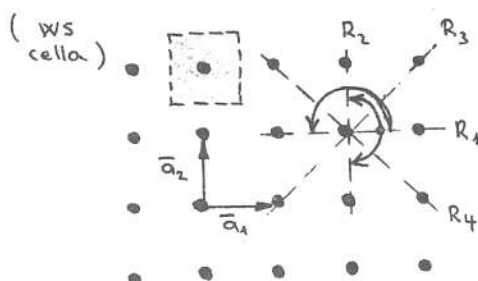
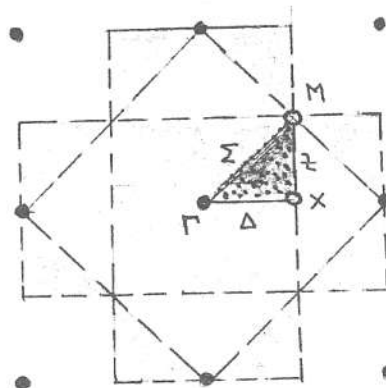
$$\left\{ \begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ \bar{k} &\in Bz \end{aligned} \right.$$

2.6.3. A sávszerkezet (diszperziós reláció)

1 dimenziós modell

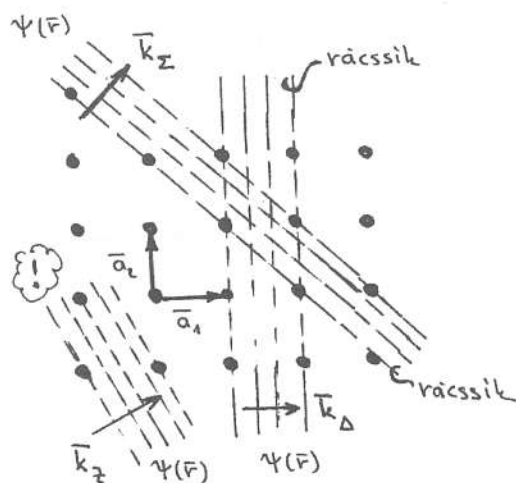


2 dimenziós modell

Pont (csoport)
TRANSZFORMÁCIÓK

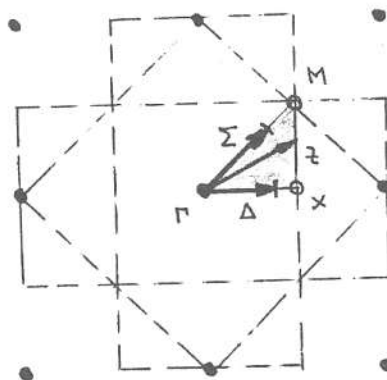
(BRILLOUIN ZÓNÁK)

nevezetes pontok és tengelyek.



$$E(k_\parallel) \rightarrow 1 \text{ dim}$$

$$E(k_\perp) \rightarrow 1 \text{ dim}$$

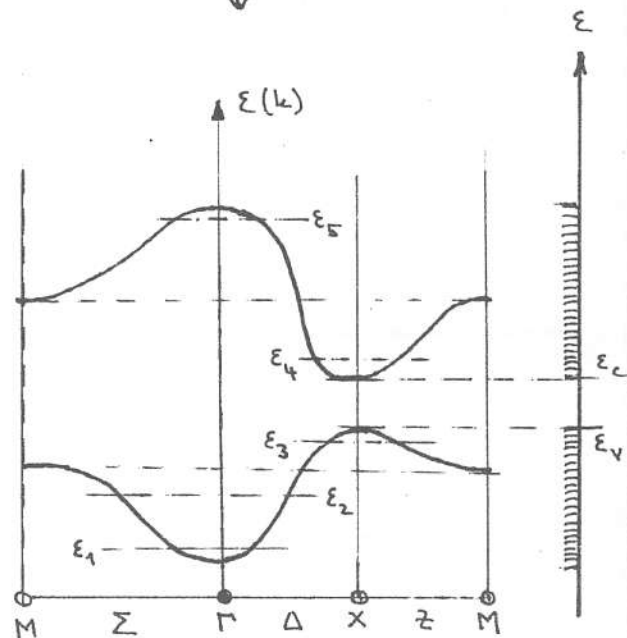
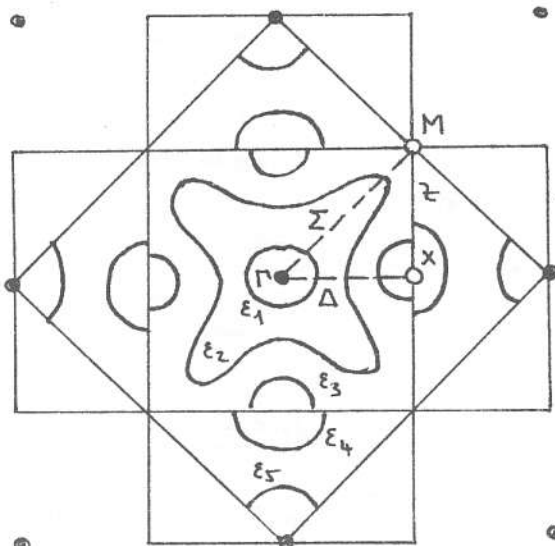


Lehetséges diszperziós relációk ($\equiv$ sáv szerkezet) 2-dimenziós modelleken.

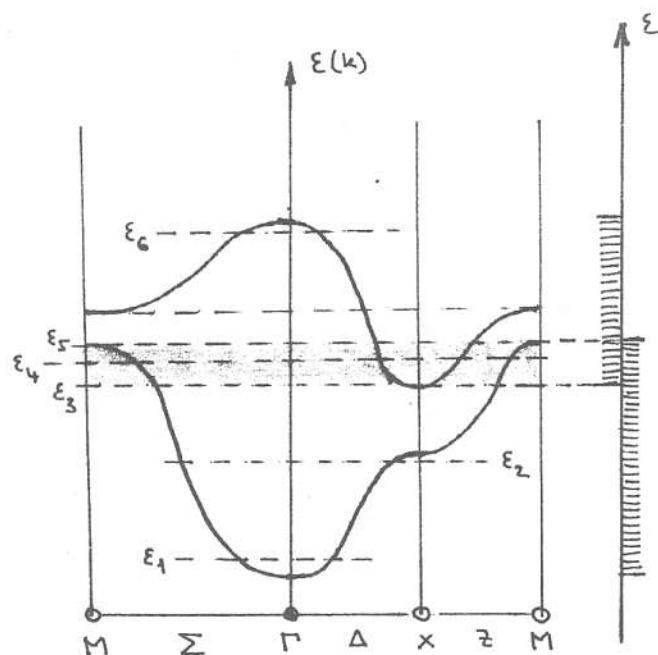
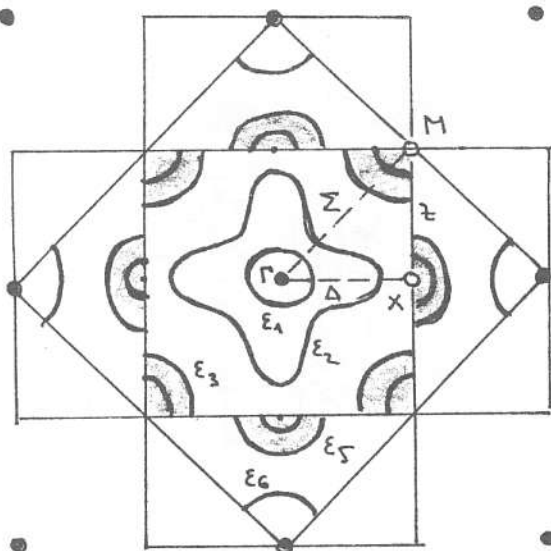
$$\varepsilon(k) \rightarrow \varepsilon(k) = \text{állandó (FERMI felület)}$$

↓ SZERLELTETÉS

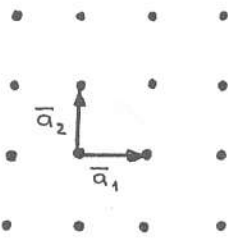
- Tiltott sáv van



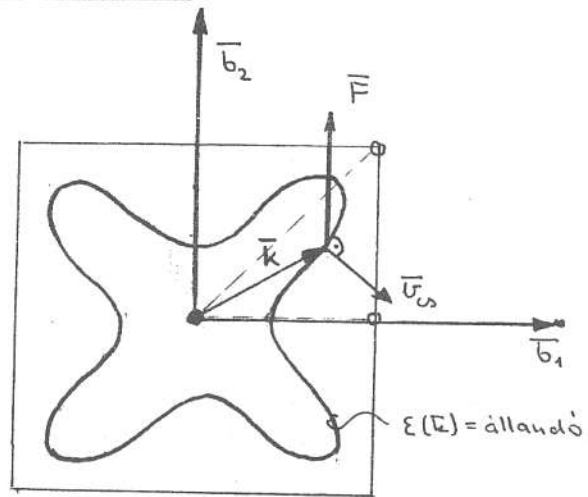
- Az u.n. "sávátfedés" $\rightarrow$ tiltott sáv nincsen



2.6.4. Az elektronok dinamikája



Rajz (2 dim)

↓
Számolás (3 dim)

B.z.

$$\vec{k} = \sum_j k_j \vec{b}_j \rightarrow \varepsilon(\vec{k}) \equiv \varepsilon(k_1, k_2, k_3)$$

$$\vec{F} = \hbar \dot{\vec{k}}$$

$$v_s = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} \rightarrow \vec{v}_s = \sum_i v_i \vec{b}_i = \frac{1}{\hbar} \sum_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i} \vec{b}_i \equiv \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})$$

$\uparrow$
 $v_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i}$

$\vec{v}_s$ merőleges az $\varepsilon(\vec{k}) = \text{állandó}$ (FERMI) felületre

$$a_s = \frac{1}{m^*} F \rightarrow \vec{a}_s = \sum_i a_i \vec{b}_i = \left[\frac{1}{m^*} \right] \cdot \vec{F} \quad (\text{az effektív tömeg tenzor definíciója})$$

$\uparrow$
 $a_i = \sum_j \frac{1}{m_{ij}^*} F_j$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \varepsilon}{dk^2} \rightarrow \boxed{\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}}$$

(az effektív tömeg tenzor (mátrix) komponenseinek meghatározása)

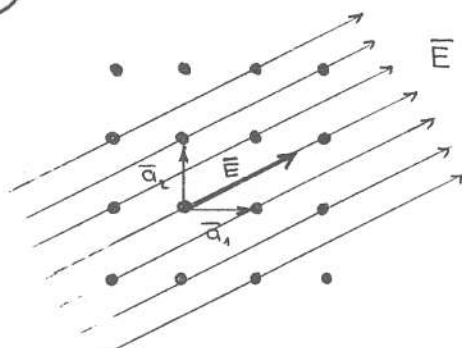
↓ SPECIÁLIS ESETEK

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{m_1^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_3^*} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{1}{m^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m^*} \end{bmatrix} \equiv \frac{1}{m^*} \cdot \underline{\underline{I}}$$

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \rightarrow \underline{\underline{\vec{j}}} = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{\vec{E}}} \rightarrow \text{speciális esetben } \underline{\underline{\vec{j}}} = \underline{\underline{\sigma}} \underline{\underline{\vec{E}}}$$

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \quad \underline{\underline{\sigma}} = e^2 n \tau \left[\frac{1}{m^*} \right]$$

Az elektron mozgása külső elektromos tér hatására



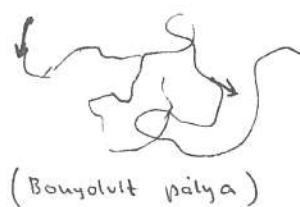
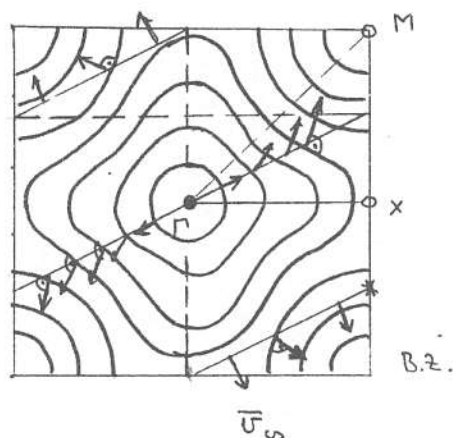
homogén elektromos tér

ideális kristály szerkezet

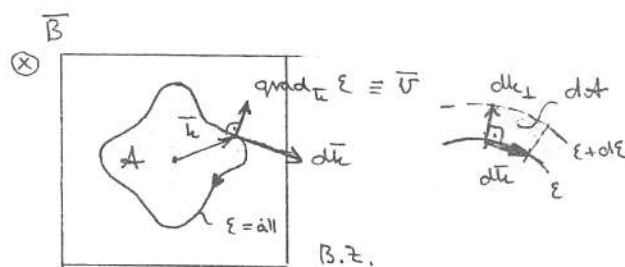
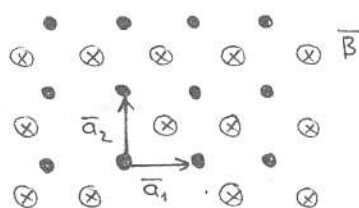
($\bar{\sigma} = \infty$) $\rightarrow$ szóródás nincsen.

$$\vec{F} = -e\vec{E}$$

$$\vec{F} = \hbar \dot{\vec{k}}$$



Az elektron mozgása homogén mágneses térben



$$\vec{F} = -e \vec{v} \times \vec{B}$$

$$\vec{F} = \hbar \dot{\vec{k}}$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -\frac{e}{\hbar} (\text{grad}_k \epsilon) \times \vec{B}$$

$$d\vec{k} = -\frac{e}{\hbar^2} (\text{grad}_k \epsilon) \times \vec{B} dt \quad \frac{1}{\hbar} |\text{grad}_k \epsilon| \equiv v_{\perp}$$

$$dk = \frac{e}{\hbar} v_{\perp} \cdot B \cdot dt$$

$$dt = \frac{\hbar}{eB} \frac{dk}{v_{\perp}}$$

($\vec{k}$ végpontja mindig az $\epsilon(\vec{k}) = \text{áll}$ görbén van)

A keringési idő:

$$T_c = \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{dk}{v_{\perp}}$$

körpálya esetén $\rightarrow$

$$T_c = \frac{2\pi}{\omega_c} = \frac{2\pi}{\frac{eB}{m^*}}$$

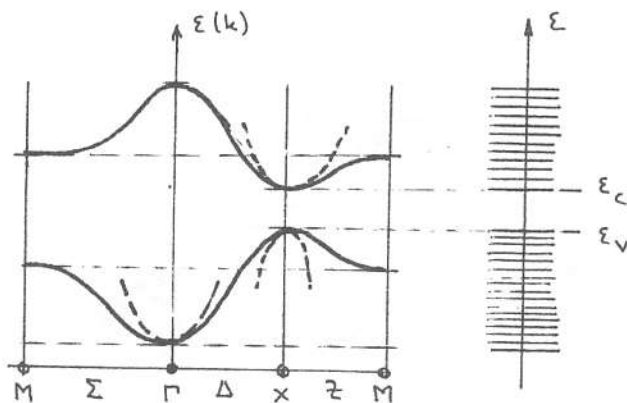
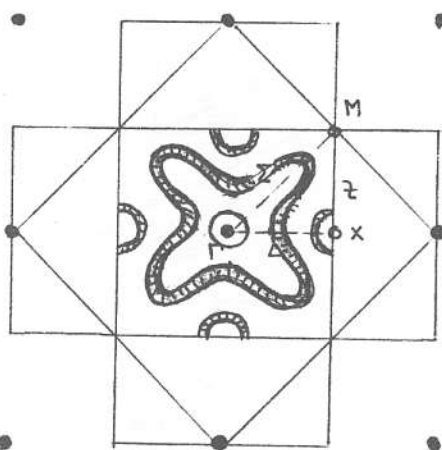
Tehát

$$m_B^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \oint \frac{dk_{\perp} dk}{d\epsilon} = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{dA}{d\epsilon} \rightarrow m^* \text{ (körpálya esetén)}$$

$$\frac{2\pi}{eB} m_B^* \equiv \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{dk}{v_{\perp}}$$

$$m_B^* = \frac{\hbar}{2\pi} \oint \frac{dk}{v_{\perp}}$$

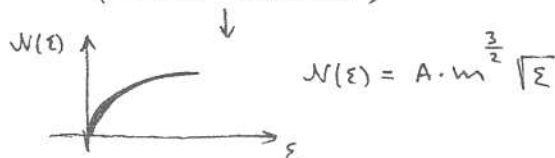
$$v_{\perp} \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk_{\perp}}$$



$\{\Gamma, X\}$ pontok környékén

$$\varepsilon(k) \approx \frac{\hbar^2}{2m^*} (k - k_i)^2 \quad (i = \Gamma, X)$$

(SZABAD ELEKTRON)



Févezetők esetében:

$$N_v(\varepsilon) = A m_v^{* \frac{3}{2}} \cdot \sqrt{\varepsilon_v - \varepsilon}$$

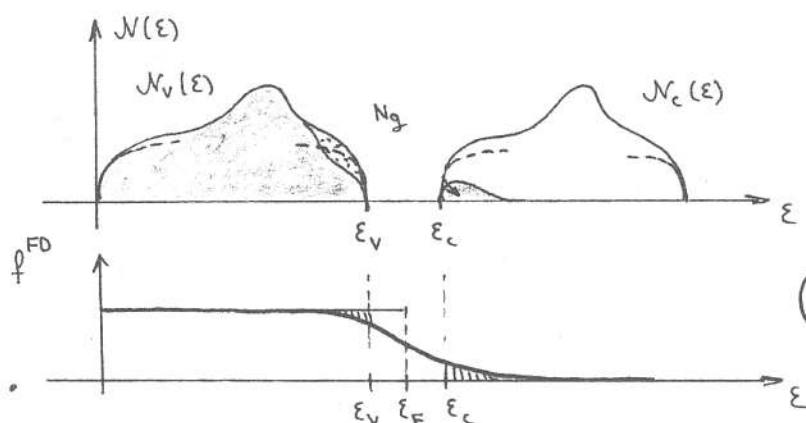
$$(m_v^* \equiv m_{ly}^*)$$

VEGYÉRTÉK SÁVBAN

$$N_c(\varepsilon) = A m_c^{* \frac{3}{2}} \cdot \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c}$$

$$(m_c^* \equiv m_e^*)$$

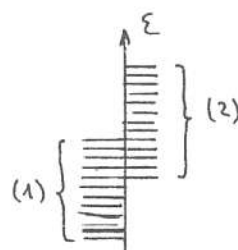
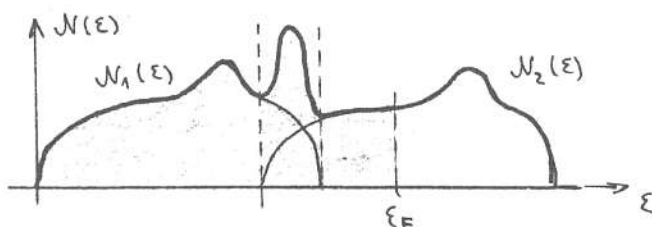
VEZETÉSI SÁVBAN



$N = \text{állandó}$

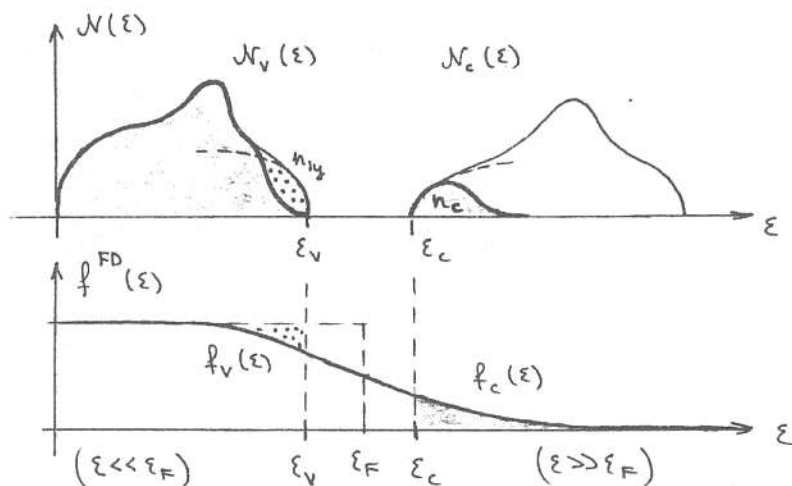
$$\begin{aligned} m_{ly}^* &> m_e^* \\ \varepsilon_F &> \frac{\varepsilon_v + \varepsilon_c}{2} \end{aligned}$$

Vezetők esetén (ha szivátfedés van)



2.7. Félfvezetők általános tulajdonságai

2.7.1. A Fermi szint meghatározása szerkezeti félfvezetők esetén



$$f_c(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} + 1} \approx e^{-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}}$$

$$f_v(\varepsilon) \equiv 1 - f^{\text{FD}}(\varepsilon) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} + 1} = \frac{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}}}{e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} + 1} \approx e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}}$$

A vezetési sávban lévő elektronok száma:

$$n_c = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} N_c(\varepsilon) \cdot f_c(\varepsilon) d\varepsilon = A \cdot m_e^{*\frac{3}{2}} \cdot \int_{\varepsilon_c}^{\infty} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} \cdot e^{-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} d\varepsilon$$

legyen:

$$\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{kT} \equiv x \rightarrow \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} \equiv \sqrt{kTx} \rightarrow d\varepsilon = kT dx$$

$$e^{-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} = e^{-\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{kT}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}}$$

Tehát:

$$n_c = A m_e^{*\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}} \cdot (kT)^{\frac{3}{2}} \cdot \underbrace{\int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-x} dx}_{\equiv \frac{1}{2} \sqrt{\pi}} = \underbrace{\frac{\sqrt{\pi}}{2} A (kT m_e^*)^{\frac{3}{2}}}_{\equiv N_c} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}}$$

$$n_c = N_c e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}} ; N_c \sim (kT m_e^*)^{\frac{3}{2}}$$

36

A vegérték sámban lévő üres állapotok száma $\equiv$ a "lyukak" száma

$$n_{ly} = \int_0^{\infty} N_v(\varepsilon) f_v(\varepsilon) d\varepsilon = A \cdot m_{ly}^{*\frac{3}{2}} \cdot \int_0^{\varepsilon_v} \sqrt{\varepsilon_v - \varepsilon} \cdot e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}} d\varepsilon = \dots$$

(hasznos módon számítható mint az előző $\rightarrow$ Feladat)

$$n_{ly} = N_{ly} e^{-\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_v}{kT}} ; N_{ly} \sim (kT m_{ly}^*)^{\frac{3}{2}}$$

A FERMI szint meghatározása:

$$N = \text{állandó} \rightarrow n_e = n_{ly} \rightarrow N_e e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}} = N_{ly} e^{-\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_v}{kT}} \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{N_{ly}}{N_e} = e^{\frac{-\varepsilon_c + \varepsilon_F + \varepsilon_F - \varepsilon_v}{kT}} \rightarrow$$

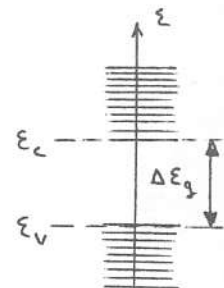
$$\rightarrow \frac{2\varepsilon_F - (\varepsilon_c + \varepsilon_v)}{kT} = \ln \left(\frac{m_{ly}^*}{m_e^*} \right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\varepsilon_F = \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_{ly}^*}{m_e^*}$$

Akogyan azt vártuk.

A vezetésben résztvevő elektronok és lyukak száma közötti fontos összefüggésre jutunk a következőkben:

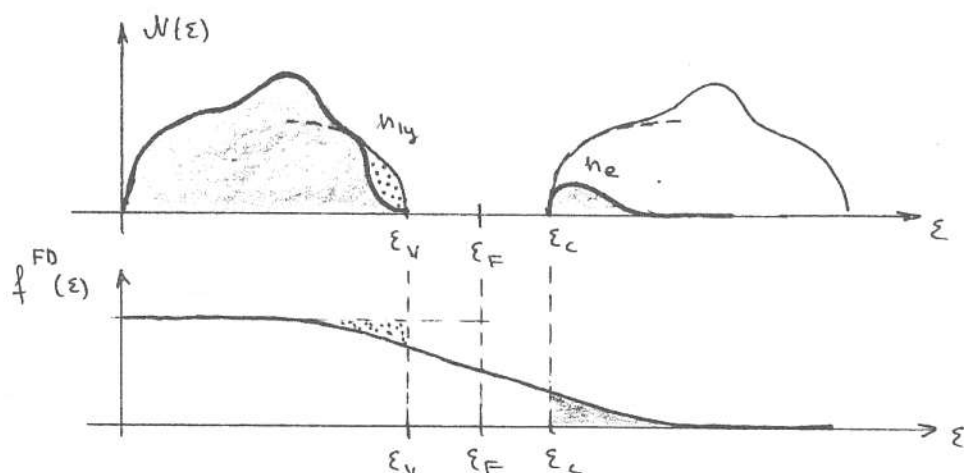
$$n_e \cdot n_{ly} = N_e \cdot N_{ly} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_v}{kT}} = e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_v}{kT}} = e^{-\frac{\Delta \varepsilon_g}{kT}}$$



$$n_e \cdot n_{ly} = N_e \cdot N_{ly} e^{-\frac{\Delta \varepsilon_g}{kT}}$$

Független a FERMI (ε_F) szinttől

2.7.2. A fajlagos vezetőképesség számítása szerkezeti félvezetőik esetén



legyen: $n_{ly}^* = n_e^* \equiv n^*$

$n_{ly} = n_e \equiv n$

$$\sigma = e \cdot n (\mu_e + \mu_{ly}) = e (\mu_e + \mu_{ly}) \frac{\sqrt{\pi}}{2} A (kT n^*)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\Delta\varepsilon_g}{2}}$$

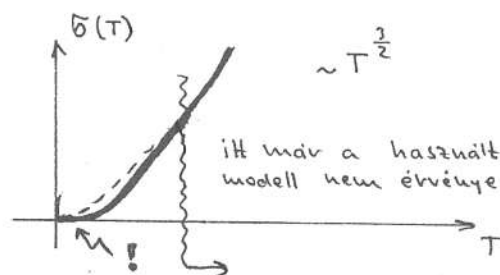
$$n = N_e e^{-\frac{\varepsilon_C - \varepsilon_F}{kT}}$$

$$\varepsilon_C - \varepsilon_F = \varepsilon_C - \frac{\varepsilon_C + \varepsilon_V}{2} = \frac{2\varepsilon_C - \varepsilon_C - \varepsilon_V}{2} = \frac{\varepsilon_C - \varepsilon_V}{2} = \frac{\Delta\varepsilon_g}{2}$$

Tehát

$$\sigma(T) = \text{állandó} \cdot (T)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\Delta\varepsilon_g}{2kT}}$$

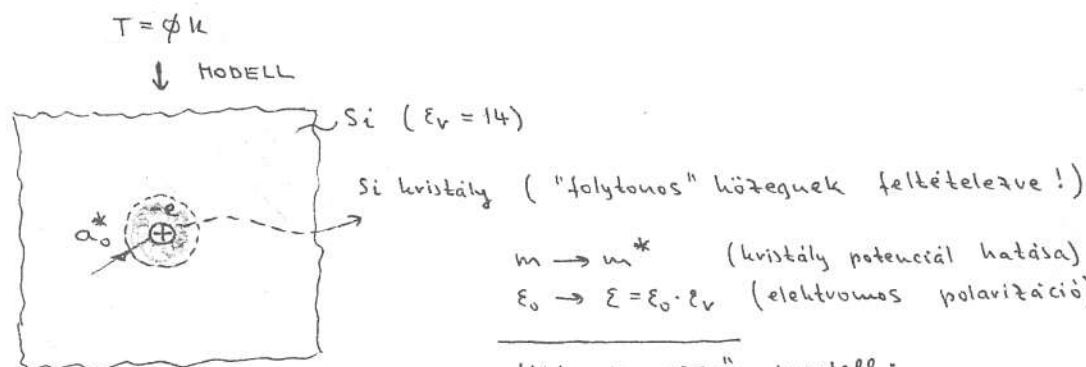
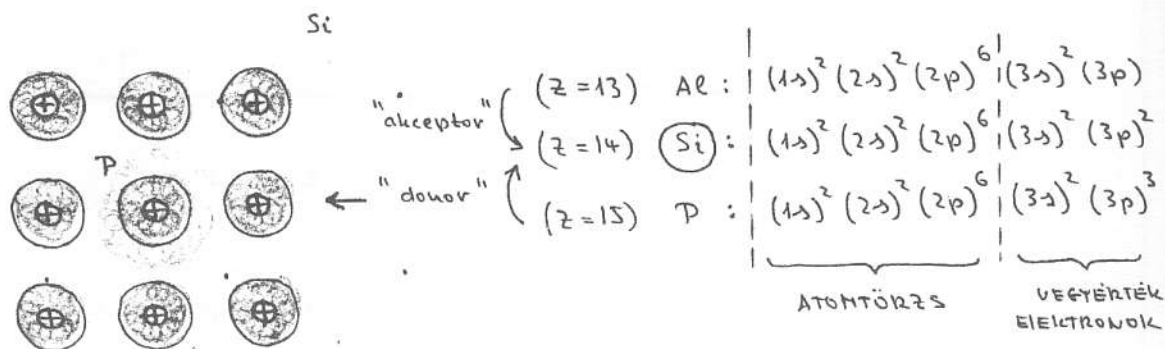
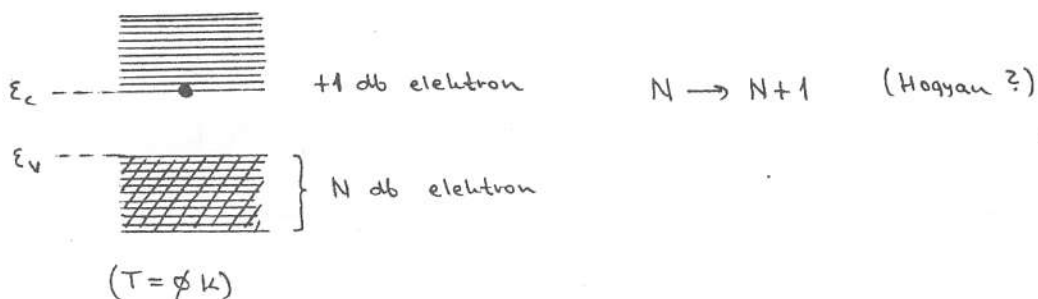
Feltéve, hogy: μ_e, μ_{ly}
állandó



itt már a használt modell nem érvényes ! [Feladat]

$$\lim_{T \rightarrow 0} \sigma(T) = 0$$

ez a "félvezető" elnevezése oka.



$m \rightarrow m^*$ (kristály potenciál hatása)

$\epsilon_0 \rightarrow \epsilon = \epsilon_0 \cdot \epsilon_v$ (elektromos polarizáció)

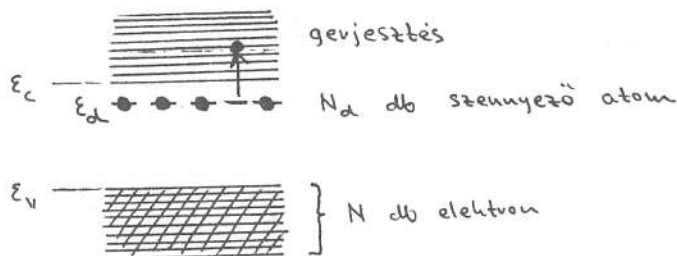
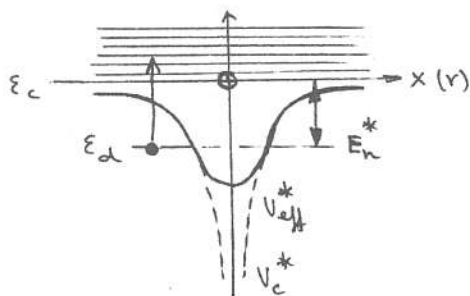
Hidrogén szerű modell:

$$E_n^* = -\frac{E_0^*}{n^2}$$

$$E_0^* = \frac{m^* e^4}{2(4\pi\epsilon_0\epsilon_v)^2 \hbar^2}$$

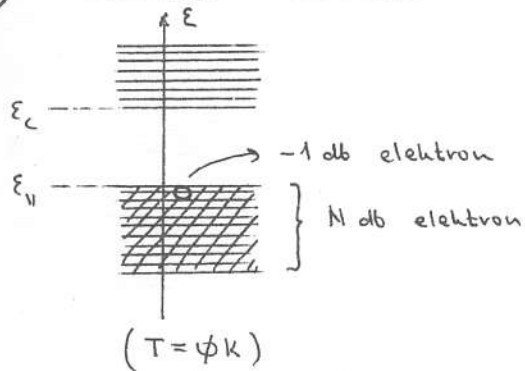
$$E_0^* = \underbrace{\frac{m^*}{m}}_{\sim \frac{1}{400}} \underbrace{\frac{1}{\epsilon_v^2} \cdot E_0}_{13,6\text{ eV}}$$

$$a_0^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_v \frac{\hbar^2}{e^2 m^*} = \underbrace{\epsilon_v}_{\sim 30} \underbrace{\frac{m}{m^*}}_{0,5 \cdot 10^{-10}\text{ m}} \cdot a_0$$



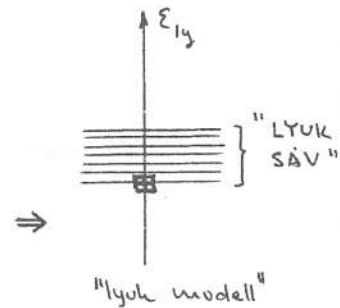
neve: n-típusú félvezető

Akceptor adalekholás

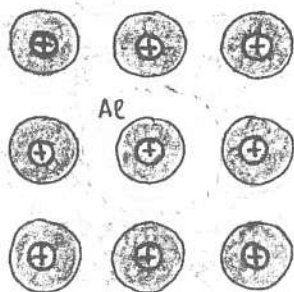


$$N \rightarrow N-1$$

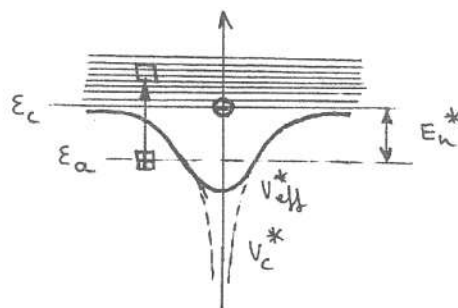
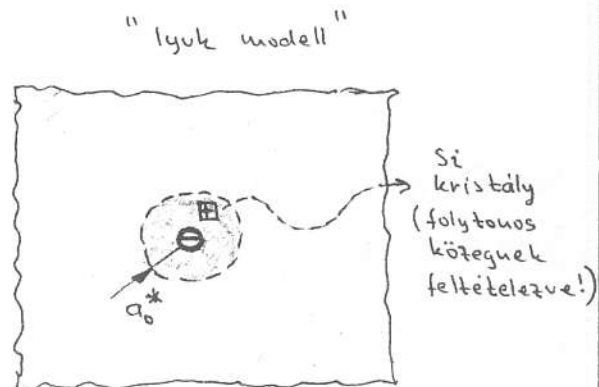
(Hogyan?)



Si

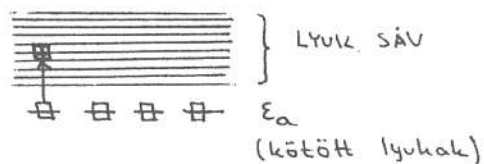
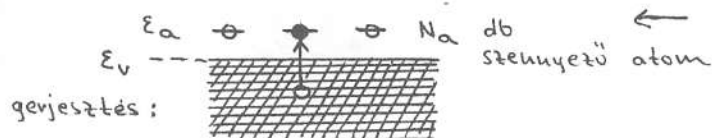
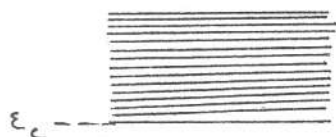


MODELL



$$E_n^* = -\frac{E_0^*}{n^2}$$

$$E_0^* = \frac{m^*}{m} \frac{1}{\epsilon_v^2} E_0 \ll 1$$

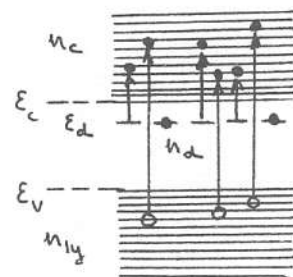
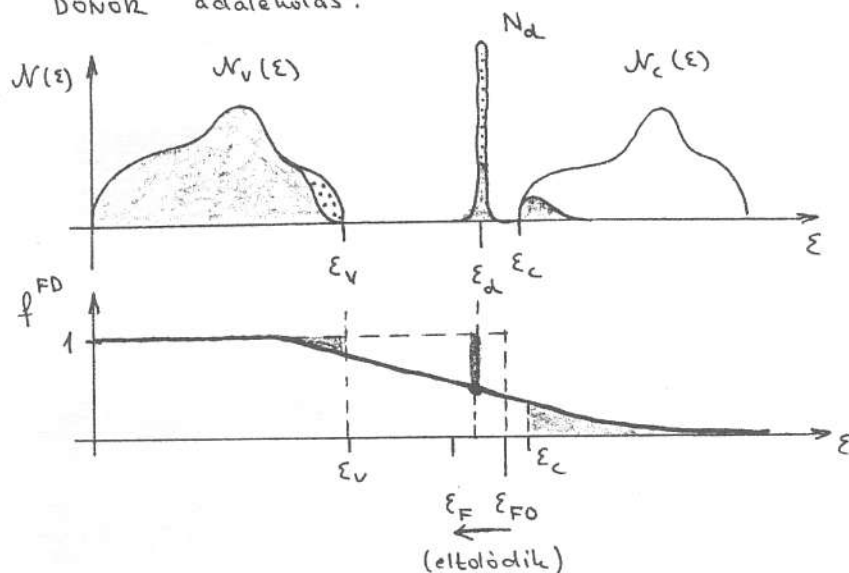


(Az üres lyuk sáv a teljesen betöltött vegértéksávot modellezi)

neve: p-típusú félvezető

Az állapot sűrűség (adalekolt félvezetők)

DONOR adalekoltás:



E_F meghatározása: az elektronok száma nem változik

a donor atomok száma: N_d

a donor szinten lévő elektronok száma: n_d

a donor szintről a vezetési sávba került elektronok száma: $(N_d - n_d)$

Tehát:

$$n_{ly} = n_c - (N_d - n_d)$$

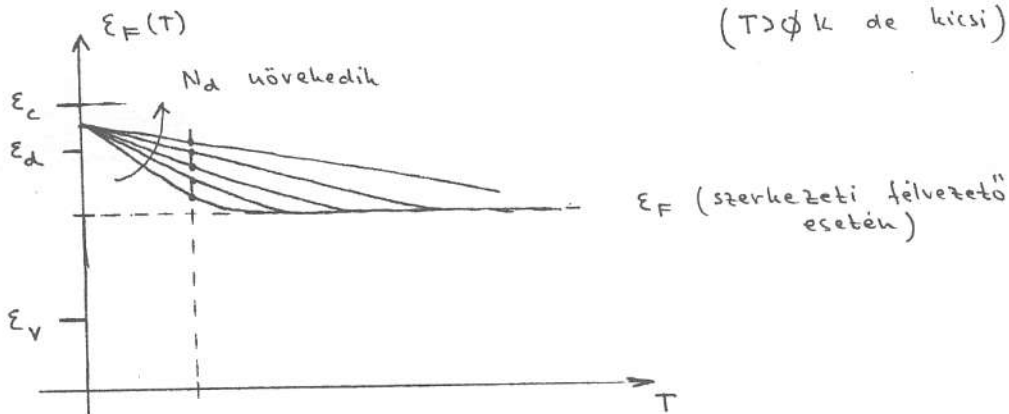
Alacsony hőmérsékleten gyakorlatilag csak a donor nívók ürülnek ki

$$n_{ly} \ll n_c \approx N_d$$

$$N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} = N_d \rightarrow \frac{E_F - E_c}{kT} = \ln \frac{N_d}{N_c}$$

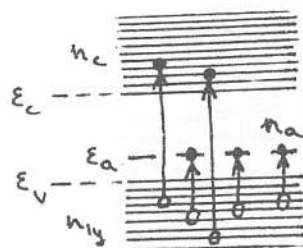
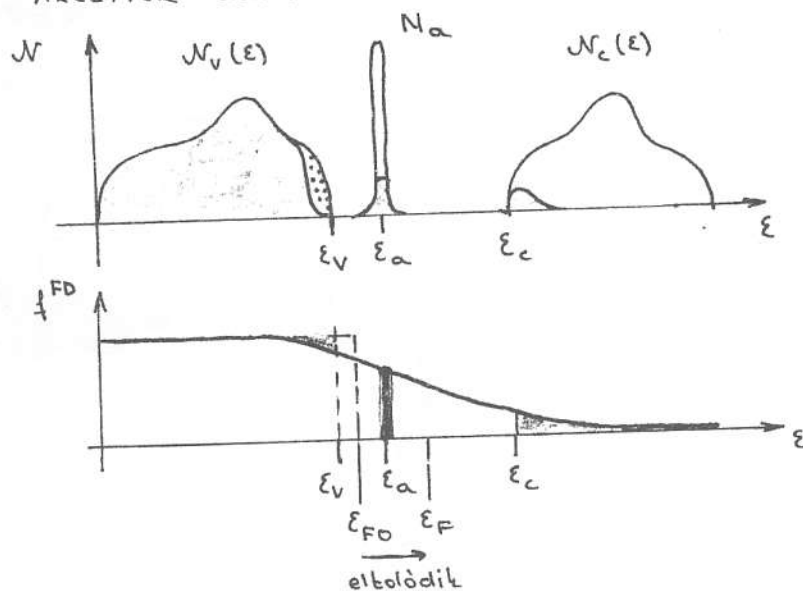
$$E_F = E_c - kT \ln \frac{N_c}{N_d}$$

($T > \phi k$ de kicsi)



41

AKCEPTOR adalékoltás:



Hasonlóan az előzőekhez:

Az elektronok száma nem változik : $n_{ly} = n_a + n_c$

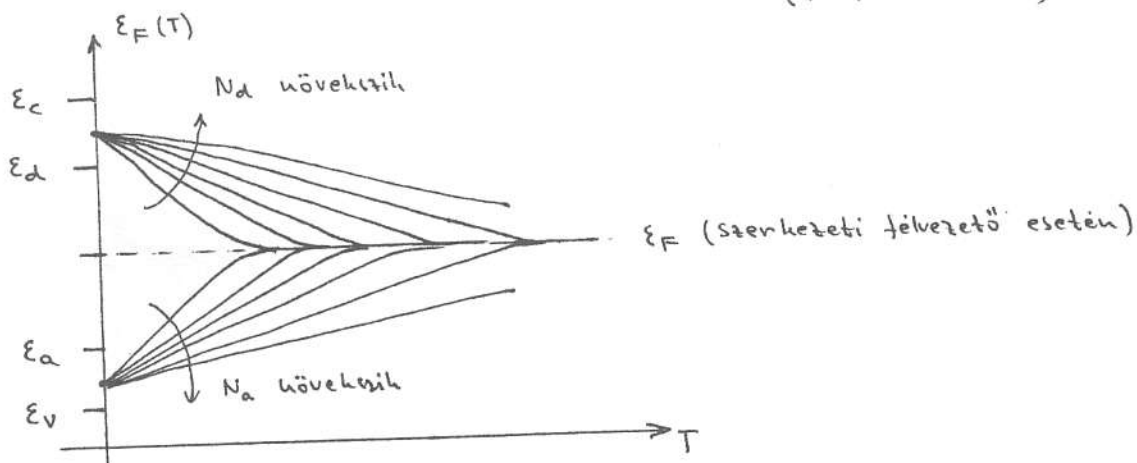
Alacsony hőmérsékleten gyakorlatilag az elektronok csak az akceptor nivóra gerjesztődnek

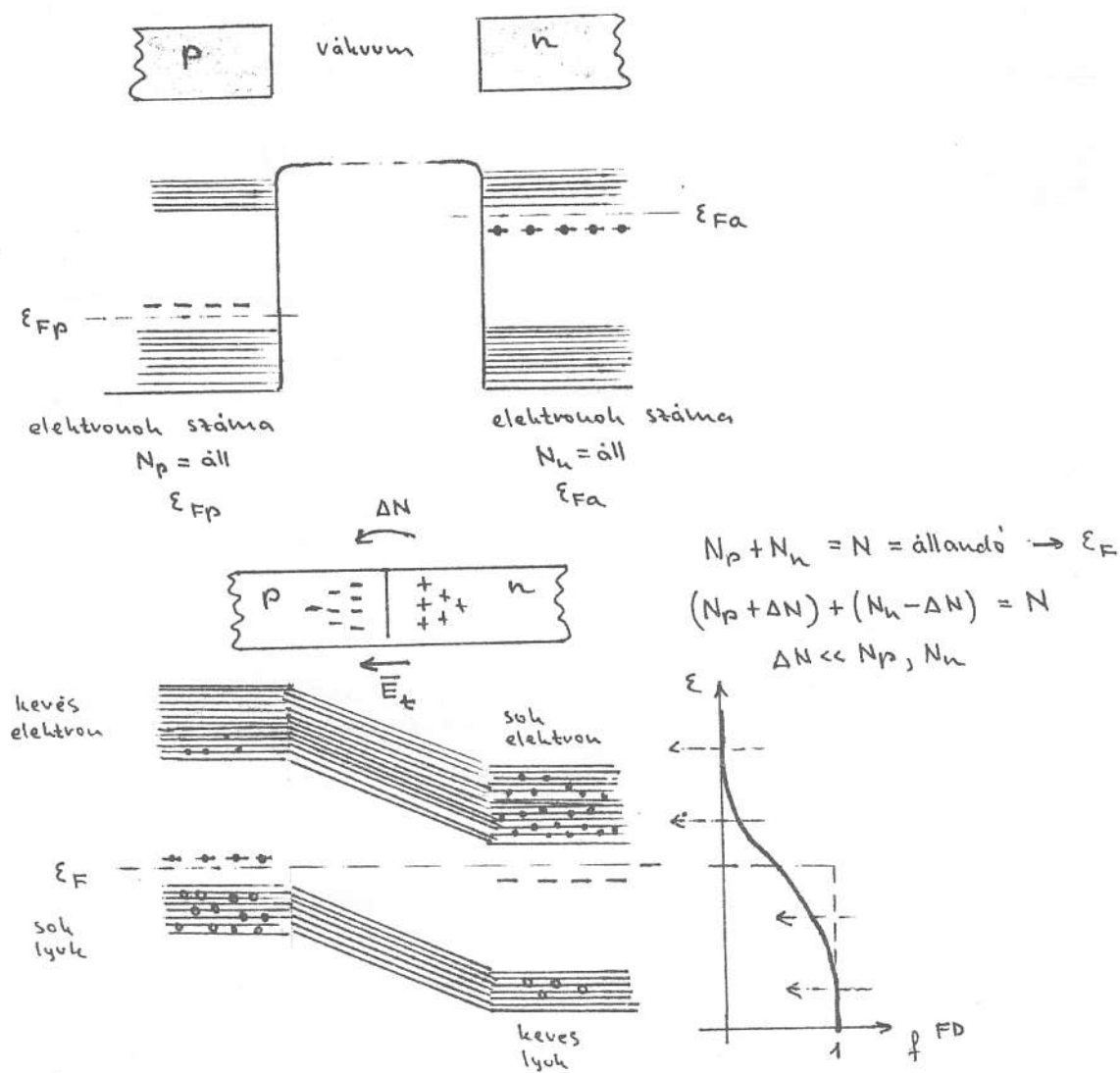
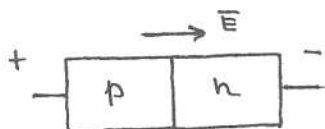
$$n_c \ll n_{ly} \approx N_a$$

$$N_{ly} e^{-\frac{\epsilon_F - \epsilon_v}{kT}} = N_a$$

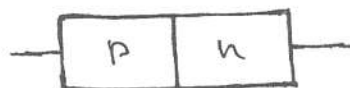
$$\epsilon_F = \epsilon_v + kT \ln \frac{N_{ly}}{N_a}$$

($T > \phi_k$ de kicsi)

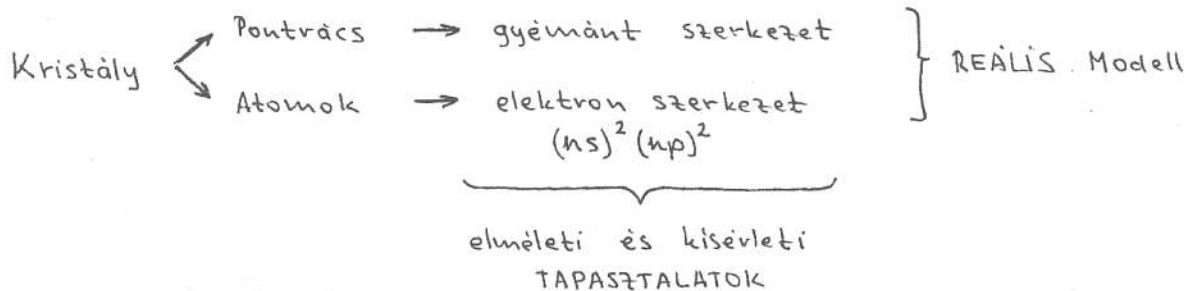


2.7.4. A p-n átmenetNYITÁS :

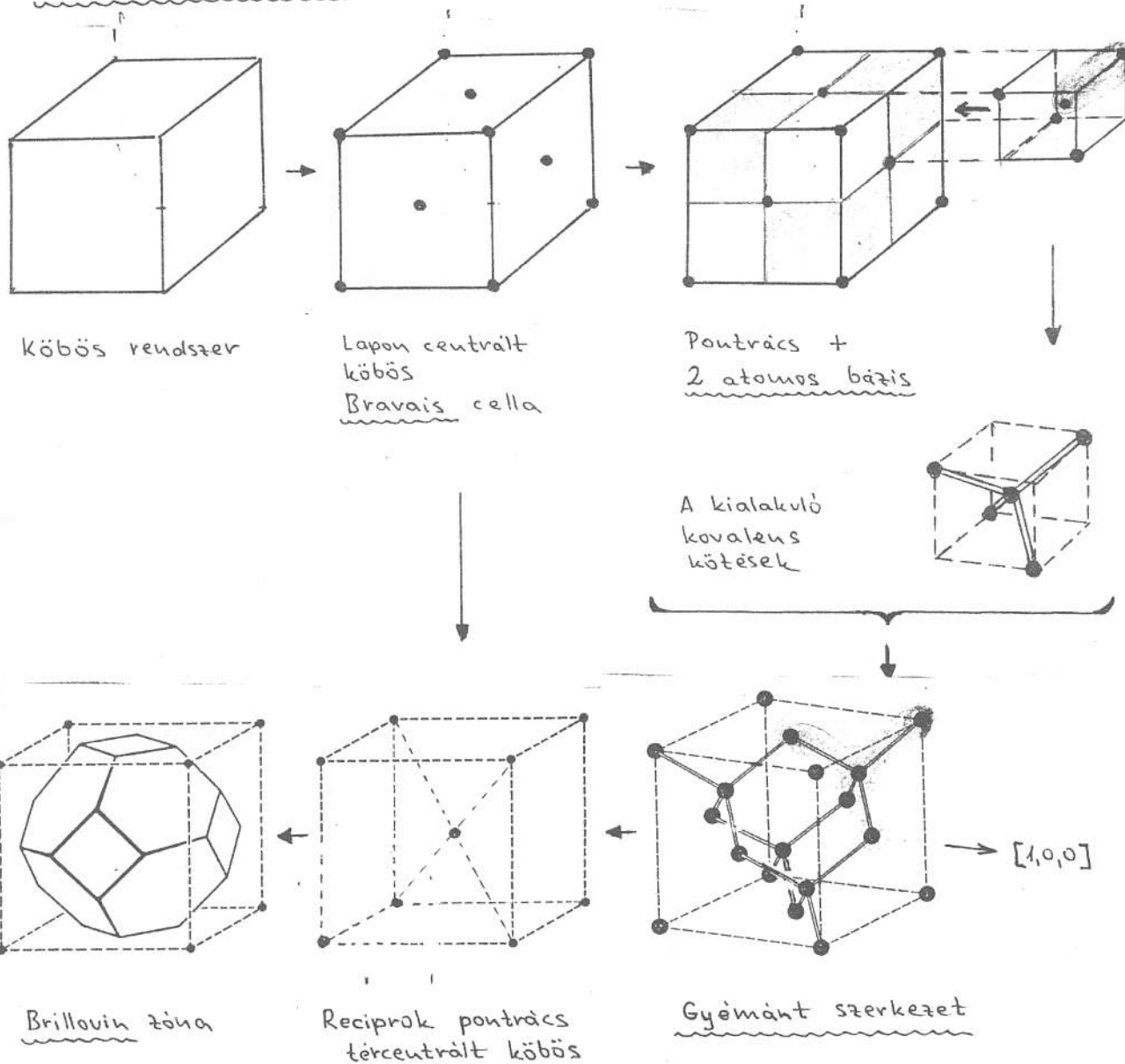
(Feladat)

ZÁRÁS :

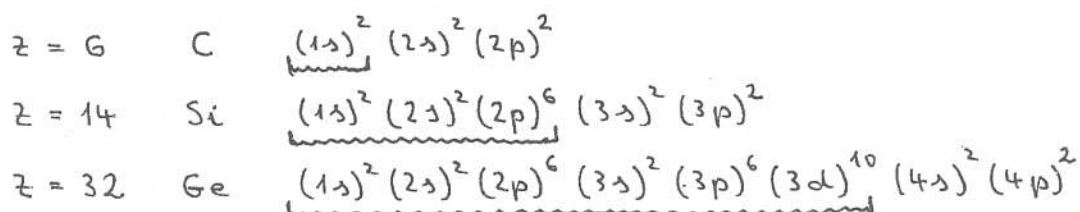
(Feladat)

2.8. Févezető kristályok2.8.1. Általános tulajdonságok

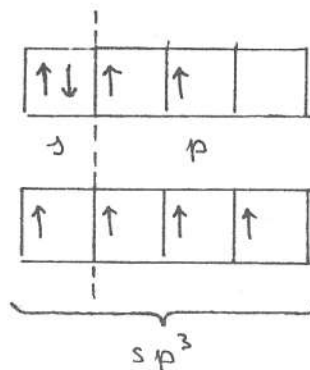
A gyémánt szerkezet:



Feladat: az atomok elhelyezkedése $[1,0,0]$ és $[1,1,1]$ irányokból nézve.

A bázis atomok elektronszerkezete

Általában : $[\text{Atomtörzs}] (ns)^2 (np)^2 \quad (n=2,3,4)$



2 vegyértékű lenne

↓ KÉMIAI TAPASZTALAT

4 vegyértékű

↑ A klasszikus vegyérték fogalom

KVANTUMMECHANIKA →

HIBRID PÁLYÁK →

irányított kovalens kötések

ψ	függvény	jelölés
$\psi_{n,0,0}$	$R_{n,0}$	s
$\psi_{n,1,-1}$	$R_{n,1} \frac{x}{r}$	p_x
$\psi_{n,1,1}$	$R_{n,1} \frac{y}{r}$	p_y
$\psi_{n,1,0}$	$R_{n,1} \frac{z}{r}$	p_z



jelölés	definíció	ψ
h_1	$S + p_x + p_y + p_z$	ψ_{h1}
h_2	$S - p_x - p_y + p_z$	ψ_{h2}
h_3	$S - p_x + p_y - p_z$	ψ_{h3}
h_4	$S + p_x - p_y - p_z$	ψ_{h4}



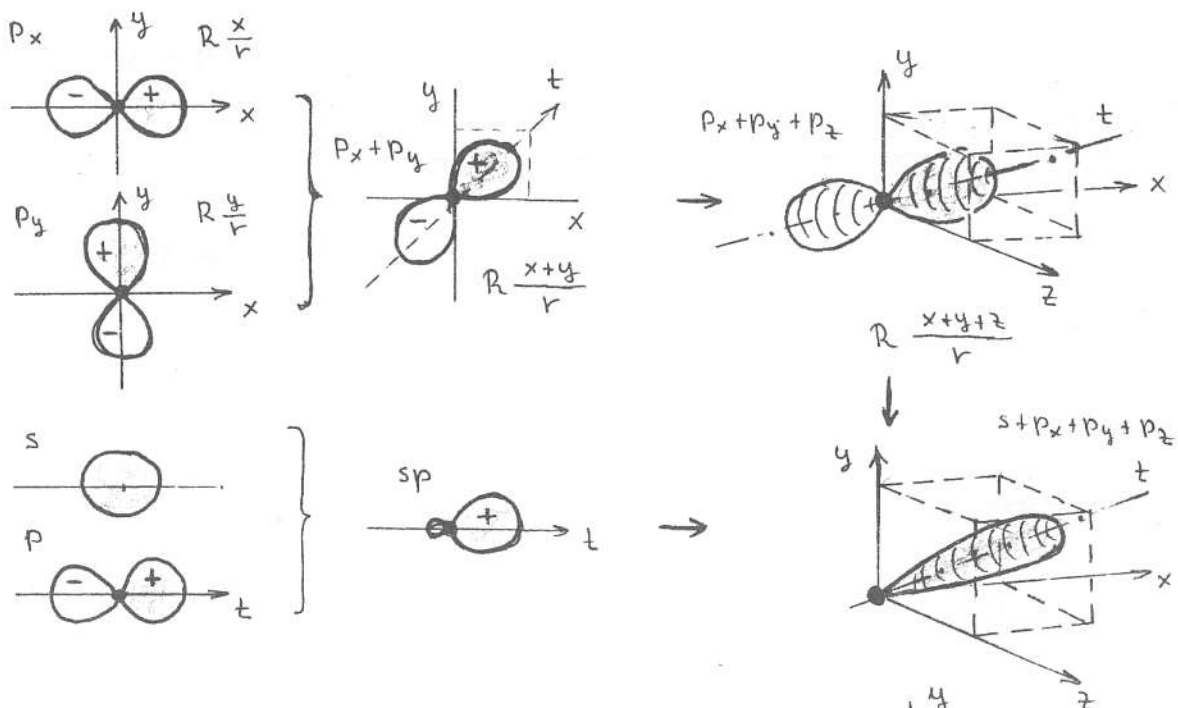
$$R_n = R_n(r)$$

ψ_{h1}	$\frac{1}{12} \left(R_{n,0} + R_{n,1} \cdot \frac{x+y+z}{r} \right)$
ψ_{h2}	
ψ_{h3}	
ψ_{h4}	

45

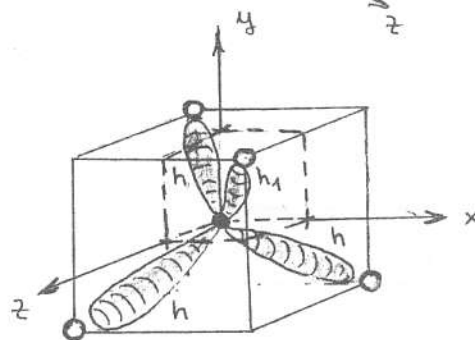
Az sp^3 hibrid pályák ábrázolása

Példa: $h_1 = s + p_x + p_y + p_z \rightarrow \psi_{h_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(R_{n,0} + R_{n,1} \frac{x+y+z}{r} \right)$

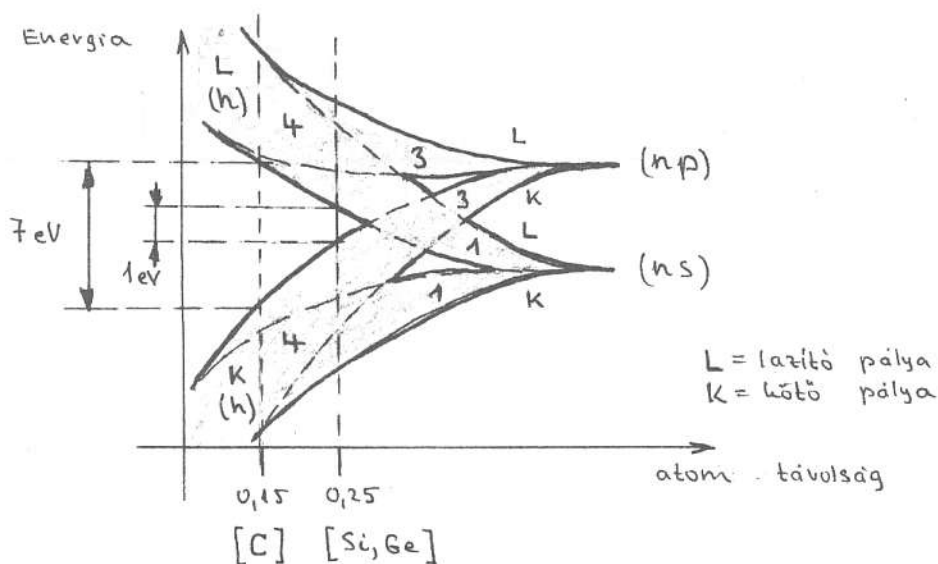


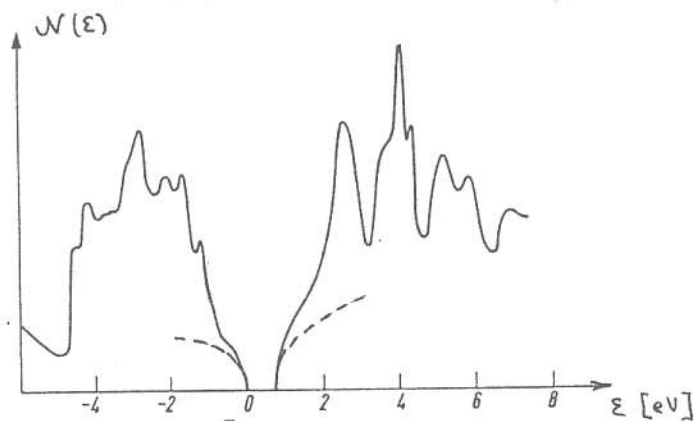
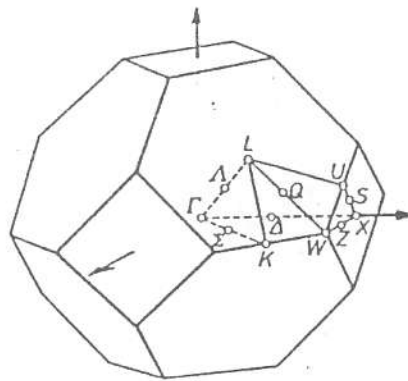
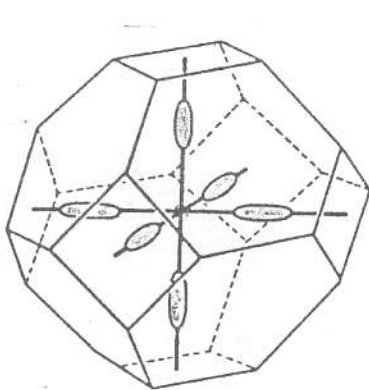
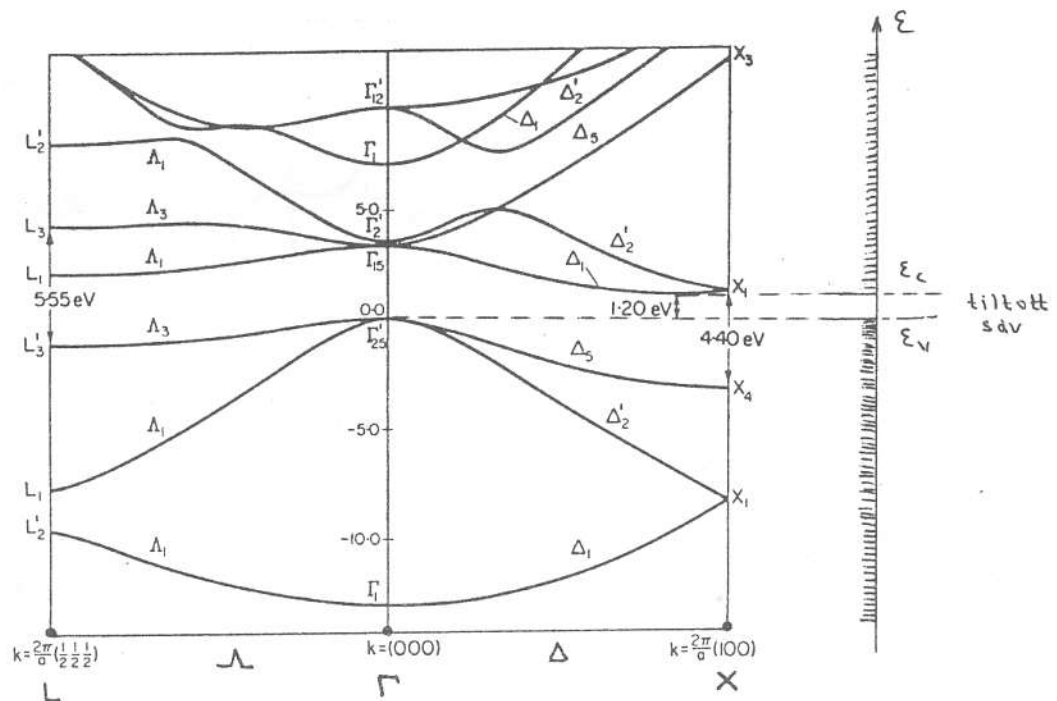
(Feladat: h_2, h_3, h_4)

irányított kovalens
kötések:



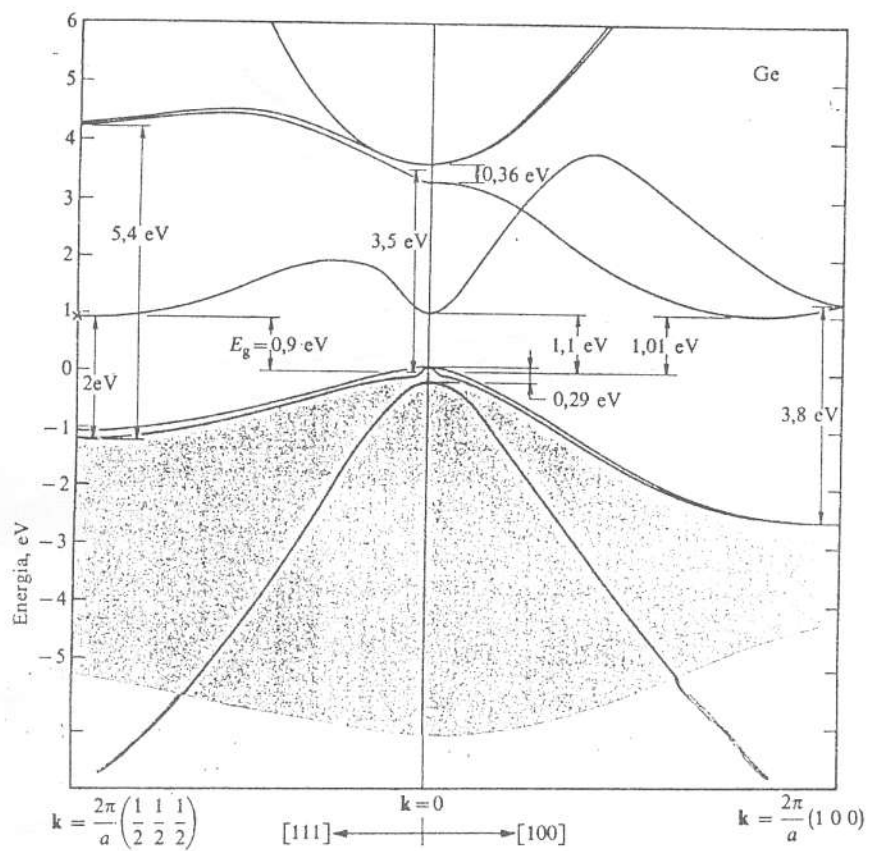
Az energiaszívók kialakulása:



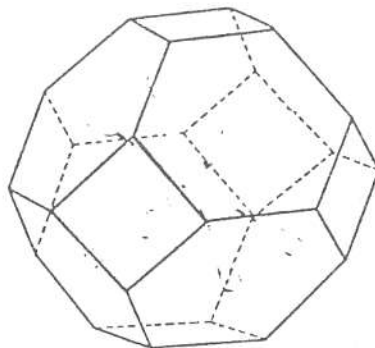
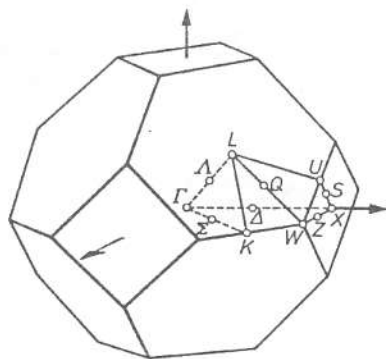
2.8.2. A Szilícium sávszerkezete

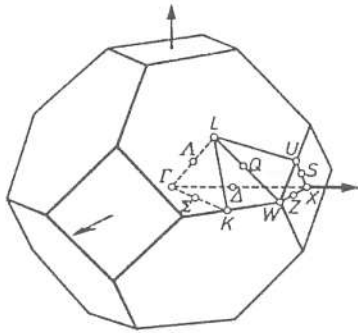
2.8.3. A Germánium sávszerkezete

Feladat:

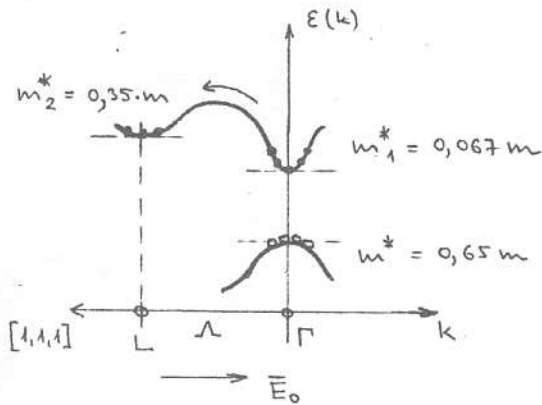


↑ z





A GUNN effektus:



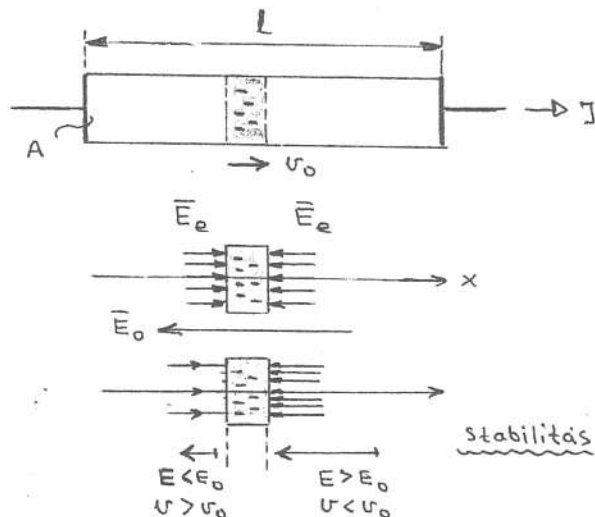
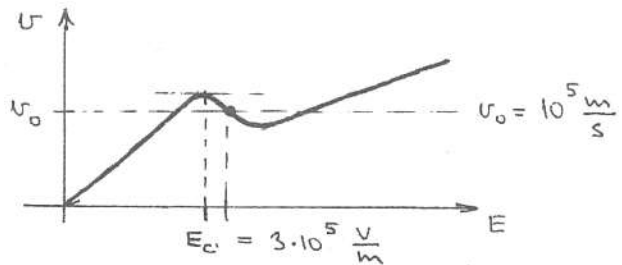
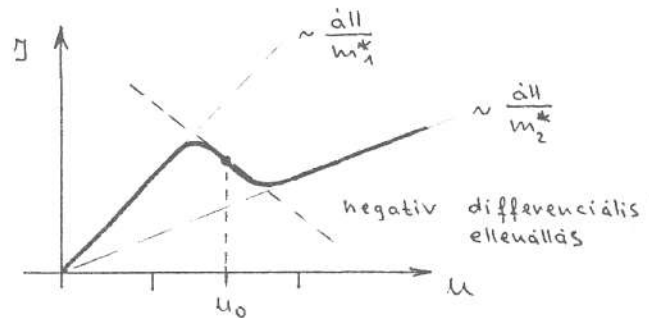
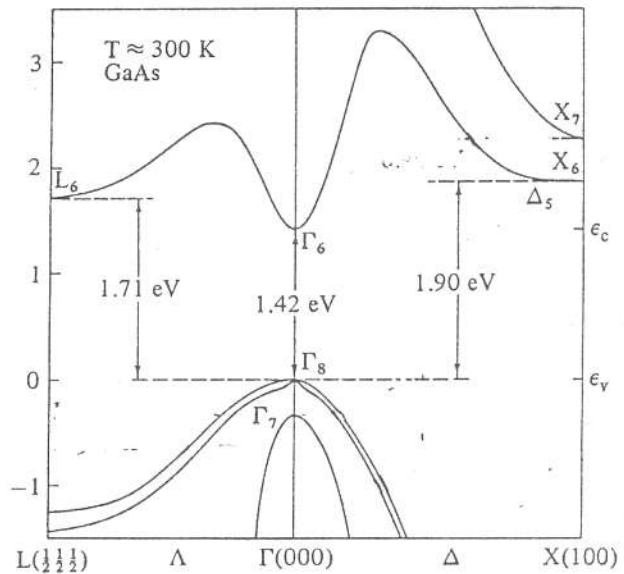
OHM törvény:

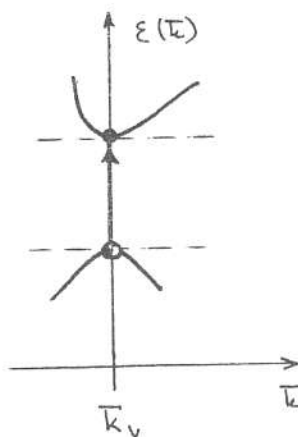
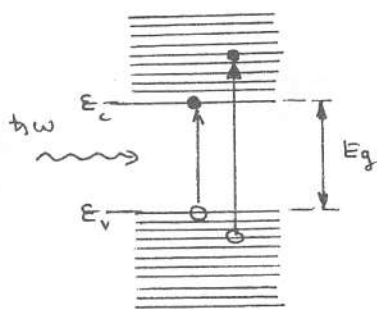
$$j = \frac{U}{R} \sim \sigma \cdot U \sim \frac{\partial j}{\partial U} \cdot U$$

$$\left. \begin{aligned} U &= l \cdot E \\ j &= A \cdot e n v \end{aligned} \right\} \begin{aligned} U &\sim E \\ j &\sim v \end{aligned}$$

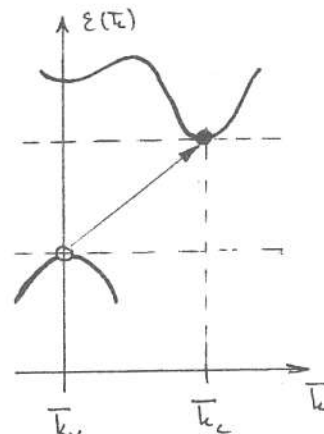
Egy töltéssűrűség tartomány (domén) v_0 sebességgel halad

$$(l = 10 \mu\text{m} \rightarrow \omega = 10 \text{ GHz})$$

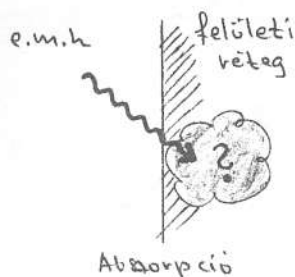




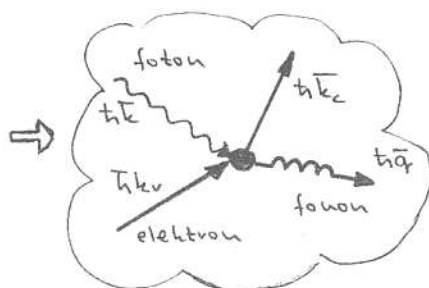
közvetlen
(direkt)
[GaAs]



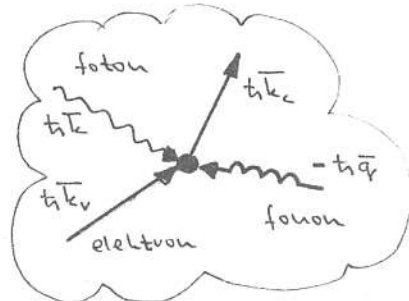
közvetett
(indirekt)
[Si][Ge]



Abszorpció



foton gerjesztés (+)



foton elnyelődés (-)

Az energia megmaradása : $h\omega + \epsilon_v = \epsilon_c \pm h\omega_q$

Az impulzus megmaradása : $h\vec{k} + h\vec{k}_v = h\vec{k}_c \pm h\vec{q}$

$\lambda_{\text{foton}} \gg a_0 \rightarrow k \approx 0$

$h\omega = \epsilon_c - \epsilon_v \pm h\omega_q$

$h\vec{k}_c = h\vec{k}_v \mp h\vec{q}$

A Γ pontban $\vec{k}_v \equiv 0$

$h\omega = E_g \pm h\omega_q$
 $h\vec{k}_c = \mp h\vec{q}$

Direkt átmenetnél :

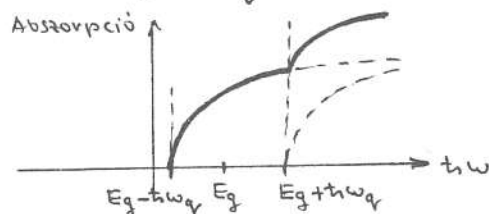
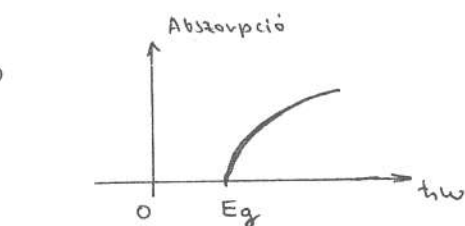
$\vec{k}_c = \vec{k}_v \Rightarrow \vec{q} = 0 \Rightarrow h\omega_q = 0$

$h\omega = E_g \Rightarrow h\omega \geq E_g$

Indirekt átmenetnél :

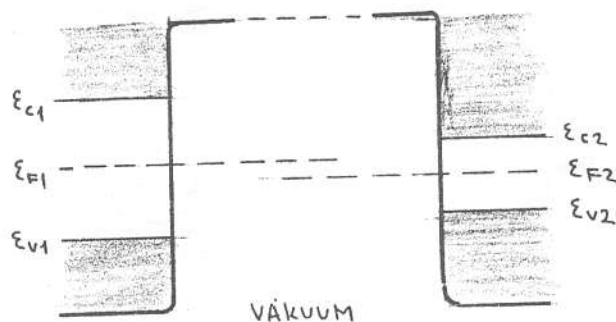
$h\vec{k}_c = \mp h\vec{q}$

$h\omega = E_g \pm h\omega_q \rightarrow h\omega \geq E_g \pm h\omega_q$

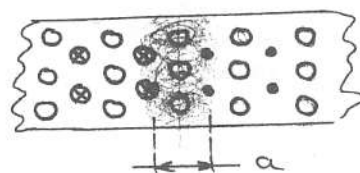
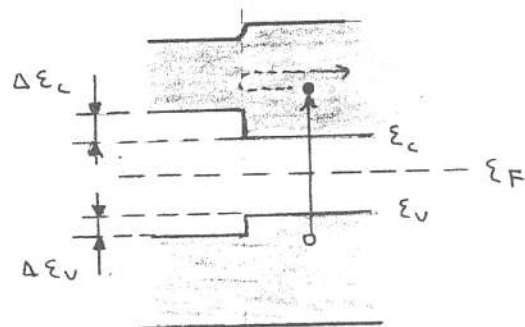
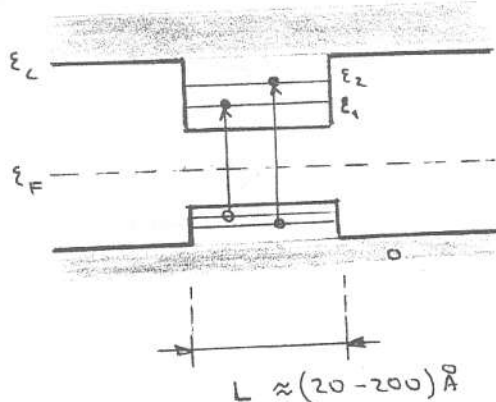
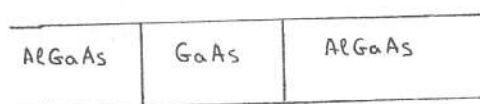


2.10. Mikrostruktúrák : a jövő elektronikája (3)

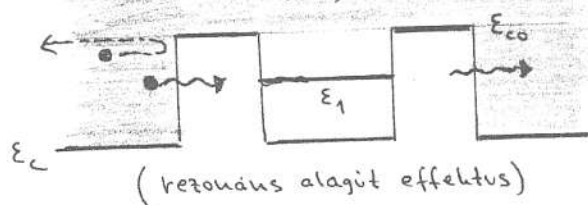
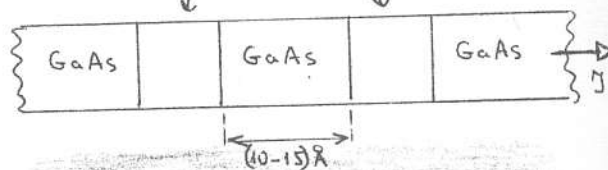
kvantum völgyek : Általános elméleti modell



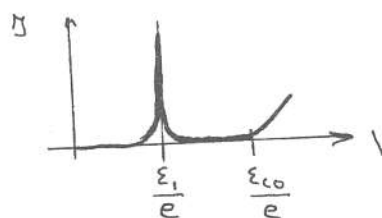
(Két "közel hasonló" félvezető)

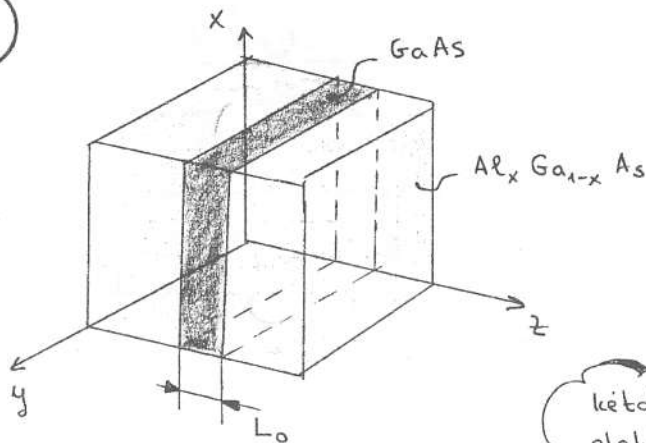
Megvalósítás

(Heterostruktúra)



(rezonáns alagút effektus)





$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \Rightarrow$$

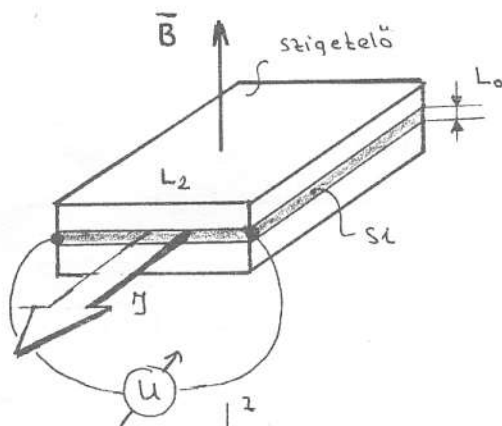
$$\Rightarrow \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2)}_{\text{szabad mozgás}} + \underbrace{\varepsilon_n}_{\text{potenciál völgy}}$$

KÖZELÍTÉS

$$\varepsilon_n \approx \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi n}{L_0} \right)^2 \quad (n=1,2,3)$$

két-dimenziós
elektron-gáz

A kvantált HALL effektus (1980 Klaus von KLITZING)



$$L_0 \approx 100 \text{ Å}$$

$$B \approx 20 \text{ T}$$

$$T \approx 0,01 \text{ K}$$

HALL
effektus

OHM
ellenállás

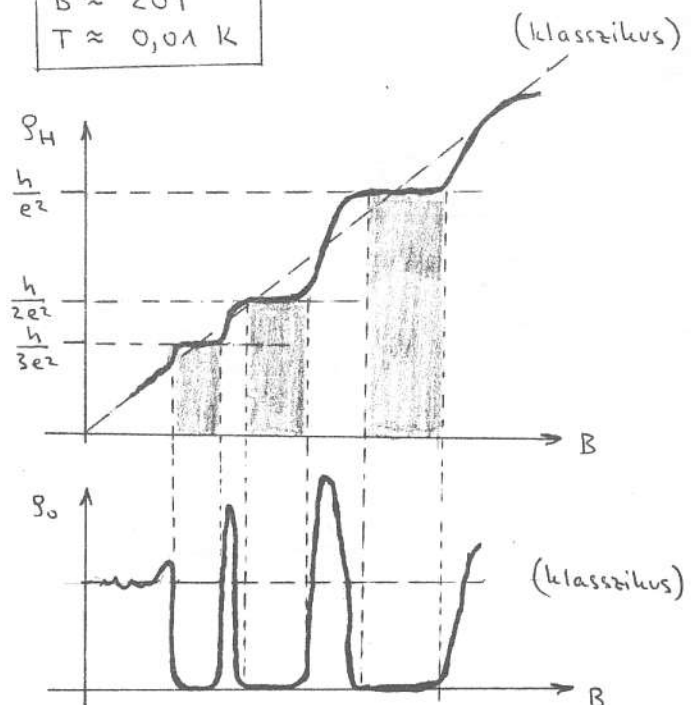
$$U = \frac{B}{en} \cdot \frac{1}{L_0 L_2} \cdot I$$

$$\equiv R_H$$

$$R_H = \frac{h}{ie^2}$$

$$\frac{h}{e^2} = 25812,8 \dots \Omega$$

(8 tizedesjegy pontossággal MÉRHETŐ)



$$i = 1, 2, 3, 4, \dots$$

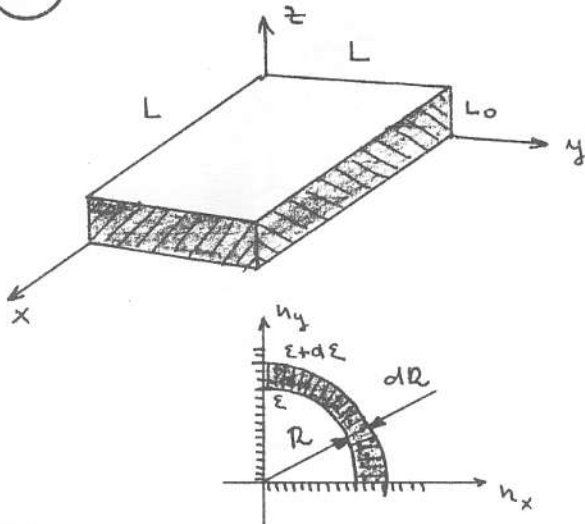
egész számú
HALL effektus

$$l = \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \dots$$

tört számú
HALL effektus

$$\left(\frac{5}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \frac{3}{7} \right)$$

A kvantált Hall effektus elméletének elemei



szabad elektrongáz:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + \varepsilon_n$$

szabad
mozgás
2 dimenzióban

kötött állapot
(potenciál völgy)

(periódikus határfeltétel)

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} (n_x^2 + n_y^2) \equiv E_0 (n_x^2 + n_y^2)$$

$$(n_x, n_y = 1, 2, 3, 4, \dots, N \gg 1)$$

Az állapotsűrűség

$$n_x^2 + n_y^2 = \frac{\varepsilon}{E_0} \equiv R^2$$

$$\rightarrow N(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{4} 2\pi R dR$$

$$R = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{E_0}}$$

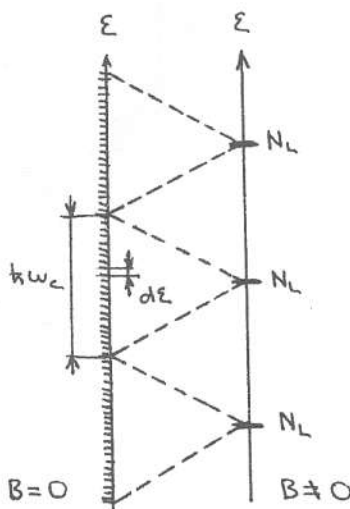
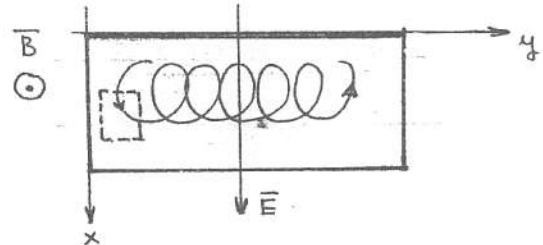
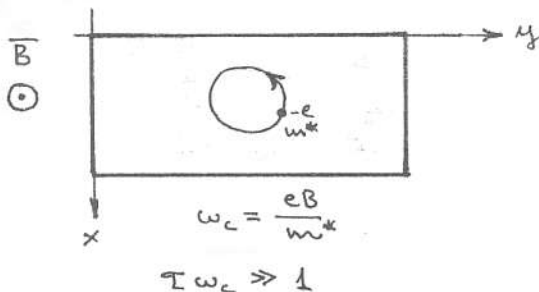
$$dR = \frac{1}{2\sqrt{E_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} d\varepsilon$$

$$N(\varepsilon) = \frac{\pi}{4E_0}$$

A kétdimenziós elektrongáz állapotsűrűsége :

$$N(\varepsilon) = \text{állandó}$$

Külső elektromágneses tér hatása:



Kvantummechanika (LANDAU)

$$\varepsilon = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n=0, 1, 2, \dots)$$

degeneráció:

$$N_L = \underbrace{N(\varepsilon)}_{\text{(állandó!)}} \cdot \hbar \omega_c = \frac{\pi}{4E_0} \frac{\hbar e B}{m^*}$$

A töltéshordozó (elektron) sűrűség:

$$n_L \equiv \frac{N_L}{L^2} = \dots = \frac{eB}{h} \quad (\text{független az energia-szinttől})$$

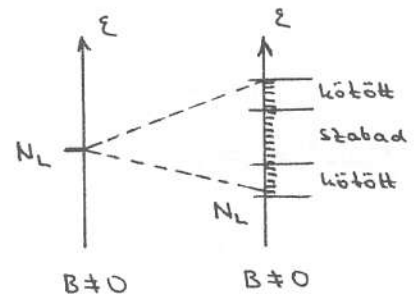
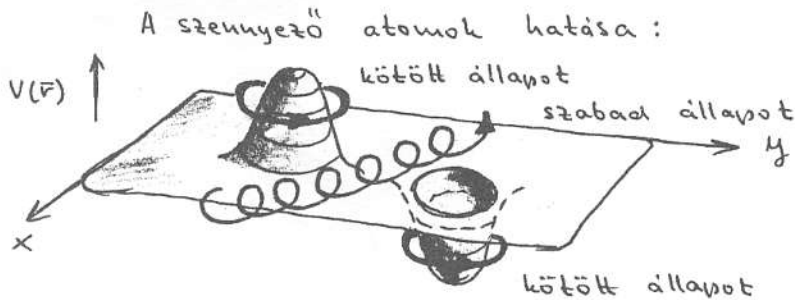
53

Legyen i db Landau nívó betöltve $\rightarrow$
a töltéshordozók (össz) sűrűsége : $n = i \cdot n_L$ ($i=1,2,3,\dots$)

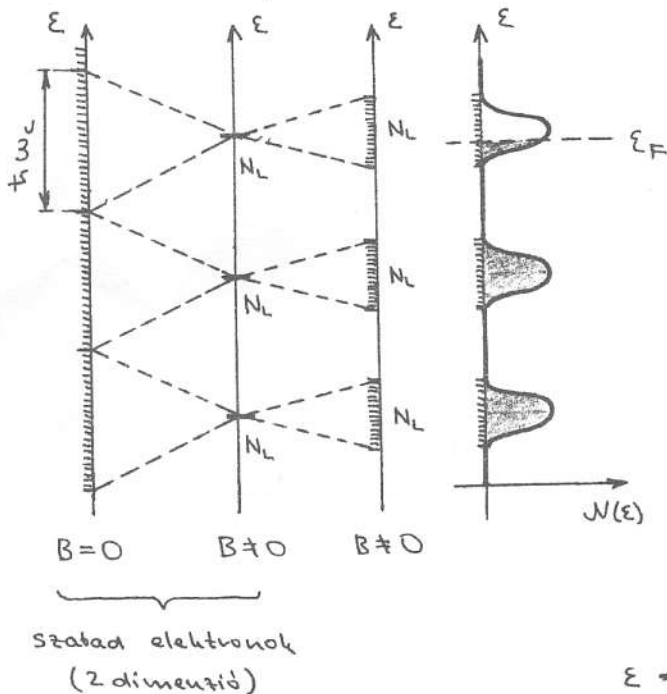
azaz :

$$g_H = \frac{B}{en} = \frac{B}{i e n_L} = \frac{h}{i e^2}$$

de: $i(B) = ?$



Összegezve :



(Fermi szint) $\epsilon_F(B) \rightarrow i(B)$

$\rightarrow$ a teljesen betöltött sávokban
stabil szabad állapotok
 $\downarrow$
szóródás hiánya (Pauli elv)
 $\downarrow$
 $g_0 = 0$

$$B \rightarrow \epsilon_F(B) \rightarrow n(B) \rightarrow g_H(B)$$

