



Az Információ-technika és a Bionika Fizikája

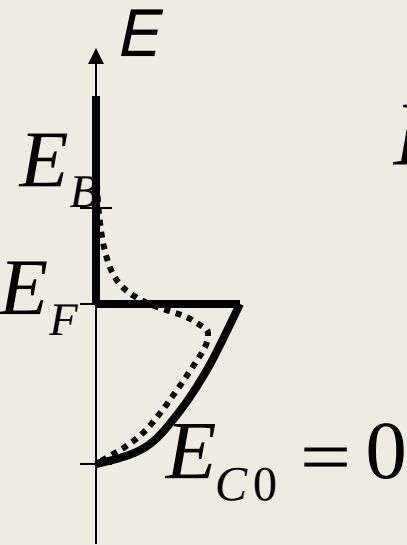
Statisztikus fizika 5

2016 Tavasz

Dr. Csurgay Árpád István

Szilárd anyagok (fémek, szigetelők, félvezetők) – Összefoglalás

Conductors
(fémek)

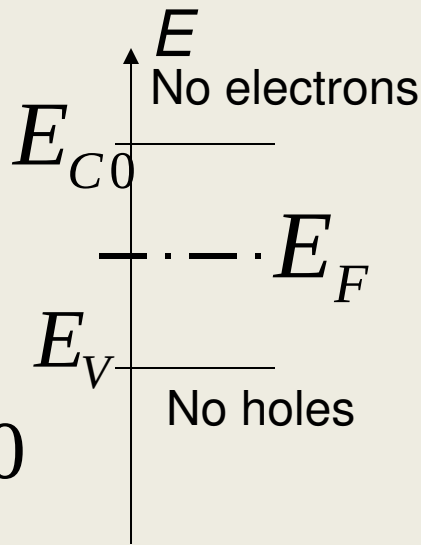


$$E_W = E_B - E_F$$

$$E_{F0} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3}$$

**Sommerfeld
model**

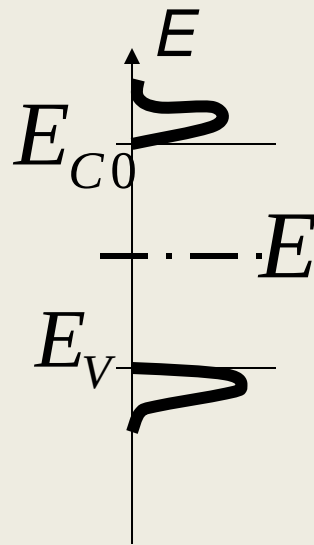
Insulators
(szigetelők)



$$E_F = \frac{E_{C0} + E_V}{2}$$

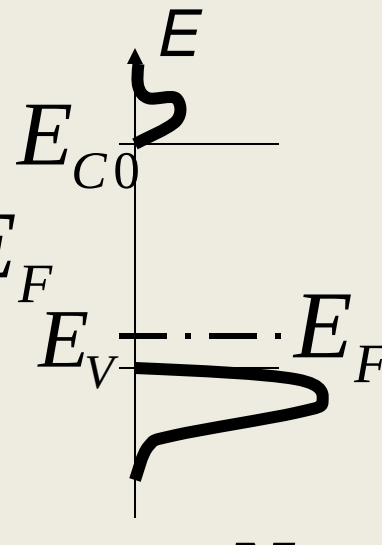
$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{\Delta E}{2k_B T}}$$

Intrinsic



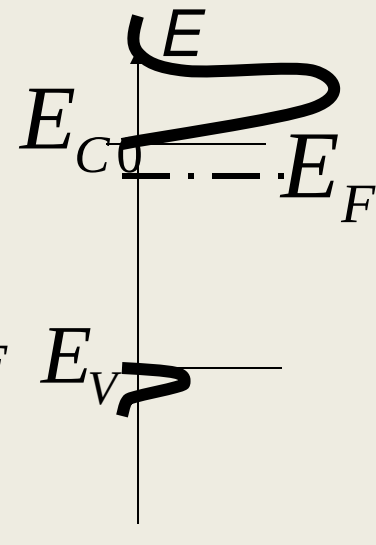
$$n_i = p_i$$

**p – típus
félvezetők**



$$n_p = \frac{n_i^2}{p_p}$$

n – típus



$$p_n = \frac{n_i^2}{n_n}$$

Elektronok mozgása az anyagban elektromos erőterben

‘Effektív tömeg’

Szabad elektronok
(erőmentes térben)

Effektív tömeg = Tömeg

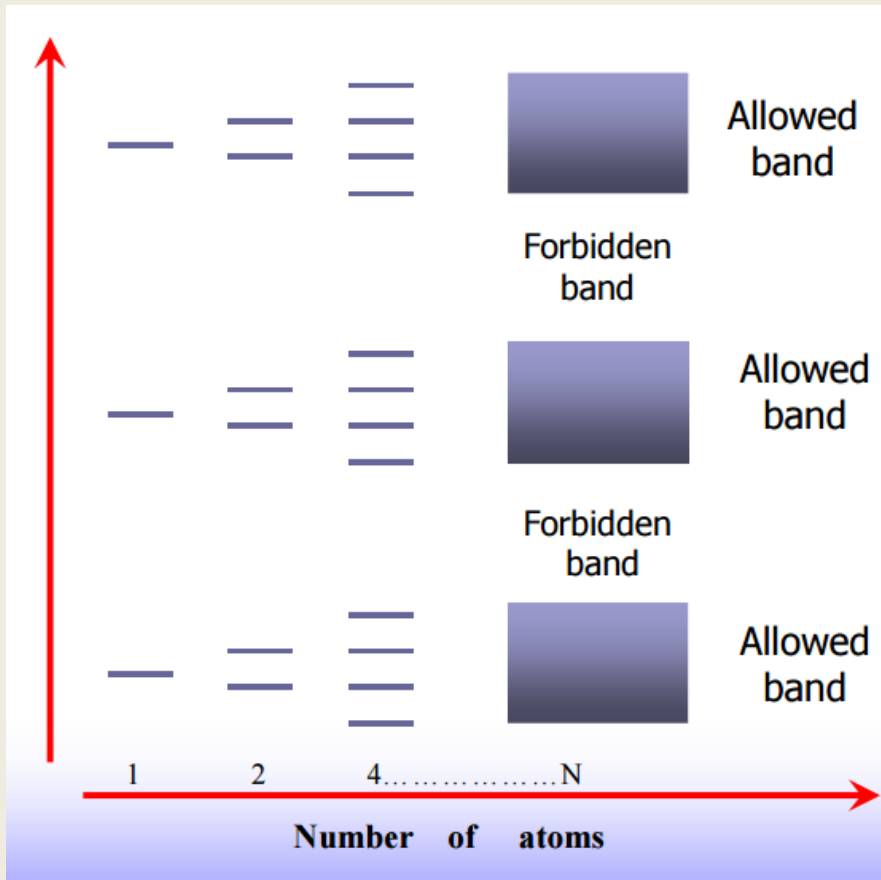
$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad E = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2$$

Elektron hullám $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$

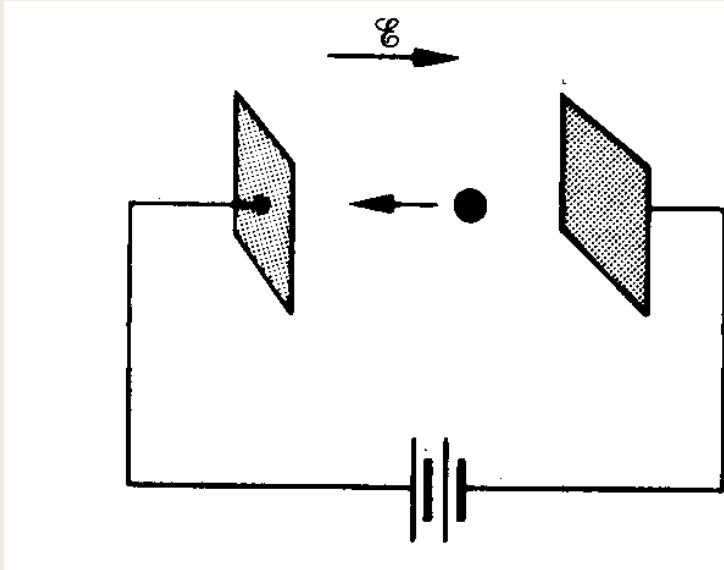
$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 \quad \frac{dE(k)}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} k$$

$$\frac{d^2 E(k)}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}$$

$$m = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E(k)}{dk^2}}$$



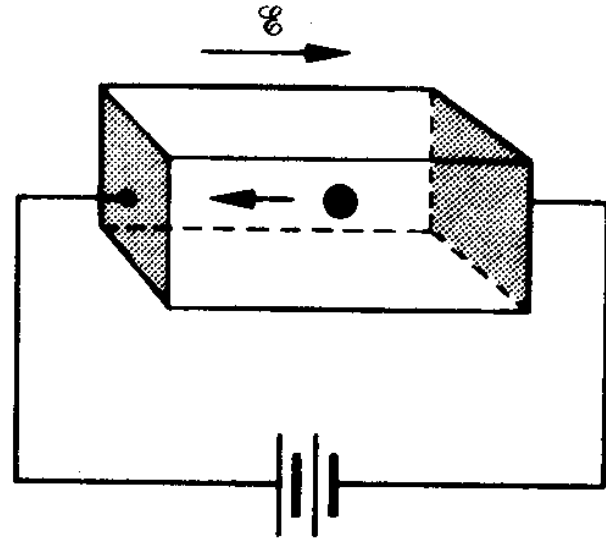
Szabad elektronok
(erőmentes térben)



$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2; \quad m = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E(k)}{dk^2}} = m;$$

Anyag belsejében

$E(k)$ adott



$$\frac{1}{m_{\text{eff}}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E(k)}{dk^2}$$

Egy-dimenzió $E(k)$
Szabad elektronok
(erőmentes térben)

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2; \quad m = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E(k)}{dk^2}};$$

Anyag belsejében $E(k)$ adott

Csoportsebesség
(a sebesség várható értéke)

$$\langle v \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk} = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\frac{dE}{dt} = F \cdot \langle v \rangle = \frac{1}{\hbar} F \cdot \frac{dE}{dk}$$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dk} \frac{dk}{dt} \quad \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} F$$

Három-dimenzió

$$E(\mathbf{k}) = E(k_x, k_y, k_z)$$

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2);$$

Anyag belsejében $E(\mathbf{k})$ adott

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

$$\mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}$$

Az elektron csoportsebessége: $\langle v \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$

A külső erő $F = \hbar \frac{dk}{dt}$

Az elektron gyorsulása:

$$\frac{d\langle v \rangle}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}$$

Gyorsulás = (Külső erő)/Eff. tömeg

$$\frac{d\langle v \rangle}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{m_{\text{eff}}} F$$

$$\frac{1}{m_{\text{eff}}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

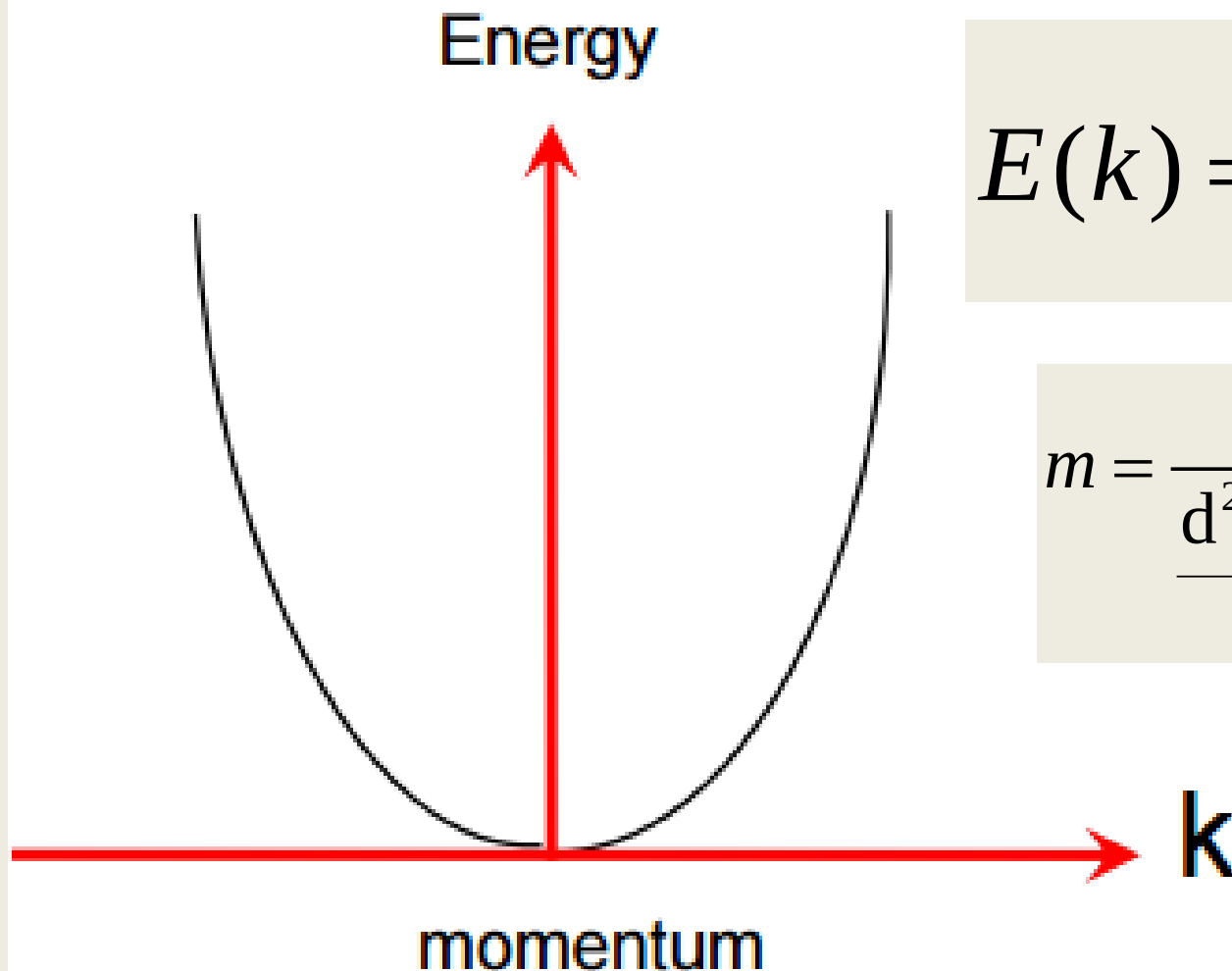
$$\mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \text{grad}_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) = \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{T}_{d\mathbf{k}}^{\text{dgrad}_{\mathbf{k}}} \mathbf{F} \end{aligned}$$

$$(\mathbf{m}_{\text{eff}})^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{bmatrix}$$

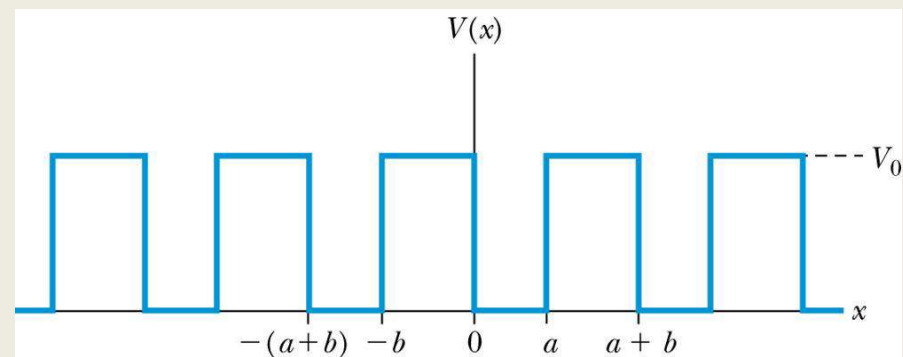
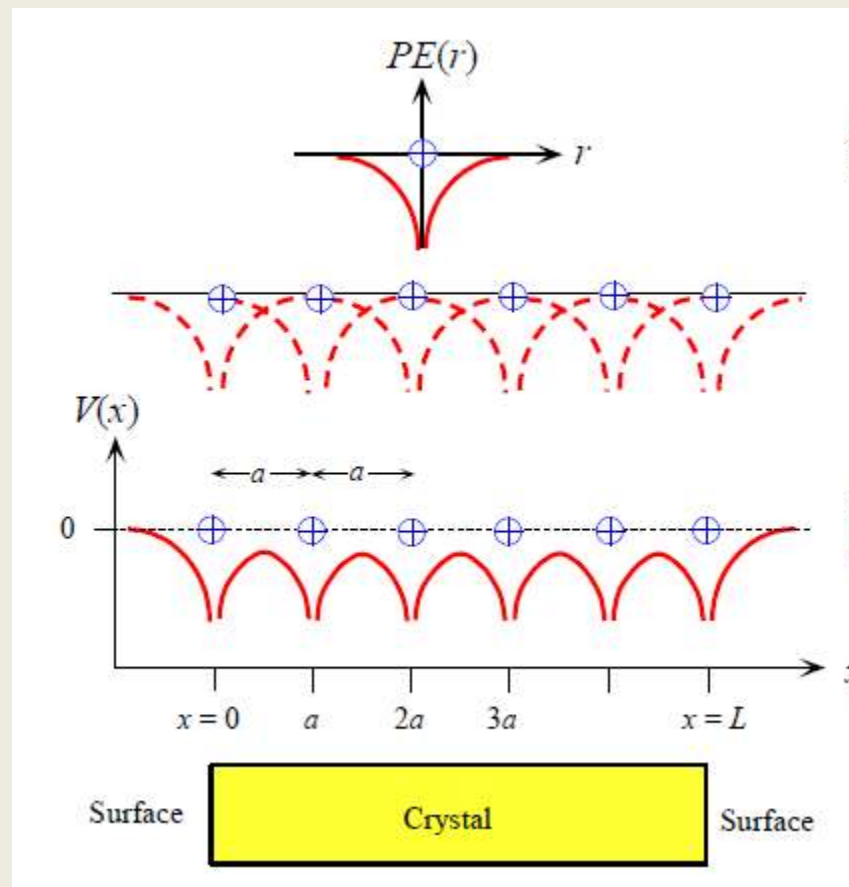
Szabad elektronok (erőmentes tér)

Effektív tömeg = Tömeg



$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2;$$

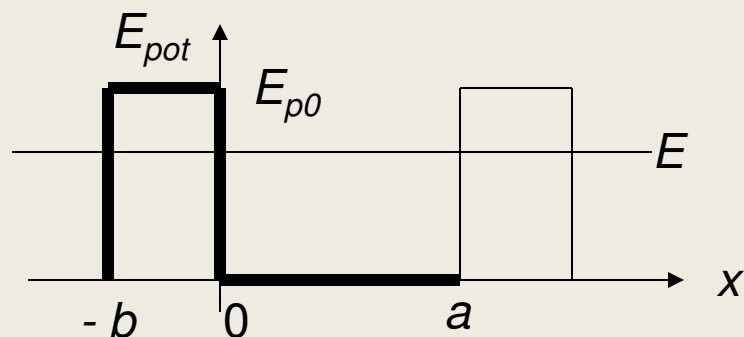
$$m = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E(k)}{dk^2}} = m;$$



Egy-elektron egy-dimenziós periodikus potenciál térben

Egy-dimenziós „kristály”

Egy periódus:



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - E_p(x)] \psi = 0$$

$$E_p(x) = \begin{cases} E_{p0} & \text{if } -b < x < 0 \\ 0 & \text{if } 0 < x < a \end{cases}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x} & \text{ha } -b < x < 0 \\ Ce^{j\alpha x} + De^{-j\alpha x} & \text{ha } 0 < x < a \end{cases} \quad \beta = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E_{p0} - E}$$

Bloch függvény $\psi(x) = u_k(x) e^{jkx}$ $\alpha = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E}$

$$u_k(x) = \begin{cases} Ae^{(\beta - jk)x} + Be^{-(\beta + jk)x} & \text{if } -b < x < 0 \\ Ce^{j(\alpha - k)x} + De^{-j(\alpha + k)x} & \text{if } 0 < x < a \end{cases}$$

$$u_k(x) = \begin{cases} Ae^{(\beta-jk)x} + Be^{-(\beta+jk)x} & \text{if } -b < x < 0 \\ Ce^{j(\alpha-k)x} + De^{-j(\alpha+k)x} & \text{if } 0 < x < a \end{cases}$$

Az A, B, C és D konstansokat az alábbi folytonossági feltételekből határozhatjuk meg:

$$u_{k1} \Big|_{x=0} = u_{k2} \Big|_{x=0}, \quad \text{azaz} \quad A+B=C+D,$$

$$\left. \frac{du_{k1}(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{du_{k2}(x)}{dx} \right|_{x=0}, \rightarrow (\beta-jk)A - (\beta+jk)B = j(\alpha-k)C - j(\alpha+k)D \Bigg\}$$

$$u_{k1} \Big|_{x=a} = u_{k2} \Big|_{x=-b}, \rightarrow Ae^{-(\beta-jk)b} + Be^{(\beta+jk)b} = Ce^{j(\alpha-k)a} + De^{-j(\alpha+k)a}, \Bigg\}$$

$$\left. \frac{du_{k1}(x)}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{du_{k2}(x)}{dx} \right|_{x=-b} \rightarrow (\beta-jk)Ae^{-(\beta-jk)b} - (\beta+jk)Be^{(\beta+jk)b} = \left. \begin{aligned} &= j(\alpha-k)Ce^{j(\alpha-k)a} - j(\alpha+k)De^{-j(\alpha+k)a} \end{aligned} \right\}$$

$$A + B = C + D,$$

$$j(\alpha - k)C - j(\alpha + k)D = (\beta - jk)A - (\beta + jk)B$$

$$Ae^{-(\beta - jk)b} + Be^{(\beta + jk)b} = Ce^{j(\alpha - k)a} + De^{-j(\alpha + k)a}, \}$$

$$(\beta - jk)Ae^{(\beta - jk)b} - (\beta + jk)Be^{(\beta + jk)b} = j(\alpha - k)Ce^{j(\alpha - k)a} - j(\alpha + k)De^{-j(\alpha + k)a} \}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ j(\alpha - k) & -j(\alpha + k) & -(\beta - jk) & +(\beta + jk) \\ e^{j(\alpha - k)a} & e^{-j(\alpha + k)a} & -e^{-(\beta - jk)b} & -e^{(\beta + jk)b} \\ (\beta - jk)e^{-(\beta - jk)b} & -(\beta + jk)e^{-(\beta + jk)b} & -j(\alpha - k)e^{j(\alpha - k)a} & +j(\alpha + k)e^{-j(\alpha + k)a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{bmatrix} = 0$$

Tiviális megoldás: $A = B = C = D = 0$ Nincs elektron a kristályban

Elektron csak akkor lehet a kristályban, ha a determináns nulla (van nem triviális megoldás)

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ j(\alpha-k) & -j(\alpha+k) & -(\beta-jk) & +(\beta+jk) \\ e^{j(\alpha-k)a} & e^{-j(\alpha+k)a} & -e^{-(\beta-jk)b} & -e^{(\beta+jk)b} \\ j(\alpha-k)e^{j(\alpha-k)a} & -j(\alpha+k)e^{-j(\alpha+k)a} & -(\beta-jk)e^{-(\beta-jk)b} & +(\beta+jk)e^{-(\beta+jk)b} \end{vmatrix} = 0$$

$$\frac{(j\beta)^2 - \alpha^2}{2j\alpha\beta} \text{sh } j\beta b \sin \alpha a + \text{ch } j\beta b \cos \alpha a = \cos k(a+b)$$

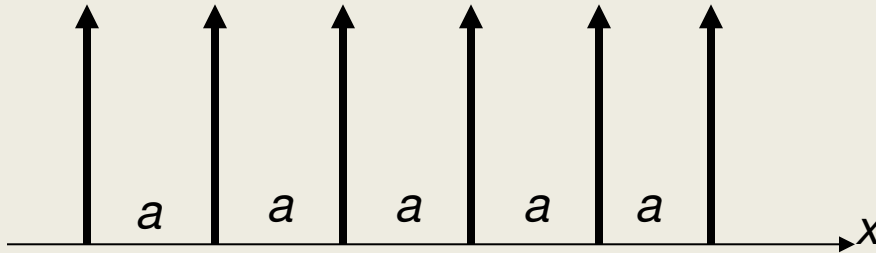
Tartson $E_{p0} \rightarrow \infty$; és $b \rightarrow 0$, de úgy, hogy $\lim_{\substack{E_{p0} \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \frac{\beta^2 ab}{2} = \delta$

$$\beta b = \sqrt{\frac{\beta^2 ab}{2}} \sqrt{\frac{2}{ab}} b = \delta \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{b} \rightarrow 0 \quad \text{ch } \beta b \cos \alpha a \rightarrow \cos \alpha a$$

$$\cos ka = \delta \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a$$

Tartson $E_{p0} \rightarrow \infty$; és $b \rightarrow 0$, de úgy, hogy

$$\lim_{\substack{E_{p0} \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \frac{\beta^2 ab}{2} = \delta$$

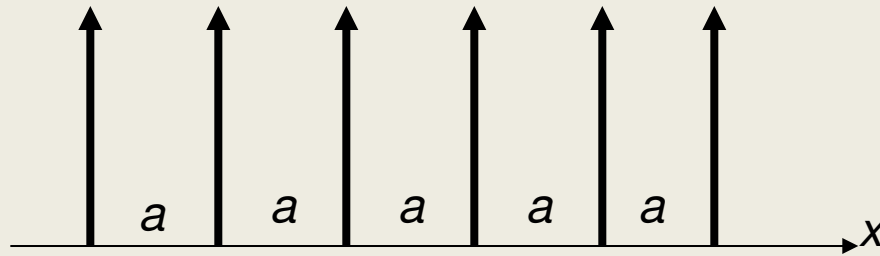


$$\beta b = \sqrt{\frac{\beta^2 ab}{2}} \sqrt{\frac{2}{ab}} b = \delta \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{b} \rightarrow 0$$

$$\frac{(j\beta)^2 - \alpha^2}{2j\alpha\beta} \text{sh } j\beta b \sin \alpha a + \text{ch } j\beta b \cos \alpha a = \cos k(a+b)$$

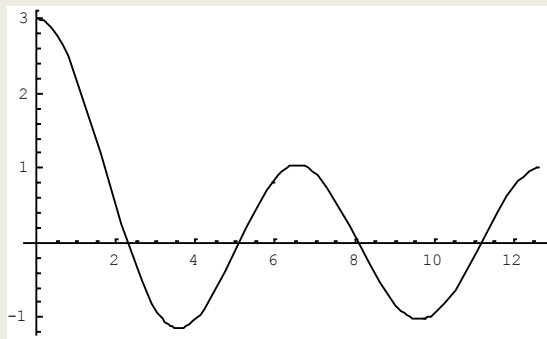
$$\cos ka = \delta \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a$$

$$\cos ka = \delta \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a$$



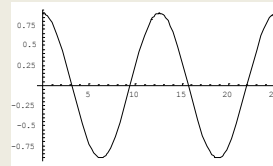
a Periódus a kristály „RÁCSTÉRBEN”

$$\delta \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a$$



αa

$\cos ka$



ka

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E}$$

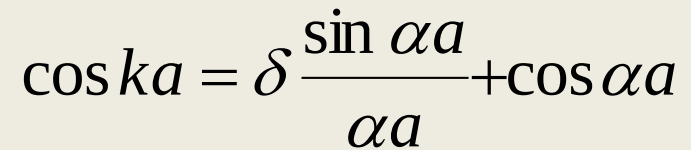
$$\delta > 0$$

$$e^{\pm jkx} \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}$$

Ha a diszperziós reláció

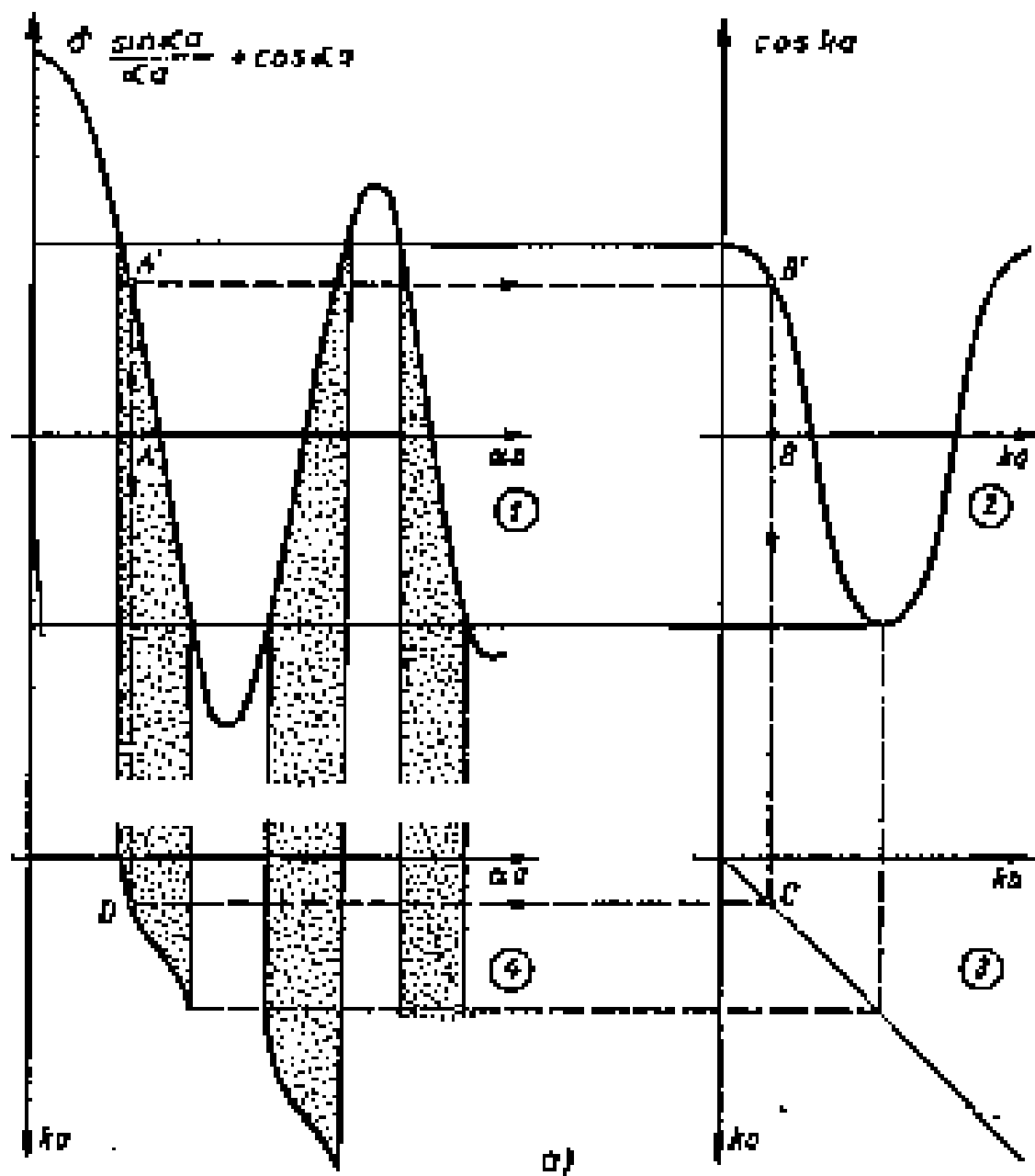
$$\cos ka = \delta \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a$$

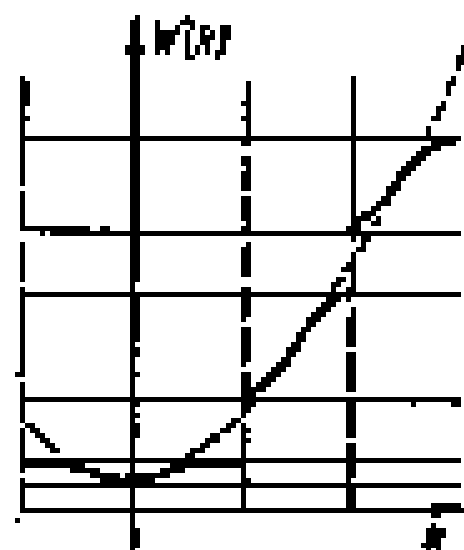
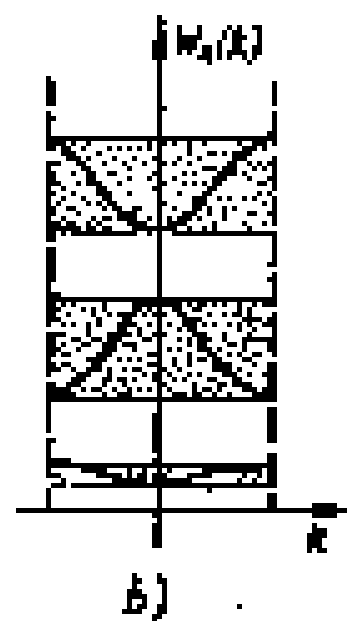
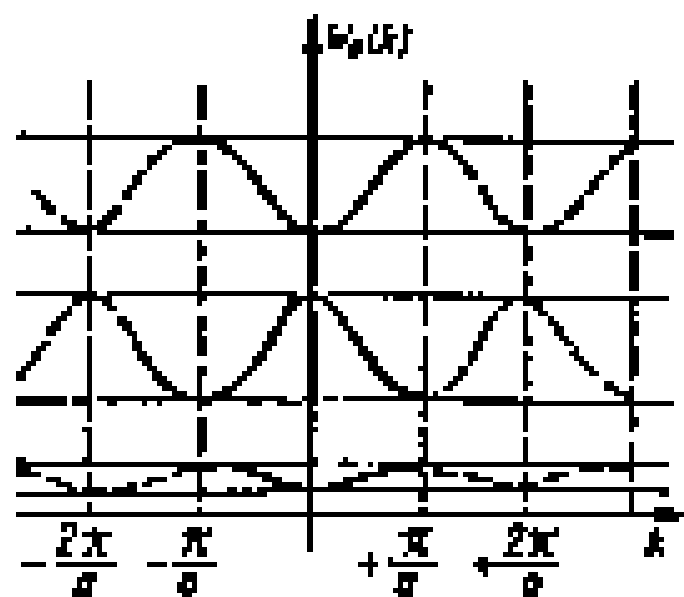
Nem teljesül, akkor
nincs elektron a
kristályban!



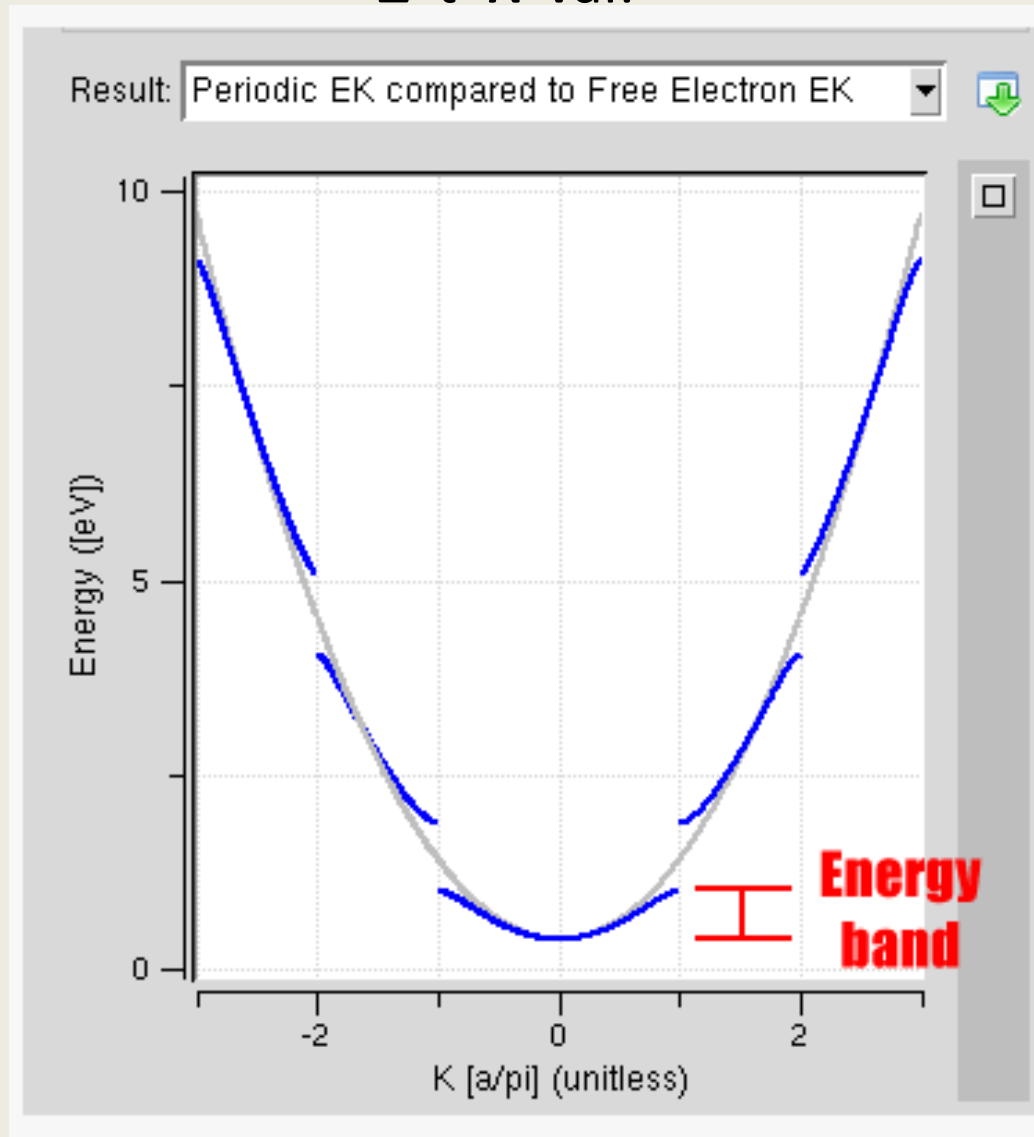
A transzcendens egyenletet oldjuk meg szerkesztéssel::







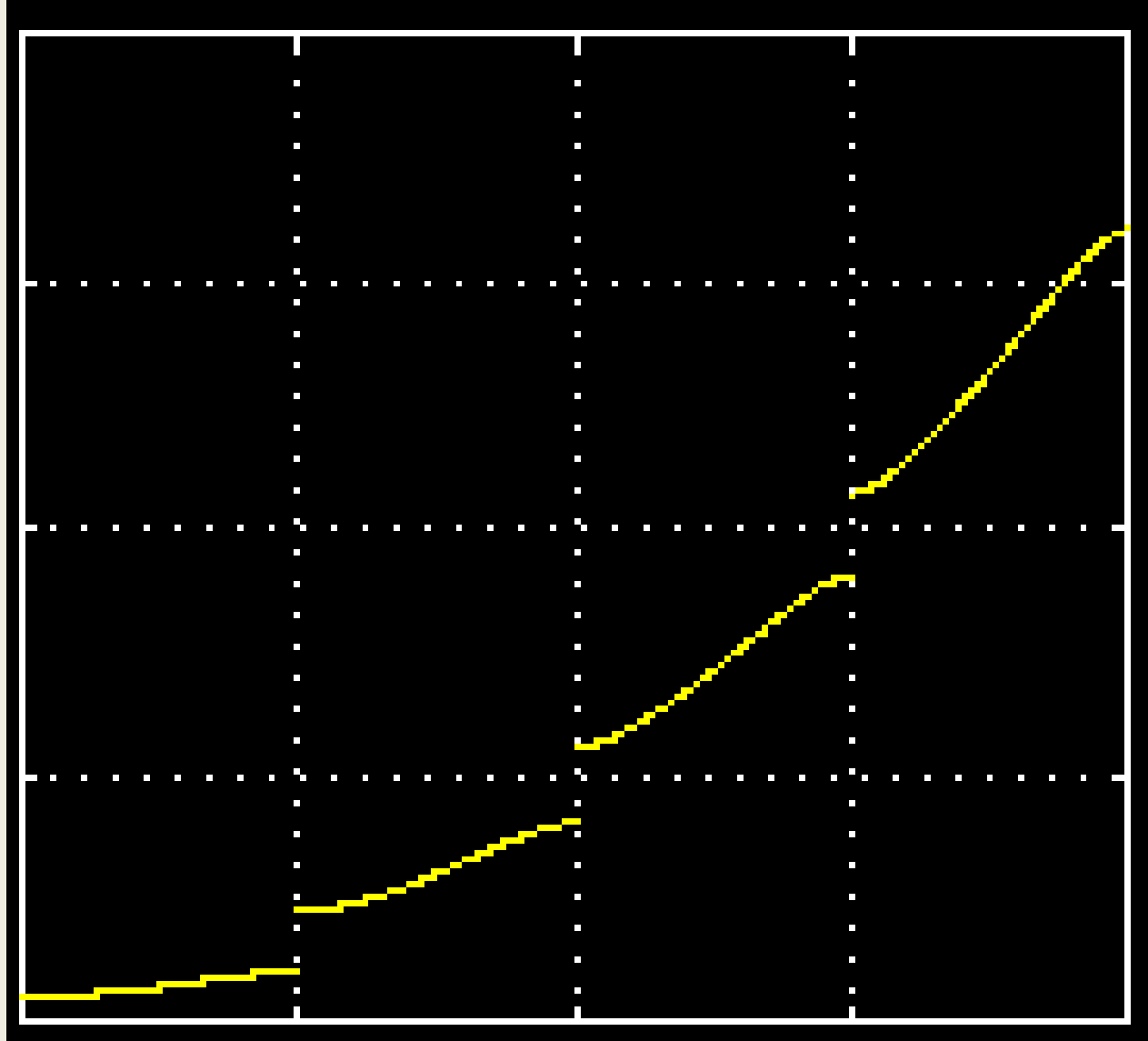
A transzcendens egyenlet megoldása összekapcsolja az
 E -t k -val:



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

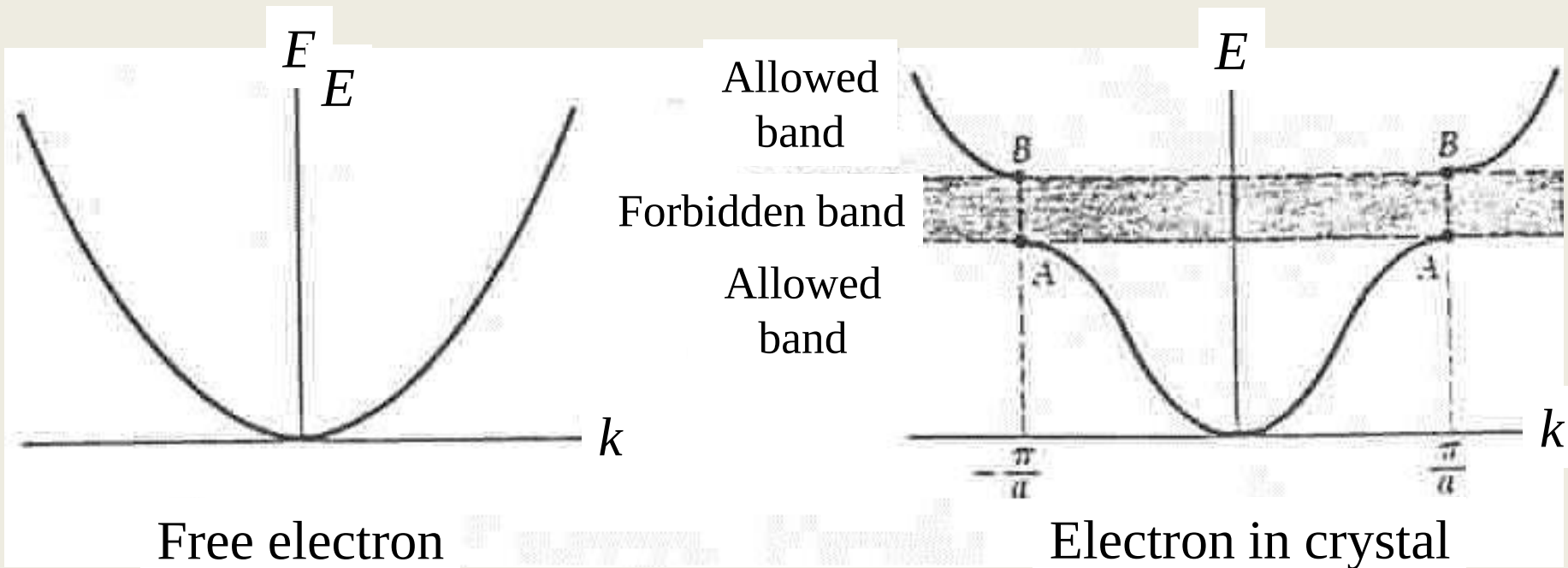
$$E_n(k)$$

$$k = 0 \qquad k = \frac{\pi}{a} \qquad \frac{2\pi}{a} \qquad \frac{3\pi}{a} \qquad \frac{4\pi}{a}$$



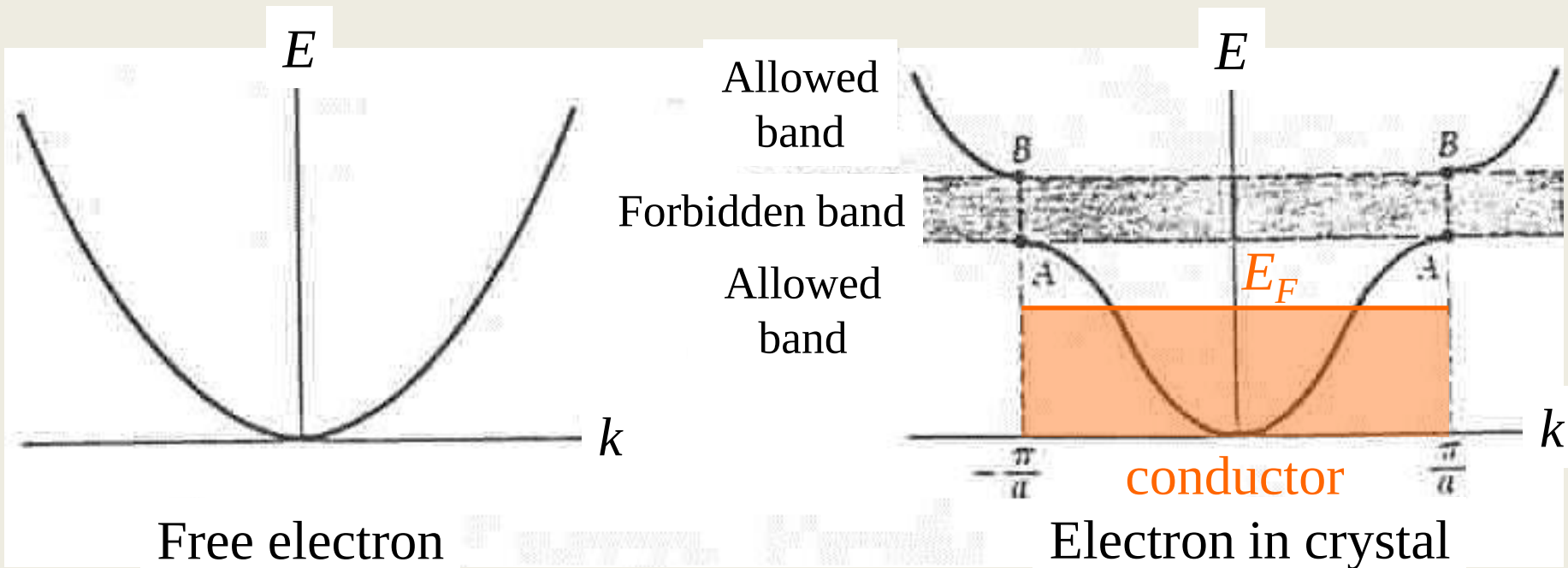
Kronig-Penney model and band gaps

So far, we have not discussed $E(p)$, the relation between the energy E and the momentum $p = \hbar k$ of electrons in crystals. But $E(p)$ has dramatic consequences.



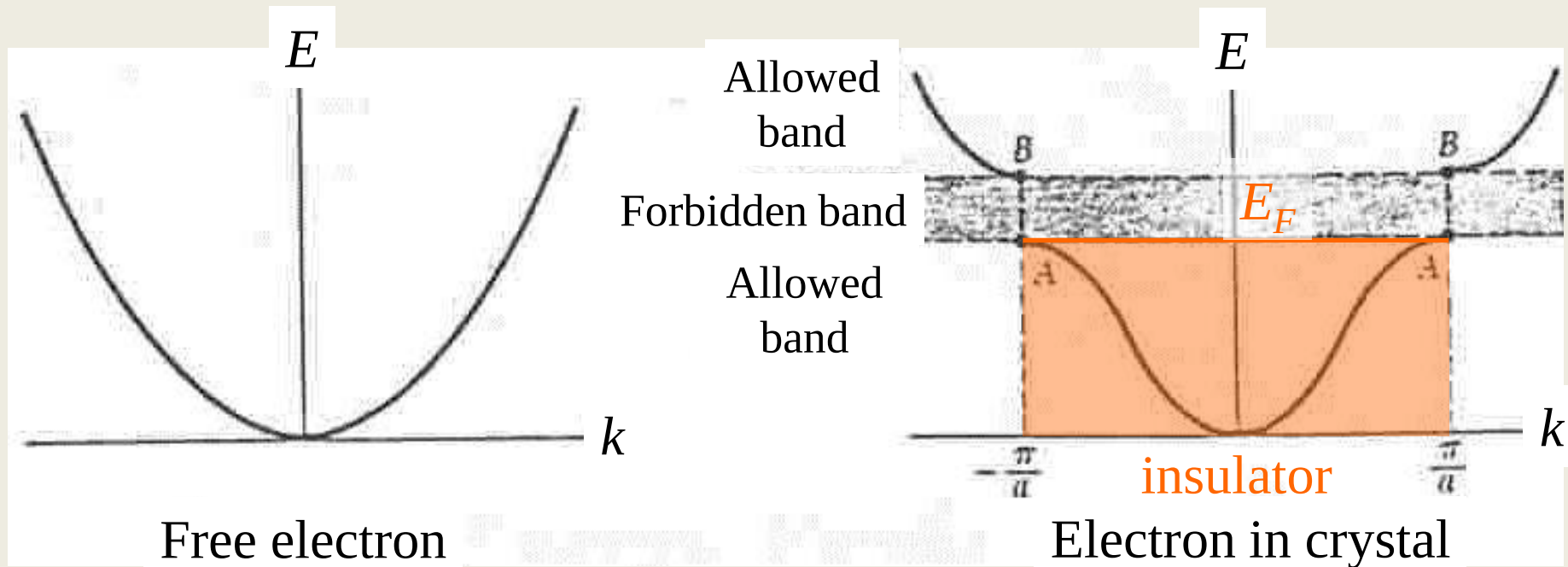
Kronig-Penney model and band gaps

So far, we have not discussed $E(p)$, the relation between the energy E and the momentum $p = \hbar k$ of electrons in crystals. But $E(p)$ is remarkable, and has dramatic consequences.



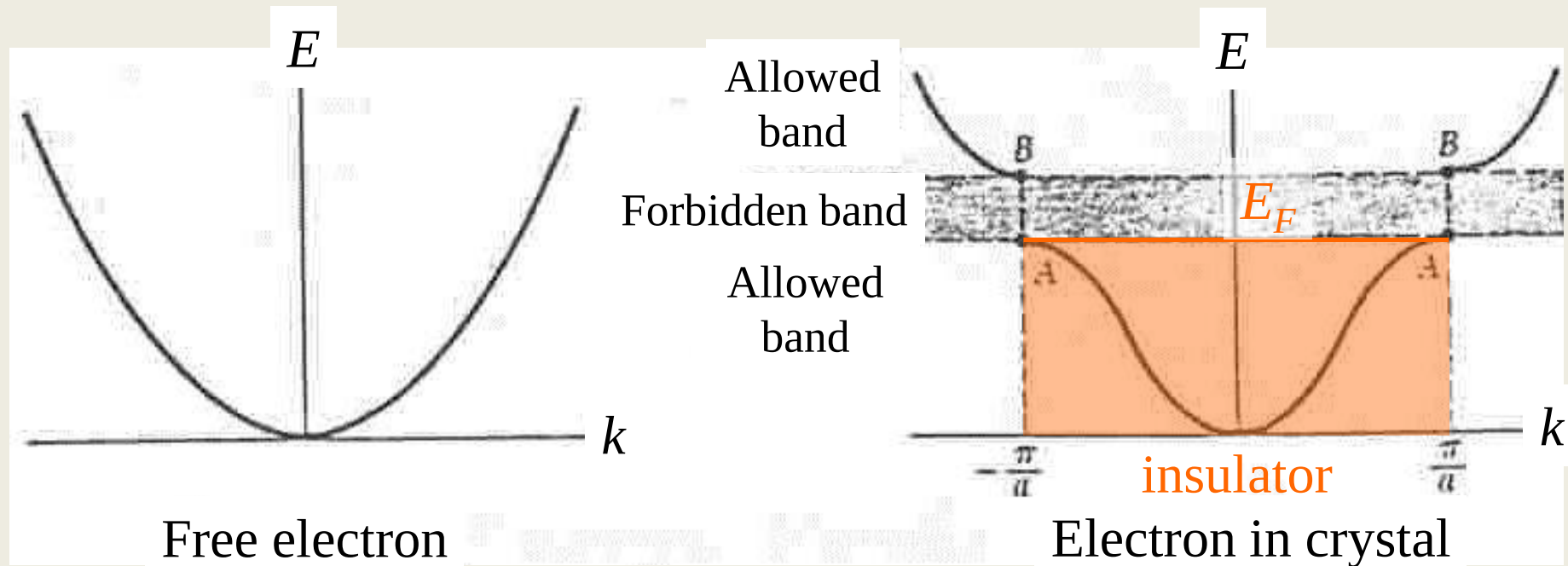
Kronig-Penney model and band gaps

So far, we have not discussed $E(p)$, the relation between the energy E and the momentum $p = \hbar k$ of electrons in crystals. But $E(p)$ is remarkable, and has dramatic consequences.



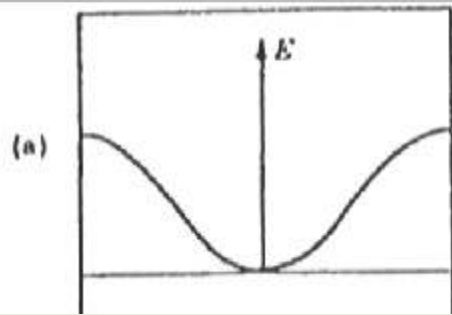
Kronig-Penney model and band gaps

So far, we have not discussed $E(p)$, the relation between the energy E and the momentum $p = \hbar k$ of electrons in crystals. But $E(p)$ is remarkable, and has dramatic consequences.

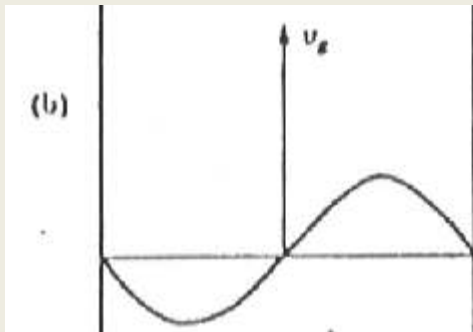


Where does the “band gap” come from?

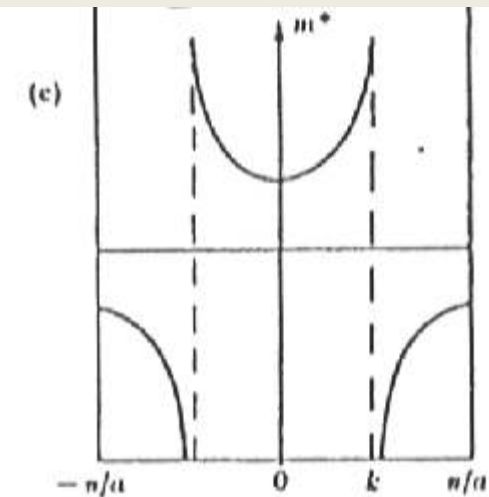
Elektron pályája szilárd testben



$$E(k)$$



$$\langle v \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$$



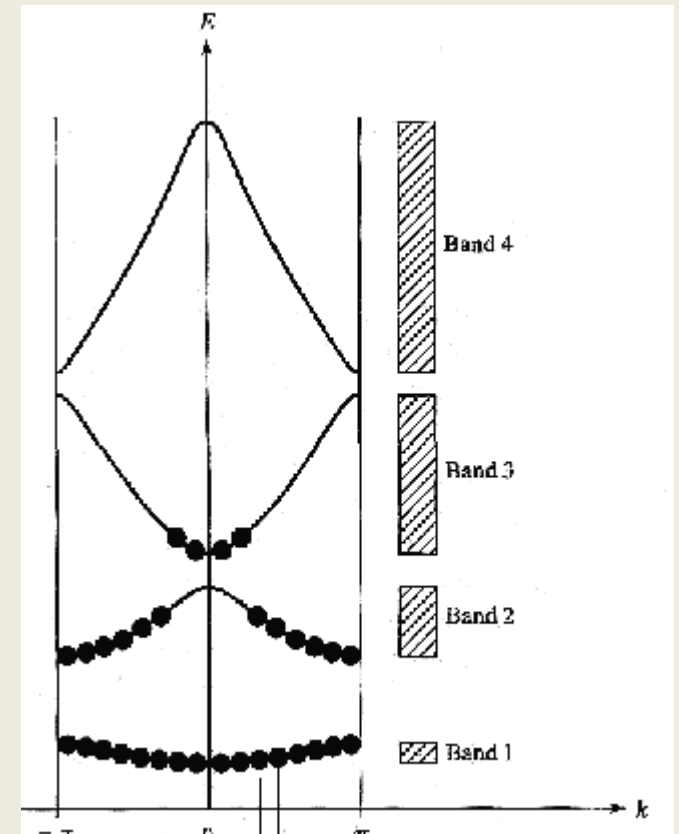
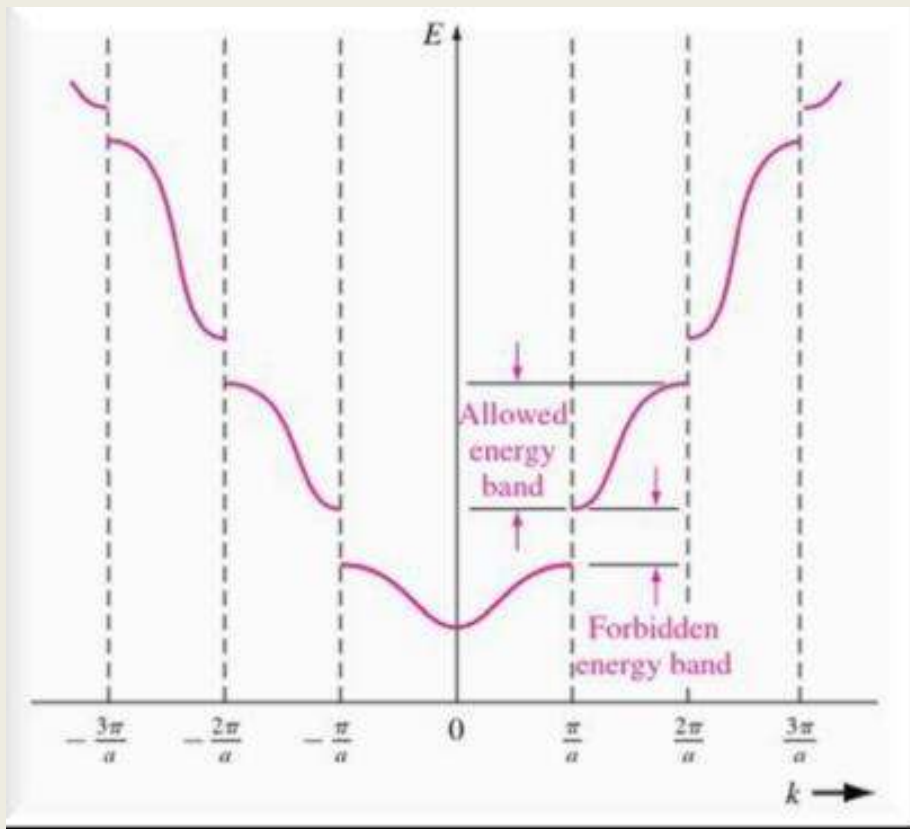
$$m_{\text{eff}} = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$$

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = m_{\text{eff}} \frac{d\mathbf{v}}{dt} \rightarrow$$

$$\frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = [\mathbf{m}_{\text{eff}}]^{-1} \langle \mathbf{F}_{\text{ext}} \rangle$$

$\rightarrow$

$$\frac{d^2 \langle \mathbf{r} \rangle}{dt^2} = [\mathbf{m}_{\text{eff}}]^{-1} \langle \mathbf{F}_{\text{ext}} \rangle$$



$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq +\frac{\pi}{a}$$

$$E = E_n(k)$$

A $-\pi/a \leq k \leq +\pi/a$ intervallum az ELSŐ Brillouin ZÓNA,
a $2\pi/a \leq k \leq -\pi/a$; $+\pi/a \leq k \leq 2\pi/a$ a MÁSDIK Brillouin ZÓNA.

Eddig, végtelen kiterjedésű egy-kristályt tanulmányoztunk.
Tegyük fel, hogy a kristály hossza L . Ebben az esetben a kristály
csomópontok száma L/a . Feltesszük, hogy L/a elég nagy szám
ahhoz, hogy a „végtelen” közelítés” jó kiindulási alap.

$$\cos k0 = 1 = \cos kL$$

$$kL = \ell 2\pi$$

$$k = \ell \frac{2\pi}{L} = \frac{\ell}{N} \frac{2\pi}{a}; \quad \ell = 1, 2, \dots, N$$

N a csomópontok (atomok) száma
a mi kristályrácsunkban

k diszkrét értékű .

**Pontosan N különböző értékű lehet k , és így
 N különböző értékű lehet az energia E is. .**

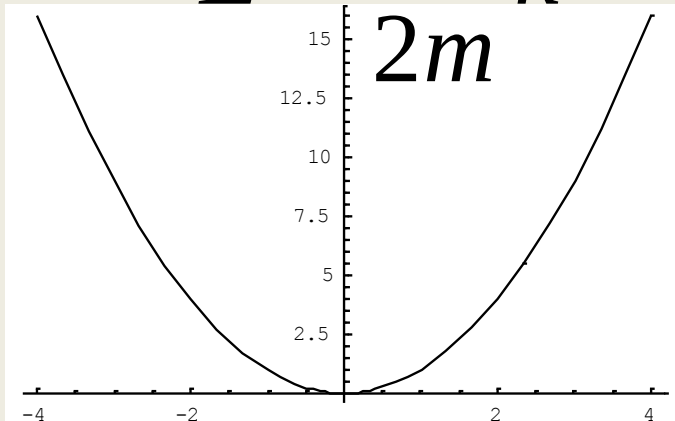
$$\cos ka = \delta \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a$$

Ha $\delta=0$, akkor $\cos ka = \cos \alpha a$, azaz $k=\alpha$

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{h/p}, \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

Az $E(k)$ függvény szabad elektronra

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

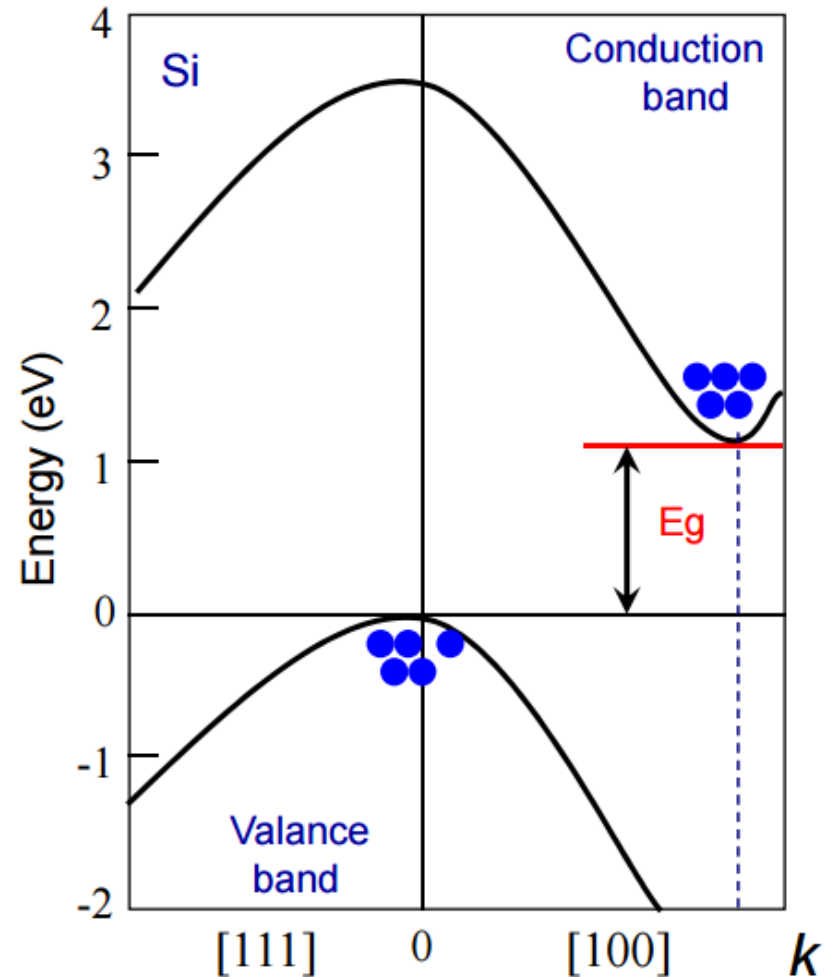
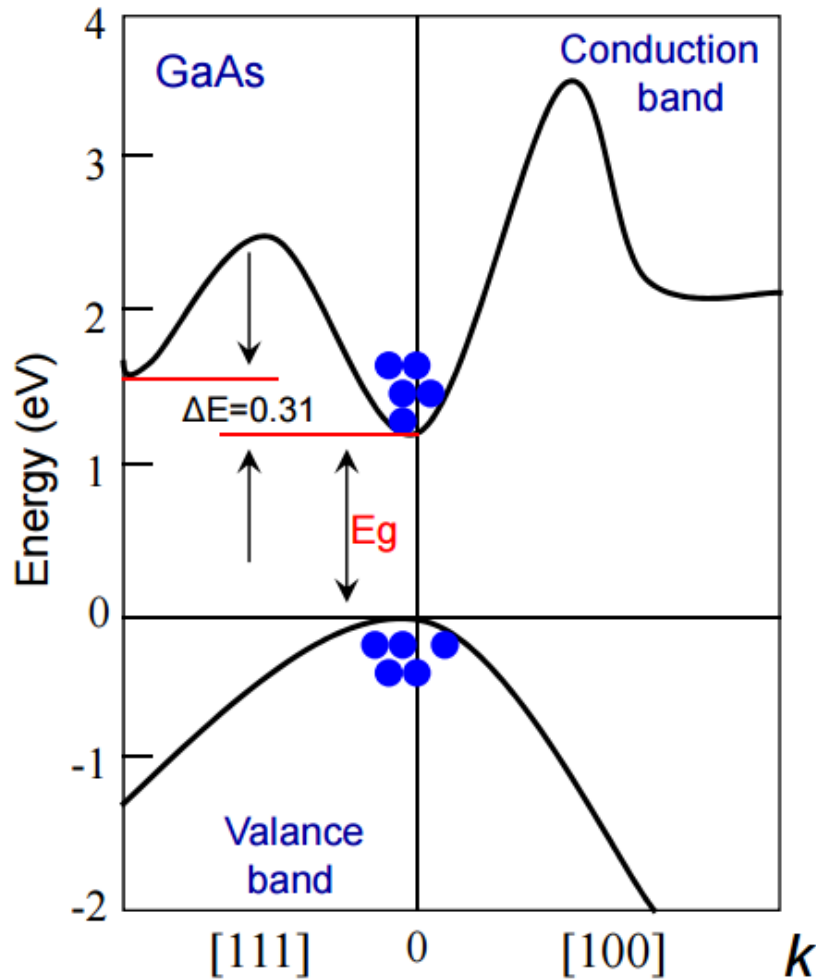


$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Kötött elektronok és lyukak

Effektív tömeg

$$E(\mathbf{k})$$



Összefoglalás: kristályos szilárd testekben az elektron
PERIÓDIKUS POTENCIÁLTÉRBE MOZOG.
AZ ERŐTÉR A RÁCSTÉRBEN PERIÓDIKUS

1. Az egy-elektron probléma megoldása **az elektron számára „megengedett” (1S, 2S, 2P, 3S, ...) és „tiltott” sávokat jelöl ki.**
2. A sávokon belül az elektron számára megengedett energiák **„kvázi folytonosak”.** Egy-egy sávban az elektronok maximális száma (a betölthető szintek száma) arányos a kristályt alkotó atomok számával: $2N, 2N, 6N, 10N, \dots$
3. Az egy-elektron probléma megoldása összekapcsolja a megengedett **E energia értékeket a hozzájuk tartozó k hullámszámmal:**

SÁVSTRUKTÚRA

$$E(\mathbf{k}) = E(k_x, k_y, k_z)$$

4. Az $E(k)$ függvény **PERIÓDIKUS a k TÉRBEN.** A **k teret „RECIPROK RÁCSTÉRNEK” nevezzük.** A reciprok rácstérbeli periódusokat **BRILLOUIN ZÓNÁ**-knak nevezzük.