

8. Physics of the Solid-state

a. Single electron in crystals of periodic potential. Potential in crystalline solids (Cubic, BCC and FCC crystals)

<http://latexcms.math.bme.hu/beadas/10/#idp2150400>

http://uni-obuda.hu/users/pap.andrea/BSc_anyagea/01Anyagszerkezet.pdf

A **kristályrácsok** a kristályos anyagokban a részecskék a tér minden irányában szabályos rendben helyezkednek el, térrácsot alkotnak. Ezek az anyagok jellemző hőmérsékleti ponton, az olvadásponton olvadnak meg. A kristály rácspontjaiban található anyagi részecskék és a közöttük működő erők típusa szerint négyféle rácsípust különböztetünk meg: atom-, fém-, molekula-, ionrács.

Elektronok rácsperiodikus potenciálban

Egy rácsban, rögzített atomok esetén, az elektronok diszkrét transzlációs szimmetriával bíró potenciálban mozognak. A rácsvektorokat ebben a fejezetben $\mathbf{R}$ -rel jelöljük. Az egyrészecske Hamilton-operátor

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) \quad U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad \forall \mathbf{R}$$

sajátérték egyenletének

$$H\Psi_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_n(\mathbf{k})\Psi_{n\mathbf{k}} \quad (7.1)$$

megoldásai a $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ Bloch-függvények, melyekre teljesül $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ minden $\mathbf{R}$ esetén (Bloch-tétel).

Ebben a jegyzetben csak nem kölcsönható elektronrendszereket vizsgálunk, vagyis elhanyagoljuk az elektronok közti Coulomb-kölcsönhatást.

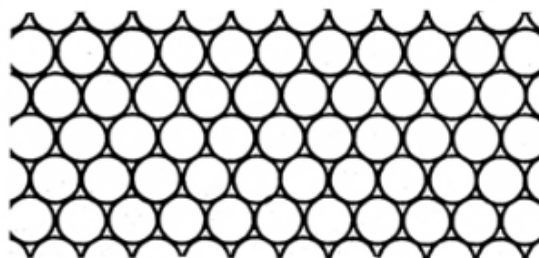
Csoportelméleti megfogalmazásban $\Psi_{n\mathbf{k}}$ az eltolási csoport $\mathbf{k}$ -val indexelt irreducibilis ábrázolásához tartozó hullámfüggvény és mivel a Hamilton-operátor felcserélhető az eltolásokkal, az egyrészecske-sajátállapotok is ilyenek lesznek. Az eltolási csoport irreducibilis ábrázolásait az első Brillouin-zóna $\mathbf{k}$ hullámszámai indexelik, a további hullámszámok nem adnak új ábrázolást. Egy irreducibilis ábrázoláshoz több invariáns sajátállapot is tartozhat, ezeket jelöli az n sávindex.

A Bloch-függvények mindig felírhatók $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ alakban, ahol $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ minden $\mathbf{R}$ eltolásra.

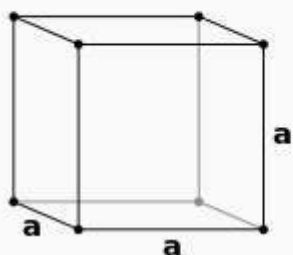
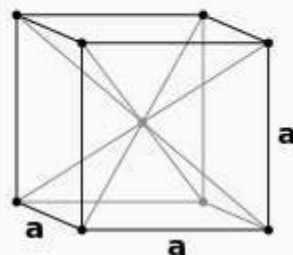
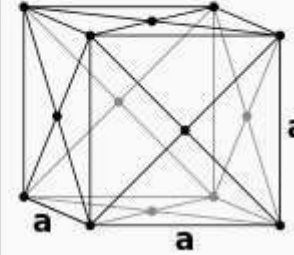
A (1) egyenlet sajátfüggvényeit és az $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ diszperziós relációt általános potenciál esetén nem lehet egzaktul meghatározni. Kivételt jelent például a Dirac-delta potenciálok alkotta rács.

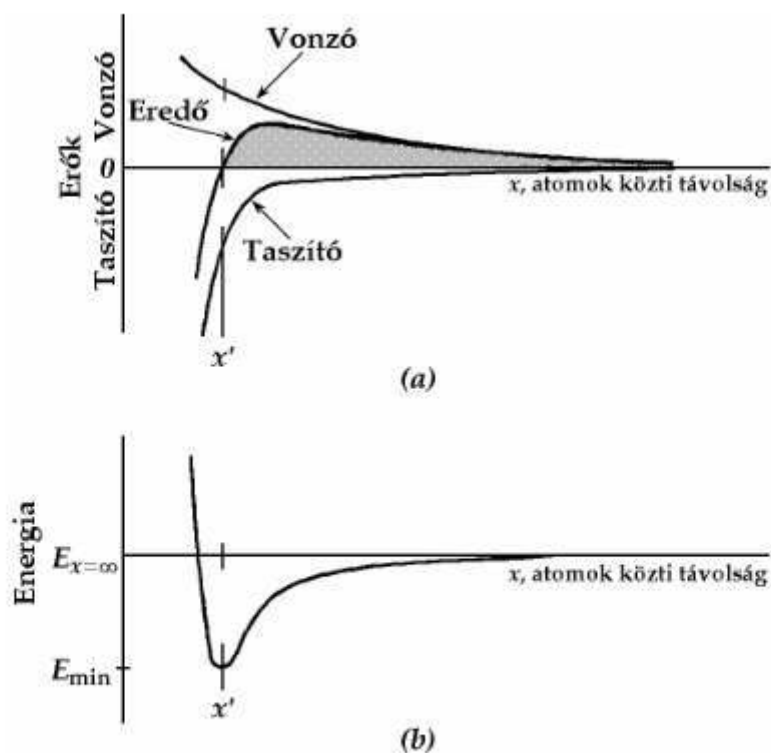
Kristályos anyagok

- Szimmetriával rendelkező rendszer
- Általában van egy szimmetria egység, és ez a szimmetria ismétlődik az anyagon belül.



Mivel a szimmetriák száma véges $\Rightarrow$ csak véges sok fajta rácstípus létezik. Ezeket 7 fő csoportba sorolhatjuk úgy, hogy egy csoportba az azonos pontszimmetriájú osztályok tartoznak. A 7 fő csoporton belül 14 lényegesen különböző egység létezik. $\Rightarrow$ **Bravais-rácsok**

Primitive cubic	Body-centered cubic	Face-centered cubic
cP	cI	cF
		



1.3.1. ábra (a): a rácselemek közötti erők változása a távolság függvényében
(b): a potenciális energia változása

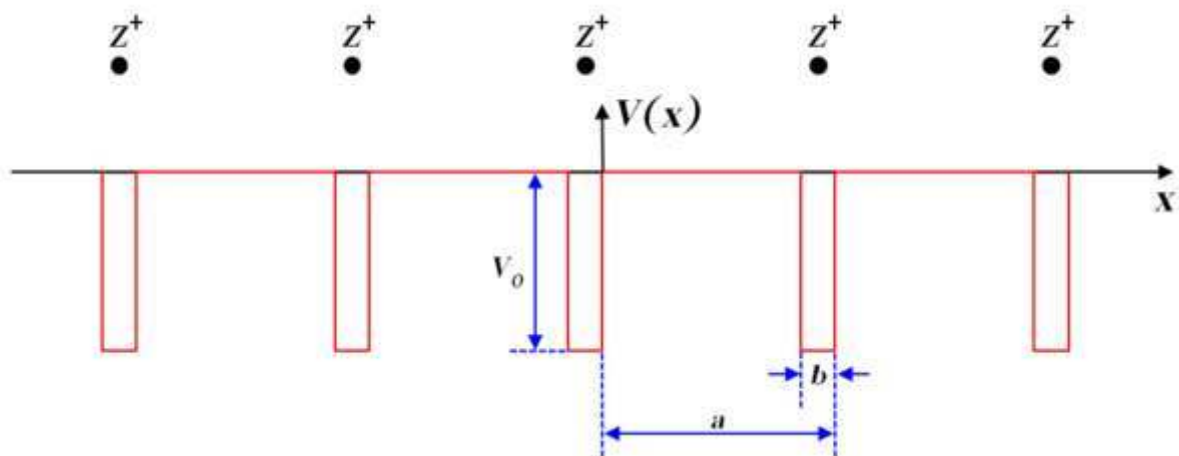
Az egyensúlyi helyzet itt a minimális potenciális energiájú állapot. Ne feledjük azonban a kvantumviselkedés néhány következményét.

- Az atomok (vagy a rácspontban ülő más egyedek) rezgési állapotai is kvantáltak, azaz csak bizonyos energiaszinteken folyhat a rezgés.
- Az E_0 minimális szint nem a potenciálgödör legalján van. Másképp: 0K-en, amikor minden rácselem E_0 . szinten van, akkor is van rezgőmozgás.

b. The one-dimensional crystal: the Kronig-Penney model. Allowed and forbidden energy bands.

The Kronig–Penney model (named after Ralph Kronig and William Penney) is a simple, idealized quantum-mechanical system that consists of an infinite periodic array of rectangular potential barriers.

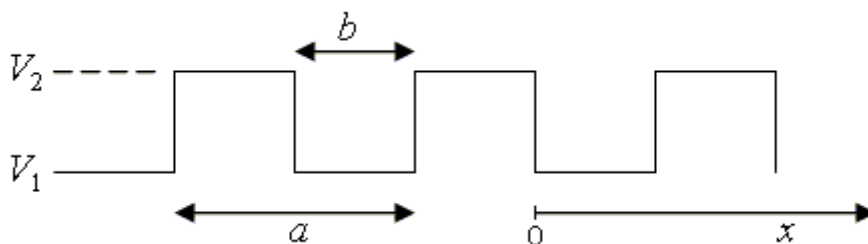
The potential function is approximated by a rectangular potential:



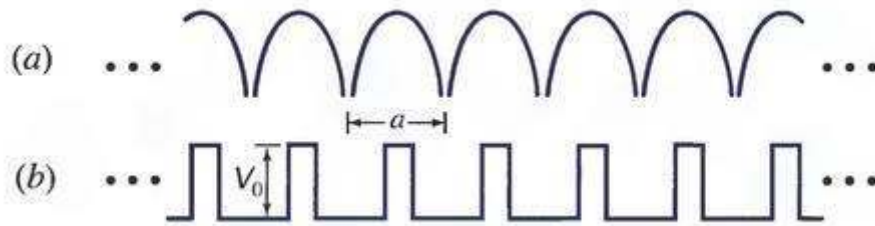
The Kronig-Penney model [1] is a simplified model for an electron in a one-dimensional periodic potential. The possible states that the electron can occupy are determined by the Schrödinger equation:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi.$$

In the case of the Kronig-Penney model, the potential $V(x)$ is a periodic square wave.



Az energiasávok keletkezését illusztrálhatjuk a **Kronig-Penney modell** segítségével. Ebben az egyszerű elméletben a kristályrács potenciálját – amelynek egydimenziós változatát az (a) ábra mutatja – periodikusan ismétlődő, négyszög alakú, potenciálgátak sorozatával közelíthetjük.



- a. Az a rácsállandója az atomok végtelen egydimenziós együttesével kapcsolatos kristályrács potenciálja
- b. A Kronig-Penney modellben alkalmazott idealizált, négyszögalakú (V_0 magasságú) potenciálgátak.

c. Energy bands derived from the splitting of 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, etc. energy levels.

<http://pvcdrom.pveducation.org/SEMICON/ELEC.HTM>

Semiconductors are different from other types of materials (for example insulators or metals) due to the configuration of the highest energy electrons in the semiconductor. Electrons in an atom by itself have discrete allowed energy levels at which the electrons can exist, denoted by the numbers 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, etc. If an electron is externally given extra energy, it can only gain energy exactly corresponding to a difference between the energy levels. This gives rise to the characteristic emission (or absorption) spectrum of pure materials.

In a crystalline material, the atoms are not in isolation from each other, but rather form bonds, which in turn change the electronic structure. The close proximity of atoms in a crystal changes the discrete energy levels into energy bands. This is due to the fact that two electrons cannot have the same energy (or more precisely the same quantum state), and hence the overlap of atomic orbitals causes the previous discrete energy level to split. As more atomic orbitals overlap, a "band" of allowed energy levels forms in a crystal rather than the discrete lines in an atom.

In a semiconductor and in an insulator, the highest energy band is "full" of electrons, ignoring for the moment that the electrons may increase their energy due to temperature (i.e., at 0 Kelvin). Since each band arises from the overlap of atomic orbitals, which have a limited number of electronic states, the bands also have a limit on the number of electrons, called the density of states (DOS). Since the bands are fully occupied, the electrons in these bands cannot conduct current. A common analogy for this is to compare a full band to a highway which is bumper to bumper with cars but the cars do not move. However, in a semiconductor, the energy difference between the band fully occupied at 0K (called the valence band) and the next highest energy band (called the conduction band) is small enough such that some electrons have enough thermal energy at room temperature to jump up to the conduction band. This energy difference is called the band gap. Since there are many unoccupied electron states in the conduction band, an electron there can move freely. In a metal, the energies of the conduction and valence bands overlap, and hence there are unoccupied electronic states in the highest energy band of a metal. These unoccupied electronic states allow movement of electrons in a metal, giving rise to a metal's high conductivity. Further, a metal does not have a band gap.

Az atomi energianívókat jellemző kvantumszámok:

n - főkvantumszám (1,2,3,4,... vagy K,L,M,N,...)

l - mellékvantumszám, az eredő pályaimpulzusmomentum kvantumszáma (0,1,2,3... vagy S,P,D,F,...)

s - eredő spinquantumszám

j - összes impulzusmomentum, értéke $|l-s|$ -től $l+s$ -ig változhat

m_j - mágneses kvantumszám: $j, j-1, \dots, -j$ A hagyományos jelölés: $n 2s + 1l_j$ Pl.: a nátrium alapállapota $3d 5/2$

d. The $W(k)$ function. Qualitative description of Brillouin zones in silicon and GaAs

Mi is az a Brillouin zóna?

A Brillouin-zónákat használják egy periodikus potenciál, például egy kristály energiaszintjeinek elméletében.

A Brillouin-zónák a $W(k)$ energia-hullámszámvektor térben azok a tartományok, amelyek határán az elektron energiája ugrásszerűen változik. A rácstávolságot hossz mértékegység helyett a rácspannaság hullám hullámszámával fejezik ki.

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

A rácspannaság merőleges hullám interferenciájának feltétele:

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d$$

Így:

$$k = n \cdot \frac{\pi}{d}$$

Amennyiben $n = 1$, így az első zóna határa $\frac{\pi}{d}$. Tehát a

k hullámszámú hullám ebben a kristályban nem terjedhet.

A szilárd állapotú anyagok atomjai között meglehetősen erős kölcsönhatások működnek, éppen ezért nem lehet őket úgy tekinteni, mint individuális egységeket. Az atomok vezetési elektronjai nem kötődnek szorosan az egyes atomokhoz, hanem inkább az atomok összességéhez, mint egészhez tartoznak. A Schrödinger-egyenlet megoldása a kristályrács atomjainak az összessége által létesített periodikus potenciáltérben lévő elektron energiájára vonatkozóan, az atomi energianívók felhasadására és energiasávok képződésére vezet. Mindegyik energia sáv sűrűn elhelyezkedő, diszkrét energianívók nagy számát tartalmazza, amelyek egymáshoz közel elhelyezkedve megközelítőleg folytonosan (kvázifolytonosan) töltik ki az energia sávot. Amint az ábra mutatja, a vegyértékkötési (valencia) sávot, és a vezetési (vagy kondukciós) sávot az E_g nagyságú energiasáv un. energiarés választja el egymástól. Ez a sáv fontos szerepet játszik az anyag elektromos és optikai tulajdonságainak a meghatározásában.



Ilyen potenciáltérre a megfelelő Schrödinger-egyenlet megoldása a következő eredményre vezet: az energiaspektrum **megengedett energiasávokból** áll, amelyeket **tiltott energiasávok** választanak el egymástól. A megengedett energiaértékeknek megfelelő sajátfüggvények rácsperiodikusan modulált síkhullámokat reprezentálnak, míg a tiltott energiaértékeknek megfelelő hullámfüggvények exponenciálisan lecsengő, nem haladó hullámokat jelentenek, és így az elektronok mozgása nem megengedett. Megmutatható, hogy a nyert eredmények általános érvényűek, és háromdimenziós esetre is alkalmazhatóak. A kristályrács periodicitásával rendelkező sík hullámú sajátfüggvényeket **Bloch-függvényeknek** nevezzük.

A hullámmechanika szerint egy szabad elektron E energiája és P impulzusa között – állandó potenciálú térben (hasonlóan, mint szabad térben) – az alábbi összefüggés áll fenn:

$$E = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0},$$

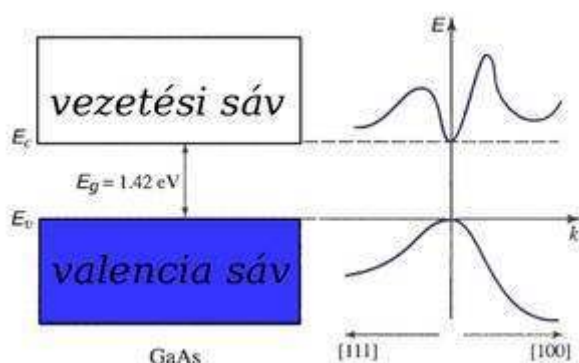
$$k = \frac{P}{\hbar}$$

$$m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

Az elektron mozgását egy félvezető anyagban szintén a Schrödinger-egyenlet írja le, az anyag periodikus kristályrácsában lévő töltések által létrehozott potenciál segítségével. Az a konstrukció – a Kronig-Penney modellhez hasonlóan – megengedett energiasávokat eredményez, amelyeket tiltott sávok választanak el egymástól. Az E - k összefüggéseket elektronokra és lyukakra, a vezetési illetve a valenciasávra vonatkozóan az $_$ ábra illusztrálja

Si és GaAs esetében. Az E energia a k hullámszámvektor (k_1, k_2, k_3) komponenseinek periodikus függvénye $(\pi/a_1, \pi/a_2, \pi/a_3)$ periódussal, ahol a_1, a_2, a_3 a kristály rácsállandói. Az $_$ ábra ennek az összefüggésnek a keresztmetszetit mutatja a

hullámszámvektor két speciális iránya mentén. A k értékek tartományát a $[-\pi/a, \pi/a]$ intervallumban, az **első Brillouin-zónaként** definiáljuk.

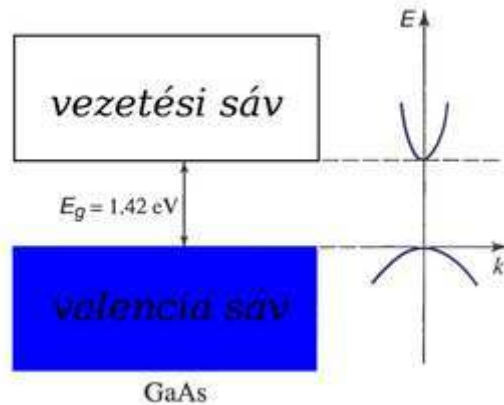


Ily módon egy elektron energiája a vezetési sávban nemcsak az impulzus nagyságától függ, hanem attól az iránytól is, amelyik irányban a kristályban mozog.

A vezetési sáv aljának közelében az E - k összefüggés megközelíthető az alábbi parabola segítségével:

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c},$$

ahol E_c az energiát jelenti a vezetési sáv aljánál. A k -t attól a hullámszámvektortól mérjük, ahol E -nek minimuma van. Az ábra azt mondja számunkra, hogy egy vezetési sávbeli elektron hasonlóan viselkedik, mint egy m_c tömegű szabad elektron. Az m_c -t az elektron (vezetési sávbeli) **effektív tömegének** nevezzük, amely különbözik a szabad elektron m_0 tömegétől. Ily módon a rács ionjainak a hatását a vezetési sávbeli elektron mozgására vonatkozóan az m_c effektív tömeg foglalja magában



Hasonlóképpen, a valenciasáv tetejénél azt írhatjuk, hogy

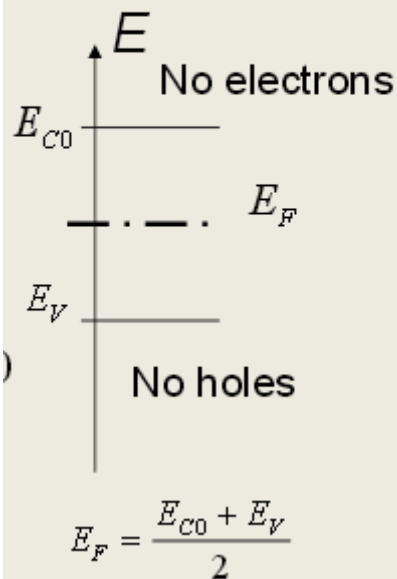
$$E = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v},$$

ahol $E_v = E_c - E_g$ az energiát jelenti a valenciasáv tetejénél, és m_v a lyuk (valenciasávbeli) effektív tömege. A rács ionjainak hatását egy valenciasávbeli lyuk mozgására, az m_v effektív tömeggel vesszük figyelembe. Az effektív tömeg függ az anyag kristályszerkezetétől és a rácsra vonatkozóan a terjedési iránytól, mivel az atomok közti távolság változik a kristálmorfológiai iránnyal. Az effektív tömeg függ még a vizsgált sáv speciális sajátosságaitól is.

Azokat a félvezetőket, amelyekre vonatkozóan a vezetési sáv minimális energiája ($E_{c,min}$) és a valenciasáv maximális energiája ($E_{v,max}$) a k hullámszámnak (vagy P impulzusnak) ugyanazon értékénél található ($k_{c,min} = k_{v,max}$), **direkt-tiltott sávú** anyagoknak nevezzük. Azokat a félvezetőket pedig, amelyekre ez a megállapítás nem érvényes ($k_{c,min} \neq k_{v,max}$), **indirekt-tiltott sávú** anyagoknak hívjuk.

GaAs direkt-tiltott sávú félvezető --> A megkülönböztetés lényeges, mivel a vezetési sáv alja és a valenciasáv teteje közötti átmenet során, indirekt tiltott sávú félvezető esetében, az elektron impulzusában egy jelentős változásnak kell bekövetkeznie. Később majd megmutatjuk, hogy a direkt-tiltott sávú félvezetők, mint amilyen a GaAs, hatékony fotoemitterek, míg az indirekt-tiltott sávú félvezetők, mint amilyen a Si, rendes körülmények között, nem szolgálnak fényemitterekként.

Szigetelők (dielectrics)



Mi is a silicon?---->SZIGETELŐ ANYAG

Azokat az anyagokat, melyek az elektromos áramot elhanyagolható mértékben vezetnek. A szigetelő anyagokban ezért kevés szabad elektron van, az anyag vezetőképessége kicsi. Gyakorlatilag nem vezet, szigetel. Ideális szigetelőben egyetlen szabad töltéshordozó sincs. Az atomok hőmozgása miatt a gyakorlatban ilyen nem fordul elő, vagyis szigetelő anyagainkra inkább rossz vezető elnevezést kellene használni. A szigetelő anyagok a gázok, az olajok, a szilárd halmazállapotúak közül az üveg, műanyagok, kerámiák, csillám stb

Mi is a GaAs?---->FÉLVEZETŐ ANYAG

$T=0$ -n félvezetőkben nincsenek elektronok a vezetési sávban.

De $T > 0$ -n már vannak, azonban minden vezetési sávbeli elektron a valenciasávbeli jön, így ott maga mögött egy hiányzó elektront, „lyukat” hagy. Nagyszámú vezetési sávbeli elektron és nagyszámú valencia sávbeli lyuk makro állapota hasonló a fémek vezetési sávbeli állapotához. A lyukak „virtuális” részecskék, pozitív töltéssel és pozitív „effektív” tömeggel.

Félvezetők olyan kristályos szilárd anyagok, amelyek vezetőképessége a 'majdnem szabad' elektronok jelenlétével kapcsolatos, és ez a vezetőképesség növekvő hőmérséklettel nő; döntő tulajdonságaik a kristály 'rács-hibáival' kapcsolatosak. Ezeket a rácsba céltudatosan beépített idegen atomok, az adalék-anyag atomjai okozzák