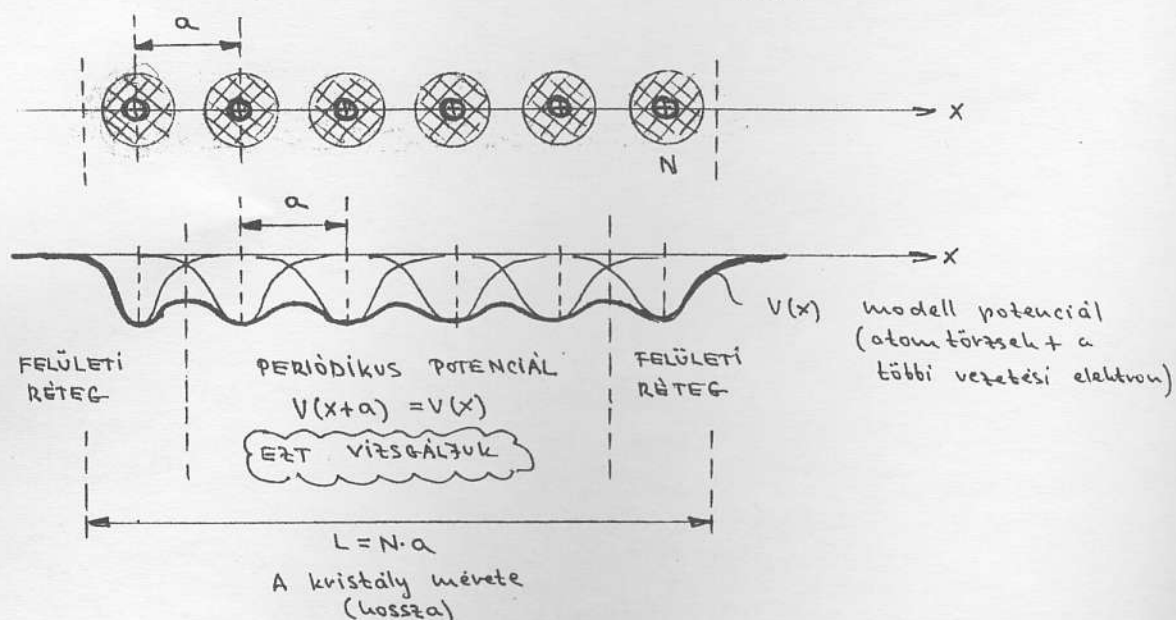
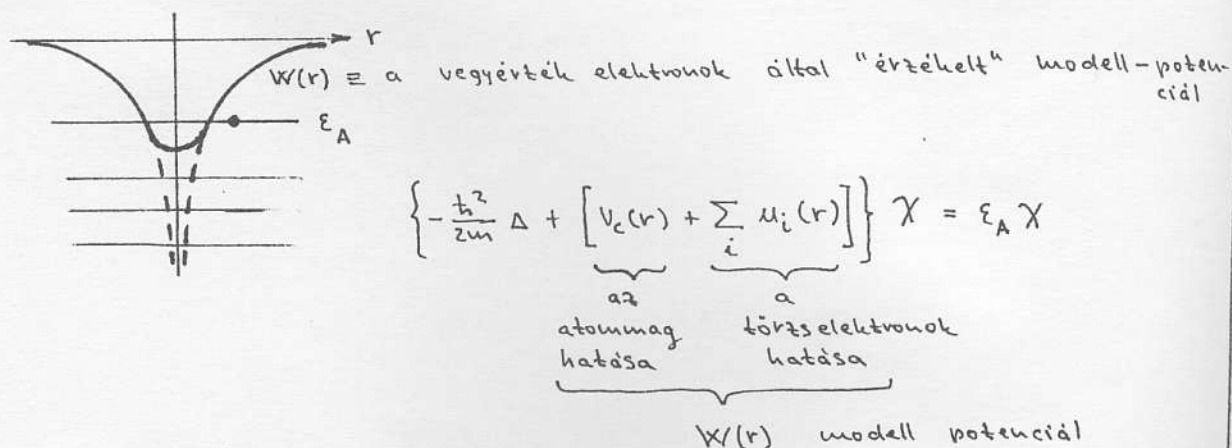
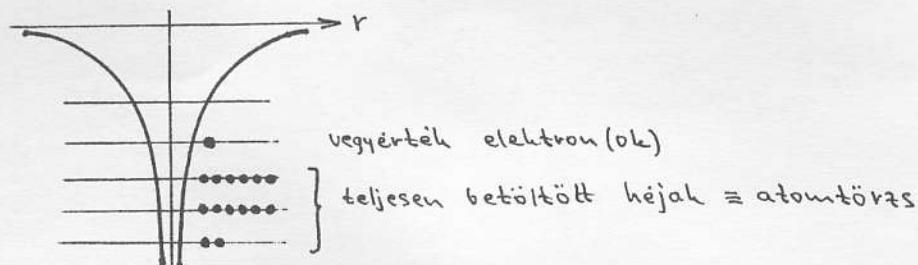
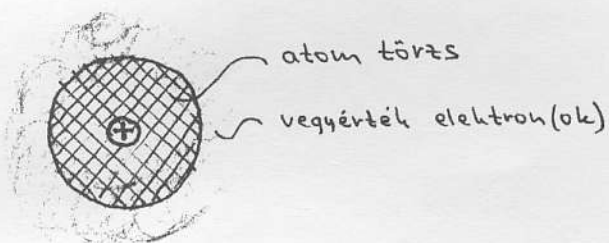


## 2.2. Szilárdtestek energiasáv elmélete

### 2.2.1. A periódikus potenciál tér egy-dimenziós modellje



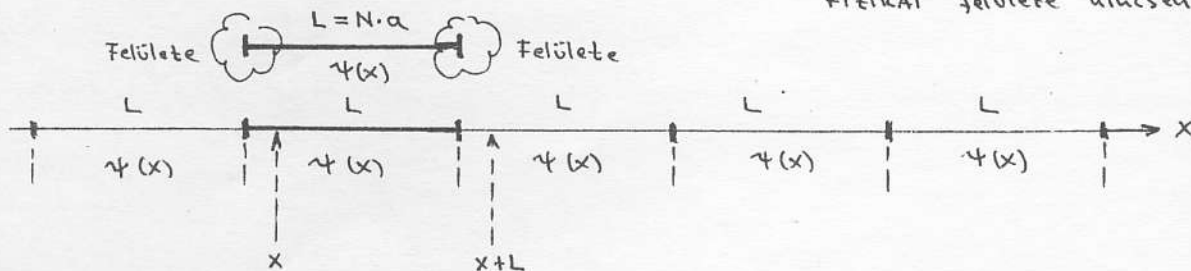
7

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:

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

↓

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

$$|c| = 1$$

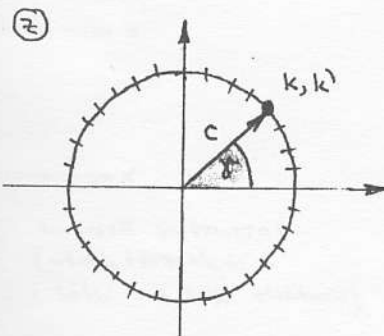
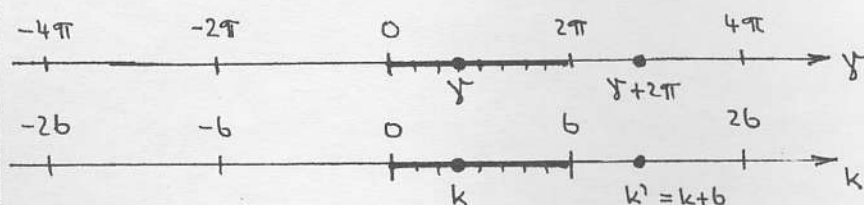
A "c" állandó meghatározható:

$$\psi(x+L) = \psi(x+N \cdot a) = \underbrace{c^N}_{=1} \cdot \psi(x) = \psi(x)$$

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

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

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



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

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

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

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)

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

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

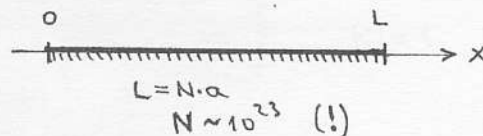
Bizonyítás:  $\psi(x+a) = u(x+a) e^{jk(x+a)} = \underbrace{u(x) \cdot e^{jkx}}_{\psi(x)} \cdot e^{jka}$

Az elektron állapotok meghatározása:

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

$$\uparrow$$

$$V(x+a) = V(x) \quad \text{periódikus potenciál}$$



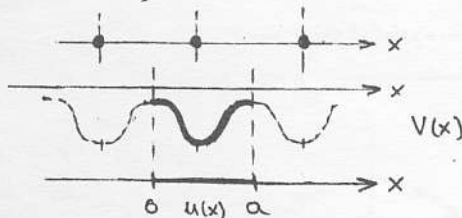
$\psi(x)$  értéket több mint  $N$  helyen (!) kell kiszámítani.

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:

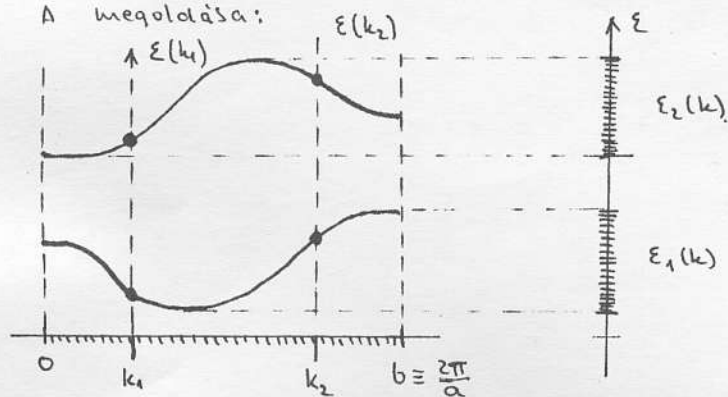
$$\hat{H}(k) \cdot u = \varepsilon \cdot u$$

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

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

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

A megoldása:



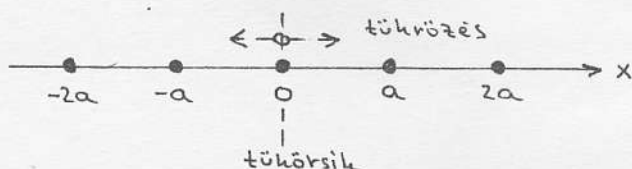
$$\rightarrow \varepsilon_v(k)$$

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

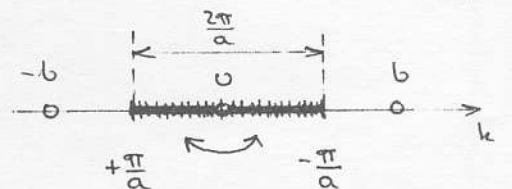
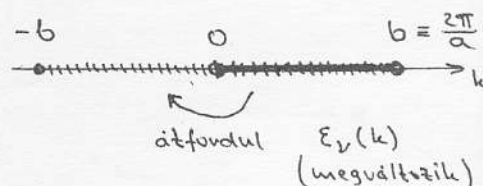
(sávindex)

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

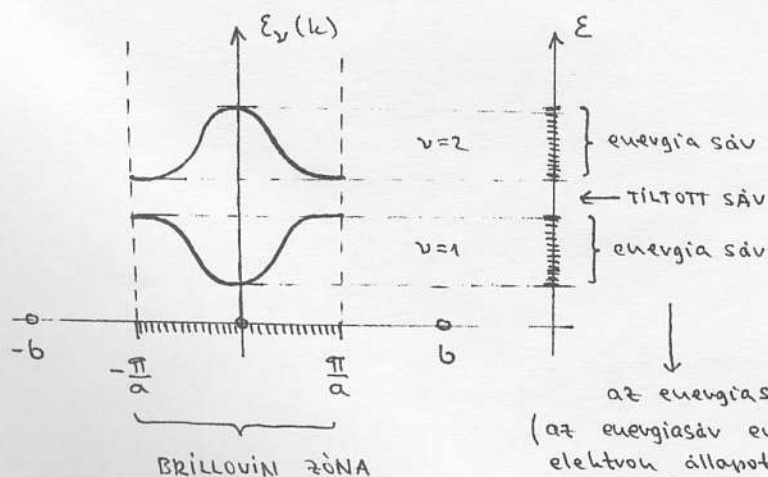
(kvázi) folytonos

Az  $u_n$  "TÜKRÖZÉSI" szimmetria következménye

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



önmagába transzformálódik  
 $\varepsilon_v(k)$  nem változik



tulajdonsága:

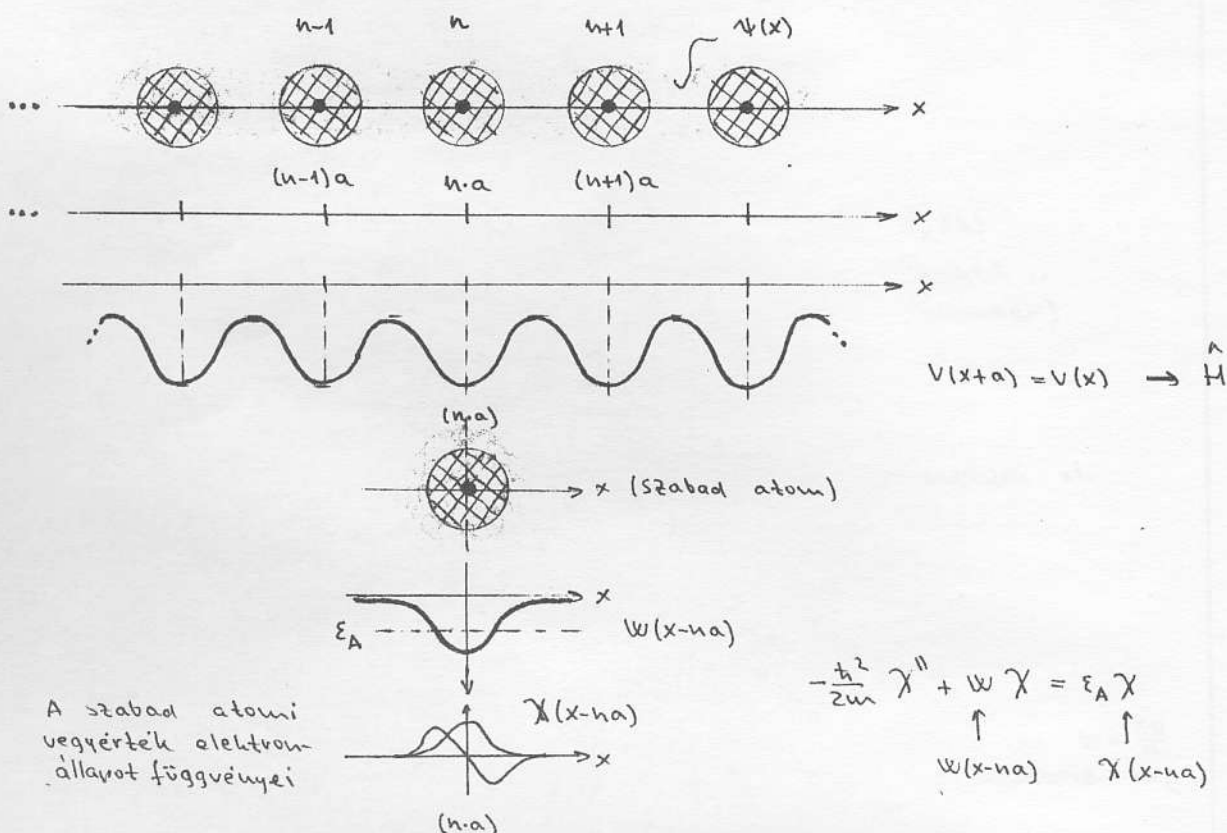
- különböző Bloch állapotokat meghatározó  $k$  pontokat tartalmaz
- A pontrács tükrözésekor nem változik ( $\rightarrow$  általánosítás 3 dim)

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 normálási 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:

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

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

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

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

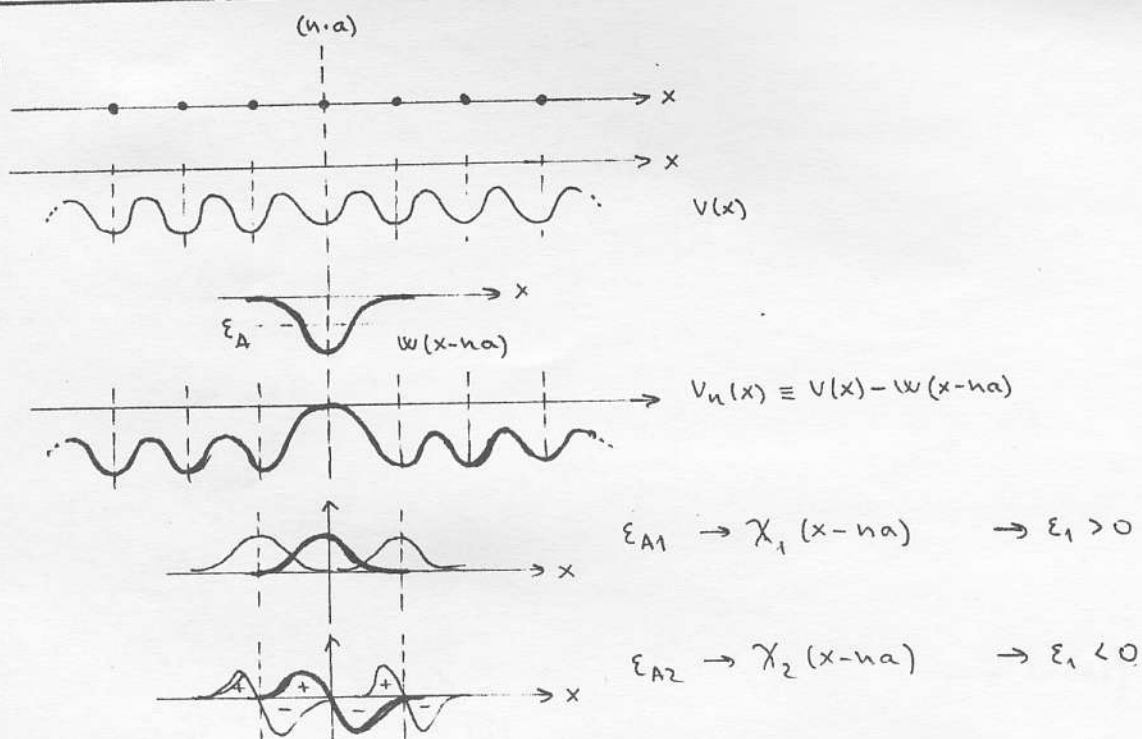
$$= A \sum_n e^{jkna} \underbrace{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + W(x-na) \right] \chi(x-na)}_{\varepsilon_A \cdot \chi(x-na)} + A \sum_n e^{jkna} V_n(x) \chi(x-na) =$$

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

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

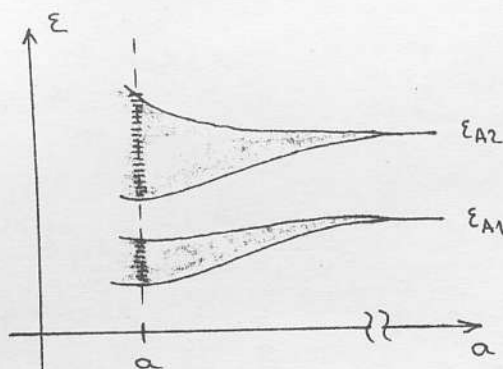


$$\langle \chi(x-na) | V_n(x) | \chi(x-na) \rangle = \begin{cases} \varepsilon_1 & \text{ha } (n-n') = \pm 1 \\ \varepsilon_0 & \text{ha } (n-n') = 0 \\ \emptyset & \text{egyébként} \end{cases}$$

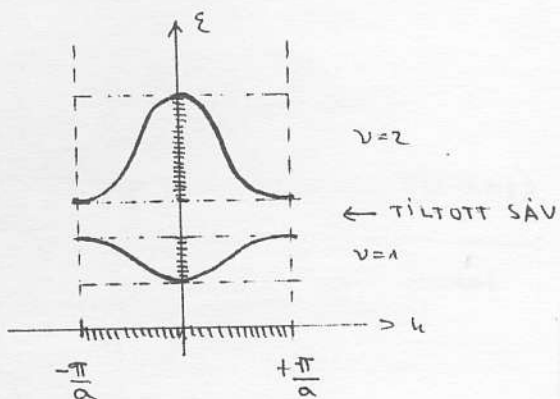
Tehát

$$\varepsilon \approx \varepsilon_A + N \cdot \varepsilon_0 + N \cdot \varepsilon_1 (e^{jka} + e^{-jka}) = \varepsilon_A + \underbrace{N\varepsilon_0}_{\equiv E_0} + \underbrace{2N\varepsilon_1}_{\equiv E_1} \cos ka$$

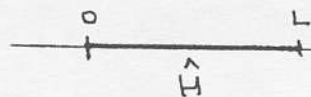
$$\boxed{\varepsilon = \varepsilon_A + E_0 + E_1 \cos ka} \quad \left( \lim_{a \rightarrow \infty} E_0 = 0 \quad \lim_{a \rightarrow \infty} E_1 = 0 \right)$$



↓  
átalakosítás (3 dim)



### 2.2.3. Az energiasávok és a szabad elektronok kapcsolata



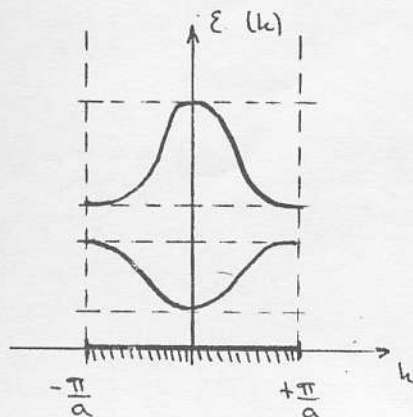
periódikus potenciál :  $V(x+a) = V(x)$

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

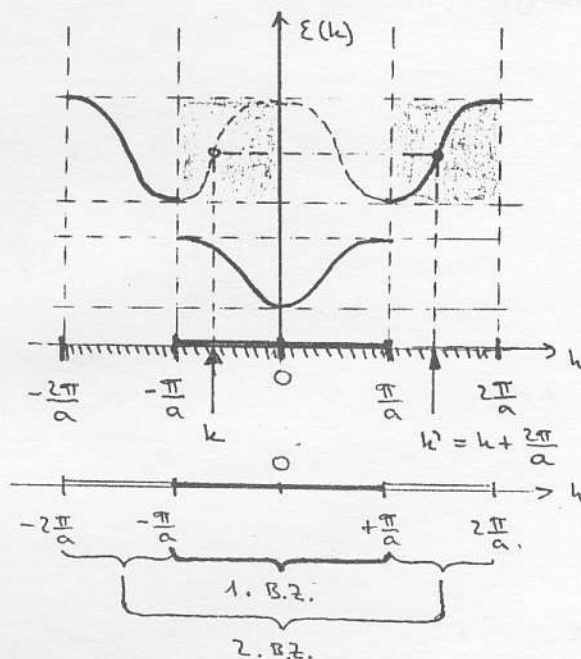
az energia mintek :  $\varepsilon(k)$

BRILLOVIN zóna

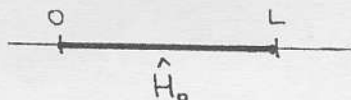
$$k' = k + \frac{2\pi}{a} \rightarrow \psi_{k'} \equiv \psi_k$$



A (kiterjesztett)  
BRILLOVIN 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

