

2. SZILÁRDTESTFIZIKA

2.1. A fémek szabadelektron elmélete

A fémek jól vezetnek az elektromos áramot. Tehát az elektromos áramot alkotó elektronok viszonylag „könnyedén” tudnak mozogni a fém belsejében. A fémes kötés ugyanis úgy alakul ki, hogy a fématomok egyesülésekor a vegyérték elektronok „közössé válnak”. Ez azt jelenti, hogy nincsenek a fémet alkotó atomokhoz kötve, hanem azokról mintegy „leszakadva” a fém teljes makroszkópikus térfogatában mozoghatnak. Első közelítésként azt mondjuk, hogy a fém elektronjai ún. „szabadelektron gázt” alkotnak.

Az elkövetkezőkben a nagyszámú, $N \gg 1$, elektront tartalmazó szabadelektron gáz kvantummechanikai tárgyalásával foglalkozunk. Ezt a modellt pár évvel a Schrödinger egyenlet felfedezése (1926) után Sommerfeld már kidolgozta (1928). Egyszerű volta ellenére választ tudott adni egy-két olyan mérési tapasztalatra (kontakt potenciál, fémek fajhője, stb...), amelyek magyarázatánál a klasszikus fizika csődöt mondott.

2.1.1. A Sommerfeld fémmodell

A fém vezetési elektronjai a fémrácsot alkotó iontörzsek terében mozognak, ugyanakkor egymással is kölcsönhatásban vannak. Ezt az igen bonyolultnak tűnő kvantummechanikai problémát alkalmas modellválasztással, egyszerűen meg lehet oldani.

Mint azt már tanultuk, sokelektronos rendszerek esetén mindig egyelektron közelítést alkalmazunk. Az egyelektron állapotokat meghatározó Schrödinger egyenletben figyelembe kell vennünk az elektronok közötti kölcsönhatást is. Jelen esetben ennek a legegyszerűbb módja a következő. Bármelyik fémelektron egyrészt az iontörzsekkel, másrészt a többi elektronnal van kölcsönhatásban. Vegyünk egyszerűségeként egy egy-vegyértékű fémet! Ekkor az iontörzsek száma megegyezik a fémes kötést létrehozó elektronok számával. Tehát bármelyik elektront tekintve a pozitív töltésű iontörzsek és a többi, negatív töltésű elektron száma gyakorlatilag megegyezik ($N \approx N - 1$, $N \gg 1$), ezért semlegesítik egymást. Tehát az elektron szabadon mozoghat az egész fém belsejében. Ugyanakkor tapasztalati tény, hogy normál körülmények között az elektron nem lép ki a fémből. Ezt úgy fogjuk modellezni, hogy az elektront egy potenciáldobozba tesszük. A doboz mérete a fém makroszkópikus méretével egyezik meg és az egyszerűség végett kocka alakú. (2.füzet, 75. oldal.)

Az egyelektron pályaalapotokat tehát egy dobozba zárt elektron Schrödinger egyenlete határozza meg. A kvantummechanikai tanulmányaink során ezt az egyenletet már megoldottuk (1.füzet, 19-20. oldal). Eszerint egy pályaalapot három kvantumszámmal az $\{n_x, n_y, n_z\}$ -vel jellemezhető. Az energiaszinteket pedig e három kvantumszám négyzetösszege határozza meg. A pályaalapotok degeneráltak.

Ezeket a pályaalapotokat kell, a Pauli-elv szerint, az N számú elektronnal betölteni. Mivel az N nagyon nagy (Avogadro számnyi!) ezért a betöltött állapotok majd mindegyike relatíve magas energiaszintekhez fog tartozni. Ez azt jelenti, hogy az \mathcal{E}_i kvantált energiaszintek relatív távolsága igen kicsi lesz. (1.füzet, 18. oldal.)

Azaz folytonos energiaskálára térhetünk át. Ekkor a „ d_i ” degeneráció helyett bevezetjük az $g(\mathcal{E})$ állapotsűrűség fogalmát. (2. Füzet, 80. oldal.) Eszerint a $g(\mathcal{E})d\mathcal{E}$ azon állapotok számát jelenti, amelyek energiája az $(\mathcal{E}, \mathcal{E} + d\mathcal{E})$ tartományba esik. A Pauli elv szerint minden pályaalapothoz két spin-állapot is tartozik. Tehát a teljes (spinpálya) $g(\mathcal{E})$ állapotsűrűség az $N(\mathcal{E})$ pályaalapot sűrűség kétszerese lesz.

Határozzuk meg az $N(\mathcal{E})$ pályaalapot sűrűséget! Minden pályaalapotot három kvantumszám az (n_x, n_y, n_z) határoz meg. Ezért az $\{n_x, n_y, n_z\}$ koordináta-rendszerben egy pont egy pályaalapotot fog reprezentálni. A kvantumszámok értéke csak pozitív egész szám lehet. Egy adott állapothoz tartozó energiaszint értéke $\mathcal{E}_i = E_0(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$.

Tekintsük azokat az állapotokat, amelyek energiája az $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$ tartományba esik! Ezen állapotokat reprezentáló pontok az $\{n_x, n_y, n_z\}$ koordináta-rendszerben egy gömbhéj nyolcadban vannak. Mivel az n_i kvantumszámok csak pozitív egész számokat vehetnek fel, ezért minden egyes egységnyi térfogatban csak egy reprezentáns pont van. Ezért az $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$ tartományban lévő állapotok száma megegyezik az említett gömbhéj-nyolcad térfogatával. Így meghatározható a pályaalapot sűrűség, amelyre az adódik, hogy $N(\epsilon) \propto \sqrt{\epsilon}$.

Az állapotok betöltését az $f^{FD}(\epsilon, T)$ Fermi-Dirac eloszlásfüggvény határozza meg. Bevezetjük az elektronok energia szerinti eloszlását megadó $n(\epsilon)$ függvényt. Eszerint az $n(\epsilon)d\epsilon$ megadja azon elektronok számát, amelyeknek az energiája az $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$ tartományban van.

Az alapállapot (nulla Kelvin hőmérsékletű) elektrongázban az ϵ_{F0} Fermi-energia szint alatt minden állapot be van töltve fölötte pedig minden állapot üres. A betöltött állapotok száma tehát éppen N kell, hogy legyen. Ez a feltétel a Fermi szintet egyértelműen meghatározza. Eredményül az adódik, hogy az ϵ_{F0} értéke az illető fém térfogati elektronsűrűségétől függ.

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 3. oldal

Érdeemes megvizsgálni azt, hogy az imént kapott ϵ_{F0} érték a "hétköznapi" energiákhoz képest mekkora? Az összehasonlítást azonban nem az energia skálán, hanem a nála sokkal szemléletesebb hőmérséklet skálán fogjuk elvégezni. Erre szolgál a T_F az ún. „Fermi hőmérséklet” fogalma. Ismeretes, hogy a klasszikus ideális gáz átlagenergiája, az ekvipartíció törvénye szerint, a gáz hőmérsékletével arányos.

A T_F Fermi hőmérsékleten értjük **annak az ideális gáznak a hőmérsékletét, amelynek az átlagenergiája megegyezik a nulla Kelvin fokos elektrongáz átlagenergiájával.**

A fémek esetén a T_F kb. 10 000 Kelvinnek adódik. (Összehasonlításképpen, a napkorona hőmérséklete kb. 6000 Kelvin). Tehát a Pauli elvből adódó Fermi energia a klasszikus fizikai energiáskálán meglehetősen nagy érték. Ez azt is jelenti, hogy ha a fém hőmérséklete (pár száz fokkal) megemelkedik, akkor a vezetési elektronjainak az átlagenergiája relatíve alig változik. Tehát a szobahőmérsékletű fém vezetési elektronjait nulla Kelvin fokos elektrongáznak lehet tekinteni. (Ugyanis a 300 Kelvin sokkal kisebb mint a 10 000 Kelvin!)

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 4. oldal

2.1.2. A szabadelektron modell alkalmazásai

A Sommerfeld féle szabadelektron modell mai szilárdtestfizikai ismereteinkhez képest nagyon primitívnek tűnhet. Megszületése (1928) mégis rendkívül nagy jelentőségű volt. Először sikerült ugyanis segítségével olyan jelenségeket megmagyarázni, amelyekkel szemben a klasszikus fizika tehetetlennek bizonyult.

2.1.2.1. A szabad elektrongáz fajhője

Az elektronok $n(\epsilon)$ energia szerinti eloszlását a $2N(\epsilon)$ állapotsűrűség függvény és az $f^{FD}(\epsilon, T)$ Fermi-Dirac eloszlásfüggvény szorzata adja meg. Az előzőekből következik, de a részletes számítás is azt bizonyítja, hogy a T hőmérsékletű szabad elektrongáz $\epsilon_F(T)$ Fermi energiája a "hétköznapi" hőmérsékleti tartományban gyakorlatilag ϵ_{F0} értékűnek vehető. A Fermi Dirac eloszlásfüggvény nulla Kelvinben egy lépcsőfüggvény. A T hőmérsékleten ez kissé "lekerelkedik". A változás azonban az ϵ_{F0} értéknek csak körülbelül a $4kT$ nagyságú környezetére korlátozódik. Ez fizikailag azt jelenti, hogy csak azok az elektronok kerülhetnek magasabb energiájú állapotba (azok gerjesztődnek), amelyeknek a kezdeti energiája a Fermi szint közelében volt. A T hőmérsékleten a gerjesztett elektronok N_g száma az N összelektron számnak csak a töredéke, közelítőleg a

T/T_F hányada. A T hőmérsékletű elektrongáz energiája tehát az alapállapot energiától csak kevésbé ($N_g kT$ - vel) tér el. Ez azt is jelenti, hogy fémekben az elektronok fajhője elhanyagolható az iontörzsek fajhőjéhez képest. A Dulong-Petit törvénynek tehát ez a kvantummechanikai magyarázata. (II. füzet 87. oldal)

2.1.2.2. A kontakt potenciál

Két azonos hőmérsékletű, de különböző fém szoros összeillesztésekor a két fém között potenciálkülönbség (az ún. kontakt potenciál) lép fel.

A két fém kilépési munkája (I. füzet 5. oldal) legyen különböző: $\Phi_2 > \Phi_1$. Amíg a két fém egymástól távol van, addig két külön rendszerről beszélhetünk. Ha a fémeket "szorosan" összeillesztjük, akkor az atomi skálán a két fém elektronjait csak egy "keskeny" potenciálgát fogja elválasztani egymástól. Ezen a potenciálgáton keresztül, alagúteffektus révén a két elektrongáz kapcsolatba lép egymással. Azaz a két fém egyetlen kvantummechanikai rendszert alkot. A fémelektronokat nulla Kelvin fokos elektrongáznak lehet tekinteni. Kezdetben, az egyik fém (abban, amelynek a kilépési munkája a kisebb) magasabb kinetikus energiájú elektronok is lesznek mint a másikban. Így ΔN számú, nagyobb energiájú elektron átmegy az egyik fémből a másikba. Ezért az egyik fém (abban, amelynek a kilépési munkája a kisebb) elektronhiányba kerül, a másikban elektronfelesleg lép fel. Ennek hatására a két fém között egy (elektrosztatikus) potenciálkülönbség lép fel. Mivel a ΔN sokkal kisebb mint a fémelektronok teljes száma, ezért a még betöltött maximális energiaszintek (\mathcal{E}_{F1} és \mathcal{E}_{F2} , a független Fermi szintek) helyzete egy-egy fémen belül gyakorlatilag nem változik meg. A két fém között fellépő potenciálkülönbség hatására az eredeti Fermi szintek egymáshoz képest eltolódnak. Éppen annyi ΔN elektron fog átmenni az egyik fémből a másikba, hogy a két Fermi szint egyenlő legyen. Egy kvantummechanikai rendszerben ugyanis csak egyetlen Fermi szint van, amit a rendszerben lévő összes elektronok száma határoz meg.

$$\text{A két fém között fellépő kontakt potenciál tehát } \Delta U = \frac{1}{e}(\Phi_2 - \Phi_1)$$

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 6. oldal

2.2. Szilárd testek energiasáv elmélete

A fémek szabadelektron modellje túl egyszerű ahhoz, hogy a szilárd testek elektromos tulajdonságait részleteiben is leírja. Láttuk, hogy a fémelektronok dinamikai viselkedése csak az \mathcal{E}_F Fermi-szint környezetében számítt. Szabadelektron gázról lévén szó könnyen meghatározható a Fermi szinthez tartozó elektronállapotok k_F Fermi-hullámszáma és így a λ_F Fermi-hullámhossz is. Ez utóbbira az adódik, hogy gyakorlatilag az atomi rács távolsággal egyezik meg. Ugyanakkor ismeretes az is, hogy a fémek fizikai tulajdonságait éppen a Fermi-szint közelében lévő elektronok dinamikai tulajdonságai határozzák meg. Ez pedig azt jelenti, hogy pont ezen elektronok szempontjából nem hanyagolható el az atomi rács szerkezet jelenléte. Ezért tehát a szabadelektron modellünket tovább kell fejleszteni. Ennek egyik lehetséges módja az, hogy valami módon figyelembe vesszük azt is, hogy a szilárd test atomjai szabályosan (kristályrácsot alkotva) helyezkednek el térben.

Ennek a szabályos rendnek az elektronokra gyakorolt hatása már egydimenziós modellben is megnyilvánul. Minden, e jelenségkörrel kapcsolatos fogalom már itt is megjelenik. Nagy előnye ugyanakkor az, hogy matematikailag könnyen kezelhető és így a modell viszonylag egyszerűen végigszámolható. Ezért a tárgyalásunkat ezzel a modellel kezdjük. Az alapfogalmak tisztázása után térünk át a realitás (háromdimenziós) modellekre.

2.2.1. A periodikus potenciálú tér egydimenziós modellje

Egy szabad atom (a kémiai tulajdonságait tekintve) atommagból, törzselektronokból és vegyérték elektronokból áll. Mint láttuk, törzselektronoknak a teljesen betöltött (zárt) (al)héjakon lévő elektronokat nevezzük. Az atommag és a törzselektronok együtt alkotják az iontörzset. Kémiai kölcsönhatások során (vegyüléskor) az iontörzsek nem változnak. A kémiai kötések létrejötte során csak a be nem töltött (al)héjakon lévő vegyérték elektronok állapota változik meg (mint azt láttuk, molekulapályákká alakulnak). Célszerű ezért az iontörzset egységesen kezelni, és a vegyérték elektronokra kifejtett hatását egy egyszerű modellpotenciállal leírni. Első közelítésben ez egy alkalmasan megválasztott potenciálgödörrel lehetséges.

Helyezzünk el az x tengely (mint egyenes) mentén „ N -db”, nagyon nagy számú atomot, egymástól (atomnyi) „ a ” ún. rácsávolságra. Ezzel egy $L=Na$ hosszúságú „egydimenziós kristályt” kaptunk. A vegyérték elektronfelhők átfedik egymást, azaz „kollektivizálódnak”. Így a vegyérték elektronok az egész kristályhoz, nem pedig csak egy iontörzshöz fognak tartozni. Ezeket a kollektivizálódott, (volt) atomi vegyértékelektronokat kristályelektronoknak fogjuk nevezni. Az iontörzsek eredő potenciálja (a kristály belsejében) egy egydimenziós $V(x)$ periodikus potenciál lesz. Ez a térbeli periodicitás a kristály két végének a környezetében (a kristály „felületi” rétegében) elromlik.

A felületi réteg mérete elhanyagolható a kristály teljes térfogatához képest. Így az elektron kristálybeli tulajdonságait elsősorban a periodikus potenciálú tartomány fogja meghatározni. Ezért egy olyan modellt fogunk kidolgozni, amelyik a kristály felületének a hatásait elhanyagolja. Tehát egy véges méretű (geometria felülettel bíró), de fizikai felülettel nem rendelkező kristálymodellt kell konstruálnunk. Ennek módja igen egyszerű. Rakjunk szorosan egymás mellé az x tengely mentén végtelen sok „ $L=Na$ ” hosszúságú kristályt. Ennek a végtelen atomsornak bármelyik L hosszúságú szakasza fogja modellezni a vizsgálandó egydimenziós kristályunkat. Ezzel elértük azt, hogy a felület közelében ugyanazok a fizikai viszonyok uralkodjanak, mint a kristály belsejében. A kristályelektronok $\psi(x)$ állapotfüggvényének minden L hosszú szakaszra ugyanannak kell lennie, hiszen minden L hosszú szakasz ugyanazt a kristálymodellt valósítja meg. Azaz teljesülnie kell a $\psi(x+L) = \psi(x)$ ún. Born-Kármán féle periodikus határfeltételnek.

A következőkben olyan általános eredményekre fogunk jutni, amelyek függetlenek a kristályrács egyedi fizikai tulajdonságaitól, például attól, hogy konkrétan milyen atomokból áll a kristály. Pusztán a kristályrács geometriai tulajdonságainak az ismerete alapján nagyon alapvető és jellegzetes fizikai következtetésekre juthatunk. Az egyik ilyen fontos tulajdonság éppen (a félvezetők elektronikájában alapvetően fontos) ún. „energiasávok” létezése lesz.

A kristályban fellépő $V(x+a) = V(x)$ atomi periodicitásnak az a következménye, hogy minden iontörzs környezetében ugyanolyan fizikai viszonyok uralkodnak. Mindezt másképpen úgy szoktuk mondani, hogy a kristály „transzlációs” szimmetriával rendelkezik. (transzláció=átvitel) Hiszen a kristályt egy „ a ” atomi rácsávolsággal eltolva az önmagába megy át, azaz fizikailag semmiféle változás nem következik be. Mindezekből az következik, hogy egy kristályelektron minden iontörzs környezetében ugyanolyan valószínűséggel lesz jelen. Azaz a kristályelektronokhoz rendelt (valószínűségi) elektronfelhő is periodikus lesz, tehát $|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2$. Magára a hullámfüggvényre nézve ebből csak az következik, hogy $\psi(x+a) = c\psi(x)$, ahol $|c| = 1$. Azaz egy „ a ” rácsávolsággal arrébb menve a hullámfüggvény egy egységnyi abszolút értékű komplex számmal (c) szorozódik. Így „ $L=Na$ ”-val arrébb menve a hullámfüggvény c^N -el fog szorozódni. De a $\psi(x+L) = \psi(x)$ periodikus határfeltétel miatt ennek éppen egynek kell lennie. Mint az a matematikai tanulmányainkból ismeretes, a $c^N = 1$ egyenletnek N darab komplex megoldása van, amelyek a komplex síkon egy egység sugarú körön helyezkednek el. Ezen komplex számok jellemzésére a γ Euler szög helyett a $\gamma = ka$ összefüggéssel definiált k mennyiséget fogjuk használni. A $c = e^{j\gamma} = e^{jka}$ komplex egységvektorra vonatkozó periodicitás ($e^{j(\gamma+2\pi)} = e^{j\gamma}$) tehát „ k ”-val is kifejezhető. Éppen „ N ” darab különböző „ k ” érték van.

Az eddigi eredményeinket matematikailag tömören az ún. Bloch tételben fogalmazhatjuk meg:

$$\psi(x+a) = e^{jka} \cdot \psi(x).$$

Tehát a kristály transzlációs szimmetriájának a következményeként a kristályelektronok állapotfüggvényeinek ki kell elégítenie a Bloch tételt. A Bloch tételt kielégítő függvények egy általános osztályát Bloch függvényeknek (illetve Bloch állapotoknak) nevezzük

$$\psi(x) = u(x) \cdot e^{j \cdot kx}, \text{ ahol } u(x+a) = u(x).$$

Láthatóan ezek olyan „ k ” hullámszámú síkhullámok, amelyek amplitúdója rács-periodikus függvény. Ezért röviden csak "amplitúdó-modulált síkhullámnak" hívjuk őket. A Bloch állapotfüggvények fizikailag igen szemléletesen tükrözik egyrészt a kristály nagyléptékű homogenitását (ezt jelenti a síkhullám rész) másrészt pedig az atomrács jelenlétét (ezt az amplitúdó modulációja fejezi ki).

A Bloch állapotok bevezetése matematikailag is igen nagy előnnyel jár. Ennek oka a következő. Próbáljuk meg a $\psi(x)$ állapotfüggvényt közvetlenül (numerikusan) kiszámolni a $(0,L)$ teljes kristály tartományban. Azokat a $0 \leq x_i \leq L$ $\{x_i | i = 1, 2, 3, \dots, N_o\}$ pontokat, amelyekben a hullámfüggvényt ki akarjuk számolni "osztópontoknak" nevezzük. Ahhoz, hogy a számolás valóban tükrözze a $V(x)$ potenciálmenetet, az osztópontok távolságának sokkal kisebbnek kell lennie, mint az „ a ” rács-távolság. Azaz az osztópontok „ N_o ” száma sokkal nagyobb kell, hogy legyen mint a rácsban lévő atomok száma. Avogadro számnyi rácsatom esetén a feladat megoldhatatlan.

Ha ugyanezt a feladatot a Bloch állapotok halmazán akarjuk megoldani, akkor csak az $u(x)$ amplitúdó-függvényt kell meghatározni. Mivel azonban, az $u(x)$ egy rács-periodikus függvény, ezért elegendő azt csak a $(0,a)$ tartományban kiszámítani. Így a numerikus számításokhoz szükséges osztópontok száma (pl.) 100-1000-re csökken.

Ha a $\psi(x)$ állapotfüggvényre vonatkozó Schrödinger egyenletbe beírjuk a Bloch-féle alakot, akkor megkapjuk az $u(x)$ amplitúdó-függvényre vonatkozó egyenletet. Az igaz ugyan, hogy ezt csak a $(0,a)$ tartományban kell megoldani, de ezeket a megoldásokat minden egyes „ k ” értékre meg kell keresnünk. Ezek száma pedig éppen a rácsatomok számával egyezik meg. Látszólag tehát „nem nyertünk semmit”! Valójában azonban, mint az a következőkben ki fog derülni, a numerikus számításokat egyáltalán nem szükséges minden lehetséges „ k ”-értékre elvégezni. Éppen ebben rejlik a Bloch-állapotok bevezetésének az egyik nagy (praktikus) előnye.

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 9. oldal

Valójában minket az érdekel, hogy egy elektron mekkora energiával rendelkezhet a kristályban. Ezek az egyelektron energiaszintek az $u(x)$ amplitúdó-függvényre vonatkozó egyenlet sajátértékei. Az egyenletben paraméterként szerepel a Bloch állapotok „ k ” hullámszáma is. Mint láttuk ez a $(0, 2\pi/a)$ tartományban N különböző diszkrét értéket vehet fel. Mivel az N nagyon nagy szám így a keresett egyelektron energia a k hullámszámnak $\mathcal{E}(k)$ (kvázi)folytonos függvénye lesz. Ugyanakkor egy adott k érték esetén a sajátérték egyenletnek az $\mathcal{E}_v(k)$ megoldásai diszkrét $v = 1, 2, 3, \dots$ energiaszintek lesznek. Ha az első ($v = 1$), a második ($v = 2$), a harmadik ($v = 3$), ..stb. energiaszintekhez tartozó energiákat a „ k ” paraméter függvényeként felrajzoljuk, akkor elegendően sima görbét kapunk. Ez azt is jelenti, hogy egyáltalán nem szükséges minden egyes k értékre a számolásokat elvégezni. Már viszonylag kevés pontból a $\mathcal{E}_v(k)$ görbék megrajzolhatók. Ez pedig óriási számolástechnikai előny! (8. oldal)

Megkaptuk tehát a kristályrácsban mozgó elektronok lehetséges energiáit. Azt tapasztaljuk, hogy az energiaszintek egymástól jól elkülönülő csoportokba rendeződnek. Egy csoporton belül az azonos v indexhez tartozó energiaszinteket találjuk. Ezeket hívjuk energiasávoknak. Egy ilyen energiasávon belül N számú (különböző k értékhez tartozó) energiaszint van. A v indexet sávindexnek nevezzük. Az energiasávokat elválasztó tartományokat "tiltott sávoknak" hívjuk.

Mint azt láttuk (7. oldal), definíció szerint, a „ k ” az $\sqrt[N]{1}$ művelet eredményével van kapcsolatban. Azaz a „ k ” és a „ $k+b$ ” (ahol $b = \frac{2\pi}{a}$) ugyanannak a komplex egységvektornak az Euler szögét határozza meg. Ezért a

$(0,b)$ azaz a $\left(0, \frac{2\pi}{a}\right)$ tartomány ugyanazokat a Bloch állapotokat meghatározó „ k ” paramétereket tartalmazza,

mint a $\left(-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}\right)$ tartomány. Tehát az $\mathcal{E}_v(k)$ görbék ez utóbbi tartományban is felrajzolhatók. Ennek az

ábrázolásnak az az előnye, hogy tükrözi a kristályrács egy másik szimmetria tulajdonságát is. A translációs szimmetrián kívül ugyanis a kristályrács rendelkezik egy ún. "pontszimmetriával" is. Ide tartozik minden olyan tükrözés vagy forgatás, amely a kristályrácsot önmagába viszi át, de a kristályrács egy pontját helyben hagyja. Egydimenziós kristály esetén egyetlen ilyen transzformáció létezik. Ez pedig egy (a „0” indexűnek nevezett) rácspontra való tükrözés. Ekkor az " na " rácspont a " $-na$ " rácspontba megy át és viszont ($n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$). Ez azt is jelenti, hogy a $(-\pi/a, +\pi/a)$ tartomány a $(+\pi/a, -\pi/a)$ tartományba, azaz önmagába transzformálódik. Mivel a pont-transzformáció semmiféle fizikai változást nem jelent, ezért változatlanok kell maradnia az $\mathcal{E}_v(k)$ görbéknek is.

A $(-\pi/a, +\pi/a)$ tartományt Brillouin zónának hívjuk. Fontos tulajdonságai a következők:

- egyrészt csak különböző Bloch állapotokat meghatározó, N darab " k " pontot tartalmaz,
- másrészt a kristályrács tükrözésekor önmagába transzformálódik.

2.2.2. Az energiasávok és az atomi energiaszintek kapcsolata

Az energiasávok létezése kétségtelenül a szilárd testek egyik érdekes és a makroszkopikus viselkedésük szempontjából fontos tulajdonsága. Meg szeretnénk mutatni, hogy ez azonban korántsem olyan meglepő! Ugyanis igen szoros kapcsolat van az atomi energiaszintek és a kristályokban fellépő energiasávok között. Nevezetesen, a sávszerkezet gyökereit a szabad atomok kvantált energiaszintjeiben kell keresnünk.

A kovalens kémiai kötés egydimenziós modelljénél láttuk (II. füzet 88. oldal), hogy ha két atomot közel viszünk egymáshoz, akkor az atomi energiaszintek két, egymáshoz közeli szintre hasadnak fel. Kézenfekvő a feltételezés, hogy ha 3, 4, ..., vagy N darab azonos atomot közelítünk (pl. egy egyenes mentén) egymáshoz, akkor az atomi energiaszintek 3, 4, ... illetve N közeli szintre hasadnak fel. Megmutatjuk, hogy a sejtésünk igaznak bizonyul. Az ötlet megvalósítható és az egydimenziós modell viszonylag egyszerűen végigszámolható.

Az egydimenziós $V(x+a) = V(x)$ periodikus potenciál a szabad atomok vegyérték elektronjainak $W(x)$ modellpotenciáljából épül fel. A rácspontokba helyezett iontörzsek által létrehozott eredő potenciál a szabad atomi $W(x+na)$, ($n = 0, 1, 2, \dots, N-1$) potenciálok összege lesz. Ebből a kristáyelektronok \hat{H} Hamilton operátora definíció szerint felírható.

Az energiára vonatkozó $\hat{H}\psi = \epsilon\psi$ sajátérték egyenletet most nem oldjuk meg. Helyette a kristályban lévő kristáyelektronok delokalizált (az egész kristályra kiterjedő) $\psi(x)$ állapotait egy $\tilde{\psi}(x)$ állapotfüggvénnyel közelítjük. Ezt a közelítő függvényt a rácspontokban lévő atomok $\chi(x-na)$ szabad atomi állapotfüggvényeiből építjük fel. Az ötlet a kovalens kötés molekulapályáinak az atompályákból való előállításánál tanultakból adódik (II. füzet 90. oldal) és a kvantumkémiaiában LCAO módszernek hívják. (Linear Combination of Atomic Orbitals = Atompályák lineáris kombinációja)

Az egzakt $\psi(x)$ egyelektron állapotfüggvényt tehát a $\tilde{\psi}(x)$ LCAO függvénnyel közelítjük.

$$\psi(x) \approx \tilde{\psi}(x) = A \cdot \sum_n e^{ikna} \chi(x-na)$$

Az $\chi(x-na)$ atompályák együtthatóit úgy kell megválasztanunk, hogy a $\tilde{\psi}(x)$ az előzőekben tanultak értelmében teljesítse a Bloch tételt, azaz egy normált Bloch állapot legyen.

A teljes kristálytérfogatra normált közelítő LCAO-Bloch $\tilde{\psi}(x)$ állapotfüggvények ismeretében a kristályban mozgó kristáyelektronok energiaszintjei a 4. axióma alapján közelítőleg meghatározhatók. Ennek

értelmében ugyanis a $V(x+a)=V(x)$ potenciális energiával rendelkező, $\tilde{\psi}(x)$ állapotú kristályelektronnak az energiáját a megfelelő \hat{H} Hamilton operátornak a $\tilde{\psi}(x)$ -val vett $\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle$ kvantummechanikai átlaga adja.

A számolás során először a $\hat{H}\tilde{\psi}(x)$ függvényt határozzuk meg. Ennek kapcsán kihasználtuk azt, hogy a $\chi(x-na)$ atomi állapotfüggvény az „na” helyen lévő atom „szabad atomi” állapotfüggvénye, azaz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(x-na)+W(x-na)\cdot\chi(x-na)=\varepsilon_A\cdot\chi(x-na)$$

Ezután képezzük a $\hat{H}\tilde{\psi}(x)$ -nek a $\tilde{\psi}(x)$ -val vett skalár szorzatát.

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 12. oldal

A $\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle$ skalár szorzat számításakor egy újabb közelítést alkalmazunk. Ennek fizikai tartalma az, hogy (feltételezzük!) az atomok közelítése során egy atomi állapotra csak a közvetlen szomszédos atomok vannak hatással, a távolabbiak nem. Eredményül adódik, hogy:

$$\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle = \varepsilon(k) = \varepsilon_A + E_0 + E_1 \cos(ka)$$

A kapott végeredmény szépen igazolta a várakozásunkat. Azaz a kezdeti ε_A atomi energiaszint, a koszinuszos tagnak megfelelően, „N” szintre hasadt fel. (Mint az ismeretes ugyanis, a „k” N-féle különböző értéket vehet fel.)

Azaz a kristályelektronok energiájának „sávos szerkezete” az atomi energiaszintek N-szeres felhasadásából származik, és mint ilyen, természetes következménye az atomi kötött állapotok energia kvantálásának.

A számolás eredményeként olyan $\varepsilon_v(k)$ $v=1,2,3,\dots$ görbék adódtak, amelyeket az előzőekben (9. oldal) általános elvek alapján megsejtettünk. Most az energiasáv szélessége is szemléletes fizikai tartalommal bír, hiszen éppen a szomszédos $\chi(x)$ atomi állapotok „átfedésének” a mértékétől függ. Ez azt jelenti, hogy adott „a” rácsávolság esetén a magasabb energiájú (azaz a magasabb sávindexű) energiasávok szélesebbek. Ugyanis a magasabb energiájú atomi állapotok kiterjedtebbek (az elektronfelhő mérete nagyobb) és így a szomszédos $\chi(x)$ állapotfüggvények átfedése nagyobb mértékű.

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 13. oldal

2.2.3. Az energiasávok és a szabad elektrongáz kapcsolata

A Bloch állapotban lévő rácselektronokat sokszor Bloch elektronoknak hívjuk. A Bloch elektronok lehetséges energiáit magadó $\varepsilon_v(k)$ $v=1,2,3,\dots$ görbék együttesét „sávabrának” nevezzük. A sávabra tehát a $(-\pi/a, +\pi/a)$ Brillouin zónán értelmezett többértékű függvény. Ezt a függvényt az értelmezési tartomány kiterjesztésével egyértékűvé tehetjük. Erre az ad lehetőséget, hogy a „k” és a „k+2 π/a ” hullámszámok pontosan ugyanazt a Bloch állapotot adják meg (7. oldal). Ezért az első ($v=1$) energiasávhoz tartozó $\varepsilon_1(k)$ görbét továbbra is a $(-\pi/a, +\pi/a)$ tartományon értelmezzük, de a második ($v=2$) energiasávhoz tartozó $\varepsilon_2(k)$ görbét a nem összefüggő $(-2\pi/a, -\pi/a) \cup (\pi/a, +2\pi/a)$ tartományon fogjuk definiálni. Könnyen belátható, hogy ez az utóbbi tartomány is rendelkezik a Brillouin zónákra kötelezően előírt tulajdonságokkal (9. oldal). Ezért ezt második Brillouin zónának nevezzük, míg a kiindulásul használt középső tartomány neve első Brillouin zóna lesz. Az eljárás a $v=3,4,\dots$ esetekre értelemszerűen folytatható. Eredményül végül is egy egyértékű $\varepsilon(k)$ függvény adódik, amelynek értelmezési tartománya az egész „k” tengely és szakadása (ugrása)

van a Brillouin zónák határain, azaz a $\{n\pi/a \mid n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots\}$ pontoknál. Ennek az eljárásnak a neve a "kiterjesztett Brillouin zónás" ábrázolás.

Az $\mathcal{E}(k)$ sávábrának a "kiterjesztett Brillouin zónás" ábrázolása nem pusztán formális matematikai játék volt, hanem mélyebb fizikai tartalommal is bír. Lehetőségünk nyílik ugyanis arra, hogy matematikailag is precíz kapcsolatot teremtsünk a bevezetőben tárgyalt szabadelektron modell és a Bloch modell között. Ennek az alapja az, hogy az egydimenziós L hosszúságú kristály szabadelektron modelljében a feltételezett, azonosan zérus potenciál is rendelkezik a translációs szimmetriából adódó "periodicitással". Ugyanis a $V(x) = V(x+a) \equiv 0$ minden x -re teljesül. Ezt fizikailag úgy lehet elképzelni, hogy geometriai pontokkal kijelöljük a rácsatomok helyét, de iontörzsüket oda nem tesszük. Ezáltal a translációs szimmetria pusztán "geometriai" tulajdonság lesz, a potenciál mindenhol azonosan zérus marad. A modellt találóan "üres rács modellnek" nevezik. A translációs szimmetriát tükröző $\psi(x)$ Bloch állapotok amplitúdója most $u(x) = u_0 = \text{állandó}$ lesz. Azaz maguk a Bloch állapotok egyszerű síkhullámok lesznek. Ennek megfelelően a sávára (természetesen) a szabadelektronokra jellemző jól ismert $\mathcal{E}(k) \propto k^2$ parabola. A "sávok" összeérnek, ezért nincsen tiltott energia tartomány.

A rácsatomok jelenléte módosítani fogja ezt a parabolát. Az $\mathcal{E}(k)$ a Brillouin zóna határain mintegy "megszakad és kitéredezik". Mindez elvezet a már jól ismert $\mathcal{E}_v(k)$ függvényhez.

Ő OROSZ L. Szilárdtestfizika 14. oldal

2.3. Az effektív tömeg közelítés

2.3.1. Az effektív tömeg fogalma

A kristályrácsban lévő elektronok kvantummechanikai tárgyalást rendkívüli módon megkönnyíti az, hogy a periodikus potenciál miatt az elektron lehetséges állapotai Bloch féle állapotok. Az ezekhez az állapotok tartozó energiaszinteket a sávra adja meg. Mivel a sávra $\mathcal{E}(k)$ függvénye eléggé sima görbe, ezért a konkrét számításokat elegendő csak "néhány" " k " pontban elvégezni.

Az elektronok kristálybeli állapota önmagában nem túl érdekes. Sokkal izgalmasabb annak a vizsgálata, hogy mi történik akkor, ha a kristályelektronokkal kölcsönhatásba lépünk? Például a makroszkopikus szilárd testre elektromos vagy mágneses teret kapcsolunk. Az elektronikus eszközökben pontosan ez történik. Így gyakorlati szempontból a kérdés igencsak indokolt. Hiszen az erre adott válasz alapján érthetők meg a félvezető alkatrészekben lezajló azon alapvető fizikai folyamatok, amelyek a makroszkopikus elektromos tulajdonságokat határozzák meg. Ez pedig minden leendő és gyakorló villamosmérnökök számára fontos dolog.

Ha egy egydimenziós kristályra külső homogén (makroszkopikus) elektromos teret kapcsolunk, akkor a kristályelektronok $V(x)$ periodikus potenciálja megváltozik. A $V(x)$ atomi és a $W(x)$ külső (csak makroszkopikus léptékben változó) potenciálok szuperponálódnak. Az eredő potenciál már nem periodikus. Elvész az ebből származó előny és a megfelelő Schrödinger egyenlet (a 8. oldalon részletezett okok miatt) gyakorlatilag megoldhatatlanná válik.

A kiutat az a felismerés adja, hogy amíg a kristályatomok okozta potenciálváltozás atomi távolságokon belül történik, addig a külső potenciál nagyon lassan (csak makroszkopikus távolságokon) változik meg. Ez pedig lehetőséget nyújt arra, hogy a kétféle hatást egymástól elkülönítve (de nem egymástól függetlenül!) kezeljük. A rácsatomok hatását továbbra is a megtanult módon (Bloch állapotokon keresztül) tárgyaljuk, míg a külső potenciál hatását az Ehrenfest tétel alkalmazásával vesszük figyelembe. Mint azt láttuk ez a tétel adja meg az átmenetet a kvantummechanikából a klasszikus mechanikába (II. füzet 49.-50. oldal). Ezért tehát igen alkalmas arra, hogy a makroszkopikus léptékű mechanikai jelenségeket kvantummechanikai fogalmakkal írassuk le. A kristályelektronok fent vázolt dinamikájánál pontosan ez a helyzet.

A klasszikus mechanikai "munka tételt" kell adaptálnunk a jelenlegi problémára.
(Adaptál=alkalmassá tesz.)

Az (általánosított) munkatétel szerint, egy mechanikai rendszer energiájának a megváltozása a rendszeren ható külső erők munkájával egyenlő. Mindez tetszőleges kicsiny „dt” időtartamokra is érvényes! Tekintsük most "rendszernek" a $V(x+a) = V(x)$ periodikus potenciálú térben mozgó kristályelektront. Ennek

az $\mathcal{E}(k)$ energiáját az előzőekben a kvantummechanika segítségével már meghatároztuk. A munkatétel szerint a kristályelektronnak ez az $\mathcal{E}(k)$ energiája fog a külső elektromos tér hatására megváltozni.

Az Ehrenfest tétel szerint a dinamikai változók kvantummechanikai átlagai között pontosan a klasszikus mechanikában érvényes összefüggések állnak fenn. A kvantummechanikában a potenciált, a klasszikus fizikában az erőt használjuk a részecskék dinamikai viselkedésének a tárgyalásánál. Láttuk azt is, hogy az Ehrenfest tétel segítségével az erő fogalmát csak lassan változó potenciálok esetén lehet bevezetni (II. füzet 49. oldal). Ezért most a kristályelektron állapotát nem (az egész kristályra kiterjedt) Bloch függvényként fogjuk megadni, hanem e helyett Bloch függvényekből összerakott (lokalizált) hullámcsomagokkal fogunk dolgozni. Ez azért tehető meg, mert a Kvantummechanika 1. axiómája szerint, ha a Bloch állapotok lehetséges állapotokat adnak meg, akkor azok lineáris kombinációja (ezek a hullámcsomagok) szintén lehetséges állapotok lesznek. Mivel pedig ezek e „hullámcsomag” állapotok (az adott esetben) sokkal kényelmesebben kezelhetők, így célszerű ezek segítségével megismerni a kristályelektronok dinamikai tulajdonságait. Egy ilyen hullámcsomag olyan, hogy a Δx kiterjedése az L makroszkopikus testméretnél sokkal kisebb (szinte „pontoszerű”), de ugyanakkor az „a” rács távolságnál sokkal nagyobb (azaz a hullámcsomag nagyon sok rácsatomot fed le). Ezzel az eljárással a kristályelektron olyan modelljéhez jutottunk, amely makroszkopikus viselkedésében pontoszerű, atomi skálán azonban a kvantummechanika törvényeit követi.

A pontoszerű kristályelektron sebessége nyilvánvalóan a Bloch csomag csoportsebességével lesz egyenlő. Az $\mathcal{E}(k) = \hbar \omega(k)$ ismert összefüggés felhasználásával a csoportsebesség az általános hullámtani definíció alapján számolható, azaz $v_{cs} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\mathcal{E}}{dk}$. Emiatt az $\mathcal{E}(k)$ függvényt „diszperziós relációnak” is nevezik

A Bloch csomag spektrális tulajdonságai ugyanazok, mint amit e tárgyunk bevezetőjében a hullámcsomagokról általában elmondtunk (I. füzet 2. oldal). A Bloch csomag spektrumát most természetesen a Brillouin zónán kell értelmeznünk. A fentiekben megkívtant lokalizációval rendelkező csomag spektruma (hála a sáv ábra simaságnak) már elegendően keskeny ahhoz, hogy azon belül az $\mathcal{E}(k)$ gyakorlatilag már ne változzon. Így a kristályelektronhoz egy meghatározott $\mathcal{E}(k)$ energiaértéket lehet rendelni. Valójában ez az energia fog változni a külső tér hatására.

A Bloch csomaggal számolt Ehrenfest tétel szerint a (makroszkopikusan pontoszerűnek tekintett) rácselektronra ható külső (makroszkopikus) erő a hullámcsomag spektrumát fogja mozgatni.

A keskenynek tekinthető Δk szélességű spektrum közepe legyen „k”. A Δk értékének a megválasztását két célszerű szempont határozza meg. Az egyik az, hogy Δk legyen elegendően kicsi a Brillouin zóna méretéhez képest (azaz $\Delta k \ll \frac{\pi}{a}$). Ez azért kell, hogy a („pontoszerűnek” tekinthető) spektrum helyzetét a

zónában a „k” vektorral lehessen azonosítani. A másik szempont az, hogy a Δk legyen elegendően nagy ahhoz, hogy az így előállított hullámcsomag mérete (lokalizáltsága) sokkal kisebbnek adódjék, mint a kristály makroszkopikus mérete (azaz $\Delta x \ll L$). Ugyanakkor fontos az is, hogy a hullámcsomag már sok rács pontot fedjen le ($\Delta x \gg a$) azért, hogy azok hatása mintegy kiátlagolódjék. Mindezek eredményeként a makroszkopikus skálán egy „pontoszerű” elektron kvantummechanikai modelljéhez juthatunk.

Végül is a munkatételben szereplő külső F erő ismeretében az $F = \hbar \dot{k}$ egyenlet adódik. Azaz, mintha dinamikai szempontból a Bloch hullámcsomag spektrumának a közepéhez rendelt $\hbar k$ „impulzusra” felírt newtoni mozgástörvény lenne előttünk. Ennek hatása a hullámcsomag térbeli mozgásában úgy nyilvánul meg, hogy a hullámcsomag gyorsulni fog. A hullámcsomag a_{cs} gyorsulása és a kristályelektronra ható külső erő között egy lineáris kapcsolat van. Ez pedig az ún. effektív tömeg (m^*) fogalmának a bevezetését teszi lehetővé: $F = m^* \cdot a_{cs}$.

Végezetül ide kívánczik egy fontos megjegyzés. Az $F = \hbar \dot{k}$ egyenletben szereplő „ $\hbar k$ ” kifejezés szabadelektron esetén valóban az elektron impulzusát adná. Most azonban a „k” a Bloch állapotot meghatározó

hullámszámot jelenti. A Bloch állapot pedig nem elégíti ki a $\hat{p}\psi = p \cdot \psi$ impulzus sajátérték egyenletet. Ezért Bloch állapotok esetén a „ $\hbar k$ ” kifejezést „kváziimpulzusnak” nevezzük.

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 16. oldal

Az $m^*(k)$ effektív tömegnek szemléletes jelentése van. Definíció szerint ugyanis a (pontoszerű) kristályelektronra ható külső erőnek és a (csoport)gyorsulásnak a hányadosával egyenlő. Tehát a gyorsulást egyedül a külső erőnek tulajdonítjuk. Ugyanakkor az elektron a kristályráccsal is kölcsönhatásban van. A kristályrács hatását az effektív tömegben az $\mathcal{E}(k)$ diszperziós reláción keresztül vettük figyelembe.

Az $\mathcal{E}(k)$ ismeretében az $m^*(k)$ effektív tömeg kiszámolható. Látszik, hogy ez negatív értéket is felvehet. Ez azonban a fizikai jelentése ismeretében, már nem meglepő. Azt jelenti ugyanis, hogy vannak olyan hullámcsomag állapotok, amely esetén a hullámcsomag a külső F erővel ellentétes irányban gyorsul. Azaz az elektronra a rácsatomok olyan hatást fejtenek ki, hogy az a külső erővel szembe fog gyorsulni.

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 17. oldal

2.3.2. Szilárd testek sávszerkezete és az elektromos vezetési tulajdonságok kapcsolata

Láttuk tehát, hogy a kristályelektronok lehetséges energiaszintjei sávokba rendeződnek. Minden sávban N darab (azaz éppen rácsatom számnyi) különböző Bloch állapotnak megfelelő energiaszint van. A Pauli-elv miatt minden Bloch (pálya)állapotban maximum két elektron lehet. Ezért egy energiasávban $2N$ elektron számára van hely. Mint ismeretes az „ N ” a kristályrácsot felépítő atomok (iontörzsek) számát jelenti. Ezeket az elektronállapotokat kell a kristályelektronokkal (azaz a kollektivizálódott vegyérték elektronokkal) betölteni. Ha a kristály „ v ” vegyértékű atomokból épül fel, akkor a kristályelektronok száma „ vN ”.

Egydimenziós kristálymodell esetén, ha a „ v ” páratlan szám, akkor lesz olyan sáv, amelyik csak félig lesz betöltve. Az ilyen kristály elektromos vezető lesz. Ennek az az oka, hogy ha a kristályra külső elektromos teret kapcsolunk, akkor a félig töltött sáv elektronjai a tér hatására a sávon belül magasabb energiaszintekre tudnak kerülni. Azaz a térben az elektron gyorsulni fog (15. oldal). Ezt a félig betöltött sávot „vezetési sávnak” hívjuk.

Ha a „ v ” páros szám, akkor alapállapotban (0 Kelvin hőmérsékleten) minden sáv teljesen be van töltve. (Egydimenziós modellről van most szó!) Ha a tiltott sáv „nagy” (5-10 eV), akkor az elektronok, normális körülmények között, nem tudják a tiltott sávot „átugrani”. Tehát külső elektromos tér hatására az elektronok állapota nem fog megváltozni. Ezek a kristályok elektromos szigetelők lesznek.

Ha a „ v ” páros szám és a tiltott sáv „elegendően” kicsi (kb. 1 eV), akkor 0 Kelvin hőmérsékleten a kristály az előzőek szerint elektromosan szigetelő lesz. Szobahőmérsékleten azonban, a Fermi-Dirac eloszlásnak megfelelően, a keskeny tiltott sávot átugorva, elektronok kerülnek az eddig üres sávba. Ennek a sávnak „vezetési sáv” (konduktancia sáv) a neve, míg az alatta lévő „vegyérték sávnak” (valencia sávnak) hívjuk. A vegyérték sáv legmagasabb \mathcal{E}_v energiaszintjét a „vegyérték sáv tetejének” nevezzük. A vezetési sáv legalacsonyabb \mathcal{E}_c energiaszintjének a megnevezésére a „vezetési sáv alja” kifejezést használjuk.

A kristályra elektromos teret kapcsolva a vezetési sáv elektronjai a tér hatására magasabb energiaszintre tudnak jutni. A kristály elektromos vezető lesz. A hőmérséklet növelésével nő a vezetési sávban lévő elektronok száma és így a vezetőképesség is. Mindez elmondható a vegyértéksáv elektronjairól is. Ezeket az kristályokat „félvezetőknek” hívjuk.

A vezetési sávba felkerült elektronok a sáv alján helyezkednek el. A sáv alján az $\mathcal{E}(k)$ diszperziós összefüggésnek minimuma van és így ott k^2 -el közelíthető. Az $\mathcal{E}(k) \approx k^2$ parabolikus kapcsolat pedig olyan, mintha m^* tömegű szabad elektronok mozognának a térben. Sikertől tehát a klasszikus fizikából jól ismert „tömegpont” modellt, kissé „átlényegült” formában, visszacsempészni a kvantummechanikai tárgyalást igénylő

szilárdtestfizikába. Ez a megszokott szemléletesség nagy előny, de vigyázni kell, nehogy elaltassa kvantummechanikai gondolkodásunkat.

Nyilvánvaló fontosságuk miatt a félvezetők elektromos tulajdonságaival az elkövetkezőkben még részletesebben is fogunk foglalkozni

2.4. Pozitív töltéshordozók szilárd testekben: a "lyukak"

2.4.1. A Hall effektus

Tekintsünk egy téglatest alakú kristályt! Rögzítsünk az éleihez egy $\{x, y, z\}$ koordináta rendszert! Tegyük a testet egy "z" irányú B mágneses térbe! Kapcsoljunk a rendszerre egy "x" irányú I áramot hajtó áramgenerátort! Ekkor a testnek az "y" irányra merőleges két szomszédos lapja között egy U potenciál különbség mérhető. A jelenség neve Hall effektus. A mért U feszültség arányos az átfolyó I árammal, azaz $U = R_H \cdot I$. Az arányossági tényezőt R_H -val jelöltük és Hall állandónak hívjuk. A jelenség a klasszikus "pontoszerű töltéshordozó modellel" egyszerűen értelmezhető. Az "x" irányban mozgó „q” ponttöltésre, a homogén mágneses tér hatására, "y" irányú Lorentz erő hat. Ennek következtében valamennyi „q” töltéshordozó halmozódik fel a test egyik oldalán. Mivel a test semleges kell, hogy maradjon, ezért ugyanennyi (-q) töltéshordozó "hiány" lép fel a szemközti oldalon. A felhalmozódott ellentétes töltések a test belsejében egy homogén elektromos teret hoznak létre. Ez az elektromos tér a mágneses Lorentz erővel ellentétes erőt fejt ki a mozgó töltéshordozókra. Ha a két erő egyenlő, akkor beállt az egyensúlyi állapot. Az U és az I időben állandó marad.

Az R_H Hall állandó a "q" töltéstől függ. Ezért adott B mágneses tér és I áram esetén, a mért U feszültség polaritásából a töltéshordozók előjelére lehet következtetni. Ha a Hall állandó negatív, akkor ez elektronok áramlását jelenti a szilárd testben, és ez természetes is. Vannak olyan anyagok (ún. „félfémek”, pl.: Berillium, Kadmium, Cink, Ólom) amelyek esetében a Hall állandó pozitívnek (!) adódik és ez pozitív töltéshordozók jelenlétére utal. Az eredmény azért meghökkentő, mert tudjuk, hogy szilárd testekben csak az elektronok képesek elmozdulni és így áramot produkálni.

A jelensége csak kvantummechanikai modellel magyarázható

2.4.2. A lyukak

Egy egydimenziós kristálymodellt fogunk vizsgálni. A Bloch állapotokat illetve az ezekből felépíthető Bloch-csomag állapotok rendszerét adottnak tekintjük. Ugyancsak adottnak vesszük az energiaszintek sávstruktúráját megadó $\mathcal{E}_v(k)$ függvényeket is. Az energiasávokhoz tartozó állapotokat a kristályelektronok a Fermi-Dirac statisztikának megfelelően töltik be. Röviden (de pongyolán!) azt szoktuk mondani, hogy: "a sávban elektronok vannak" vagy "elektronok mennek át egyik sávból a másikba".

Egy sáv betöltöttségének a mértékét két adattal fogjuk jellemezni. Ezek a sáv betöltött állapotait definiáló "k" hullámszámok $\sum k$ összege és a sávban lévő elektronok $\sum \mathcal{E}(k)$ összenergiája. A sávban lévő elektronok kollektív (együttes) elektromos viselkedésére az általuk létrehozott „j” áram(sűrűség) és annak időbeli változása a jellemző. Egydimenziós esetben az áram és az áramsűrűség fogalma összemosódnak, hiszen nincsen értelme "egységnyi keresztmetszetű felületről" beszélni. Ezért, az egyszerűsítés végett, némi formális pongyolaság itt és most megengedhető. Majd a háromdimenziós általánosításakor mindent pontosítani fogunk. Ennek értelmében az áramsűrűség, definíció szerint, a (betöltött Bloch-csomag állapotokban lévő) kristályelektronok (csoport)sebességeink az összegéből számolható, azaz $j \approx -e \sum_k v(k)$. A külső „E”

elektromos tér hatására bekövetkező áramsűrűség változás pedig a sávban lévő elektronok effektív tömegének (pontosabban azok reciprokának) az összegével fejezhető ki $\frac{d}{dt} j = +e^2 \cdot E \cdot \sum_k \frac{1}{m^*}$.

Tekintsünk tehát egy egydimenziós modellkristályt. Legyen a vegyérték sáv teljesen tele, és a vezetési sáv teljesen üres. Az üres vezetési sávban fenti adatok értelemszerűen mind zérussal egyenlők. A teljesen betöltött vegyérték sávban a szimmetria miatt az összenergián kívül a többi három jellemző adat szintén zérus értékű lesz.

Vigyünk át egy elektront a vegyérték sávból a vezetési sávba!

Határozzuk meg először a vezetési sáv előbb definiált tulajdonságait! Egyetlen vezetési elektronnál lévén szó a sávot jellemző négy adat megegyezik magának a vezetési elektronnak a megfelelő adataival.

Azaz: a hullámszáma $\sum k = k_e$, az energiára $\sum \mathcal{E}(k) = \mathcal{E}(k_e)$, az áramsűrűsége

$j = -e \sum v(k) = -ev(k_e)$, az áramsűrűség időbeli megváltozására pedig a

$$+ e^2 E \sum \frac{1}{m^*(k)} = e^2 E \frac{1}{m^*(k_e)} \text{ érték adódik.}$$

Térjünk át a vegyérték sávra! A vegyérték sávban egy híján minden állapot be van töltve. A szükséges összegezek formális végigszámolása igen nehéz lenne, és a sávra pontos ismeretét követelné meg. A feladat ennek ellenére igen egyszerűen megoldható. Ennek lényege az, hogy matematikai átalakításokkal elérjük, hogy az összegezekben a teljesen betöltött sáv adatai jelenjenek meg. Így azután ezek (ha nullák) az összegzésből kiesnek. Ezt úgy érjük el, hogy a megfelelő összeghez hozzáadjuk és le is vonjuk a betöltetlen állapotnak megfelelő adatot.

Az egyszerű számolás végül is ugyancsak egyszerű eredményre vezet. Az egy híján betöltött sáv minden jellegzetes tulajdonságában úgy viselkedik, mintha egyetlen töltéshordozót tartalmazó vezetési sáv lenne.

Azaz: a hullámszáma $\sum k = -k_e$, az energiára $\sum \mathcal{E}(k) = \mathcal{E}_0 - \mathcal{E}(k_e)$, az áramsűrűsége

$j = -e \sum v(k) = +ev(k_e)$, az áramsűrűség időbeli megváltozására pedig

$$+ e^2 E \sum \frac{1}{m^*(k)} = e^2 E \frac{-1}{m^*(-k_e)} \text{ értéket kapunk.}$$

Látható, hogy ennek a „fiktív” töltéshordozónak a töltése pozitívnak(!) adódik, hiszen $j = +ev(k_e)$.

Ezt a fiktív töltéshordozót találóan "lyuknak" nevezzük. Alkalmas definíciókkal konzekvens módon megadhatjuk a lyukakra jellemző k_{ly} hullámszámot, az $\mathcal{E}_{ly}(k_{ly})$ energia függvényt, a $v_{ly}(k_{ly})$ sebesség függvényt és az $m_{ly}^*(k_{ly})$ effektív tömeg függvényt. Ennek megfelelően például az adódik, hogy a lyuk effektív tömege az őt generáló üres elektronállapotban számítható effektív tömeg negatív szorosa.

Vigyázzunk azonban, a lyuk NEM(!) azonos a be nem töltött üres állapottal (ez különben minden jellemző adatából is látszik). A lyuk egy olyan "fiktív" részecske, amely minden tekintetben egymaga reprezentálja (képviseli) az egyetlen állapot híján betöltött sáv nagyon nagyszámú elektronjának együttes viselkedését. Azaz fizikai viselkedésében a lyuk és az általa reprezentált elektronegyüttes semmi mérhető különbséget nem mutat. Paradox módon a lyuk "létezésében fiktív" ugyan, de fizikai megnyilvánulásában igenis valódinak tekinthető.

Mivel a fémek vezetési sávja "majdnem" teljesen betöltött, ezért a vezetési elektronok együtt úgy viselkednek, mintha kevés számú pozitív töltéshordozó vezetné az áramot. A töltéshordozók viszonylag kis száma miatt nem jó elektromos vezetők és többek között ezért is hívják őket fémeknek.

A félvezetők elektromos vezetési tulajdonságainak a tárgyalása a lyuk fogalmának a bevezetésével némileg leegyszerűsödik. A vegyérték sáv nagyszámú elektronja helyett az itt definiálható kevés számú lyukakkal lehet számolni. Tehát a félvezetőkben negatív elektronok és pozitív lyukak vezetnek az elektromos áramot, jóllehet a valóságban(?) csak elektronok mozognak!

Mivel (egydimenziós modellben) a vegyérték sáv keskenyebb, mint a vezetési sáv (12. oldal), ezért itt az $\varepsilon(k)$ görbe laposabb, és így az effektív tömeg nagyobb mint a vezetési sávban. Ezért a vezetésben résztvevő lyukak (vegyértéksáv alapján számított) effektív tömege nagyobb, mint a vezetésben résztvevő elektronok (vezetési sáv alapján számított) effektív tömege. Egydimenziós modellben a lyukak mindig lomhábbak, mint az elektronok. A valóságot jobban közelítő háromdimenziós modellben ez nincsen egészen így.

2.5. Az elektromos vezetés fizikai alapjai szilárd testekben, az Ohm törvény

Az eddigi modellben a kristályelektronok egy teljesen szimmetrikus hibamentes "merev" rácsban mozogtak. A Bloch állapotok tökéletesen alkalmazkodnak a kristály translációs szimmetriájához és ezt lényegében „öröklük” a Bloch-csomagok is. Külső elektromos tér hatására a kristályelektronok akadály nélkül mozoghatnak. A kristálynak nincs elektromos ellenállása. Ez a valóságban azonban egyáltalán nincsen így. Szükség van tehát (az egydimenziós) modellünk továbbfejlesztésére.

2.5.1. A relaxációs idő közelítés

Tekintsük egy egydimenziós fém vezetési sávját. Mint azt már megbeszéltük a fémelektronok esetében mindig 0 Kelvin fokos betöltöttséggel számolhatunk (3. oldal) Tehát az állapotok a Fermi szintig be vannak töltve. A sávábrát tekintve ez azt jelenti, hogy a Brillouin zóna $(-k_F, +k_F)$ tartományába tartozó N_e számú állapot van betöltve. A betöltött Bloch csomag állapotok $v(k)$ csoportsebessége adja meg (a kristályelektronok dinamikai modelljében) az elektronok makroszkopikus léptékben definiálható sebességét. Ez pedig a makroszkopikus áramsűrűséget határozza meg. Ezért meg kell vizsgálnunk a $v(k)$ sebességek "betöltöttségét" is. Célszerű ezért az $f^{FD}(\varepsilon, T)$ Fermi-Dirac eloszlásfüggvényt a " k " függvényének tekinteni, azaz a Brillouin zónán értelmezni. Az így kapott $f_0(k)$ eloszlásfüggvény adja meg formálisan azt, hogy mely " k " hullámszámú Bloch(csomag) állapotok vannak betöltve. Ha külső elektromos tér nincsen jelen, akkor ugyanannyi kristályelektron megy jobbra, mint balra. Az eredő áram(sűrűség) tehát zérus. Ahogyan annak lennie is kell.

Kapcsoljunk a kristályra egy homogén \vec{E} elektromos teret. Ennek hatására (15. oldal) a betöltött állapotok az egyik irányba eltolódnak. A kezdeti betöltöttség szimmetriája megszűnik. Az egyik irányban haladó kristályelektronok száma a másik irányban haladók rovására megnő. Az eredő áramsűrűség már nem lesz nulla. Tökéletes kristály esetén a betöltött állapotok ilyen értelmű eltolódása tovább folytatódna. Azonban a valóságban tökéletes és merev kristály nincsen. Mindig vannak jelen különféle típusú rács hibák, idegen atomok (=szennyeződések), egyéb rács torzulások. Ugyanakkor (adott hőmérsékleten) a rácsatomok folytonos rezgőmozgást is végeznek, amelynek következtében a rács minden pillanatban eltér egy kissé az ideális geometriai kristályszerkezetétől. Ennek következtében megbomlik a harmónia a Bloch állapotok és a kristályrács között. A Bloch hullámok szóródnak a szabálytalan kristályon. A kristályelektronok szempontjából ez azt jelenti, hogy az elektronok a külső térből nyert energiájukat átadják a rácsatomoknak (Joule hő formájában). Az elektronállapotok szintjén ez úgy nyilvánul meg, hogy a betöltött elektronállapotok fent említett „eltolódása” megáll és az elektronrendszer felvesz egy ún. „stacionárius” (azaz az időben már nem változó) állapotot.

Az új $f(k)$ egyensúlyi eloszlás úgy adódik, hogy a kezdeti $f_0(k)$ eloszlás egy Δk értékkel eltolódik. A $v(k)$ sebesség függvény és az $f(k)$ ismeretében az eredő j áramsűrűség kiszámítható. Nyilvánvaló, hogy a Δk eltolódás mértéke a külső \vec{E} térerősségtől függ és ezért az áramsűrűség az elektromos térrel lesz arányos (ez az ún. differenciális Ohm törvény).

Az $f(k)$ eloszlás dinamikáját (és így a Δk eltolódást) az ún. Boltzmann egyenlet határozza meg. Mi ennek most az egyszerűsített, egydimenziós változatát fogjuk használni. Az egyenlethez a következő gondolatmenettel juthatunk el.

Az $f(k)$ időbeli megváltozását két hatás okozza. Az egyik a külső elektromos tér $\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_E$, a másik az ezzel ellentétes "visszaszóródás" $\left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_\sigma$. Ez utóbbi adja meg az elektronrendszer és a kristályrács (fent részletezett) termikus kölcsönhatását. Ha a két effektus éppen kiegyenlíti egymást, akkor beáll a kívánt (termikus) egyensúlyi (stacionárius) állapot és az $f(k)$ az időben már tovább nem változik, azaz

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

Mivel a külső elektromos tér a betöltött állapotok halmazát tolja el a Brillouin zónában, ezért az eloszlásfüggvény időbeli változása a "k"-kon keresztül érvényesül. Azaz az $f(k)$ eloszlás az $f(k(t))$ alakba írható.

A szóródást megadó időderivált csak formálisan jelölhető ki. Részletes számítása túlhaladja e tárgy kereteit, számunkra elegendő lesz egy globális (átfogó, részleteket nem tartalmazó) leíró jellegű közelítés használata is. Ennek a neve a "relaxációs idő" közelítés.

~ OROSZ L. Szilárdtestfizika 23. oldal

A relaxációs idő fogalmához a következő gondolatmenettel juthatunk el.

Tekintsük a homogén elektromos térben lévő egydimenziós modellkristályunkat. A betöltött állapotok időben nem változnak, a rendszer egyensúlyi állapotban van. Kapcsoljuk ki az elektromos teret. Ekkor az $f(k(t))$ eloszlásfüggvény időbeli megváltozása nem lesz zérus, hiszen a szóródást nem kompenzálja a külső tér, tehát

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[\frac{\partial f}{\partial t}\right]_\sigma.$$

A külső tér kikapcsolása után a rendszer „hamar” felveszi az $f_0(k)$ -val jellemezhető alapállapotát. Ha ismernénk a szórási tagot, akkor az egyenletet meg tudnánk oldani. Mivel azonban ezt nem ismerjük így csak általános feltételezéseket tehetünk. Tegyük fel, hogy az „f” eloszlásfüggvény változási sebessége annál nagyobb, minél távolabb van a rendszer pillanatnyi állapota az ismert „ f_0 ” egyensúlyi végállapottól, azaz:

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

E feltételezésünket az eloszlásfüggvényre alkalmazva, annak matematikai megfogalmazásban egy „ τ ” arányossági tényező jelenik meg. Ennek neve a "relaxációs idő". Az elnevezés eredete rögtön világossá válik, ha megoldva az egyenletet felrajzoljuk az $f(t)$ függvényt. Most csak az időbeli változás érdekel minket, ezért a „k”-tól eltekinthetünk. Látható, hogy az eloszlásfüggvény exponenciális időfüggéssel közelít a végső egyensúlyi állapotához és kb. 3τ idő alatt gyakorlatilag "eléri" azt. Tehát minél erősebb a szórási effektus, a „ τ ” relaxációs idő annál kisebb. Ha nincsen szóródás, akkor a τ végtelen. Azaz a rendszer marad a kezdeti állapotában, hiszen nincsen olyan hatás, ami ezt az állapotot megváltoztatná. Ha több, különböző szóródást előidéző effektus hat egyszerre, akkor az eredő hatásra jellemző relaxációs időt a relaxációs idők reciprokainak összege szolgáltatja.

A Boltzmann egyenletbe a szórási tagot relaxációs idő közelítésben beírva az egyenlet lineáris közelítésben megoldható. A lineáris közelítés azt jelenti, hogy $\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{\partial f_0}{\partial t}$. Eredményül megkapjuk az eloszlásfüggvény Δk eltolódását. Ez a külső elektromos térrel és a relaxációs idővel arányos, ahogyan azt vártuk is.

2.5.2. A vezetőképesség számítása

Minden a rendelkezésünkre áll ahhoz, hogy a kristály vezetőképességét kiszámítsuk.

A külső \vec{E} elektromos tér hatására létrejött j áramsűrűség meghatározásához szükség van még a $v(k)$ sebesség függvényre. Egy újabb közelítés alkalmazásával erre egy egyszerű összefüggés adódik. Feltehetjük ugyanis, hogy a Δk eltolódás normális körülmények között csak akkor, hogy a betöltött állapotok nem hagyják el az $\mathcal{E}(k)$ diszperziós reláció parabolikus tartományát. Ezt nevezik "effektív tömeg" közelítésnek, hiszen az

$\mathcal{E}(k) = \mathcal{E}_c + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$ összefüggés az m^* effektív tömegű szabadon mozgó részecskékre jellemző. Ekkor a

$v(k) = \frac{\hbar k}{m^*}$ sebesség függvény „ k ”-ban lineáris lesz, és a „ j ” áramsűrűség egyszerűen meghatározható. A számításokban megjelenik a vezetési elektronok „ n ” sűrűsége. Eredményül az adódik, hogy:

$$j = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \cdot E$$

A számolás eredményeképp megkaptuk az Ohm törvény differenciális alakját, valamint a „ σ ” vezetőképesség konkrét kifejezését is. Érdekes összehasonlítani ez utóbbit a klasszikus Drude-modell által kapott vezetőképesség kifejezésével. Formálisan ugyanaz a képlet adódott. De az elektron m_e tömege helyett az m^* effektív tömeget és az átlagos ütközési idő helyett a τ relaxációs időt kell használnunk.

Látható tehát, hogy a szilárd testben mozgó töltéshordozók úgy viselkednek, mintha klasszikus tömegpontok volnának. Ez a fizikai kép nagyon egyszerű és szemléletes. De tudnunk kell, hogy az alkalmazhatóságának korlátai vannak.

Foglaljuk ezért össze a felhasznált közelítéseket:

1. Az elektronrendszer **stacioner állapotban** van. Beállt az egyensúly, az elektronok állapotbetöltése időben már nem változik
2. Az **anyag homogén**. A kristályban nincsenek olyan inhomogenitások, amelyek diffúziós effektusokat hoznának létre
3. **Relaxációs idő** közelítés. A kristályatomok és a kristályelektronok között fellépő bonyolult kvantummechanikai szórási folyamatokat kiátlagolva, csupán egyetlen paraméterrel, a relaxációs idővel vesszük figyelembe.
4. **Lineáris közelítés**. A Boltzmann egyenlet közelítő megoldása, amelyben matematikai eszközökkel biztosítjuk, hogy az eloszlásfüggvény csak eltolódjék, de az alakja ne változzon
5. **Effektív tömeg** közelítés. Az elektromos vezetési folyamat során a kristályelektronok mindvégig a diszperziós összefüggés parabolikus tartományában maradnak

Az elektronikus alkatrészekben lezajló vezetési folyamatoknál gyakran használt fogalom a m mozgékonyosság. Ez az alkalmazott külső elektromos térerősség és a kristályelektron rendszer $\langle v \rangle$ (statisztikai) átlagsebességének a kapcsolatára jellemző $\langle v \rangle = \mu \cdot E$. Ha az effektív tömeg nagy, akkor a mozgékonyosság kicsi és viszont. Az elektronikai számításokban a differenciális Ohm törvényt gyakran a mozgékonyosság felhasználásával írjuk fel.