Fizika M1, 8. előadás, 2017/10/30

II. Elektronok

II.1. A vezetési e-ok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

- klasszikus vs kvantumos: melyik jobb?

<u>kvantumos</u>: $C_V^{(e)} \propto T^1$

klasszikus: $C_V^{(e)} \propto T^0$

e-ok járuléka az állandó V-on vett fajhőhöz

II.2. e-ok az egyatomos láncban

- Sommerfeld-modell: szabad e-ok
- egyatomos lánc: "szoroskötésű modell"

rácson ugráló e-ok

e-e kölcs: elhanyagoljuk

1D kristály

egyfajta atomból épül fel

minden atomon 1 pályát veszünk figyelembe (pl. 1s)

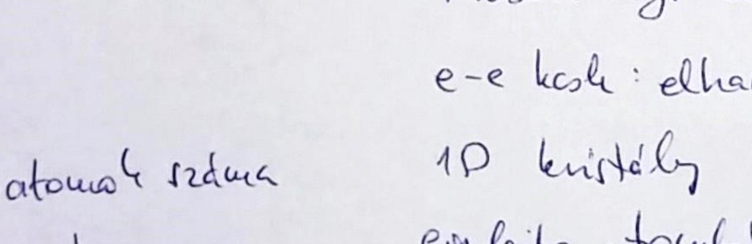
periodikus határfeltétel

atomok száma

↓

pl: $N_a = 5$

periodikus h. f. ← 0. és 5. atom ugyanaz



"rácsállandó"

• állapotjelző: hullámfv, itt: 5 komplex szám

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \psi(3) \\ \psi(4) \\ \psi(5) \end{pmatrix}$$

normált: $1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_m |\psi(m)|^2$

Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & t \\ t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 & t \\ t & 0 & 0 & t & 0 \end{pmatrix}$$

t: "átugrási mátrixelem", "alagutazási mátrixelem", "hopping"

• dinamika: időfüggő SE:

$$\frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \dot\psi(1) \\ \dot\psi(2) \\ \dot\psi(3) \\ \dot\psi(4) \\ \dot\psi(5) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & t \\ t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 & t \\ t & 0 & 0 & t & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \psi(3) \\ \psi(4) \\ \psi(5) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

• stacionárius állapotok: időfüggetlen SE: $\hat{H}\psi = E\psi$

E	$2t$	$2t\cos\left(\frac{2\pi}{5}\right)$	$2t\cos\left(\frac{4\pi}{5}\right)$	$2t\cos\left(\frac{6\pi}{5}\right)$	$2t\cos\left(\frac{8\pi}{5}\right)$
ψ	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}e^{i\frac{2\pi}{5}}\\e^{2i\frac{2\pi}{5}}\\e^{3i\frac{2\pi}{5}}\\e^{4i\frac{2\pi}{5}}\\e^{5i\frac{2\pi}{5}}\end{pmatrix}$, $e^{5i\frac{2\pi}{5}} = 1$	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}e^{i\frac{4\pi}{5}}\\e^{2i\frac{4\pi}{5}}\\e^{3i\frac{4\pi}{5}}\\e^{4i\frac{4\pi}{5}}\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}e^{i\frac{6\pi}{5}}\\e^{2i\frac{6\pi}{5}}\\e^{3i\frac{6\pi}{5}}\\e^{4i\frac{6\pi}{5}}\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt5}\begin{pmatrix}e^{i\frac{8\pi}{5}}\\e^{2i\frac{8\pi}{5}}\\e^{3i\frac{8\pi}{5}}\\e^{4i\frac{8\pi}{5}}\\1\end{pmatrix}$

"diszkrét síkhullámok"

• általában: $k \in \{0, \delta k, 2\delta k, 3\delta k, \ldots (N_a-1)\delta k\}$, $\delta k = \frac{2\pi}{N_a \cdot a}$

hullámszám

$$\left.\begin{aligned} E_k &= 2t\cos(ka) \\ \Psi_k(m) &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{ik(ma)} \end{aligned}\right\} \to N_a \text{ különböző sajátérték-sajátvektor pár}$$

• áll: k és $k' = k + N_a \delta k \cdot l$ ekvivalens sé-sv-párt indexel, l egész

biz: $E_{k'} = E_{k+N_a\delta k \cdot l} = 2t\cos\left((k + N_a \delta k\, l)a\right) =$

$$= 2t\cos\left(ka + N_a \frac{2\pi}{N_a \cdot a} \cdot l \cdot a\right) = 2t\cos(ka + 2\pi l) =$$

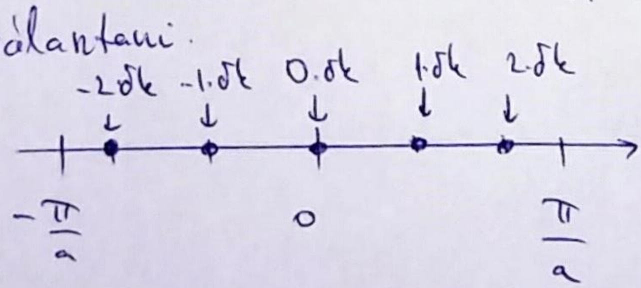
$$= 2t\cos(ka) = E_k \quad \checkmark$$

$$\Psi_{k'}(m) = \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{ik'ma} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{i(k+N_a\delta k\, l)ma} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{ikam} \underbrace{e^{iN_a \frac{2\pi}{N_a \cdot a} lma}}_{e^{i2\pi lm} = 1} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} e^{ikma} = \Psi_k(m) \quad \checkmark$$

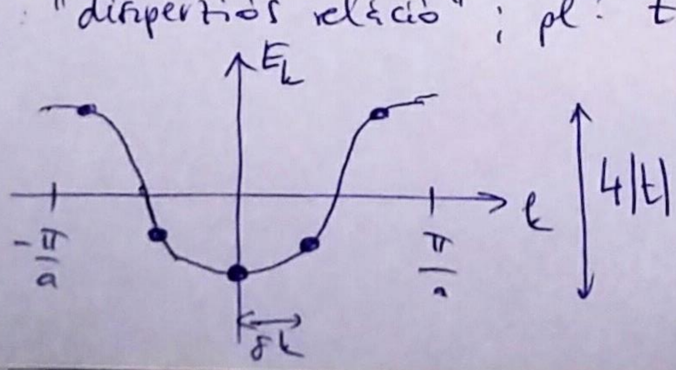
• a sé, sv párokat a $\left]-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ intervallumból szokás választani.

neve: (első) Brillouin-zóna

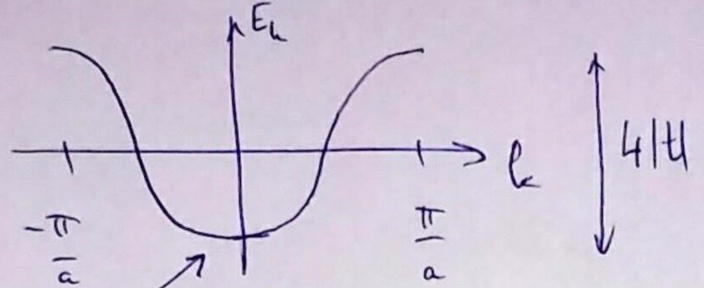


pl: $N_a = 5$

• E_k: "diszperziós reláció"; pl: $t < 0$, $N_a = 5$



• pl: $t<0$, $N_a \to \infty$ (ekkor $\delta k = \frac{2\pi}{N_a \cdot a} \to 0$)



"sáv"

"sáv szélessége" $= 4|t|$

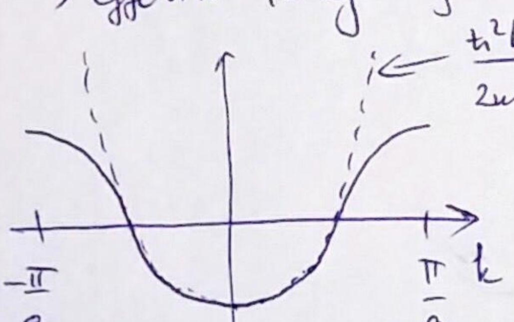
• legyen $a = 2Å$, $t = -1\,eV$; mekkora a $k = \frac{\pi}{2a}$ hullámszámú elektron csoportsebessége?

$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_k}{\partial k} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k}\left(2t\cos(ka)\right) = \frac{1}{\hbar}2t\left(-\sin(ka)\right)a$$

$$v\left(k=\frac{\pi}{2a}\right) = -\frac{2at}{\hbar} \cong 6{,}1 \times 10^{6}\,\frac{m}{s}$$

• E_k "alja" parabolikus, mint a szabad-e diszperzió, $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

→ "effektív tömeg" (m^*) jellemzi a sáv alját; $m^* = ?$



válasz: $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - 2|t| \equiv -2|t|\cos(ka)$

$-2|t|\cos(ka) \approx -2|t|\left(1 - \frac{1}{2}k^2a^2\right)$

kis k ($ka \ll 1$)

ebből $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = |t|a^2k^2 \to \boxed{m^* = \frac{\hbar^2}{2|t|a^2}}$

• feladat: $a = 2Å$, $t = -1\,eV \to m^* = ?$ $\Rightarrow m^* \approx 8{,}68 \times 10^{-31}\,kg$

$\approx 0{,}95 \cdot m_e$

konklúzió: az e a kristályban a sáv alján hasonlóan mozog, mint vákuumban.

• kérdés: ha az atomokat távolítom egymástól ($a \to \infty$), mi történik a sávval? válasz: ellaposodik, $t \to 0 \Rightarrow N_a$ darab degenerált nívó

$= N_a$ darab független atom

• **kérdés**: a láncot nyújtva (a-t növelve) hogyan változik a sáv alját jellemző m^*?

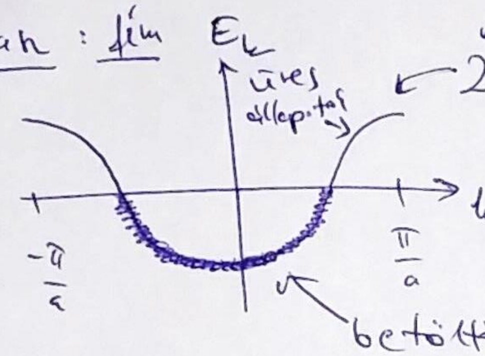
válasz: attól függ: $m^* = \frac{\hbar^2}{2|t|a^2}$ $\Big\}$ m^* nőhet is és csökkenhet is.

($|t|$: csökken; a: nő)

• **kérdés**: $t = -1\ \text{eV}$, $a = 2\ \text{Å}$, $N_e = N_a$ (1 vezetési e per atom)

fém vagy szigetelő? (spin!) ($T=0$)

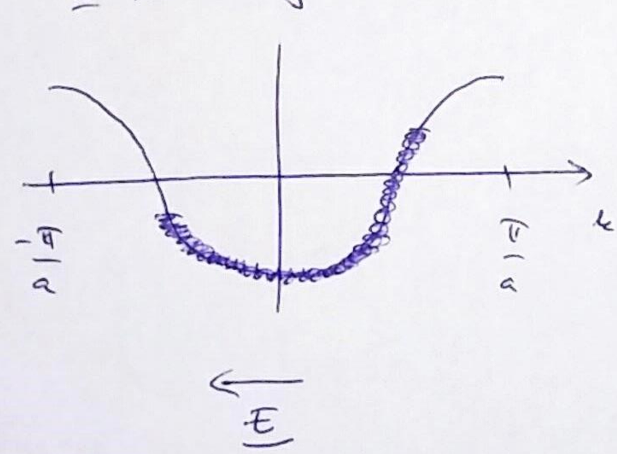
válasz: fém



spin

$2 \times N_a$ darab állapot, N_a darab e^- $\Big\}$ → félig töltött sáv

E-tér könnyen átrendezi a betöltést:



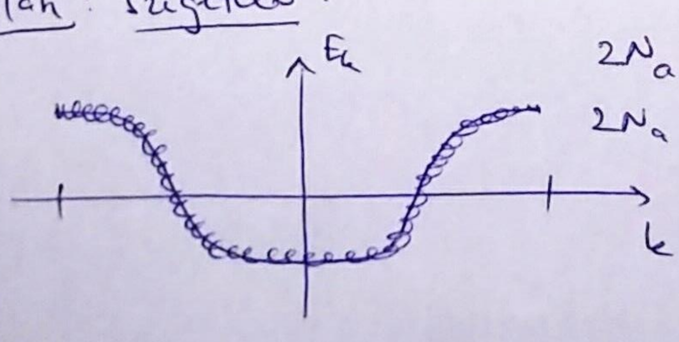
több e^- megy jobbra

$\rightarrow I = \sum_k f(k)\, v_k \left(-\frac{e}{L}\right) \neq 0$

→ fém.

• **kérdés**: mint fent, de $N_e = 2N_a$. Fém vagy szigetelő?

válasz: szigetelő:



$2N_a$ darab állapot, $2N_a$ darab e^- $\Big\}$ teljesen betöltött sáv

E-tér nem tudja átrendezni a betöltést → $I = 0$ → szigetelő