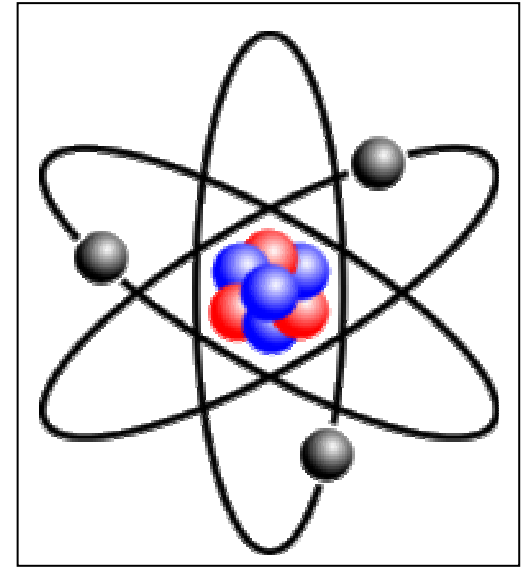


Szilárdtestfizikai összefoglaló I.

Elektromosság

Az általunk ismert világot nagyon kicsi méretű objektumok alkotják, amiket részecskének nevezünk.

A szilárd anyagok atomokból épülnek fel. Az atomokat három fajta egymással kölcsönható részecske alkotja: elektronok, protonok és neutronok. A protonok és neutronok kis távolságon mindannyian vonzzák egymást: **erős kölcsönhatás - magerő**. Hatótávolsága kb. 10^{-15} m. Ez a kölcsönhatás tartja össze az atommagot, amely protonokból és neutronokból áll. Az elektronok és neutronok nem hatnak kölcsön.



Az elektronok taszítják egymást, a protonok is taszítják egymást, viszont az elektronok és protonok vonzzák egymást. Ezt a jelenséget nevezzük **elektromosságnak**: elektrosztatikus kölcsönhatás - Coulomb erő. Hatótávolsága kb. 10^3 m (lásd villámlás). Ez a kölcsönhatás tartja meg az elektronokat az atommag körül és tartja össze a szilárd anyagokat.

Az erős kölcsönhatás kis távolságon sokkal erősebb, mint az elektrosztatikus: különben szétrepülne az atommag.

Az anyag kettős természet, kvantálás

Az anyag (az ú.n. részecske) hol hullámként, hol részecskeként (golyóként) viselkedik.

Max Planck (1900) - a fekete test sugárzási spektruma úgy érthető meg, hogy a kisugárzott energia kvantált, azaz a sugárzás és az anyag kölcsönhatásakor az energiacsere nem folyamatos, hanem kis adagokban, diszkrét energiakvantumokban megy végbe. Ezek értéke arányos a sugárzás frekvenciájával:

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

ahol h a Planck állandó ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js), ν a frekvencia, $\hbar = h/2\pi$ ($\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$ Js) és ω a körfrekvencia.

Albert Einstein (1905) - Minden sugárzás (elektromágneses sugárzás, fény) kvantált, független energiakvantumokból ("részecskékből") áll. A fény (elektromágneses sugárzás) kvantuma a foton.

A foton energiája:

$$E = m_0 c^2$$

ahol m_0 a foton nyugalmi tömege, c a fény sebessége ($c = 3 \cdot 10^8$ m/s)

Einstein fizikai Nobel díj (1921).

A foton impulzusa:

$$p = m_0 c = E/c = h\nu/c$$

($E = m_0 c^2$ alapján). Innen:

$$p = h/\lambda$$

és

$$p = \hbar k$$

ahol k a hullámszám:

$$k = 2\pi/\lambda$$

(A hullámszám azt mutatja meg, hogy egységnyi sugarú kör kerületére hányszor fér rá a hullámhossz).

Három dimenzióban hullámvektor:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y + \mathbf{k}_z$$

ahol \mathbf{k}_x , \mathbf{k}_y és \mathbf{k}_z a koordináták szerinti összetevők.

Az impulzus:

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

Hullámok

Hullámterjedés



Hullámegyenlet

Hullám: a térben terjedő rezgőmozgás. Mind időben, mind térben periódikus, kielégíti a hullámegyenletet:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

ahol ψ a kitérés, t az idő, v a terjedési sebesség, x a koordináta.

Síkhullám:

$$\psi = A \sin[2\pi(vt - x/\lambda) + \alpha]$$

vagy

$$\psi = A \sin(2\pi vt - kx + \alpha)$$

ahol A az amplitúdó, λ a hullámhossz, α a kezdő fázisszög és k a hullámszám.

Egy adott helyen a kitérés az idő szerint szinuszosan változik, és a hullámforma egy adott időpillanatban szabályos szinuszfüggvény a koordináta mentén, mely a terjedési sebességgel mozog.

Összefüggések:

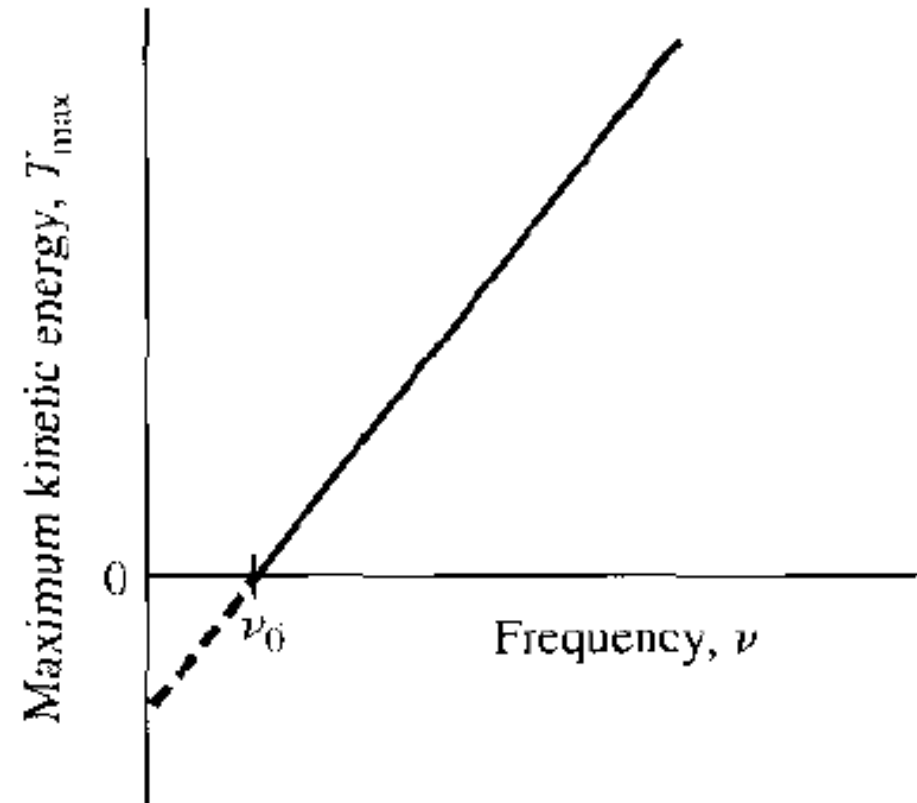
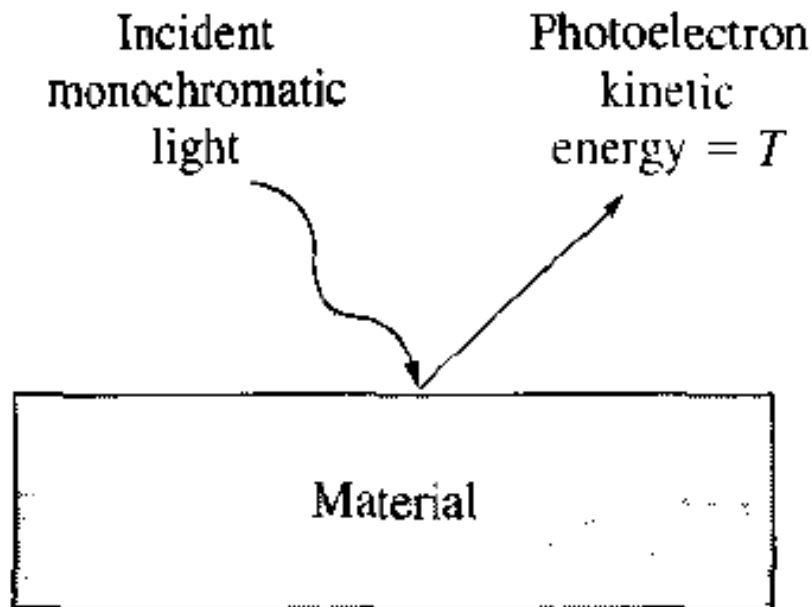
$$\lambda = vT, \quad \nu = 1/T, \quad \text{innen } \lambda = v/\nu \quad (\text{fény esetén } \lambda = c/\nu)$$

ahol T a periódus idő és ν a frekvencia.

A fény kettős természete

Fényelektromos jelenség

Közvetlen klasszikus kísérleti bizonyítéka a foton részecske természetének: elektronok kilépése (alkáli) fémekből fénnyel történő megvilágítás hatására - a kilépő elektron mozgási energiája arányos a foton energiájával és a kilépési munka (ν_0) különbségével.



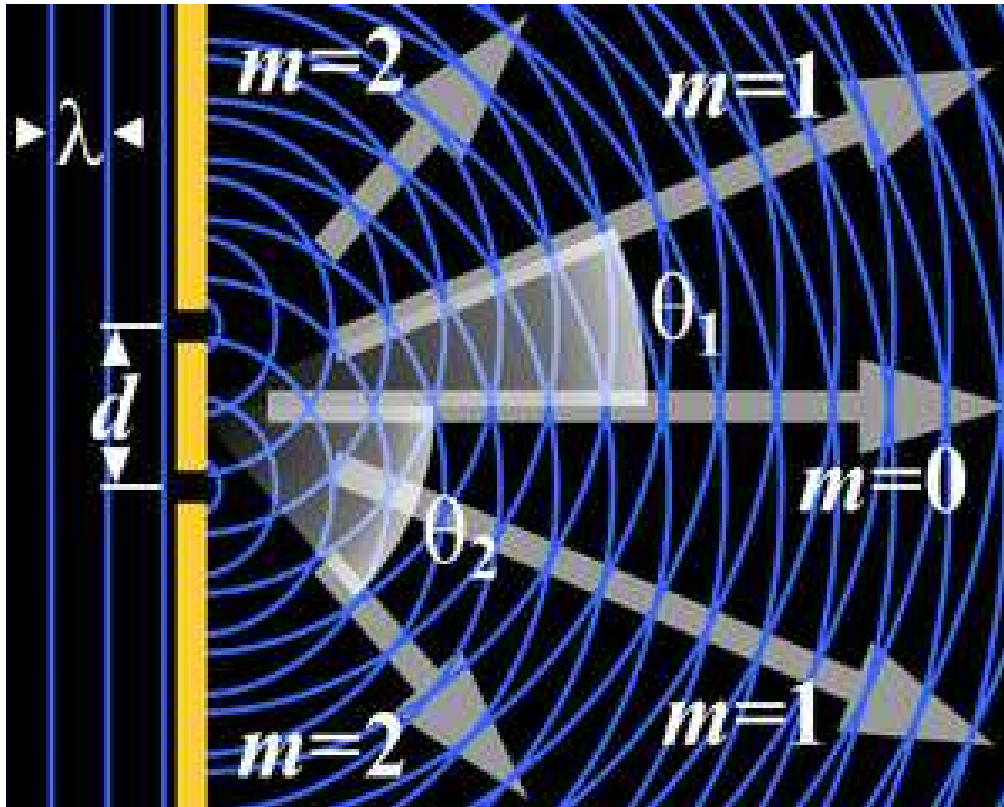
Hullámelhajlás



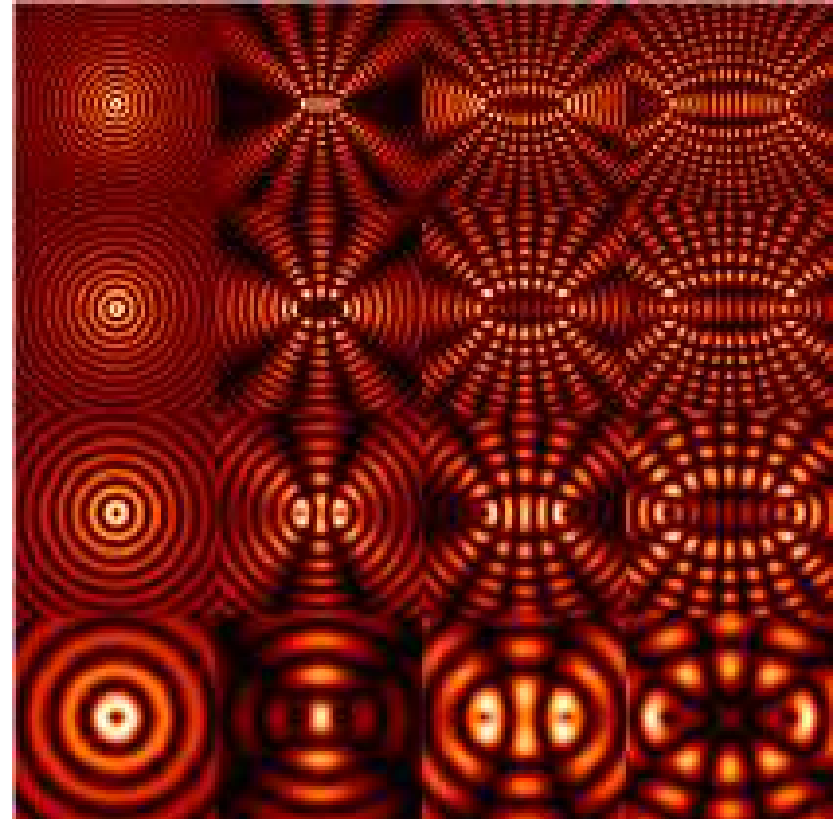
Siófoki kikötő, 2019. augusztus 21.

Fényelhajlás és interferencia

Közvetlen klasszikus kísérleti bizonyítéka a foton hullámtermészetének.



Fényelhajlás (diffrakció)



Interferencia különböző hullámhosszak és két optikai rés különböző távolságai esetében

A foton hullámhossza, frekvenciája és energiája közötti összefüggés

Feladat:

Mekkora egy 500 nm hullámhosszú zöld, egy 700 nm hullámhosszú vörös és egy 7 nm hullámhosszú Röntgen foton frekvenciája és energiája?

Megoldás:

$$\nu = c/\lambda, \quad E = h\nu$$

A **zöld** foton frekvenciája:

$$\nu = 3 \times 10^8 / 5 \times 10^{-7} = 6 \times 10^{14} \text{ Hz} = \mathbf{600 \text{ THz}}$$

A zöld foton energiája:

$$E = (6,626 \times 10^{-34})(6 \times 10^{14}) = 3,98 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Átszámolva elektronvoltba:

$$\mathbf{E = 3,98 \times 10^{-19} / 1.6 \times 10^{-19} = 2,48 \text{ eV}}$$

Hasonló módon a **vörös** foton frekvenciája és energiája:

$$\nu = 4,29 \times 10^{14} \text{ Hz} = \mathbf{429 \text{ THz}}$$

$$\mathbf{E = 2,84 \times 10^{-19} \text{ J} = 1,77 \text{ eV}}$$

A Röntgen foton frekvenciája és energiája ennek pont a százszorosa:

$$\nu = 4,29 \times 10^{16} \text{ Hz} = \mathbf{42,9 \text{ PHz}}$$

$$\mathbf{E = 2,84 \times 10^{-17} \text{ J} = 177 \text{ eV}}$$

Anyaghullámok

Louis de Broigle (1924) - ha a hullám részecske, akkor a részecske is hullám: az elektronnak is van hullámtermészete.

Az elektron energiája:

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

Az elektron impulzusa:

$$p = h/\lambda, \quad p = \hbar k$$

Az energia és impulzus közötti összefüggés:

$$E = mv^2/2$$

$$p = mv$$

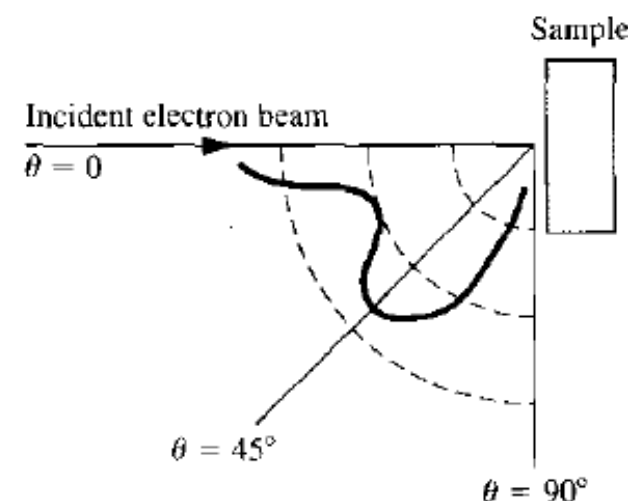
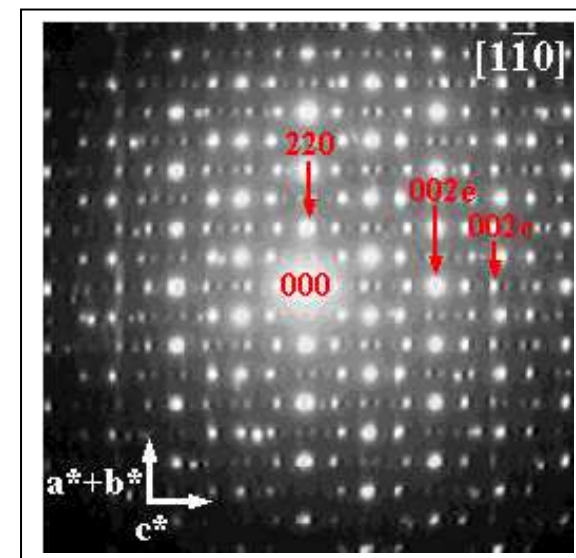
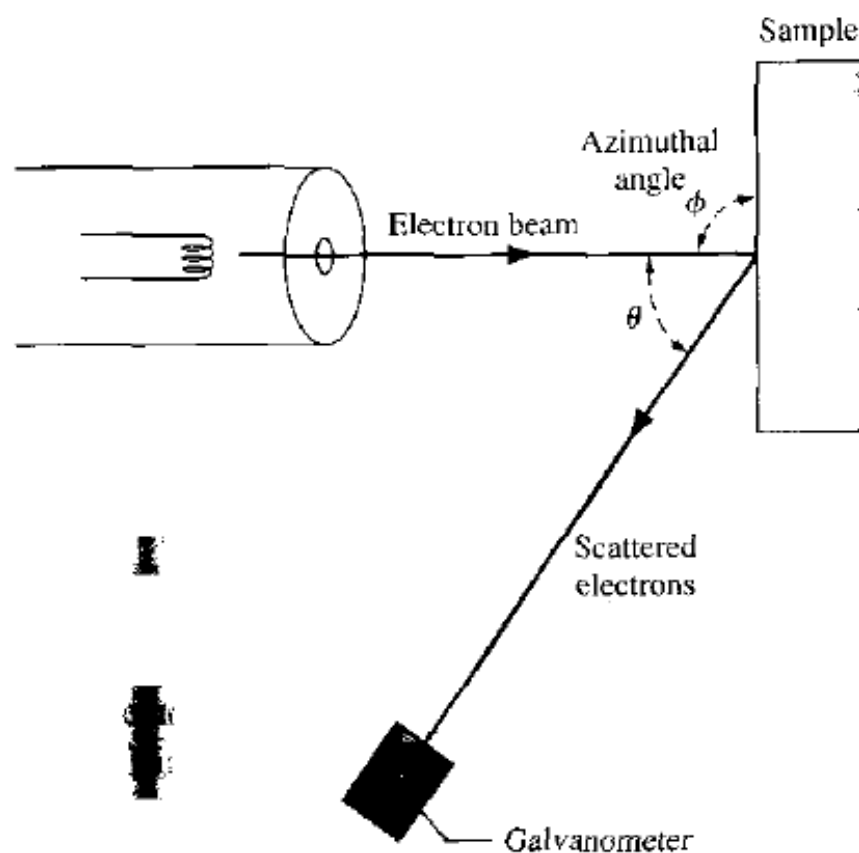
$$E = p^2/(2m)$$

$$E = (\hbar k)^2/(2m)$$

Az elektron hullámtermészete határozza meg, hogy hogyan viselkedik az anyagon belül, milyen energiaértékeket vehet fel és hogyan mozoghat - elektromos tulajdonságok.

Davisson-Germer kísérlet (1927)

Közvetlen kísérleti bizonyítéka az elektron hullámtermészetének: nikkel egykristály felületéről visszaszórt elektronok interferenciája.



Ma anyagvizsgálati módszerként alkalmazzák (elektron diffrakció).

Az elektron sebessége és de Broglie hullámhossza közötti összefüggés

Feladat:

Mekkora egy 10^5 m/s és egy 10^4 m/s sebességgel mozgó elektron de Broglie hullámhossza?

Megoldás:

$$\lambda = h/p, \quad p = mv$$

A **10^5 m/s** sebességgel mozgó elektron impulzusa:

$$\mathbf{p = (9,11 \times 10^{-31})(10^5) = 9,11 \times 10^{-26} \text{ mkg/s}}$$

Az elektron de Broglie hullámhossza:

$$\lambda = 6,626 \times 10^{-34} / (9,11 \times 10^{-26}) = 7,27 \times 10^{-9} \text{ m} = \mathbf{7,27 \text{ nm}}$$

A **10^4 m/s** sebességgel mozgó elektron impulzusa a fenti érték tizedrésze, de Broglie hullámhossza pedig a tízszerese:

$$\mathbf{p = 9,11 \times 10^{-27} \text{ mkg/s}}$$

$$\lambda = \mathbf{72,7 \text{ nm}}$$

Schrödinger egyenlet

Erwin Schrödinger (1924) a kvantumelmélet ($E=h\nu$ és $p=\hbar k$) alapján a részecskék hullámtermészetére az alábbi hullámegyenletet írta fel (időfüggetlen Schrödinger egyenlet):

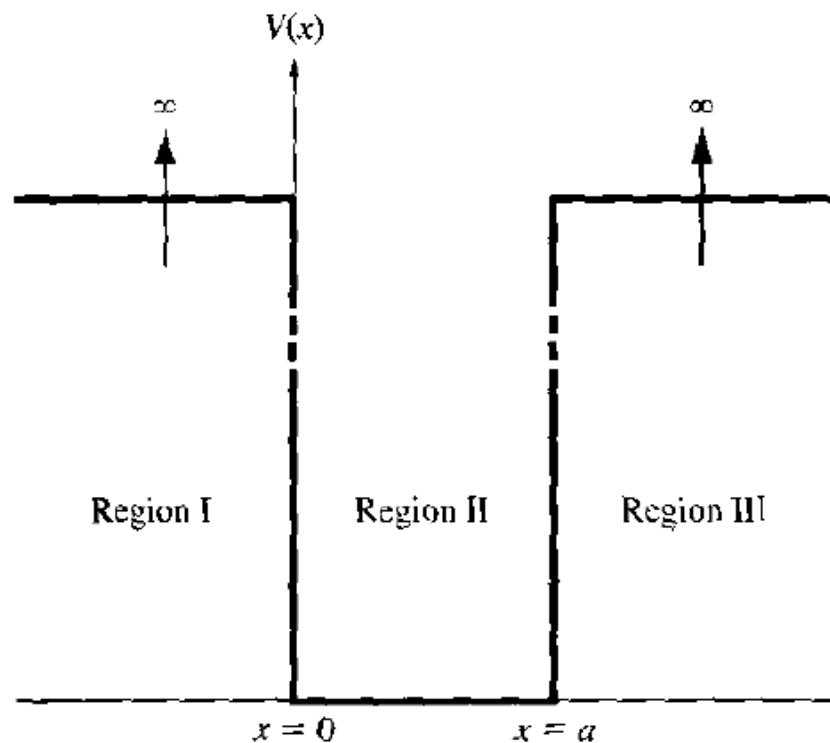
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \psi = 0$$

ahol ψ a kitérés, x a koordináta, m az elektron tömege, h a Planck állandó, E az elektron teljes energiája és E_p az elektron (koordináta függő) potenciális energiája.

A Schrödinger egyenletet kielégítő függvények (saját értékek vagy hullámfüggvények) meghatározzák az energia és a hullámszám (impulzus) lehetséges értékeit és a ψ érték négyzetének koordináta függése megadja a részecske előfordulási valószínűségét a koordináta mentén.

Kvantumbezártság - elektron potenciálgödörben

Végtelen mély potenciálgödör



A Schrödinger egyenlet megoldása

Határfeltételek:

$$\psi = 0, \text{ ha } x \leq 0 \text{ vagy } x \geq a$$

$$\int_0^a \psi(x)^2 dx = 1$$

Megoldás:

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \text{ ahol } n \text{ egész szám: } n=1,2,3,\dots$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} n^2$$

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}$$

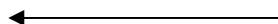
$$E_n = n^2 E_1$$

$$E = (\hbar k)^2 / (2m)$$

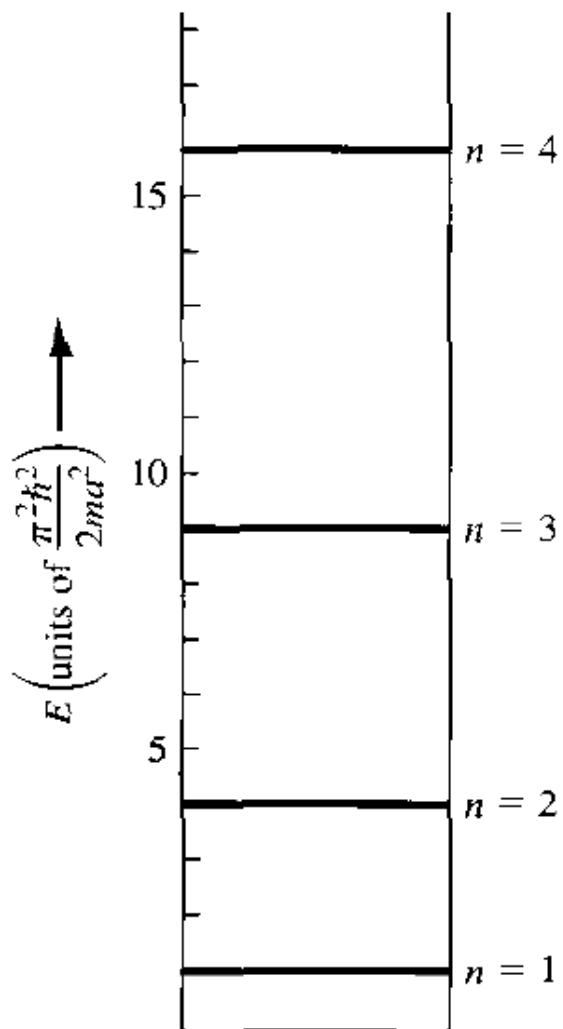
$$E = (hk)^2 / (8\pi^2 m)$$

k_n -t behelyettesítve:

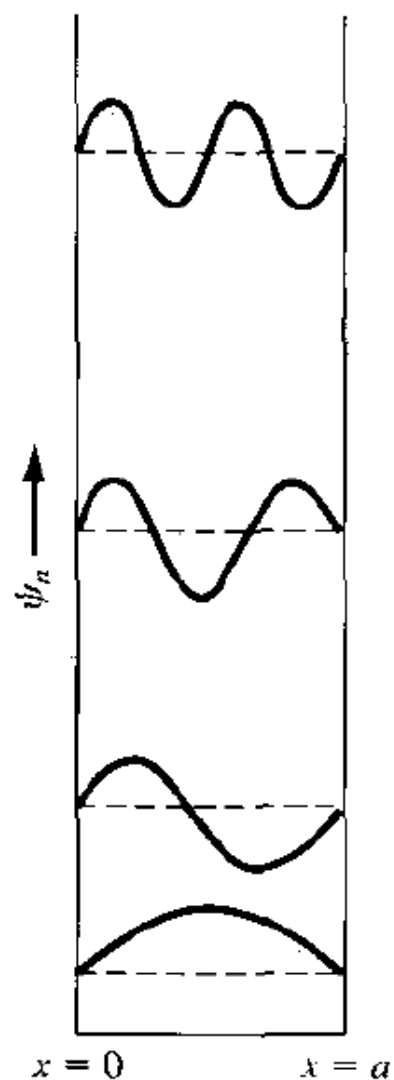
$$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} n^2$$



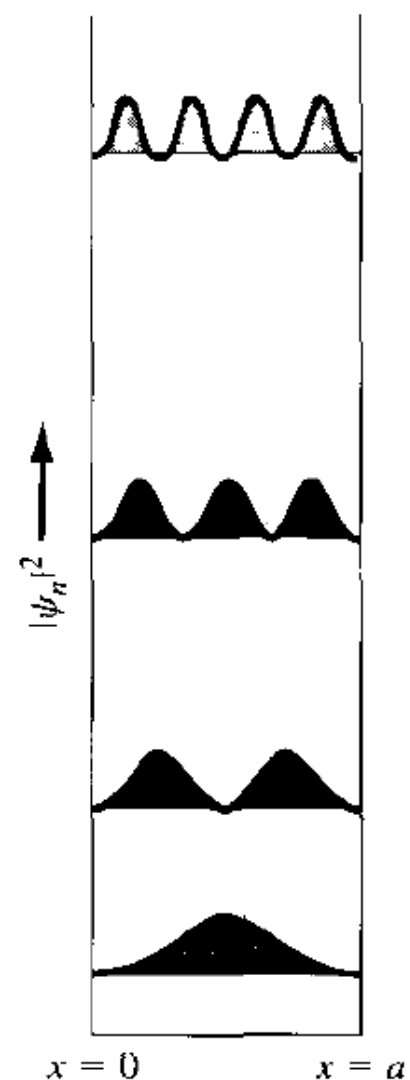
A Schrödinger egyenlet megoldása



Energiaállapotok



Saját értékek



Előfordulási
valószínűségek

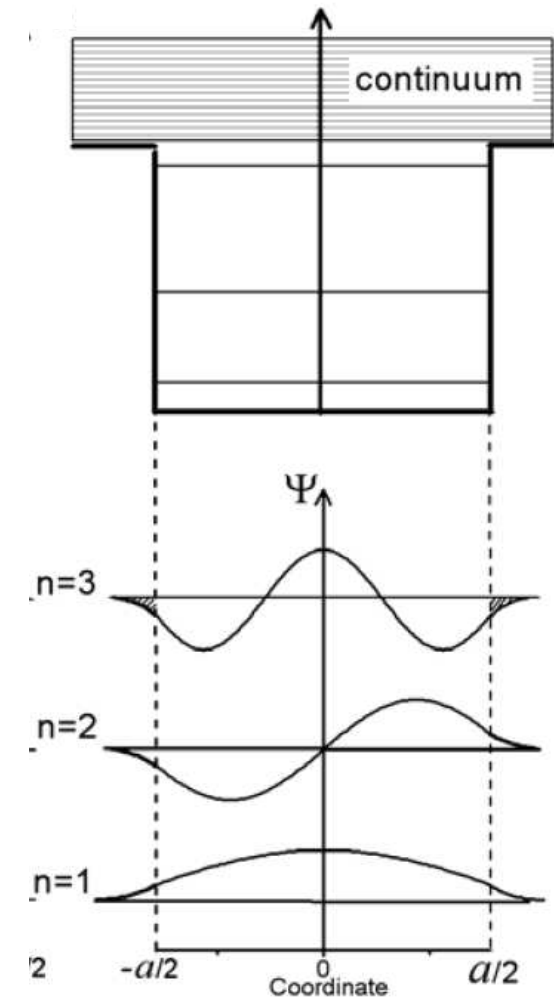
A nullponti energia (E_1)

a	E_1 [eV]
1 μm	$3,76 \cdot 10^{-7}$
1 nm	0,376
0,1 nm	37,6

Nem végtelen mély potenciálgödör

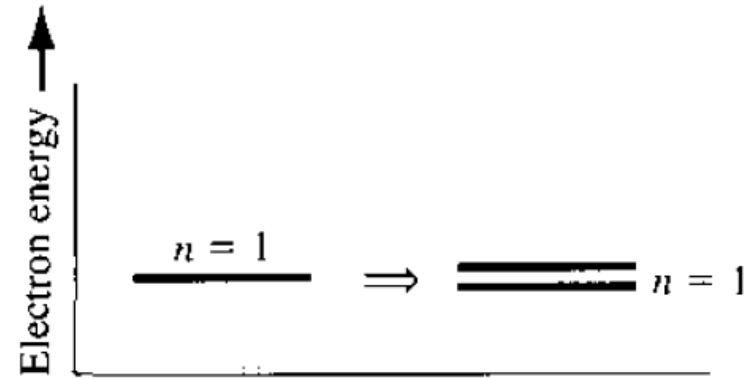
A hullámfüggvény túlnyúlik a potenciálgödör falán: van véges valószínűsége annak, hogy az elektron a potenciálgödörön kívül tartózkodik annak közelében.

Kvantumbezártság: ha a részecske kis térrészbe van bezárva, nem vehet fel tetszőleges energia- és impulzusértéket. A felvehető értékek diszkrétéek és a térrész mérete és a részecske tömege határozza meg őket.

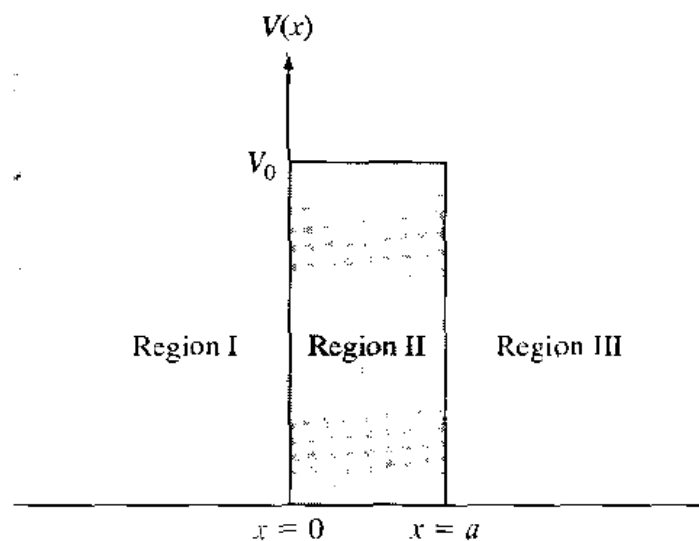


Csatolt potenciálgödrök

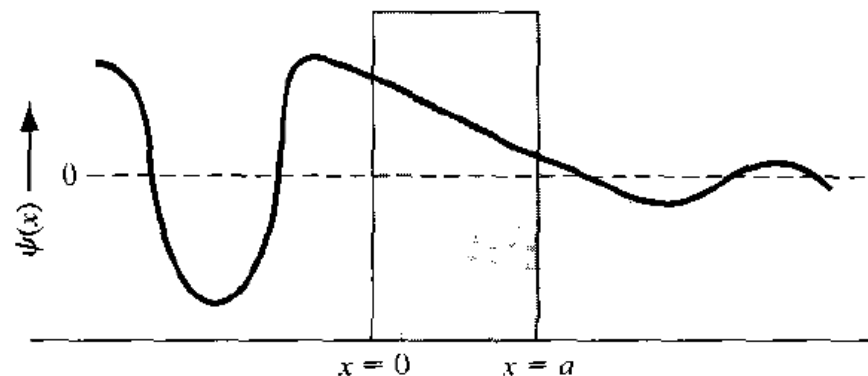
Ha két vagy több nem végtelen mély potenciálgödör olyan közel van egymáshoz, hogy a hullámfüggvények átlapolnak, a megengedett energiaállapotok felhasadnak. Annyi megengedett állapot jön létre, amennyi a csatolt potenciálgödrök száma.



Alagúteffektus



Potenciálgát



Hullámfüggvény

Ha a részecske (pl. elektron) energiája kisebb, mint a potenciálgát magassága, akkor is van véges (nullánál nagyobb) valószínűsége annak, hogy átjut a potenciálgáton. Az átjutás valószínűsége annál kisebb, minél kisebb a részecske energiája, minél nagyobb a részecske tömege és minél vastagabb a potenciálgát.

Kvantummechanikai visszaszóródás

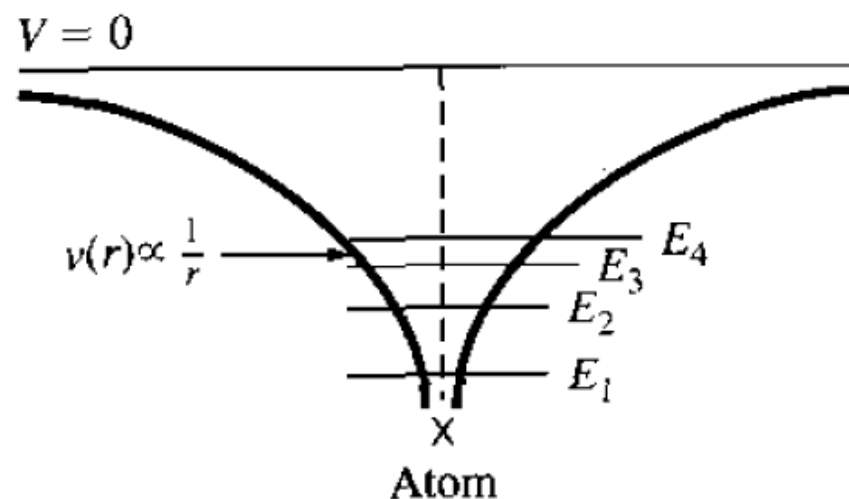
Fordított effektus: ha a részecske (elektron) energiája nagyobb, mint a potenciálgát magassága, akkor is van véges valószínűsége annak, hogy nem jut át a potenciálgáton.

Elektronpályák az atomokban

Az atomban a potenciálgödröt az atommag és az elektron közötti Coulomb erő hozza létre:

$$F_C = \frac{zq^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

ahol z az atomszám,
 q az elemi töltés,
 ϵ_0 a vákuum permeabilitása,
 r az elektronpálya sugara



Minél messzebb van az elektron az atommagtól, annál nagyobb az energiája.

Az elektron energiaállapota az atomban

Az elektronok energiaállapota (és helyzete) az atomban a Bohr-Sommerfeld model szerint négy kvantumszám segítségével írható le:

n - főkvantumszám, azt mutatja meg, hogy az elektron hányadik elektronhéjon helyezkedik el

l - mellékkvantumszám, azt mutatja meg, hogy az elektron hányadik alhéjon helyezkedik el az elektronhéjon belül, és meghatározza a pálya alakját:

(A Bohr-Sommerfeld atommodel szerint

$$b/a = (l+1)/n$$

ahol a a nagytengely hossza, b a kistengely hossza)

l felvehető értékei: $0 \leq l \leq n-1$ (n lehetséges érték minden héjon)

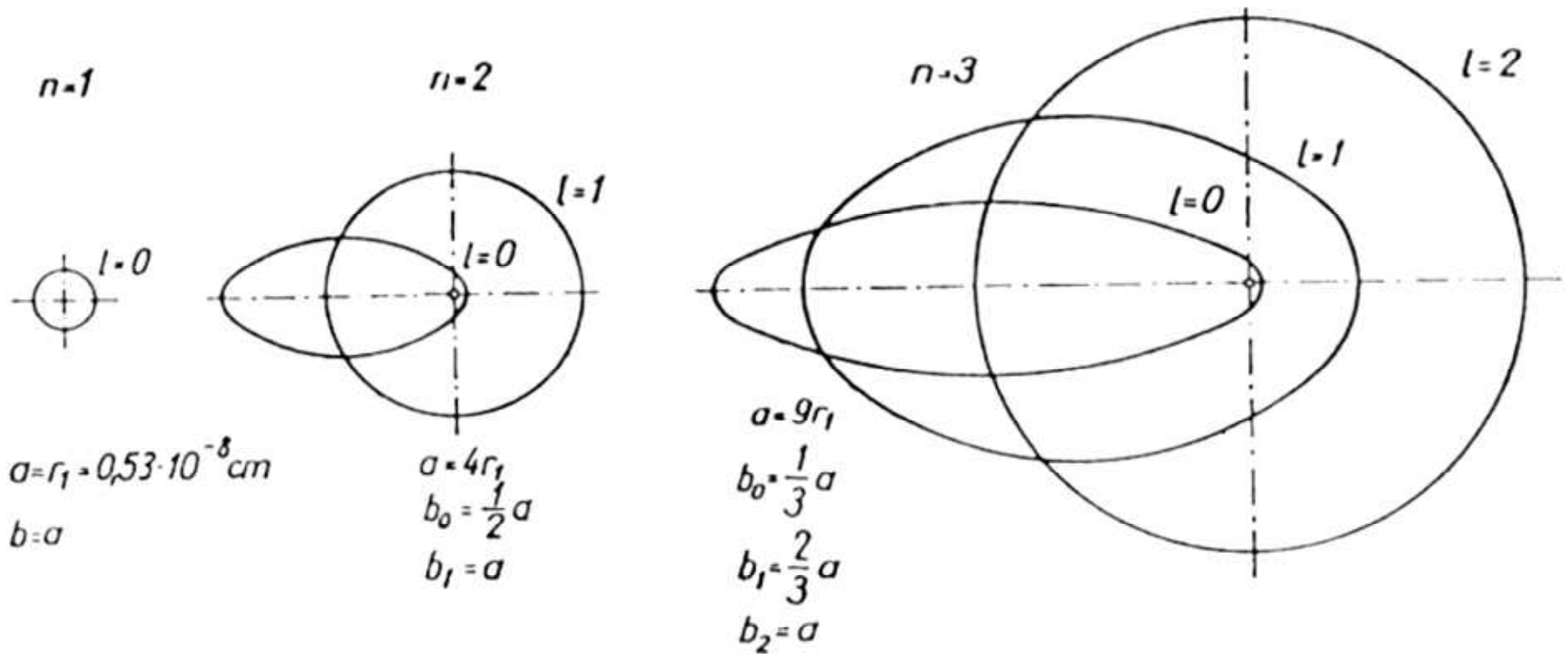
m - mágneses kvantumszám, azzal kapcsolatos, hogy az elektronpálya hogy áll be külső mágneses térben

m felvehető értékei: $-l \leq m \leq l$ ($2l+1$ lehetséges érték minden alhéjon)

s - spin, az elektron mechanikai és mágneses nyomatékának az irányát mutatja meg

s felvehető értékei: $1/2$ és $-1/2$

A hidrogénatom első három héjának elektronpályái a Bohr-Sommerfeld model szerint



a - a nagytengely hossza, b - a kistengely hossza

Elektronpályák a Schrödinger egyenlet alapján

A Bohr modellel ellentétben a pályák az elektron megtalálási valószínűségével kapcsolatosak, a megtalálási valószínűség eloszlását adják. Nem tudjuk megmondani, hogy mozog az elektron, csak azt, hogy mekkora valószínűséggel található adott távolságra az atommagtól. Az elektronok a rendelkezésre álló tér kitöltésére törekszenek, és – a köztük lévő taszítás miatt – a pályák a lehető legszimmetrikusabban helyezkednek el.

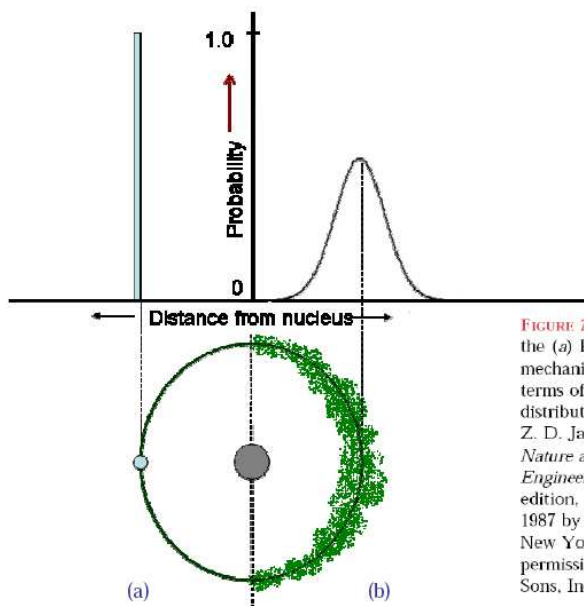
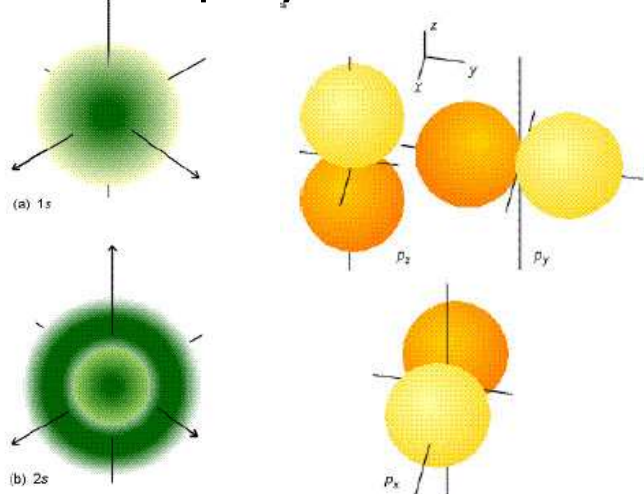


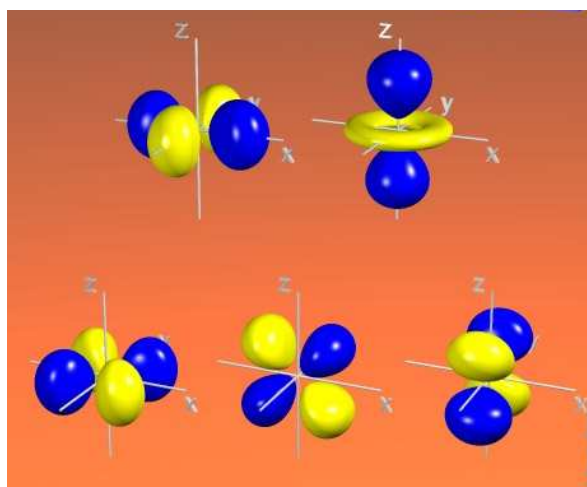
FIGURE 2.3 Comparison of the (a) Bohr and (b) wave-mechanical atom models in terms of electron distribution. (Adapted from Z. D. Jastrzebski, *The Nature and Properties of Engineering Materials*, 3rd edition, p. 4. Copyright © 1987 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.)

A H atom pályái:

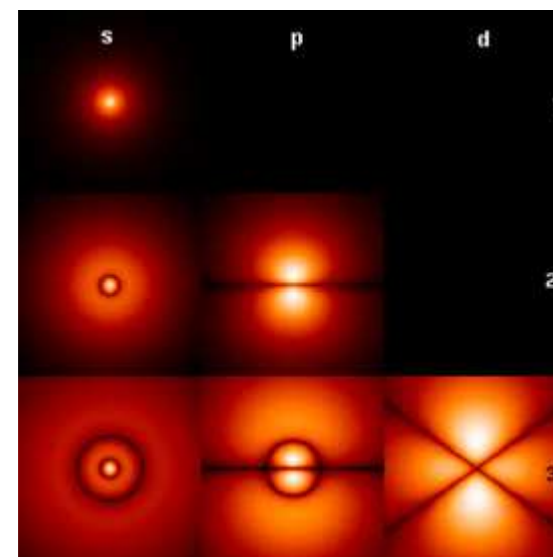


1s és 2s pályák

p pályák



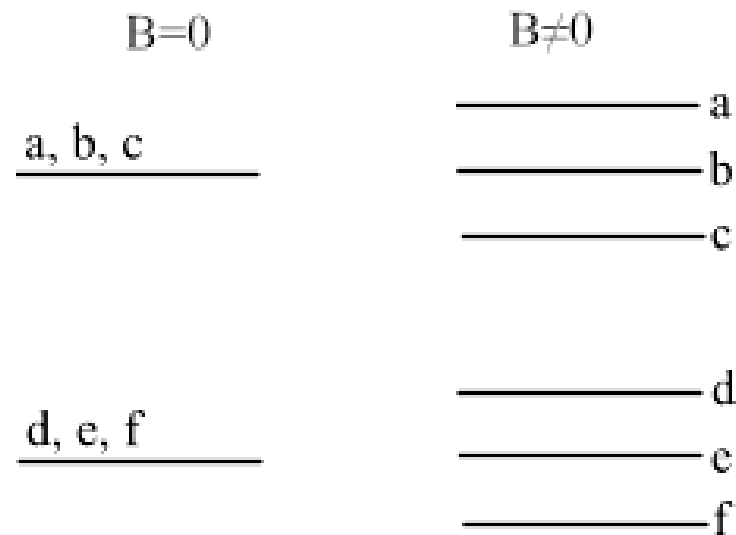
d pályák



Megtalálási valószínűség

A Pauli elv

Az elektron energiája elsősorban az elektronhéj számától, kisebb mértékben az alhéjtól függ. Külső mágneses térben az alhéjak energiaszintjei felhasadnak (Zeeman effektus), ezek külön energiaállapotot jelentenek külső mágneses tér nélkül is (elfajult állapotok).



Pauli elv: Minden energiaállapotban legföljebb két - ellentétes spínű - elektron tartózkodhat. (Vagyis két elektronnak nem lehet ugyanaz mind a négy kvantumszáma.)

Az elektronszerkezet szerepe

Az anyag tulajdonságait az atomok térbeli elhelyezkedése, a köztük lévő távolság és a külső elektronhéjon lévő elektronok száma határozza meg. A periódusos rendszer első három oszlopában a fémek, a IV. oszlopban a félvezetők, az V-VII. oszlopokban a nemfémek, a VIII. oszlopban a nemes gázok találhatóak.

Alapállapot - a legkisebb energiájú állapotok vannak betöltve (belső héjak és alhéjak).

Gerjesztett állapot: az elektronok egy része magasabb energiaállapotokon helyezkedik el energiaközlés hatására (pl. megvilágítás, hőmozgás, elektromágneses tér).

Ha az elektronok visszaesnek alacsonyabb energiaállapotba, az energiakülönbséget foton (fény) formájában bocsátják ki.

A megengedett energiaszintek közötti távolság minden elem esetében más és más, ez az anyag "ujjlenyomata".

Szinkép: a kibocsátott vagy elnyelt fény hullámhossz szerinti eloszlása - megállapítható az összetétel.

Kémiai kötések

Stabil állapot, ha a külső héjon 8 elektron van. A kémiai kötések során ez alakul ki.

Fémes kötés: a külső héjon lévő elektronok leszakadnak az atomról és szabadon mozognak a kristályban. Az egész kristály egy nagy molekula.

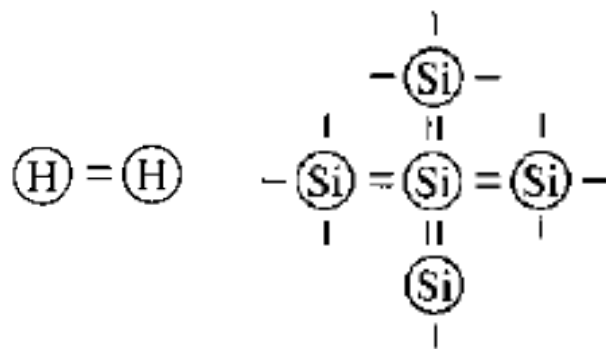
Ionos kötés: a fém átadja a külső héján lévő elektronokat a nemfémnek.
Pl: Na^+Cl^- .

Kovalens kötés: közös elektronok keringenek az atomok körül, így a külső héjon keringő elektronok száma kiegészül.

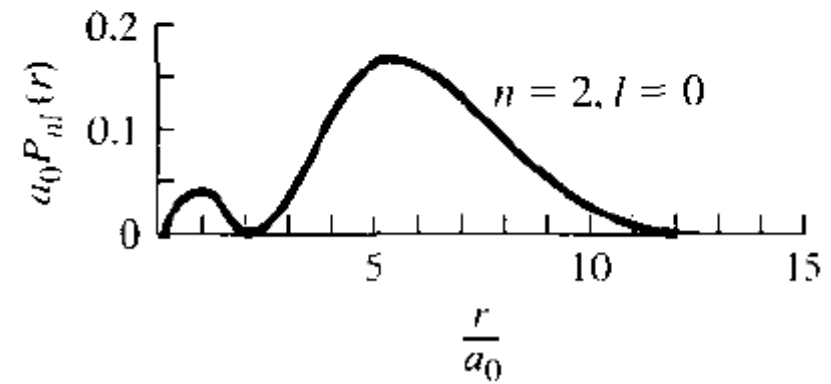
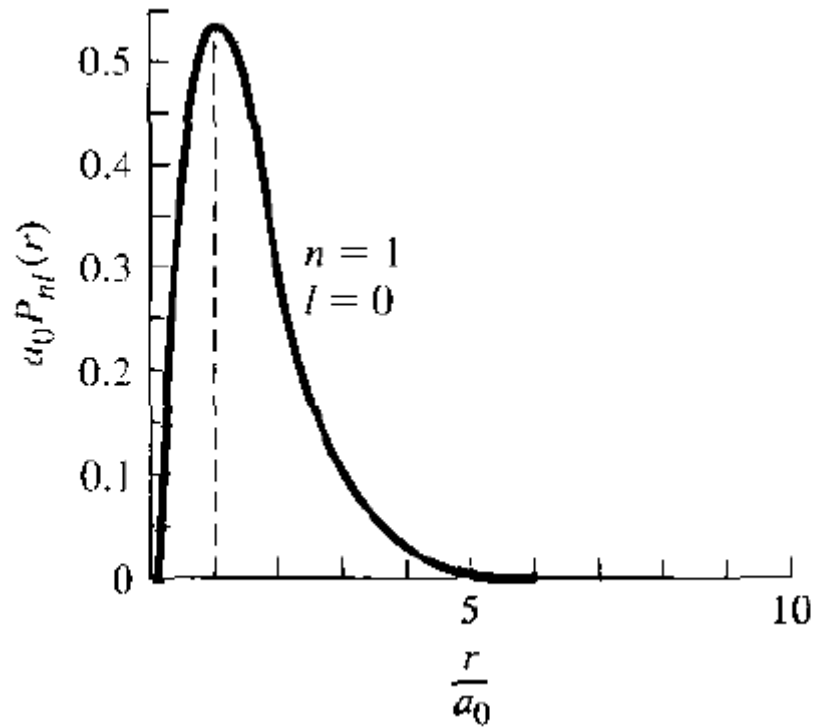
Pl.: H_2 - 1-1 megosztott elektron: 2 közös elektron a külső s héjon.

N_2 - 3-3 megosztott elektron, 2 saját és 6 közös elektron a külső p héjon.

Félvezetők (Ge, Si, C): minden atom átad 1-1 elektront mind a 4 szomszédjának, 8 közös elektron a külső p héjon.



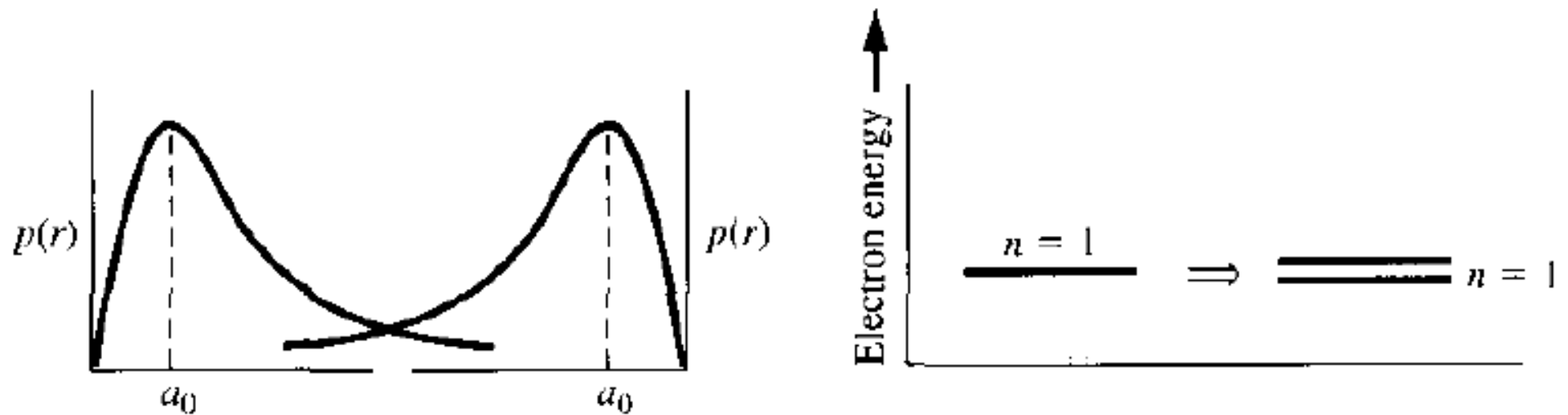
A Schrödinger egyenlet megoldása a hidrogén atomra



Előfordulási valószínűség az első és második elektronhéjon
 a_0 - Bohr rádiusz ($a_0 = 0,053$ nm)

A hidrogénmolekula

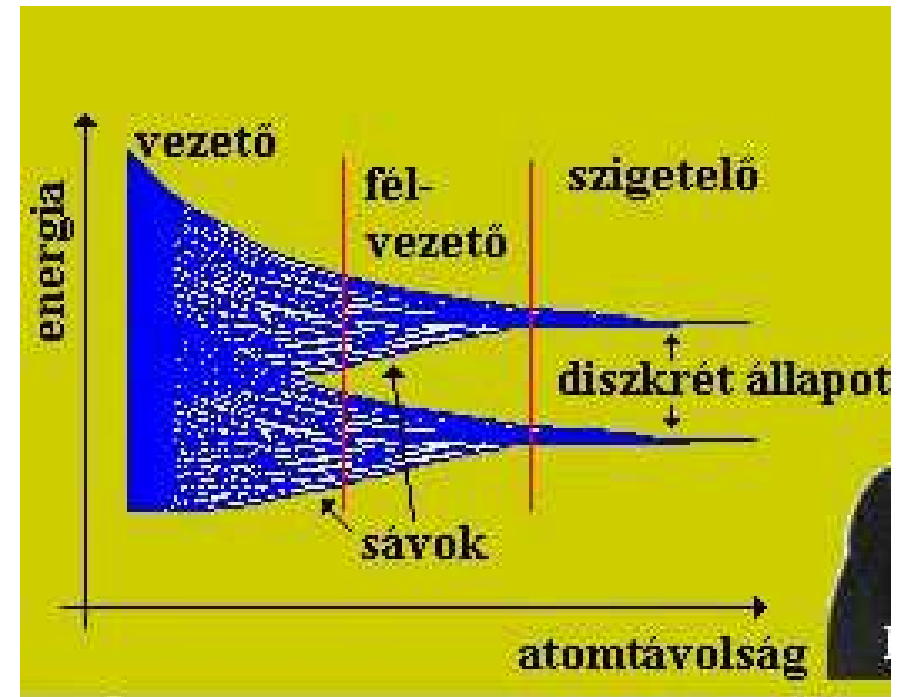
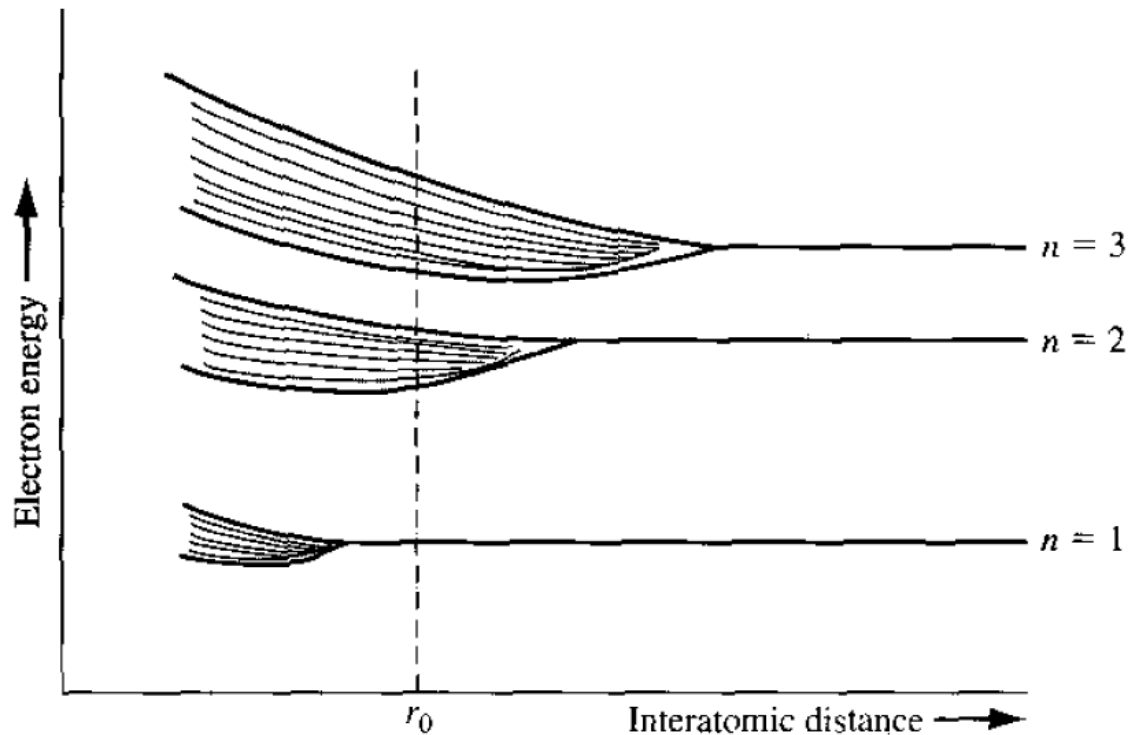
A hidrogénmolekulában a hullámfüggvények átlapolnak és az energiaszintek felhasadnak.



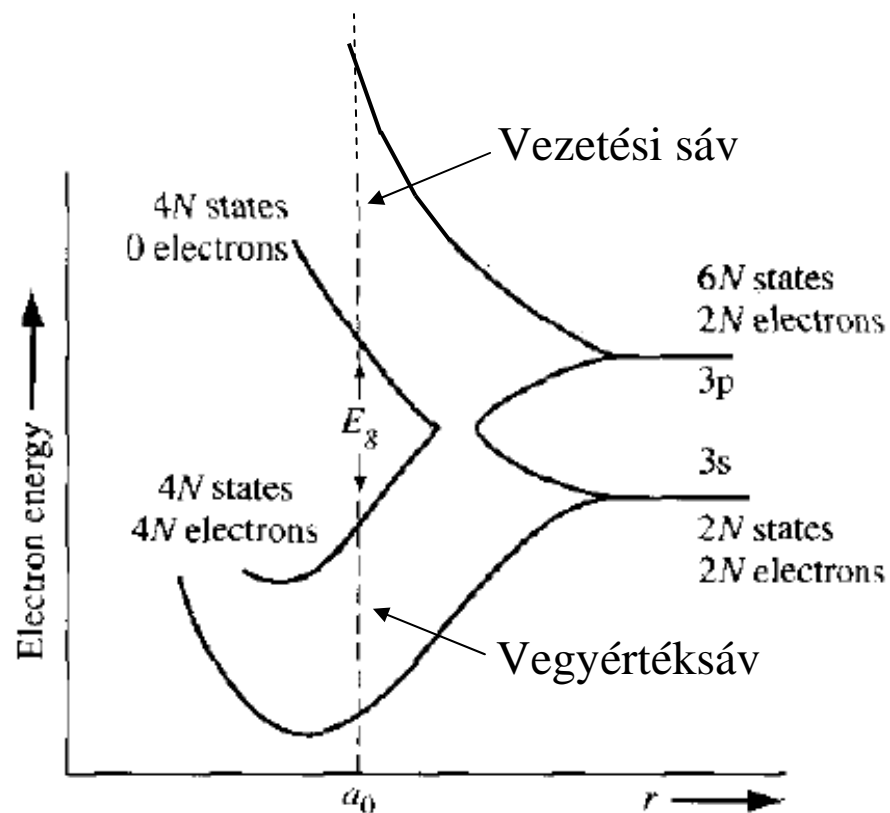
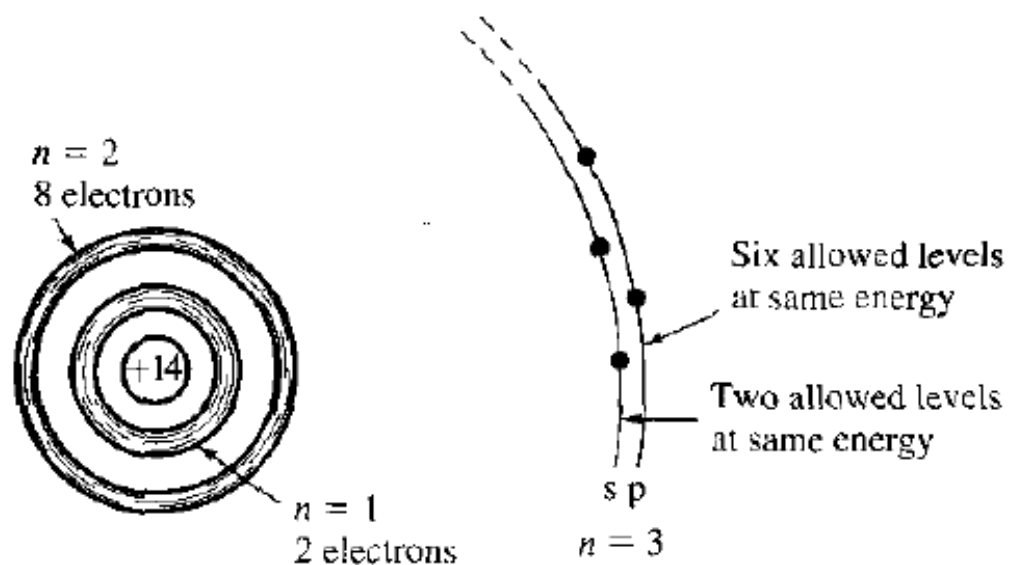
Az első elektronhéj hullámfüggvényeinek átlapolása és az energiaszint felhasadása

Az energiaszintek felhasadása sok kölcsönható atom esetén

Az energiaszintek annyi felé hasadnak, amennyi a kölcsönhatásban részt vevő atomok száma.



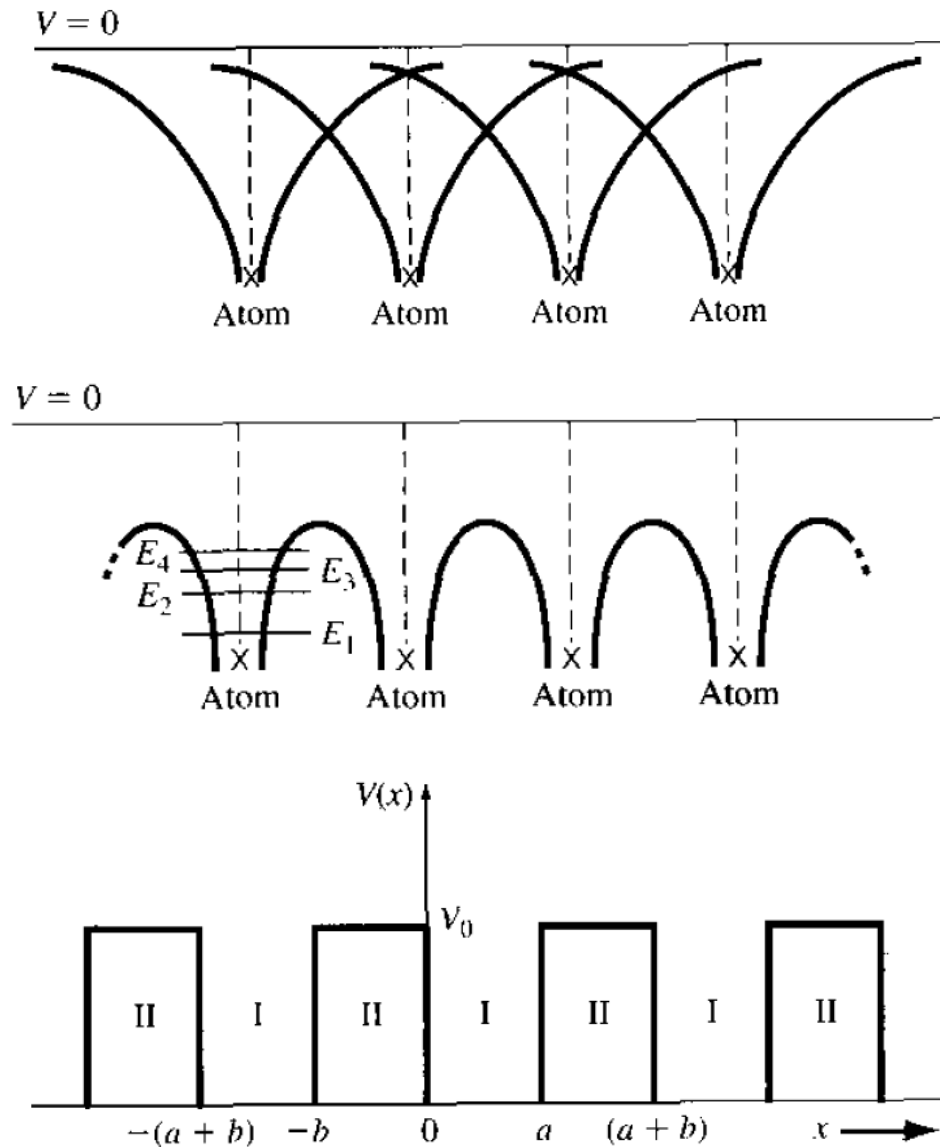
A szilícium elektronállapotai



Az elektronpályák sematikus elhelyezkedése és betöltöttsége, és az energiaszintek felhasadása vegyérték és vezetési sávra

A Schrödinger egyenlet megoldása a kristály periódikus potenciális terében

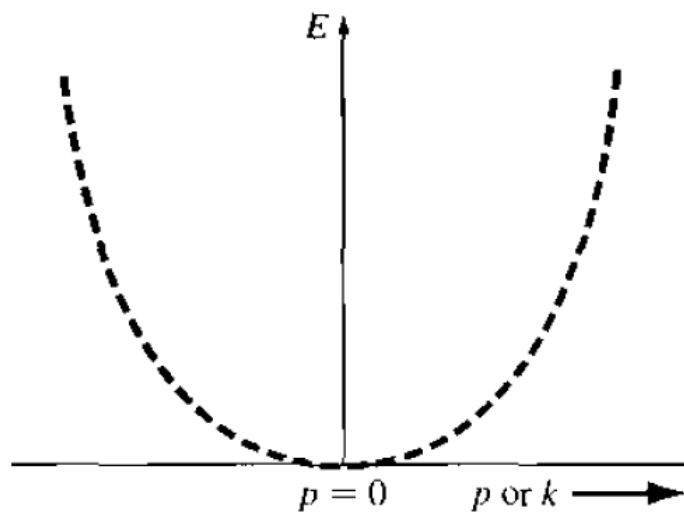
Az atomtörzsek között potenciálgátak alakulnak ki.



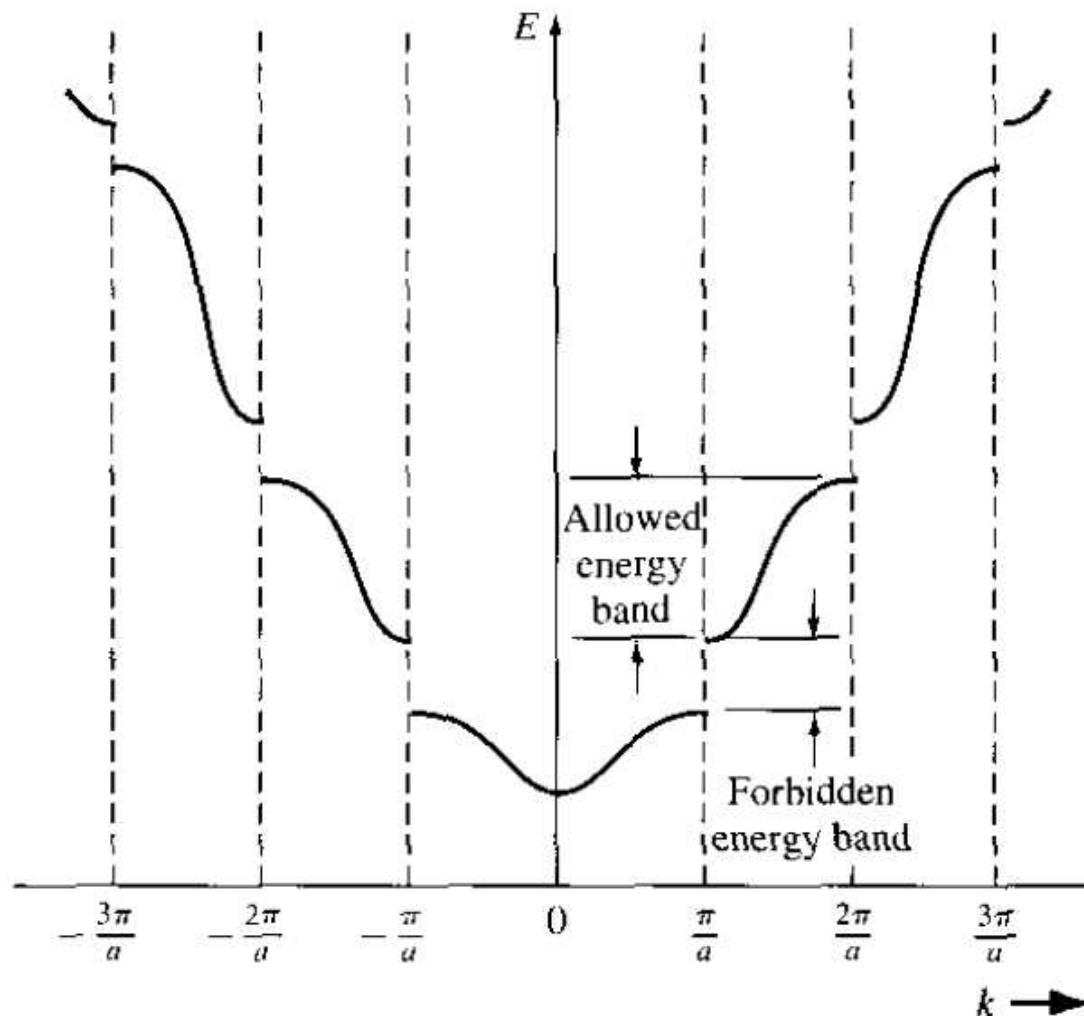
Krönig-Penney
model

A Schrödinger egyenlet megoldása a Krönig-Penney modellel

Az elektron teljes energiája és hullámszáma közti összefüggés



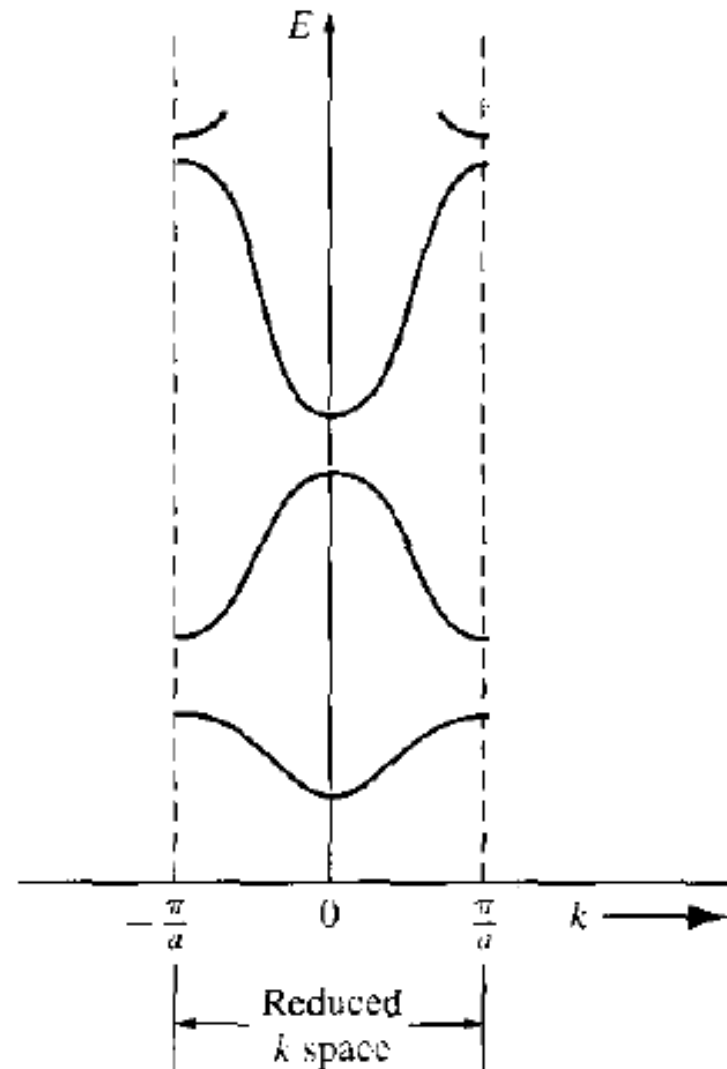
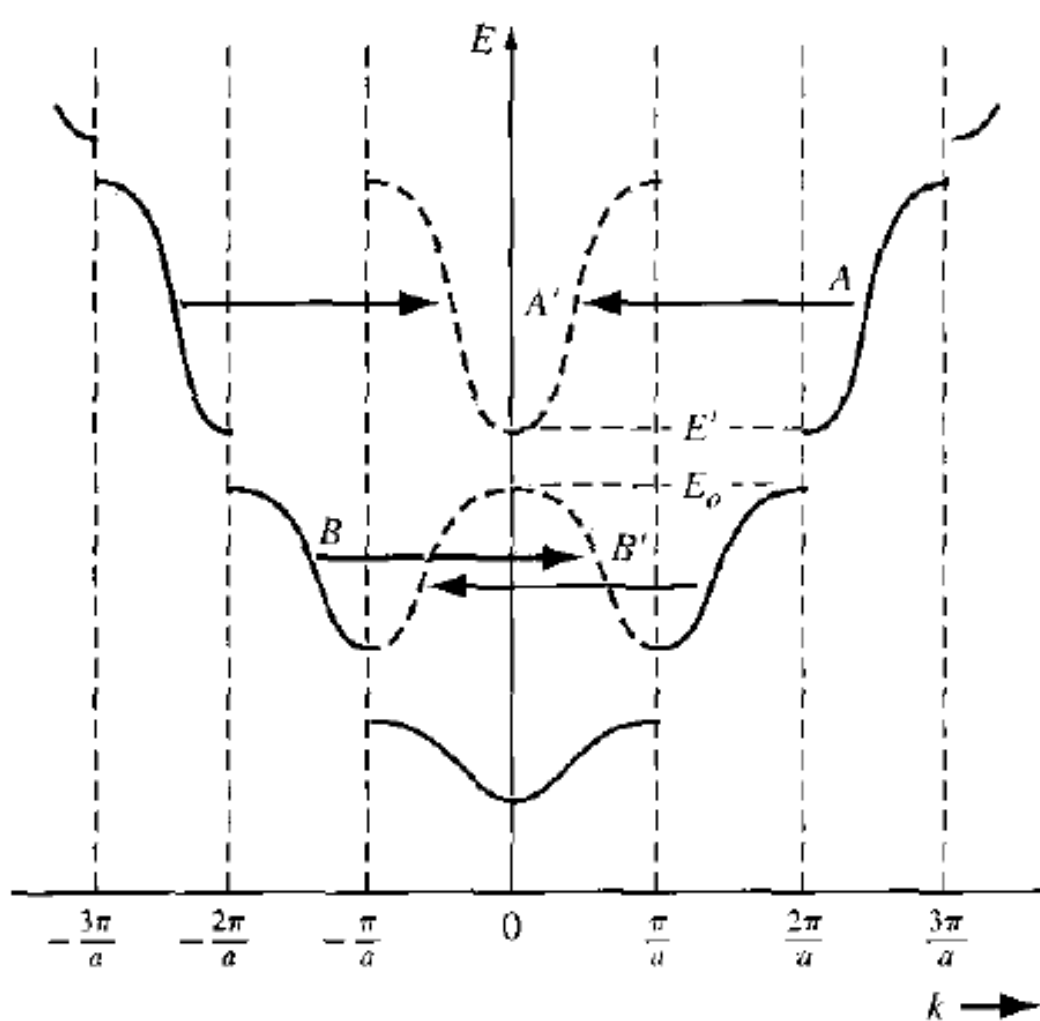
Szabad elektron esetében



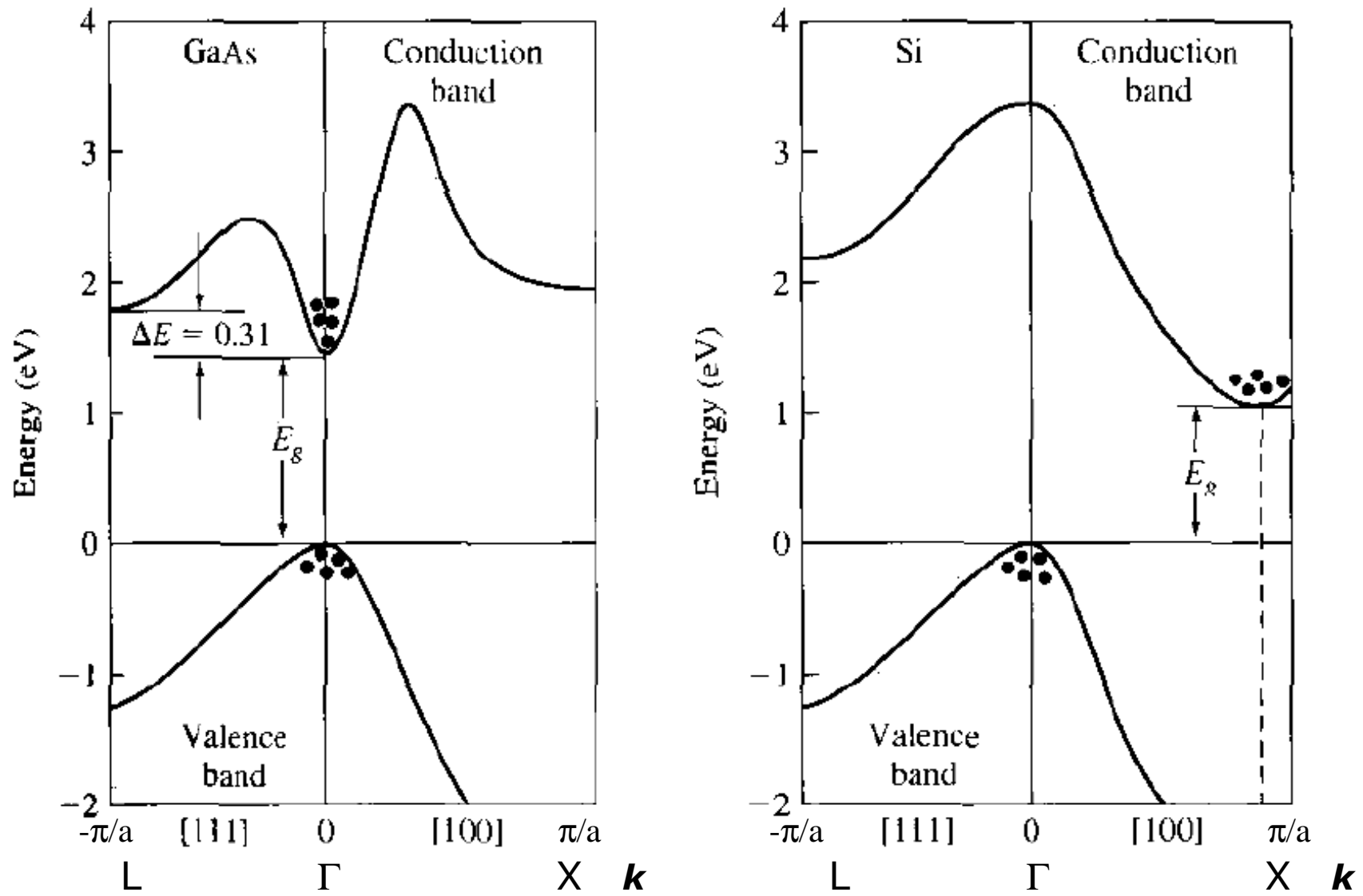
A kristályban

A kristály térbeli periodicitásának hatása

Az energia és hullámszám közötti összefüggés (a sáv szerkezet) $2\pi/a$ periódussal periodikus k szerint. Ezért elegendő a $-\pi/a$ és $+\pi/a$ vagy a 0 és π/a közötti tartományt vizsgálni.



A GaAs és a Si Sáv szerkezete az [111] és [100] kristálytani irányokban



[111] irány - L völgy, [110] irány - X völgy, $k=0$ - Γ pont.

A sávszerkezet jellemzői

1., A tiltott sáv szélessége és hőmérsékletfüggése

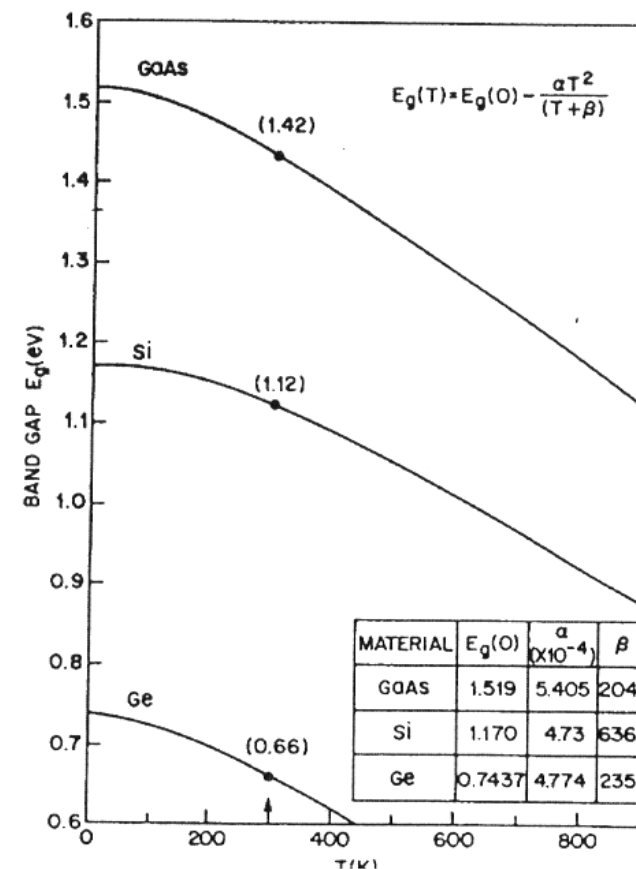
$$E_g = E_{g0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

	E_{g0} [eV]	$\alpha \cdot 10^4$ [1/K]	β [K]	E_{g300} [eV]
GaAs	1,52	5,41	204	1,42
Si	1,17	4,73	636	1,12

2., Direkt vagy indirekt sávszerkezet

Direkt: a vegyértéksáv maximuma és a vezetési sáv minimuma ugyanál a hullámszám értéknél van (pl. GaAs).

Indirekt: a vegyértéksáv maximuma és a vezetési sáv minimuma különböző hullámszám (k) értékeknél van (pl. Si).



3., Effektív tömeg

A szabad elektron tömege:

$$m = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} \quad (E = p^2/(2m), p = \hbar k \text{ alapján})$$

A kristályban effektív tömeg:

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

A periódikus potenciális tér miatt eltér a szabad elektron tömegétől.

4., Állapotsűrűség

$$g(E) = \frac{dN}{dE}$$

A dE energiatartományra jutó energiaállapotok száma.

Ellenőrző kérdések:

Mi az összefüggés a szabad elektron energiája és frekvenciája között?

Mi a hullámszám?

Mi az összefüggés a szabad elektron impulzusa és hullámszáma között?

Mit jelent az anyag kettős természete?

Milyen energiák szerepelnek a Schrödinger egyenletben?

Mi az alagúteffektus?

Mi a kvantummechanikai hullámfüggvény fizikai értelme?

Miért nem rendelkezhet tetszőleges energiával a részecske a potenciálgödörben?

Mi az interferencia?

Mi az összefüggés a foton energiája és a fény hullámhossza között?

Mikor nem lóg túl a hullámfüggvény a potenciálgödör szélén?

Mi a kvantummechanikai visszaszóródás?

Hányszorososa a második megengedett energiaszint az elsőnek egydimenziós végtelen mély potenciálgödör esetében?

Hány alhéj van a harmadik elektrónhéjon?

Hány alhéj van a második elektrónhéjon?

Mi az atomtörzs?

Lehet-e elektron Si atomban a harmadik héj harmadik alhéján?

Milyen kémiai kötések ismer?

Mi az összefüggés a szabad elektronok koncentrációja és a térfogati atomsűrűség között fémek esetében?

Mi jellemzi a direkt sáv szerkezetet?

Mi az oka annak, hogy a sáv szerkezet különböző a különböző kristálytani irányokban?

Mi az állapotsűrűség definíciója?

Mi a tiltott sáv szélessége?

Mi jellemzi az indirekt sáv szerkezetet?

Melyik két fizikai mennyiség közötti összefüggést nevezzük sáv szerkezetnek?

Hogy függ a tiltott sáv szélessége a hőmérséklettől?

Milyen hullámszám-tartományra szokás ábrázolni a sáv szerkezetet?

Melyek a sáv szerkezet fő jellemzői (paraméterei)?

A félvezetők sáv szerkezetének szokásos ábrázolása esetén a bal- és jobboldal miért nem tükörszimmetrikus?

Mi az elektron effektív tömege?

Mi az állapotsűrűség fogalma?