

Szilárdtestfizikai összefoglaló I.

Az anyag kettős természete

Az anyag hol hullámként, hol részecskeként 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 csak diszkrét energiakvantumokban megy végbe:

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

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:

$$E=m_0c^2$$

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 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:

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

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

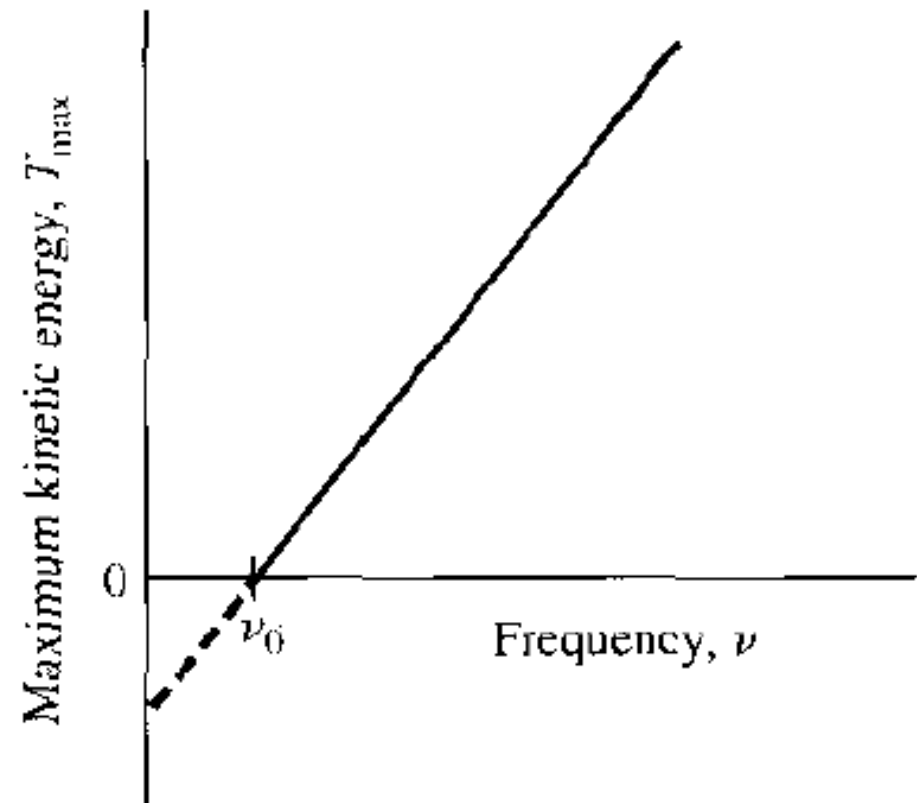
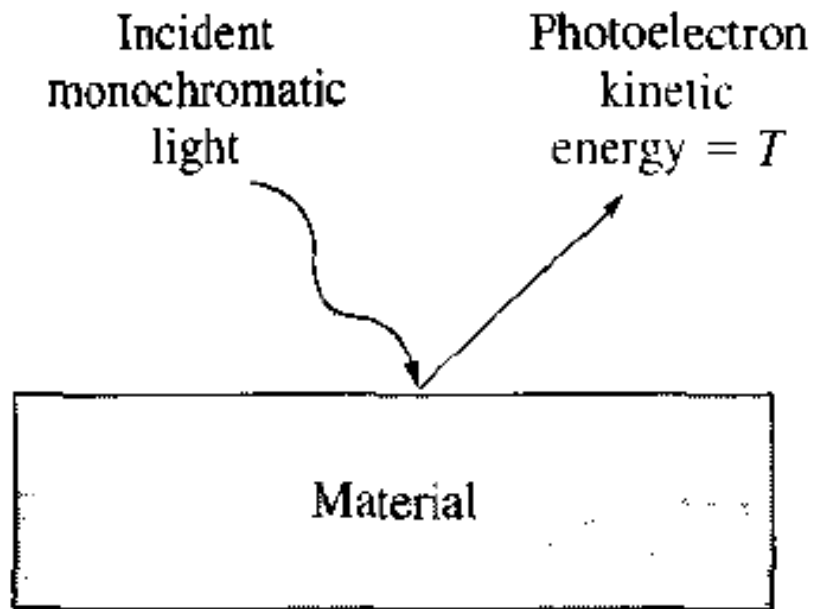
A Röntgen foton frekvenciája és energiája ennek pont a százszorosa:

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

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

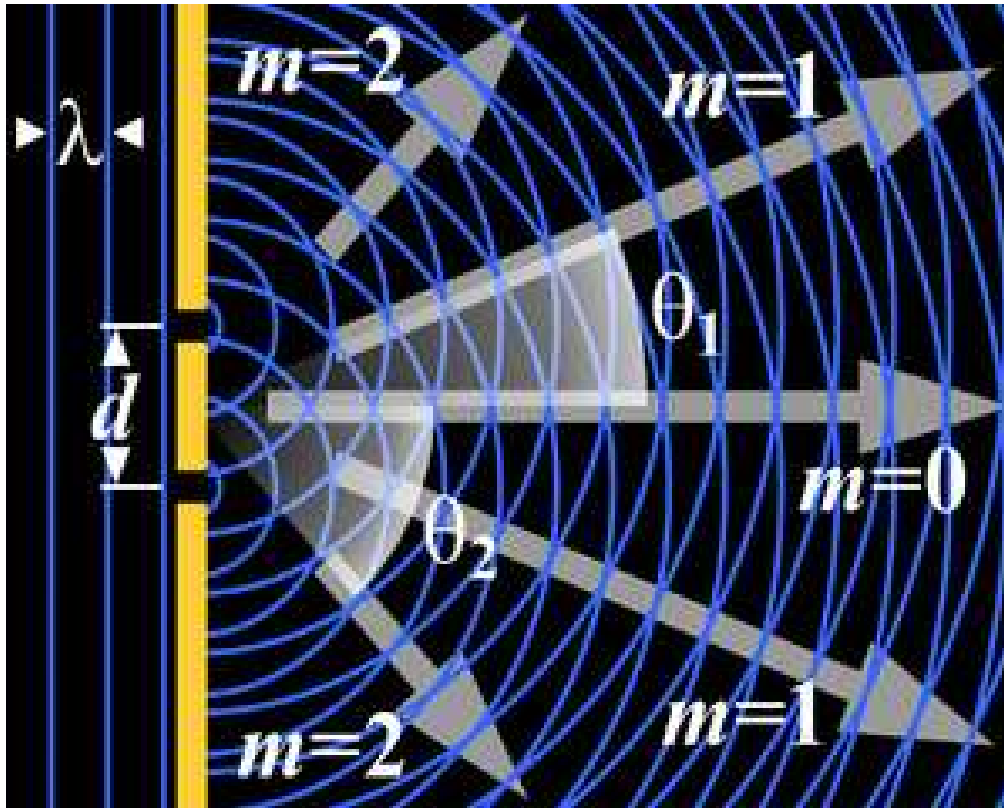
Fényelektromos jelenség

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

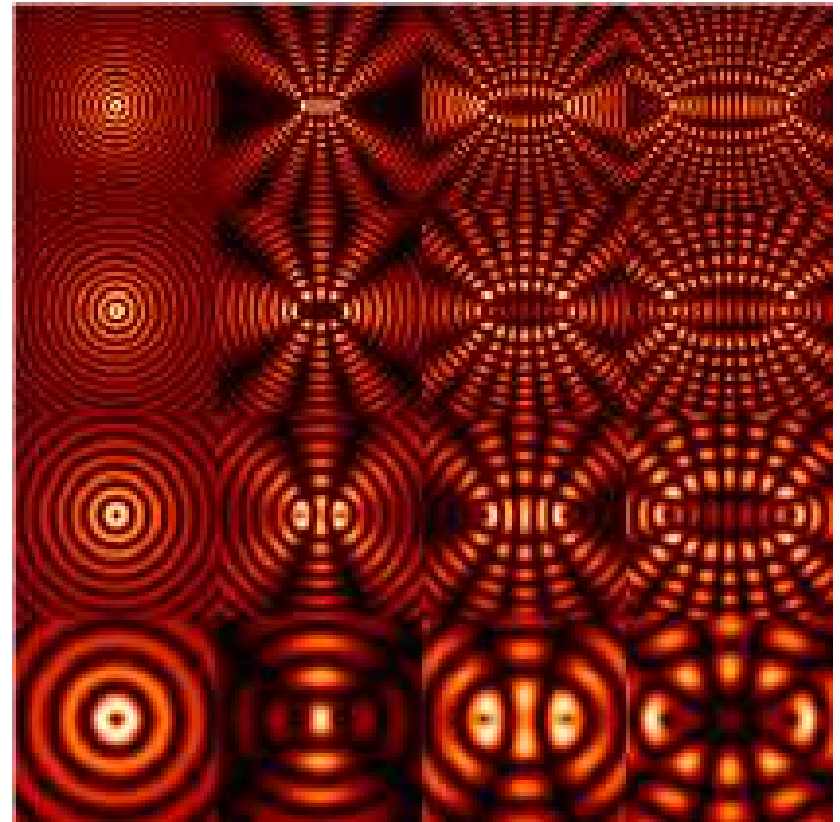


Fényelhajlás és interferencia

Közvetlen klasszikus kísérleti bizonyítéka a foton hullámtermészetének.



Fényelhajlás (diffrakció)



Interferencia különböző
hullámhosszak és két fényforrás
különböző távolságai esetében

A foton impulzusa:

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

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:

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

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 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:

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

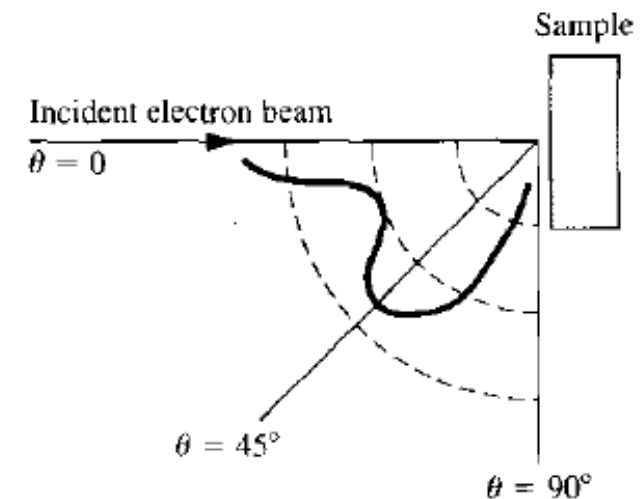
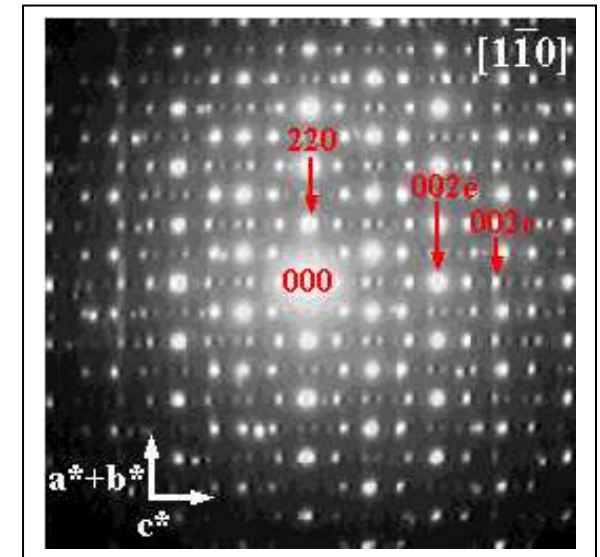
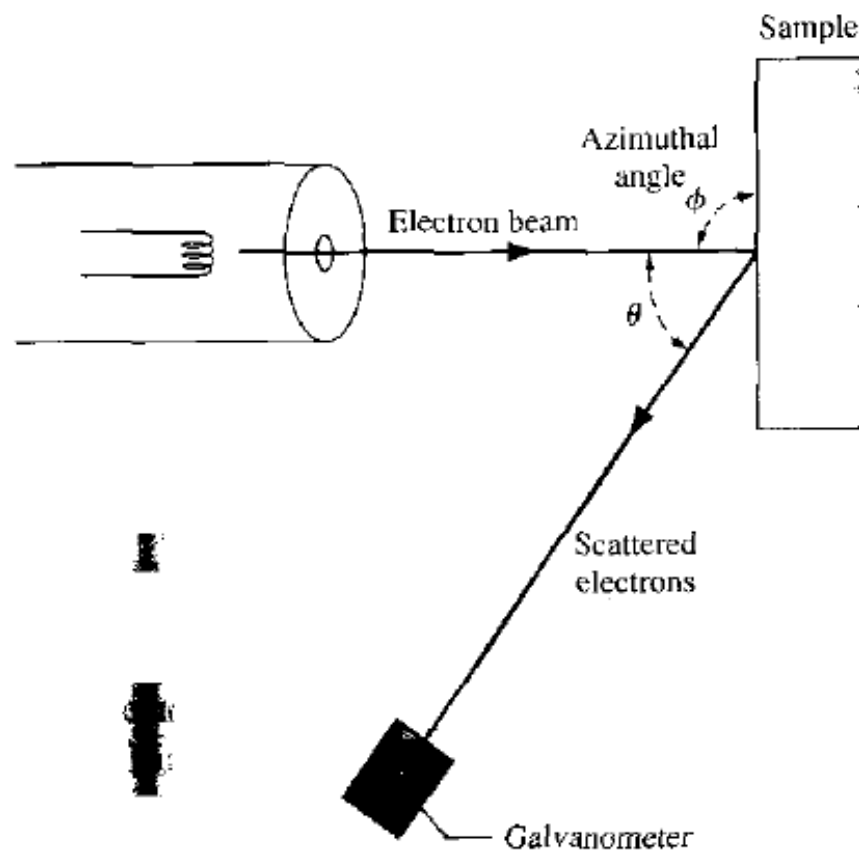
A **10^4 m/s** sebességgel mozgó elektron impulzusa a fenti érték tizedrésze, de Broglie hullámhossza pedig a tízszerese:

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

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

Davisson-Germer kísérlet (1927)

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



Ma anyagvizsgálati módszerként alkalmazzák (elektrondiffrakció).

Hullámok

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

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

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 α a kezdő fázis szög.

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.

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):

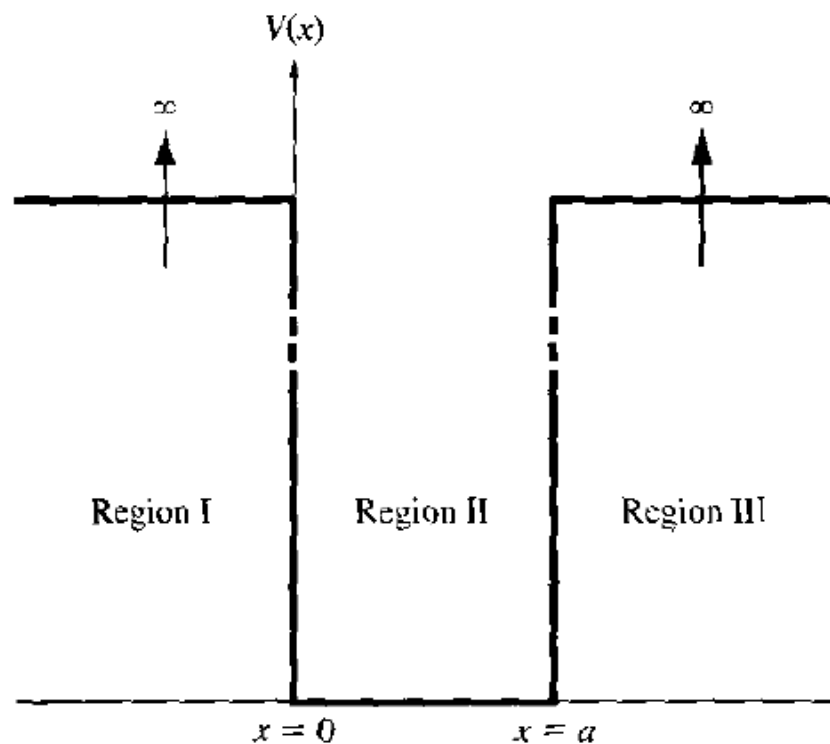
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \psi = 0$$

ahol m az elektron tömege, E az elektron teljes energiája és E_p a (kordináta függő) potenciális energia.

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

Elektron potenciálgödörben

Végtelen mély potenciálgödör



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

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

k_n -t behelyettesítve:

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

A Schrödinger egyenlet megoldása

Határfeltételek:

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

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

Megoldás:

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

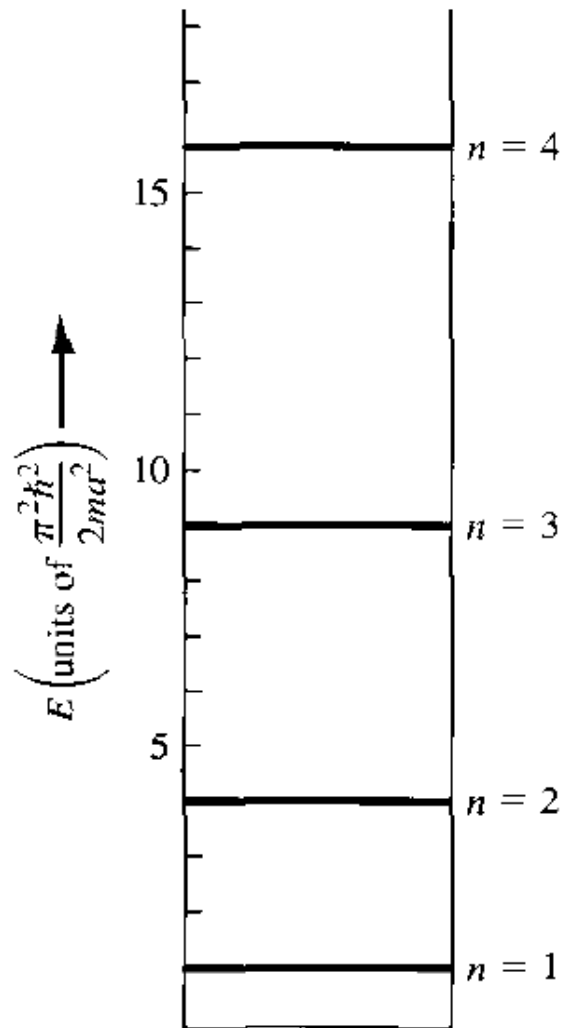
$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

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

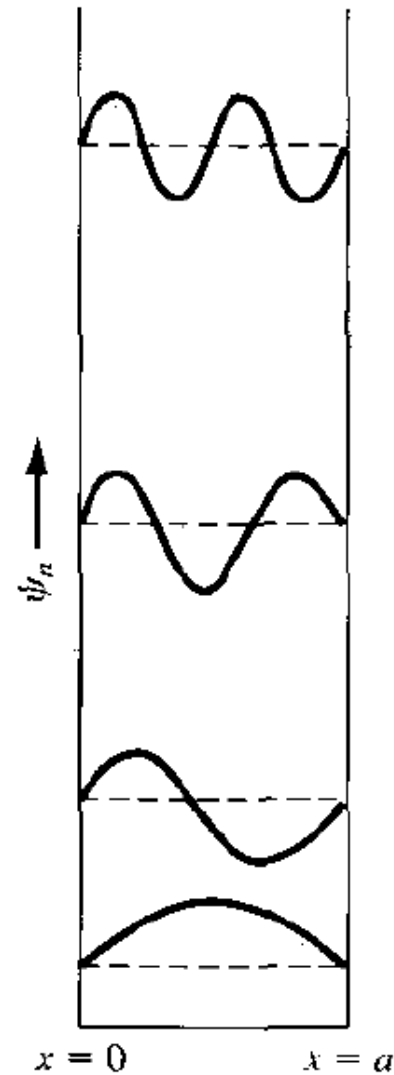
$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}$$

$$E_n = n^2 E_1$$

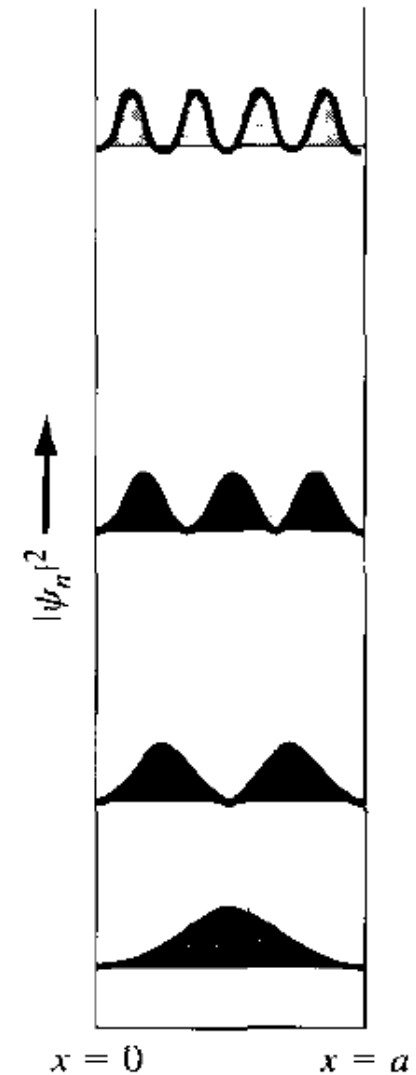
A Schrödinger egyenlet megoldása



Energiaállapotok



Saját értékek



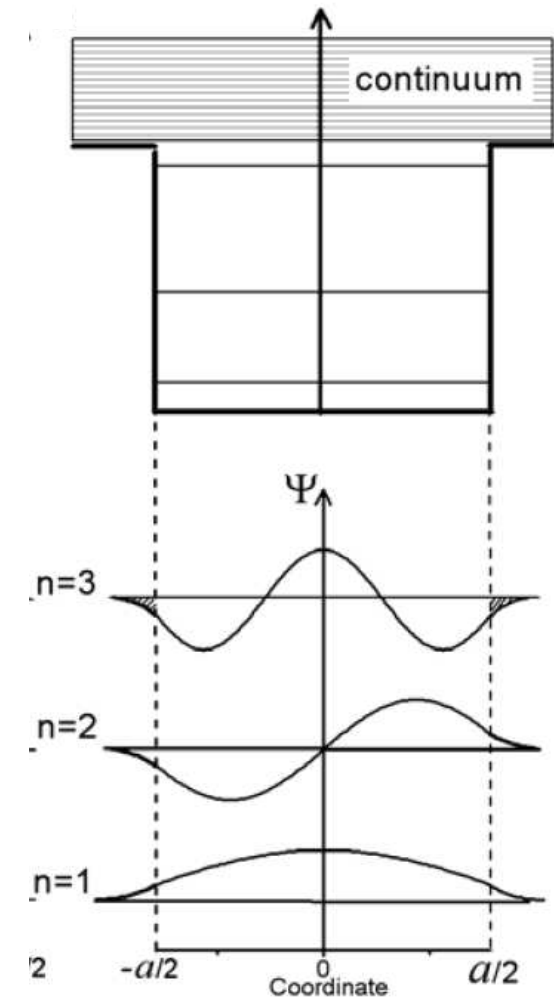
Előfordulási
valószínűségek

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

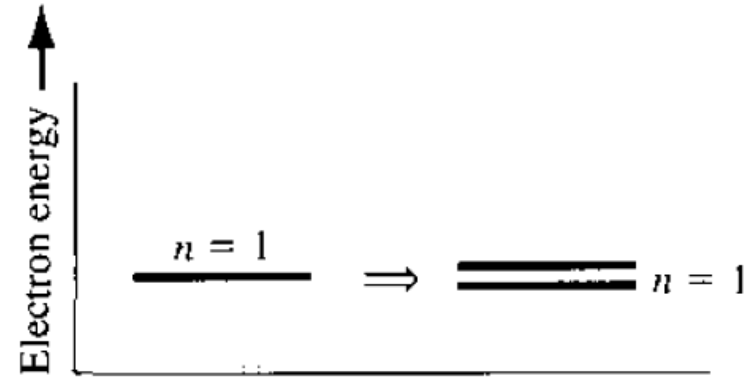
Nem végtelen mély potenciálgödör

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

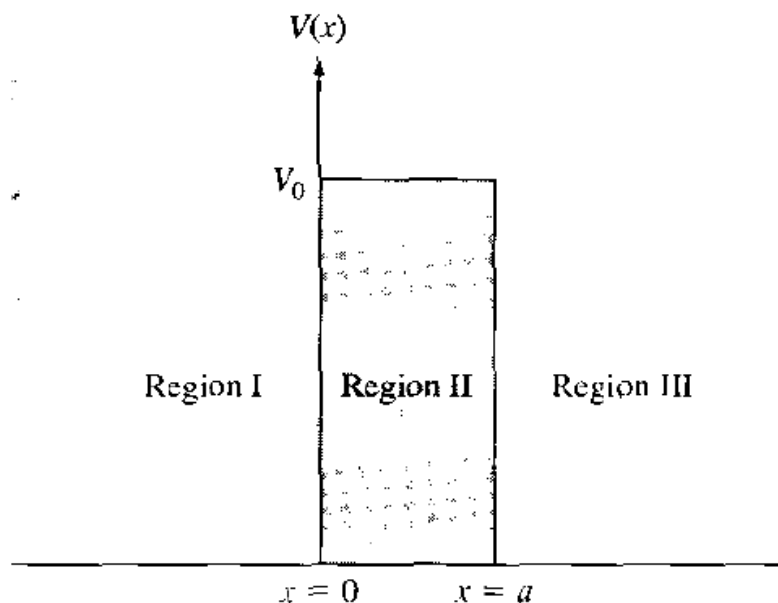


Csatolt potenciálgödrök

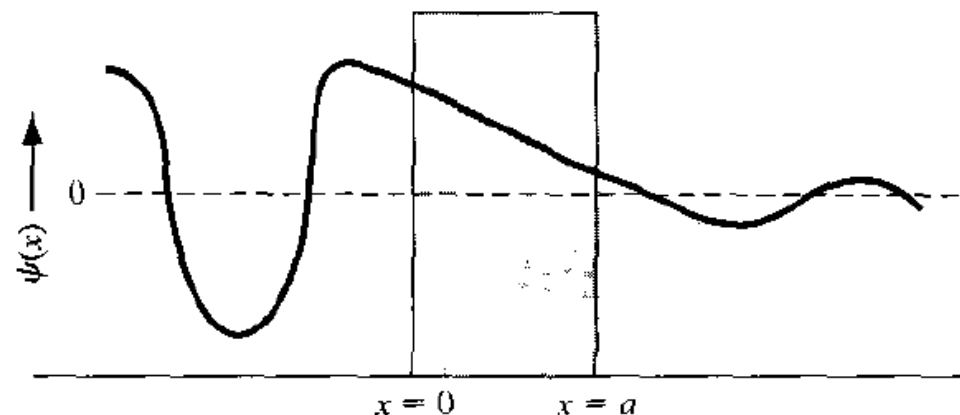
Ha két vagy több nem végtelen mély potenciálgödör olyan közel van egymáshoz, hogy a hullámfüggvények átlapolnak, a megengedett energiaállapotok felhasadnak. Annyi megengedett állapot jön létre, amennyi a csatolt potenciálgödrök száma.



Alagúteffektus



Potenciálgát



Hullámfüggvény

Ha az elektron energiája kisebb, mint a potenciálgát magassága, akkor is van véges valószínűsége annak, hogy átjut a potenciálgáton.

Kvantummechanikai visszaszóródás

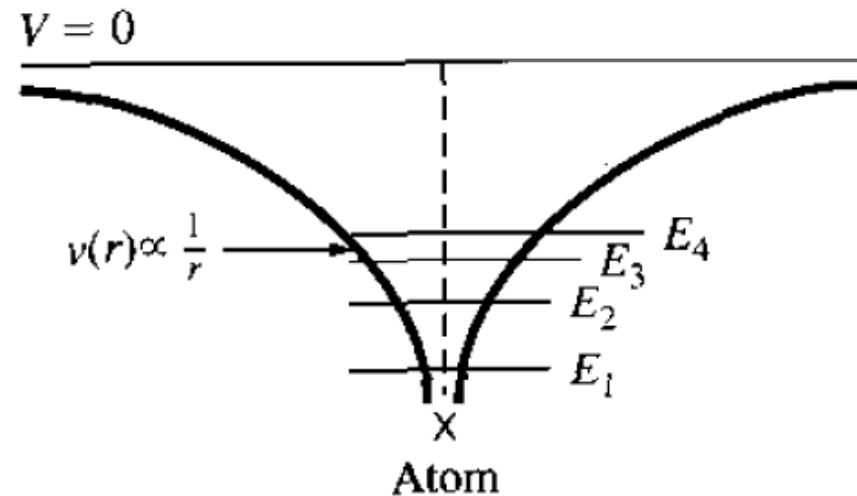
Fordított effektus: ha az elektron energiája nagyobb, mint a potenciálgát magassága, akkor is van véges valószínűsége annak, hogy nem jut át a potenciálgáton.

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 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 atommodell 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)

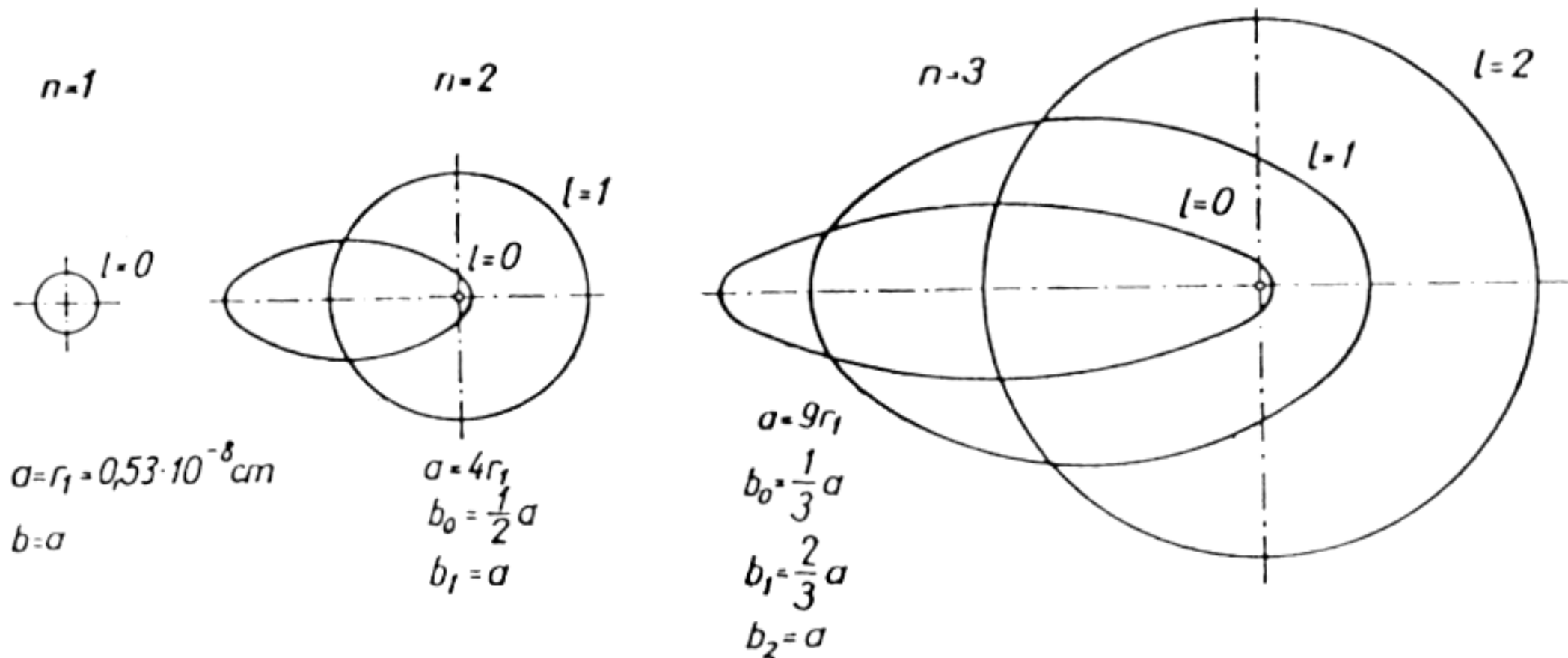
m - mágneses kvantumszám, azzal kapcsolatos, hogy az elektronpálya hogy áll be külső mágneses térben

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

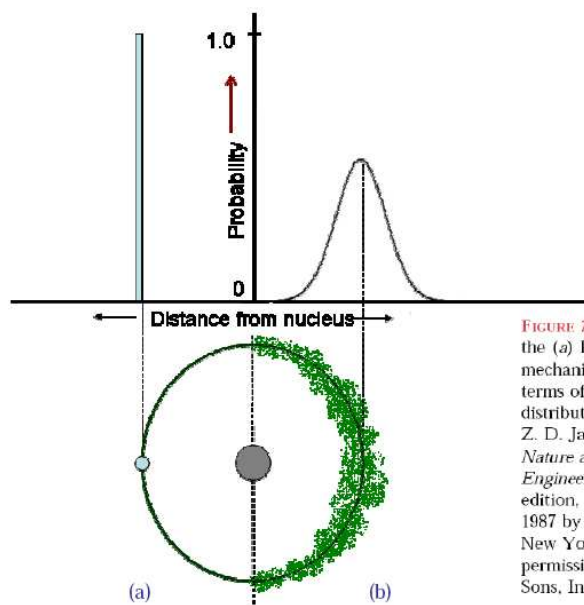
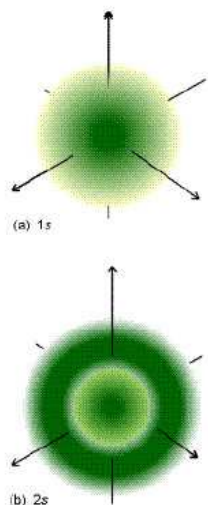


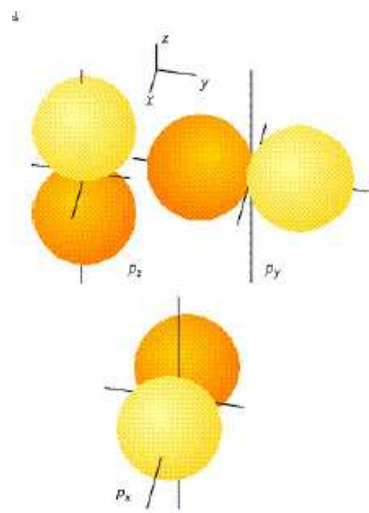
FIGURE 2.3 Comparison of the (a) Bohr and (b) wave-mechanical atom models in terms of electron distribution. (Adapted from Z. D. Jastrzebski, *The Nature and Properties of Engineering Materials*, 3rd edition, p. 4. Copyright © 1987 by John Wiley & Sons, New York. Reprinted by permission of John Wiley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

A 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.

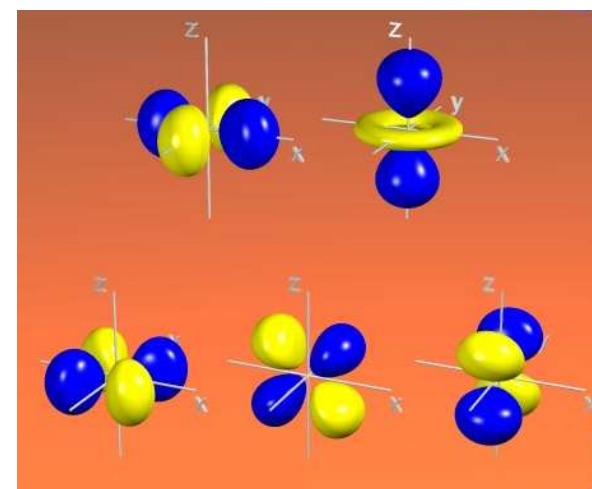
Az elektronok a rendelkezésre álló tér kitöltésére törekszenek, és – a köztük lévő taszítás miatt – a pályák a lehető legszimmetrikusabban helyezkednek el.



1s és 2s pályák



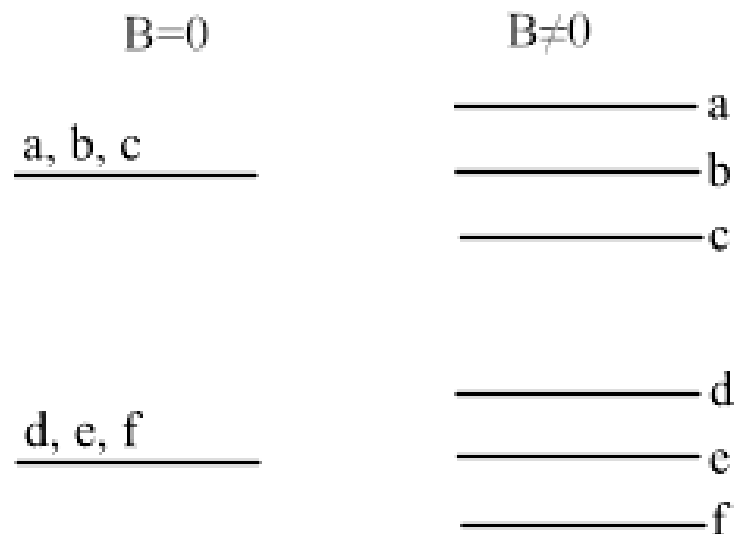
p pályák



d pályák

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 és távolsága 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 találhatók.

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 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.

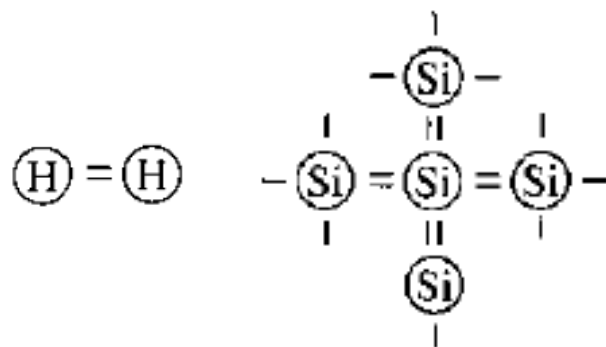
Ionos kötés: a fém átadja a külső héján lévő elektronokat a nemfémnek.
Pl: Na^+Cl^- .

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

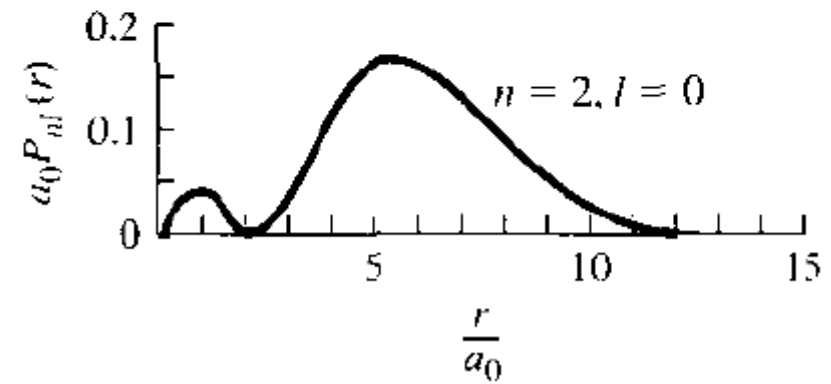
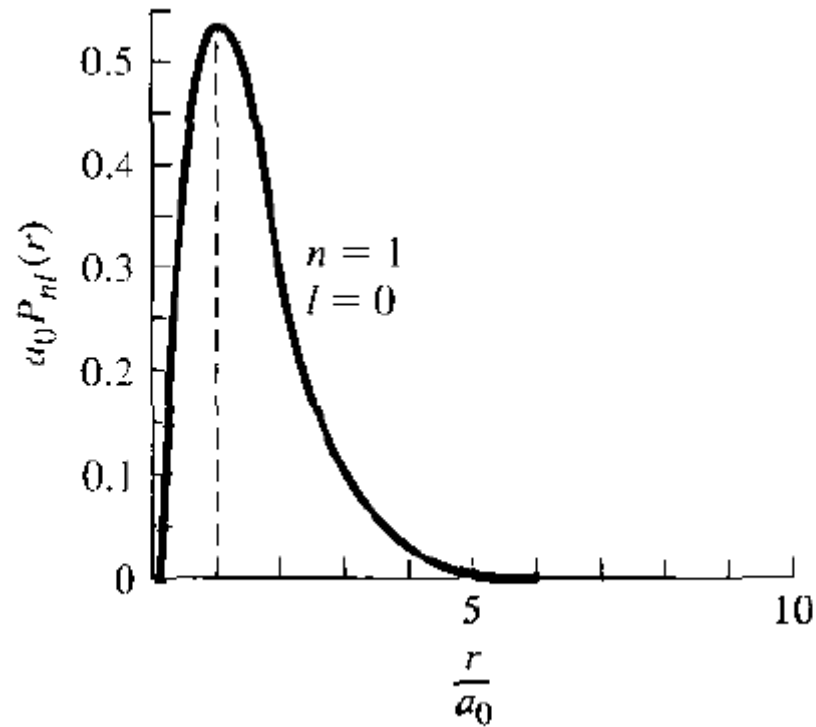
Pl.: H_2 - 1-1 megosztott elektron: 2 közös elektron a külső s héjon.

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.



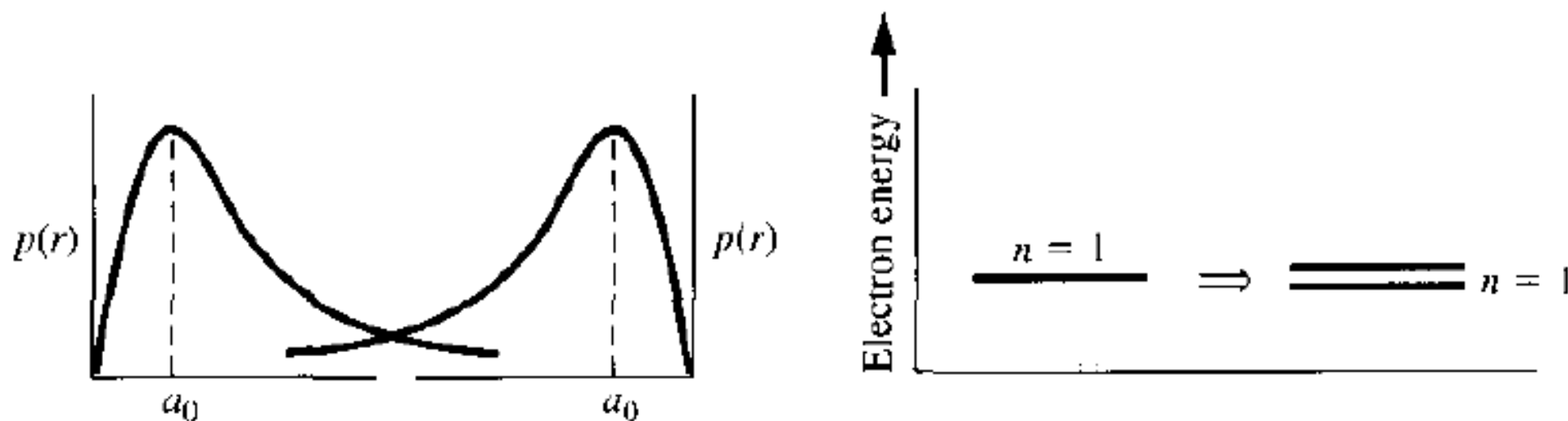
A Schrödinger egyenlet megoldása a hidrogén atomra



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

A hidrogénmolekula

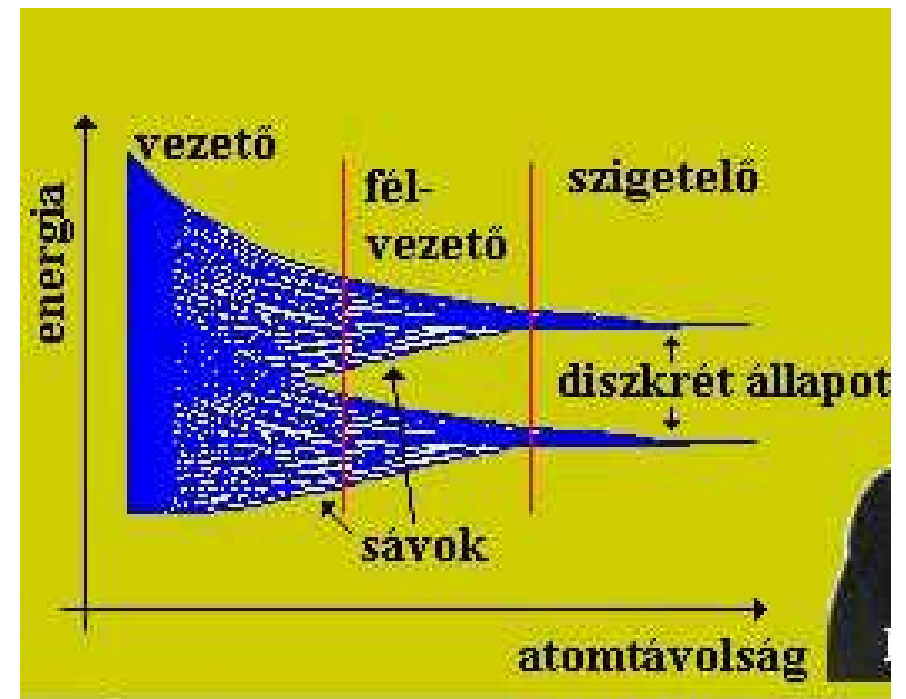
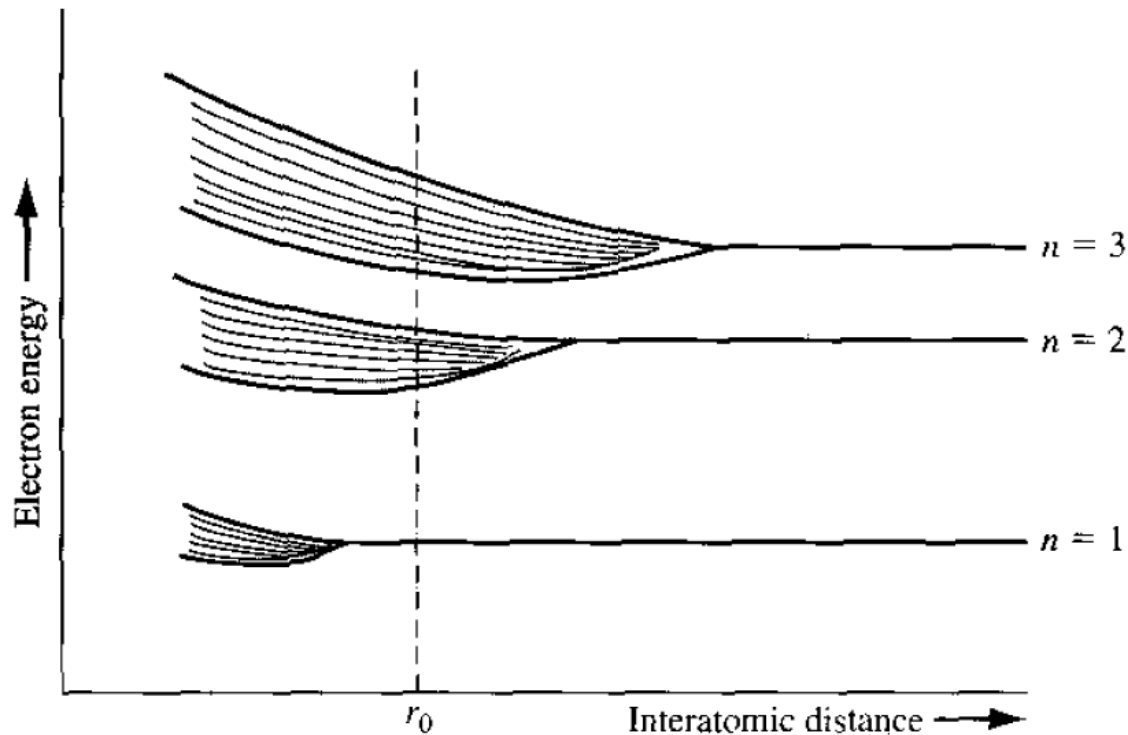
A hidrogénmolekulában a hullámfüggvények átlapolnak és az energiaszintek felhasadnak.



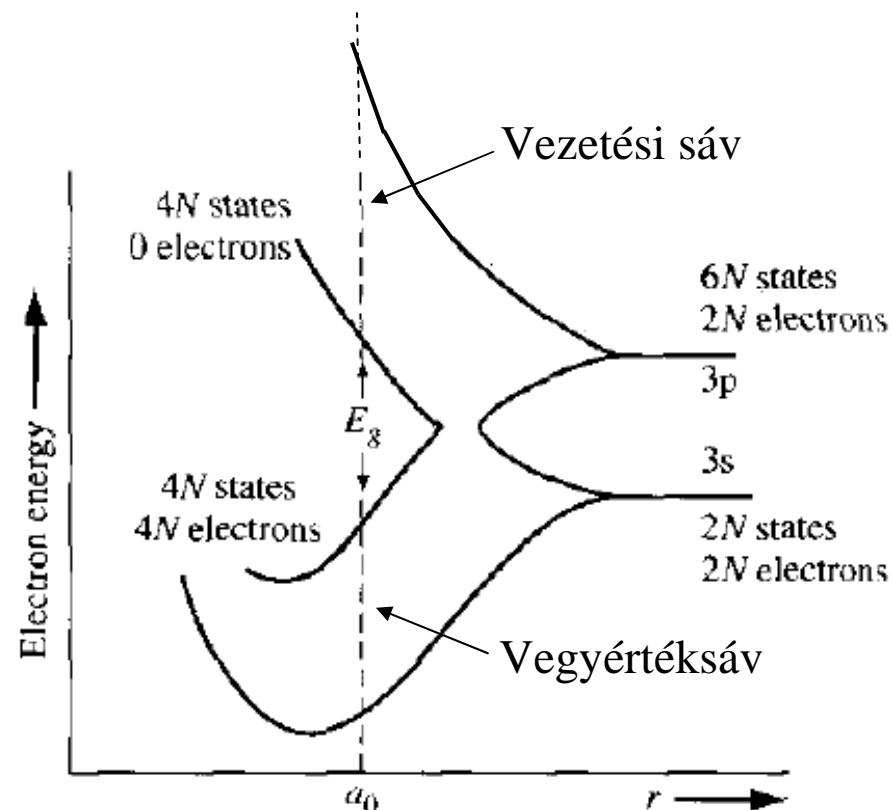
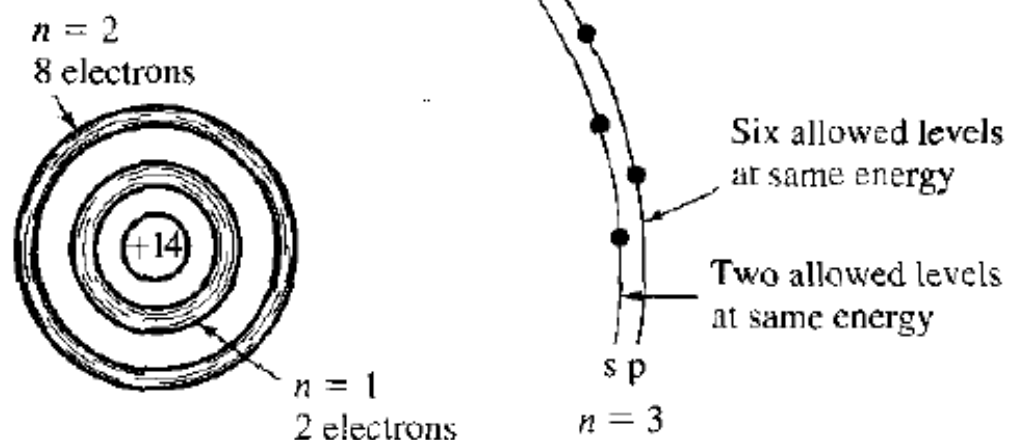
Az első elektronhéj hullámfüggvényeinek átlapolása és az energiaszint felhasadása

Az energiaszintek felhasadása sok kölcsönható atom esetén

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



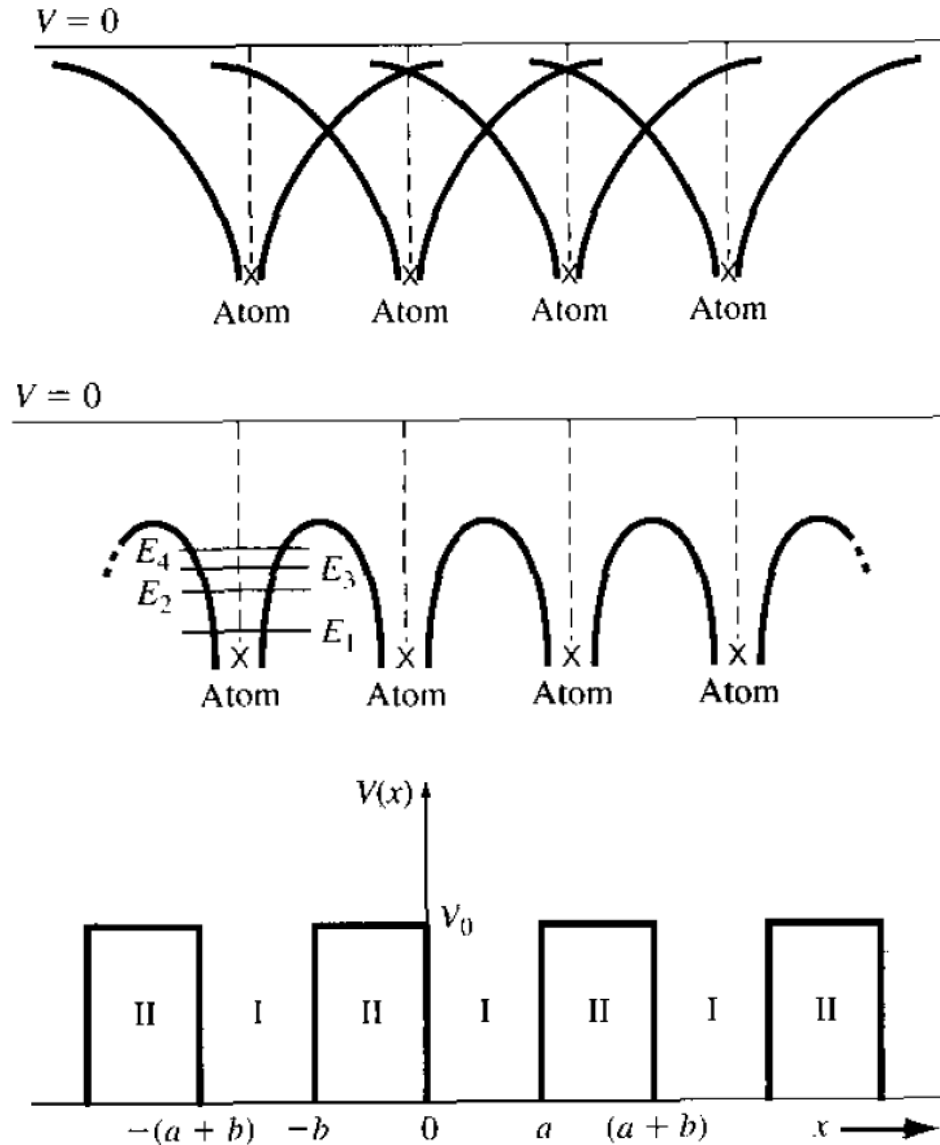
A szilíciumatom



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

A Schrödinger egyenlet megoldása a kristály periódikus potenciális terében

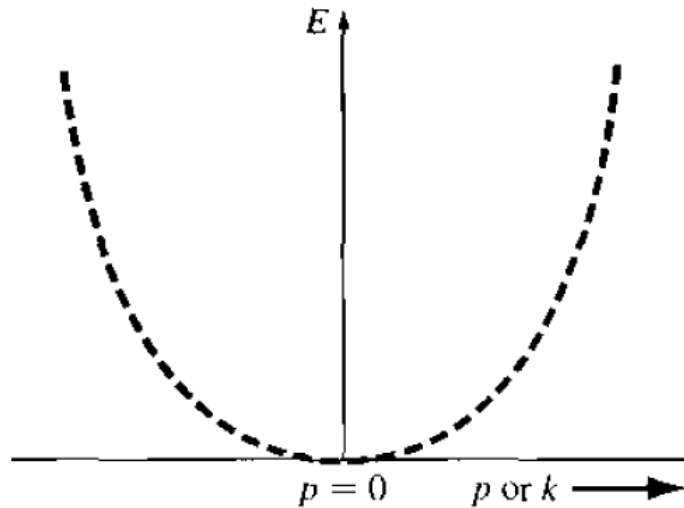
Az atomtörzsek között potenciálgátak alakulnak ki.



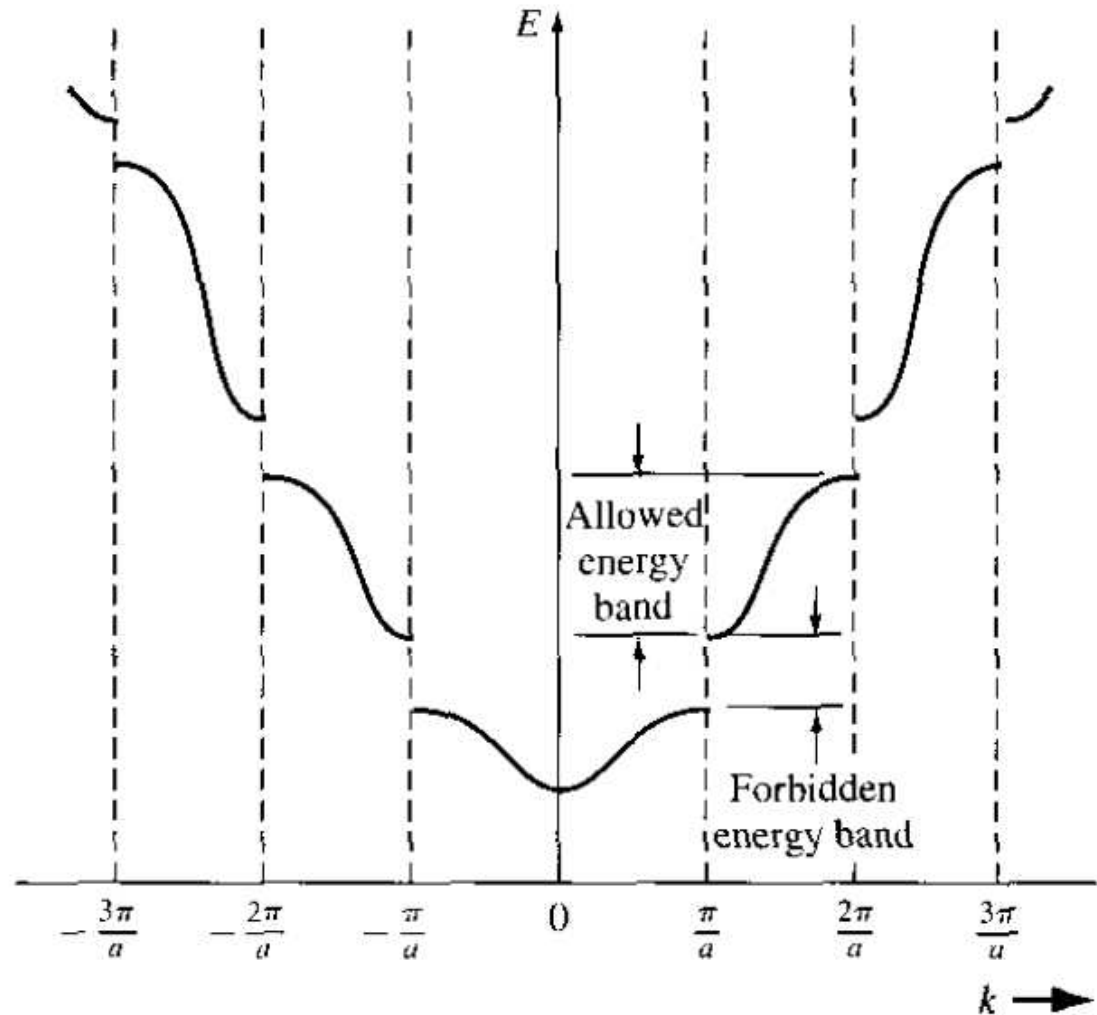
Krönig-Penney
model

A Schrödinger egyenlet megoldása a Krönig-Penney modellel

Az elektron teljes energiája és hullámszáma közti összefüggés



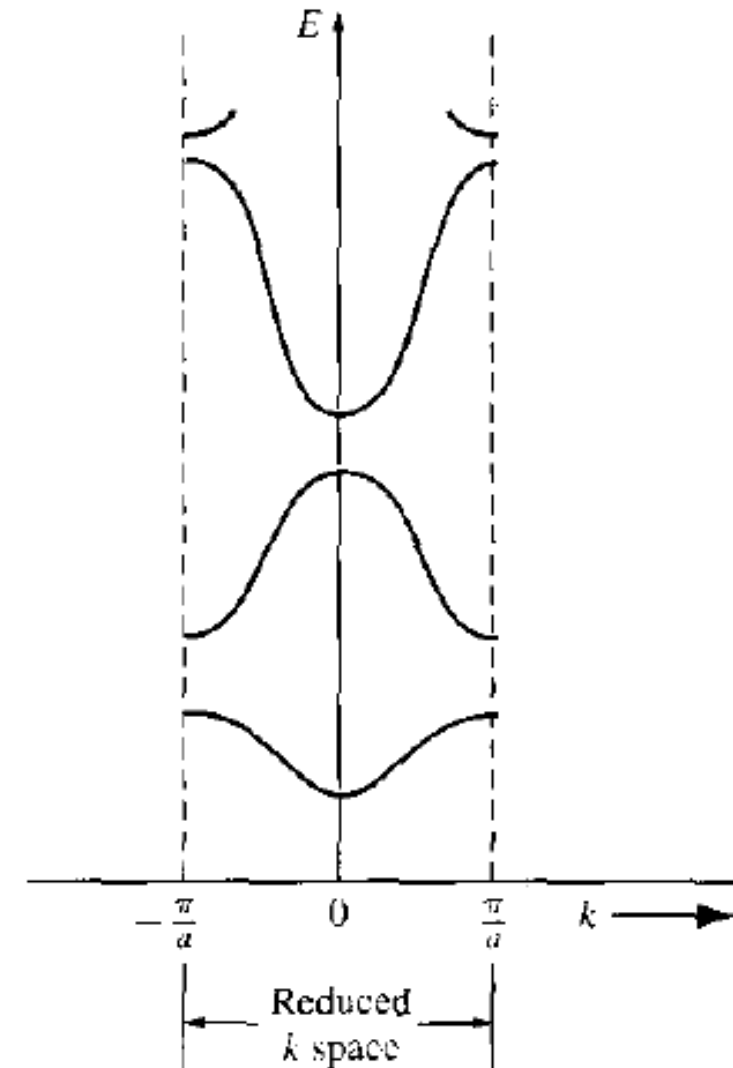
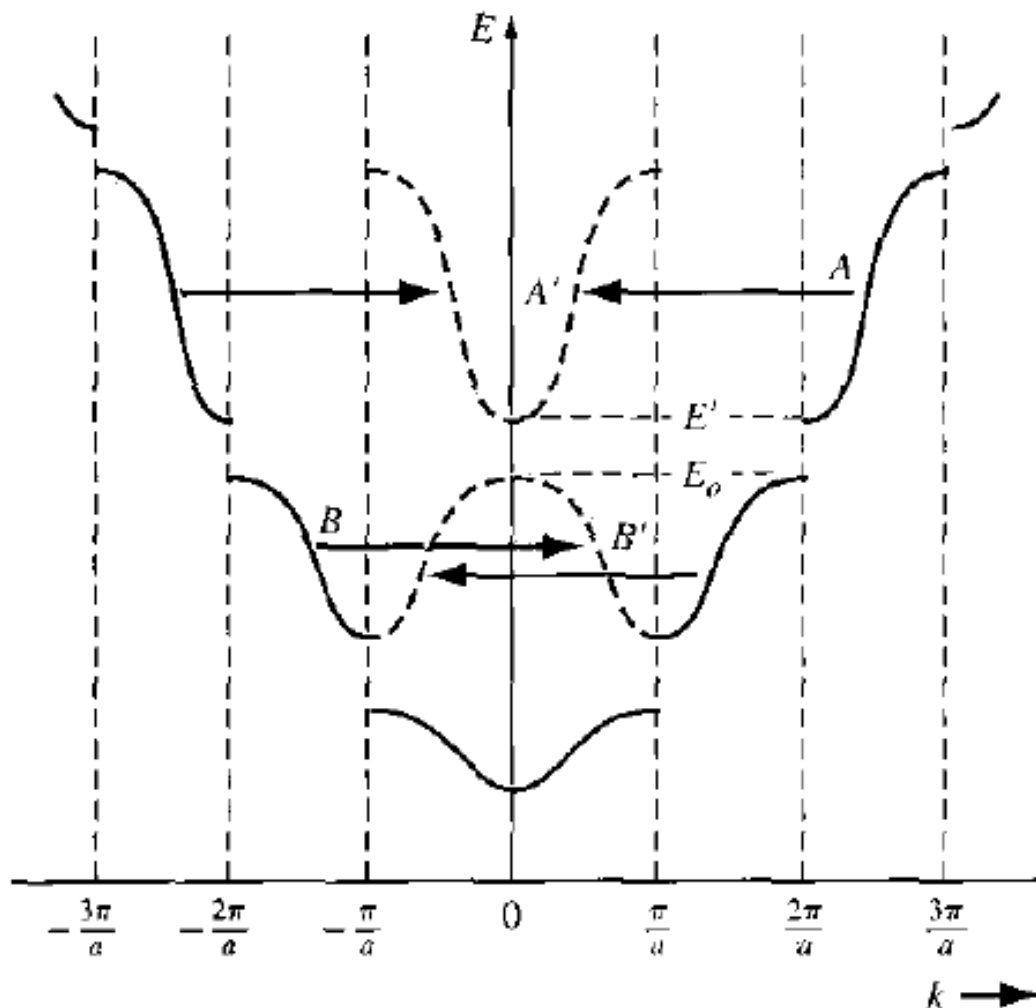
Szabad elektron esetében



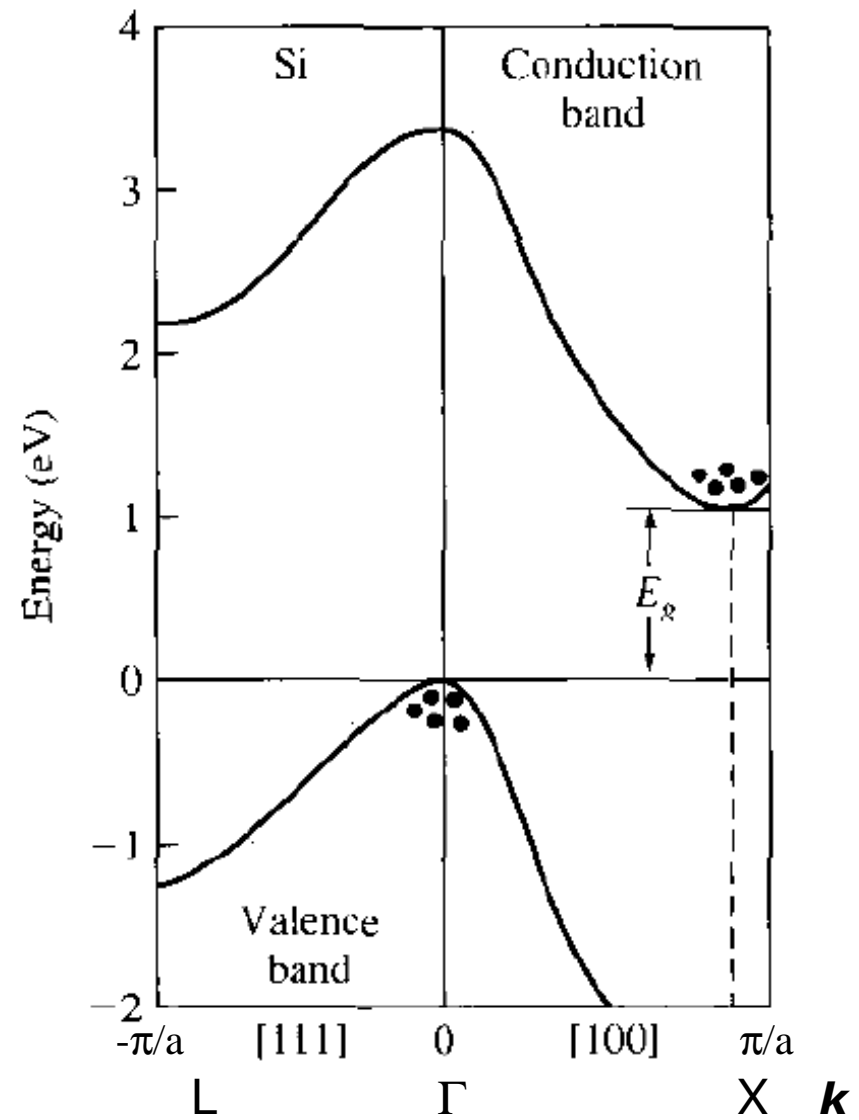
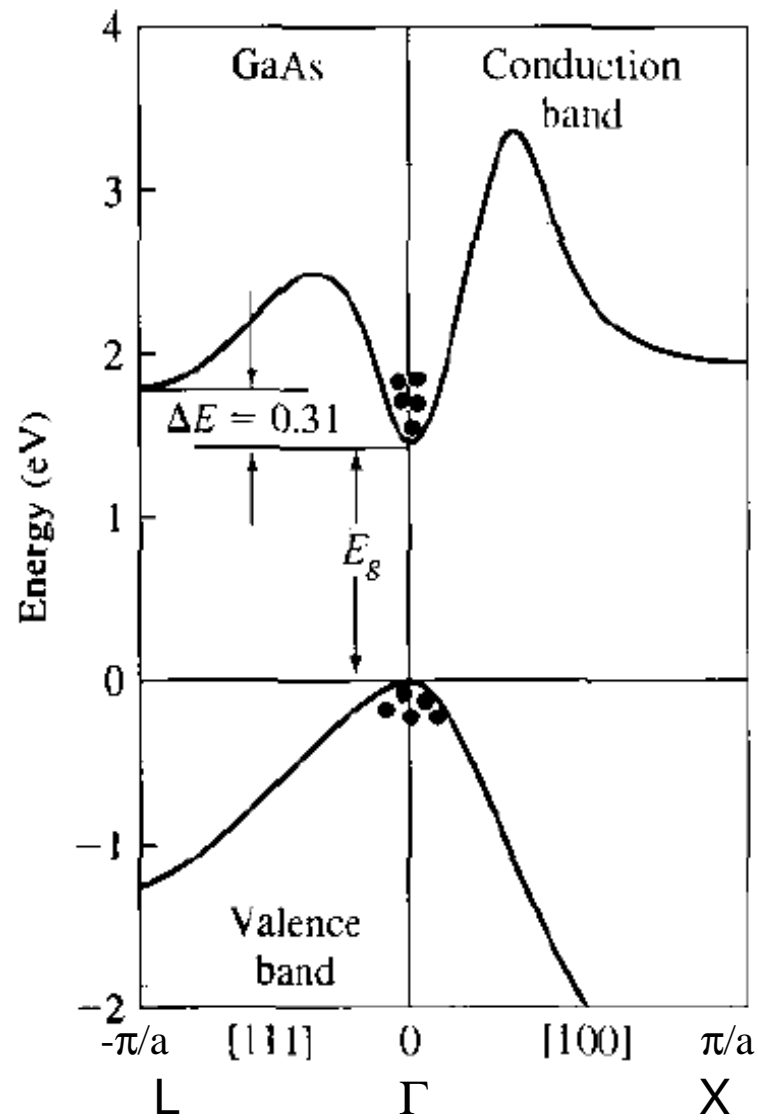
A kristályban

A kristály térbeli periodicitásának hatása

Az energia és hullámszám közötti összefüggés (a sávszerkezet) $2\pi/a$ 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 Sávszerkezete 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

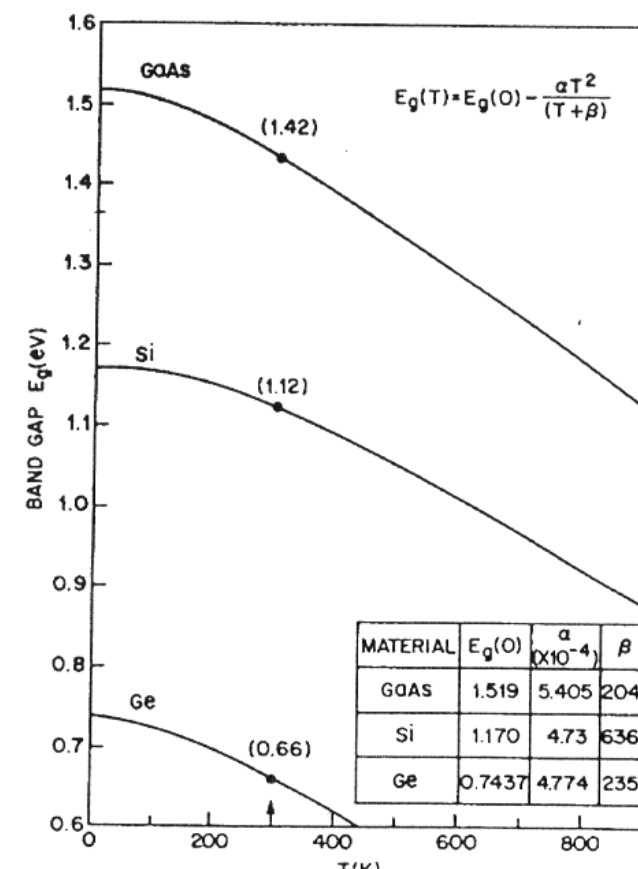
$$E_g = E_{g0} - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

	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 ugyanánál 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:

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

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?

Hányszorosa 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?

Mi jellemzi a direkt sáv szerkezetet?

Mi az oka annak, hogy a sávszerkezet különböző a különböző kristálytani irányokban?

Mi az állapotsűrűség definíciója?

Mi a tiltott sáv szélessége?

Mi jellemzi az indirekt sávszerkezetet?

Melyik két fizikai mennyiség közötti összefüggést nevezzük sávszerkezetnek?

Hogy függ a tiltott sáv szélessége a hőmérséklettől?

Milyen hullámszám-tartományra szokás ábrázolni a sávszerkezetet?

Melyek a sávszerkezet fő jellemzői (paraméterei)?

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

Mi az elektron effektív tömege?

Mi az állapotsűrűség fogalma?