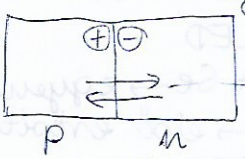
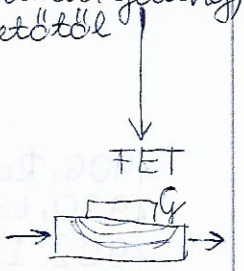
A félvezetők fizikája

IX.5.
1. hét

Simon Ferenc

Félvezetők: olyan anyag, aminek a vezetőképessége nagyban függ:
- hőmérséklettől
- adalékolástól (dópolástól)
- külső feszültségtől/draintől (kapuzás/gating)
- közeli kontaktusban lévő félvezetőtől
  pl. diffúzió, transzfer
  (pn dióda) (Gunn-dióda)





- fény (szenzorok)
- mágnesség (spintronika, mágneses félvezetők)
  MRAM

Félvezető anyagok

IV (főcsoport) Si, Ge, (Sn), C (grafén, szén-nanocsövek, gyémánt)
↓ adalékolható

IV vegyületei: SiC
III–V: AlP, GaAs, InSb
II–VI: ZnS, ZnSe, ZnO, CuO, PbS$_2$, FeS$_2$
alacsony-dimenziós félvezetők: ~~szén~~ 1D: szénnanocsövek, nanodrótok GaAs, InP
2D: grafén, dichalcogenidek, MoS$_2$, MoSe$_2$, WS$_2$
molekuláris, szerves félvezetők: C_{60}

A félvezetők korai története

Alapjelenségek

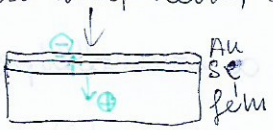
1833. Faraday: Ag$_2$S melegítve → R csökken
1839. Becquerel: Fotovoltaikus effektus
1873. Smith: fotovezetés Se-ben (fény → R csökken)
1874. Braun: egyenirányítás fém–szulfidokban
Schuster: CuO-ban ←"—
1878. Hall-effektus
1900. Baedeker: CuI-ben Hall-effektus ellentétes előjellel

Hall-állandó: $R_H = \frac{1}{n \cdot e}$

1910. Weiss: Halbleiter elnevezés
1928–1938: félvezetők kvantumelmélete, Bloch, Schottky, Mott
1940. Bardeen: a nem reprodukáló eredmények a tisztasággal függnek össze, 1 ppm (10^{-6}) nem elég!
(– ma: 10^{-12} tisztaság)

Eszközök:

1880. Bell: hangátvitel fénnyel, Se-nel
1883. Fritts: első napelem, Se + fém + vékony arany



1904. J. C. Bose: érzékeny rádiódetektor (cat's whiskers), galéna PbS_2 + tű
(pontkontaktus-dióda)



1906. Round: első LED
1920, többen: $CuO + Se \rightarrow$ egyenirányító
1922. Iosev: $ZnO \rightarrow$ első erősítő
1926. Lilienfeld: FET
1941. Ohl: első Si p-n átmenet
1947. Bardeen, Battain, Schockley: tranzisztor

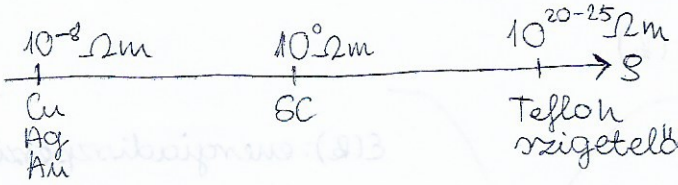
Nobel díjak:

1956. tranzisztor
1973. Esaki, Giaver: tunnel dióda
1985. von Klitzing: kvantált Hall-effektus
2000. Alferov, Kroemer, Kilby:
félvezető lézer, IC
2007. Fert, Grünberg GMR
2009. Boyle, Smith; CCD
2010. Geim, Novoselov: grafén
2014. Akasaki, Amano, Nakamura: kék LED, GaN

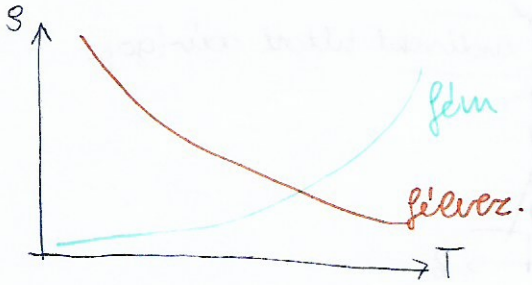
A félvezető fizika helye:

- kell hozzá: kvantummechanika, szilfiz, statfiz, anyagtudomány (optika)
- kijön belőle: elektronika, spintronika, lézeroptika, lézerfizika
- kutatások: alapkut. (új anyagok, alacsonydimenziós félvezetők, exitonok)
alapvető jelenségek demója (Bose-Einstein kondenzátum, QHE, FQHE, ...)
- alkalmazott kutatás: új eszközök (HEMT)
méret ↓, sebesség, frekvencia ↑, fogyasztás
- alkalmazások: hol nem?

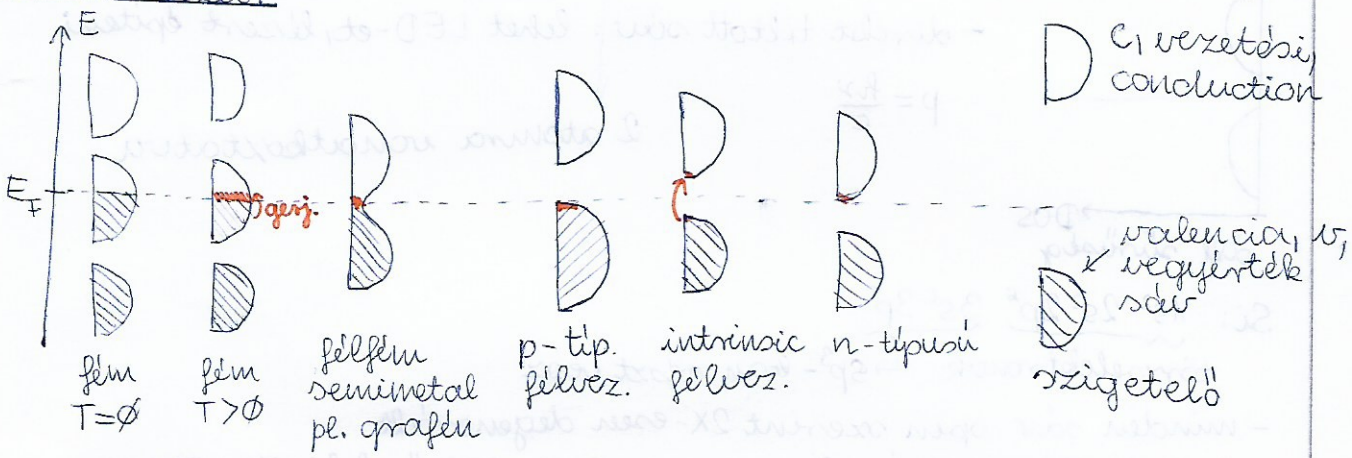
A félvezetők fizikai tulajdonságai



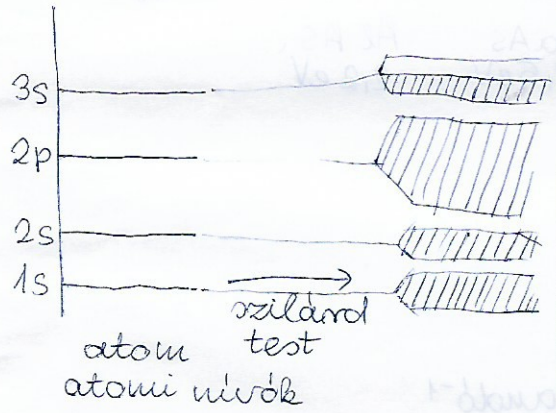
SC - semiconductor



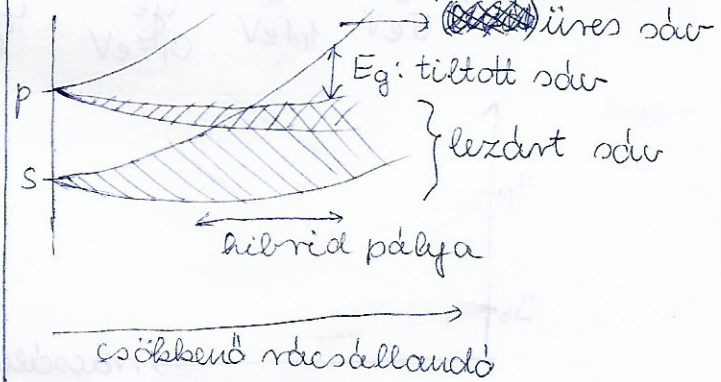
Sávszerkezet:



Na fém



IV elemek (C: $2s^2\ 2p^2$)



csökkenő rácsállandó

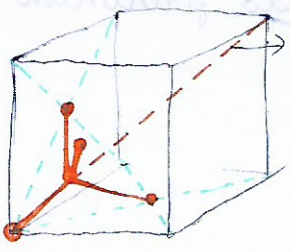
- hibridizáció → lezárt sáv

$E_{g,gyémánt} > E_{g,Si}$

↳ kisebb rácsállandó miatt

Szerkezet: gyémántrács, ZnS (cink-blende, cink-szulfid rács)

- Bravais-rács: fcc, bázis: $(\emptyset,\emptyset,\emptyset)$, $\frac{1}{4}a\,(1,1,1)$



cink-blende: bázisatomok mások

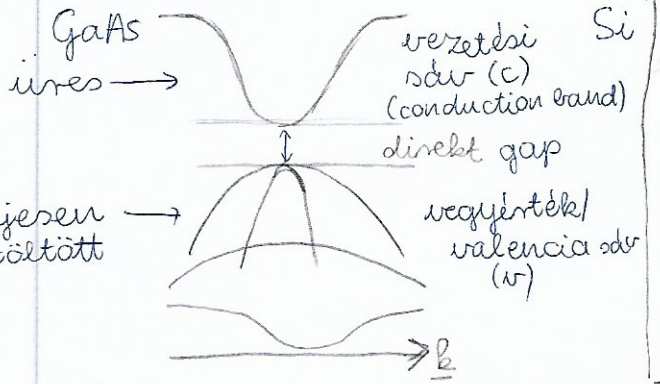
pl. $(\emptyset,\emptyset,\emptyset)\ a \Rightarrow$ Ga

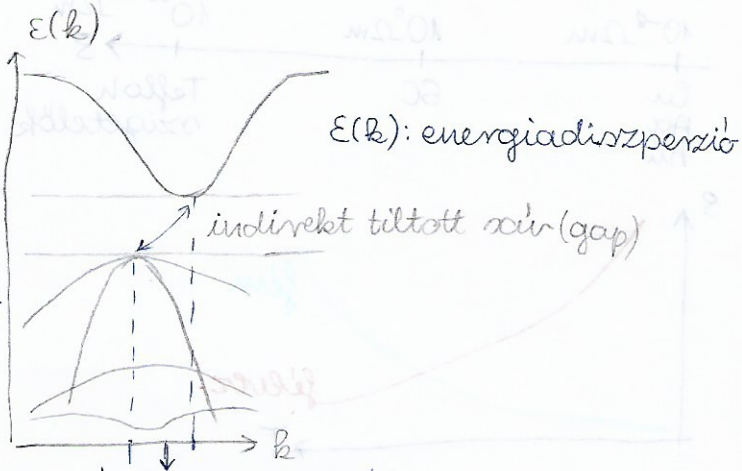
$(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})\ a \Rightarrow$ As

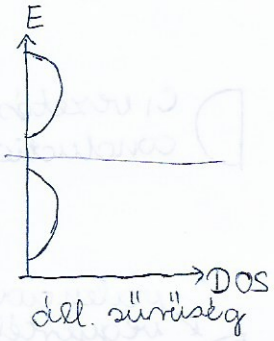
IX.12.
2. hét

s-p hibridizáció → következménye a félvezetés, a gyémántszerk.

Sávszerkezet







- direkt tiltott sáv: lehet LED-et, lézert építeni

$$p = \frac{h\nu}{c}$$

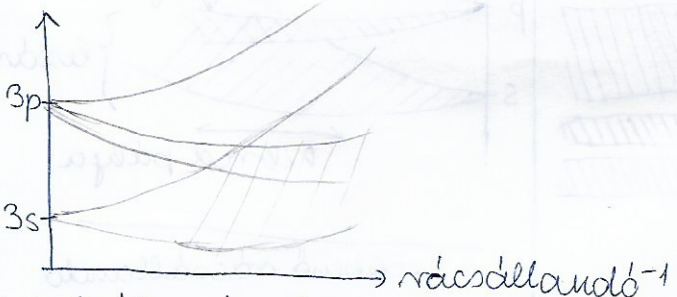
2 atomra vonatkoztatva

Si: $\underbrace{1s^2\ 2s^2\ 2p^6}_{\text{törzselektronok}}\ \underbrace{3s^2\ 3p^2}_{\text{↳ sp}^3\text{- ban részt vesz}}$

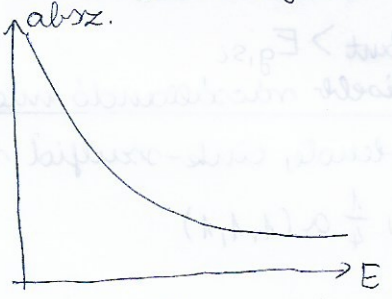
- minden sáv spin szerint 2X-esen degenerált
- energiadiszperzió: 2 db Si-on 8 db külső elektron van
  2-atomos bázis szerkezettel összefügg
- tiltott sáv:

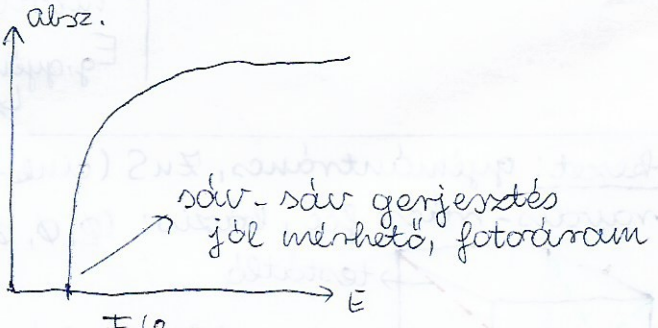
C	Si	Ge	GaAs	Al As
5 eV	1,1 eV	0,7 eV	1,5 eV	2,2 eV

- evol.:

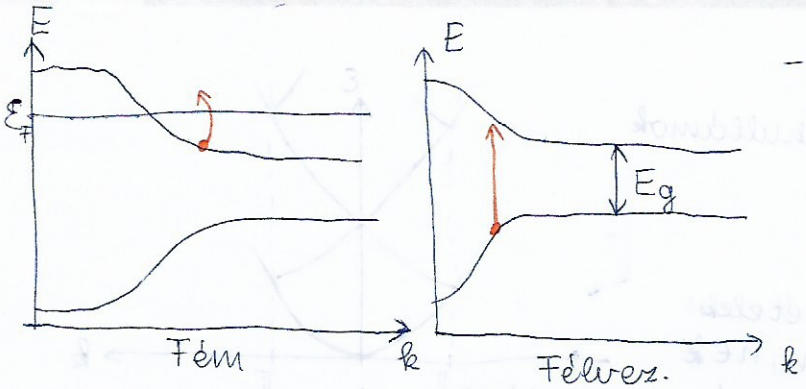


- Optikai tulajdonságok:









- a félvezetők jó optikai detektorok

Töltéshordozók félvezetőkben

n - töltéshordozó koncentráció

Fémben: $n = 10^{22} \frac{1}{cm^3}$

Germániumban, szobahőmérsékleten: $n = 2 \cdot 10^{13} \frac{1}{cm^3}$

hozzáadunk 1 ppm elektront: $n = 2 \cdot 10^{19} \frac{1}{cm^3}$ → vezetőképesség nagyon megnő

Drude-modell:

$ma = F = qE$

létezik egy „visszbozitás" → $ma = 0 = qE - Kv$ →

↑ stac. lin. relaxációs idő közelítés

$ma = qE - Kv$

$a = \frac{qE}{m} - \frac{K}{m} v$

↳ kell egy idő dim. mennyiség → $\frac{K}{m} = \frac{1}{\tau}$ → $\frac{qE}{m} = \frac{v}{\tau}$

↑ relaxációs idő

$v = \frac{qE\tau}{m}$ driftsebesség $\left(\frac{cm}{s}\right)$

pl. $\frac{10^{-19} \cdot 10^{4} \cdot 10^{-15}}{10^{-31}} = 10^{1} \frac{m}{s}$

- áramsűrűség:

$j = n \cdot e \cdot v_{drift}$

$\frac{1}{m^3} \cdot \frac{As \cdot m}{s} = \frac{A}{m^2}$ ✓

- Félvezetők: j arányos n-nel!
- adalékolással n nől, de egy idő után τ kezd csökkenni

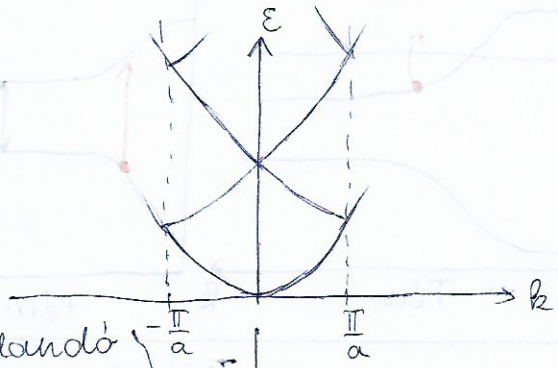
Szilárdtestek alapok

- 1D-s elektrongáz

$\Psi(k,x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot e^{ikx}$ síkhullámok

$p = \hbar k$

$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$



redukált zónakép, üres rács (csak e⁻-gáz)

periodikus határfeltételek:

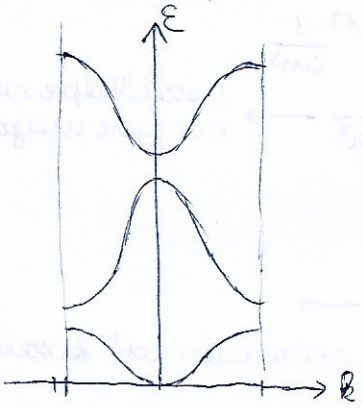
$e^{ikL} = 1 \Longrightarrow kL = 2\pi n;\ n \in \mathbb{Z}$

$k = \frac{2\pi}{L}$ és $L = N \cdot a$ — a - rácsállandó, N - atomok száma

$k = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n}{N} \longrightarrow N$ db különböző k

$k_{min} = -\frac{\pi}{a};\ k_{max} = \frac{\pi}{a}$

- ha van periodikus potenciál:

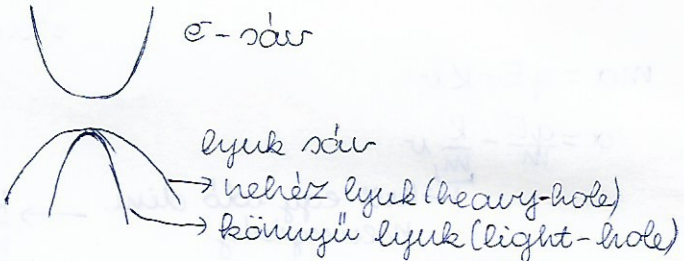


$v = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$ sebesség

- effektív tömeg:

$(m^*)^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k^2}$ görbület inverze

pl. GaAs



- tipikusan $m_c^* = 0{,}1 - 0{,}5 \cdot m_0$

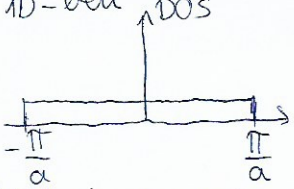
$m_v^* = (-1) - (-2) \cdot m_c$

$F = \hbar \dot{k}$

Állapotsűrűség

- DOS: 1D-ben $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$ sűrűség a k állapotok között
- állapotok sűrűsége $D(k) = \frac{L}{2\pi}$; 3D-ben $\frac{V}{(2\pi)^3}$ (később X2) egyenletes! (k térben)
- összes állapot száma:

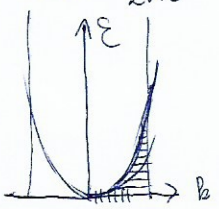
1D-ben DOS

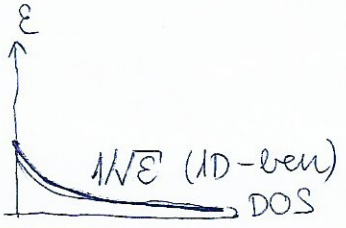


$\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{L}{2\pi} dk = N$ ✓

- áttérés energia térbe:

$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$





3D-ben: $D(k)\cdot 4\pi k^2 dk = D(\varepsilon)\,d\varepsilon$ ($4\pi k^2 \to$ Jacobi)

1D: $D(\varepsilon)\,d\varepsilon = D(k)\,dk$

itt $\varepsilon(\underline{k}) = \frac{\hbar^2 |\underline{k}|^2}{2m}$

$$\frac{V}{4\pi^3}\cdot 4\pi \cdot \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\cdot \frac{dk}{d\varepsilon} = D(\varepsilon)$$

↑ spin!

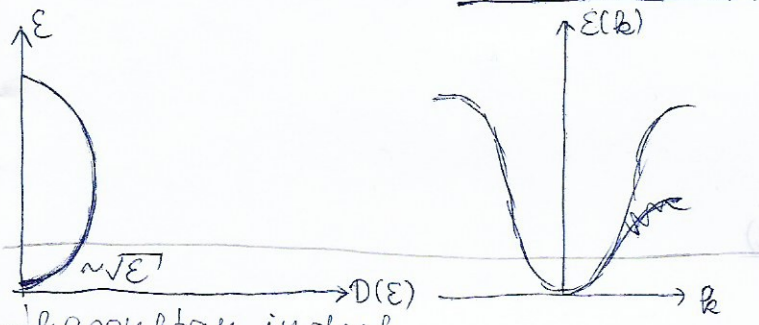
$$\hookrightarrow \left(\frac{d\varepsilon}{dk}\right)^{-1} = \left(\frac{\hbar^2 k}{m}\right)^{-1} = \left(\frac{\hbar^2}{m}\cdot\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}\right)^{-1}$$

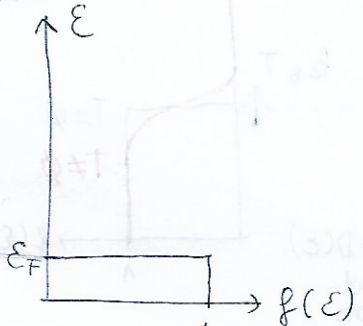
$$k = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}$$

$$\boxed{D(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2}\cdot\sqrt{\varepsilon}\cdot\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}}$$

3D nincs szingularitás → Jacobi-det. eltűnteti

Sávok betöltése





- hasonlóan indul és ér véget

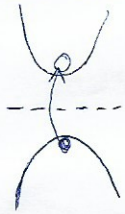
$$\varepsilon(\underline{k}) = \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m}$$

$$f(\varepsilon,\mu) = \frac{1}{1+e^{+\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}}$$

- ε_F: $T=\emptyset$-n jellemzi a rsz.-t ($\varepsilon_F = \mu$, ha $T=\emptyset$)
  elektronok betöltése

anyagra jellemző — statisztika

- Félvezető / Szigetelő ε_F-je?

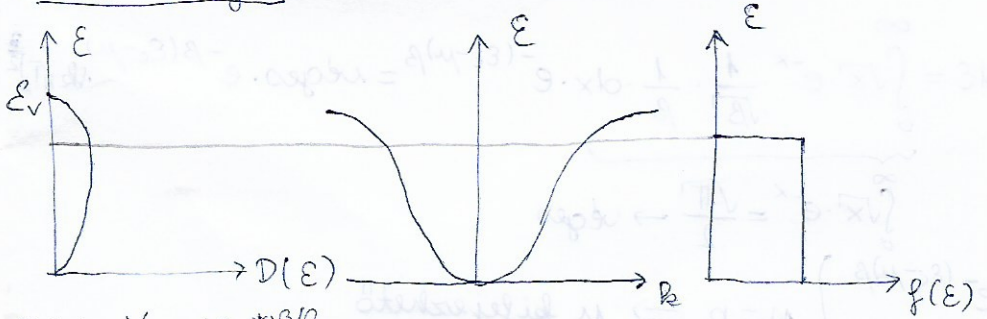


ε_F = a $T=\emptyset$ melletti kém. pot.

$\varepsilon_F = \mu$ $(T\to\emptyset)$

ε_F rosszul definiált ilyenkor

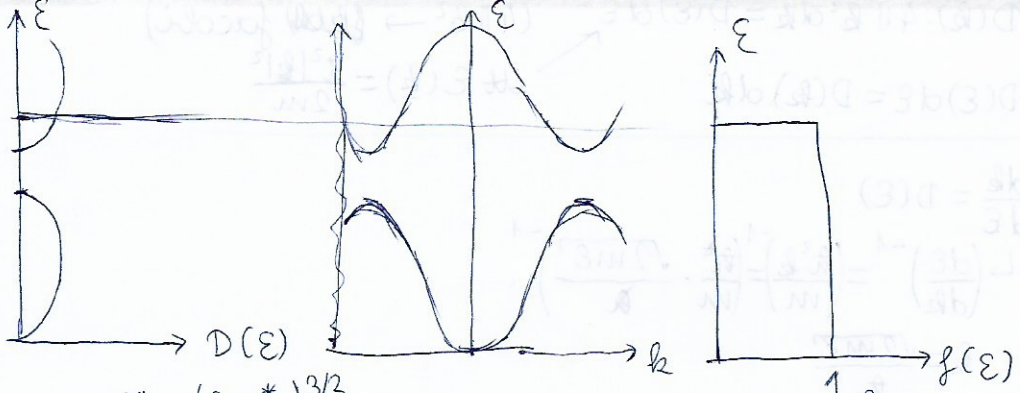
- Sáv teteje:



$$D(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2}\cdot\left(\frac{2m_V^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}(\varepsilon_V-\varepsilon)^{1/2}$$

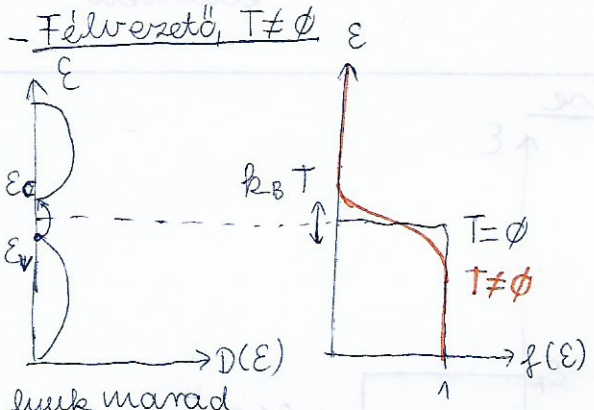
$$\varepsilon(\underline{k}) = \varepsilon_V - \frac{\hbar^2(\underline{G}-\underline{k})^2}{2m_V^*}$$

$$f(\varepsilon,\mu) = \frac{1}{1+e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}}$$



$$D(\varepsilon)=\frac{V}{(2\pi)^2}\left(\frac{2m_c^*}{2\pi^2}\right)^{3/2}\sqrt{\varepsilon-\varepsilon_c}\,;\quad \varepsilon(k)=\varepsilon_c+\frac{\hbar^2(\underline{k}-\underline{G})^2}{2m_c^*}$$

- <u>Félvezető, $T\neq\emptyset$</u>



lyuk marad v-ben, e⁻ lesz c-ben

- közelítés: $E_g \gg k_BT$ (pl. 300K → $k_BT=26\,meV$) $\quad \frac{1}{1+e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_BT}}}\approx e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_BT}}$
- elektronok száma: (kiszámítás)

$$n=\int_{\varepsilon_c}^{\infty} D_c(\varepsilon)f(\varepsilon)\,d\varepsilon$$

- lyukak száma:

$$p=\int_{0}^{\varepsilon_v} D_v(\varepsilon)(1-f(\varepsilon))\,d\varepsilon$$

$$\int_{\varepsilon_c}^{\infty}\sqrt{\varepsilon}\cdot e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_BT}}\,d\varepsilon$$

↑ változócsere: $\varepsilon=x^2 \rightarrow x\cdot e^{-x^2}$

$$\int_{\varepsilon_c}^{\infty}\sqrt{\varepsilon-\varepsilon_c}\cdot e^{-\frac{\varepsilon-\mu}{k_BT}}\,d\varepsilon=\int_{0}^{\infty}\sqrt{x}\cdot e^{-x}\cdot\frac{1}{\sqrt{\beta}}\cdot\frac{1}{\beta}\cdot dx\cdot e^{-(\varepsilon_c-\mu)\beta}=\text{véges}\cdot e^{-\beta(\varepsilon_c-\mu)}\cdot(k_BT)^{\frac{3}{2}}$$

$x=(\varepsilon-\varepsilon_c)\beta$, $\quad d\varepsilon=\frac{dx}{\beta}$

$\int_0^{\infty}\sqrt{x}\cdot e^{-x}=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$ → véges

$$n=2\cdot\left(\frac{m_c^{**}k_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot e^{-(\varepsilon_c-\mu)\beta}$$

$$p=2\cdot\left(\frac{m_v^*\cdot k_BT}{2\pi\cdot\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot e^{+(\varepsilon_v-\mu)\beta}$$

$n=p \Rightarrow \mu$ kifejezhető

$$\mu=\underbrace{\frac{1}{2}(\varepsilon_c+\varepsilon_v)}_{\text{sáv közepén}}+\frac{3}{4}k_BT\cdot\ln\left(\frac{m_v^*}{m_c^*}\right),\ \text{és}\ n=p=\sqrt{np}$$

$$\sqrt{np} = n = p = 2\cdot\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot (m_c^*\cdot m_p^*)^{3/4}\cdot e^{-\frac{E_g}{k_B T}} \Longrightarrow n \sim e^{-E_g/k_B T}$$

IX. 19.
3. hét

DOS $\quad \mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$; $\quad D(\mathcal{E}) = \frac{1}{2\pi^2}\cdot\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot\sqrt{\mathcal{E}}$

↳ dimenziók

$$\frac{V}{2\pi^2}\cdots \longrightarrow [D(\mathcal{E})] = m^3\left(\frac{J s^2}{m^2 J^{1/2} s^2}\right)^{3/2}\cdot\sqrt{J} = \frac{1}{J}$$

- töltéshordozók száma:

$$n = \int_0^{\mathcal{E}_F} D(\mathcal{E})\cdot d\mathcal{E} \Longrightarrow [n] = db$$

↑ Fermi-fv. $\frac{1}{e^{(\mathcal{E}-\mathcal{E}_F)\beta}+1}$

- töltéshordozó koncentráció: $n \sim 10^{21}\frac{1}{cm^3}$ pl. Na atom: $1e^-$/cella

$$\frac{n}{V} = \frac{1}{2\pi^2}\cdot\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot\frac{3}{2}\mathcal{E}_F^{3/2} \approx \frac{1}{10}\cdot\underbrace{\left(\frac{10^{-30}kg}{10^{-68}}\right)^{3/2}}_{10^{57}}\cdot\frac{3}{2}\cdot\underbrace{(10\text{-}19)^{3/2}}_{10^{-28}} \approx 10^{+28}\frac{1}{m^3} = 10^{22}\frac{1}{cm^3}$$

- Félvezetőkre (intrinsic):

$$n = p = 2\cdot\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}(m_e^* m_h^*)^{3/4}\cdot\exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

$$\Updownarrow \text{ u. ö.: fémekkel}$$

$$n_{fém} = \frac{1}{2\pi^2}\cdot\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot\frac{3}{2}\mathcal{E}_F^{3/2}$$

$$\frac{n_{félv}}{n_{fém}} \approx \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)\cdot\left(\frac{k_B T}{\mathcal{E}_F}\right)^{3/2}$$

(E_g: 0,5 eV/Å; $k_B T$: ≈26meV; $\mathcal{E}_F$: 1eV)

$$\frac{n_{félv}}{n_{fém}} \approx \underbrace{e^{-20}}_{10^{-10}}\cdot\frac{1}{500} \approx 10^{-13}$$

Tehát félvezetőkben $n \approx 10^9 - 10^{11}\frac{1}{cm^3}$

Mobilitás

Drude-modell: $ma = -eE - Kv$

$$\dot{v} = -\frac{eE}{m} - \frac{v}{\tau}$$

lyuk → kvázirészecske

$j = \sigma\cdot E$; $j = ne v_D$

	Elektron	Lyuk
Driftsebesség	$v_{D,e} = -\frac{eE\tau_e}{m_e^*}$	$v_{D,h} = \frac{eE\tau_h}{m_h^*}$
Vezetőképesség	$\sigma_e = \frac{ne^2\tau_e}{m_e^*}$	$\sigma_h = \frac{ne^2\cdot\tau_h}{m_h^*}$
Mobilitás $\frac{\lvert v_D\rvert}{E} = \mu$	~~$\frac{ne^2\tau_e m_e^*}{m_e^*}$~~ $\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e^*}$	~~$\frac{ne^2\tau_h}{m_h^*}$~~ $\mu_h = \frac{e\tau_h}{m_h^*}$

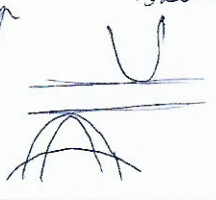
$$\boxed{\sigma = ne\mu_e + p\cdot e\mu_h}$$

$[\mu] = \frac{m^2}{Vs} = \frac{cm^2}{V\cdot S}$

- tipikus értékek: Si $\mu_e = 1000\frac{cm^2}{Vs}$ ← e^--fonon szórás

$\mu_h = 100$ ← közeli sávok lehetnek interband scattering

sávok közötti szórás



GaAs $\mu_e = 30\,000$

$\mu_h = 1000$

poli-Si (napelem): $\mu_e \approx 1$

organic semiconductors: $\mu_e \approx 10$

grafén: $\mu = 200\,000 - 2\,000\,000 \longrightarrow v_D = \mu E$

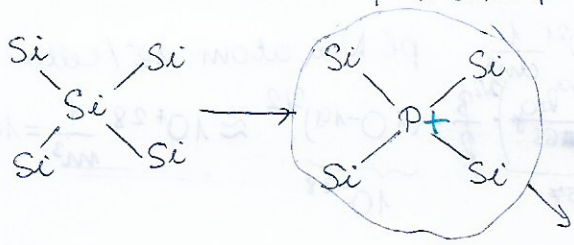
- Fizikai korlát: optikai fononemisszió

$\hbar\omega_{opt} = \frac{1}{2} m v_D^2$ (lelassul, rácsrezgéseket kezd el gerjeszteni)

Dópolás

- Félvezető rácsba heteroatomokat helyezünk

pl. B:Si, Al:Si	III. oszlop → lyukdópoló
P:Si, As:Si	V. oszlop → elektrondópoló



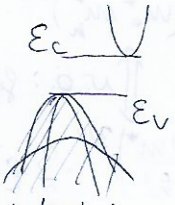
- anyag töltéssemleges
- foszfor: könnyen ionizálható

⟹ elektron delokalizálódhat (T-függés)

- Schrödinger-e., Si-ra:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right]\psi(\underline{r}) = E\cdot\psi(\underline{r})$$

↓ atomi potenciálok



gondolatban: $+1\,e^- \rightarrow$ vezetési sávba kerül!

pl. P esetén nem csak $+1\,e^-$ van, hanem $+1\,p^+$ is

⟹ H-atom-szerű potenciált adok hozzá → kötött állapot E_c-hez képest

- hidrogénatom-szerű állapotok: Bohr-modell

$$\left.\begin{aligned}\frac{mv^2}{r} &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r^2}\\ L &= mvr = n\cdot\hbar\end{aligned}\right\} \quad r = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mv^2}$$

$$mv \propto \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mv^2} = n\cdot\hbar \longrightarrow v = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{n\hbar} = \frac{c\cdot\alpha}{n}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}$$

finomszerk. áll., dimenziótlan

Ezzel $r_n = \frac{\alpha\hbar c\cdot n^2}{mc^2\alpha^2} = \frac{\hbar}{mc}\cdot\frac{n^2}{\alpha}$; $\quad a_B = \frac{\hbar}{mc}\cdot\frac{1}{\alpha}$

Bohr-sugár $a_B \approx 0{,}5$ Å

Alapod

Energia: $E_n = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{1}{2}\frac{mc^2\alpha^2}{n^2}$

mc^2 – elektron nyugalmi energiája

$mc^2 \approx -13{,}6$ eV

- Félvezetőben: $m \to m^*$; $\varepsilon_0 \to \varepsilon_0 \varepsilon_r$ ↳ 10-20

$a_B \longrightarrow a_B^*$

↓ elektron helyett kvázirészecskék

ε_r eredete: többi elektron hatása, árnyékolás

- dópoló atom Bohr-sugara:

$a_B^* = a_B \cdot \varepsilon_r \cdot \frac{m}{m^*}$ $> a_B$ mivel $\varepsilon_r = 10 \ldots 20$, $m^* = 0{,}1 - 0{,}5\, m$

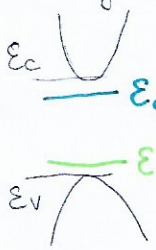
$E_1^* = E_1 \cdot \frac{1}{\varepsilon_r^2} \cdot \frac{m^*}{m}$ $\ll E_1$

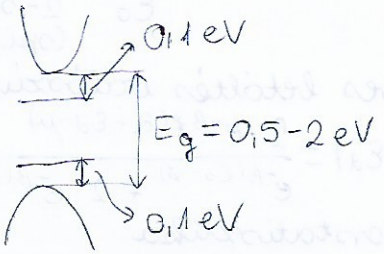
↓ (kötési energia)

→ tipikusan: $a_B^* = 30 - 100$ Å → kiterjedt hullámfv.

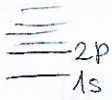
$E_1^* = 10 - 100$ meV

- Energiaszerkezet:

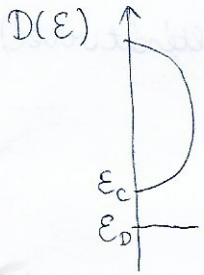




- Megjegyzés:



} Rydberg-sorozat



$d = \frac{1}{(n_D)^{1/3}}$ donorok távolsága

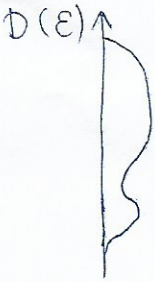
$a_B^* \ll d$



$a_B^* \approx d$ (összemérhető)

↓

donor sáv



degenerált donor sáv

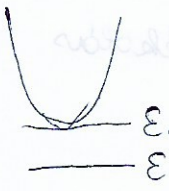
fém-szigetelő átmenet → hirtelen következik be

$a_B^* > d$

- pl. B:C bórral dópolt gyémánt (1%)

fém; $T_c = 10$ K-en szupravezető

Dópolás hatása a töltéshordozó-koncentrációra



- Kémiai potenciál
  - intrinsicre: $T \to \emptyset$; $\mu = \frac{1}{2}(\varepsilon_c + \varepsilon_v)$
  - itt: μ kiszámolása nehéz
  - intuíció: $\mu = \frac{1}{2}(\varepsilon_c + \varepsilon_d)$

$\langle n \rangle$: betöltés várható értéke

$$\langle n \rangle = \frac{\sum n \cdot e^{-\beta(\varepsilon_n - n\mu)}}{Z} \; ; \quad Z = \sum_n e^{-\beta(\varepsilon_n - n\mu)} \quad \forall \text{ állapotra}$$

- donor nívókra: $n = \emptyset, 1, \cancel{2}$ ↳ nem valósul meg (Coulomb-taszítás)
  - ε_0 2-szeresen megvalósulhat (spin degenerációt)

- egyszeres betöltés valószínűsége

$$f_d(\varepsilon_d) = \frac{2 \cdot e^{-\beta(\varepsilon_0 + \varepsilon_d - \mu)}}{e^{-\beta(\varepsilon_0 - \emptyset)} + 2 \cdot e^{-\beta(\varepsilon_0 + \varepsilon_d - \mu)}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{+\beta(\varepsilon_d - \mu)}}$$

f_d: donorstatisztika

ε_0: alapállapot; $\emptyset$-szoros betöltés teljes energiája

⇕ n. ö. Fermi-fv.

$$\frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_d - \mu)}}$$

- Ionizáció valószínűsége: ~~$1 - f_d(\varepsilon_d)$ (töltés adtál el)~~ (töltésátvitel)

$$1 - f_d(\varepsilon_d) = \frac{1}{1 + 2\, e^{\beta(\mu - \varepsilon_d)}}$$

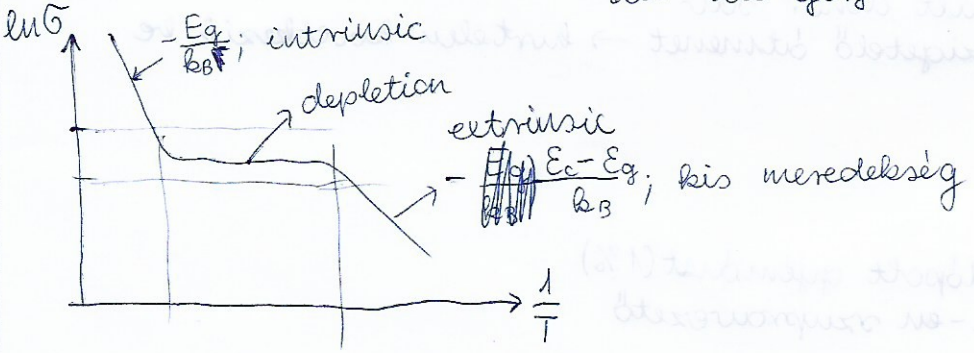
- Töltéshordozó-koncentráció vezetési sávban

$$n = n_d \frac{1}{1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_d)}} \; ; \quad \mu = \frac{1}{2}(\varepsilon_c + \varepsilon_d)$$

1.) $T \to \emptyset$-ban $n = \emptyset$

2.) $k_B T \approx \varepsilon_c - \varepsilon_d \Longrightarrow n \approx n_d$ §kiürülési tartomány (depletion)
minden donor ionizált → sok e^- a vezetési sávban

3.) $k_B T > \varepsilon_c - \varepsilon_d$; $k_B T \approx E_g \Longrightarrow$ intrinsic tartomány
sáv-sáv gerjesztés



alkalmazások 99,9%-a

Sávszerkezet számítások félvezetőkben

IX.26.
4. hét

Fontos: vezetési tulajdonságok (m^*, E_g)
optikai tulajdonságok (E_g)
intelligens tervezés (band gap engineering)

Sávszerkezet számítások:
- közelítés (üres rács modell)
- kvázi szabad elektron
- semi-empirikus módszerek (tight binding TB, pszeudopotenciál)
- ab-initio (első elvi), DFT
- kölcsönható modellek, sok elektron, GW

$H\Psi = E\Psi$

$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)$, ahol $U(r) = \sum H_{at} + H_{e\text{-}e}$

H_{at}: ion-elektron; $H_{e\text{-}e}$: elektron-elektron kcsh

- egyszerűsítés: ún. egyelektron Hamiltoni:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right]\Psi(r) = E\Psi(r)$$

$\Psi(r)$: egyelektron hullámfv.

- szilárd testekben $U(\underline{r}) = U(\underline{r} + \underline{R})$ $\underline{R} \in$ rácsvektor, $U(\underline{r})$ rácsperiodikus
- Bloch-tétel: $\Psi_k(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}}\, u_k(\underline{r})$, ahol $u_k(\underline{r}) = u_k(\underline{r} + \underline{R})$

$e^{i\underline{k}\underline{r}}$: síkhullám

$k \in$ Born-Kármán periodikus határfeltételek által megengedett érték

a ⟷

N db atom; $k = \frac{2\pi}{Na} \cdot n$ $\quad n = -\frac{N}{2} \dots \frac{N}{2}$

k: kristálymomentum ($\hbar k$)

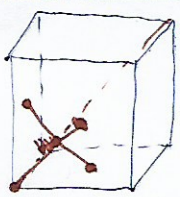
ha $k = \emptyset$, akkor $\Psi_{k=0}(r) = u_{k=0}(r)$ rácshelyeken állandó

ha $k =$ BZ határa (1D-ben $k = \frac{\pi}{a}$)

két rácshely között $+a$, $+2a$, stb.

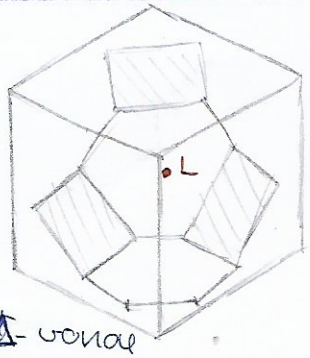
$e^{i\underline{k}\underline{r}} = \pm 1$ értékű ⟶ előjelet vált a hullámfv.

Szerkezet valós és reciprok rácstérben



egyéműntrdes

k-tér:

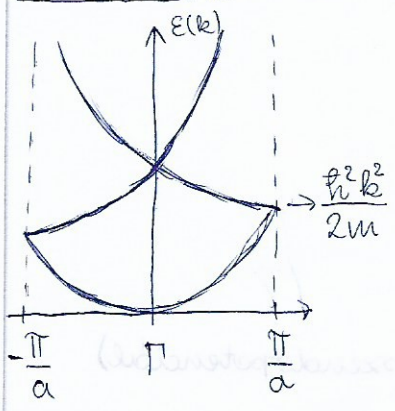


Γ: BZ közepe ($\emptyset, \emptyset, \emptyset$)
L: hatszög közepe
X: négyzet közepe
K: 2 hatszög közös él-felezője

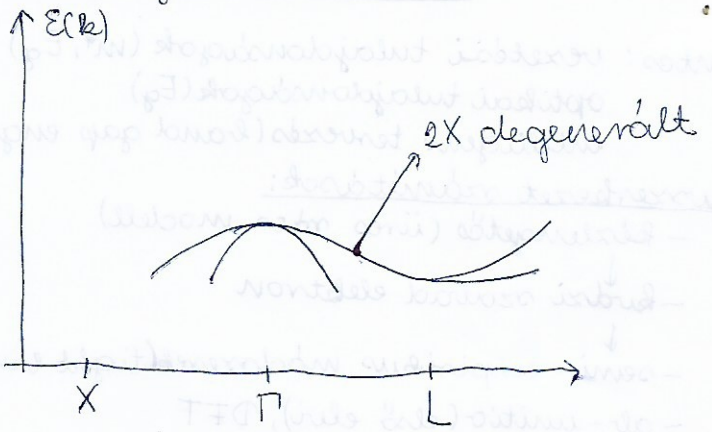
100 irány: Γ Δ X
111 irány: Γ Λ L
110 irány: Γ Σ K

Δ-vonal

Üres rács: (1D)

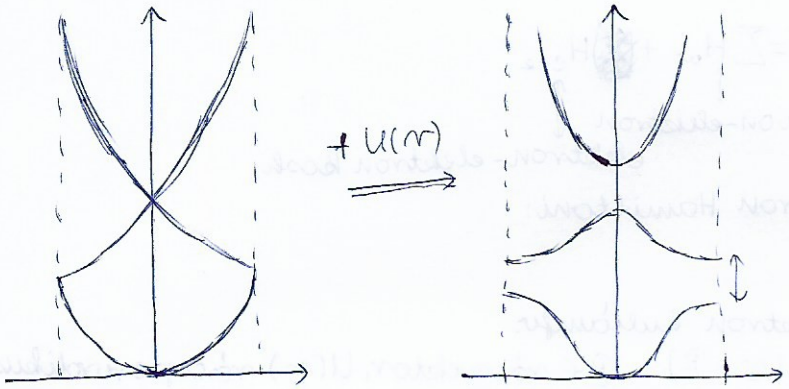


2 v. 3D-ben degenerált sávok



Kvázi szabad elektron

(gyenge periodikus potenciál)



$E_k = E_0 + \langle k_1 r | U | k_1 r \rangle$

↓ perturbáció

- degenerált pontokban $\begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix}$ → sajátértékprobléma
  → mindig használható, folyamatosan diagonizálódik

$U \xrightarrow{FT} U(q)$

felhasadás: $2U(G) \rightarrow G = \frac{2\pi}{a}$

Szoros kötésű közelítés (tight-binding, TB)

- 1D, 1 atomos rács; $H\psi = E\psi$; $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)$

$U(r) = \sum_R V_{atom}(r-R)$, $R = n\cdot a$

$H_{at}\varphi_a = \varepsilon_a \varphi_a$ (ismert atomi megoldások)

- Ansatz: $\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{ikna}\varphi_a(r-na)$, Bloch-tételt teljesíti

$$\varphi_k(r) = \sum_n e^{ikna}|n\rangle,$$

- eredetibe beírva:

$$H\psi = \sum_n e^{ikna}\cdot\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{n'} V_{atomi}(r-n'a)\right]|n\rangle = E\sum_n e^{ikna}|n\rangle$$

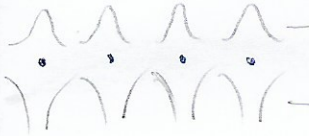
- balról $\langle n''|$; tudva $\langle n''|n\rangle = \delta_{n''n}$

$$\sum_{n'} V_{atomi}(r-n'a) = V_{atomi}(r-na) + \sum_{n'\neq n} V(r-n'a)$$

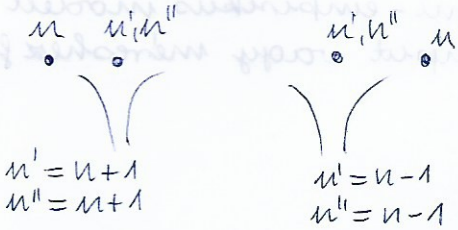
$$\sum_n e^{ikna}\left[\varepsilon_a\delta_{n''n} + \sum_{n'\neq n}\langle n''|V_{at}(r-na)|n\rangle\right] = E\sum_n e^{ikna}\delta_{n''n}$$

$\to$ $E(k) = \varepsilon_a + \sum_{n,n'\neq n} e^{ik(n-n'')a}\langle n''|V_{at}(r-n'a)|n\rangle$

[$e^{ikn''a}$-val egyszerűsítve



- közelítés (NNTB, nearest neighbour) első szomszéd



- legyen $\underbrace{\langle n-1|V_{at}|n\rangle}_{\text{negatív}} = -|t| = \langle n+1|V_{at}|n\rangle$

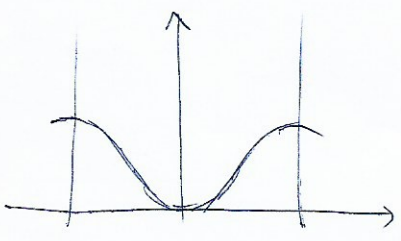
(V(r): Coulomb)

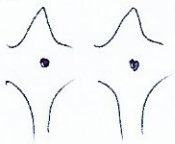
- Ezzel $E(k) = \varepsilon_a + (e^{ika} + e^{-ika})\cdot(-2|t|)$ t: átfedési integrál

- Végeredmény:

$|t| = -\int\varphi^*_{at}(r-a)\cdot V(r-a)\varphi_{at}(r)\,d^3r$

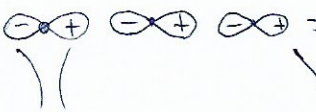
$E(k) = \varepsilon_a - 2|t|\cdot\cos(ka)$



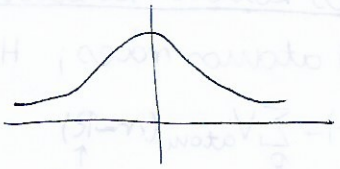


$\Longleftrightarrow$ SSC modell (átfedés)

Pat: p típusú pálya



$\Longrightarrow E(k) = \varepsilon_a + 2t \cdot \cos(ka)$



↘ irodalomban: $pp\sigma$ ↓ σ-típusú kötés

- másik:



$\Longrightarrow pp\pi$ irodalomban

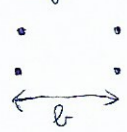
- 1D + második szomszéd kcsh.

$$\sum_{n \neq n'} e^{ika(n-n')} \langle n'' | V_{at}(r - n'a) | n \rangle$$

→ $\cos(2k \cdot a)$ frekvenciájú tag is megjelenik

$E(k) = \varepsilon_a - 2|t_1| \cdot \cos(ka) - 2|t_2| \cdot \cos(2ka)$

- 2D tight binding: fázisban vektorok



$E(k) = \varepsilon_a - 2|t_a| \cdot \cos(k_x a) - 2|t_b| \cdot \cos(k_y b)$

→ anizotróp sávszerkezet

- effektív tömeg:

$$(m^*)^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}$$

↳ $\varepsilon_a - 2|t| \cdot \cos(ka)$ ($k = \emptyset$ kiírül) $\rightarrow -2|t| \left(1 - \frac{k^2 a^2}{2}\right)$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{2ta^2}{\hbar^2} \qquad \left(\frac{Jm^2}{J^2 s^2} = \frac{s^2 m^2}{kg m^2 s^2} = \frac{1}{kg}\right)$$

szemi-empirikus modell

t: input vagy méréshez fittelhető

$k \cdot p$ modell

- jó szemiempirikus modell a sávok extrémumainál (félvezetők!)
  pl. - transzport
  - kisenergiás optika

$H\Psi = E\Psi$ $\qquad \boxed{\Psi_{nk}(r) = e^{ikr}\, u_{nk}(r)}$

n: pálya (v. sáv) index

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$

$$\Delta\Psi_{nk}(r) = (ik)^2 e^{ikr} u_{nk}(r) + 2(ik)\cdot\nabla u_{nk}(r) e^{ikr} + e^{ikr}\cdot\Delta u_{nk}(r)$$

$$\left[\frac{\hbar^2k^2}{2m} - \frac{i\hbar^2 k}{m}\cdot\nabla - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right] u_{nk}(r) = E u_{nk}(r)$$

$-i\hbar\nabla = p$ kanonikus impulzus operátora

v.ö. $\hbar k$: kristályimpulzus

ezzel: $$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2(k\cdot p)}{m} + \frac{\hbar^2k^2}{2m} + V\right] u_{nk}(r) = E_{nk}\, u_{nk}(r)$$

$k = 0$-ra: $\left[\frac{p^2}{2m} + V\right]\cdot u_{n0} = E_{n0}\, u_{n0}$ sáv extrémumra

↓ csak 1 elemi cella

- ezen a bázison $\frac{\hbar^2k^2}{2m} + \frac{\hbar k\cdot p}{m}$ perturbáció

$$u_{nk}(r) = \sum_{n'} c_{n'}(k)\cdot u_{n0}(r)$$

↑ Ansatz ↖ eh.

elsőrendű perturbáció

- általában: $H|n\rangle = \mathcal{E}|n\rangle$

$$(H+V)\Psi = E\Psi \;\rightarrow\; \Psi = \sum_n c_n |n\rangle$$

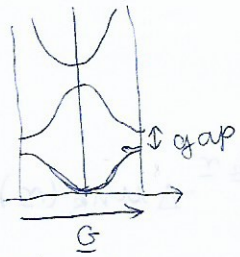
$$\Psi_n = |n\rangle + \sum_{n'\neq n} \frac{\langle n'|V|n\rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{n'}}|n'\rangle$$

$$E_n = \mathcal{E}_n + \langle n|V|n\rangle + \sum_{n'\neq n} \frac{|\langle n'|V|n\rangle|}{\mathcal{E}_{n'} - \mathcal{E}_n}$$

X.10.
6. hét

Ismétlés

- üres rács $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- tight binding $\mathcal{E}(k) = \mathcal{E}_0 - 2|t| \cdot \cos(ka)$
- gyenge periodikus potenciál:
  gap = $U(G)$ potenciál Fourier-komponensei



- kvázidegenerált perturbációszámítás (tds)

$$\begin{pmatrix} \mathcal{E}_1 & U(k-G) \\ U^* & \mathcal{E}_2 \end{pmatrix}$$

analitikusan gap-től távolabbi pontok is kiszámíthatók, degenerált-ként kezelve

HF:
$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & U \\ U & \frac{\hbar^2\left(\frac{2\pi}{a} - k\right)^2}{2m} \end{pmatrix} \longrightarrow \mathcal{E}_1(k'),\ \mathcal{E}_2(k')$$

- k·p modell: $H\psi = E\psi$

$$\psi_{nk} = e^{ikx} \cdot u_{nk}(x)$$

u_{nk}: rácsperiodikus

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$$

V: rácspotenciál (elektron-elektron kcsh, elektron-mag kcsh visszahatása elhanyagolva)

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar k \cdot p}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V\right] u_{nk}(x) = E_{nk} u_{nk}(x)$$

- bevezetve: $-i\hbar\nabla = p$

$k = 0$ körül perturbációszámítás

itt: $\left[\frac{p^2}{2m} + V\right] u_{n0}(x) = E_{n0} u_{n0}$

sok szélén megoldottuk (szemiempirikus módszer) ⟶ kísérleti eredményekre visszavezetve

Ezen a bázison $\frac{\hbar k p}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ perturbáció.

Eredmény általában: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

$(H + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$E_1 = E_n + \langle n|V|n\rangle$
$\psi_m = |n\rangle$
} elsőrendben

$E_2 = E_n + \langle n|V|n\rangle + \sum_{n'\neq n} \frac{|\langle n'|V|n\rangle|^2}{E_n - E_{n'}}$
$\psi_n = |n\rangle + \sum_{n'\neq n} \frac{\langle n'|V|n\rangle \cdot |n\rangle}{E_n - E_{n'}}$
} másodrendben

- Feltevés: $E_{n\sigma}$: szélsőértékek → nem lehet ~~[illegible]~~ k-ban lineáris tag

$u_{nk}(\underline{r}) = \sum_n C_n(\underline{k}) \cdot u_{n\sigma}(\underline{r})$


→ hullámfüggvények lineárkombinációjával dolgozhatok

$\Longrightarrow$ Eredmény:

$$u_{nk} = u_{n0} + \frac{\hbar}{m} \sum_{n'\neq n} \frac{\langle u_{n'\sigma}|\underline{k}\cdot\underline{p}|u_{n'0}\rangle}{E_{n'0} - E_{n'0}} |u_{n'0}\rangle$$



- mert $\left\langle u_{n'\sigma}\left|\frac{\hbar^2\underline{k}^2}{2m}\right|u_{n\sigma}\right\rangle = \emptyset$ ~~[illegible]~~
↖ csak szorzás

- Energia: $E_{nk} = E_{n0} + \frac{\hbar^2\underline{k}^2}{2m} + \left[\sum_{n'\neq n} \frac{|\langle u_{n\sigma}|\underline{k}\cdot\underline{p}|u_{n'\sigma}\rangle|^2}{E_{n\sigma} - E_{n'\sigma}}\right] \cdot \frac{\hbar^2}{m^2}$

~~[illegible]~~

- Effektív tömeg közelítés:

$E_{nk} = E_{n0} + \frac{\hbar^2\underline{k}^2}{2m^*}$, innen $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{1}{m^2\underline{k}^2} \sum_{n'\neq n} \frac{|\langle u_{n\sigma}|\underline{k}\cdot\underline{p}|u_{n'\sigma}\rangle|^2}{E_{n\sigma} - E_{n'\sigma}}$

- dominánsnak tekintjük: $E_{n\sigma} - E_{n'\sigma} = E_g$
és $|\langle u_{c,\sigma}|\underline{k}\cdot\underline{p}|u_{v,\sigma}\rangle|^2$ ~~[illegible]~~ $\frac{1}{\underline{k}^2} = p^2$
(c: conduction, v: valencia)

$\Longrightarrow m^* = \frac{1}{m} + \frac{2p^2}{m^2 E_g}$

$\frac{2p^2}{m} \approx 20$ eV a legtöbb IV, III–V, stb. félvezetőre

- Az így kapott m^* néhány százalékon belül egyezik a kísérleti értékkel. (Aschroft - Mermin)
Ezért szemiempirikus, mert $m^* = m^*(P, E_g)$

EFA: Envelope function approximation

burkoló

- Miért? → Külső terek (elektromos, mágneses, optikai, dipólkáposzélítés, heterószerkezet, band gap engineering)

$|p|n|p|n|$

~~$Ga_xAl_{1-x}As$~~ $Ga_{1-x}Al_xAs$

~~GaAs~~ GaAs

- Mindezek hatása: térben lassan változó perturbáció

$H_0\Psi(\underline{r}) = E_c\Psi(\underline{r})$

↳ E_{nk}, külső tér nélküli félvezető megoldása

$\Psi_{nk}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}}\, u_{n\underline{k}}(\underline{r})$

- Perturbált probléma: $H = H_0 + V(\underline{r})$

térben lassan változik

$H\Phi = E\Phi$ ⟹ Fourier-komponense δ

- Ansatz: (eredeti bázis minden függvénye)

$$\Phi(\underline{r}) = \sum_{n,\underline{k}} F_n(\underline{k})\cdot\Psi_{n\underline{k}}(\underline{r})$$

↑ burkolófüggvény

- Behelyettesítés:

$$\sum_{n,\underline{k}} \Psi_{n\underline{k}}(\underline{r})\left[E_{n\underline{k}}(\underline{r}) - E + V(\underline{r})\right]\cdot F_n(\underline{k}) = \emptyset \quad / \Psi_{n'\underline{k}'}(\underline{r}) + \int$$

→ lin. egyenletrendszer

~~Fourier~~

$$\sum_{n,\underline{k}}\left[(E_{n\underline{k}} - E)\,\delta_{\underline{k}\underline{k}',nn'} + \langle\Psi_{n'\underline{k}'}|V(\underline{r})|\Psi_{n\underline{k}}\rangle\right] F_n(\underline{k}) = \emptyset$$

$V_{n'\underline{k}'n\underline{k}}$

$$V_{n'\underline{k}'n\underline{k}} = \int u^*_{n'\underline{k}'}(\underline{r})\, u_{n\underline{k}}(\underline{r})\cdot e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\underline{r}}\, V(\underline{r})\, d^3r$$

- közelítés: szeparálható integrál (EFA)

$u_{n'k'} \longrightarrow$ lokalizált, $V(\underline{r}) \longrightarrow$ kiterjedt függvény

$$V_{n'\underline{k}'n\underline{k}} = \underbrace{\int u^*_{n'\underline{k}'}(\underline{r})\, u_{n\underline{k}}(\underline{r})\, d^3r}_{\delta_{nn'}} \cdot \underbrace{\int e^{i(\underline{k}-\underline{k}')\underline{r}}\, V(\underline{r})\, d^3r}_{V(\underline{k}-\underline{k}') \leftarrow \text{Fourier-tr.}}$$

- Visszaírva:

$$\sum_{\underline{k}}\left[(E_{n'}(\underline{k}) - E)\,\delta_{\underline{k}\underline{k}'} + V(\underline{k}-\underline{k}')\right] F_{n'}(\underline{k}) = \emptyset \longrightarrow \sim \text{Schrödinger-egy. sajátértékprobléma}$$

↓ rendszerre jellemző rész

$F_{n'}(\underline{k})$-ra

(visszavezetve a külső tér hatására)

→ Eredeti problémából:

$$E_n(\underline{k}) = E_c + \frac{\hbar^2\underline{k}^2}{2m^*}$$

↓ vez. sáv alja

$n' \equiv C$: vezetési sáv

→ így $\frac{\hbar^2 k'^2}{2m_c^*} F_c(k') + \sum_k U(k-k') F_c(k) = (E - E_c) \cdot F_c(k)$ (Fourier tér) — egy homogén lin. egy. rsz. $F_c(k)$-ra

- Áll.: $k \longrightarrow -i\nabla$ cserével eljutunk egy operátoregyenlethez kapunk

$$\left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_c^*} + E_c + V(r) \right] F_c(r) = E F_c(r) \qquad \text{(valós tér)}$$

deriválás → térbeli Fourier transzformációban ik szorzót hozzon be

$$\int f(r) e^{ikr} d^3r = f(k)$$

$$\int \frac{\partial f}{\partial r} e^{ikr} d^3r = ikf(k)$$

⟹ valós térben Schrödinger-egyenlet $F_c(r)$-re, ha $V(r)$ ismert.
Ez is szemiempirikus, mert E_c és m^* benne van

- Ha $F_c(r)$ ismert, (pl. szennyező atom!)
- pl. töltéssűrűség:

$$n(r) = \sum_i |\Psi(r)|^2 f(E_i) =$$

↑ Fermi-függvény adott szóra

$m_i^*, E_{ci}, \varepsilon_r$-rel
$V(r) = \frac{-1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r} \cdot \frac{e^2}{r}$

$$= n_{c\phi} \sum_i |F_i(r)|^2 \cdot f(E_i)$$

$n_{c\phi}$: eredeti töltéshordozók koncentrációja

→ ad egy módosítást

→ pl. szennyezőre: $V(r) \to$ Coulomb, akkor egy oda lokalizált $F(r)$-t kapunk

X. 17.
7. hét

Transzportfolyamatok félvezetőkben

j (áram), hődáram), j_q; mágneses ellenállás, frekvenciafüggő vezetés, Seebeck, Peltier

Méretskálák

- **töltéshordozó diffúziós hossz**
  - töltéshordozó keltése és rekombinációja között diffúzióval megtett út
  - ~~transz. v. cm~~ 10 μm — mm v. cm (napelemek) ←

$\vec{j} = -D \cdot \nabla n$ Fick-törvény $\quad [j] = \frac{1}{m^2 \cdot s}$; $[D] = \frac{m^2}{s}$; $[n] = \frac{1}{m^3}$

$\delta_{\text{töltés}} = \sqrt{Dt}$, t: rekombinációs idő

- **spindiffúzió**
  - τ_s: spinélettartam
  - $\delta_s = \sqrt{D\tau_s}$
  - 1–100 μm
- **fáziskoherencia-hossz**
  - 100 nm – 1 μm
  - $e^{i\vec{k}\vec{r}}$



~ síkhullám terjedés
– szórócentrum → véletlen fázisok felszedése

~~gyenge lokalizáció~~

- **gyenge lokalizáció; ballisztikus transzport** (nincs ellenállása, de nem szupravezető)
  - eszköz mérete: < 100 nm

→ optikai analógia: optikai szál

- **Momentumrelaxációs idő**
  - 1 nm – 100 nm; $l = v_F \tau$

méret ↑

Ohm-tv. (diffúzió + drift); ↳ spontán; ↱ külső tér hatása; szórásos keresztül lokális egyensúly

100 nm – 1 μm

Landau-Büttiker formalizmus

Leírás („Ohm-törvény")

Szabad elektronok (Sommerfeld)	Bloch-elektronok
kvantumszám: $k \in$ per. hat. felt.	$k \in$ per hat. felt., n: sávindex
$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	$\mathcal{E}_n(\underline{k}) = \mathcal{E}_n(\underline{k}+\underline{G})$; $G \in$ rec. rács vektorok (redukált zónaképp)
$\underline{v} = \frac{\hbar \underline{k}}{m} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \underline{k}}$	$\underline{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}_n(\underline{k})}{\partial \underline{k}}$
$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\underline{k}\underline{r}}$	$\psi_{n\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}} u_{n\underline{k}}(\underline{r})$, ahol $u_{n\underline{k}}(\underline{r}) = u_{n\underline{k}}(\underline{r}+\underline{R})$
$m^* = m$	$(\underline{\underline{m^*}})^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\cdot\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial \underline{k}^2}$ (grafén: $m^* = \infty$)

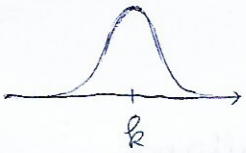
Kvaziklasszikus (szemiklasszikus) dinamika

- az elektron hullámfüggvénye kiterjedt, mégis részecskeként kezelhető (erős állítás, A–M bizonyítja)
- mozgásegyenlete: $\underline{v} = \frac{\hbar \underline{k}}{m}$; $\hbar \dot{\underline{k}} = \underline{F} = -e(\underline{E} + \underline{v} \times \underline{B})$
- motiváció:
  1. korrespondencia-elv
  2. hullámcsomag

$$\psi_n(\underline{r}, t) = \sum_{k'} g(k') \underbrace{\psi_{nk'}(\underline{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_n(\underline{k}')t}}_{\text{Bloch-függvények} \rightarrow H\psi = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi},$$

tetszőleges lineáris kombináció

ahol $g(k') \approx 0$, ha $|k' - k| > \Delta k$



k-térben lokalizált hullámcsomag

- hullámcsomag tulajdonságai:
  - időben szétfolyik (nem sajátállapot)

$$\ldots \sum g(k') \ldots e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(k')t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}(k)t} \cdot \sum e^{-\frac{i}{\hbar}[\mathcal{E}(k') - \mathcal{E}(k)]t}$$

időben lineárisan szétfolyik

  - térbeli lokalizáció:

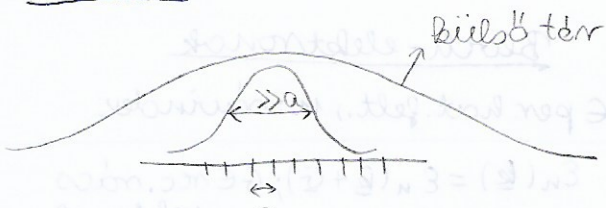
$\Delta r \cdot \Delta p \approx \hbar \longrightarrow \Delta r \cdot \hbar \Delta k \approx \hbar$ (határozatlansági rel.)

$\Delta r \Delta k \approx 1$

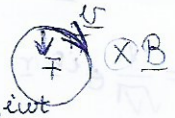
$\Delta k \ll G \approx \frac{1}{a}$

$\Rightarrow$ $\boxed{\Delta r \gg a}$ valós térben az elektron nem lesz egy rácspontra jól lokalizálva

- Méretek:



- Feltevések: eEa, $\hbar\omega_c \ll \frac{E_G^2}{E_F}$ ← nincs sáv-sáv átmenet
  - ↓ felvett energia
  - $\hbar\omega_c$: ciklotron-frekvencia
    $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ ← $m^*\omega^2 r = \pm e\omega r B$



  - ha változó frekvenciájú tér van, $E_0 e^{i\omega t}$
    $\hbar\omega \ll E_g$
  - $\lambda \gg a$ $\left(\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi}{\omega}\right)$

- Megjegyzések:
  - Drude-modell: ionokkal ütközés → ellenállás
  - Bloch: ha csak ionok vannak tökéletes periodikus rácsban, akkor $\sigma = \infty$
    $\underline{v}_{\underline{k}} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \underline{k}}$ → állandó sebesség
  - kristálymomentum ≠ momentum ($\underline{p}$)
    $\hbar\underline{k} = \mp_{külső}$ csak külső erőket tartalmaz
    szabad elektronokra: $\boxed{\underline{k} = \frac{\underline{p}}{\hbar}}$ → CSAK SZABAD ELEKTRON!

- Impulzusmegmaradás:
  - transzlációval szembeni invariancia
  - folytonos térbeli eltolás következménye, $\dot{p} = 0$
  - kristályban: rácstranszláció van!
  - helyesen: $\underline{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$ momentum op.

$$\psi_{n\underline{k}}(\underline{r}) = e^{i\underline{k}\underline{r}}\, u_{n\underline{k}}(\underline{r})$$

$$\underline{p}\,\psi_{n\underline{k}}(\underline{r}) = \hbar\underline{k}\,\psi_{n\underline{k}}(\underline{r}) + \frac{\hbar}{i} e^{ikr}\,\nabla u_{n\underline{k}}(\underline{r})$$

$p \neq \hbar k$ $\quad \psi_{n\underline{k}}(\underline{r})$: nem impulzus sajátállapot

Lezárt sáv járuléka a vezetéshez

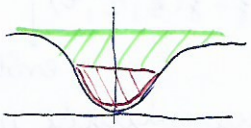
$$j = -e \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{k}} = \emptyset$$

lezárt sáv

erős, itt nem bizonyított állítás
(lásd A–M, szemléltetés: $\frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{k}}$ ptlan fv.)

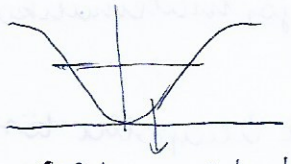
A lyukak koncepciója

$$\emptyset = \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \underline{v}(\underline{k}) = \int_{\text{betöltött mindaddig}} \frac{d^3k}{4\pi^3} \underline{v}(\underline{k}) + \int_{\text{betöltött feletti állapotok}} \frac{d^3k}{4\pi^3} \underline{v}(\underline{k})$$

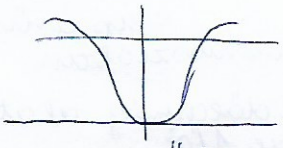


$$-e \int_{\text{alsó állapotok}} \frac{d^3k}{4\pi^3} \underline{v}(\underline{k}) = +e \int_{\text{felső állapotok}} \frac{d^3k}{4\pi^3} \underline{v}(\underline{k})$$

- pl.:



elektron leírás jó
$m^* > \emptyset$



egyszerűbb a lyuk leírás
$m^* < \emptyset$

Boltzmann-egyenlet

$f(\underline{k}, \underline{r}, t)$ eloszlásfüggvénnyel írunk le mindent

$f^\circ(\underline{k}) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(\underline{k})-\mu}{k_B T}} + 1}$; hely- és időfüggetlen

- mérhető fizikai mennyiségek:

$$j = -e \int \underline{v}(\underline{k}) \cdot P(\underline{k}) f(\underline{k}) \, d^3k$$

$$\frac{1}{4\pi^3} = \frac{2}{(2\pi)^3}$$

- A Boltzmann-egyenlet

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\underline{k}} \nabla_{\underline{k}} f + \dot{\underline{r}} \nabla f - \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{\text{collision}} = \emptyset$$

ütközési tag

heurisztikusan bevezetjük

$f = f(\varepsilon(\underline{k}), \underline{k}(t))$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial f}{\partial \underline{k}}}_{\nabla_{\underline{k}} f} \cdot \underbrace{\frac{\partial \underline{k}}{\partial t}}_{\dot{\underline{k}}}$$

1. tag, $\dot{\underline{k}} \nabla_{\underline{k}} f \rightarrow$ erő tag, $\hbar \dot{\underline{k}} = \mp \underline{F}_{\text{külső}}$

2. tag, $\dot{\underline{r}} \nabla f \rightarrow$ diffúziós tag (jön később, most $\emptyset$)

$f(\underline{k}, t) = f^\circ(\underline{k}) + g(\underline{k}, t)$ egyensúlytól való eltérés

közelítés:

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{\text{coll}} = \frac{g}{\tau}$$

relaxációs idő közelítés

erős állítás

X. 31.
9. hét

Ismétlés

- Boltzmann-egyenlet:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\underline{k}}\,\nabla_{\underline{k}} f + \dot{\underline{r}}\,\nabla f - \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = 0$$

$f = f(\underline{k}, \underline{r}, t)$ → erőtag; diffúziós tag (most 0); → ütközési tag

- Egyensúlytól való eltérést tekintjük:

$$f(\underline{k}, t) = f^0(\underline{k}) + g(\underline{k}, t)$$

Innen: $\frac{\partial g}{\partial t} + \dot{\underline{k}}\,\nabla_{\underline{k}} f = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = -\frac{g}{\tau}$

↓ relaxációs idő közelítés (dimenzionálisan jó, matematikai egyszerűsítés)

- de: $\frac{1}{\tau}$ mérhető, pl. fotoemisszióban
- adott $\underline{k}$ állapotból időegység alatti másik állapotba történő kiszórás valószínűsége $1/\tau$
- τ: egyezik a Drude-modellből kapott τ-val
- Általában: $\tau = \tau(\underline{k})$

- Miért relaxációs idő közelítés?

erő tag $= 0$ $\quad \frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{g}{\tau} \longrightarrow g(t) = g_0(t=0)\, e^{-t/\tau}$

$\Longrightarrow$ τ relaxációs idővel egyensúlyi $f^0(\underline{k})$-ba visszatér

- Stacionárius állapot:

$$\boxed{\dot{\underline{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \underline{k}} = -\frac{g}{\tau}}$$

felírva $\nabla_{\underline{k}} f = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$

→ mert pl. $f^0 = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1}$

- korábban volt: $\hbar \dot{\underline{k}} = \underline{F}_{külső} = -e\underline{E}$ (csak elektromos tér)

és $\frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{k}} = \hbar \underline{v}(\underline{k})$

$$\dot{\underline{k}} \cdot \nabla_{\underline{k}} f = -eE\underline{v}(\underline{k}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\frac{g}{\tau}$$

innen: $g = eE\,v(k) \cdot \tau \cdot \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$

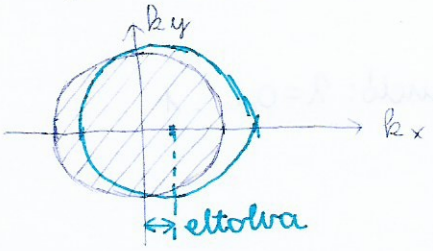
innen $\boxed{f = f^0 + eE\,v(\underline{k})\,\tau \cdot \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}}$

- tekintsük úgy, hogy $f \approx f^0\left(\underline{k} + \frac{e\underline{E}\tau}{\hbar}\right)$ (közelítés; ha kicsi) $\overset{\text{(sorfejtés)}}{\approx} f^0(\underline{k}) + \frac{e\underline{E}\tau}{\hbar}\underline{v}(\underline{k})\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{\underline{k}}}$

→ új f: eltolva $\underline{k}$-térben

~~Pl. $\underline{E} = (E_x, 0, 0)$~~

- Pl. $\underline{E} = (E_x, 0, 0)$



→ eltolva $\underline{k}_d$-vel: $\underline{k}_d = -\frac{e\tau \underline{E}}{\hbar}$ (d - drift)

$v_d = \frac{\hbar k_d}{m^*} = -\frac{eE\tau}{m^*}$ (egyezik a Drude-modellel)

$|v_d| = \mu E \longrightarrow \mu = \frac{e\tau}{m^*}$

- teljesen hasonlóan: $\left.\begin{aligned} j &= ne v_d \\ j &= \sigma E \end{aligned}\right\} \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$

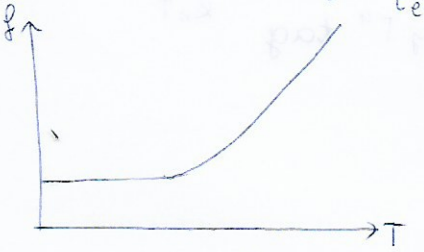
- Megjegyzés:

Drude		Bloch (Boltzmann)	
- sok, lassú elektron ↳ összes e^-	←——→	- kevés, gyors elektron ↓ csak a Fermi-felület közelében, de $v = v_F$	koncepcionális különbség
$v = v_d$		$j = e v_f \cdot \frac{n v_d}{v_f}$ → számuk	
$j = ne v_d$			

- τ oka: - szennyezők, fononok, elektron-elektron kölcsönhatás
  ↓
  szándékos (pl. adalékolás)

- Matthiessen-szabály: hogyan adódik össze a különböző folyamatok járuléka? (sorosan / párhuzamosan?)

- elektronoknál: $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{e\text{-}e}} + \frac{1}{\tau_{e\text{-}f}} + \frac{1}{\tau_{szennyezők}}$

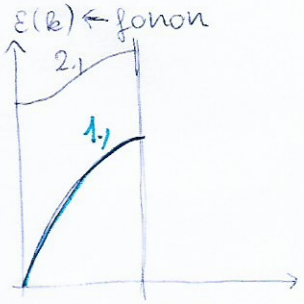


szennyezők → konstans $\left(\frac{1}{\tau_{szenny.}} = const\right)$

$\frac{1}{\tau_{e\text{-}e}} \sim (k_B T)^2$ (pl. heavy-fermion)

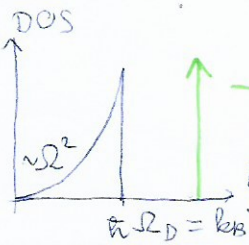
→ fononok: ~~$T < T_D$~~ (T_D: Debye - hőmérséklet)

$$\frac{1}{\tau_{e\text{-}f}} = \begin{cases} \sim T^5; & T < T_D \\ \sim T; & T \gg T_D \end{cases}$$



1.) $\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$; (lineárisan indul) akusztikus fononok

2.) optikai fononok

- Debye: 

- közelítő állapotsűrűség → Debye-Einstein modell (→ δ → optikai módus)

$E\Omega$ (fonon energiája)

- magashőmérsékletű limitben:

$$\frac{\hbar}{\tau} = 2\pi \cdot k_B T \cdot \lambda$$

↓ szórási ráta

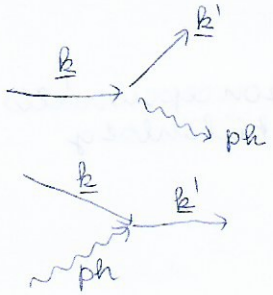
↑ elektron – fonon csatolási állandó: $\lambda = 0{,}1 \dots 1$

$$\lambda = 2 \cdot \int \frac{d\Omega}{\Omega} \underbrace{\alpha^2 F(\Omega)}_{\text{Eliashberg-függvény (jelölés)}}$$

$F(\Omega)$: fonon DOS

$\alpha^2 F(\Omega)$ jelölés, bonyolult művelet

$(1 - \cos\vartheta)$ tag is benne van



$$\alpha^2 F(\Omega) \simeq (1 - \cos(\vartheta)) \times F(\Omega)$$

↑ szimbólikus

$\vartheta = 0$, $\vartheta = \pi$

↓ $1 - \cos\vartheta = 0$ (előreszóródásnak nincs járuléka az ellenállásban)

↘ $1 - \cos\vartheta = 2$ hátraszórás járuléka maximális

- Bloch-Grüneisen-fv.:

$$\frac{\hbar}{\tau} = 2\pi \lambda k_B T \cdot \underbrace{\int_0^{\Omega_D} \frac{d\Omega}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{\Omega_D}\right)^4 \cdot \left[\frac{\hbar\Omega / k_B T}{\sinh(\hbar\Omega / k_B T)}\right]^2}$$

↓ anyagra jellemző

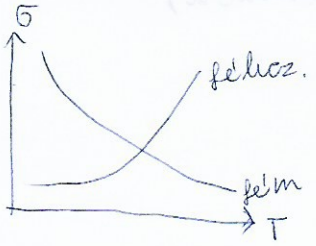
ha $T \to \infty$, ez 1-be tart

ha $T \to 0$, akkor változócsere: $x = \frac{\hbar\Omega}{k_B T}$

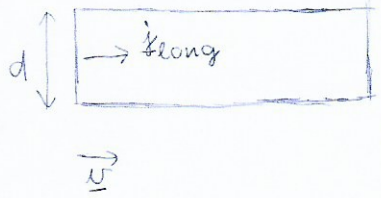
→ integrálból kijön egy T^4 tag

univerzális függvény

- Félvezetőknél $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$



Klasszikus Hall-effektus



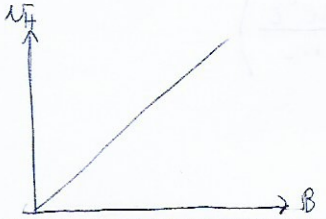
$\underline{F}_{transzv} = e\,\underline{v} \times \underline{B}$

Első elektrosztatikus tér:

$\underline{F}_{sztat} = -\underline{F}_{Lor} = -E\,\nabla\varphi$

- Drude-modell: $v_d = \frac{eE\tau}{m^*} = \mu E_{long}$ (μ - mobilitás)
- Hall-feszültség: $V_H = \frac{d \cdot e\,(n)\,E_{long}\,B}{m}$
- Def: Hall-ellenállás: $R_H = \frac{E_{transzv}}{j_{long}}$ $\quad j = \sigma E$, $E = \varrho j$

$R_H = \frac{v_d \cdot B}{n e v_d} = R \cdot B$, ahol $R = \frac{1}{ne}$: Hall-állandó (csak n-től függ, előjeles)

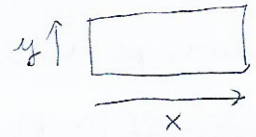


(Kvantum Hall-effektus, ha $g\mu_B B \gg \frac{\hbar}{\tau}$)

- Precízebben:

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$$

↓ izotróp anyag



→ invertálva: (levezetés nélkül)

$$\varrho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2} = \frac{m^*}{ne^2\tau} = \frac{1}{n\mu e}$$

↑ miért?

$$\varrho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xx}^2} = \frac{B}{|e|n}$$

→ mérések: n és μ meghatározása gyakorlatban:

$$n = \frac{1}{|e| \cdot \left(\frac{\partial \varrho_{xy}}{\partial B}\right)\Big|_{B=0}} \; ; \qquad \mu = \frac{\left(\frac{\partial \varrho_{xy}}{\partial B}\right)_{B=0}}{\varrho_{xx}}$$

- Mágneses ellenállás (magnetoresistance)



→ ejtővonala → nem lesz akkora járuléka a vezetőképességben

⊙B

$\underline{v} = \mu(\underline{E} + \underline{v} \times \underline{B})$ $\qquad \underline{v} = \mu \underline{E}$ ↓ $E_{sztat} + E_{Lorentz}$ $\qquad [\mu] = \frac{m^2}{Vs}$

- megoldva v-re:

$$\boxed{\underline{v} = \frac{\mu}{1 + (\mu B)^2}\left(\underline{E} + \mu(\underline{E} \times \underline{B}) + \mu^2(\underline{B} \cdot \underline{E})\underline{B}\right)} \qquad R(B) = \frac{R(B=0)}{1 + (\mu B)^2}$$

XI.7.
10. hét

Elektromos transzport

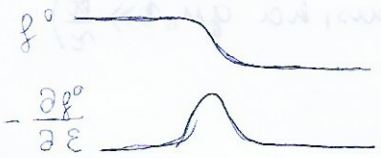
$\underline{j} = -e \int \frac{d^3k}{4\pi^3} f(\underline{k}) \underline{v}(\underline{k})$; $f(\underline{k})$ Boltzmann-egyenletből ismert

$\underline{j} = -e^2 \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \cdot \underbrace{\left(\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right) \tau(\underline{k}) (\underline{v}(\underline{k}) \underline{E})}_{\text{volt: } f = f^0 + e\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \underline{v} \underline{E} \tau} \underline{v}(\underline{k}) =$

$= \text{---------} \| \text{---------} \cdot \underbrace{\int d\varepsilon \cdot \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\underline{k}})}_{\text{integrál értéke 1}} =$

$= e^2 \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right) \underbrace{\int \frac{d^3k}{4\pi^3} \cdot \delta(\varepsilon - \varepsilon(\underline{k})) \tau(\underline{k}) [\underline{v}_{\underline{k}}(\underline{k}) \circ \underline{v}(\underline{k})] \underline{E}}_{\rightarrow \underline{\underline{\sigma}}(\varepsilon)}$

innen: $\underline{j} = \cancel{e^2} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right) \underline{\underline{\sigma}}(\varepsilon) \cdot \underline{E}$ (Drude $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$)



- Izotróp eset:

$\underline{v}_{\underline{k}} \circ \underline{v}_{\underline{k}}$ egy elem; pl. $v_x^2 = \frac{1}{3} v_k^2$

- ezzel $\sigma = e^2 \int \frac{d^3k}{4\pi^3} \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_k}\right) \tau(\underline{k}) \cdot \frac{1}{3} v_k^2 = *$

$\int \frac{d^3k}{4\pi^3} \rightarrow \int d\varepsilon \cdot D(\varepsilon)$

$k^2 dk \leftarrow$

k-térben egyenletes eloszlás
→ periodikus határfeltétel következménye

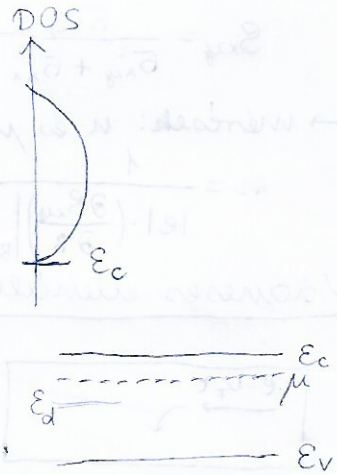
- vezetési sávra:

$D_c(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c}$

$* = \frac{2e^2}{3m^*} \int_{\varepsilon_c}^{\infty} \tau(\varepsilon) \cdot \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right) (\varepsilon - \varepsilon_c) D_c(\varepsilon)\, d\varepsilon$

Közelíthető magas hőmérsékleten

$f^0(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} \approx e^{-\frac{(\varepsilon - \mu)}{k_B T}} = \underbrace{e^{-\frac{(\varepsilon_c - \mu)}{k_B T}}}_{\text{const}} e^{-\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{k_B T}}$



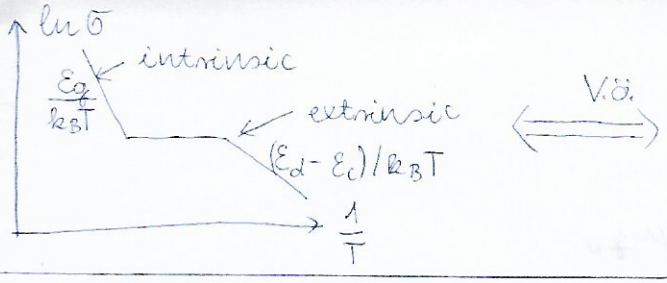
$\sigma = \frac{e^2 \cdot 4n(T)}{m^* \sqrt{\pi}} (k_B T)^{-5/2} \int_{\varepsilon_c}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon - \varepsilon_c}{k_B T}} \tau(\varepsilon) (\varepsilon - \varepsilon_c)^{3/2} d\varepsilon$

$n(T) = \frac{1}{4} \left(\frac{2m^* k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon_c - \mu}{k_B T}}$

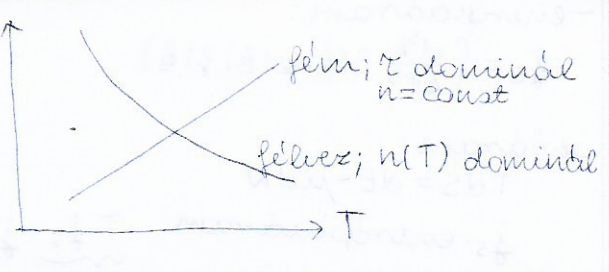
↑ töltéshordozó-koncentráció, volt

V.ö. Drude $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$

τ átlagolása



V.ö.



Termoelektromos jelenségek

Boltzmann-egyenlet:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\underline{k}} \frac{\partial f}{\partial \underline{k}} \nabla_{\underline{k}} f + \dot{\underline{r}} \nabla f = -\frac{g}{\tau}$$

külső erő — diffúzió

Tapasztalat szerint: $\nabla T \rightarrow$ áramot hoz létre (Seebeck-effektus)

$\dot{\underline{s}} \rightarrow \underline{j}_Q$ Peltier-effektus

megoldása volt: $f = f^0 + e\tau \underline{v}(\underline{k}) \underline{E} \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)$

$f = f(\underline{k}, \underline{r}, t)$ helyett: $f = f(\underline{k}, \underline{r}, t, \mu, T)$

– ha μ és T helyfüggő és a diffúziót elhanyagoljuk

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\underline{k}} \nabla_{\underline{k}} f + \mu \cdot \frac{\partial f}{\partial \mu} + \nabla T \cdot \dot{\underline{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial T} =$$

$\mu \rightarrow \nabla \mu \cdot \dot{\underline{r}}$

átlépés $\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$-ra

$$= \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\underline{k}} \nabla_{\underline{k}} f + \dot{\underline{r}} \nabla \mu \frac{\partial f}{\partial \mu} + \dot{\underline{r}} \cdot \nabla T \cdot \frac{\partial f}{\partial T} =$$

$\nabla_{\underline{k}} f = v_{\underline{k}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \hbar$

$$\frac{\partial f}{\partial \mu} = -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}$$

$$f = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}} + 1} = f(x)$$

$x = \frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}$

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial T} = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \cdot k_B T \cdot \left(-\frac{\varepsilon - \mu}{T^2 \cdot k_B}\right) = -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{\varepsilon - \mu}{T}$$

→ megoldás:

$$f = f^0 + \tau \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon}\right) \underline{v}(\underline{k}) \left[-e\underline{E} - \nabla \mu + \frac{\varepsilon_{\underline{k}} - \mu}{T} \left(-\nabla T\right)\right]$$

erő

→ következmény: ∇T is csinál áramot ($\underline{j}_f$)

$-e\underline{E} - \nabla \mu$ is csinál hőáramot ($\underline{j}_{fQ}$)

– részecskeáram:

$$\underline{j}_n = \int \frac{d^3 k}{4\pi^3} \underline{v}(\underline{k}) \cdot f(\underline{k})$$

– töltésáram:

$$\underline{j}_f = -e \int \frac{d^3 k}{4\pi^3} \underline{v}(\underline{k}) f(\underline{k})$$

$\int d\varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon)$

↓ ↓

kvantumstat. rendszerspecifikus

+ szorozni azzal a mennyiséggel, amit keresünk

- energiaáram:

$$\underline{j}_E = \int \frac{d^3k}{4\pi^3}\, \varepsilon(\underline{k})\, \underline{v}(\underline{k})\, f(\underline{k})$$

- hőáram:

$$T dS = dE - \mu dN$$

$\underline{j}_S$: entrópiaáram $\quad T\cdot \underline{j}_S = \underline{j}_E - \mu \underline{j}_N$

$\underline{j}_q$: hőáram

$$\underline{j}_q = \int \frac{d^3k}{4\pi^3} [\varepsilon(\underline{k}) - \mu]\, \underline{v}(\underline{k})\, f(\underline{k})$$

f-et beírva $\underline{j}$-kbe kapjuk:

$$\boxed{\begin{aligned} \underline{j} &= K_0\left(\underline{E} + \frac{\nabla\mu}{e}\right) - K_1\left(-\frac{\nabla T}{T}\right) \\ \underline{j}_q &= -K_1\left(\underline{E} + \frac{\nabla\mu}{e}\right) + K_2\left(-\frac{\nabla T}{T}\right) \end{aligned}}$$

$$K_0 = \sigma = e^2 \int \frac{d^3k}{4\pi^3}\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) \tau(k) \cdot \frac{1}{3} v_k^2$$

$$K_1 = \frac{1}{e}\int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) \sigma(\varepsilon)(\varepsilon - \mu)$$

- K_1 azonossága → megfelelő keresztegyütthatók mindig azonosak
Onsager-relációk (hőtan IV. főtétele)

- Példák: 1. hővezetés $\underline{j}_q = -K \nabla T$ Fourier-törvény
$\underline{j} = \emptyset$ ↖ ismert fenomenológiai összefüggés

+ Boltzmann:

$$K_0 \cdot \left(\underline{E} + \frac{\nabla\mu}{e}\right) = K_1\left(-\frac{\nabla T}{T}\right)$$

$$\boxed{K = \left\{-\frac{K_1^2}{K_0 T} - \frac{K_2}{T}\right.}$$

2, Seebeck-effektus $E = \emptyset$; $\nabla T \neq \emptyset \Longrightarrow \underline{j} \neq \emptyset$

vagy ha $\underline{j} = \emptyset$, nem folyik áram, $\nabla T \neq \emptyset \Longrightarrow E \neq \emptyset$
(termopár hőmérő)

$$\boxed{\underline{E} + \frac{\nabla\mu}{e} = S \nabla T}$$

↑ Seebeck-együttható

$$\underline{j} = \emptyset \longrightarrow S = -\frac{1}{eT}\cdot\frac{K_1}{K_0}$$

3, Peltier-effektus $\underline{j} \neq \emptyset$; $\nabla T = \emptyset \Longrightarrow \underline{j}_q \neq \emptyset$

$$\underline{j}_q = \Pi \underline{j}$$

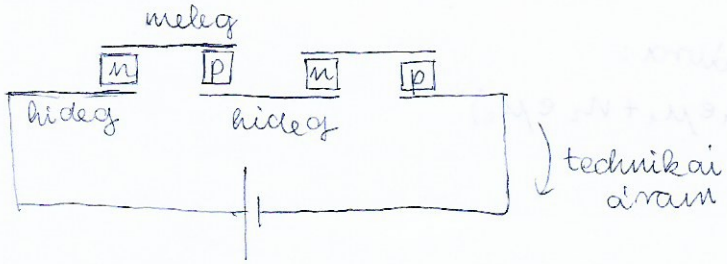
↑ Peltier-együttható definíciója

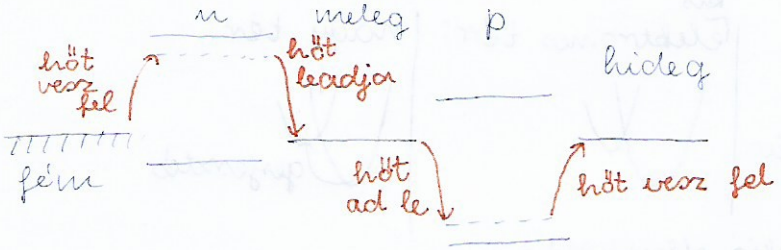
$$\underline{j}_q = -\frac{K_1}{e K_0}\underline{j} \quad \text{és kijön, hogy} \quad \Pi = ST$$

(Kelvin-összefüggés)
(Onsager lenne van)

Peltier - effektus

nagy $\nabla\mu$, kis hővezetés!





- Megjegyzés:
  - nem elég csak n típusú
  - jósági tényező maximális, ha soros elektromosan és párhuzamos hőáram szempontjából
  - csak 1 p v. 1 n is tudna Peltier-elem lenni
  - fordítva: termoelektromos generátor

Diffúziós jelenségek félvezetőkben

Félvez. fiz: XI. 14.

Töltéshordozó keltés: termikusan, fénnyel, stb.
- ellentétes folyamat: rekombináció R (ráta)

$\mathcal{E}_c$ ——— n típusú félvezető
$\mathcal{E}_d$ ····· → többségi és kisebbségi töltéshordozók
↓ n_0 ↓ p_0
$\mathcal{E}_v$ ——— n-típus: $n_0 >> p_0 \neq \emptyset$
p-típus: $p_0 >> n_0 \neq \emptyset$

- intrinsic esetben (volt):

$$n = p = n_i(T) = 2\left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} (m_e^* m_p^*)^{3/4} \cdot \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right)$$

n: töltéssemlegesség; n_i: intrinsic

$n \cdot p = n_i^2(T)$
Tömeghatás törvénye (mass law action)
igaz extrinsic esetben is! (ahol $n >> p$)

μ ——— ····· μ

$e^{-\frac{\mathcal{E}_c - \mu}{k_B T}} \sim n$
$e^{-\frac{(\mu - \mathcal{E}_v)}{k_B T}} \sim p$
→ szorzatuk állandó
$n \cdot p = \text{áll.}$

intrinsic extrinsic

- nemegyensúlyi állapotban:
  - egyensúlyba fog tartani; τ_n és τ_p az elektron és lyuk rekombinációs élettartama
    $(\tau_n, \tau_p) >> \tau$ (τ: mom. relaxáció)

→ kontinuitási egyenletek:

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{e}\nabla j_n = + \frac{p - p_0}{\tau_p}$$
$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{e}\nabla j_p = - \frac{p - p_0}{\tau_p}$$

n-típusú félvezető; n és p kontinuitási egyenlete; a töltéshordozók számának megváltozása csak a kisebbségi töltéshordozóktól függ

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{e}\nabla j_p = + \frac{n - n_0}{\tau_n}$$
$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{e}\nabla j_n = - \frac{n - n_0}{\tau_n}$$

p-típusúban

Térbeli inhomogenitás

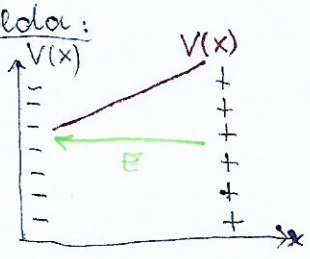
Drift

$j_{drift} = ne v_d = ne\mu E$
$j_{drift} = -ne\mu \nabla V$

Diffúziós áram

$j_n = -D \nabla n$
↑ részecskeáram
diffúziós töltés-áram:
$j_{diff} = -e j_n = eD \nabla n$

- Példa:



- stacionárius esetben:

$j_{drift} + j_{diff} = \emptyset$

(n-tip.) $\emptyset = -ne\mu_n \nabla V + eD \nabla n$

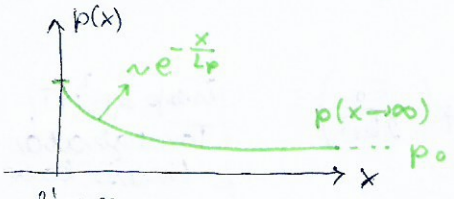
$n(r) = n_0 e^{-\frac{e_c - \mu - eV}{k_B T}}$

$\nabla n(r) = n(r) \cdot \frac{e}{k_B T} \cdot \nabla V$ (volt)

$\mu_n = \frac{e}{k_B T} D$
Einstein-reláció

Diffúziós hossz

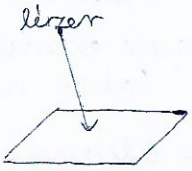
- pl. lyuk injektálva n-típusúba stacionárius eset;
  - kisebbségi töltéshordozók → $\frac{1}{e}\nabla j_p = -\frac{p-p_0}{\tau_p}$ (analógia: $\int j\,dA = 0$; Kirchhoff)
  - $j_p = -\frac{D_p}{e}\nabla p$ (diffúziós egyenlet)
  - $[p] = \frac{1}{cm^3}$
  - Innen $\boxed{\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = \frac{1}{D_p \tau_p}(p-p_0)}$
  - Megoldása: $p(x) = p_0 + (p(x=0) - p_0)e^{-\frac{x}{L_p}}$, ahol $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$

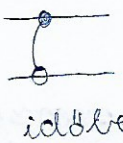


(Def.) rekombinációs hossz – L_p

$L_p \approx 10-100$ nm, de akár 1mm is lehet nagy tisztaságú félvezetőkben

(pl. Semilab



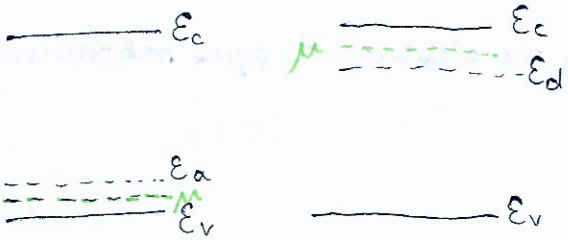




időmérésre visszavezet egy töltéshordozó-koncentráció mérést)

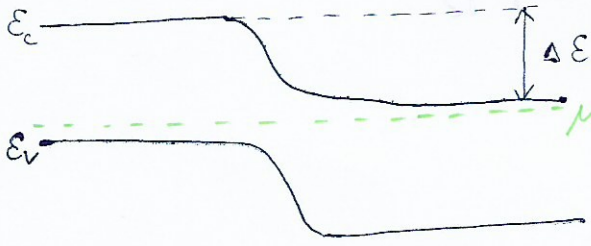
Félvezető eszközök

p-n átmenet

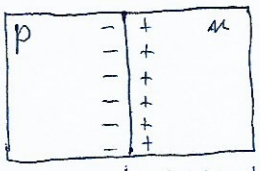


- összeérintve → kontaktpotenciál beáll
- hajtóerő: kémiai potenciál különbsége
- beépített elektromos tér kiegyenlíti a kémiai potenciálokat



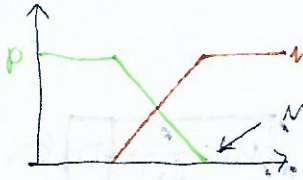


→ diffúziós potenciál / kontakt potenciál

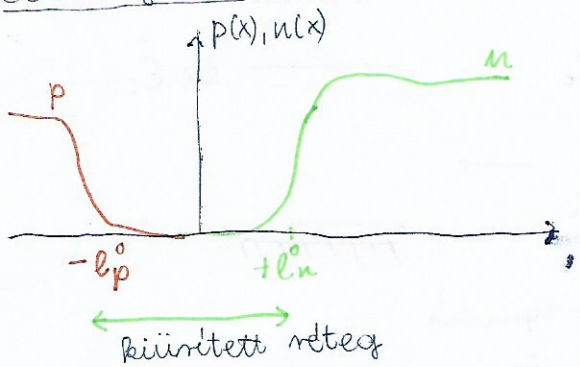


↳ kiürített réteg (nincsenek szabad töltéshordozók)
↳ beépített elektromos tér (térfogati töltés)

- volt: $-en\mu_d E + eD\nabla n = 0$
- térbeli eloszlás:



Schottky-közelítés:



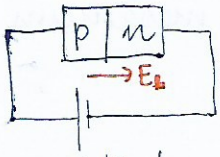
Semlegesség: $p \cdot l_n^0 = n \cdot l_p^0$

$p \approx n_a$; $n \approx n_d$ ionizált adalékok

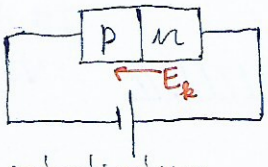
$l \approx$ néhány 10 um (hiúcs közel L_D-hez)

$E \approx 10^4 - 10^6 \frac{V}{cm} \approx 10^6 - 10^8 \frac{V}{m}$

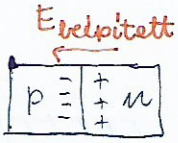
p-n átmenet feszültség alatt:



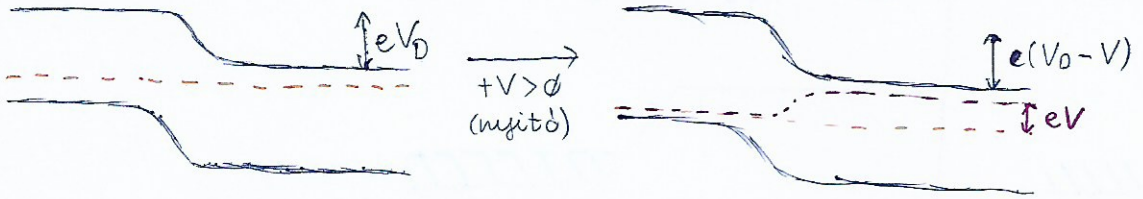
nyitóirány (csökken a kiürített réteg)



záróirány (→ nagyobb kiürített réteg)

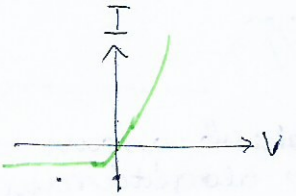


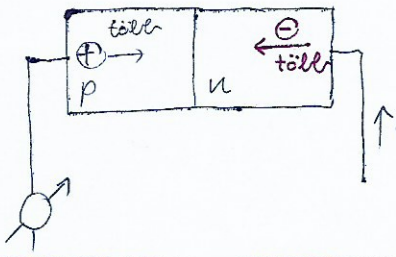
- energiasáma:



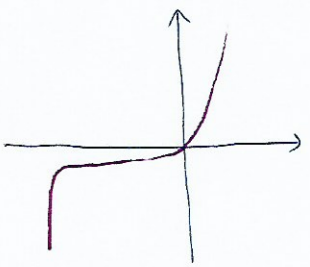
lezárási irányban → I_c áram, teljes karakterisztika

$I(V) = I_c \left(e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1 \right)$ Schockley-összefüggés



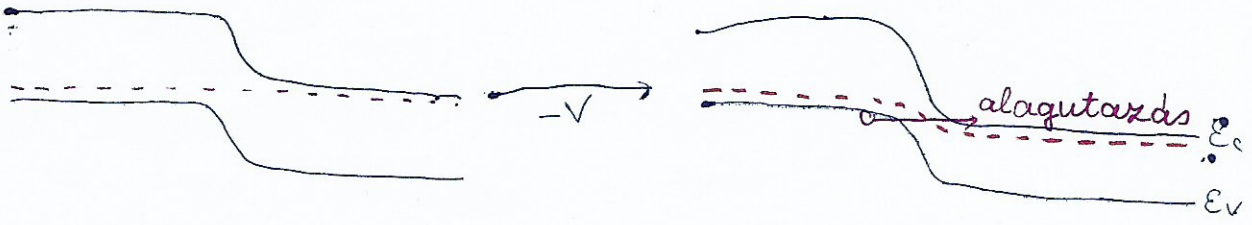


- határfelület → kisebbségi töltéshordozókká válnak
- makroszkopikusan folyik áram
- rekombináció → energia szabadul fel (hő / fény)



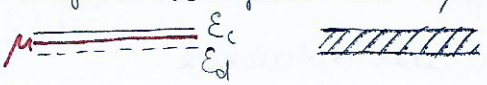
lavina → záróirány, nagy elektromos tér termikusan gerjesztett kisebbségi töltéshordozóknak nagy energiája lesz → további töltéshordozókat kell

Zener-effektus

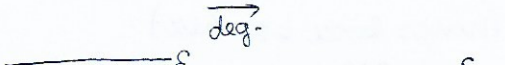


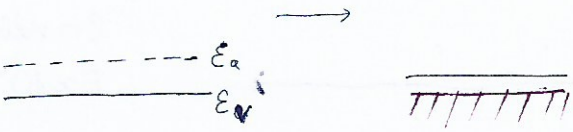
Alagútdióda (Esaki-dióda)

degenerált félvezető → μ a sávokban van





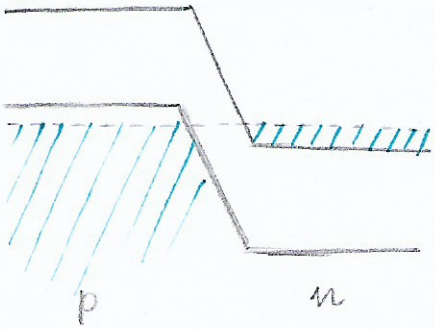




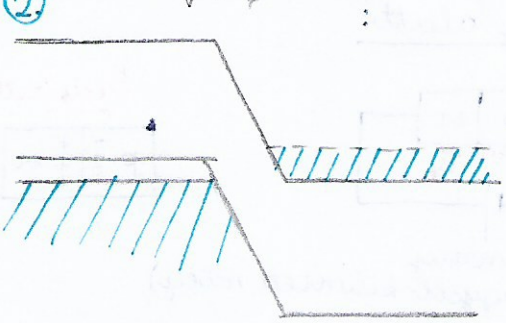
n – típusú

p-típusú

① $V = 0$



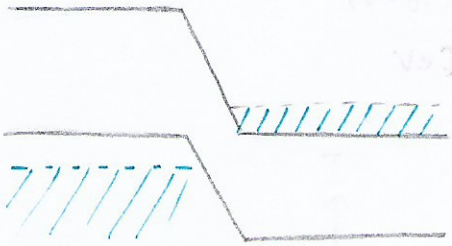
② $V > 0$



Itt áram maximum

$V = V_{crit}$

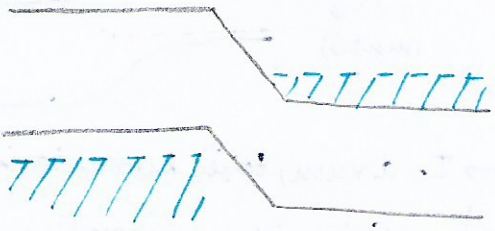
③ $V > V_{krit}$

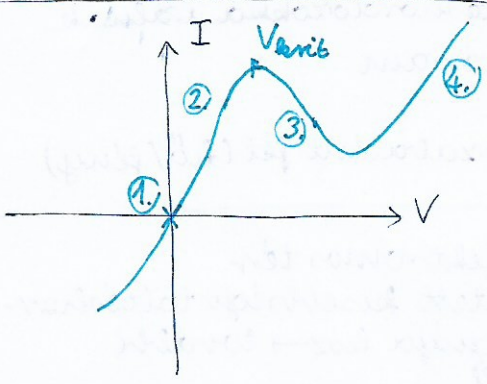


csökkenő áram

nincs alagútáram

④ Hagyományos dióda

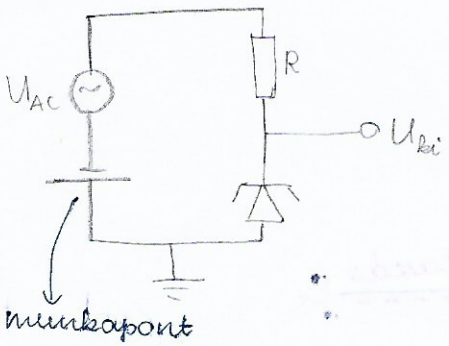




$$\left.\frac{dI}{dV}\right|_{munkapont} = -\frac{1}{r}$$

negatív diff. ellenállás

- Felhasználás: feszültségerősítés (oszcillátor)



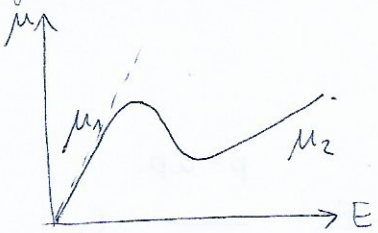
$$U_{ki} = U_{AC} \cdot \frac{-r}{R-r} = U_{AC} \cdot \frac{r}{r-R} > U_{AC}$$

ha $R < r$

erősítő vagy analóg oszcillátor

XI. 21.
12. hét

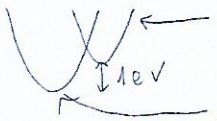
Gunn-dióda



GaAs
eredő mobilitás

$j = nev$
$v = \mu E$
több sávra:
$j = (n_1 e \mu_1 + n_2 e \mu_2)$

- sávszerkezet (GaAs)



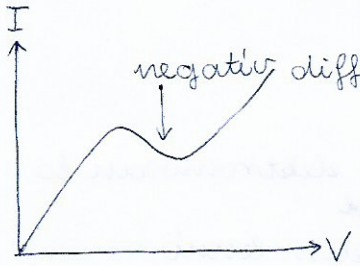
← további sáv ($\mu_2 > \mu_1$)
← vezetési sáv (μ_1)

kis elektromos tér:



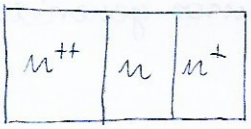
nagy tér:





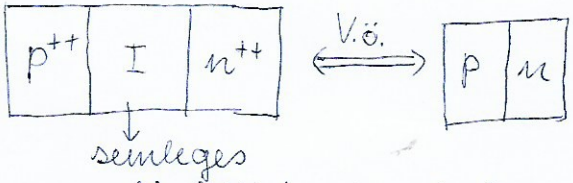
negatív differenciális ellenállás

- Gunn-dióda:



nem a junction miatti effektus

PIN dióda



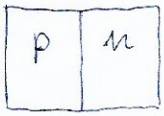
semleges

- nagyobb letörési feszültség
- rosszabb egyenirányító
- alacsony kapacitás → nagy sebességű kapcsoló (mikrohullám)

Varaktor-dióda



- záróirány
~~(- tértöltés)~~
- feszültségvezérelt kondenzátor



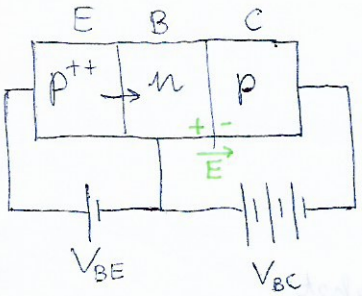
← E tértöltések, kapacitás

→ nagy záróirányú fesz. → kis kapacitás
kis nagy

$$C \sim \frac{1}{\sqrt{V_{záró}}}$$

Bipoláris tranzisztor (BJT)

↳ bipolar junction transistor



- V_{BE} → nyitóirány
  V_{BC} → záróirány
- bázis < L
  ↓
  diffúziós hossz

$\Rightarrow$ BJT ≠ pn + np

- bázis → kisebbségi töltéshordozók (bipolárisis)
  → kis rekombinációs, lyuk típusú áram
- npn → minden töltés fordított
- E-ből B-be jövő áram ~~[illegible]~~ V_{BE}-től függ

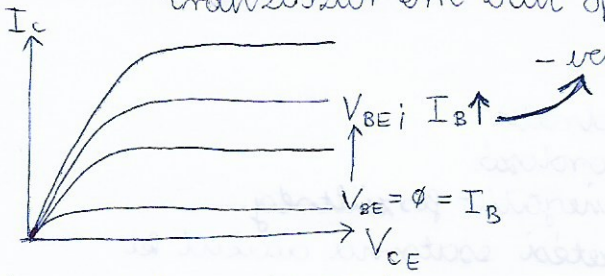
$I_{EC} \gg I_B$

E: nagy, $E \sim V_{BC}$ → nagy E átsöpri a pozitív töltéseket a C-ra.

I_C függ a V_{BE}-től; de $V_{BE} \sim I_B$

$\frac{I_C}{I_B} = \beta = 10 - 100$; ún. áramerősítési tényező

tranzisztor erre van optimálva

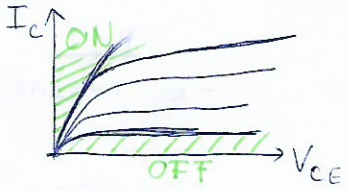


- vezérlés → feszültséggel vagy árammal

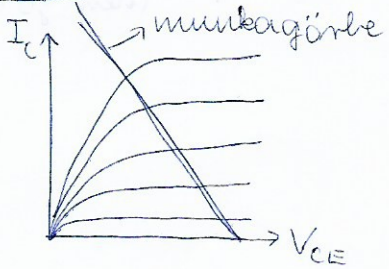
V_{BE} → csak az átsöprés a szerepe

telítés → elektromos „átsöprés" következménye
(nem jelenik meg több töltéshordozó)

- Két viselkedés: - kapcsoló, TTL (tranzisztor-T logic)



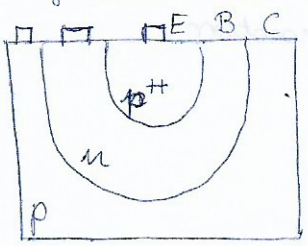
- erősítő



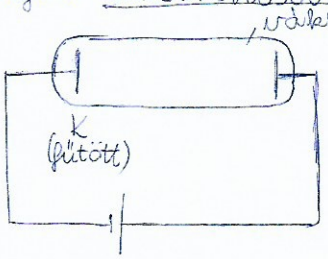
V_{CE} adott értéknél nagyjából

$\Rightarrow$ $I_C \sim I_B$

- megvalósítása:

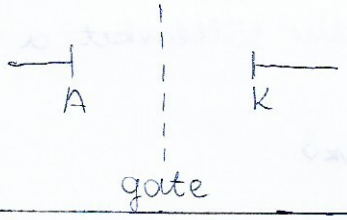


Analógia: elektroncsövek



fűtött katód → emisszió lehet
dióda, 1904
egyenirányító

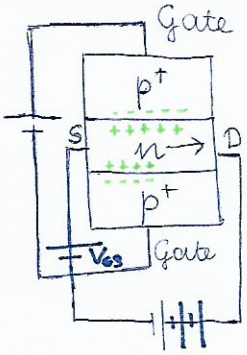
- trióda (1906)



gate-tel lehet vezérelni az anódáramot

gate → nem vesz föl áramot
⟹ nagy áramerősítés!

1FET: function field effect tr.
(legelső FET)



- S - source ; D - drain
- többségi töltéshordozó
- vezérlés: G-re negatív feszültség
  → keskeny vezetési csatorna alakul ki

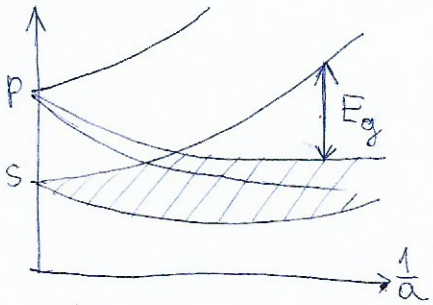
$V_{GS} \leq \emptyset$ (kiürített réteg nő, záróirány)

1FET	BJT
- nagy vezérlő impedancia $I_G = \emptyset$	- kis vezérlő impedancia
- digitális kapcsolásra jó (nem folyik áram)	- analóg erősítőnek jó (nem jó digitális alkalmazásokra)

Felületi állapotok

SC | vákuum

hullámfv. → ugrik a potenciál



tömbi anyagban

⟷ felületen: atomszerű állapotok

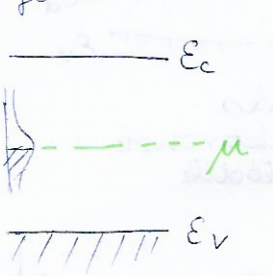


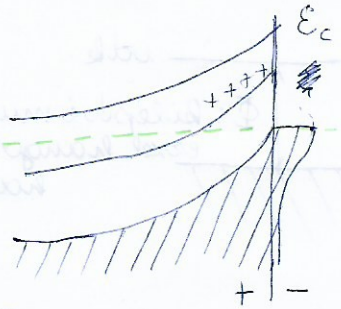
lokalizált sáv a tiltott sáv közepén

-bulk (tömbi anyag) ⟷ felület

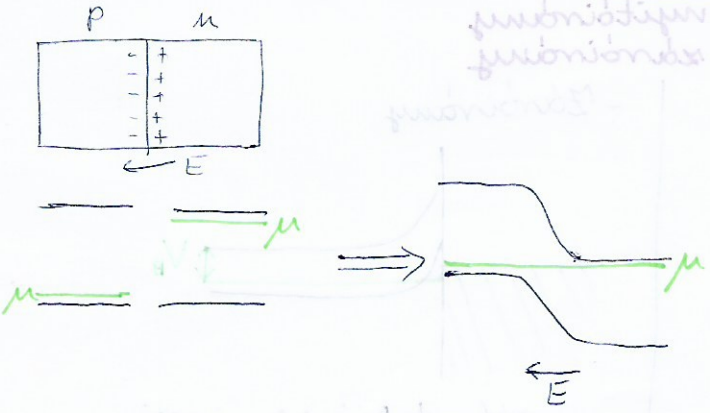




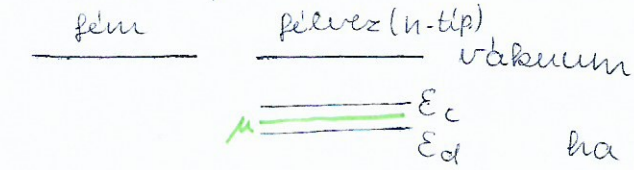




⟹ donor nívók a felületnél ionizáltak → felületi töltés



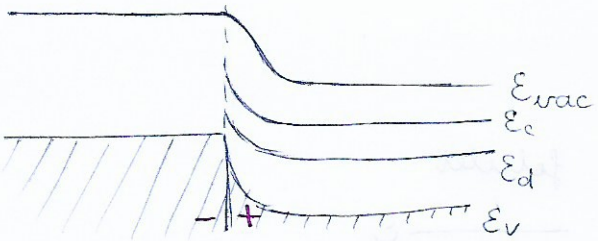
- Schottky-gát (fém + félvezető határra)
  - kisebb átmenet → alacsonyabb fogyasztás (mint pn-ben)



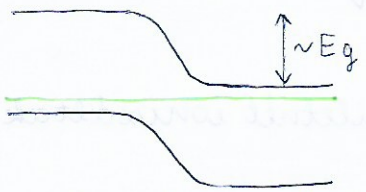
ha messze vannak



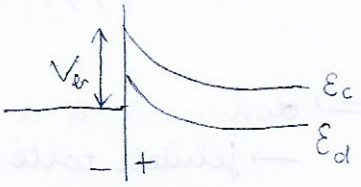
összerakva



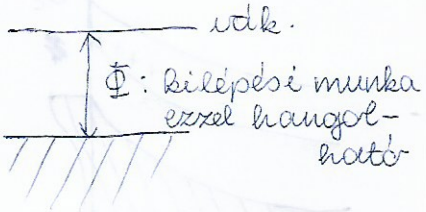
sávelhajlás
- áthaladó elektronok → delokalizálódik



p-n átmenet

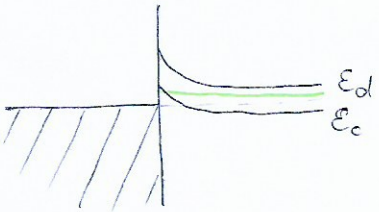


Schottky

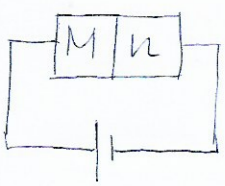


tértöltés
← beépített tér
← nyitóirány
→ záróirány

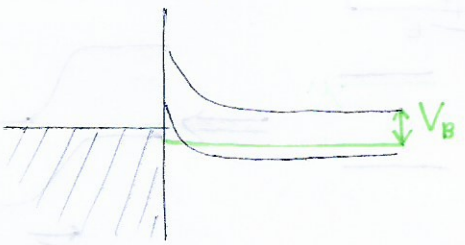
- Nyitóirány:



barrier csökken



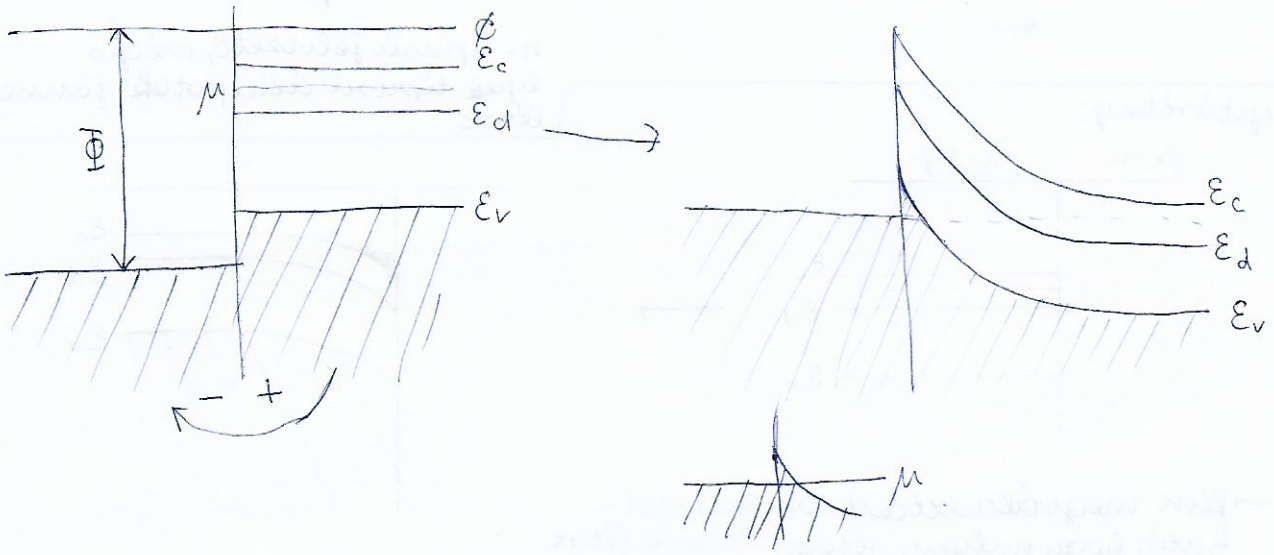
- Záróirány



→ V_{br}-t lejjebb viszi

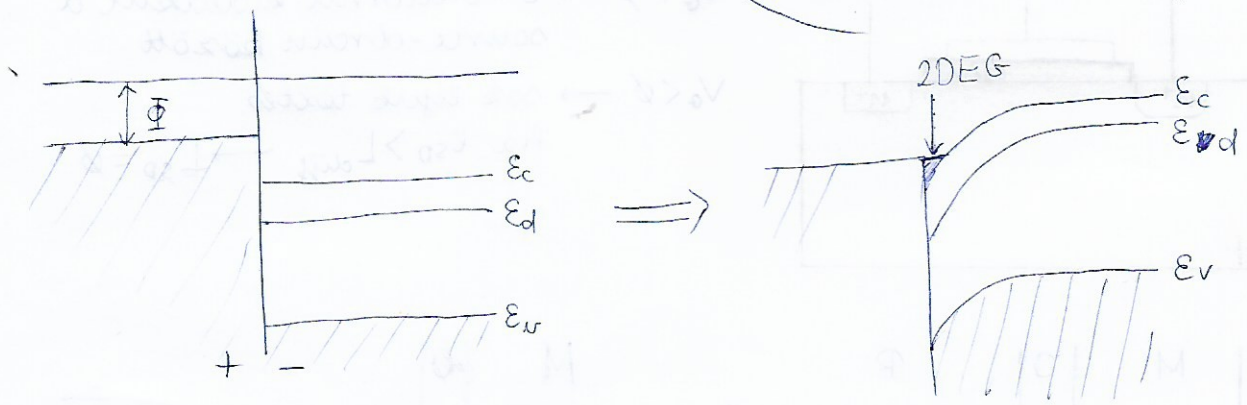
- Schottky-barrier előnye:
  - hangolható
  - kicsi tud lenni
  - nincsenek kisebbségi töltéshordozók
  - gyorsabb (~ többségi, rekombinációnak nem kell idő, ...)
  - kisebb fogyasztás

Φ nagy fényre:



lyuk típusú töltéshordozók
→ 2D lyuk gáz n-típusú félvezetőben
→ ún. inverziós réteg

- Másik szélső eset: Φ kicsi

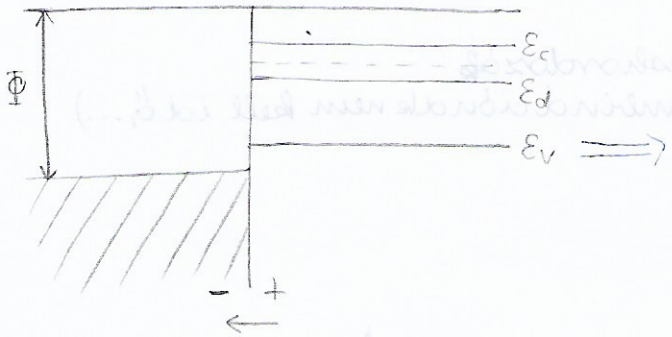


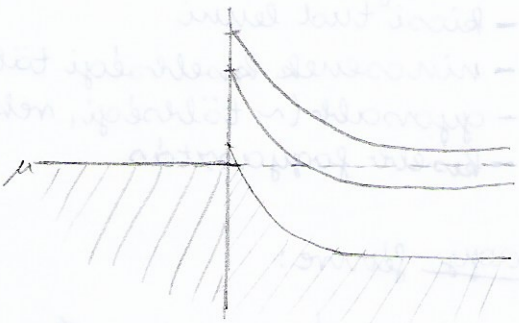
nyitóréteg

- Létezik ohmikus kontaktus:
  erős dópolás
  $N_d \cdot l$ = tértöltés
  ↑ átmenet vastagsága
  N_d nagy → l kicsi

XI. 28.
13. hét

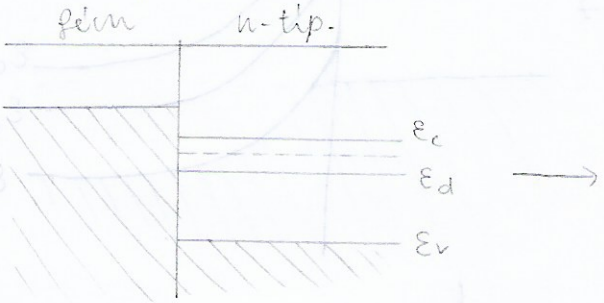
inverziós réteg: (előző órán rosszul szerepelt)

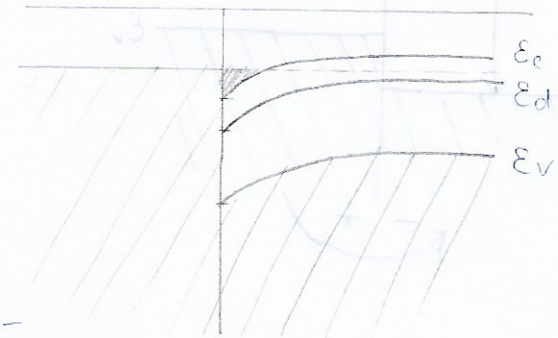




n-típusú félvezető, mégis lyuk típusú állapotok jönnek létre

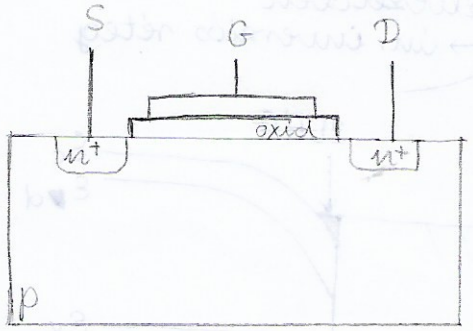
nyitóréteg:





→ fém megválasztásával kiválasztható, hogy milyen réteget hozok létre

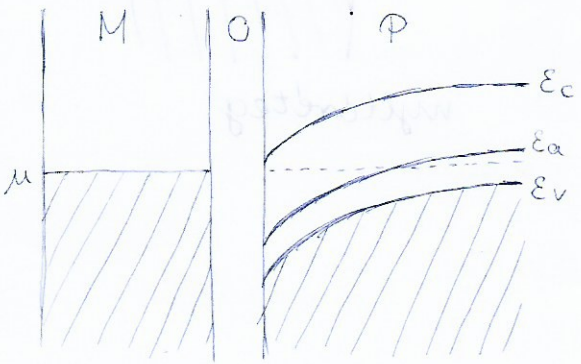
MOSFET - Metal-Oxide-field-effect tranzistor

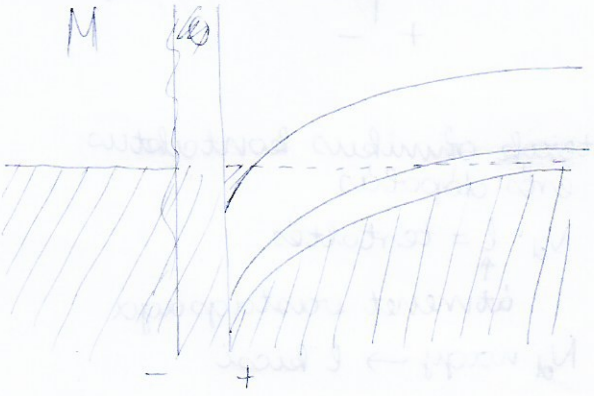


$V_G > \emptyset \rightarrow$ e^--csatorna kialakul a source-drain között

$V_G < \emptyset \rightarrow$ sok lyuk töltés

ha $l_{SD} > L_{diff} \rightarrow I_{SD} = \emptyset$





$V = \emptyset$, ~~kicsi inverziós réteg, elektron típusú~~

(~~vagy $V > \emptyset$~~)

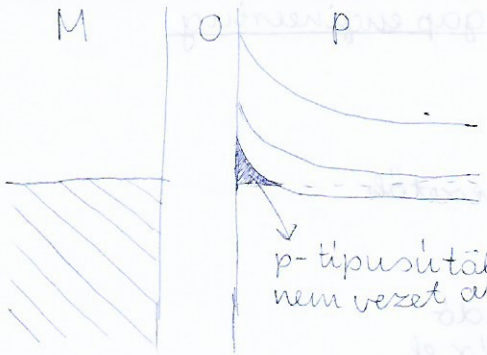
~~lyuk típusú csatorna~~

~~nem vezet~~

nincsenek töltéshordozók

$V > \emptyset$

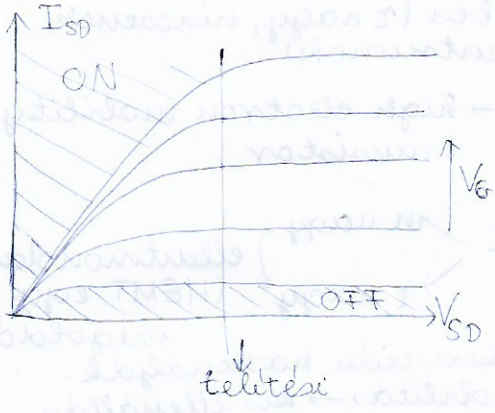
e^--típusú → vezetési csatorna az n-es elektródák között



akceptor nivó szerepe annyi, hogy beállítja a kémiai potenciált (betöltöttsége nem számít)

p-típusú töltéshordozó nem vezet az n-es elektródák között

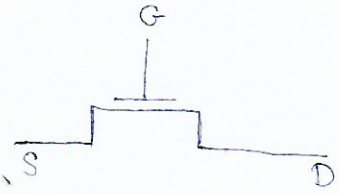
$V_G < \emptyset$



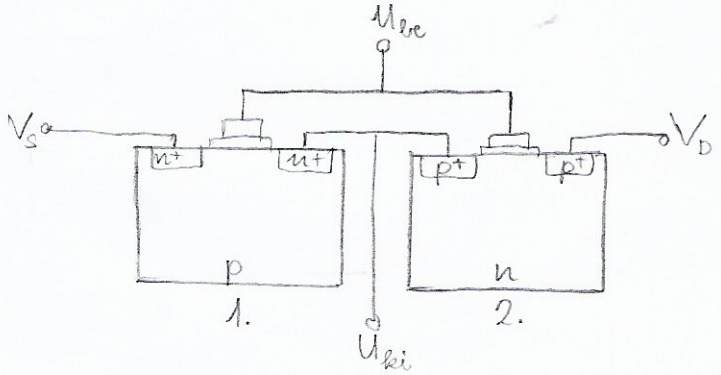
$I_{SD} \sim V_G$ → erősítő (nagy impedanciával)

V_G nő $\quad \frac{ON}{OFF}$ V_G-től függ

CMOS: Complementary MOS (metal-oxide semiconductor)



on → I_{SD} nagy → nagy fogyasztás!
off → I_{SD} kicsi



$U_{be} > \emptyset$ (magas)
$U_{be} \leq \emptyset$ (alacsony)

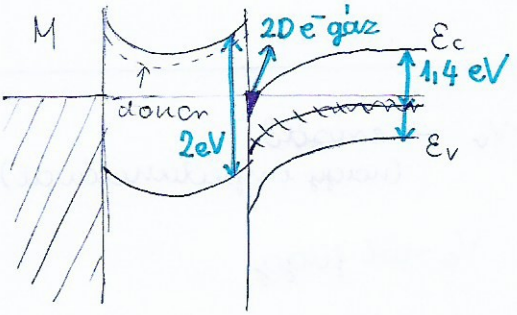
1. nyitva, 2. zárva → $U_{ki} = V_S$
$U_{ki} = V_D$

inverter áramkör a gyakorlatban
- áram csak kapcsoláskor folyik

Heteroréteg, modulation doping, band-gap engineering

1., töltéshordozó jelleg
2., határréteg, fém-félv.
3., Field-effect
4., Heteroréteg → hasonló rácsállandójú félvezetők
különböző gap!

pl. $Al_{0,4}Ga_{0,6}As$ 2 eV
$GaAs$ 1,4 eV
} rácsállandó 1%-kan tér el



Si dópolt
$Al_{0,4}Ga_{0,6}As$
gyenge donor nívók

vezetők nagy mobilitásúak a GaAs-ben (τ nagy, nincsenek szórócentrumok)

HEMT → high electron mobility transistor

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$ n nagy, τ nagy } ellentmondás (HEMT egy megoldás)

nagyfrekvencián használják
nagy mobilitás → kis ellenállás

Félvezetők optikai tulajdonságai

DC Drude

$$m\dot{v} = -eE - \frac{mv}{\tau} \longrightarrow j = nev_D = \sigma E \quad (v = \mu E) \longrightarrow \boxed{\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}}$$

AC Drude

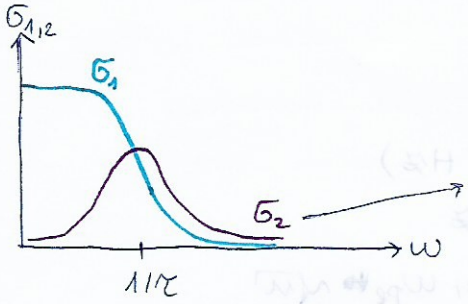
$$m\dot{v} = -eE - \frac{mv}{\tau}\,; \quad \text{~~bunsatz~~)}\ E = E_0 \cdot e^{-i\omega t}$$

ansatz: $v = v_0 e^{-i\omega t}$

$$m^* v_0(-i\omega) = -eE_0 - \frac{m^* v_0}{\tau} \longrightarrow \sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m^*} \cdot \frac{1}{1 - i\omega\tau} = \sigma_1(\omega) + \sigma_2(\omega)$$

$$\frac{1}{1-i\omega\tau} = \frac{1 + i\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} \longrightarrow \sigma_1(\omega) = \sigma_{DC} \cdot \frac{1}{1+\omega^2\tau^2}$$

$$\sigma_2(\omega) = \sigma_{DC} \cdot \frac{\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2}$$



$\sim \omega$, ha $\omega \ll \frac{1}{\tau}$

$\sim \frac{1}{\omega}$, ha $\omega \gg \frac{1}{\tau}$

σ_1, σ_2 tulajdonságai:

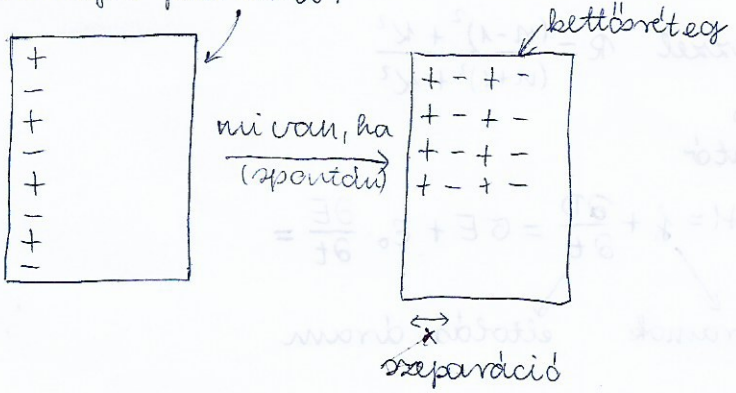
- σ_1 és σ_2 egymás Kramers-Kronig párjai (Hilbert-transzformáltjai) (nem függetlenek)

$$\sigma_1(\omega) = -\frac{1}{\pi} \oint \mathcal{P} \int \frac{\sigma_2(\omega)}{\omega - \omega'} d\omega' \quad ; \quad \sigma_2(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int \frac{\sigma_1(\omega)}{\omega - \omega'} d\omega'$$

↑ főértékintegrál

Plazmaoszcillációk

- semleges plazma:



$$\int E\,dA = \frac{Q}{\varepsilon_0} \longrightarrow E = \frac{Q}{A\varepsilon_0}$$

$$Q = \S V = e \cdot n_e \cdot A \cdot x \longrightarrow \text{innen:} \quad \boxed{E = \frac{e \cdot n_e x}{\varepsilon_0}}$$

↑ térfogati töltéssűrűség

$[n_e] = \frac{1}{m^3}$

– töltéshordozókra (elektronokra) ható erő:

$$F = -eE = -\frac{n_e e^2 x}{\varepsilon_0}$$

$$m\ddot{x} = -\frac{n_e e^2}{\varepsilon_0}\cdot x \longrightarrow \boxed{\omega_0^2 = \frac{n_e e^2}{\varepsilon_0 m}}$$

plazmaoszcilláció, fémben

$\boxed{\omega_{Pl}^2 = \frac{n_e e^2}{m^* \varepsilon_0}}$ plazmafrekvencia négyzete

$$\frac{1}{m^3}\cdot\frac{A^2 s^2}{VAs}\cdot\frac{m^2}{s^2}\cdot\frac{Vm}{As} = \frac{1}{s^2} \quad \checkmark$$

$$\sigma_{DC} = \varepsilon_0 \cdot \omega_{Pl}^2 \cdot \tau$$

ill. $\sigma_{AC} = \sigma_{DC}\left(\frac{1}{\omega^2\tau^2+1}\right) + \frac{i\omega\tau}{\omega^2\tau^2+1}\cdot\sigma_{DC}$

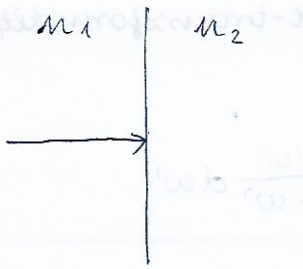
$\tau = 10^{-14}$ sec $\longrightarrow \frac{1}{\tau} \sim 100$ THz

(látható fény 300 THz)

$\hbar\cdot\omega_{Pl} \sim 1-10$ eV $\longrightarrow$ 100 THz – 1000 THz

Két független skála; $\frac{1}{\tau}$ → szennyezők; ω_{Pl} ~~↑~~ $\sqrt{n}$

Fresnel-formula



$$R = \left|\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right|^2$$



$$\Gamma = \frac{Z_e - Z_0}{Z_e + Z_0}$$

$N(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$, ezzel $R = \frac{(n-1)^2+\kappa^2}{(n+1)^2+\kappa^2}$

↑ frek. függő törésmutató; ↓ extinkciós együttható

Maxwell-egyenletek: $\nabla \times H = j + \frac{\partial D}{\partial t} = \sigma E + \varepsilon_0 \cdot \frac{\partial E}{\partial t} =$

szabad áramok; eltolási áram

$$= \varepsilon_0 \cdot \frac{\partial E}{\partial t}\left(1 + \frac{\sigma}{-i\omega\varepsilon_0}\right) = \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}\left(1 + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0\omega}\right)$$

↑ ha harmonikus a külső tér $E = E_0 \cdot e^{-i\omega t}$

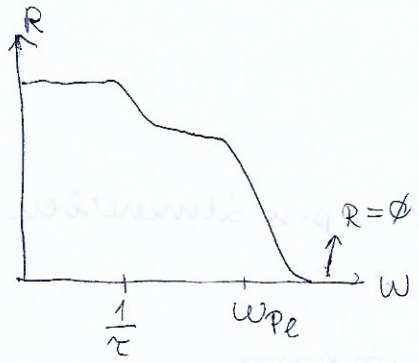
fémekben: σ ad egy korrekciót, ami frekvenciafüggő

Fémek dielektromos állandója:

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{i\sigma}{\varepsilon_0\omega}$$

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_{Pl}^2}{\omega^2 + \frac{i\omega}{\tau}} \longrightarrow \omega_{Pl} \text{ és } \frac{1}{\tau} \text{ is megjelenik}$$

függetlenek, de mindkettőt figyelembe kell venni



ha $\frac{1}{\tau} < \omega_{Pl}$

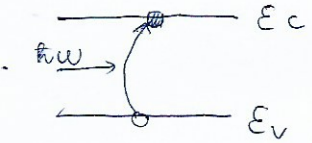
$\omega_{Pl}^2 = \frac{ne^2}{m^*}$ félvezetőben n alacsony $\Rightarrow$ ω_{Pl} kicsi

$\omega_{Pl}(SC) < \omega_{Pl}(fém)$

IR fölött a félvezetők átlátszóak, viszont vannak sáv-sáv átmenetek

Fotovezetés: sáv-sáv gerjesztés

$\Delta n \sim \Delta p \sim I$: intenzitás



$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h$$

$$\Delta\sigma = \sigma_0 \left(\frac{1 + \mu_e/\mu_h}{b_0 \mu_e/\mu_h + p_0} \right) \cdot \Delta n \sim I$$

érzékeny a bejövő fény intenzitására

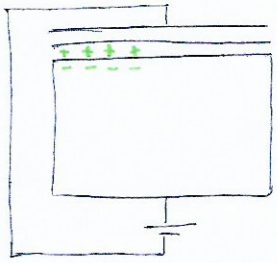
↓

μ-PCD

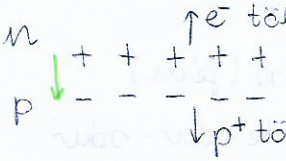
XII.5.
14. hét

Csontos Miklós jegyzet: jelszó: felvezetők
vizsga → 1 választott + 1 húzott
jegyzetet lehet vinni

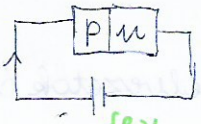
Napelem



- jó: az abszorpció a p-n átmenetben van
- $\ell \ll L$
  - vastagság (átmenet) $\ll$ diffúziós hossz (rekombinációs hossz)

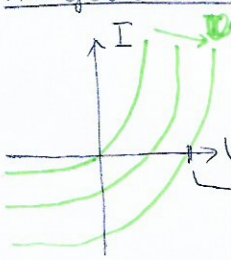


záróirányú áram

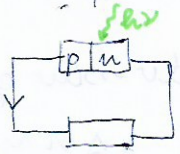


nyitóirányú

- Helyettesítő kép:



intenzitás nő
→ sötét áram lefelé tolódik



V_{oc}: open circuit voltage
(terhelés nélküli feszültség)

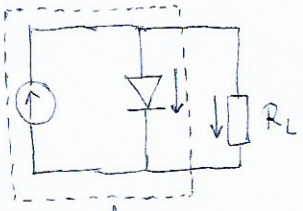
$$I = I_s\left(e^{\frac{eV_{oc}}{k_BT}} - 1\right) - I_{ph} = \emptyset$$

rövidre zárva

I_{ph} → fotóáram

olddala karakterisztika

$$V = V_{oc} \longrightarrow V_{oc} = \frac{k_BT}{e} \cdot \ln\left[\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right] \approx \frac{k_BT}{e} \cdot \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s}\right)$$

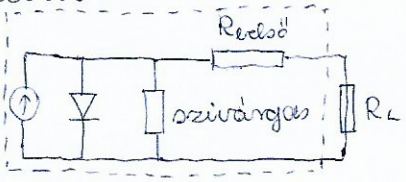


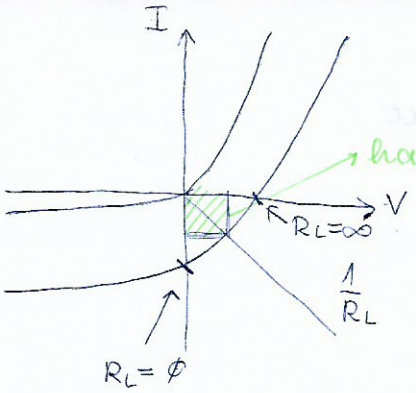
napelem
nyitóirány!

R_L → hasznos teljesítmény; terhelő ellenállás
Ⓘ → ideális áramgenerátor

nincs áram → ∀ a diódán folyik el

- kevésbé ideális:





$R_L(opt)=?$ → legnagyobb teljesítményhez

→ hasznos teljesítmény

$R_L=\infty$ → nem folyik áram

$R_L=\emptyset$ → ~~nem folyik áram~~

R a gyakorlatban: U_{DC} ~ kevésbé változik
I_{DC} ~ változik, $I_{fény}$ függő } inverter
↓
$U_{ki} \sim 220V$
$I_{ki} \sim I_{fény}$
↑
fényintenzitás

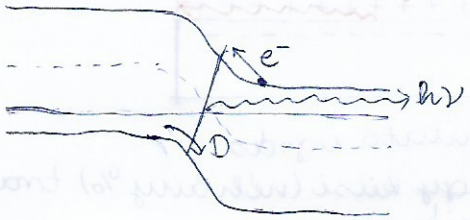
LED, light emitting diode

p-n átmenet: $\ell > L$

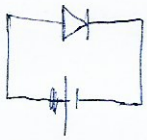
- kiürített réteg vastagabb, mint a rekombinációs hossz

~~(átmenet vastagságának beállítása)~~

- nyitóirány, áramjelző nagy árammal
- gyenge dópolás → hosszabb kiürített réteg
- spontán emisszió:

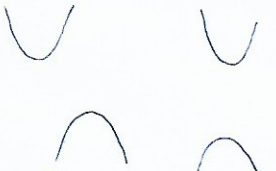


- felső réteg vékony az önabszorpció miatt



- LED-nek indirekt félvezető is jó, bár hatásfoka kisebb

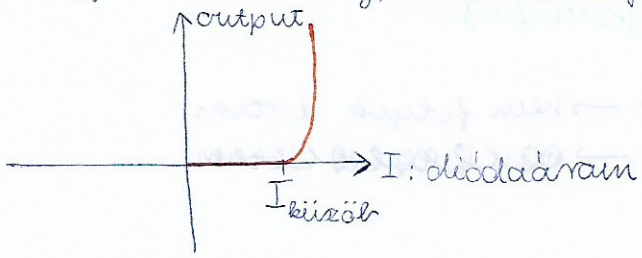
$$P_{foton} = \frac{h\nu}{c}$$



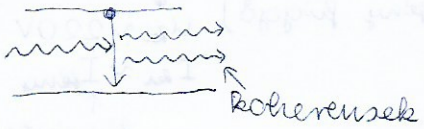
↓
fonon is elnyelődik

Lézerdiódák

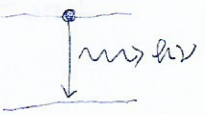
- csak direkt gap-ű félvezetők, pl. GaAs
- nagy áramsűrűség, nemlineáris folyamat



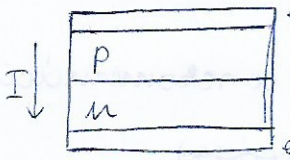
- stimulált emisszió



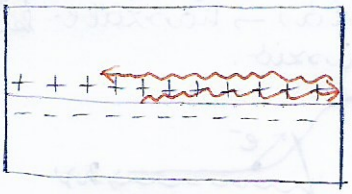
- spontán emisszió



legerjesztődés
↓
foton ki



→ sima felület, rezonátort képez
→ határrétegben folyamatos pumpálás van!
(e^- - lyuk áram)



törésmutató ugrás

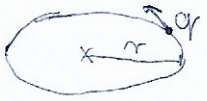
- van egy kicsi (néhány %) transzmisszió
→ itt jön ki elzserugárzás

- koherens, monokromatikus

Spintronika félvezetőkben

spin: információhordozó/tároló

Mi a spin?



klasszikusan: $\mu = A \cdot I$

$\mu = \frac{r^2 \pi V}{2r\pi} \cdot q$ $\Big\}$ $\frac{Vrq}{2} = \frac{q}{2} \cdot \frac{N}{m}$

$N = mVr$

μ mágn. mom. $\sim N$ imp. mom.

- kísérletek: Stern-Gerlach → anyagnak van mágn. mom.
  Einstein-de Haas → mágn. mom. → van impulzus-momentuma
- spin: alapvető kvantumos tulajdonság, klasszikus megfelelő nélkülé
- Dirac-egyenletéből:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}] \cdot \frac{i}{\hbar} \neq \emptyset$$

↓

pályaimpulzus → nem megmaradó mennyiség

ha $\hat{L} + \hat{S} = \hat{j}$, akkor $\frac{d\hat{j}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}, \hat{j}] = \emptyset$

$\langle S^2 \rangle = s(s+1)$, ahol $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$

$\langle S_z \rangle = \pm S$, vagy $\pm \frac{\hbar}{2}$

$\underbrace{\underline{\mu} = -g\mu_B \underline{S}}_{\text{elektronra}}$, ahol $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ → V.ö klasszikus $\mu = \frac{eV}{2m} = \frac{e\hbar L}{2m} = \mu_B L$ (egész)

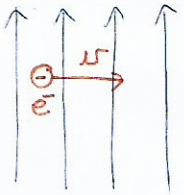
$g = 2$ Dirac-egyenletéből itt $g = 1$

$g_0 = 2{,}0023 \leftarrow$ QED

- $\underline{B}$-térben:

$\hat{\mathcal{H}}_{zeeman} = g\mu_B \underline{S}\,\underline{B}$; $U = -(\underline{\mu}\,\underline{B})$; $\underline{\mu} = -g\mu_B \underline{S}$

- Spin-pálya kölcsönhatás (SOI – spin-orbit interaction / coupling) SOC
  - elektromos tér jelenlétében



- homogén E tér
- nyugalmi koord. rsz.-ben:

$$\underline{B}' = -\frac{1}{c^2} \underline{v} \times \underline{E}$$ Lorentz-invariancia

- van $\underline{B}'$ → van mágneses kcsh., $\underline{\mu}$ miatt

- atomi potenciál:

$$\underline{E} = \nabla \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r} = \underbrace{\frac{r}{|r|}}_{\underline{e}_r} \cdot \frac{d}{dr} \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 |r|}$$

↑ H-atom szerű atom

$\hat{\mathcal{H}}_{SOC} = -g\mu_B(\underline{S}) \cdot \frac{1}{c^2} \underline{v} \times \underline{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\hbar \underline{L}}{m} \times \underline{E} \cdot g\mu_B \underline{S} = \text{const} \cdot \underline{L} \cdot \underline{S}$

$= \frac{1}{c^2} g \mu_B \underline{S} \cdot \frac{\underline{p}}{m_0} \times \underline{E} = \text{const} \cdot \underline{S} \underbrace{(\underline{p} \times \underline{v})}_{\hbar \cdot \underline{L}} \sim \underline{S} \cdot \underline{L}$ ↓ spin-pálya kcsh.

→ $\underline{L} \cdot \underline{S}$ csak atomi eredetű elektromos térrel jó!

→ radiális elektromos tér következménye

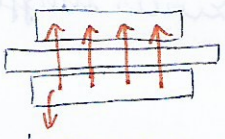
→ SOC okai:

- atomi elektromos tér → intrinsic
- pl. GaAs inverziós szimmetria sérülés III IV Ga As

↓ ~~Dbldd~~

bulk SOC, ~~Dresselh~~ Dresselhaus

- heterorétegek:



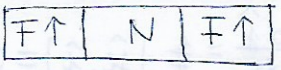
→ Bychkov-Rashba

transzverzális elektromos tér

Spin-szelep



F: ferromágneses fém
N: normál fém

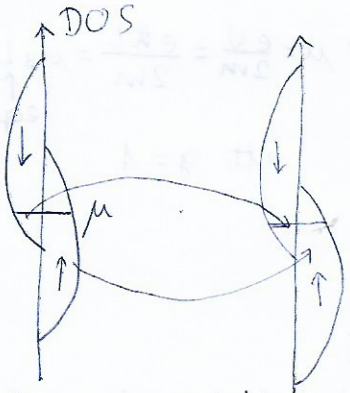


alacsony ellenállás

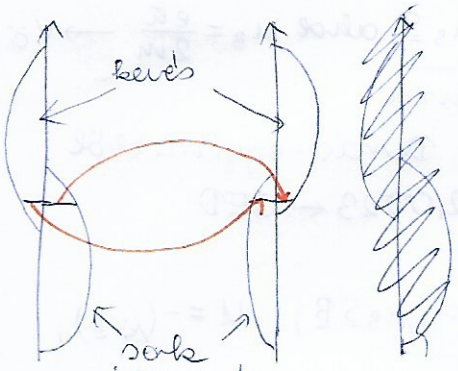


magas ellenállás

(Fert, Grünberg Nobel)

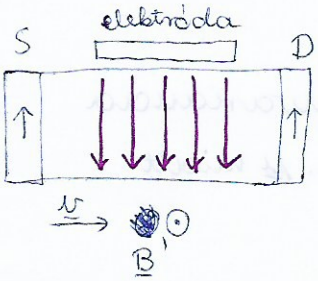


Körmyen folyik áram



sokból keverésbe
keverésből sokra

- Datta-Das tranzisztor:



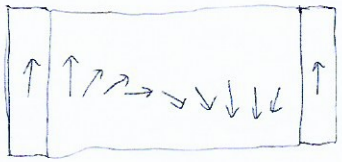
$\underline{B}' = -\frac{1}{c^2} \underline{v} \times \underline{E}$

↓ Larmor-precesszió

$\mu \uparrow$ $\quad \frac{d\underline{\mu}}{dt} = \gamma (\underline{\mu} \times \underline{B})$

↓ állandó

ekkor $\underline{v}$ körül precesszió



ellenállás elektromos térrel vezérelhető

$I_{SD} \leftrightarrow$ függ V_G-től

- Spinek mozgása
  - spinrelaxáció
    - lokálisan ha $B = \emptyset$ $\quad M(t \to \infty) = \emptyset$
    - ha injektálok

$$M \neq M(t \to \infty)$$

$$\frac{dM}{dt} = -\frac{M_0 - M(t)}{T_1} \qquad T_1 \text{ spinrelaxációs idő}$$

$$M_0 = M(t \to \infty)$$

  - diffúziós transzport
  - spindrift → ha nagy az elektrondrift (ballisztikus)
  - spindiffúziós hossz:

$$L_{spin} = v_F \sqrt{\tau T_1} \gg v_F \tau = l$$

↓ momentumrelaxáció

szabad úthossz