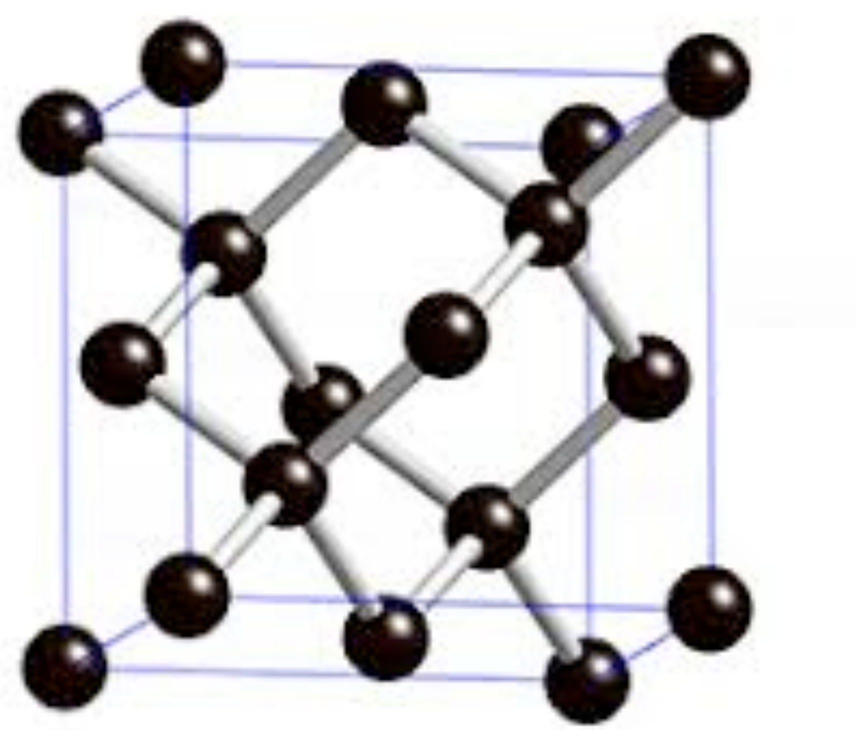
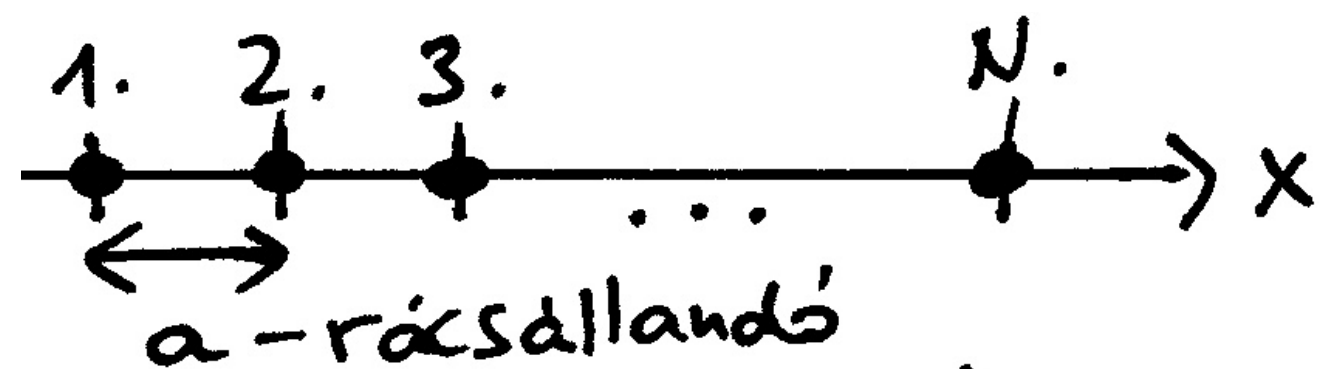
Modern Fizika Gépészmérnököknek / Fizika M1
5. előadás, 2019. október 8.

Elektronok kristályos szilárdtestekben



valóság
(bonyolult)



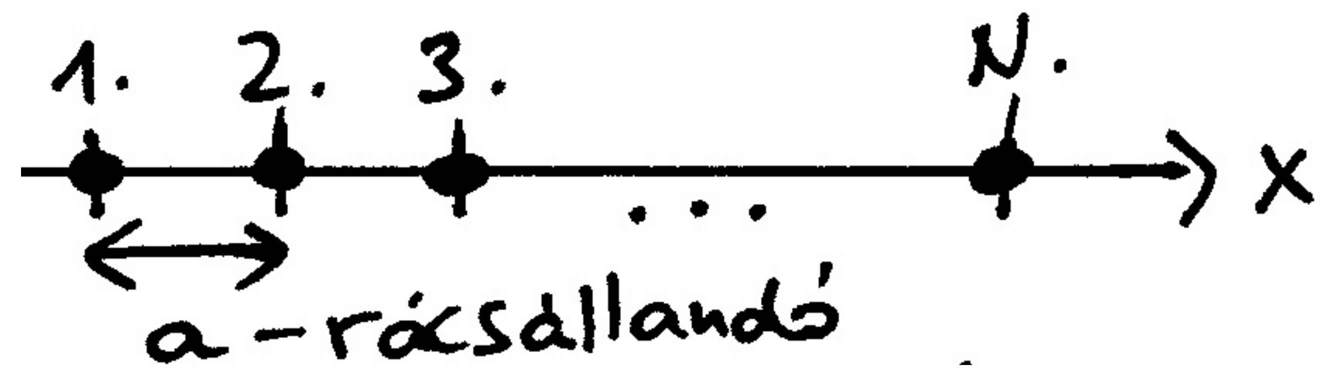
modell
(egyszerű)

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

Fém egyszerű, egydimenziós (1D) modellje:

- pöttyök (•): ionok
- kristályos, periodikus szerkezet
- e-e-kölcsönhatást elhanyagoljuk
- 1 vezetési elektron per atom



Kérdések:

(a) Melyek a stacionárius állapotok (energiasajátállapotok)?

(b) Mekkora áramot visznek a stacionárius állapotok?

(c) Zérus hőmérsékleten ($T = 0$), zérus feszültségnél ($U = 0$) mely stacionárius állapotok vannak betöltve?

(d) $T = 0$, $U = 0$: mekkora áram folyik?

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

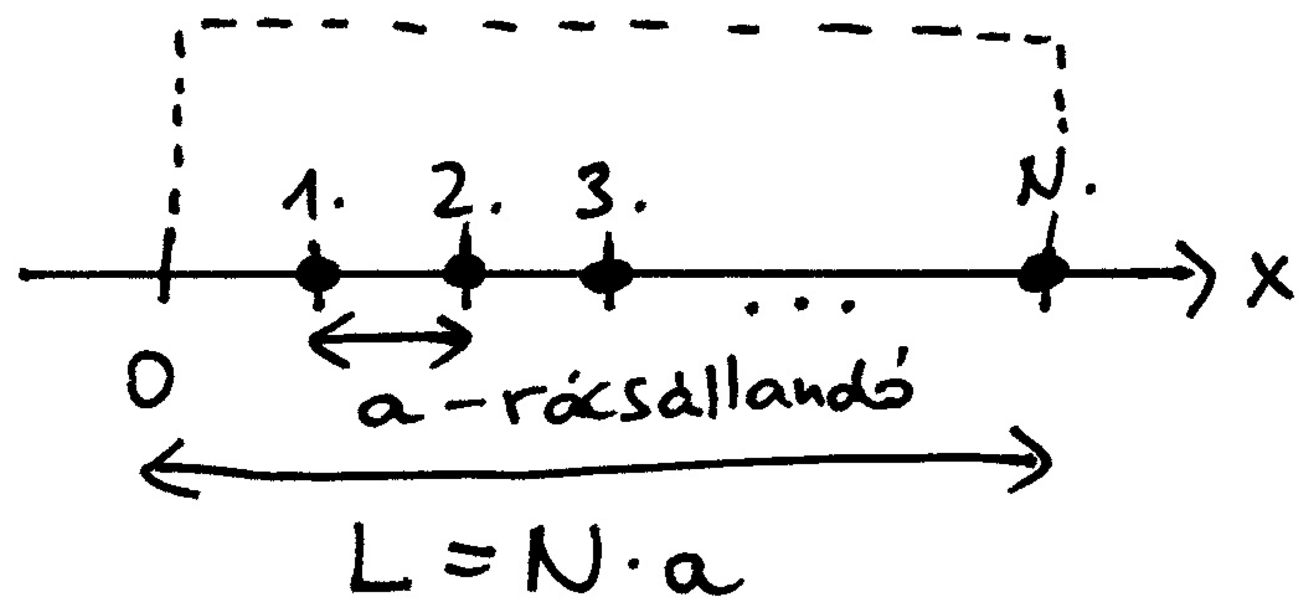
Kérdések:

(a) Melyek a stacionárius állapotok (energiasajátállapotok)?

(b) Mekkora áramot visznek a stacionárius állapotok?

(c) Zérus hőmérsékleten ($T = 0$), zérus feszültségnél ($U = 0$) mely stacionárius állapotok vannak betöltve?

(d) $T = 0$, $U = 0$: mekkora áram folyik?



Válaszok: *Sommerfeld modell* feltevései:

(i) iontörzsek periodikus potenciálját elhanyagoljuk (üresrács-közelítés)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_\mathrm{e}} = -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\partial_x^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}}\partial_x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

(ii) periodikus határfeltétel (Born-Kármán határfeltétel): $\psi(x = 0) = \psi(x = L)$

(iii) $N \rightarrow \infty$ (azaz $L \rightarrow \infty$) határesetben a határfeltétel úgysem számít

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

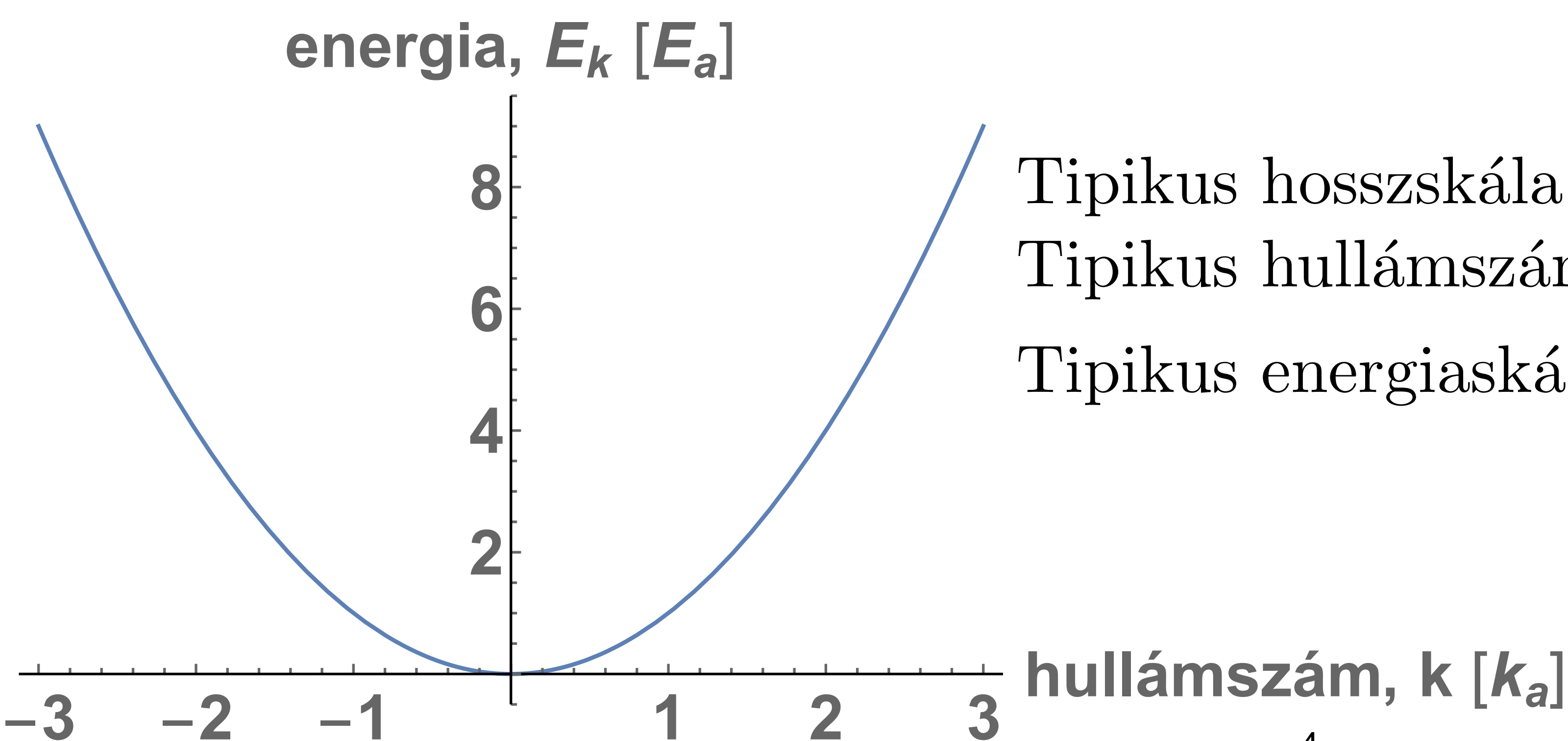
(a) Melyek a stacionárius állapotok (energiasajátállapotok)?

Időfüggetlen SE megoldása: $\psi(x) \equiv \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\mathrm{e}}$

Bizonyítás:

$$\hat{H}\psi_k(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}} \partial_x \left(\partial_x \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}} \partial_x \left(ik \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \right)$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{e}} (ik)(ik) \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\mathrm{e}} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = E_k \psi_k(x)$$

Elnevezés: *szabad elektronok diszperziós relációja*: $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\mathrm{e}}$



Tipikus hosszskála: rácsállandó, a

Tipikus hullámszámskála: inverz rácsállandó, $k_a = 1/a$

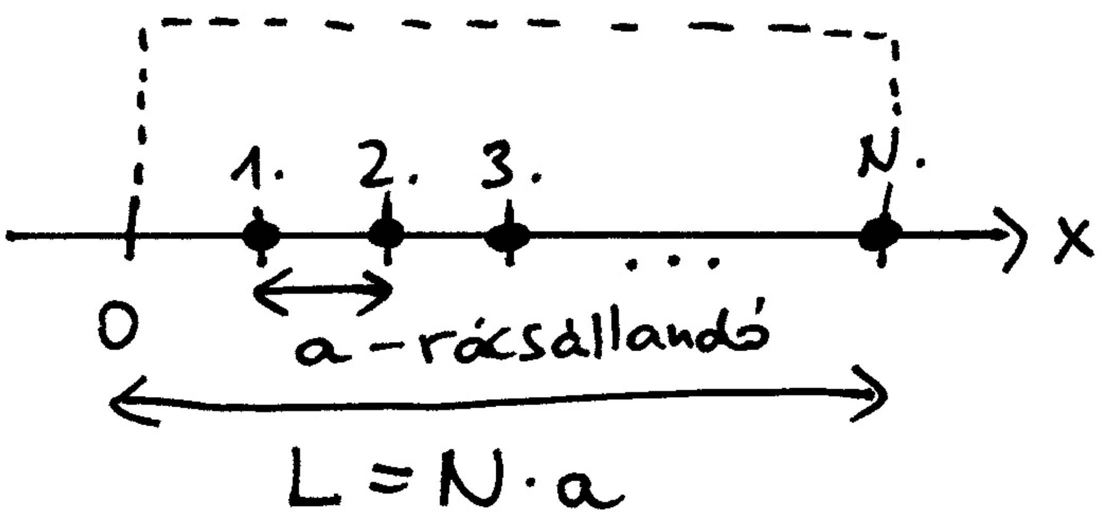
Tipikus energiaskála: $E_a = \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m_\mathrm{e}}$

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

(a) Melyek a stacionárius állapotok (energiasajátállapotok)?

Időfüggetlen SE megoldása: $\psi(x) \equiv \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

Megjegyzés: a k hullámszám nem lehet tetszőleges a periodikus határfeltétel miatt:



$$\psi_k(x=0) = \psi_k(x=L)$$

$$\rightarrow e^{ik\cdot 0} \equiv 1 = e^{ikL}$$

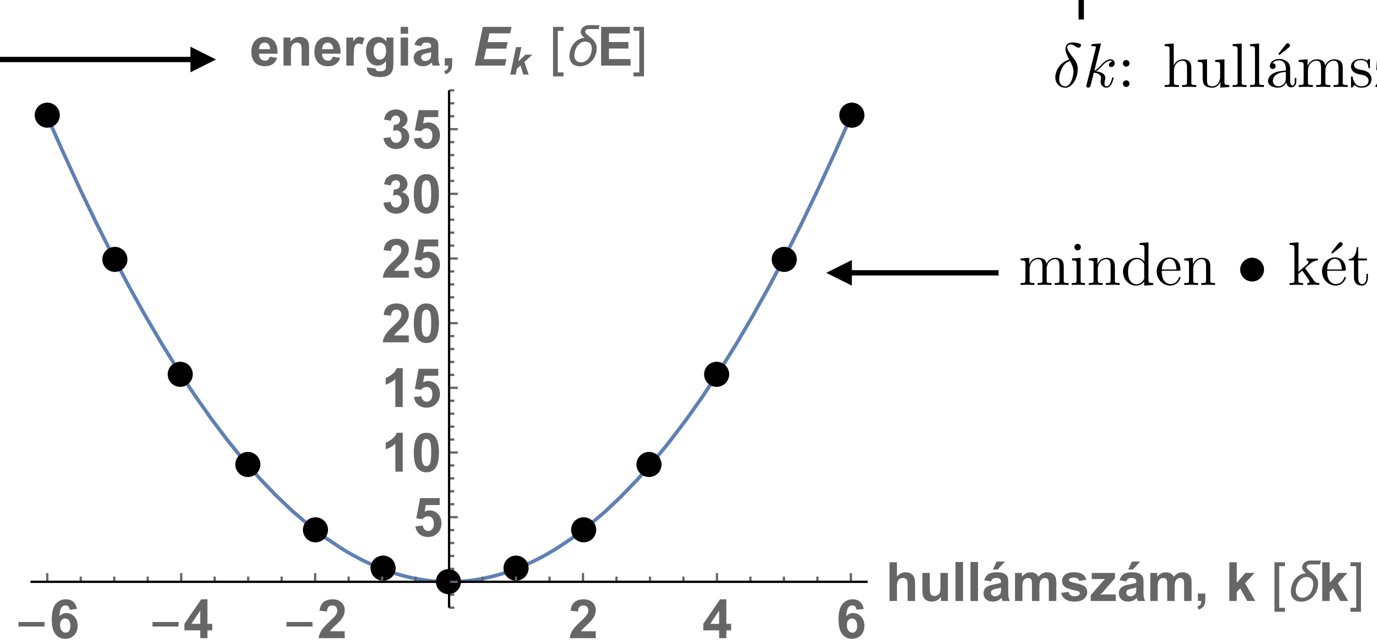
$$\rightarrow kL = 2\pi m \ (m \text{ egész szám})$$

$$\rightarrow k = \frac{2\pi}{L} m \equiv \delta k\, m$$

δk: hullámszám-kvantum

$$\delta E = \frac{\hbar^2 \delta k^2}{2m_e}$$

Energiaspektrum ábrázolása:



minden • két állapotot jelöl (spin)

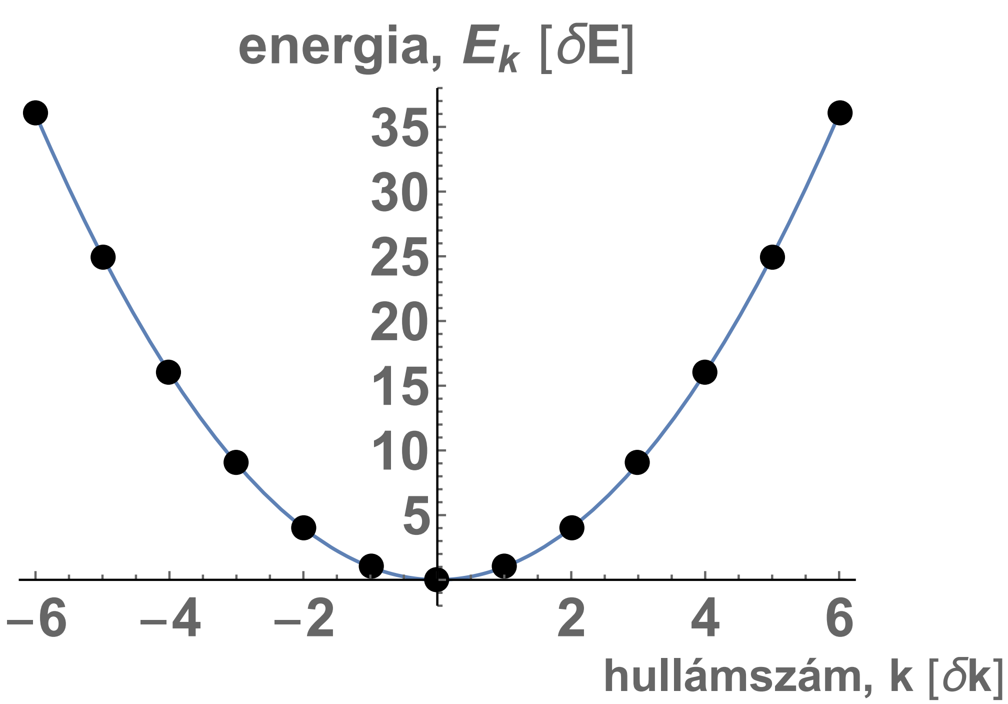
(b) Mekkora áramot visznek a stacionárius állapotok?

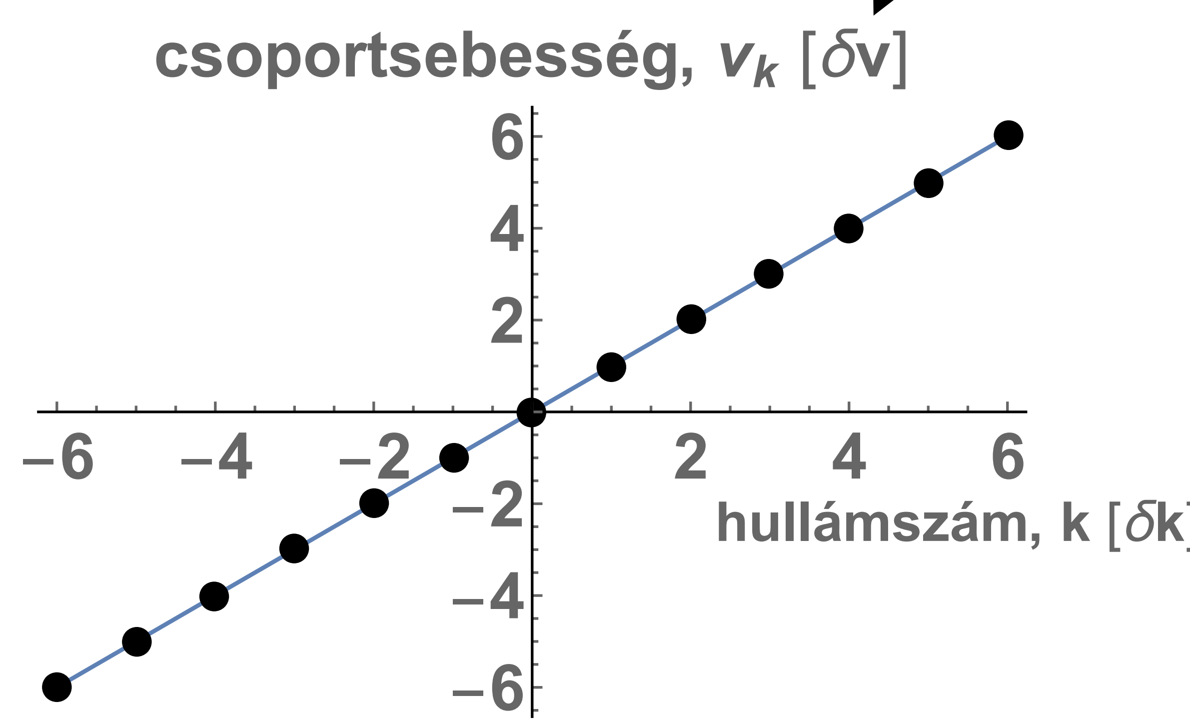
Állítás: a k hullámszámú állapot árama/áramsűrűsége

$$I_k = j_k = -\frac{e}{L} v_k = -\frac{e}{L}\frac{\hbar k}{m_e}$$

$$\text{csoportsebesség: } v_k = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar k}{m_\mathrm{e}}$$

$$\delta v = \frac{\hbar\,\delta k}{m_\mathrm{e}}$$





II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

(b) Mekkora áramot visznek a stacionárius állapotok?

Állítás: a k hullámszámú állapot árama/áramsűrűsége

$$I_k = j_k = -\frac{e}{L} v_k = -\frac{e}{L} \frac{\hbar k}{m_e}$$

csoportsebesség: $v_k = \dfrac{1}{\hbar} \dfrac{dE}{dk} = \dfrac{\hbar k}{m_\mathrm{e}}$

Bizonyítás:

részecske-áramsűrűség: $j_{\mathrm{r},k}(x) = \mathrm{Re}\left(\psi_k(x) \frac{\hat{p}}{m_\mathrm{e}} \psi_k(x)\right) = \frac{1}{L} \frac{\hbar k}{m_\mathrm{e}}$

elektromos áramsűrűség: $j_k(x) = -e j_{\mathrm{r},k}(x) = -\frac{e}{L} \frac{\hbar k}{m_\mathrm{e}}$

(b) Mekkora áramot visznek a stacionárius állapotok?

Állítás: a k hullámszámú állapot árama/áramsűrűsége

$$I_k = j_k = -\frac{e}{L} v_k = -\frac{e}{L} \frac{\hbar k}{m_e}$$

$$\text{csoportsebesség: } v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar k}{m_\mathrm{e}}$$

Megjegyzés:

$$\text{1D: áram: } [I] = \mathrm{A}, \text{elektromos áramsűrűség: } [j] = \mathrm{A}$$

$$\text{2D: áram: } [I] = \mathrm{A}, \text{elektromos áramsűrűség: } [j] = \mathrm{A/m}$$

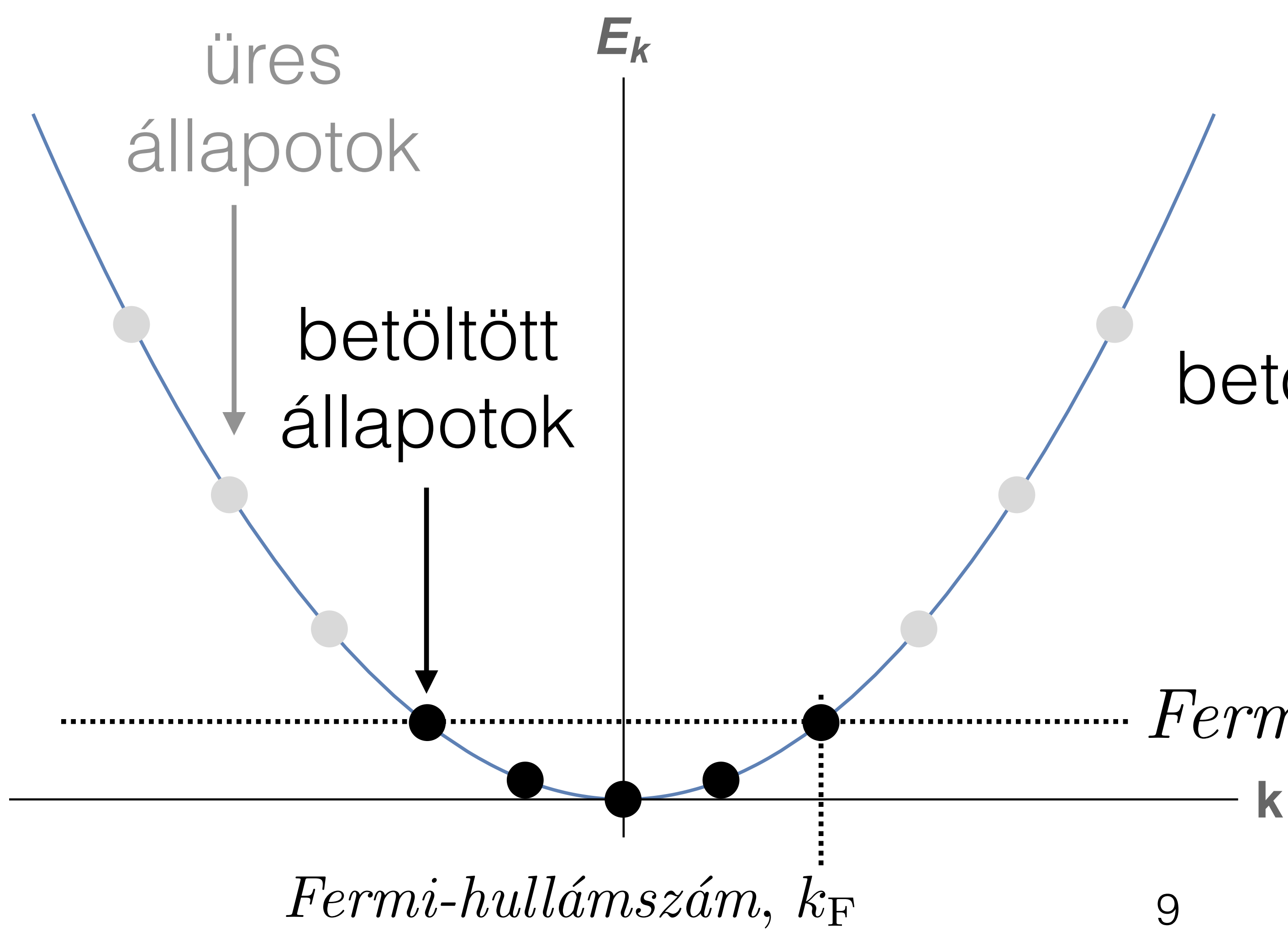
$$\text{3D: áram: } [I] = \mathrm{A}, \text{elektromos áramsűrűség: } [j] = \mathrm{A/m^2}$$

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

(c) Zérus hőmérsékleten ($T = 0$), zérus feszültségnél ($U = 0$) mely stacionárius állapotok vannak betöltve?

Válasz: Pauli-elv és energiaminimum elve alapján.

Példa: $N = 10$ atom, 1 vezetési elektron per atom



Fermi-energia, ε_{F}

$$N_{\mathrm{e}} = 10 \rightarrow \delta k = \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{10a}$$

betöltött állapotok: 10 db (spin miatt)

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\mathrm{e}}} \mapsto k_F = \frac{\sqrt{2m_{\mathrm{e}}\varepsilon_{\mathrm{F}}}}{m_{\mathrm{e}}}$$

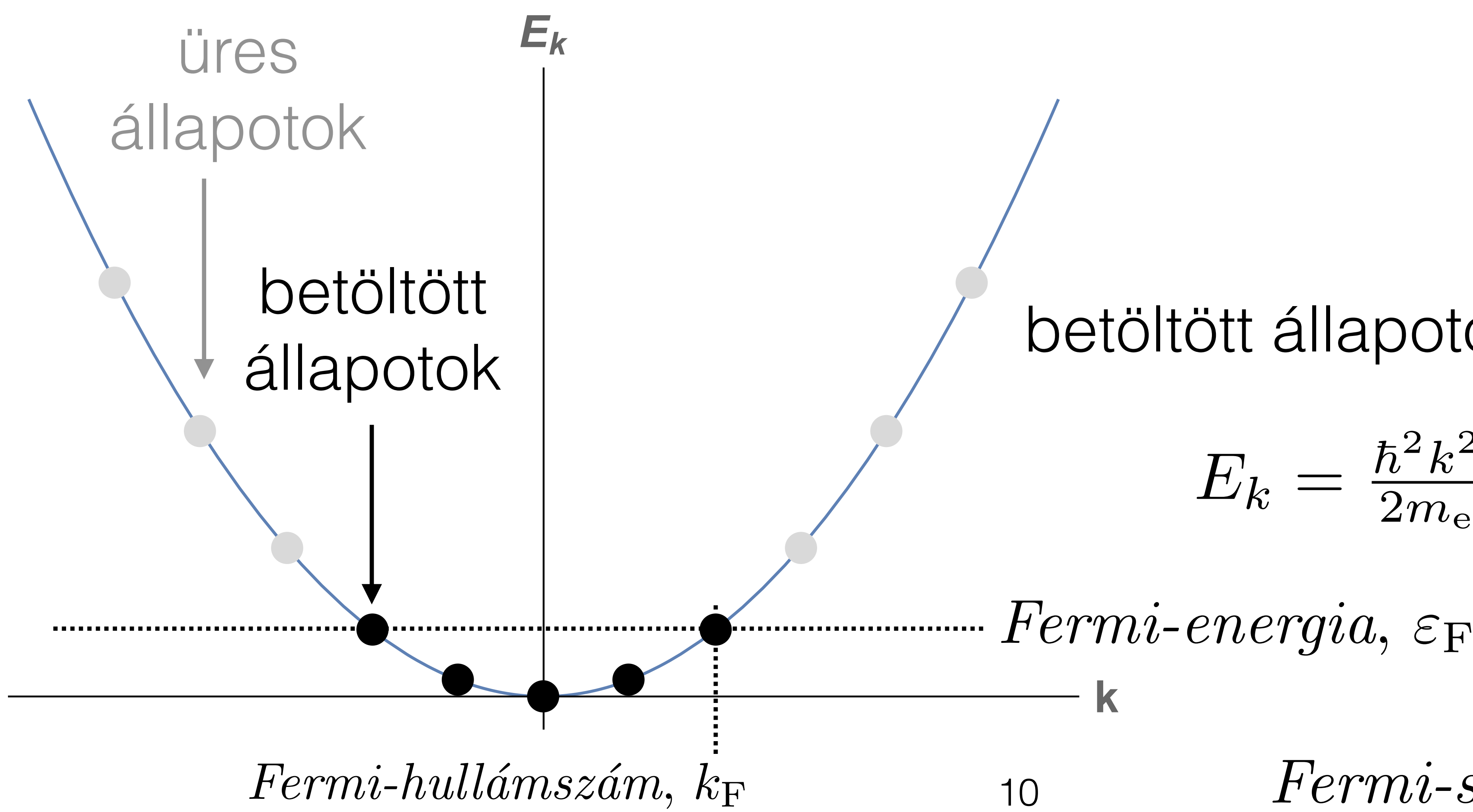
Fermi-sebesség: itt: $v_{\mathrm{F}} = \dfrac{\hbar k_{\mathrm{F}}}{m_{\mathrm{e}}}$

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

Fermi-energia: legmagasabb energiájú betöltött állapot energiája

Fermi-hullámszám: legmagasabb energiájú betöltött állapot hullámszáma

Fermi-sebesség: legmagasabb energiájú betöltött állapot sebessége



betöltött állapotok: 10 db (spin miatt)

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\mathrm{e}} \mapsto k_F = \frac{\sqrt{2m_\mathrm{e}\varepsilon_\mathrm{F}}}{m_\mathrm{e}}$$

Fermi-sebesség: itt: $v_\mathrm{F} = \frac{\hbar k_\mathrm{F}}{m_\mathrm{e}}$

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

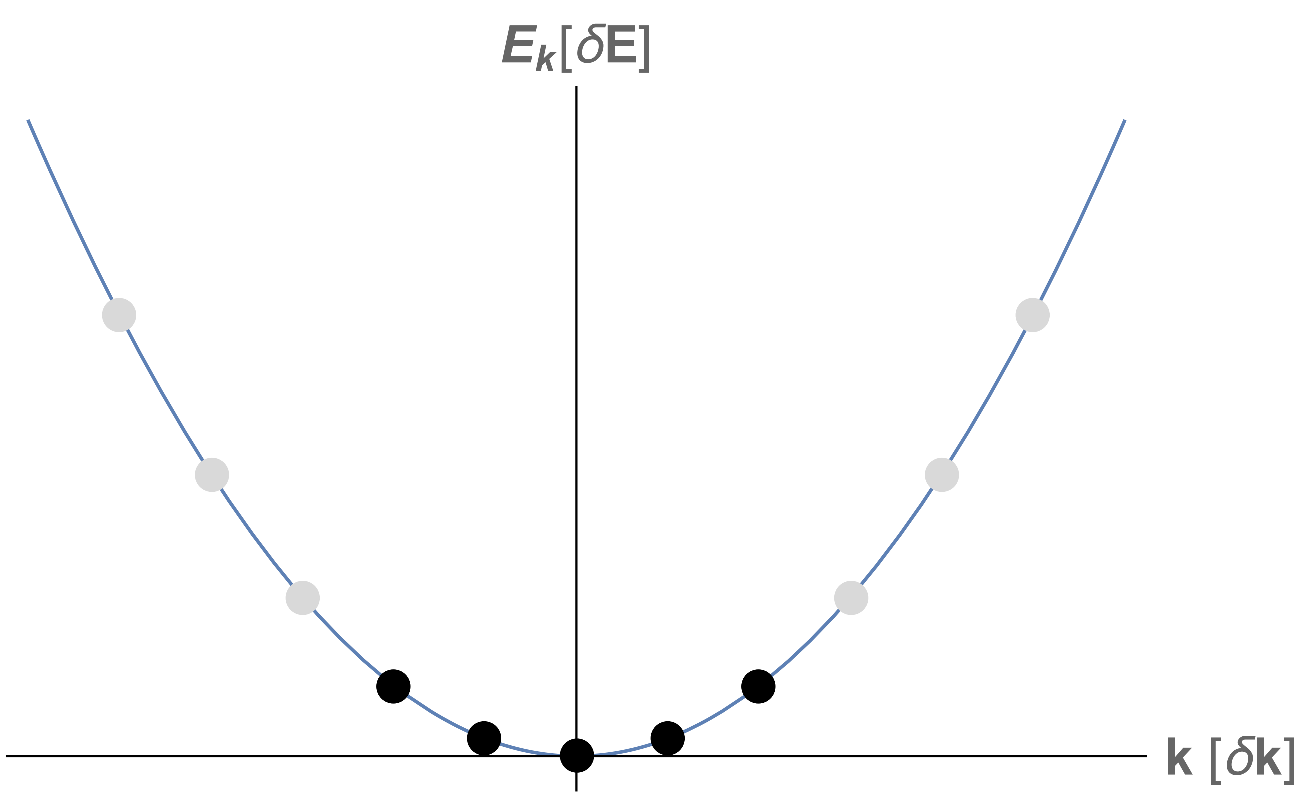
(d) $T = 0$, $U = 0$: mekkora áram folyik?

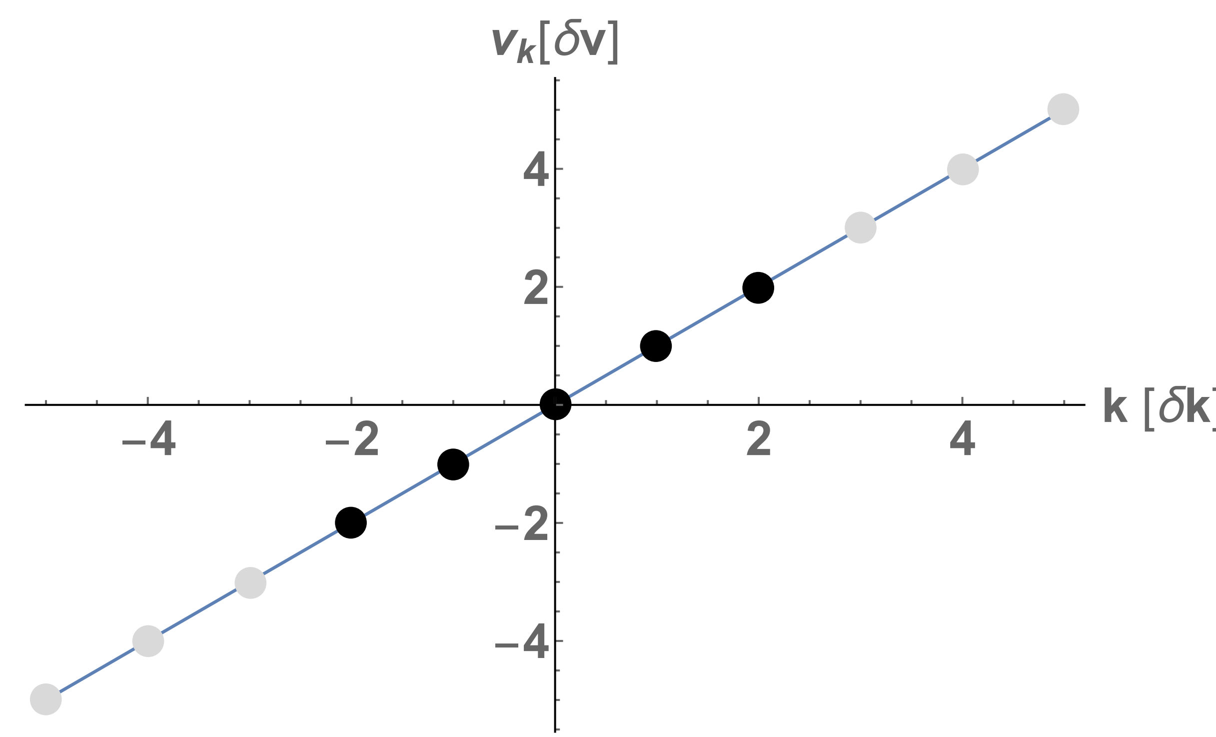
Állítás: az áram nulla, $I = 0$.

hiszen $v_{-k} = -v_k$

Bizonyítás:

$$I = \sum_{k \in \text{betöltött}} I_k = \sum_{k \in \text{betöltött}} \left(-\frac{e}{L}\right) v_k = 0$$





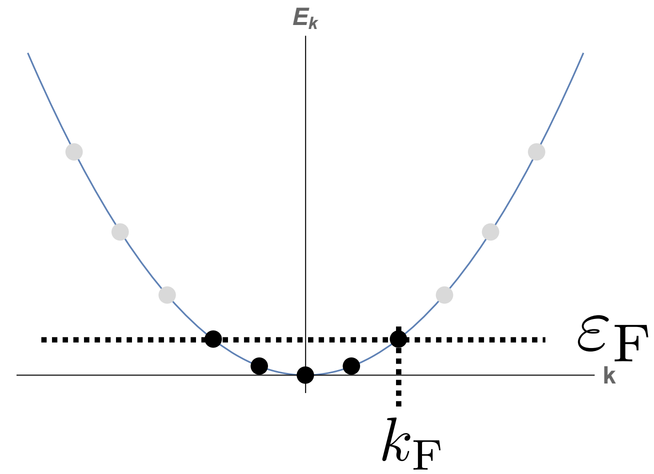
II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

Feladat: 1D Sommerfeld-modell, 1 elektron per atom, $N = N_\mathrm{e} \to \infty$, $a = 2$ Å.

(a) $k_\mathrm{F} = ?$

(b) $\varepsilon_\mathrm{F} = ?$

(c) $v_\mathrm{F} = ?$



(a) N_e darab elektront kell elhelyezni a $[-k_\mathrm{F}, k_\mathrm{F}]$ intervallumban
spin-↑ állapotok száma a $[-k_\mathrm{F}, k_\mathrm{F}]$ intervallumban:

$$\frac{2k_\mathrm{F}}{\delta k} = \frac{2k_\mathrm{F}}{\left(\frac{2\pi}{Na}\right)} = \frac{k_\mathrm{F} a N}{\pi}$$

spin-↓ állapotok száma a $[-k_\mathrm{F}, k_\mathrm{F}]$ intervallumban: ugyanennyi
összes állapot száma a $[-k_\mathrm{F}, k_\mathrm{F}]$ intervallumban: $\frac{2k_\mathrm{F} a N}{\pi}$
az elektronok száma megegyezik a betöltött állapotok számával:

$$N_\mathrm{e} = \frac{2k_\mathrm{F} a N}{\pi} \to k_\mathrm{F} = \frac{\pi}{2a} \approx 7.85 \frac{1}{\mathrm{nm}}$$

(b) $\varepsilon_\mathrm{F} = \frac{\hbar^2 k_\mathrm{F}^2}{2m_\mathrm{e}} \approx 2.35\,\mathrm{eV}$

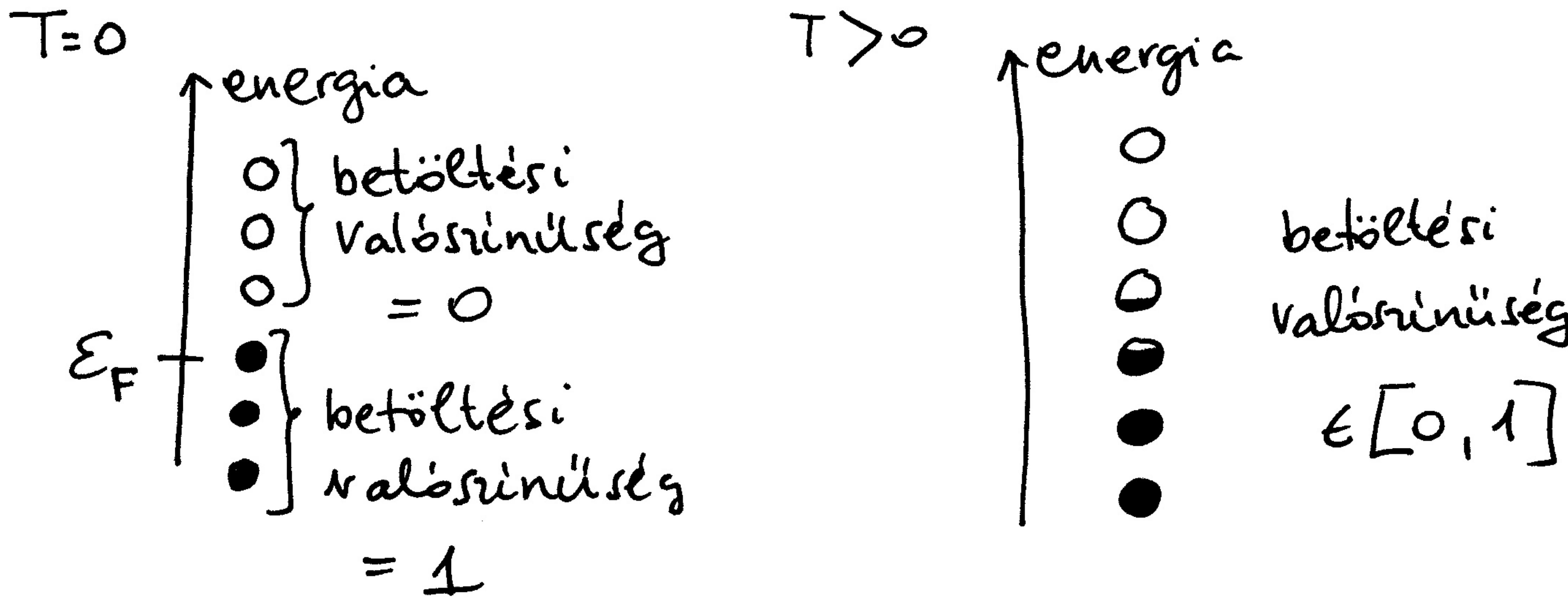
(c) $v_\mathrm{F} = \frac{\hbar k_\mathrm{F}}{m_\mathrm{e}} \approx 9.1 \times 10^5 \mathrm{m/s}$

Megjegyzés: ε_F, k_F, v_F az $N \to \infty$ határesetben jól definiált.

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

Kérdés: $T > 0$, $U = 0$: Mely stacionárius állapotok vannak betöltve? Mekkora áram folyik?

Válasz:



Fermi-Dirac függvény, Fermi-Dirac betöltési függvény:

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

kémiai potenciál

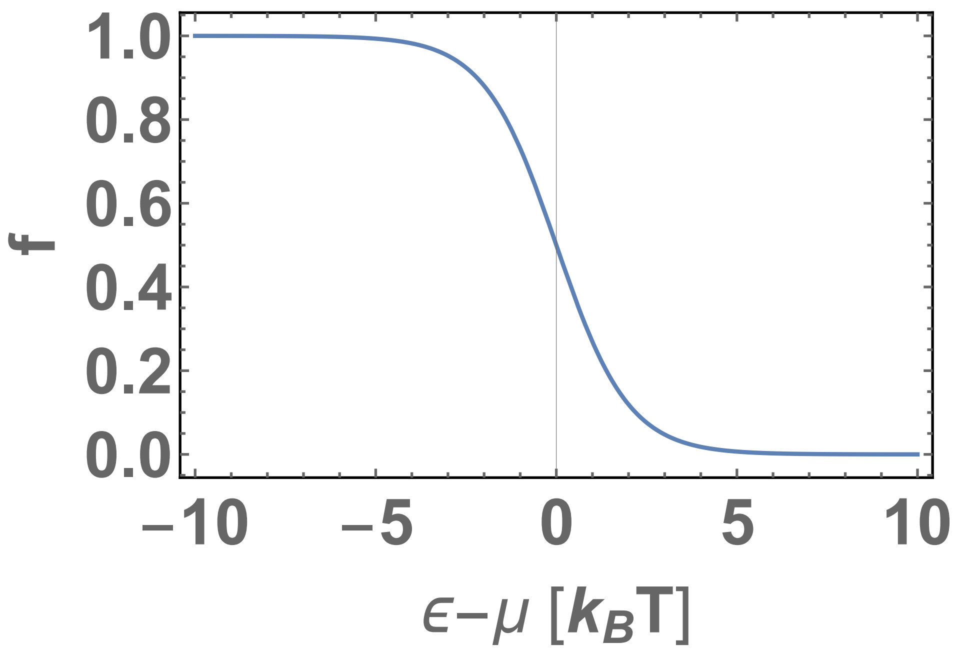
Boltzmann-állandó:
$k_{\mathrm{B}} \approx 1.4 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K} = 1.4 \times 10^{-23}\,\mathrm{m^2\,kg\,s^{-2}\,K^{-1}}$

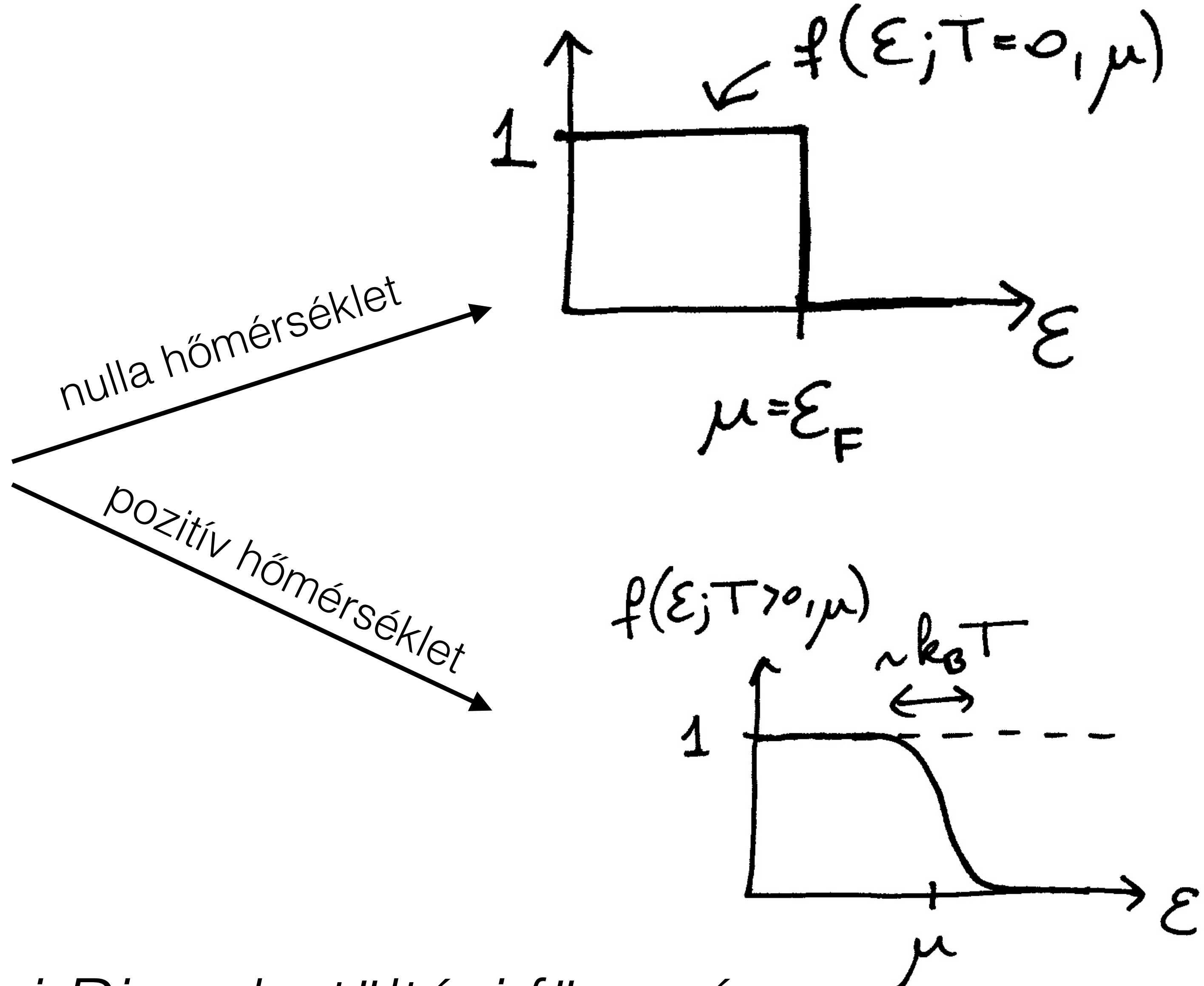
Termikus fluktuációk energiaskálája: $k_{\mathrm{B}} T_{\mathrm{szoba}} \approx 0.03\ \mathrm{eV}$

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

Kérdés: $T > 0$, $U = 0$: Mely stacionárius állapotok vannak betöltve? Mekkora áram folyik?

Válasz:





Fermi-Dirac függvény, Fermi-Dirac betöltési függvény:

$$f(\varepsilon; T, \mu) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_\mathrm{B}T}} + 1}$$

kémiai potenciál

Boltzmann-állandó:
$k_\mathrm{B} \approx 1.4 \times 10^{-23}\mathrm{J/K} = 1.4 \times 10^{-23}\mathrm{m^2\,kg\,s^{-2}\,K^{-1}}$

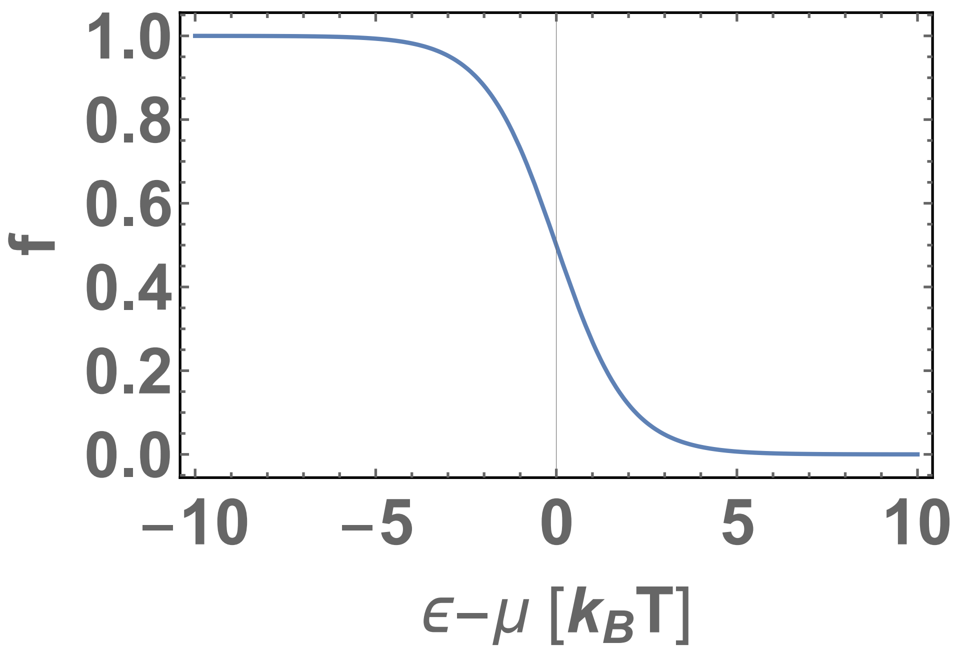
Termikus fluktuációk energiaskálája: $k_\mathrm{B}T_\mathrm{szoba} \approx 0.03$ eV

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

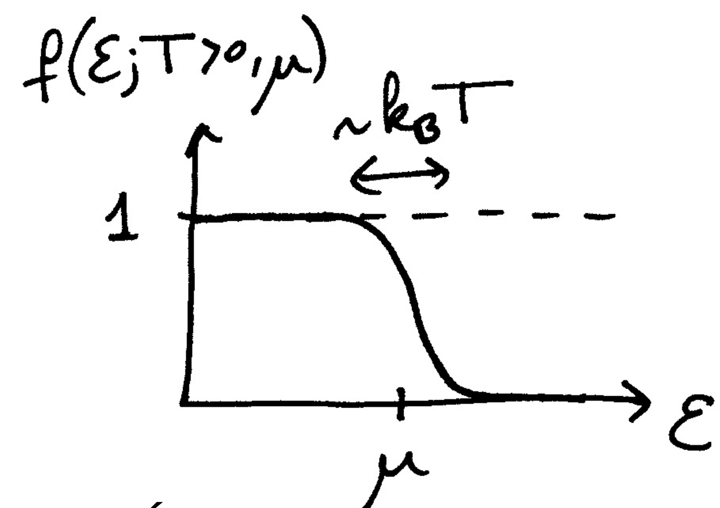
Kérdés: $T > 0$, $U = 0$: Mely stacionárius állapotok vannak betöltve? Mekkora áram folyik?

Válasz:

,,A hőmérsékleti (termikus) fluktuációk fellazítják a betöltési függvényt"



pozitív hőmérséklet



Fermi-Dirac függvény, Fermi-Dirac betöltési függvény:

$$f(\varepsilon; T, \mu) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_\mathrm{B} T}} + 1}$$

kémiai potenciál

Boltzmann-állandó:
$k_\mathrm{B} \approx 1.4 \times 10^{-23}\mathrm{J/K} = 1.4 \times 10^{-23}\mathrm{m^2\,kg\,s^{-2}\,K^{-1}}$

Termikus fluktuációk energiaskálája: $k_\mathrm{B} T_\mathrm{szoba} \approx 0.03$ eV

II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

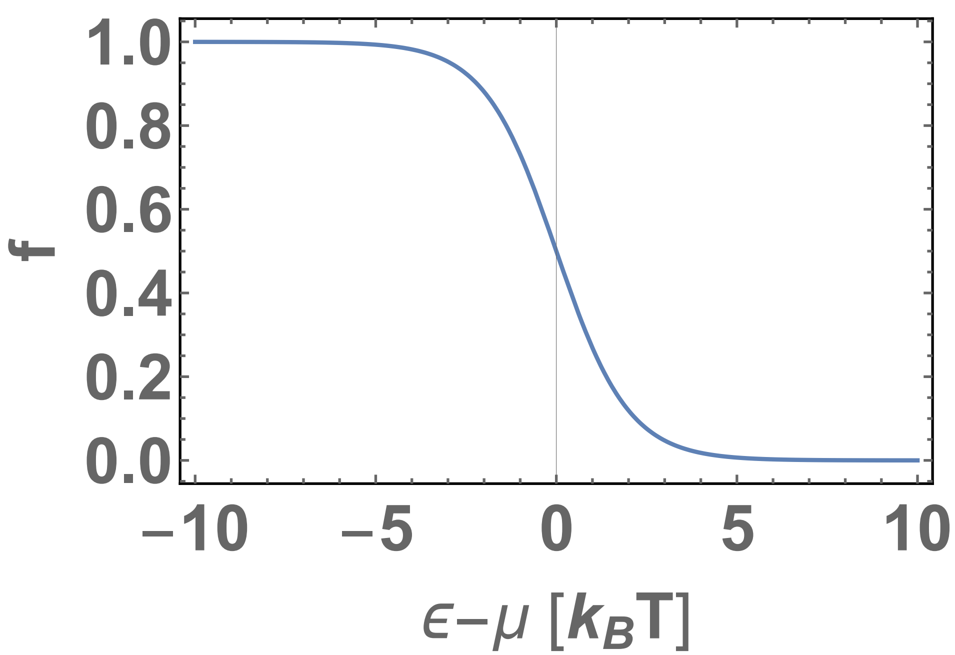
Kérdés: $T > 0$, $U = 0$: Mely stacionárius állapotok vannak betöltve? Mekkora áram folyik?

Válasz:

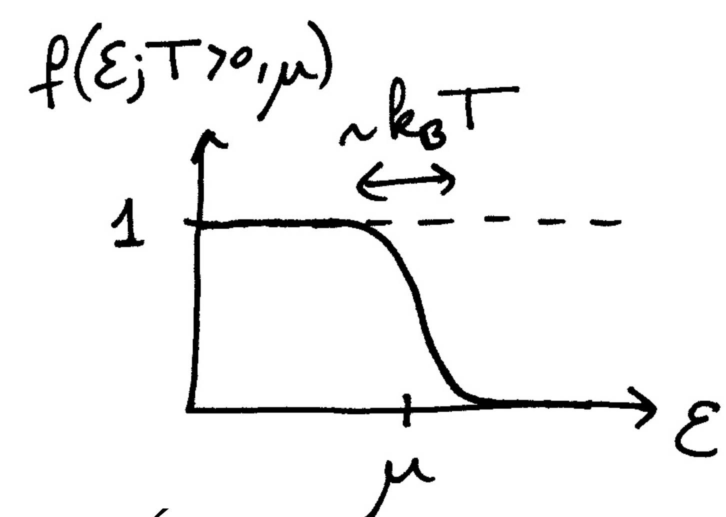
áram:

$$I = \sum_k f(E_k; T, \mu) I_k = -\frac{e}{L} \sum_k f(E_k; T, \mu) v_k = 0$$

mert $v_{-k} = -v_k$ és $f(E_k) = f(E_{-k})$



pozitív hőmérséklet



Fermi-Dirac függvény, Fermi-Dirac betöltési függvény:

$$f(\varepsilon; T, \mu) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_\mathrm{B} T}} + 1}$$

kémiai potenciál

Boltzmann-állandó:
$k_\mathrm{B} \approx 1.4 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K} = 1.4 \times 10^{-23}\,\mathrm{m^2\,kg\,s^{-2}\,K^{-1}}$

Termikus fluktuációk energiaskálája: $k_\mathrm{B} T_\mathrm{szoba} \approx 0.03$ eV

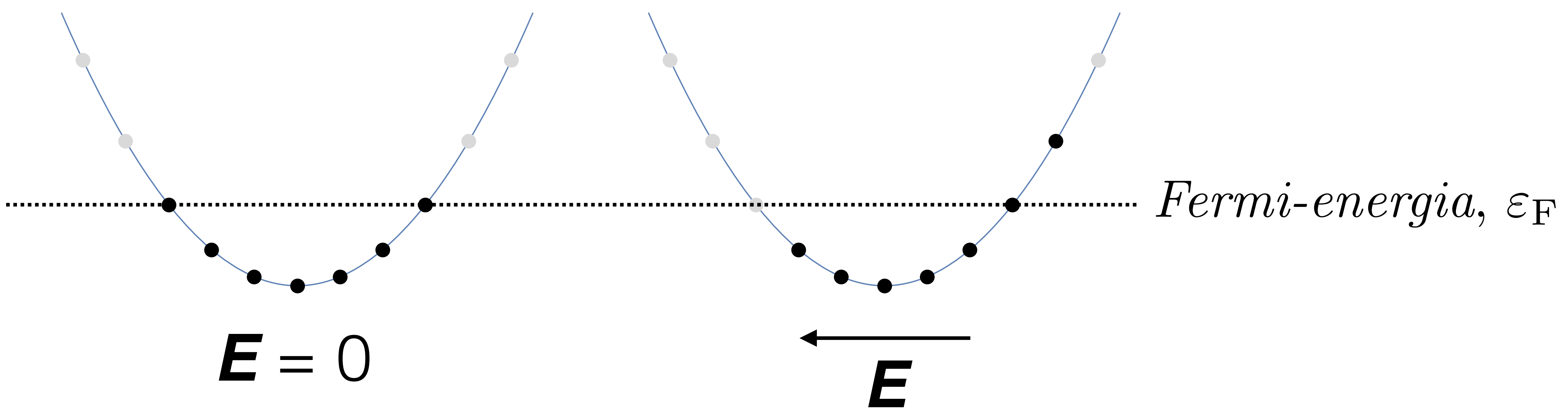
II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

Kérdés: $T = 0$, $U > 0$: Mely stacionárius állapotok vannak betöltve? Mekkora az áram?

Válasz: elektromos tér gyorsítja az elektronokat
$\rightarrow$ elektromos tér átrendezi a betöltési függvényt
$\rightarrow$ nem minden k-ra igaz, hogy $f(E_k) = f(-E_k)$
$\rightarrow$ folyik áram

$$I = \sum_k f(E_k) I_k = 0$$

$$I = \sum_k f(E_k) I_k \neq 0$$



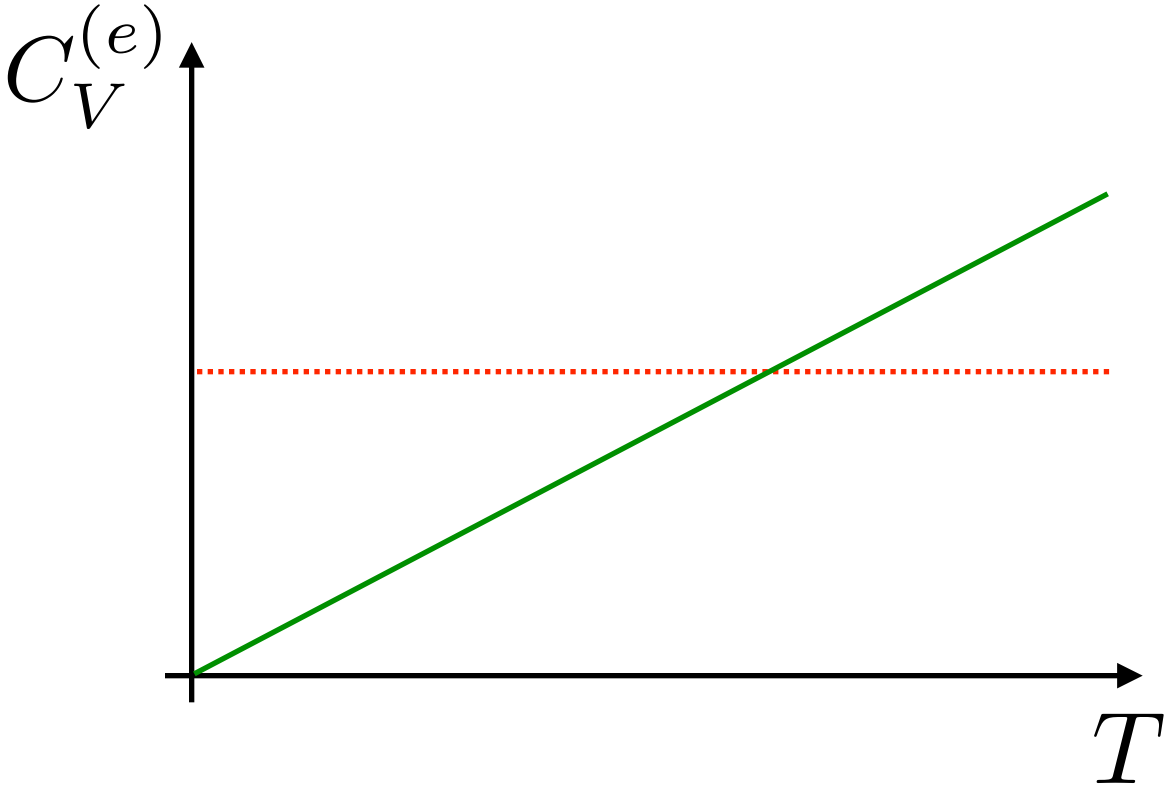
II/C A vezetési elektronok kvantummechanikai Sommerfeld-modellje

Kérdés: Nemkölcsönható elektronok klasszikus és kvantumos modellje: melyik jobb?

Válasz #1: elektronok járuléka az állandó térfogaton vett fajhőhöz:

kvantumos: $C_V^{(e)} \propto T^1$ (ez egyezik a kísérletekkel)

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



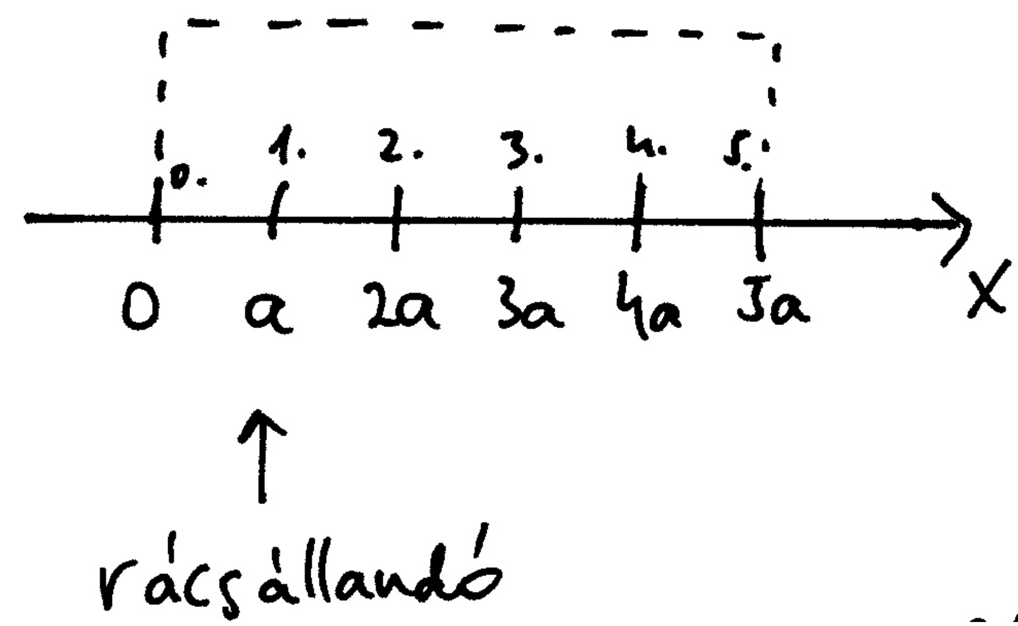
II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Sommerfeld-modell: szabad elektronok

Egyatomos lánc szoroskötésű modellje

atomok száma: $N = 5$



(i) láncon (rácson) ugráló elektronok

(ii) e-e-kölcsönhatást elhanyagoljuk

(iii) 1D kristály (de általánosítható)

(iv) egyfajta atomból áll a lánc

(v) minden atomon egy pályát veszünk figyelembe

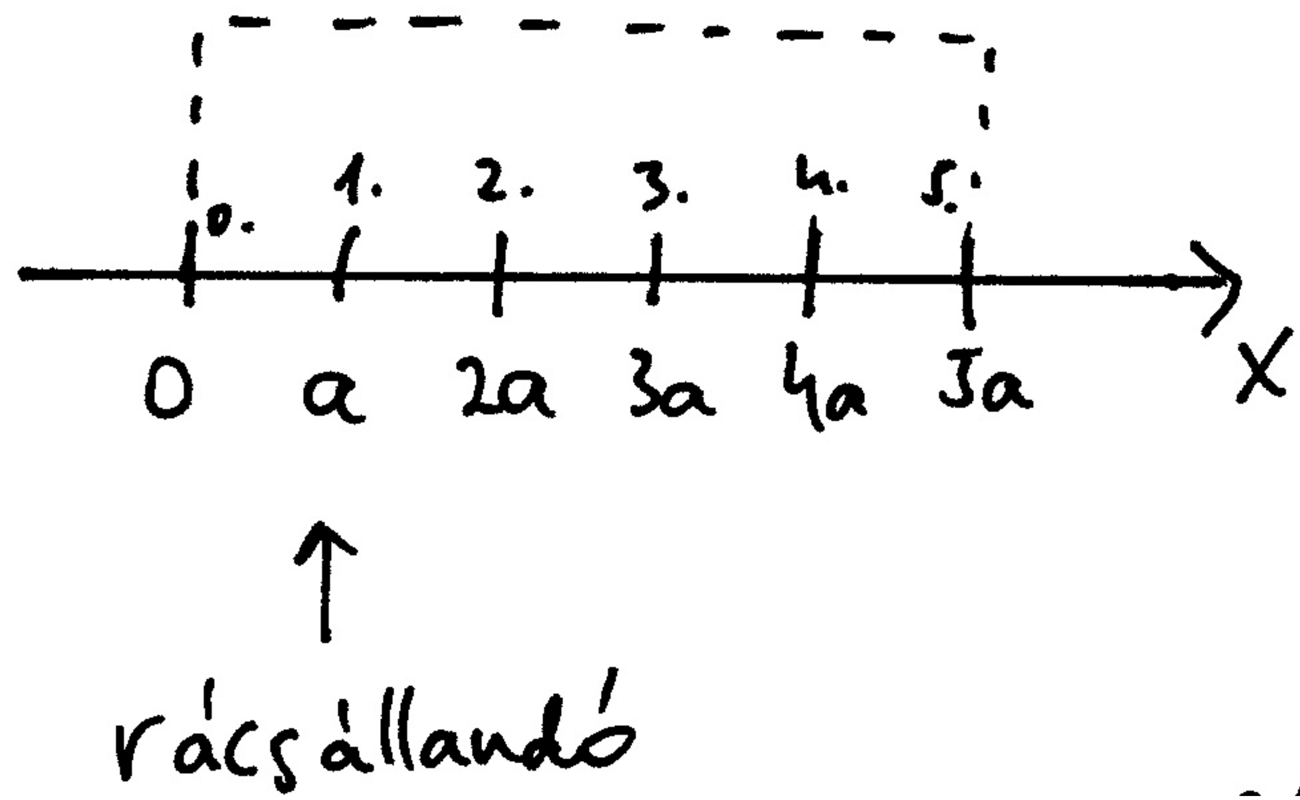
(vi) periodikus határfeltétel (pl.: 0. és 5. atom ugyanaz)

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Elektron állapotjelzője: hullámfüggvény, itt: 5 komplex szám:

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



A hullámfüggvény normált: $\langle\psi|\psi\rangle \equiv \sum_{m=1}^{5} |\psi(m)|^2 = 1$

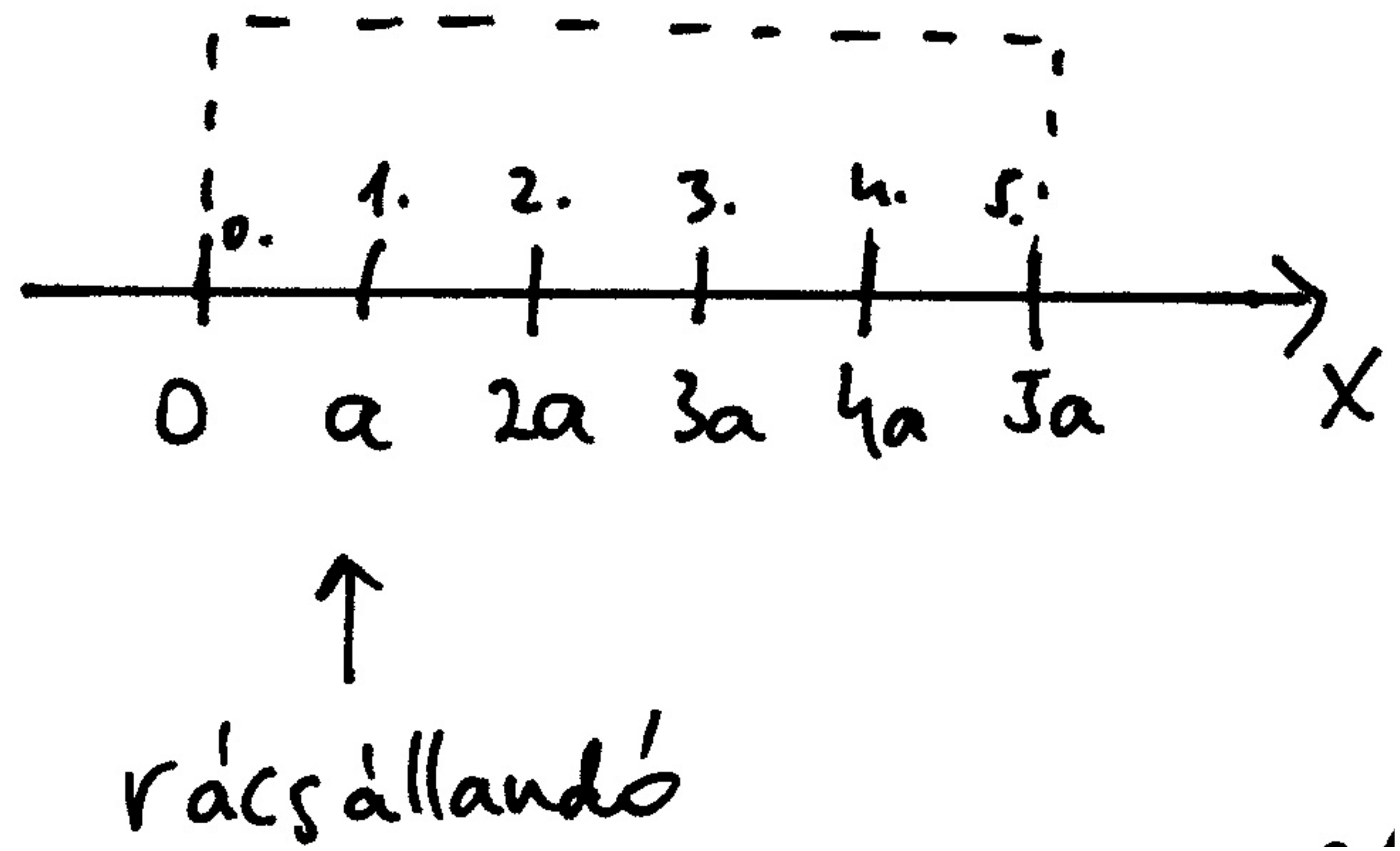
az elektron megtalálási valószínűsége az m-ik atomon

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Hamilton-operátor:

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



t: átugrási mátrixelem, alagutazási mátrixelem, hopping mátrixelem

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

dinamika: időfüggő Schrödinger-egyenlet

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

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Stacionárius állapotok: időfüggetlen Schrödinger-egyenletből

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & t \\ t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 & t \\ t & 0 & 0 & t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \psi(3) \\ \psi(4) \\ \psi(5) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(2) \\ \psi(3) \\ \psi(4) \\ \psi(5) \end{pmatrix}$$

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Stacionárius állapotok: időfüggetlen Schrödinger-egyenletből

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$z = e^{i2\pi/5}$$

diszkrét síkhullámok

energia	$2t$	$2t\cos(2\pi/5)$	$2t\cos(4\pi/5)$	$2t\cos(6\pi/5)$	$2t\cos(8\pi/5)$
ψ	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z\\z^2\\z^3\\z^4\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^2\\z^4\\z^6\\z^8\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^3\\z^6\\z^9\\z^{12}\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^4\\z^8\\z^{12}\\z^{16}\\1\end{pmatrix}$

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Stacionárius állapotok: időfüggetlen Schrödinger-egyenletből

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$z = e^{i2\pi/5}$$

diszkrét síkhullámok

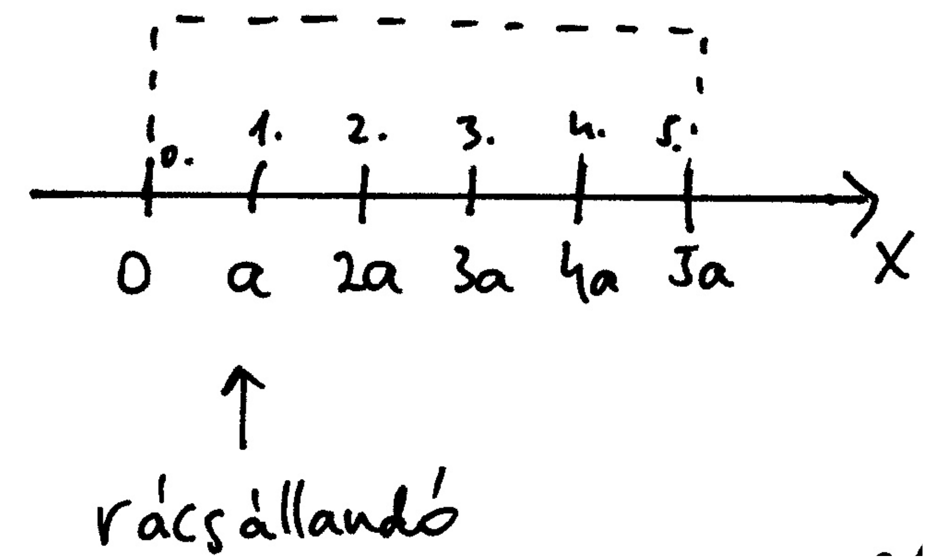
energia	$2t$	$2t\cos(2\pi/5)$	$2t\cos(4\pi/5)$	$2t\cos(6\pi/5)$	$2t\cos(8\pi/5)$
ψ	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z\\z^2\\z^3\\z^4\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^2\\z^4\\z\\z^3\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^3\\z\\z^4\\z^2\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^4\\z^3\\z^2\\z\\1\end{pmatrix}$

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Stacionárius állapotok: időfüggetlen Schrödinger-egyenletből

energia	$2t$	$2t\cos(2\pi/5)$	$2t\cos(4\pi/5)$	$2t\cos(6\pi/5)$	$2t\cos(8\pi/5)$
ψ	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z\\z^2\\z^3\\z^4\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^2\\z^4\\z\\z^3\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^3\\z\\z^4\\z^2\\1\end{pmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}z^4\\z^3\\z^2\\z\\1\end{pmatrix}$



Általános N esetén:

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

$$\psi_k(m) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik(ma)}$$

N db különböző sajátérték-sajátvektor pár

... ahol $k \in \{0, \delta k, 2\delta k, \ldots, (N-1)\delta k\}$ és $\delta k = \frac{2\pi}{Na}$

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

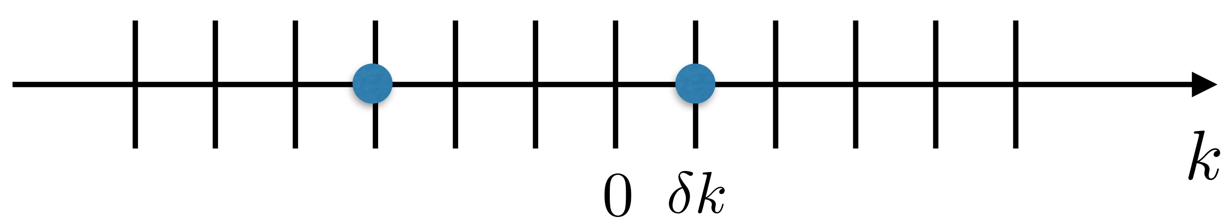
Állítás: Legyen k egy megengedett hullámszám (azaz egész számszor δk),

és legyen $k' = k + \frac{2\pi}{a}\, l$, ahol l egész.

Ekkor k sajátérték-sajátvektor párja ugyanaz mint a k' sajátérték-sajátvektor párja.

(Ezért ilyenkor k-t és k'-t *ekvivalens hullámszámoknak* hívjuk.)

példa: $N = 5$, $k = -4\,\delta k$, $l = 1$, $k' = \delta k$



II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

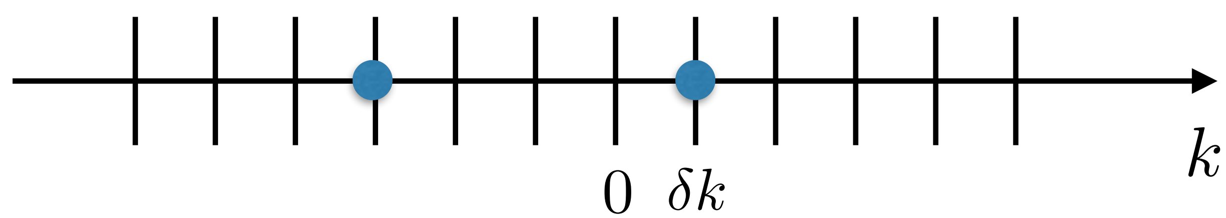
Állítás: Legyen k egy megengedett hullámszám (azaz egész számszor δk),

és legyen $k' = k + \frac{2\pi}{a} l$, ahol l egész.

Ekkor k sajátérték-sajátvektor párja ugyanaz mint a k' sajátérték-sajátvektor párja.

(Ezért ilyenkor k-t és k'-t *ekvivalens hullámszámoknak* hívjuk.)

példa: $N = 5,\ k = -4\,\delta k,\ l = 1,\ k' = \delta k$



Bizonyítás:

$$E_{k'} = E_{k+2\pi l/a} = 2t\cos\left[(k + 2\pi l/a)a\right] = 2t\cos(ka + 2\pi l) = 2t\cos(ka) = E_k$$

$$\psi_{k'}(m) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik'ma} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(k+2\pi l/a)ma} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikma} e^{i2\pi lm} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikma} = \psi_k(m)$$

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

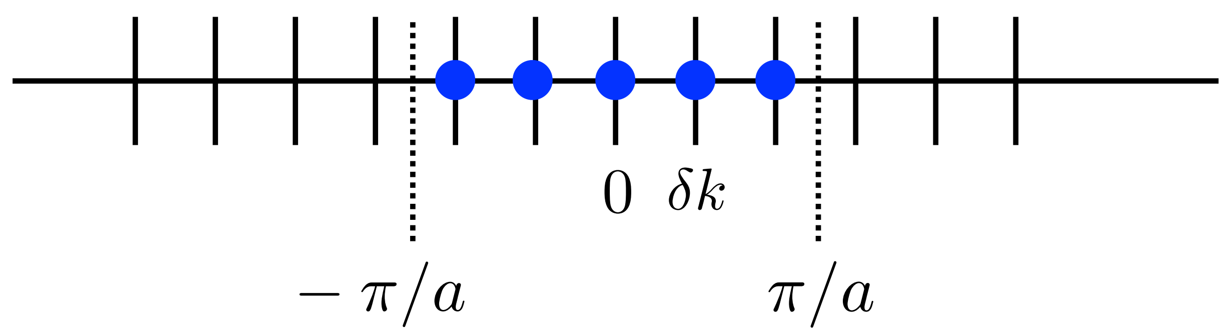
Állítás: Legyen k egy megengedett hullámszám (azaz egész számszor δk),

és legyen $k' = k + \frac{2\pi}{a} l$, ahol l egész.

Ekkor k sajátérték-sajátvektor párja ugyanaz mint a k' sajátérték-sajátvektor párja.

(Ezért ilyenkor k-t és k'-t *ekvivalens hullámszámoknak* hívjuk.)

példa: $N = 5$



Az $(E_k,\, \psi_k)$ sajátérték-sajátvektor párok hullámszámait a $]-\pi/a, \pi/a]$ intervallumból szokás választani

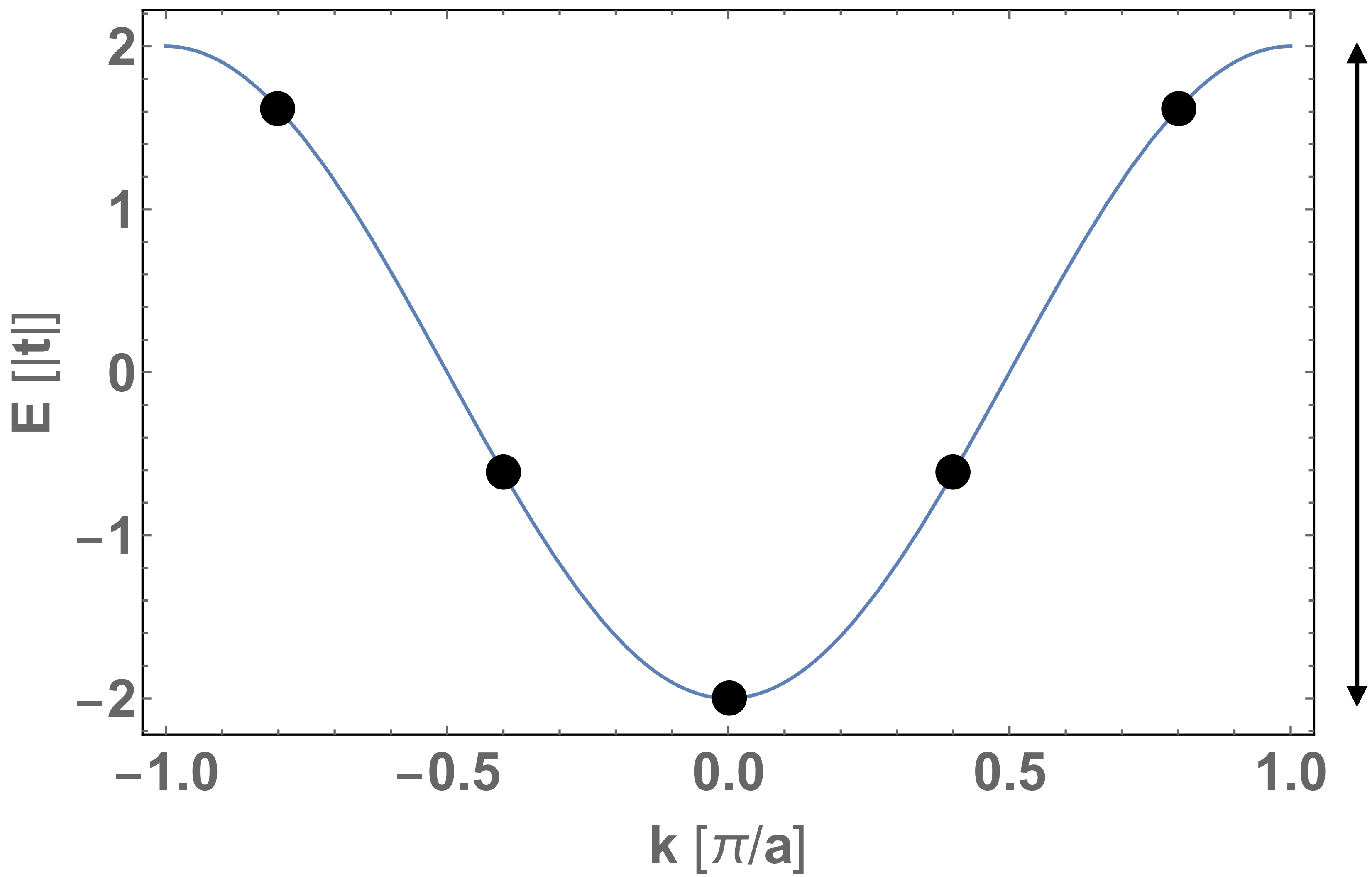
Brillouin-zóna vagy *első Brillouin-zóna*

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Diszperziós reláció, példa: $t < 0,\ N = 5$

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



sáv

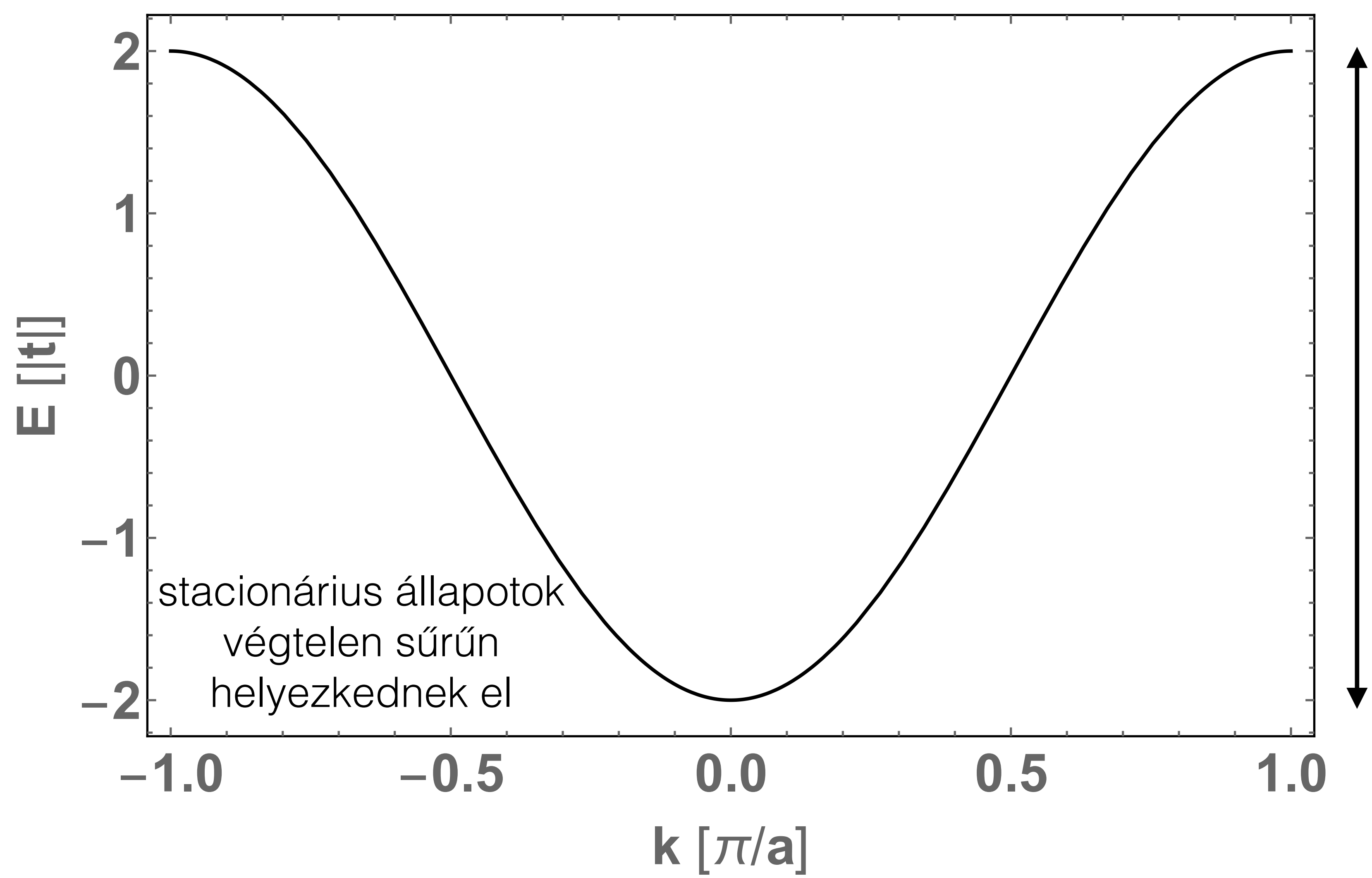
sávszélesség:
$4|t|$

II. Elektronok kristályos szilárdtestekben

II/D Elektronok az egyatomos láncban

Diszperziós reláció, példa: $t < 0,\ N \to \infty$ (ekkor $\delta k = \frac{2\pi}{Na} \to 0$)

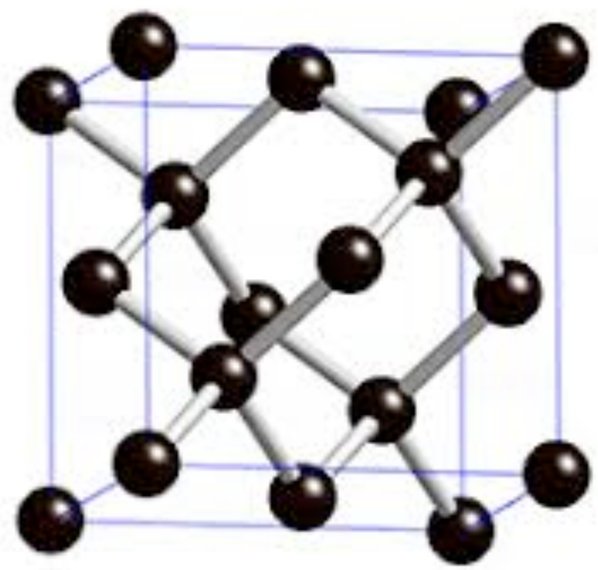
$$E_k = 2t\cos(ka)$$

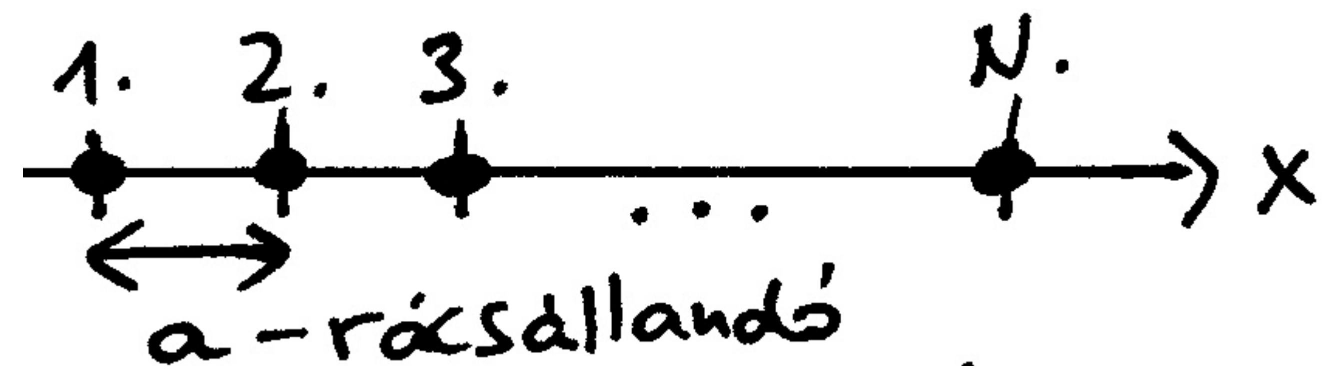


sáv

sávszélesség:
$4|t|$

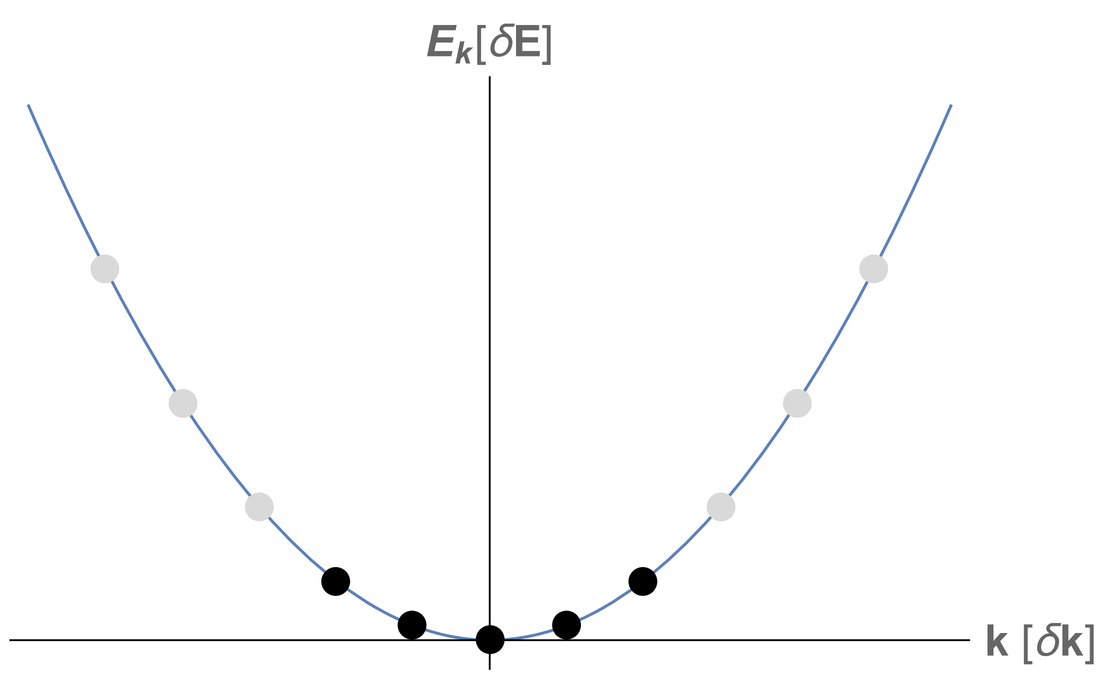
Összefoglalás

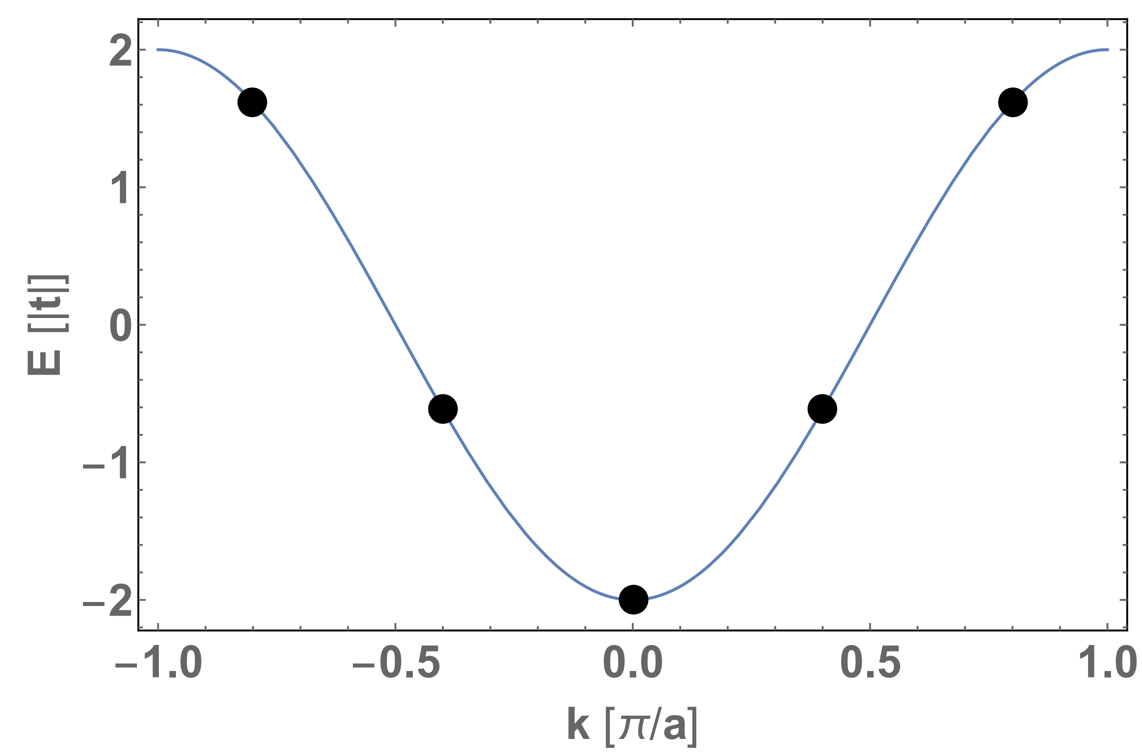




Sommerfeld-modell

szoroskötésű modell





… diszperziós reláció, áram, elektromos tulajdonságok