

## 2. SZILÁRDTESTFIZIKA

### 2.1. A fémek szabadelektron elmélete

A fémek jól vezetnek az elektromos áramot. Tehát az elektromos áramot alkotó elektronok viszonylag „könnyedén” tudnak mozogni a fém belsejében. A fémes kötés ugyanis úgy alakul ki, hogy a fématomok egyesülésekor a vegyérték elektronok „közössé válnak”. Ez azt jelenti, hogy nincsenek a fém atomokhoz kötve, hanem azokról mintegy „leszakadva” a fém teljes makroszkópikus térfogatában mozoghatnak. Első közelítésként azt mondjuk, hogy a fém elektronjai ún. „szabadelektron gázt” alkotnak.

Az elkövetkezőkben a nagyszámú,  $N \gg 1$ , elektront tartalmazó szabadelektron gáz kvantummechanikai tárgyalásával foglalkozunk. Ezt a modellt pár évvel a Schrödinger egyenlet felfedezése (1926) után Sommerfeld már kidolgozta (1928). Egyszerű volta ellenére választ tudott adni egy-két olyan mérési tapasztalatra (kontakt potenciál, fémek fajhője, stb...), amelyek magyarázatánál a klasszikus fizika csődöt mondott.

#### 2.1.1. A Sommerfeld fémmodell

A fém vezetési elektronjai a fémrácsot alkotó iontörzsek terében mozognak, ugyanakkor egymással is kölcsönhatásban vannak. Ezt az igen bonyolultnak tűnő kvantummechanikai problémát alkalmas modellválasztással, egyszerűen meg lehet oldani.

Mint azt már tanultuk, sokelektronos rendszerek esetén mindig egyelektron közelítést alkalmazunk. Az egyelektron állapotokat meghatározó Schrödinger egyenletben figyelembe kell vennünk az elektronok közötti kölcsönhatást is. Jelen esetben ennek a legegyszerűbb módja a következő. Bármelyik fémelektron egyrészt az iontörzsekkel, másrészt a többi elektronnal van kölcsönhatásban. Vegyünk egyszerűségképpen egy egy-vegyértékű fém! Ekkor az iontörzsek száma megegyezik a fémes kötést létrehozó elektronok számával. Tehát bármelyik elektront tekintve a pozitív töltésű iontörzsek és a többi, negatív töltésű elektron száma gyakorlatilag megegyezik ( $N \approx N - 1$ ,  $N \gg 1$ ), ezért semlegesítik egymást. Tehát az elektron szabadon mozoghat az egész fém belsejében. Ugyanakkor tapasztalati tény, hogy normál körülmények között az elektron nem lép ki a fémből. Ezt úgy fogjuk modellezni, hogy az elektront egy potenciáldobozba tesszük. A doboz mérete a fém makroszkópikus méretével egyezik meg és az egyszerűség végett kocka alakú. (2. füzet, 75. oldal.)

Az egyelektron pályaalapotokat tehát egy dobozba zárt elektron Schrödinger egyenlete határozza meg. A kvantummechanikai tanulmányaink során ezt az egyenletet már megoldottuk (1. füzet, 19-20. oldal). Eszerint egy pályaalapot három kvantumszámmal az  $\{n_x, n_y, n_z\}$ -vel jellemezhető. Az energiaszinteket pedig e három kvantumszám négyzetösszege határozza meg. A pályaalapotok degeneráltak.

Ezeket a pályaalapotokat kell, a Pauli-elv szerint, az  $N$  számú elektronnal betölteni. Mivel az  $N$  nagyon nagy (Avogadro számnyi!) ezért a betöltött állapotok majd mindegyike relatíve magas energiaszintekhez fog tartozni. Ez azt jelenti, hogy az  $\varepsilon_i$  kvantált energiaszintek relatív távolsága igen kicsi lesz. (1. füzet, 18. oldal.)

Azaz folytonos energiaskálára térhetünk át. Ekkor a „ $d_i$ ” degeneráció helyett bevezetjük az  $g(\varepsilon)$  állapotsűrűség fogalmát. (2. Füzet, 80. oldal.) Eszerint a  $g(\varepsilon)d\varepsilon$  azon állapotok számát jelenti, amelyek energiája az  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$  tartományba esik. A Pauli elv szerint minden pályaalapothoz két spin-állapot is tartozik. Tehát a teljes (spinpálya)  $g(\varepsilon)$  állapotsűrűség az  $N(\varepsilon)$  pályaalapot sűrűség kétszerese lesz.

Határozzuk meg az  $N(\varepsilon)$  pályaalapot sűrűséget! Minden pályaalapotot három kvantumszám az  $(n_x, n_y, n_z)$  határoz meg. Ezért az  $\{n_x, n_y, n_z\}$  koordinátarendszerben egy pont egy pályaalapotot fog reprezentálni. A kvantumszámok értéke csak pozitív egész szám lehet. Egy adott állapothoz tartozó energiaszint értéke  $\varepsilon_i = E_0(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ .

Tekintsük azokat az állapotokat, amelyek energiája az  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$  tartományba esik! Ezen állapotokat reprezentáló pontok az  $\{n_x, n_y, n_z\}$  koordináarendszerben egy gömbhéj nyolcadban vannak. Mivel az  $n_i$  kvantumszámok csak pozitív egész számokat vehetnek fel, ezért minden egyes egységnyi térfogatban csak egy reprezentáns pont van. Ezért az  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$  tartományban lévő állapotok száma megegyezik az említett gömbhéj-nyolcad térfogatával. Így meghatározható a pályaállapot sűrűség, amelyre az adódik, hogy  $N(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon}$ .

Az állapotok betöltését az  $f^{FD}(\varepsilon, T)$  Fermi-Dirac eloszlásfüggvény határozza meg. Bevezetjük az elektronok energia szerinti eloszlását megadó  $n(\varepsilon)$  függvényt. Eszerint az  $n(\varepsilon)d\varepsilon$  megadja azon elektronok számát, amelyeknek az energiája az  $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$  tartományban van.

Az alapállapotú (nulla Kelvin hőmérsékletű) elektrongázban az  $\varepsilon_{F0}$  Fermi-energia szint alatt minden állapot be van töltve fölül pedig minden állapot üres. A betöltött állapotok száma tehát éppen N kell, hogy legyen. Ez a feltétel a Fermi szintet egyértelműen meghatározza. Eredményül az adódik, hogy az  $\varepsilon_{F0}$  értéke az illető fém térfogati elektronsűrűségétől függ.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 3. oldal

Érdeemes megvizsgálni azt, hogy az imént kapott  $\varepsilon_{F0}$  érték a "hétköznapi" energiákhoz képest mekkora? Az összehasonlítást azonban nem az energia skálán, hanem a nála sokkal szemléletesebb hőmérséklet skálán fogjuk elvégezni. Erre szolgál a  $T_F$  az ún. „Fermi hőmérséklet” fogalma. Ismeretes, hogy a klasszikus ideális gáz átlagenergiája, az ekvipartíció törvénye szerint, a gáz hőmérsékletével arányos.

A  $T_F$  Fermi hőmérsékleten értjük **annak az ideális gáznak a hőmérsékletét, amelynek az átlagenergiája megegyezik a nulla Kelvin fokos elektrongáz átlagenergiájával.**

A fémek esetén a  $T_F$  kb. 10 000 Kelvinnek adódik. (Összehasonlításul, a napkorona hőmérséklete kb. 6000 Kelvin). Tehát a Pauli elvből adódó Fermi energia a klasszikus fizikai energiaskálán meglehetősen nagy érték. Ez azt is jelenti, hogy ha a fém hőmérséklete (pár száz fokkal) megemelkedik, akkor a vezetési elektronjainak az átlagenergiája relatíve alig változik. Tehát a szobahőmérsékletű fém vezetési elektronjait nulla Kelvin fokos elektrongáznak lehet tekinteni. (Ugyanis a 300 Kelvin sokkal kisebb mint a 10 000 Kelvin!)

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 4. oldal

## 2.1.2. A szabadelektron modell alkalmazásai

A Sommerfeld féle szabadelektron modell mai szilárdtestfizikai ismereteinkhez képest nagyon primitívnek tűnhet. Megszületése (1928) mégis rendkívül nagy jelentőségű volt. Először sikerült ugyanis segítségével olyan jelenségeket megmagyarázni, amelyekkel szemben a klasszikus fizika tehetetlennek bizonyult.

### 2.1.2.1. A szabad elektrongáz fajhője

Az elektronok  $n(\varepsilon)$  energia szerinti eloszlását a  $2N(\varepsilon)$  állapotsűrűség függvény és az  $f^{FD}(\varepsilon, T)$  Fermi-Dirac eloszlásfüggvény szorzata adja meg. Az előzőekből következik, de a részletes számítás is azt bizonyítja, hogy a T hőmérsékletű szabad elektrongáz  $\varepsilon_F(T)$  Fermi energiája a "hétköznapi" hőmérsékleti tartományban gyakorlatilag  $\varepsilon_{F0}$  értékűnek vehető. A Fermi Dirac eloszlásfüggvény nulla Kelvinen egy lépcsőfüggvény. A T hőmérsékleten ez kissé "lekerkedik". A változás azonban az  $\varepsilon_{F0}$  értéknek csak körülbelül a 4kT nagyságú környezetére korlátozódik. Ez fizikailag azt jelenti, hogy csak azok az elektronok kerülhetnek magasabb energiájú állapotba (azok gerjesztődnek), amelyeknek a kezdeti energiája a Fermi szint közelében

volt. A T hőmérsékleten a gerjesztett elektronok  $N_g$  száma az N összelektron számnak csak a töredéke, közelítőleg a

$T/T_F$  hányada. A T hőmérsékletű elektrongáz energiája tehát az alapállapot energiától csak kevéssé ( $N_g kT$  - vel) tér el. Ez azt is jelenti, hogy fémekben az elektronok fahője elhanyagolható az iontörzsek fahőjéhez képest.

A Dulong-Petit törvénynek tehát ez a kvantummechanikai magyarázata. (II. füzet 87. oldal)

### 2.1.2.2. A kontakt potenciál

Két azonos hőmérsékletű, de különböző fém szoros összeillesztésekor a két fém között potenciálkülönbség (az ún. kontakt potenciál) lép fel.

A két fém kilépési munkája (I. füzet 5. oldal) legyen különböző:  $\Phi_2 > \Phi_1$ . Amíg a két fém egymástól távol van, addig két külön rendszerről beszélhetünk. Ha a fémeket "szorosan" összeillesztjük, akkor az atomi skálán a két fém elektronjait csak egy "keskeny" potenciálgát fogja elválasztani egymástól. Ezen a potenciálgáton keresztül, alagúteffektus révén a két elektrongáz kapcsolatba lép egymással. Azaz a két fém egyetlen kvantummechanikai rendszert alkot. A fémelektronokat nulla Kelvin fokos elektrongáznak lehet tekinteni. Kezdetben, az egyik fémbe (abban, amelynek a kilépési munkája a kisebb) magasabb kinetikus energiájú elektronok is lesznek mint a másikban. Így  $\Delta N$  számú, nagyobb energiájú elektron átmege az egyik fémből a másikba. Ezért az egyik fémbe elektron hiány a másikban elektron felesleg lép fel. Ennek hatására a két fém között egy (elektrosztatikus) potenciálkülönbség lép fel. Mivel a  $\Delta N$  sokkal kisebb mint a fémelektronok teljes száma, ezért a még betöltött maximális energiaszintek ( $\mathcal{E}_{F1}$  és  $\mathcal{E}_{F2}$ , a független Fermi szintek) helyzete egy-egy fémen belül gyakorlatilag nem változik meg. A két fém között fellépő potenciálkülönbség hatására az eredeti Fermi szintek egymáshoz képest eltolódnak. Éppen annyi  $\Delta N$  elektron fog átmeenni az egyik fémből a másikba, hogy a két Fermi szint egyenlő legyen. Egy kvantummechanikai rendszerben ugyanis csak egyetlen Fermi szint van, amit a rendszerben lévő összes elektronok száma határoz meg.

$$\text{A két fém között fellépő kontakt potenciál tehát } \Delta U = \frac{1}{e} (\Phi_2 - \Phi_1)$$

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 6. oldal

## 2.2. Szilárd testek energiasáv elmélete

A fémek szabadelektron modellje túl egyszerű ahhoz, hogy a szilárd testek elektromos tulajdonságait részleteiben is leírja. Láttuk, hogy a fémelektronok dinamikai viselkedése csak az  $\mathcal{E}_F$  Fermi-szint környezetében számíthat. Szabadelektron gázzal lévén szó könnyen meghatározható a Fermi szinthez tartozó elektronállapotok  $k_F$  Fermi-hullámszáma és így a  $\lambda_F$  Fermi-hullámhossz is. Ez utóbbira az adódik, hogy gyakorlatilag az atomi rácstávolsággal egyezik meg. Ugyanakkor ismeretes az is, hogy a fémek fizikai tulajdonságait éppen a Fermi-szint közelében lévő elektronok dinamikai tulajdonságai határozzák meg. Ez pedig azt jelenti, hogy pont ezen elektronok szempontjából nem hanyagolható el az atomi rácsszerkezet jelenléte. Ezért tehát a szabadelektron modellünket tovább kell fejleszteni. Ennek egyik lehetséges módja az, hogy valami módon figyelembe vesszük azt is, hogy a szilárd test atomjai szabályosan (kristálysíkot alkotva) helyezkednek el térben.

Ennek a szabályos rendnek az elektronokra gyakorolt hatása már egydimenziós modellben is megnyilvánul. Minden, e jelenségkörrel kapcsolatos fogalom már itt is megjelenik. Nagy előnye ugyanakkor az, hogy matematikailag könnyen kezelhető és így a modell viszonylag egyszerűen végigszámolható. Ezért a tárgyalásunkat ezzel a modellel kezdjük. Az alapfogalmak tisztázása után térünk át a realisabb (háromdimenziós) modellekre.

### 2.2.1. A periodikus potenciálú tér egydimenziós modellje

Egy szabad atom (a kémiai tulajdonságait tekintve) atommagból, törzselektronokból és vegyérték elektronokból áll. Mint láttuk, törzselektronoknak a teljesen betöltött (zárt) (al)héjakon lévő elektronokat nevezzük. A atommag és a törzselektronok együtt alkotják az iontörzset. Kémiai kölcsönhatások során (vegyüléskor) az iontörzsek nem változnak. A kémiai kötések létrejötte során csak a be nem töltött (al)héjakon lévő vegyérték elektronok állapota változik meg (mint azt láttuk, molekulapályákká alakulnak). Célszerű ezért az iontörzset egységesen kezelni, és a vegyérték elektronokra kifejtett hatását egy egyszerű modellpotenciállal leírni. Első közelítésben ez egy alkalmasan megválasztott potenciálgödörrel lehetséges.

Helyezzünk el az  $x$  tengely (mint egyenes) mentén „ $N$ -db”, nagyon nagy számú atomot, egymástól (atomnyi) „ $a$ ” ún. ráctávolságra. Ezzel egy  $L=Na$  hosszúságú "egydimenziós kristályt" kaptunk. A vegyérték elektronfelhők átfedik egymást, azaz "kollektivizálódnak". Így a vegyérték elektronok az egész kristályhoz, nem pedig csak egy iontörzshöz fognak tartozni. Ezeket a kollektivizálódott, (volt) atomi vegyértékelektronokat kristályelektronoknak fogjuk nevezni. Az iontörzsek eredő potenciálja (a kristály belsejében) egy egydimenziós  $V(x)$  periodikus potenciál lesz. Ez a térbeli periodicitás a kristály két végének a környezetében (a kristály "felületi" rétegében) elromlik.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 7.oldal

A felületi réteg mérete elhanyagolható a kristály teljes térfogatához képest. Így az elektron kristálybeli tulajdonságait elsősorban a periodikus potenciálú tartomány fogja meghatározni. Ezért egy olyan modellt fogunk kidolgozni, amelyik a kristály felületének a hatásait elhanyagolja. Tehát egy véges méretű (geometriai felülettel bíró), de fizikai felülettel nem rendelkező kristálymodellt kell konstruálnunk. Ennek módja igen egyszerű. Rakjunk szorosan egymás mellé az  $x$  tengely mentén végtelen sok „ $L=Na$ ” hosszúságú kristályt. Ennek a végtelen atomsornak bármelyik  $L$  hosszúságú szakasza fogja modellezni a vizsgálandó egydimenziós kristályunkat. Ezzel elértük azt, hogy a felület közelében ugyanazok a fizikai viszonyok uralkodjanak, mint a kristály belsejében. A kristályelektronok  $\psi(x)$  állapotfüggvényének minden  $L$  hosszú szakaszra ugyanannak kell lennie, hiszen minden  $L$  hosszú szakasz ugyanazt a kristálymodellt valósítja meg. Azaz teljesülnie kell a  $\psi(x+L) = \psi(x)$  ún. Born-Kármán féle periodikus határfeltételnek.

A következőkben olyan általános eredményekre fogunk jutni, amelyek függetlenek a kristályrács egyedi fizikai tulajdonságaitól, például attól, hogy konkrétan milyen atomokból áll a kristály. Pusztán a kristályrács geometriai tulajdonságainak az ismerete alapján nagyon alapvető és jellegzetes fizikai következtetésekre juthatunk. Az egyik ilyen fontos tulajdonság éppen (a félvezetők elektronikájában alapvetően fontos) ún. "energiasávok" létezése lesz.

A kristályban fellépő  $V(x+a) = V(x)$  atomi periodicitásnak az a következménye, hogy minden iontörzs környezetében ugyanolyan fizikai viszonyok uralkodnak. Mindezt másképpen úgy szoktuk mondani, hogy a kristály "transzlációs" szimmetriával rendelkezik. (transzláció=átvitel) Hiszen a kristályt egy „ $a$ ” atomi ráctávolsággal eltolva az önmagába megy át, azaz fizikailag semmiféle változás nem következik be. Mindezekből az következik, hogy egy kristályelektron minden iontörzs környezetében ugyanolyan valószínűséggel lesz jelen. Azaz a kristályelektronokhoz rendelt (valószínűségi) elektronfelhő is periodikus lesz, tehát  $|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2$ . Magára a hullámfüggvényre nézve ebből csak az következik, hogy  $\psi(x+a) = c\psi(x)$ , ahol  $|c| = 1$ . Azaz egy „ $a$ ” ráctávolsággal arrébb menve a hullámfüggvény egy egységnyi abszolút értékű komplex számmal ( $c$ ) szorzódik. Így „ $L=Na$ ” val arrébb menve a hullámfüggvény  $c^N$ -el fog szorzódni. De a  $\psi(x+L) = \psi(x)$  periodikus határfeltétel miatt ennek éppen egynek kell lennie. Mint az a matematikai tanulmányainkból ismeretes, a  $c^N = 1$  egyenletnek  $N$  darab komplex megoldása van, amelyek a komplex síkon egy egységsugarú körön helyezkednek el. Ezen komplex számok jellemzésére a  $\gamma$  Euler szög helyett a  $\gamma = ka$  összefüggéssel definiált  $k$  mennyiséget fogjuk használni. A  $c = e^{j\gamma} = e^{jka}$  komplex egységvektorra vonatkozó periodicitás ( $e^{j(\gamma+2\pi)} = e^{j\gamma}$ ) tehát „ $k$ ”-val is kifejezhető. Éppen „ $N$ ” darab különböző „ $k$ ” érték van.

Az eddigi eredményeinket matematikailag tömören az ún. Bloch tételben fogalmazhatjuk meg:

$$\psi(x+a) = e^{j \cdot ka} \cdot \psi(x).$$

Tehát a kristály translációs szimmetriájának a következményeként a kristályelektronok állapotfüggvényeinek ki kell elégítenie a Bloch tételt. A Bloch tételt kielégítő függvények egy általános osztályát Bloch függvényeknek (illetve Bloch állapotoknak) nevezzük

$$\psi(x) = u(x) \cdot e^{j \cdot kx}, \text{ ahol } u(x+a) = u(x).$$

Láthatóan ezek olyan „ $k$ ” hullámszámú síkhullámok, amelyek amplitúdója rács-periodikus függvény. Ezért röviden csak "amplitúdó-modulált síkhullámnak" hívjuk őket. A Bloch állapotfüggvények fizikailag igen szemléletesen tükrözik egyrészt a kristály nagyléptékű homogenitását (ezt jelenti a síkhullám rész) másrészt pedig az atomrács jelenlétét (ezt az amplitúdó modulációja fejezi ki).

A Bloch állapotok bevezetése matematikailag is igen nagy előnnyel jár. Ennek oka a következő. Próbáljuk meg a  $\psi(x)$  állapotfüggvényt közvetlenül (numerikusan) kiszámolni a  $(0,L)$  teljes kristály tartományban. Azokat a  $0 \leq x_i \leq L$   $\{x_i | i = 1,2,3,\dots, N_o\}$  pontokat, amelyekben a hullámfüggvényt ki akarjuk számolni "osztópontoknak" nevezzük. Ahhoz, hogy a számolás valóban tükrözze a  $V(x)$  potenciálménetet, az osztópontok távolságának sokkal kisebbnek kell lennie, mint az „ $a$ ” rácstávolság. Azaz az osztópontok „ $N_o$ ” száma sokkal nagyobb kell, hogy legyen mint a rácsban lévő atomok száma. Avogadro számnyi rácsatom esetén a feladat megoldhatatlan.

Ha ugyanezt a feladatot a Bloch állapotok halmazán akarjuk megoldani, akkor csak az  $u(x)$  amplitúdó-függvényt kell meghatározni. Mivel azonban, az  $u(x)$  egy rács-periodikus függvény, ezért elegendő azt csak a  $(0,a)$  tartományban kiszámítani. Így a numerikus számításokhoz szükséges osztópontok száma (pl.) 100-1000-re csökken.

Ha a  $\psi(x)$  állapotfüggvényre vonatkozó Schrödinger egyenletbe beírjuk a Bloch-féle alakot, akkor megkapjuk az  $u(x)$  amplitúdó-függvényre vonatkozó egyenletet. Az igaz ugyan, hogy ezt csak a  $(0,a)$  tartományban kell megoldani, de ezeket a megoldásokat minden egyes „ $k$ ” értékre meg kell keresnünk. Ezek száma pedig éppen a rácsatomok számával egyezik meg. Látszólag tehát „nem nyertünk semmit”! Valójában azonban, mint az a következőkben ki fog derülni, a numerikus számításokat egyáltalán nem szükséges minden lehetséges „ $k$ ”-értékre elvégezni. Éppen ebben rejlik a Bloch-állapotok bevezetésének az egyik nagy (praktikus) előnye.

Valójában minket az érdekel, hogy egy elektron mekkora energiával rendelkezhet a kristályban. Ezek az egyelektron energiaszintek az  $u(x)$  amplitúdó-függvényre vonatkozó egyenlet sajátértékei. Az egyenletben paraméterként szerepel a Bloch állapotok „ $k$ ” hullámszáma is. Mint láttuk ez a  $(0, 2\pi/a)$  tartományban  $N$  különböző diszkrét értéket vehet fel. Mivel az  $N$  nagyon nagy szám így a keresett egyelektron energia a  $k$  hullámszámnak  $\varepsilon(k)$  (kvázi)folytonos függvénye lesz. Ugyanekkor egy adott  $k$  érték esetén a sajátérték egyenletnek az  $\varepsilon_\nu(k)$  megoldásai diszkrét  $\nu = 1, 2, 3, \dots$  energiaszintek lesznek Ha az első ( $\nu = 1$ ), a második ( $\nu = 2$ ), a harmadik ( $\nu = 3$ ), ..stb. energiaszintekhez tartozó energiákat a „ $k$ ” paraméter függvényeként felrajzoljuk, akkor elegendően sima görbékét kapunk. Ez azt is jelenti, hogy egyáltalán nem szükséges minden egyes  $k$  értékre a számolásokat elvégezni. Már viszonylag kevés pontból a  $\varepsilon_\nu(k)$  görbék megrajzolhatók. Ez pedig óriási számolástechnikai előny! (8.oldal)

Megkaptuk tehát a kristályrácsban mozgó elektronok lehetséges energiáit. Azt tapasztaljuk, hogy az energiaszintek egymástól jól elkülönülő csoportokba rendeződnek. Egy csoporton belül az azonos  $\nu$  indexhez tartozó energiaszinteket találjuk. Ezeket hívjuk energiasávoknak. Egy ilyen energiasávon belül  $N$  számú (különböző  $k$  értékhez tartozó) energiaszint van. A  $\nu$  indexet sávindeksnek nevezzük. Az energiasávokat elválasztó tartományokat "tiltott sávoknak" hívjuk.

Mint azt láttuk (7. oldal), definíció szerint, a "k" az  $\sqrt[N]{1}$  művelet eredményével van kapcsolatban. Azaz a "k" és a "k+b" (ahol  $b = \frac{2\pi}{a}$ ) ugyanannak a komplex egységvektornak az Euler szögét határozza meg. Ezért

a  $(0, b)$  azaz a  $\left(0, \frac{2\pi}{a}\right)$  tartomány ugyanazokat a Bloch állapotokat meghatározó „k” paramétereket

tartalmazza, mint a  $\left(-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}\right)$  tartomány. Tehát az  $\varepsilon_v(k)$  görbék ez utóbbi tartományban is felrajzolhatók.

Ennek az ábrázolásnak az az előnye, hogy tükrözi a kristályrács egy másik szimmetria tulajdonságát is. A translációs szimmetrián kívül ugyanis a kristályrács rendelkezik egy ún. "pontszimmetriával" is. Ide tartozik minden olyan tükrözés vagy forgatás, amely a kristályrácsot önmagába viszi át, de a kristályrács egy pontját helyben hagyja. Egydimenziós kristály esetén egyetlen ilyen transzformáció létezik. Ez pedig egy (a „0” indexűnek nevezett) rácspontra való tükrözés. Ekkor az "na" rácspont a "-na" rácspontba megy át és viszont ( $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ ). Ez azt is jelenti, hogy a  $\left(-\pi/a, +\pi/a\right)$  tartomány a  $\left(+\pi/a, -\pi/a\right)$  tartományba, azaz önmagába transzformálódik. Mivel a pont-transzformáció semmiféle fizikai változást nem jelent, ezért változatlanok kell maradni az  $\varepsilon_v(k)$  görbéknek is.

A  $\left(-\pi/a, +\pi/a\right)$  tartományt Brillouin zónának hívjuk. Fontos tulajdonságai a következők:

- egyrészt csak különböző Bloch állapotokat meghatározó, N darab "k" pontot tartalmaz,
- másrészt a kristályrács tükrözésekor önmagába transzformálódik.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 10. oldal

### 2.2.2. Az energiasávok és az atomi energiaszintek kapcsolata

Az energiasávok létezése kétségtelenül a szilárd testek egyik érdekes és a makroszkopikus viselkedésük szempontjából fontos tulajdonsága. Meg szeretnénk mutatni, hogy ez azonban korántsem olyan meglepő! Ugyanis igen szoros kapcsolat van az atomi energiaszintek és a kristályokban fellépő energiasávok között. Nevezetesen, a sávszerkezet gyökereit a szabad atomok kvantált energiaszintjeiben kell keresnünk.

A kovalens kémiai kötés egydimenziós modelljénél láttuk (II. füzet 88. oldal), hogy ha két atomot közel viszünk egymáshoz, akkor az atomi energiaszintek két, egymáshoz közeli szintre hasadnak fel. Kézenfekvő a feltételezés, hogy ha 3, 4, ... vagy N darab azonos atomot közelítünk (pl. egy egyenes mentén) egymáshoz, akkor az atomi energiaszintek 3, 4, ... illetve N közeli szintre hasadnak fel. Megmutatjuk, hogy a sejtésünk igaznak bizonyul. Az ötlet megvalósítható és az egydimenziós modell viszonylag egyszerűen végigszámolható.

Az egydimenziós  $V(x+a) = V(x)$  periodikus potenciál a szabad atomok vegyérték elektronjainak  $W(x)$  modellpotenciáljából épül fel. A rácspontokba helyezett iontörzsek által létrehozott eredő potenciál a szabad atomi  $W(x+na)$ , ( $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$ ) potenciálok összege lesz. Ebből a kristályelektronok  $\hat{H}$  Hamilton operátora definíció szerint felírható.

Az energiára vonatkozó  $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$  sajátérték egyenletet most nem oldjuk meg. Helyette a kristályban lévő kristályelektronok delokalizált (az egész kristályra kiterjedő)  $\psi(x)$  állapotait egy  $\tilde{\psi}(x)$  állapotfüggvénnyel közelítjük. Ezt a közelítő függvényt a rácspontokban lévő atomok  $\chi(x-na)$  szabad atomi állapotfüggvényeiből építjük fel. Az ötlet a kovalens kötés molekulapályáinak az atompályákból való előállításánál tanultakból adódik (II. füzet 90. oldal) és a kvantumkémiaiában LCAO módszernek hívják. (Linear Combination of Atomic Orbitals = Atompályák lineáris kombinációja)

Az egzakt  $\psi(x)$  egyelektron állapotfüggvényt tehát a  $\tilde{\psi}(x)$  LCAO függvénnyel közelítjük.

$$\psi(x) \approx \tilde{\psi}(x) = A \cdot \sum_n e^{jkna} \chi(x-na)$$

Az  $\chi(x-na)$  atompályák együtthatóit úgy kell megválasztanunk, hogy a  $\tilde{\psi}(x)$  az előzőekben tanultak értelmében teljesítse a Bloch tételt, azaz egy normált Bloch állapot legyen.

A teljes kristálytérfogatra normált közelítő LCAO-Bloch  $\tilde{\psi}(x)$  állapotfüggvények ismeretében a kristályban mozgó kristályelektronok energiaszintjei a 4. axióma alapján közelítőleg meghatározhatók. Ennek értelmében ugyanis a  $V(x+a) = V(x)$  potenciális energiával rendelkező,  $\tilde{\psi}(x)$  állapotú kristályelektronnak az energiáját a megfelelő  $\hat{H}$  Hamilton operátornak a  $\tilde{\psi}(x)$ -val vett  $\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle$  kvantummechanikai átlaga adja.

A számolás során először a  $\hat{H}\tilde{\psi}(x)$  függvényt határozzuk meg. Ennek kapcsán kihasználtuk azt, hogy a  $\chi(x-na)$  atomi állapotfüggvény az „na” helyen lévő atom „szabad atomi” állapotfüggvénye, azaz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi''(x-na) + W(x-na) \cdot \chi(x-na) = \varepsilon_A \cdot \chi(x-na)$$

Ezután képezzük a  $\hat{H}\tilde{\psi}(x)$ -nek a  $\tilde{\psi}(x)$ -val vett skalár szorzatát.

A  $\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle$  skalár szorzat számításakor egy újabb közelítést alkalmazunk. Ennek fizikai tartalma az, hogy (feltételezzük!) az atomok közelítése során egy atomi állapotra csak a közvetlen szomszédos atomok vannak hatással, a távolabbiak nem. Eredményül adódik, hogy:

$$\langle \tilde{\psi} | \hat{H} \tilde{\psi} \rangle = \varepsilon(k) = \varepsilon_A + E_0 + E_1 \cos(ka)$$

A kapott végeredmény szépen igazolta a várakozásunkat. Azaz a kezdeti  $\varepsilon_A$  atomi energiaszint, a koszinuszos tagnak megfelelően, „N” szintre hasadt fel. (Mint az ismeretes ugyanis, a „k” N-féle különböző értéket vehet fel.)

Azaz a kristályelektronok energiájának „sávós szerkezete” az atomi energiaszintek N-szeres felhasadásából származik, és mint ilyen, természetes következménye az atomi kötött állapotok energia kvantálásának.

A számolás eredményeként olyan  $\varepsilon_\nu(k)$   $\nu = 1, 2, 3, \dots$  görbék adódtak, amelyeket az előzőekben (9. oldal) általános elvek alapján megsejtettünk. Most az energiasáv szélessége is szemléletes fizikai tartalommal bír, hiszen éppen a szomszédos  $\chi(x)$  atomi állapotok „átfedésének” a mértékétől függ. Ez azt jelenti, hogy adott „a” rácstávolság esetén a magasabb energiájú (azaz a magasabb sávindexű) energiasávok szélesebbek. Ugyanis a magasabb energiájú atomi állapotok kiterjedtebbek (az elektronfelhő mérete nagyobb) és így a szomszédos  $\chi(x)$  állapotfüggvények átfedése nagyobb mértékű.

### 2.2.3. Az energiasávok és a szabad elektrongáz kapcsolata

A Bloch állapotban lévő rácselektronokat sokszor Bloch elektronoknak hívjuk. A Bloch elektronok lehetséges energiáit magadó  $\varepsilon_\nu(k)$   $\nu = 1, 2, 3, \dots$  görbék együttesét „sávabrána” nevezzük. A sávabra tehát a  $(-\pi/a, +\pi/a)$  Brillouin zónán értelmezett többértékű függvény. Ezt a függvényt az értelmezési tartomány kiterjesztésével egyértékűvé tehetjük. Erre az ad lehetőséget, hogy a „k” és a „k+2π/a” hullámszámok pontosan ugyanazt a Bloch állapotot adják meg (7. oldal). Ezért az első ( $\nu=1$ ) energiasávhoz tartozó  $\varepsilon_1(k)$  görbét továbbra is a  $(-\pi/a, +\pi/a)$  tartományon értelmezzük, de a második ( $\nu=2$ ) energiasávhoz tartozó  $\varepsilon_2(k)$  görbét a nem összefüggő  $(-2\pi/a, -\pi/a) \cup (+\pi/a, +2\pi/a)$  tartományon fogjuk definiálni. Könnyen belátható, hogy ez az utóbbi tartomány is rendelkezik a Brillouin zónákra kötelezően előírt tulajdonságokkal

(9. oldal). Ezért ezt második Brillouin zónának nevezzük, míg a kiindulásul használt középső tartomány neve első Brillouin zóna lesz. Az eljárás a  $\nu=3,4,\dots$  esetekre értelemszerűen folytatható. Eredményül végül is egy egyértékű  $\varepsilon(k)$  függvény adódik, amelynek értelmezési tartománya az egész "k" tengely és szakadása (ugrása) van a Brillouin zónák határain, azaz a  $\{n\pi/a \mid n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots\}$  pontoknál. Ennek az eljárásnak a neve a "kiterjesztett Brillouin zónás" ábrázolás.

Az  $\varepsilon(k)$  sávábrának a "kiterjesztett Brillouin zónás" ábrázolása nem pusztán formális matematikai játék volt, hanem mélyebb fizikai tartalommal is bír. Lehetőségünk nyílik ugyanis arra, hogy matematikailag is precíz kapcsolatot teremtsünk a bevezetőben tárgyalt szabadelektron modell és a Bloch modell között. Ennek az alapja az, hogy az egydimenziós L hosszúságú kristály szabadelektron modelljében a feltételezett, azonosan zérus potenciál is rendelkezik a translációs szimmetriából adódó "periodicitással". Ugyanis a  $V(x) = V(x+a) \equiv 0$  minden x-re teljesül. Ezt fizikailag úgy lehet elképzelni, hogy geometriai pontokkal kijelöljük a rácsatomok helyét, de iontörzseket oda nem teszünk. Ezáltal a translációs szimmetria pusztán "geometriai" tulajdonság lesz, a potenciál mindenhol azonosan zérus marad. A modellt találóan "üres rács modellnek" nevezik. A translációs szimmetriát tükröző  $\psi(x)$  Bloch állapotok amplitúdója most  $u(x) = u_0 = \text{állandó}$  lesz. Azaz maguk a Bloch állapotok egyszerű síkhullámok lesznek. Ennek megfelelően a sávokra (természetesen) a szabadelektronokra jellemző jól ismert  $\varepsilon(k) \propto k^2$  parabola. A "sávok" összeérnek, ezért nincsen tiltott energia tartomány.

A rácsatomok jelenléte módosítani fogja ezt a parabolát. Az  $\varepsilon(k)$  a Brillouin zóna határain mintegy "megszakad és kitöredezik". Mindez elvezet a már jól ismert  $\varepsilon_\nu(k)$  függvényhez.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 14. oldal

## 2.3. Az effektív tömeg közelítés

### 2.3.1. Az effektív tömeg fogalma

A kristályrácsban lévő elektronok kvantummechanikai tárgyalást rendkívüli módon megkönnyíti az, hogy a periodikus potenciál miatt az elektron lehetséges állapotai Bloch féle állapotok. Az ezekhez az állapotok tartozó energiaszinteket a sávokra adja meg. Mivel a sávokra  $\varepsilon(k)$  függvénye eléggé sima görbe, ezért a konkrét számításokat elegendő csak "néhány" "k" pontban elvégezni.

Az elektronok kristálybeli állapota önmagában nem túl érdekes. Sokkal izgalmasabb annak a vizsgálata, hogy mi történik akkor, ha a kristályelektronokkal kölcsönhatásba lépünk? Például a makroszkopikus szilárd testre elektromos vagy mágneses teret kapcsolunk. Az elektronikus eszközökben pontosan ez történik. Így gyakorlati szempontból a kérdés igencsak indokolt. Hiszen az erre adott válasz alapján érthető meg a félvezető alkatrészekben lezajló azon alapvető fizikai folyamatok, amelyek a makroszkopikus elektromos tulajdonságokat határozzák meg. Ez pedig minden leendő és gyakorló villamosmérnökök számára fontos dolog.

Ha egy egydimenziós kristályra külső homogén (makroszkopikus) elektromos teret kapcsolunk, akkor a kristályelektronok  $V(x)$  periodikus potenciálja megváltozik. A  $V(x)$  atomi és a  $W(x)$  külső (csak makroszkopikus léptékben változó) potenciálok szuperponálódnak. Az eredő potenciál már nem periodikus. Elvész az ebből származó előny és a megfelelő Schrödinger egyenlet (a 8. oldalon részletezett okok miatt) gyakorlatilag megoldhatatlanná válik.

A kiutat az a felismerés adja, hogy amíg a kristályatomok okozta potenciálváltozás atomi távolságokon belül történik, addig a külső potenciál nagyon lassan (csak makroszkopikus távolságokon) változik meg. Ez pedig lehetőséget nyújt arra, hogy a kétféle hatást egymástól elkülönítve (de nem egymástól függetlenül!) kezeljük. A rácsatomok hatását továbbra is a megtanult módon (Bloch állapotokon keresztül) tárgyaljuk, míg a külső potenciál hatását az Ehrenfest tétel alkalmazásával vesszük figyelembe. Mint azt láttuk ez a tétel adja meg az átmenetet a kvantummechanikából a klasszikus mechanikába (II. füzet 49.-50. oldal). Ezért tehát igen alkalmas arra, hogy a makroszkopikus léptékű mechanikai jelenségeket kvantummechanikai fogalmakkal írassuk le. A kristályelektronok fent vázolt dinamikájánál pontosan ez a helyzet.

A klasszikus mechanikai "munka tételt" kell adaptálnunk a jelenlegi problémára.  
(Adaptál=alkalmassá tesz.)



Az (általánosított) munkatétel szerint, egy mechanikai rendszer energiájának a megváltozása a rendszeren ható külső erők munkájával egyenlő. Mindez tetszőleges kicsiny „dt” időtartamokra is érvényes! Tekintsük most "rendszernek" a  $V(x+a) = V(x)$  periodikus potenciálú térben mozgó kristályelektron. Ennek az  $\varepsilon(k)$  energiáját az előzőekben a kvantummechanika segítségével már meghatároztuk. A munkatétel szerint a kristályelektronnak ez az  $\varepsilon(k)$  energiája fog a külső elektromos tér hatására megváltozni.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 15. oldal

Az Ehrenfest tétel szerint a dinamikai változók kvantummechanikai átlagai között pontosan a klasszikus mechanikában érvényes összefüggések állnak fenn. A kvantummechanikában a potenciált, a klasszikus fizikában az erőt használjuk a részecskék dinamikai viselkedésének a tárgyalásánál. Láttuk azt is, hogy az Ehrenfest tétel segítségével az erő fogalmát csak lassan változó potenciálok esetén lehet bevezetni (II. füzet 49. oldal). Ezért most a kristályelektron állapotát nem (az egész kristályra kiterjedt) Bloch függvényként fogjuk megadni, hanem e helyett Bloch függvényekből összerakott (lokalizált) hullámcsomagokkal fogunk dolgozni. Ez azért tehető meg, mert a Kvantummechanika 1. axiómája szerint, ha a Bloch állapotok lehetséges állapotokat adnak meg, akkor azok lineáris kombinációja (ezek a hullámcsomagok) szintén lehetséges állapotok lesznek. Mivel pedig ezek e „hullámcsomag” állapotok (az adott esetben) sokkal kényelmesebben kezelhetők, így célszerű ezek segítségével megismerni a kristályelektronok dinamikai tulajdonságait. Egy ilyen hullámcsomag olyan, hogy a  $\Delta x$  kiterjedése az L makroszkopikus testméretnél sokkal kisebb (szinte "pontoszerű"), de ugyanakkor az "a" rácsávolságnál sokkal nagyobb (azaz a hullámcsomag nagyon sok rácsatomot fed le). Ezzel az eljárással a kristályelektron olyan modelljéhez jutottunk, amely makroszkopikus viselkedésében pontoszerű, atomi skálán azonban a kvantummechanika törvényeit követi.

A pontoszerű kristályelektron sebessége nyilvánvalóan a Bloch csomag csoportsebességével lesz egyenlő. Az  $\varepsilon(k) = \hbar \omega(k)$  ismert összefüggés felhasználásával a csoportsebesség az általános hullám-tani definíció alapján számolható, azaz  $v_{cs} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$ . Emiatt az  $\varepsilon(k)$  függvényt "diszperziós relációnak" is nevezik

A Bloch csomag spektrális tulajdonságai ugyanazok, mint amit e tárgyunk bevezetőjében a hullámcsomagokról általában elmondtunk (I. füzet 2. oldal). A Bloch csomag spektrumát most természetesen a Brillouin zónán kell értelmeznünk. A fentiekben megkívánt lokalizációval rendelkező csomag spektruma (hála a sávábra simaságnak) már elegendően keskeny ahhoz, hogy azon belül az  $\varepsilon(k)$  gyakorlatilag már ne változzon. Így a kristályelektronhoz egy meghatározott  $\varepsilon(k)$  energiaértéket lehet rendelni. Valójában ez az energia fog változni a külső tér hatására.

A Bloch csomaggal számolt Ehrenfest tétel szerint a (makroszkopikusan pontoszerűnek tekintett) rácselektronra ható külső (makroszkopikus) erő a hullámcsomag spektrumát fogja mozgatni.

A keskenynek tekinthető  $\Delta k$  szélességű spektrum közepe legyen "k". A  $\Delta k$  értékének a megválasztását két célszerű szempont határozza meg. Az egyik az, hogy  $\Delta k$  legyen elegendően kicsi a Brillouin zóna méretéhez képest (azaz  $\Delta k \ll \frac{\pi}{a}$ ). Ez azért kell, hogy a („pontoszerűnek” tekinthető) spektrum helyzetét a

zónában a „k” vektorral lehessen azonosítani. A másik szempont az, hogy a  $\Delta k$  legyen elegendően nagy ahhoz, hogy az így előállított hullámcsomag mérete (lokalizáltsága) sokkal kisebbnek adódjék, mint a kristály makroszkopikus mérete (azaz  $\Delta x \ll L$ ). Ugyanakkor fontos az is, hogy a hullámcsomag már sok rácspontra fedjen le ( $\Delta x \gg a$ ) azért, hogy azok hatása mintegy kiátlagolódjék. Mindezek eredményeként a makroszkopikus skálán egy „pontoszerű” elektron kvantummechanikai modelljéhez juthatunk.

Végül is a munkatételben szereplő külső F erő ismeretében az  $F = \hbar \dot{k}$  egyenlet adódik. Azaz, mintha dinamikai szempontból a Bloch hullámcsomag spektrumának a közepéhez rendelt  $\hbar k$  "impulzusra" felírt newtoni mozgástörvény lenne előttünk. Ennek hatása a hullámcsomag térbeli mozgásában úgy nyilvánul meg, hogy a hullámcsomag gyorsulni fog. A hullámcsomag  $a_{cs}$  gyorsulása és a kristályelektronra ható külső erő között egy lineáris kapcsolat van. Ez pedig az ún. effektív tömeg ( $m^*$ ) fogalmának a bevezetését teszi lehetővé:  

$$F = m^* \cdot a_{cs}.$$

Végezetül ide kívánkozik egy fontos megjegyzés. Az  $F = \hbar \dot{k}$  egyenletben szereplő „ $\hbar k$ ” kifejezés szabadelektron esetén valóban az elektron impulzusát adná. Most azonban a „ $k$ ” a Bloch állapotot meghatározó hullámszámot jelenti. A Bloch állapot pedig nem elégíti ki a  $\hat{p}\psi = p \cdot \psi$  impulzus sajátérték egyenletet. Ezért Bloch állapotok esetén a „ $\hbar k$ ” kifejezést „kváziimpulzusnak” nevezzük.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 16. oldal

Az  $m^*(k)$  effektív tömegnek szemléletes jelentése van. Definíció szerint ugyanis a (pontoszerű) kristályelektronra ható külső erőnek és a (csoport)gyorsulásnak a hányadosával egyenlő. Tehát a gyorsulást egyedül a külső erőnek tulajdonítjuk. Ugyanakkor az elektron a kristályráccsal is kölcsönhatásban van. A kristályrács hatását az effektív tömegben az  $\varepsilon(k)$  diszperziós reláción keresztül vettük figyelembe.

Az  $\varepsilon(k)$  ismeretében az  $m^*(k)$  effektív tömeg kiszámolható. Látszik, hogy ez negatív értéket is felvehet. Ez azonban a fizikai jelentése ismeretében, már nem meglepő. Azt jelenti ugyanis, hogy vannak olyan hullámcsomag állapotok, amely esetén a hullámcsomag a külső  $F$  erővel ellentétes irányban gyorsul. Azaz az elektronra a rácsatomok olyan hatást fejtenek ki, hogy az a külső erővel szembe fog gyorsulni.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 17. oldal

### 2.3.2. Szilárd testek sávszerkezete és az elektromos vezetési tulajdonságok kapcsolata

Láttuk tehát, hogy a kristályelektronok lehetséges energiaszintjei sávokba rendeződnek. Minden sávban  $N$  darab (azaz éppen rácsatom számnyi) különböző Bloch állapotnak megfelelő energiaszint van. A Pauli-elv miatt minden Bloch (pálya)állapotban maximum két elektron lehet. Ezért egy energiasávban  $2N$  elektron számára van hely. Mint ismeretes az „ $N$ ” a kristályrácsot felépítő atomok (iontörzsek) számát jelenti. Ezeket az elektronállapotokat kell a kristályelektronokkal ( azaz a kollektivizálódott vegyérték elektronokkal) betölteni. Ha a kristály „ $\nu$ ” vegyértékű atomokból épül fel, akkor a kristályelektronok száma „ $\nu N$ ” .

Egydimenziós kristálymodell esetén , ha a „ $\nu$ ” páratlan szám, akkor lesz olyan sáv, amelyik csak félig lesz betöltve . Az ilyen kristály elektromos vezető lesz. Ennek az az oka, hogy ha a kristályra külső elektromos teret kapcsolunk, akkor a félig töltött sáv elektronjai a tér hatására a sávon belül magasabb energiaszintekre tudnak kerülni. Azaz a térben az elektron gyorsulni fog (15. oldal). Ezt a félig betöltött sávot „vezetési sávnak” hívjuk.

Ha a „ $\nu$ ” páros szám, akkor alapállapotban ( 0 Kelvin hőmérsékleten) minden sáv teljesen be van töltve. (Egydimenziós modellről van most szó!) Ha a tiltott sáv „nagy” (5-10 eV), akkor az elektronok, normális körülmények között, nem tudják a tiltott sávot „átugrani”. Tehát külső elektromos tér hatására az elektronok állapota nem fog megváltozni. Ezek a kristályok elektromos szigetelők lesznek

Ha a „ $\nu$ ” páros szám és a tiltott sáv „elegendően” kicsi (kb. 1 eV), akkor 0 Kelvin hőmérsékleten a kristály az előzőek szerint elektromosan szigetelő lesz. Szobahőmérsékleten azonban, a Fermi-Dirac eloszlásnak megfelelően, a keskeny tiltott sávot átugorva, elektronok kerülnek az eddig üres sávba. Ennek a sávnak „vezetési sáv” (konduktancia sáv) a neve, míg az alatta lévő „vegyérték sávnak” (valencia sávnak) hívjuk. A vegyérték sáv legmagasabb  $\varepsilon_v$  energiaszintjét a „vegyérték sáv tetejének” nevezzük. A vezetési sáv legalacsonyabb  $\varepsilon_c$  energiaszintjének a megnevezésére a „vezetési sáv alja” kifejezést használjuk.

A kristályra elektromos teret kapcsolva a vezetési sáv elektronjai a tér hatására magasabb energiaszintre tudnak jutni. A kristály elektromos vezető lesz. A hőmérséklet növelésével nő a vezetési sávban lévő elektronok száma és így a vezetőképesség is .Mindez elmondható a vegyértéksáv elektronjairól is. Ezeket az kristályokat „félvezetőknek” hívjuk.

A vezetési sávba felkerült elektronok a sáv alján helyezkednek el. A sáv alján az  $\varepsilon(k)$  diszperziós összefüggésnek minimuma van és így ott  $k^2$ -el közelíthető. Az  $\varepsilon(k) \approx k^2$  parabolikus kapcsolat pedig olyan,

mintha  $m^*$  tömegű szabad elektronok mozognának a térben. Sikerült tehát a klasszikus fizikából jól ismert "tömegpont" modellt, kissé "átlényegült" formában, visszacsempészni a kvantummechanikai tárgyalást igénylő szilárdtestfizikába. Ez a megszokott szemléletesség nagy előny, de vigyázni kell, nehogy elaltassa kvantummechanikai gondolkodásunkat.

Nyilvánvaló fontosságuk miatt a félvezetők elektromos tulajdonságaival az elkövetkezőkben még részletesebben is fogunk foglalkozni

## 2.4. Pozitív töltéshordozók szilárd testekben: a "lyukak"

### 2.4.1. A Hall effektus

Tekintsünk egy téglatest alakú kristályt! Rögzítsünk az éleihez egy  $\{x, y, z\}$  koordináta rendszert! Tegyük a testet egy "z" irányú B mágneses térbe! Kapcsoljunk a rendszerre egy "x" irányú I áramot hajtó áramgenerátort! Ekkor a testnek az "y" irányra merőleges két szomszédos lapja között egy U potenciálkülönbség mérhető. A jelenség neve Hall effektus. A mért U feszültség arányos az átfolyó I árammal, azaz  $U = R_H \cdot I$ . Az arányossági tényezőt  $R_H$ -val jelöltük és Hall állandónak hívjuk. A jelenség a klasszikus "pontoszerű töltéshordozó modellel" egyszerűen értelmezhető. Az "x" irányban mozgó „q” ponttöltésre, a homogén mágneses tér hatására, "y" irányú Lorentz erő hat. Ennek következtében valamennyi „q” töltéshordozó halmozódik fel a test egyik oldalán. Mivel a test semleges kell, hogy maradjon, ezért ugyanennyi (-q) töltéshordozó "hiány" lép fel a szemközti oldalon. A felhalmozódott ellentétes töltések a test belsejében egy homogén elektromos teret hoznak létre. Ez az elektromos tér a mágneses Lorentz erővel ellentétes erőt fejt ki a mozgó töltéshordozókra. Ha a két erő egyenlő, akkor beállt az egyensúlyi állapot. Az U és az I időben állandó marad.

Az  $R_H$  Hall állandó a "q" töltéstől függ. Ezért adott B mágneses tér és I áram esetén, a mért U feszültség polaritásából a töltéshordozók előjelére lehet következtetni. Ha a Hall állandó negatív, akkor ez elektronok áramlását jelenti a szilárd testben, és ez természetes is. Vannak olyan anyagok (ún. „félfémek”, pl.: Berillium, Kadmium, Cink, Ólom ) amelyek esetében a Hall állandó pozitívnek (!) adódik és ez pozitív töltéshordozók jelenlétére utal. Az eredmény azért meghökkenítő, mert tudjuk, hogy szilárd testekben csak az elektronok képesek elmozdulni és így áramot produkálni.

A jelensége csak kvantummechanikai modellel magyarázható

### 2.4.2. A lyukak

Egy egydimenziós kristálymodellt fogunk vizsgálni. A Bloch állapotokat illetve az ezekből felépíthető Bloch-csomag állapotok rendszerét adottnak tekintjük. Ugyancsak adottnak vesszük az energiaszintek sávstruktúráját megadó  $\varepsilon_v(k)$  függvényeket is. Az energiasávokhoz tartozó állapotokat a kristályelektronok a Fermi-Dirac statisztikának megfelelően töltik be. Röviden (de pongyolán!) azt szoktuk mondani, hogy: "a sávban elektronok vannak" vagy "elektronok mennek át egyik sávból a másikba".

Egy sáv betöltöttségének a mértékét két adattal fogjuk jellemezni. Ezek a sáv betöltött állapotait definiáló "k" hullámszámok  $\sum k$  összege és a sávban lévő elektronok  $\sum \varepsilon(k)$  összenergiája. A sávban lévő elektronok kollektív (együttes) elektromos viselkedésére az általuk létrehozott „j” áram(sűrűség) és annak időbeli változása a jellemző. Egydimenziós esetben az áram és az áramsűrűség fogalma összemosódnak, hiszen nincsen értelme "egységnyi keresztmetszetű felületről" beszélni. Ezért, az egyszerűsítés végett, némi formális pongyolaság itt és most megengedhető. Majd a háromdimenziós általánosításakor mindent pontosítani fogunk. Ennek értelmében az áramsűrűség, definíció szerint, a (betöltött Bloch-csomag állapotokban lévő) kristályelektronok (csoport)sebességeink az összegéből számolható, azaz  $j \approx -e \sum_k v(k)$ . A külső „E”

elektromos tér hatására bekövetkező áramsűrűség változás pedig a sávban lévő elektronok effektív tömegének (pontosabban azok reciprokának) az összegével fejezhető ki  $\frac{d}{dt} j = +e^2 \cdot E \cdot \sum_k \frac{1}{m^*}$ .

Tekintsünk tehát egy egydimenziós modellkristályt. Legyen a vegyérték sáv teljesen tele, és a vezetési sáv teljesen üres. Az üres vezetési sávban fenti adatok értelemszerűen mind zérussal egyenlők. A teljesen betöltött vegyérték sávban a szimmetria miatt az összenergián kívül a többi három jellemző adat szintén zérus értékű lesz.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 19.oldal

Vigyünk át egy elektront a vegyérték sávból a vezetési sávba!

Határozzuk meg először a vezetési sáv előbb definiált tulajdonságait! Egyetlen vezetési elektronnal lévén szó a sávot jellemző négy adat megegyezik magának a vezetési elektronnak a megfelelő adataival.

Azaz: a hullámszámmra  $\sum k = k_e$ , az energiára  $\sum \varepsilon(k) = \varepsilon(k_e)$ , az áramsűrűsége

$j = -e \sum v(k) = -ev(k_e)$ , az áramsűrűség időbeli megváltozására pedig a

$$+ e^2 E \sum \frac{1}{m^*(k)} = e^2 E \frac{1}{m^*(k_e)} \text{ érték adódik.}$$

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 20.oldal

Térjünk át a vegyérték sávra! A vegyérték sávban egy híján minden állapot be van töltve. A szükséges összegezés formális végigszámolása igen nehéz lenne, és a sávra pontos ismeretét követelné meg. A feladat ennek ellenére igen egyszerűen megoldható. Ennek lényege az, hogy matematikai átalakításokkal elérjük, hogy az összegezésekben a teljesen betöltött sáv adatai jelenjenek meg. Így azután ezek (ha nullák) az összegzésből kiesnek. Ezt úgy érjük el, hogy a megfelelő összeghez hozzáadjuk és le is vonjuk a betöltetlen állapotnak megfelelő adatot.

Az egyszerű számolás végül is ugyancsak egyszerű eredményre vezet. Az egy híján betöltött sáv minden jellegzetes tulajdonságában úgy viselkedik, mintha egyetlen töltéshordozót tartalmazó vezetési sáv lenne.

Azaz: a hullámszámmra  $\sum k = -k_e$ , az energiára  $\sum \varepsilon(k) = \varepsilon_0 - \varepsilon(k_e)$ , az áramsűrűsége

$j = -e \sum v(k) = +ev(k_e)$ , az áramsűrűség időbeli megváltozására pedig

$$+ e^2 E \sum \frac{1}{m^*(k)} = e^2 E \frac{-1}{m^*(-k_e)} \text{ értéket kapunk.}$$

Látható, hogy ennek a „fiktív” töltéshordozónak a töltése pozitívnak(!) adódik, hiszen  $j = +ev(k_e)$ .

Ezt a fiktív töltéshordozót találóan "lyuknak" nevezzük. Alkalmos definíciókkal konzekvens módon megadhatjuk a lyukakra jellemző  $k_{ly}$  hullámszámot, az  $\varepsilon_{ly}(k_{ly})$  energia függvényt, a  $v_{ly}(k_{ly})$  sebesség függvényt és az  $m_{ly}^*(k_{ly})$  effektív tömeg függvényt. Ennek megfelelően például az adódik, hogy a lyuk effektív tömege az öt generáló üres elektronállapotban számítható effektív tömeg negatív szorosa.

Vigyázzunk azonban, a lyuk NEM(!) azonos a be nem töltött üres állapottal (ez különben minden jellemző adatából is látszik). A lyuk egy olyan "fiktív" részecske, amely minden tekintetben egymaga reprezentálja (képviseli) az egyetlen állapot híján betöltött sáv nagyon nagyszámú elektronjának együttes viselkedését. Azaz fizikai viselkedésében a lyuk és az általa reprezentált elektronegyüttes semmi mérhető különbséget nem mutat. Paradox módon a lyuk "létezésében fiktív" ugyan, de fizikai megnyilvánulásaiban igenis valódinak tekinthető.

Mivel a félfémek vezetési sávja "majdnem" teljesen betöltött, ezért a vezetési elektronok együtt úgy viselkednek, mintha kevés számú pozitív töltéshordozó vezetné az áramot. A töltéshordozók viszonylag kis száma miatt nem jó elektromos vezetők és többek között ezért is hívják őket félfémeknek.

A félvezetők elektromos vezetési tulajdonságainak a tárgyalása a lyuk fogalmának a bevezetésével némileg leegyszerűsödik. A vegyérték sáv nagyszámú elektronja helyett az itt definiálható kevés számú lyukakkal lehet számolni. Tehát a félvezetőkben negatív elektronok és pozitív lyukak vezetnek az elektromos áramot, jóllehet a valóságban(?) csak elektronok mozognak!

Mivel (egydimenziós modellben) a vegyérték sáv keskenyebb, mint a vezetési sáv (12. oldal), ezért itt az  $\varepsilon(k)$  görbe laposabb, és így az effektív tömeg nagyobb mint a vezetési sávban. Ezért a vezetésben résztvevő lyukak (vegyérték-sáv alapján számított) effektív tömege nagyobb, mint a vezetésben résztvevő elektronok (vezetési sáv alapján számított) effektív tömege. Egydimenziós modellben a lyukak mindig lomhábbak, mint az elektronok. A valóságot jobban közelítő háromdimenziós modellben ez nincsen egészen így.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 21. oldal

## 2.5. Az elektromos vezetés fizikai alapjai szilárd testekben, az Ohm törvény

Az eddigi modellben a kristályelektronok egy teljesen szimmetrikus hibamentes "merev" rácsban mozogtak. A Bloch állapotok tökéletesen alkalmazkodnak a kristály translációs szimmetriájához és ezt lényegében „öröklék” a Bloch-csomagok is. Külső elektromos tér hatására a kristályelektronok akadály nélkül mozoghatnak. A kristálynak nincs elektromos ellenállása. Ez a valóságban azonban egyáltalán nincsen így. Szükség van tehát (az egydimenziós) modellünk továbbfejlesztésére.

### 2.5.1. A relaxációs idő közelítés

Tekintsük egy egydimenziós fém vezetési sávját. Mint azt már megbeszéltük a fémelektronok esetében mindig 0 Kelvin fokos betöltöttséggel számolhatunk (3. oldal). Tehát az állapotok a Fermi szintig be vannak töltve. A sávabrát tekintve ez azt jelenti, hogy a Brillouin zóna  $(-k_F, +k_F)$  tartományába tartozó  $N_e$  számú állapot van betöltve. A betöltött Bloch csomag állapotok  $v(k)$  csoportsebessége adja meg (a kristályelektronok dinamikai modelljében) az elektronok makroszkopikus léptékben definiálható sebességét. Ez pedig a makroszkopikus áramsűrűséget határozza meg. Ezért meg kell vizsgálnunk a  $v(k)$  sebességek "betöltöttségét" is. Célszerű ezért az  $f^{FD}(\varepsilon, T)$  Fermi-Dirac eloszlásfüggvényt a "k" függvényének tekinteni, azaz a Brillouin zónán értelmezni. Az így kapott  $f_0(k)$  eloszlásfüggvény adja meg formálisan azt, hogy mely "k" hullámszámú Bloch(csomag) állapotok vannak betöltve. Ha külső elektromos tér nincsen jelen, akkor ugyanannyi kristályelektron megy jobbra, mint balra. Az eredő áram(sűrűség) tehát zérus. Ahogyan annak lennie is kell.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 22. oldal

Kapcsoljunk a kristályra egy homogén  $\vec{E}$  elektromos teret. Ennek hatására (15. oldal) a betöltött állapotok az egyik irányba eltolódnak. A kezdeti betöltöttség szimmetriája megszűnik. Az egyik irányban haladó kristályelektronok száma a másik irányban haladók rovására megnő. Az eredő áramsűrűség már nem lesz nulla. Tökéletes kristály esetén a betöltött állapotok ilyen értelmű eltolódása tovább folytatódna. Azonban a valóságban tökéletes és merev kristály nincsen. Mindig vannak jelen különféle típusú rács hibák, idegen atomok (=szennyeződések), egyéb rácszavarások. Ugyanakkor (adott hőmérsékleten) a rácsatomok folytonos rezgőmozgást is végeznek, amelynek következtében a rács minden pillanatban eltér egy kissé az ideális geometriai kristályszerkezetétől. Ennek következtében megbomlik a harmónia a Bloch állapotok és a kristályrács között. A Bloch hullámok szóródnak a szabálytalan kristályon. A kristályelektronok szempontjából ez azt jelenti, hogy az elektronok a külső térből nyert energiájukat átadják a rácsatomoknak (Joule hő formájában). Az elektronállapotok szintjén ez úgy nyilvánul meg, hogy a betöltött elektronállapotok fent említett „eltolódása” megáll és az elektronrendszer felvesz egy ún. „stacionárius” (azaz az időben már nem változó) állapotot.

Az új  $f(k)$  egyensúlyi eloszlás úgy adódik, hogy a kezdeti  $f_0(k)$  eloszlás egy  $\Delta k$  értékkel eltolódik. A  $v(k)$  sebesség függvény és az  $f(k)$  ismeretében az eredő j áramsűrűség kiszámítható. Nyilvánvaló, hogy a  $\Delta k$  eltolódás mértéke a külső  $\vec{E}$  térerősségtől függ és ezért az áramsűrűség az elektromos térrel lesz arányos (ez az ún. differenciális Ohm törvény).

Az  $f(k)$  eloszlás dinamikáját (és így a  $\Delta k$  eltolódást) az ún. Boltzmann egyenlet határozza meg. Mi ennek most az egyszerűsített, egydimenziós változatát fogjuk használni. Az egyenlethez a következő gondolatmenettel juthatunk el.

Az  $f(k)$  időbeli megváltozását két hatás okozza. Az egyik a külső elektromos tér  $\left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_E$ , a másik az

ezzel ellentétes "visszaszóródás"  $\left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_\sigma$ . Ez utóbbi adja meg az elektronrendszer és a kristályrács (fent részletezett) termikus kölcsönhatását. Ha a két effektus éppen kiegyenlíti egymást, akkor beáll a kívánt (termikus) egyensúlyi (stacionárius) állapot és az  $f(k)$  az időben már tovább nem változik, azaz

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_\sigma - \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_E = 0$$

Mivel a külső elektromos tér a betöltött állapotok halmazát tolja el a Brillouin zónában, ezért az eloszlásfüggvény időbeli változása a "k"-kon keresztül érvényesül. Azaz az  $f(k)$  eloszlás az  $f(k(t))$  alakba írható.

A szóródást megadó időderivált csak formálisan jelölhető ki. Részletes számítása túlhaladja e tárgy kereteit, számunkra elegendő lesz egy globális (átfogó, részleteket nem tartalmazó) leíró jellegű közelítés használata is. Ennek a neve a "relaxációs idő" közelítés.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 23.oldal

A relaxációs idő fogalmához a következő gondolatmenettel juthatunk el.

Tekintsük a homogén elektromos térben lévő egydimenziós modellkristályunkat. A betöltött állapotok időben nem változnak, a rendszer egyensúlyi állapotban van. Kapcsoljuk ki az elektromos teret. Ekkor az  $f(k(t))$  eloszlásfüggvény időbeli megváltozása nem lesz zérus, hiszen a szóródást nem kompenzálja a külső tér, tehát

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_\sigma.$$

A külső tér kikapcsolása után a rendszer „hamar” felveszi az  $f_0(k)$ -val jellemezhető alapállapotát. Ha ismernénk a szórási tagot, akkor az egyenletet meg tudnánk oldani. Mivel azonban ezt nem ismerjük így csak általános feltételezéseket tehetünk. Tegyük fel, hogy az „f” eloszlásfüggvény változási sebessége annál nagyobb, minél távolabb van a rendszer pillanatnyi állapota az ismert „ $f_0$ ” egyensúlyi végállapottól, azaz:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_\sigma = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

E feltételezésünket az eloszlásfüggvényre alkalmazva, annak matematikai megfogalmazásban egy „ $\tau$ ” arányossági tényező jelenik meg. Ennek neve a "relaxációs idő”. Az elnevezés eredete rögtön világossá válik, ha megoldva az egyenletet felrajzoljuk az  $f(t)$  függvényt. Most csak az időbeli változás érdekel minket, ezért a „k”-tól eltekinthetünk. Látható, hogy az eloszlásfüggvény exponenciális időfüggéssel közelít a végső egyensúlyi állapotához és kb.  $3\tau$  idő alatt gyakorlatilag "eléri" azt. Tehát minél erősebb a szórási effektus, a „ $\tau$ ” relaxációs idő annál kisebb. Ha nincsen szóródás, akkor a  $\tau$  végtelen. Azaz a rendszer marad a kezdeti állapotában, hiszen nincsen olyan hatás, ami ezt az állapotot megváltoztatná. Ha több, különböző szóródást előidéző effektus hat egyszerre, akkor az eredő hatásra jellemző relaxációs időt a relaxációs idők reciprokainak összege szolgáltatja.

A Boltzmann egyenletbe a szórási tagot relaxációs idő közelítésben beírva az egyenlet lineáris közelítésben megoldható. A lineáris közelítés azt jelenti, hogy  $\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{\partial f_0}{\partial t}$ . Eredményül megkapjuk az eloszlásfüggvény  $\Delta k$  eltolódását. Ez a külső elektromos térrel és a relaxációs idővel arányos, ahogyan azt vártuk is.

### 2.5.2. A vezetőképesség számítása

Minden a rendelkezésünkre áll ahhoz, hogy a kristály vezetőképességét kiszámítsuk.

A külső  $\vec{E}$  elektromos tér hatására létrejött  $j$  áramsűrűség meghatározásához szükség van még a  $v(k)$  sebesség függvényre. Egy újabb közelítés alkalmazásával erre egy egyszerű összefüggés adódik. Feltehetjük ugyanis, hogy a  $\Delta k$  eltolódás normális körülmények között csak akkor, hogy a betöltött állapotok nem hagyják el az  $\varepsilon(k)$  diszperziós reláció parabolikus tartományát. Ezt nevezik "effektív tömeg" közelítésnek, hiszen az

$\varepsilon(k) = \varepsilon_c + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$  összefüggés az  $m^*$  effektív tömegű szabadon mozgó részecskékre jellemző. Ekkor a

$v(k) = \frac{\hbar k}{m^*}$  sebesség függvény „ $k$ ”-ban lineáris lesz, és a „ $j$ ” áramsűrűség egyszerűen meghatározható. A számításokban megjelenik a vezetési elektronok „ $n$ ” sűrűsége. Eredményül az adódik, hogy:

$$j = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \cdot E$$

A számolás eredményeképp megkaptuk az Ohm törvény differenciális alakját, valamint a „ $\sigma$ ” vezetőképesség konkrét kifejezését is. Érdekes összehasonlítani ez utóbbit a klasszikus Drude-moddal által kapott vezetőképesség kifejezésével. Formálisan ugyanaz a képlet adódott. De az elektron  $m_e$  tömege helyett az  $m^*$  effektív tömeget és az átlagos ütközési idő helyett a  $\tau$  relaxációs időt kell használnunk.

Látható tehát, hogy a szilárd testben mozgó töltéshordozók úgy viselkednek, mintha klasszikus tömegpontok volnának. Ez a fizikai kép nagyon egyszerű és szemléletes. De tudnunk kell, hogy az alkalmazhatóságának korlátai vannak.

Foglaljuk ezért össze a felhasznált közelítéseket:

1. Az elektronrendszer **stacioner állapotban** van. Beállt az egyensúly, az elektronok állapotbetöltése időben már nem változik
2. Az **anyag homogén**. A kristályban nincsenek olyan inhomogenitások, amelyek diffúziós effektusokat hoznának létre
3. **Relaxációs idő** közelítés. A kristályatomok és a kristályelektronok között fellépő bonyolult kvantummechanikai szórási folyamatokat kiátlagolva, csupán egyetlen paraméterrel, a relaxációs idővel vesszük figyelembe.
4. **Lineáris közelítés**. A Boltzmann egyenlet közelítő megoldása, amelyben matematikai eszközökkel biztosítjuk, hogy az eloszlásfüggvény csak eltolódjék, de az alakja ne változzon
5. **Effektív tömeg** közelítés. Az elektromos vezetési folyamat során a kristályelektronok mindvégig a diszperziós összefüggés parabolikus tartományában maradnak

Az elektronikus alkatrészekben lezajló vezetési folyamatoknál gyakran használt fogalom a  $m$  mozgékonyosság. Ez az alkalmazott külső elektromos térerősség és a kristályelektron rendszer  $\langle v \rangle$  (statisztikai) átlagsebességének a kapcsolatára jellemző  $\langle v \rangle = \mu \cdot E$ . Ha az effektív tömeg nagy, akkor a mozgékonyosság kicsi és viszont. Az elektronikai számításokban a differenciális Ohm törvényt gyakran a mozgékonyosság felhasználásával írjuk fel.

## 2.6. Szilárd testek háromdimenziós modellje

Mint az az előzményekből kiderült az egydimenziós kristálymodellünk minden lényeges effektusról számot tudott adni. Mivel matematikailag könnyen kezelhető volt, ezért viszonylag kevés munkával alapvetően fontos összefüggésekhez jutottunk. A valóságban azonban a kristályok nem egydimenziósak, szükség van tehát az eredményeink háromdimenziós általánosítására.

### 2.6.1. Ideális kristályok leírása

Minden kristály alapvető tulajdonsága a translációs- és a pont-szimmetria. A szimmetriák jelenléte nagymértékben leegyszerűsíti a szilárdtestfizikai számításokat. Rendszerezett tárgyalásuk ezért nagyon fontos.

A pontrács a térben szabályosan elhelyezkedő geometriai pontok halmaza.

A translációs szimmetriával kapcsolatosak a következő fogalmak. .

**Elemi cella** az az elemi térfogat, amely eltolásával a kristályrács felépíthető.

Ha az elemi cella összesen egy pontot tartalmaz, akkor **primitív cellának** hívjuk. A rácspontok itt a cella csúcsain vannak, ezért a csúcsokon „töredékpontokat” (!) kell venni.

Pontszimmetria azt jelenti, hogy a pontrács önmagába transzformálható úgy hogy egy pontja közben helyben marad (forgatások, tükrözések, inverzió azaz ponttükrözés).

**Bravais cella** a pontrács transzformációk során önmagába transzformálódik. Ha a Bravais cella primitív cella is egyben, akkor **Wigner-Seitz cella** a neve.

Egy fizikai kristály úgy épül fel, hogy a geometriai pontrács pontjaiba atomokat illetve atomcsoportokat teszünk. Ezeket az atomcsoportokat bázisnak hívjuk.

A kristálytani irányok és síkok kijelölésére a Miller indexek szolgálnak. Ezeket az „Anyagtudomány” tantárgyban már részleteiben megismertük.

A kristályok a tárgyalt szimmetriájuk alapján 7 osztályba sorolhatók. Ezen osztályok elemi jellemzői egy „egyszerű köbös” cella megadott „torzításaival” kaphatók meg.

A rácstípusok 4 fajtáját különböztetjük meg. Ezek az elemi cellában elhelyezkedő pontok helyzetében térnek el egymástól.

### 2.6.2. Az elektronállapotok számítása

Az egydimenziós kristálymodell olyan egyszerű volt, hogy csak két szimmetria transzformációt (egy eltolást és egy tükrözést) lehetett definiálni rajta. Ez azonban már elegendő volt arra, hogy bemutassuk azt, hogy az elektronállapotokban és a sávabránban hogyan nyilvánul meg e két fajta szimmetria hatása. Mindez magában rejti az általánosítás lehetőségét. Ezért először megkeressük az analógiát az egy- és a (két)háromdimenziós pontrács között, majd ennek ismeretében megkonstruáljuk a (két)háromdimenziós elektronállapotokat és a sávabrát.

Egy háromdimenziós pontrácsot három bázisvektor az  $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3\}$  segítségével építünk fel.

Egy  $\vec{R}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$  rácspontot a bázisvektorokkal adunk meg ( $n_i = \text{egész szám}$ ).

A tér egy tetszőleges pontját egy  $\vec{r}$  helyvektor jelöli ki.



A kristály makroszkopikus méretét a három éle mentén elhelyezkedő atomok száma ( $N_i \mid i=1,2,3$ ) adja meg. A rácsot így  $N = N_1 N_2 N_3$  számú atom építi fel.

A rácsszerkezetnek megfelelően fellép a  $V(\vec{r} + \vec{R}_n) = V(\vec{r})$  translációs szimmetria.

A felületi hatások elhanyagolására szolgáló Born-Kármán féle periodikus határfeltételt értelemszerűen mindhárom irányban teljesíteni kell, azaz  $\psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi(\vec{r})$  ( $i=1,2,3$ ).

A translációs szimmetria következtében az elektronállapotokhoz most is Bloch függvények rendelhetők, amelyek egy  $\vec{k}$  hullámszám vektorral (I. füzet 1. oldal) jellemezhetők  $\psi(\vec{r}) = u(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}}$ .

A  $\vec{k}$  (hullámszám)vektor meghatározása a skalár komponenseinek a megadásával történik. Ez azonban általános esetben (ha az  $\vec{a}_i$  kristály bázisvektorok nem ortonormáltak) eléggé nehézkes volna. Ezért a  $\vec{k}$  vektorokat egy ún. reciprok bázis  $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$  bázisvektoraival adjuk meg. Ennek az a nagy előnye, hogy a  $\vec{k} = \kappa_1 \vec{b}_1 + \kappa_2 \vec{b}_2 + \kappa_3 \vec{b}_3$  vektor skalár együtthatói (a Born-Kármán féle periodikus határfeltételek alkalmazásával) igen egyszerűen számíthatók ki.

A reciprok bázist a kristály pontrácsának az  $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3\}$  bázisvektorai segítségével definiáljuk az  $\vec{b}_j \vec{a}_i = 2\pi \delta_{ji}$  összefüggés szerint.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 29. oldal

A reciprok bázis egy reciprok pontrácsot definiál, amelyben a rácspontokat a  $\vec{K}_m = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$  vektorok adják meg ( $m_j = \text{egész szám}$ ). A reciprok pontrács egy primitív cellája csak olyan  $\vec{k}$  vektorokat tartalmaz, amelyek különböző Bloch állapotokat határoznak meg. Így tehát a  $\vec{k}$  és a  $\vec{k} + \vec{K}_m$  hullámszám vektorok ugyanazt a Bloch függvényt adják meg. A reciprok pontrács Wigner-Seitz cellája a kristályrács ponttranszformációi során önmagába megy át, így tehát az egydimenziós esetben használt definíció alapján (9. oldal), ez lesz az (első) Brillouin zóna.

Ennek megszerkesztése a következőképpen történik. Kiválasztjuk a reciprok pontrács egyik rácspontját, nevezzük ezt el  $\Gamma$  (gamma) pontnak. Ezek után megkeressük, a gamma pontot a legközelebbi rácspontokkal összekötő, egyenes szakaszokat. Majd felvesszük ezen egyenes szakaszok felező merőleges síkjait. Ezek a síkok fogják határolni az első Brillouin zónát. Mivel a kristályrács ponttranszformációi során a reciprok pontrács valamint az őket összekötő egyenesek rendszere önmagába megy át, ezért a zóna is önmagába fog transzformálódni. Ha ugyanezt az eljárást folytatjuk a második, a harmadik, stb. szomszédokkal, akkor mindig az újabb és a régi síkok által határolt térrész fogja adni a második, a harmadik, stb. Brillouin zónákat. A Bloch állapotú kristályelektronok lehetséges energiáit a  $\varepsilon_\nu(\vec{k})$  kifejezés adja meg ahol  $\nu = 1,2,3,\dots$  a sávindex. Ezen (többértékű) vektorváltozós skalár függvény (rendszer) szemléletes ábrázolására jól kidolgozott módszerek vannak. Az elkövetkezőkben ezzel fogunk megismerkedni. Ugyanis ez elengedhetetlenül szükséges ahhoz., hogy egy valódi kristály bonyolultnak tűnő sáv szerkezetéből kiolvashassuk a minket érdeklő, a mérnöki munkához szükséges adatokat.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 30. oldal

### 2.6.3. A sáv szerkezet ( diszperziós reláció)

A háromdimenziós kristály energia sáv szerkezete, sáv ábrája egyes részleteiben igen hasonlít az egydimenziós modelléhez, de vannak olyan új vonásai, amelyek a térbeli dimenziószám megnövekedéséből fakadnak. Ezek már kétdimenziós modelleken is megjelennek. Mivel a kétdimenziós modellek szemléltetése

egyszerűbb, ezért először ezen mutatjuk be az említett sajátosságokat. A valódi, háromdimenziós kristályok sáv szerkezete ezek után már könnyen érthető lesz.

Az egyszerűség végett tekintsünk egy "egyszerű négyzetes" kristályt. (Ez felelne meg a háromdimenziós egyszerű köbös kristályszerkezetnek.) Ennek a reciproknál pont rácsa szintén négyzetes lesz. A Brillouin zónák most síkbeli tartományok, amelyek megszerkesztése az előzőekben elmondottak szerint történik. Azzal az értelemszerű változással, hogy a felező síkok helyett most felező egyenesek alkotják a Brillouin zónák határait.

A négyzetes rács valódi ponttranszformációi: forgatások (3 db.), tükrözések (4 db.) és az inverzió.

Az első Brillouin zóna tartalmazza azokat a  $\vec{k}$  vektorokat, amelyekre meg kell határozni az  $\varepsilon_\nu(\vec{k})$  kristályelektron energiákat.

A pontszimmetria miatt könnyen kijelölhető a Brillouin zónának az a legkisebb egyszeresen összefüggő elemi része, amellyel a forgatások és a tükrözések alkalmazásával az egész zóna "lefedhető". Elegendő ezért az energia sajátértékeket csak ebbe a tartományba tartozó elektron állapotokra kiszámítani. A többi már ezekből a pontszimmetria révén kiadódik. Ezt az elemi tartományt nevezetes pontok ( $\Gamma, X, M$ ) és tengelyek ( $\Sigma, \Delta, Z$ ) határolják. Az ezeken lévő pontok bizonyos értelemben "speciális" hullámszám vektorokat jelentenek. Például a  $\Sigma$  és a  $\Delta$  tengelyek pontjaihoz tartozó Bloch hullámok hullámfrontjai éppen a kristályrács bizonyos rácssíkjaival párhuzamosak. Így ezek viselkedése, érthetően, hasonló lesz az egydimenziós hullámokéhoz, ezért a hozzájuk tartozó sávakra is hasonló jellegű kell, hogy legyen. Ezt a tényt a későbbiekben majd fel is fogjuk használni

Az  $\varepsilon_\nu(\vec{k})$  ( $\nu=1,2,3,\dots$ ) elektronenergiák szemleltetése két, egymást kiegészítő módon történik. Az egyik módszernél a  $\vec{k}$  vektorokat (a kiterjesztett Brillouin zónákon) a teljes reciproknál rácspan értelmezzük és az első zónában az  $\nu=1$ , a másodikban az  $\nu=2$ , stb. sávindexnek megfelelő energia értékeket adjuk meg. Ezáltal már csak egy egyértékű vektorváltozós  $\varepsilon(\vec{k})$  energia függvényünk van. Ezt pedig a matematikában tanultak szerint ún. "szintfelületekkel" ábrázoljuk. A szilárdtestfizikában ezeket (a Brillouin-zónában definiálható felületeket) Fermi felületeknek hívják. A "szintfelület" (Fermi felület) jelen esetben (a két dimenzió miatt) az a görbe vonal, amelynek minden  $\vec{k}$  pontjához ugyanaz az energiaérték tartozik. Ezek, a Brillouin-zónában felvett szintvonalak természetesen eleget tesznek a kristályra jellemző pontszimmetriáknak.

A másik módszernél a Brillouin zóna elemi tartományát határoló tengelyek (élek) mentén kiszámítjuk az  $\varepsilon_\nu(k)$   $\nu=1,2,3,\dots$  energiákat és azt az illető tengely mentén mint egy egyváltozós többértékű függvényt felrajzoljuk. A kapott két ábra nem független egymástól. A közös pontoknál meg kell, hogy feleljenek egymásnak.

Anélkül, hogy bármit is számolnánk, az eddigi egydimenziós tapasztalatunk is elég már ahhoz, hogy kvalitatíve helyes ábrákat rajzoljunk. Ehhez fogjuk felhasználni azt, a fizikai megfontoláson alapuló észrevételünket, hogy a  $\Sigma$  és a  $\Delta$  tengelyek mentén az egydimenziós esethez hasonló  $\varepsilon_\nu(k)$  függvényeket kell kapnunk. A  $Z$  tengely mentén a két végpont ( $X$  és  $M$ ) között monoton görbét "kell" (?) rajzolnunk.

Két, egymástól lényegesen különböző sávra szerkeszthető. Az egyiknél megjelenik a már ismert tiltott sáv. A másik azonban olyan tulajdonságot mutat, ami újdonság az egydimenziós modellhez képest. Ez pedig az ún. "sávátfedés" jelensége. Ekkor a Brillouin zónában olyan szintfelületek jelennek meg, amelyek két zónára is kiterjednek. A bemutatott példán ez az  $\varepsilon_3 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_5$  energiához tartozó Fermi-felületek. Az energiáskálán ez a tiltott sáv eltűnéséhez vezet. Ezáltal válik érthetővé az, hogy páros egyértékű fémek is létezhetnek. A egydimenziós modell szerint ez ugyanis lehetetlen volna (III. füzet 17. oldal).

#### 2.6.4. Az elektronok dinamikája

Mint azt már láttuk, ha a kristályra külső (pl.) elektromos teret kapcsolunk, akkor a kristályelektronok dinamikáját effektív tömeg közelítésben szoktuk tárgyalni. Ekkor a kristályelektronok állapotához Bloch-féle hullámcsomagokat rendelünk. Ugyanezt kell csinálnunk a két(három)dimenziós modell esetén is. Ügyelnünk kell azonban arra, hogy most a vektorokkal(!)  $(\vec{r}, \vec{k}, \vec{v}_{cs}, \vec{a}_{cs}, \vec{F}, \dots \text{stb.})$  kell dolgoznunk. Így a  $\vec{v}_{cs}$  csoportsebesség definíciójában szerepelő elsörendű „k”-szerinti deriválás helyett a neki megfelelő gradiens képzés művelete lép. Az  $\vec{a}_{cs}$  csoportgyorsulás számításakor szükséges „k”-szerinti másodrendű deriválást a neki megfelelő derivált tenzonnal kell helyettesíteni. Láthatóan az effektív tömeg is tenzor mennyiség lesz. (A tenzor a véges dimenziós vektortéren értelmezett lineáris transzformáció) Ez fizikailag azt jelenti, hogy az erő és az általa létrehozott gyorsulás nem fog egy egyenesbe esni. Tudva azt, hogy az effektív tömeg magába foglalja az kristályrács hatását is ezen nem kell csodálkoznunk.

Az effektív tömeg tenzor definíciójából következik, hogy az öt megadó (effektív tömeg) mátrix szimmetrikus lesz. Ugyanis (mint azt a matematikai analízis alapjaiban tanultuk) a vegyes másodrendű deriváltaknál a deriválás sorrendje nem számít. Az is ismeretes, hogy minden szimmetrikus tenzor diagonalizálható. Azaz mindig felvehető egy olyan koordináta-rendszer, amelyben csak a (szimmetrikus) tenzor főátlójában vannak véges mennyiségek, a többi elem zérus. Ez a mi esetünkben azt jelenti, hogy legáltalánosabb esetben az effektív tömeg tenzor három különböző effektív tömeggel jellemezhető. A legegyszerűbb esetben egyetlen effektív tömeg van, ami azt jelenti, hogy az effektív tömeg tenzor egy skalárral való szorzást jelent.

Az eddigiek eredményeképpen az Ohm törvényben szereplő  $\sigma$  vezetőképesség is  $\underline{\underline{\sigma}}$  tenzor lesz. (Általában két vektort tenzori, azaz lineáris, kapcsolat fog összekötni).

Vizsgáljuk meg, hogy milyen "pályán" fog mozogni egy a makroszkopikus skálán pontszerűnek képzelt kristályelektron. A fizikai jelenséget a kétdimenziós modellen mutatjuk be.

Kapcsoljunk a kristályra egy homogén  $\vec{E}$  elektromos teret!

Ez a tér a kristályelektronra állandó  $\vec{F} = -e\vec{E}$  erőt fejt ki. A  $\vec{v}_{cs}$  csoportsebességet célszerű a Brillouin zónában ábrázolni. Magából a definícióból következik, hogy a csoportsebesség vektor mindig merőleges lesz a Fermi felületekre (a gradiens miatt!). Az állandó külső erő pedig az állapotot reprezentáló "pontszerű spektrumot" egyenletes sebességgel mozgatja a Brillouin zónában, a már jól ismert (III. füzet 15. oldal)  $\vec{F} = \hbar \dot{\vec{k}}$  összefüggésnek megfelelően. (Ez a spektrum csak a zóna méretéhez képest "pontszerű", válójában igen sok  $\vec{k}$ -vektor végpontját tartalmazza, amelyek előállítják a kristályelektron reprezentáló hullámcsomagot). A sebesség iránya és nagysága pillanatról pillanatra változni fog. Ennek a következtében, a kristály makroszkopikus méretéhez képest „pontszerűnek” tekinthető (hullámcsomaggal megadott) kristályelektron bonyolult, zezzugos mozgást fog végezni a kristályban.

Vizsgáljuk meg mi történik akkor, ha a kristályra merőleges, homogén mágneses teret kapcsolunk be!

Ekkor a kristályelektronra ható Lorentz erő merőleges lesz a mindenkori (csoport)sebességre. Mivel a csoportsebesség merőleges a Fermi felületre (most ezt vonalak jelenítik meg), így a  $\vec{k}$  vektor mindvégig a Fermi felületen marad. Tehát a kristályelektron energiája nem fog megváltozni, ahogyan azt az elektrodinamika szerint vártuk is. A Brillouin zónában az elektront reprezentáló pont (ne feledjük, válójában ez egy nagyon kis kiterjedésű "pontszerű" spektrum!) egy zárt görbén mozog és ennek megfelelően a kristályelektron is egy zárt pályán mozog a kristályban. A  $T_C$  keringési idő nyilvánvalóan mindkét esetben ugyanakkora. Ha az elektron nem kristályban mozogna, akkor a jól ismert körpályát és a ciklotron frekvenciát kapnánk. Ki lehet számítani annak az elektronnak az  $m_B^*$  effektív tömegét, amelyik ciklotron frekvenciája éppen a most kiadódó körfrekvenciával egyenlő. Ez szoros összefüggésben van a Fermi "vonal" által körbezárt területtel.

### 2.6.5 Az állapotosság

Láttuk, hogy kétdimenziós kristálymodell esetén a sáv szerkezet (sávakra) bonyolultabb szerkezetű, mint egy dimenzióban volt és mindent tud már, amit a háromdimenziós eset produkál. Ezért a kétdimenziós modell alapján pontos kijelentéseket tehetünk a reális kristályok sáv szerkezetének néhány általános tulajdonságára. Az egyik ilyen az állapotosság. Az állapotosságot az elektronok energia szerinti eloszlásának a meghatározásához kell ismernünk.

A kétdimenziós kristály sávbróját tekintve látható, hogy a sáv szélein az  $\varepsilon_v(k)$  függvénynek szélső értéke van. Ezért ez parabolával közelíthető. De ez a "parabolikus sáv szél" egyben azt is jelenti, hogy itt az effektív tömeg közelítést használhatjuk. Azaz a kristályban mozgó elektronokat (a sáv szél környéki energiákon!) szabadon mozgó, de effektív tömeggel rendelkező elektronoknak tekinthetjük. Az egyszerűség végett olyan (szimmetrikus) esetet vizsgálunk, amikor az effektív tömeg egyetlen ( $m^*$ ) skalárral adható meg! Mint azt már láttuk, a szabadelektronok állapotossága (három dimenzióban)  $\sqrt{\varepsilon}$ -nal arányos (III. füzet 2. oldal). Mivel a Fermi felület a sáv közepén eltér a "gömbtől" (háromdimenziós modell), így ott az állapotosság is eltér a négyzetgyökös függvénytől (megmutatható, hogy nagyobb lesz!).

Vegyünk először egy félvezetőt!

A tiltott sáv környékén az állapotosság a "négyzetgyökös" függést követi. A két "gyök" meredeksége azonban az effektív tömegek különbözősége miatt nem lesz egyenlő. Ha a vezetési sáv elektronjainak és a vegyérték sáv lyukainak az effektív tömege megegyezne, akkor a Fermi-szintet (az elektronszám állandósága miatt) pontosan a tiltott sáv közepébe kellene helyezni. Mivel a lyukak effektív tömege (általában) nagyobb mint az elektronoké, ezért a Fermi-szint kissé a felezőpont fölött lesz. A pontos számolással később találkozunk.

Sávátfedés esetén, az állapotok összeadódnak és az eredő állapotosság értelem szerűen megszerkeszthető.

## 2.7. Félvezetők általános tulajdonságai

### 2.7.1. A Fermi-szint meghatározása szerkezeti félvezetők esetén

A félvezetők elektromos tulajdonságainak a megértéséhez szükséges tudni, a félvezetőben lévő töltéshordozók (elektronok és lyukak) számát. Ez az állapotosság és a T hőmérséklet ismeretében tehető meg. Mivel a Fermi-Dirac eloszlásfüggvény csak a Fermi szint közelében tér el lényegesen a 0 Kelvin fokos "lépcső függvénytől", ezért elegendő az állapotosságot csak a sáv szélek közelében konkrétan ismerni. De tudjuk, hogy effektív tömeg közelítésben az állapotosság az energiának négyzetgyökös függvénye lesz.

A vegyérték és a vezetési sáv energia szintjei ( $\varepsilon \leq \varepsilon_v$  és  $\varepsilon_c \leq \varepsilon$ ) már elegendően távol vannak a Fermi szinttől ahhoz, hogy a Fermi-Dirac eloszlásfüggvényt ezekben a tartományokban exponenciális függvénnyel lehessen közelíteni. Így már egy egyszerű integrálással (igen jó közelítéssel) meghatározhatjuk a vezetési sávban lévő elektronok  $n_c$  számát:

$$n_c = N_c \cdot \exp\left\{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_F}{kT}\right\} \quad (\text{ahol „k” a Boltzmann állandó!}).$$

Az  $N_c \approx (m_e^* kT)^{3/2}$  mennyiséget az elektronok „effektív számának” hívjuk.

### Fontos megjegyzés:

A háromdimenziós elektrongáznál az állapotsűrűség kifejezése valójában tartalmazza a gáz  $L^3$  térfogatát is (III.füzet 2. oldal). Ezért a vezetési elektronok állapotsűrűsége is függ a szilárd test  $L^3$  térfogatától, azaz

részletezve:  $N_c(\varepsilon) = \text{állandó} \cdot L^3 \cdot (m^*)^3 \cdot \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c}$ . Így az imént meghatározott „effektív szám” is

arányos a térfogattal, azaz  $N_c = \text{állandó} \cdot L^3 \cdot (m_e^* kT)^{3/2}$ .

Míndezek a számítások egy  $L^3$  térfogatú, tökéletesen homogén félvezetőre vonatkoztak. A valódi esetben elképzelhető, hogy a makroszkopikus skálán, a félvezetőben a fizikai viszonyok már nem tekinthetők homogénnek. Például a hőmérséklet, vagy az effektív tömeg a hely függvénye lehet, vagy külső elektromos tér van jelen, stb. Ekkor, legtöbbször a félvezető lokálisan (azaz a mikroszkopikus skálán) még homogénnek tekinthető. Ezért az előző számítások lokálisan (azaz a tér egy adott  $L^3 = \Delta V$  térfogatelemében) továbbra is helyesek lesznek.

Célszerű ezért a fenti eredményeket „egységnyi térfogatra” vonatkoztatni, azaz a vezetési elektronok  $n_c$  (térfogat) sűrűségéről beszélni. A továbbiakban ezt külön nem hangsúlyozzuk ugyan, de mindvégig a „lokálisan homogén” modellt használjuk és így például a töltéshordozók térfogati sűrűségét határozzuk meg.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 36. oldal

Mint azt tudjuk (III.füzet 18.-20. oldal), a majdnem betöltött vegyérték sávban lévő elektronok együttesen úgy viselkednek, mintha a félvezetőben az üres helyek által definiált pozitív lyukak lennének jelen. Ezért a vegyérték sávban lévő üres helyek száma éppen a pozitív töltéshordozó lyukak  $n_{ly}$  számát adja meg. A számolás gondolatmenete és matematikai lépései pontosan megegyeznek azzal, amit vezetési sávban lévő elektronok kiszámításánál követtünk. Ezért az eredmény is igen hasonló:

$$n_{ly} = N_{ly} \exp\left\{-\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_v}{kT}\right\}, \text{ ahol } N_{ly} \approx (m_{ly}^* kT)^{3/2} \text{ a lyukak effektív számát jelenti.}$$

A Fermi szintet az a feltétel határozza meg, hogy az elektronok száma a félvezetőben a hőmérséklet változása során mindvégig állandó marad. Ez azt jelenti, hogy az  $n_e = n_{ly}$  feltételnek minden T hőmérsékleten teljesülnie kell. Ebből a Fermi szint "helyzete" meghatározható. Pontosán a várt eredmény adódott. Nevezetesen, ha a vezetésben résztvevő elektronok és lyukak effektív tömege megegyezik, akkor a Fermi-szint éppen a tiltott sáv közepén lesz. Ha a kétféle effektív tömeg eltér egymástól, akkor a Fermi szint ennek megfelelően a középről eltolódik.

A másik igen érdekes és fontos eredmény az, hogy az elektronok és a lyukak számának a szorzata nem függ a Fermi szint helyzetétől! Értékét (az egyéb adatokon kívül) a tiltott sáv szélessége  $\Delta\varepsilon_g = \varepsilon_c - \varepsilon_v$  határozza meg.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 37. oldal

### 2.7. A fajlagos vezetőképesség számítása szerkezeti félvezetők esetén

Minden adat rendelkezésünkre áll ahhoz, hogy kiszámítsuk egy félvezető makroszkopikusan is mérhető  $\sigma$  vezetőképességét. Azt már tudjuk (III.füzet 25. oldal), hogy általános esetben a vezetőképességet milyen fizikai adatok határozzák meg. Eszerint, csak a töltéshordozók száma az, ami a hőmérséklettel változni fog. Figyelembe kell még vennünk azt, hogy kétféle töltéshordozó (elektron és lyuk) vesz részt a vezetésben. Az egyszerűsítés végett tegyük fel, hogy e kétféle töltéshordozó effektív tömege megegyezik. Az előzőekben láttuk azt, hogy a hőmérséklet csökkenésével a töltéshordozók száma is csökken. Míndezek alapján kiadódik az a már

előzőleg kvalitatíve felismert effektus (III.füzet 17. oldal), hogy a vezetőképesség a hőmérséklet csökkenésével szintén csökkenni fog.

Alacsony hőmérsékleti tartományra a  $\sigma(T)$  függvényt konkrétan is meg tudjuk határozni:

$$\sigma(T) = \text{állandó} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left\{-\frac{\Delta \varepsilon_g}{2kT}\right\}.$$

Ennek a matematikai kifejezésnek van egy érdekessége. Nevezetesen, igaz ugyan, hogy  $T \rightarrow 0$  esetben  $\sigma(T) \rightarrow 0$ , de nem tudunk egy közelítő hatványfüggvényt megadni, mert  $T=0$  esetén a függvény bármely rendű deriváltja zérus. Azaz a  $\sigma(T)$  függvény „nagyon laposan” indul.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 38. oldal

### 2.7.3. Adalékolt félvezetők

Eddig ún. szerkezeti félvezetővel foglalkoztunk.

Ez egy homogén félvezető egykristályt jelentett.

$T=0$  Kelvin fokos hőmérsékleten a vegyérték sáv teljesen tele van míg a vezetési sáv teljesen üres. Ha a rendszerhez hozzáadnánk egy elektront, akkor az csak a vezetési sávba kerülhetne. A vezetési elektronok számát azonban a gyakorlatban ilyen módon megnövelni nem tudjuk, mert így a félvezető kristály eredő elektromos töltése megváltozna. A kristály feltöltődne, ami makroszkopikus szinten is érezhető nem kívánatos hatásait. Az ötlet azonban nem elvetendő és egy egyszerű trükkel megvalósítható. Eszerint az elektronnal együtt adjunk egy protont is a rendszerhez! Ezt legegyszerűbben úgy érhetjük el, hogy egy (Si) szilícium atomot pl. egy (P) foszfor atomra cserélünk ki. Ezt nevezzük adalékolásnak (néha szennyezésnek). A kétféle atom elektronszerkezetéből látszik, hogy az iontörzsük felépítése teljesen egyforma. Joggal feltételezhetjük (ismerve a protonok és az atomok egymáshoz viszonyított méretét), hogy a kétféle iontörzs mérete is jó közelítéssel ugyanakkora. Tehát ez az "atomcsere" semmiféle rácsdeformációt nem fog okozni. Mivel ezáltal a kristályba egy többlet elektron került, a foszfor atomokat "donor" atomoknak nevezzük. A többlet elektron neve a "donor elektron". (Donor = valamit adó.)

A foszfor atom környezetében azonban a fizikai viszonyok megváltoznak. Ennek oka az, hogy a foszfor iontörzs a környezetéhez képest egy protonnyi (pozitív) töltéstöbblettel rendelkezik. Ez az első pillanatra bonyolultnak tűnő rendszer egy egyszerű "hidrogénszerű modellel" közelítőleg egészen jól leírható. Tekintsük, ugyanis a szilícium kristályt folytonos (kontinuum) közegnek. Ekkor a foszfor atom helyén egy pontszerű pozitív (többlet)töltés fog megjelenni. A foszfor atom ötödik (többlet) vegyérték (donor) elektronja pedig ennek a terében kötött állapotba fog kerülni. Ha a donor elektron energiája elegendően nagy, akkor az "leszakadva" a pozitív ponttöltéstől, attól nagyon "eltávolodik". Ha az elektron olyan messze került a pozitív töltéstől, hogy annak hatása már elhanyagolható, akkor ő már csak a tiszta szilícium kristályt érzékeli maga körül. Az elektron ekkor a szilícium kristályban immáron „szabadon” fog mozogni (azaz Bloch állapotban lesz). De mint tudjuk ebben az esetben az energiájának a szilícium kristály vezetési sávjába kell esnie. Ebből következik, hogy a foszfor atom jelenléte a szilícium kristályban úgy modellezhető, mint egy (folytonos) szilícium közegben lévő hidrogén atom, amelynek ionizációs energiaszintje (a vákuum szint helyett) a szilícium kristály vezetési sávjának az alja. Ennek a hidrogén atomnak az elektronja kétféle módon is érzékeli azt, hogy ő egy szilícium kristályba van "beágyazva". Egyrészt az elektromos töltése polarizálja a környezetében lévő kristályt, amit a szilícium dielektromos állandóján keresztül lehet figyelembe venni. Másrészt a szabályos kristályráccsal való kölcsönhatását az effektív tömegébe lehet "beépíteni". Mindez azt jelenti, hogy a foszfor atom körül kialakuló kötött állapotok energiaszintjeit úgy kell meghatározni, hogy a hidrogén atom energiaszintjeit megadó összefüggésbe a vákuum „ $\varepsilon_0$ ” dielektromos állandója helyett a szilícium „ $\varepsilon_0 \varepsilon_r$ ” dielektromos állandóját írjuk, és az elektron „ $m$ ” tömege helyett a szilícium kristályban adódó „ $m^*$ ” effektív tömeget használjuk.

A hidrogén atom energiaszintjeinek az ismeretében az említett módosításokat elvégezve, azt kapjuk, hogy a kötött állapotok energiaszintjei a vezetési sáv alja alatt, ahhoz nagyon közel, a tiltott sávban helyezkednek el. Alapállapotban (0 Kelvin hőmérsékleten) tehát az adalékolt félvezetők elektronszerkezete úgy néz ki, hogy a vegyérték sáv teljesen tele van, a vezetési sáv teljesen üres és a (donor) elektronok a foszfor atomok környezetében kötött állapotban vannak. Már nagyon kis hőmérséklet emelkedésre a kötött állapotban

lévő donor elektronok leszakadnak a donor atomokról és felkerülnek a vezetési sávba. Sikerült tehát megnövelni a vezetésben résztvevő elektronok ("n" típusú, negatív töltéshordozók) számát. Ezért ezt a félvezetőt "n-típusú félvezetőnek" szoktuk hívni.

Számoljuk ki a donor atomot modellező hidrogén atom, "méretét". Az ezt jellemző adat lehet az első Bohr sugár. Azt kapjuk eredményül, hogy a "modell hidrogén" atomunk sugara kb. 30-szor akkora mint egy szabad hidrogén atomé. Tételezzük fel, hogy a kristályrácsban az atomok távolsága a szabad hidrogén atom átmérőjének kb. 3-4 szerese. Ebből az következik, hogy a szilícium kristályban lévő hidrogénszerű atom kb. 100 db kristályatomot foglal magába. Ami a modellt kiindulásául szolgáló folytonos anyag feltételezésével összhangban van.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 39. oldal

Teljesen hasonló a helyzet akkor, ha egy szilícium atomot egy alumínium (Al) atomra cserélünk ki. Most a rendszerből elvettünk egy elektront és egy protont is. Ezért az alumínium atomot "akceptor atomnak", a kristályt "akceptor félvezetőnek" nevezzük. (Akceptor = valamit elfogadó, itt elvevő) Az egy elektron elvétele azt jelenti, hogy a vegyérték sávban egy üres hely jelenik meg. Mint azt láttuk, a vegyérték sáv elektronjai együttesen egyetlen pozitív lyukként fognak viselkedni. Ez a pozitív lyuk lép kölcsönhatásba a hiányzó protont modellező negatív ponttöltéssel. A kötött állapotok számítása is pontosan úgy történik mint a donor adalékolás esetén volt. A "lyuk sáv alatt" megjelenő kötött állapotú energiaszinteket az elektron energiakálára visszatranszformálva (III.füzet 19. oldal) azok a "vegyértéksáv feletti" energiaszintekként jelennek meg. Gerjesztéskor lyukak ("p" típusú, pozitív töltéshordozók) jelennek meg a félvezetőben. Ezért ezt a félvezetőt "p típusú félvezetőnek" szoktuk nevezni.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 40. oldal

A gyakorlatban szükséges ismerni az adalékolat, szobahőmérsékletű félvezetők makroszkopikus vezetési tulajdonságait. Ehhez pedig tudnunk kell a töltéshordozók számát. A vezetésben résztvevő töltéshordozók számát pedig az energiasáv betöltési viszonyai adják meg. Mint az ismeretes, az elektronok energia szerinti eloszlását a Fermi-Dirac statisztika határozza meg. Ehhez pedig ismerni kell a Fermi szint helyzetét. Ezért tulajdonképpen azt kell tudnunk, hogy adalékolat félvezetők esetén hol van a Fermi szint.

Tekintsük egy n-típusú félvezető állapotosságát. Ez abban különbözik a szerkezeti félvezetőétől, hogy a tiltott sávban megjelenik egy "hegyes" Dirac delta típusú függvény is. Ez az  $\epsilon_d$  donor szintekhez tartozó, kötött állapotokat megadó állapotosságát jelenti.  $T=0$  Kelvin fokon a Fermi-szintnek valahol az  $\epsilon_d$  donor szint és  $\epsilon_c$  a vezetési sáv alja között kell lennie. A pontos helyét az határozza meg, hogy kis hőmérsékleten a donor szintet elhagyó elektronok száma gyakorlatilag meg kell, hogy egyezzen a vezetési sávban lévő elektronok számával, hiszen ekkor még a vegyérték sávból gyakorlatilag egyetlen elektron sem került fel a vezetési sávba.

Ha a hőmérséklet elég magas, akkor tetemesen megnő a vegyértéksávból átjutott elektronok száma és ehhez képest elhanyagolhatóvá válik a donor szintről érkezett elektronok száma. (Ne feledjük el, hogy a donor atomok  $N_d$  száma kicsi az összelektronok számához képest!) Ekkor a helyzet nagyon hasonló lesz a szerkezeti félvezetőkéhez, ahol a vezetési elektronok  $n_e$  száma megegyezik a lyukak  $n_h$  számával. Tehát a hőmérséklet emelésével a Fermi szint a tiltott sáv közepe felé tart. Nyilvánvaló, hogy a Fermi szint annál alacsonyabb hőmérsékleten éri el a tiltott sáv közepét, minél kevesebb a donor atomok száma, azaz minél kisebb vezetési elektronszám esetén válik a donor elektronok száma elhanyagolhatóvá.

Akceptor adalékolás esetén a gondolatmenet teljesen hasonló. De most  $T=0$  Kelvin hőmérsékleten a Fermi-szint az  $\varepsilon_v$  vegyérték sáv teteje és az  $\varepsilon_a$  akceptor szint között kell, hogy legyen.

A Fermi-szint helyzetét  $T$  hőmérsékleten megadó  $\varepsilon_F(T)$  függvény, adott  $N_d$  donor illetve  $N_a$  akceptor adalékolás esetén, felrajzolható.

Ezt a függvényt a mérnöki gyakorlatban, az elektronikai alapszámítások során gyakran használják.

#### 2.7.4. A p-n átmenet

A félvezető alapú elektronikai alkatrészekben a működés fizikai alapja az ún. "p-n átmenet".

Ez úgy állítható elő, hogy egy p-típusú és egy n-típusú félvezetőt szorosan összeillesztünk.

Fizikai alapjait tekintve a helyzet nagyon hasonló ahhoz, mint amikor két fém érintkezését vizsgáltuk (III.füzet 5. oldal). Van azonban egy lényeges különbség is a két eset között. Ez pedig a fémek és az adalékolt félvezetők elektronszerkezetének a különbözőségéből adódik. Nevezetesen a tiltott sáv jelenléte tesz alapvető különbséget a fémeknél kialakuló kontakt potenciál és a p-n átmenet potenciálviszonyi között.

A két félvezető összeérintésekor elektronok lépnek át az n-típusú félvezetőből a p-típusúba. Így az érintkező felület két oldala között töltésmegosztás keletkezik, amely potenciálkülönbséget hoz létre a két félvezető között és ez csökkenti az eredeti Fermi szintek közötti különbséget. Ez a töltésmegosztás addig folytatódik, ameddig a rendszer egyensúlyi állapotba nem jut, azaz két Fermi szint egyenlő nem lesz. Ugyanis egyetlen kvantummechanikai rendszerről lévén szó, csak egyetlen Fermi szint lehet. Mivel az átmenet elektronok  $\Delta N$  száma sokkal kisebb mint a két félvezetőben lévő elektronok ( $N_p$  és  $N_n$ ) száma, ezért a Fermi szintnek az energiasávokhoz viszonyított helyzete gyakorlatilag nem változik meg.

A fémekkel ellentétben a (pozitív illetve a negatív) többlettöltések nem fognak az érintkező felületeken lokalizálódni, hanem (a dielektrikumoknak megfelelően) a határoló felület környezetében oszlanak el. A kialakult térfogati töltéssűrűség alakítja ki az eredő elektromos teret és így az elektronok potenciális energia függvényét. Ennek közelítő kiszámítására az **Elektronika-c. tantárgy** kereteiben kerül sor.

Az elektronok energia szerinti eloszlását a Fermi-Dirac eloszlásfüggvény határozza meg.

Kapcsoljunk a „p-n” átmenetre egy olyan külső  $\vec{E}$  elektromos teret amely a „p”-tól az „n” irányába mutat! Ekkor az elektronok vezetési sávbéli energiaszintjei az „n” oldalon (a megadott ábra szerint) „fel felé” tolnak el. Ezáltal az „n” oldali betöltött energiaszintek a „p” oldali csak kevésbé betöltött (mondhatni üres) energiaszintekkel kerülnek azonos nivóra. Ezáltal az „n” oldali „többségi” töltéshordozók (ezek most az elektronok) átmennek a „p” oldalra. Azaz egy „I” áram lép fel. Ezt a jelenséget „nyitásnak” nevezzük. A „p-n” átmenetre kapcsolt „U” feszültséget „nyitó feszültségnek”, a folyó áramot „nyitó irányú áramnak” hívjuk. Hasonló a helyzet a vegyértéksávban lévő „lyukakkal”. Ugyanis a „nyitó irányú” tér hatására a „p” oldalon többségben lévő lyukak átáramlanak az „n” oldalra, ezzel is növelve a nyitó áram nagyságát.

Ellenkező irányú  $\vec{E}$  elektromos tér bekapcsolásakor a vezetési sávban lévő elektronok energiaszintjei az „n” oldalon (az ábra szerint) „le felé” tolnak el. Ezáltal az „p” oldali kevésbé betöltött energiaszintek az „n” oldali (gyakorlatilag) üres energiaszintekkel kerülnek azonos nivóra. Ezáltal az „p” oldali „kisebbségi” töltéshordozók (ezek most is az elektronok) átmennek a „n” oldalra. Azaz egy igen kicsi „I” áram lép csak fel. Ezt a jelenséget „zárásnak” nevezzük. A „p-n” átmenetre kapcsolt ilyen irányú „U” feszültséget „záró feszültségnek”, a folyó kicsi áramot pedig „záró irányú áramnak” hívjuk. Hasonlóan magyarázható a vegyérték sávban lévő kisebbségi „lyukak” áramlása is.

A tárgyalt „p-n” átmenet az ún. félvezető dióda.

A jellegzetes  $I(U)$  dióda (karakterisztika) függvény matematikai formában történő meghatározására szintén az **Elektronika-c. tantárgy** bevezető fejezeteiben kerül majd sor.



## 2.8. Félvezető kristályok

Az eddigiekben egy- és kétdimenziós modellkristályokkal foglalkoztunk. Didaktikai előnyük abban rejlett, hogy az elméleti számításokat egyszerűen el lehetett végezni és az eredmények szemléltetése sem jelentett különösebb gondot. Ezen kívül minden lényeges fogalmat és effektust be tudtunk mutatni a segítségükkel.

A valóságban azonban a kristályok háromdimenziósak. Szükséges tehát megnézni, hogy az eddig tanultakat hogyan lehet felhasználni a valódi kristályok sáv szerkezetének és sávábrájának a meghatározására.

### 2.8.1. Általános tulajdonságok

A minket érdeklő félvezető kristályok ún. "gyémánt" szerkezetűek. Az első pillanatra talán bonyolultnak tűnő rácsszerkezet szépen beleillik a már megtárgyalt osztályozási rendszerünkbe (III. füzet 27. oldal)

A gyémánt szerkezet pontrácsa laponcentrált köbös rács. A rács pont minden pontjába egy (adott helyzetű) két atomból álló bázis van. Így kialakul az a szerkezet, amelyben minden atomot négy másik vesz körül és ez a négy atom éppen egy tetraéder négy csúcspontján van.

Mivel a gyémánt szerkezet pontrácsa laponcentrált köbös, ezért a reciproklaponcentrált köbös szerkezetű lesz.

A Brillouin zóna a már ismertetett módszerrel megszerkeszthető.

A vizsgált szigetelők és félvezetők (C, Si, Ge) bázis atomjainak elektronszerkezete nagyon hasonló. A négy vegyérték elektron közül kettő "s", kettő pedig "p" állapotban van. (II. füzet 64.-65. oldal) A kémiai tapasztalatok szerint (mivel az „s” és a „p” állapotok energiája közel azonos) vegyüléskor az egyik "s" állapotú elektron "p" állapotba megy át. Ezáltal egy "s" és három "p" állapotú vegyértékelektron adja a "négy vegyértékű" atom elektronszerkezetét. Ezt az effektust nevezzük „hibridizációnak”.

Ebből a négy elektron állapotból szuperpozícióval (1. axióma) olyan ún. hibrid állapotokat lehet előállítani, amelyek térbeli irányítottága megfelel a tetragonális rácsszerkezetnek. Ezeket nevezik  $sp^3$  hibrid pályáknak.

Bármelyik  $sp^3$  hibrid állapotfüggvény az "s" és a három "p" állapotfüggvény megfelelő előjellel vett összege lesz (1. axióma)

A kristályt most is elő lehet úgy állítani, hogy a rácsatomokat fokozatosan közelítjük egymáshoz (III. füzet 12. oldal) Az energiasávok kialakulása most is az atomi energiaszintek felhasadásából származik. A hibridizáció csak azonos energiájú állapotok között jöhet létre. Az atomok közötti kölcsönhatás megváltoztatja a atomi energiaszinteket, így lehetőség van arra, hogy a kezdetben különböző energiájú "s" és "p" állapotok energiája (II. füzet 63. oldal) egyenlővé váljon. Az atomok hibrid pályái egymáshoz kapcsolódva kötő vagy lazító pályákat alakítanak ki (II. füzet 90. oldal)

A kötő  $sp^3$  hibrid állapotok adják a vegyérték sávot és a lazító  $sp^3$  hibrid állapotok adják a vezetési sávot. A tiltott sáv szélessége dönti el, hogy szigetelőről (C) vagy pedig félvezetőről (Si, Ge) van szó.

### 2.8.2. A szilícium sávszerkezete

A kristály pontszimmetriájának a következtében ki lehet jelölni a Brillouin zónának azt az elemi tartományát amellyel, a ponttranszformációkat végrehajtva, az egész zóna lefedhető. A tartományt határoló élek (ún. speciális tengelyek) mentén meghatározhatjuk az  $\epsilon_v(\vec{k})$  sávábrát (diszperziós relációt). Ennek ismeretében megkereshetjük a tiltott sávot.

Eredményül a következők adódnak.

A vegyérték sáv teteje a Brillouin zóna középpontját jelölő  $\Gamma$  pontban van

Termikus gerjesztés során a  $\Gamma$  pont közelében lévő elektronállapotokat elhagyják az elektronok és a vezetési sávba kerülnek. A kiürült állapotok hatására pozitív töltéshordozók, azaz lyukak jelennek meg a félvezetőben. A kiürült állapotokat jellemző  $\vec{k}$ -vektorok (a kristály szimmetriája és a parabolikus sávszél következtében) egy  $\Gamma$  pont körüli, gömb alakú Fermi-felület belsejében lesznek. A lyukak egyetlen skalár effektív tömeg értékkel jellemezhetők.

A vezetési sáv alján lévő állapotokat reprezentáló  $\vec{k}$  hullámszám vektorok a Brillouin-zóna  $\Delta$  tengelyein, a zónahatárok (X pontok) közelében lévő pontokban található. A termikus gerjesztés hatására a vezetési sávban megjelenő elektronok a Brillouin-zóna ezen pontjaival definiált Bloch-állapotokat töltik be. Ezen betöltött állapotokat reprezentáló  $\vec{k}$ -vektorok egy adott energiához tartozó Fermi felület belsejében lesznek. Ez a Fermi-felület most nem lesz egy „összefüggő” felület. Ugyanis mivel 6db  $\Delta$  tengely van, így a szóban forgó Fermi-felület is összesen 6db forgási ellipszoidból fog állni.

A forgási ellipszoid alakú Fermi-felület azt jelenti, hogy a vezetési elektronok dinamikáját megadó effektív tömeg tenzor két különböző skalár effektív tömeggel jellemezhető (III.füzet 32.oldal)

A vezetési kristályelektronok sebesség vektora erre a Fermi felületre lesz merőleges (III.füzet 33.oldal).

A sávszélek közelében a várt "négyzetgyökös" állapotsűrűséget kapjuk.

### 2.8.3. A germánium sávszerkezete

A szilíciumhoz hasonló módon elemezhető a germánium (Ge) sávszerkezete is.

A részleteket, gyakorlás céljából, a Tisztelt hallgatóra bízunk.

Érdemes azonban egy fontos észrevételt tennünk.

A megadott sávábrából látszik, hogy a vezetési sáv alján lévő elektronállapotok most a Brillouin-zóna „L” határpontjainak a környezetében lesznek. A megadott Brillouin-zóna ábrából látható az is, hogy összesen 8db „L” pont van. Minden (zónahatáron lévő) „L” pont köré egy-egy fél (forgási) ellipszoid alakú Fermi-felület rajzolható. Ebben lesznek a vezetési sávban megjelenő elektronok Bloch-állapotait megadó  $\vec{k}$ -hullámszám vektorok. Látható, hogy a 8db fél ellipszoid csak 4db teljes forgási ellipszoidot jelent szemben a szilícium esetén adódó 6db-al.

Ez fizikailag azt jelenti, hogy a vezetési sáv alján az állapotsűrűség a szilícium esetén kb. 1.5 szer nagyobb mint a germánium kristályban. Azaz ugyanolyan hőmérsékleten a szilícium kb. másfélszer több vezetési elektront (és ennek megfelelő lyukat) tartalmaz. Így a vezetési tulajdonságai jobbak. Többek között ez is az oka annak, hogy mára már a germánium gyakorlatilag kiszorult a „kommersz” félvezető iparból.

#### 2.8.4. A Gallium-Arzenid kristály

A következőkben arra foguk példát látni, hogy egy kristály adott sávszerkezete hogyan vezethet egészen furcsa és érdekes makroszkopikus jelenségekhez, amelyeket azután az elektronikus alkatrészekben hasznosíthatunk.

A GaAs (gallium-arzenid) kristály pontrácsa szintén laponcentrált köbös rács. A pontrács minden pontjába egy kétatomos bázist teszünk ugyanúgy, mint a gyémántszerkezet esetén. Most azonban a bázis egyik atomja a gallium, a másik atomja az arzén.

Tekintsük meg a GaAs sávábráját!

A vezetési sávban két lokális minimum található. Mindkettő a  $\Lambda$  tengelyen van, az egyik a  $\Gamma$ , a másik az L pontban. Emiatt ezt a félvezetőt "kettős völgyű" félvezetőnek nevezzük. A völgyek alján definiálható effektív tömegek nem egyenlők. Ez azt jelenti, hogy a különböző völgyekben lévő vezetési elektronok mozgékonyasága nem ugyanakkora. Azaz a kristály ellenállása is más, attól függően, hogy a vezetési elektronok az egyik, vagy a másik völgyben vannak.

Mint azt már láttuk, külső térerősség hatására a betöltött állapotok  $\Delta k$ -val "elmozdulnak" az kezdeti szimmetrikus helyzetükhöz képest (III.füzet 23.oldal). Ez makroszkopikus szinten úgy nyilvánul meg, hogy a kristályban „I” áram folyik. A térerősséget a kristály végeire kapcsolt „U” feszültség generátorral tudjuk változtatni. Alacsony feszültség értékeknél a vezetési elektronok a  $\Gamma$  pont körüli völgyben vannak, ahol az effektív tömeg kisebb. Ezért az elektronok mozgékonyasága nagyobb, a kristály ellenállása kisebb. Magasabb feszültségeknél a kristályban fellépő térerősség már elegendően nagy ahhoz, hogy a vezetési elektronokat (helyesebben az általuk betöltött állapotokat) "átolja" a másik, L pont körül lévő völgybe. Itt az effektív tömeg nagyobb, a vezetési elektronok mozgékonyasága kisebb, a kristály ellenállása nagyobb lesz. E két helyzet közötti átmenet az áram-feszültség karakterisztikába "mérnöki érzékkel" berajzolható.

Látható, hogy megjelent egy ún. "negatív differenciális ellenállású" tartomány, amely az eszközt speciális áramköri felhasználásra teszi alkalmassá. (Az elnevezés onnan származik, hogy ebben a tartományban az I(U) görbe meredeksége negatív. Azaz az I áramnak az U feszültség szerinti első differenciál hányadosa negatív.)

Mi most egy másik, nem kevésbé érdekes jelenséget fogunk ismertetni. Ez az ún. **Gunn effektus** (1964).

Az I(U) "áram-feszültség" diagram a kristály makroszkopikus elektromos vezetési tulajdonságait adja meg. Ugyanakkor, ennek megfelelően, megkaphatjuk a vezetési elektronok szintjén lezajló folyamatokra jellemző  $v(E)$  "sebesség-térerősség" diagramot is. Hiszen az „I” áramerősség a töltéshordozók „v” sebességével, az „U” feszültség pedig a félvezetőben jelen lévő „E” térerősséggel arányos.

Kapcsoljunk a kristályra akkora  $E_0$  térerősséget, hogy az a "negatív meredekségű" tartományba essék. Ez azt jelenti, hogy a vezetési elektronok sebessége  $v_0$  lesz. Tételezzük fel, hogy valahogyan kialakul a kristályban egy kis "elektron sűrűsödés". Ekkor ez, a környezetéhez képest negatív, kis tértöltés tartomány stabil lesz azaz nem fog "szétdiffundálni". Ennek az az oka, hogy a tértöltés tartomány által keltett elektromos tér hozzáadódik a külső elektromos térhez. Így a sűrűsödés előtt haladó elektronokra a külső térnél nagyobb térerősség hat. Ezért a sebességük kisebb lesz, mint  $v_0$ , hiszen a negatív meredekségű  $v(E)$  tartományban vagyunk. Hasonló okok miatt a sűrűsödés mögött haladó elektronok a külső térnél kisebb térerősséget érzékelnek és ezért a sebességük nagyobb lesz, mint  $v_0$ . Ez az effektus mintegy összetartja ezt a lokalizált tértöltést. Ez a stabil tértöltés tartomány, mint egy "áramimpulzus", állandó  $v_0$  sebességgel végigrohan a kristályon. Ha egy alkalmas elektronikával mindig akkor indítunk el egy újabb áramimpulzust, amikor az előző a kristályból éppen kilép, akkor egy igen stabil mikrohullámú oszcillátorhoz jutottunk. Az oszcillátor frekvenciáját a  $v_0$  sebesség értéke és a kristály hossza határozza meg.

Egy tipikus adat:

10  $\mu\text{m}$  hosszú kristály esetén 10 GHz frekvenciát kapunk.

## 2.9. Szilárd testek optikai tulajdonságai és a sáv szerkezet

Ha egy kristályra fény (elektromágneses hullám) esik, akkor annak egy része elnyelődik. Ezt nevezzük fény abszorpciónak. Az elnyelődés mértéke függ a beeső fény frekvenciájától is. Azt fogjuk most megvizsgálni, hogy kristály sáv szerkezete hogyan határozza meg az abszorpciós tulajdonságokat. És viszont, az abszorpciós spektrum mérése milyen információkat szolgáltat a kristály sáv szerkezetéről.

A szilícium (Si) a germánium (Ge) és a gallium-arszenid (GaAs) sáv bráját összehasonlítva egy lényeges különbséget fedezhetünk fel.

Azt mondjuk erre, hogy a GaAs "közvetlen vagy direkt sávú", a Si és a Ge "közvetett vagy indirekt sávú" félvezető. Az elnevezés onnan származik, hogy a GaAs esetén a vegyérték sáv teteje és a vezetési sáv alja a Brillouin zónának ugyanabban a pontjában van, míg a Si és a Ge esetében nem. Ezért GaAs esetében egy elektront "közvetlenül felvihetünk" a vegyérték sávból a vezetési sávba, ugyanakkor Si és Ge esetén az elektronnak még "impulzust is kell kapnia" ehhez.

A vezetési elektronok gerjesztése optikai úton is történhet. A következőkben ezt fogjuk részletesen is megvizsgálni.

Az energiaskálán a folyamat a következőképpen zajlik le. A kristályba belépő elektromágneses hullám kölcsönhatásba lép a vegyérték sáv tetején lévő,  $\epsilon_v$  energiájú elektronnal. Az elektron egy  $\hbar\omega$  fotonnyi energiát elnyel és ennek hatására felugrik a vezetési sáv aljára, azaz az energiája  $\epsilon_c$  lesz. Ugyanakkor az elektron mindvégig kölcsönhatásban van a kristályráccsal is és ennek eredményeképpen egy  $\hbar\omega_q$  "fononnyi" energiát (II. füzet 85. oldal) lead vagy felvesz ( $\pm$ ). Erre a folyamatra természetesen mind az energia, mind pedig az impulzus megmaradás tételének teljesülnie kell. Látható, hogy a foton és a fonon nem megmaradó mennyiségek! (II. füzet 82. oldal) Mivel a foton hullámhossza több ezerszer is nagyobb lehet, mint a kristály rácstávolsága, ezért a  $\hbar\vec{k}$  impulzusa elhanyagolható az elektron és a fonon  $\hbar\vec{q}$  impulzusa mellett. Továbbá tudjuk azt is, hogy mindkét félvezető típusban a vegyérték sáv teteje a ( $\vec{k}_\Gamma = 0$ )  $\Gamma$  pontban van, ami azt jelenti, hogy itt az elektron (kvázi)impulzusa nulla,  $\hbar\vec{k}_\Gamma = 0$ .

Az energia és az impulzus megmaradást kifejező egyenleteket megoldva lényeges különbség adódik a direkt és az indirekt sávú félvezetők között. Nevezetesen:

$$\text{direkt átmenetnél ez elnyelt foton energiája: } \hbar\omega \geq E_g,$$

$$\text{indirekt átmenetnél ez elnyelt foton energiája: } \hbar\omega \geq E_g \pm \hbar\omega_q.$$

Az abszorpciós spektrumból meghatározható  $E_g$  a tiltott sáv szélessége, és indirekt sávú félvezető esetén a vezetési sáv aljának a helye(?) a Brillouin zónában ( $\hbar\omega_q$  segítségével).

## 2.10 Mikrostruktúrák: A jövő elektronikája

### A technológiai haladás és a kvantummechanika.

A elektronikai technológia fejlődése az elmúlt évtizedekben elképesztő méreteket öltött. Ez tette lehetővé azt a szédületes fejlődést, amely olyan eszközök tömeggyártását tette lehetővé, amelyek gyökeresen megváltoztatták a mindennapi gazdasági és társadalmi tevékenységeinket is. Átformálta a világgazdaság arculatát és a politikai mozgások trendjét is befolyásolta. Egy valóban végbemenő ipari forradalom szenvedő de

egyben csodáló és reményeink szerint tevékeny részesei vagyunk. Mindennek kiindulópontja egy tisztán elméleti modell a kvantummechanika megszületése volt.

A mai kor mérnöke és fizikusa szemtanúja lehet az "elmélet" és a "gyakorlat" aktív és termékeny kölcsönhatásának. A tények győznek meg minket arról, hogy ez a kétféle tevékenység nem egymást kizáró, hanem egymást kiegészítő területe a modern műszaki tudományoknak. Ma már elő tudunk állítani olyan atomi struktúrákat, amelyek a kvantumos effektusok egész sorát emeli be a gyakorlati alkalmazások sorába. A következőkben ezekről szeretnénk egy-két szót szólni. Koránt sem a teljesség igényével, inkább csak bepillantást engedve a "jövő elektronikája" elvi műhelyébe.

A mai modern technológia lehetővé teszi a kristályok rétegenkénti "növesztését". Ezzel el lehet érni azt, hogy "közel hasonló" kristályok (pl.:  $GaAs - AlGaAs$ ) tetszőleges vastagságú rétegei egyetlen rácssík mentén érintkezve épüljenek egymásra. Ekkor az egyes rétegekben a Fermi szintek egyenlőek, de a tiltott sávok különbözőek lesznek. Ennek következtében például a vezetési sávban lévő elektron (az elválasztó rácscsíknál) egy potenciállépcsőt fog érzékelni. Két ilyen átmenet potenciálvölgyet vagy potenciál gátat hoz létre. Így nyernek valódi fizikai realitást a kvantummechanikai bevezetőben megoldott egyszerű, tisztán elviek hitt feladatok (I. füzet. 16. oldal és 32. oldal). A kettős potenciálgát által létrehozható rezonáns alagúteffektus ma már mérhető makroszkopikus áram-feszültség karakterisztikát produkál.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 51. oldal

### **Meglepő kísérlet-maglepő elmélet: A kvantált Hall-effektus**

A potenciálvölgy mélysége adott, azt a  $AlGaAs - GaAs - AlGaAs$  sáv szerkezete határozza meg. A völgy szélességét (ami a GaAs kristályréteg szélessége) mi választjuk meg. Ha a völgy elegendően keskeny akkor csak egyetlen kötött állapotú energiaszintet fog tartalmazni. Így az (ebben a keskeny kristályrétegben lévő) elektron a rétegre merőlegesen kötött állapotban van és ezért a rétegben tulajdonképpen kétdimenziós mozgást végez. A vezetési elektronok sokasága tehát kétdimenziós elektrongázt alkot. Ennek a kvantummechanikai tulajdonságai és azok makroszkopikus megnyilvánulása eltér a háromdimenziós esettől. Ennek (történetileg) az első példája a kvantált Hall-effektus.

*"Ritkán fordul elő, hogy egy fizikai jelenség születésének az óráját olyan pontosan meg lehessen állapítani, mint a kvantumos Hall jelenségét. 1980. február 4-éről 5-ére virradó éjjel 2 óra körül járt az idő a grenoble-i Erős Mágneses Terek Laboratóriumában amikor egyszer csak felvetődött az ötlet, hogy "a" kísérleti eredményeket újféléképpen kellene értelmezni....A különös felismerés az volt, hogy a Si-MOSFET félvezető eszközök bizonyos elektromos tulajdonságait az erős mágneses térben már nem befolyásolják a szilárdtest egyedi részletei. Függetlenül attól, hogy a mérést melyik cég által gyártott mintán végeztük el, újra meg újra ugyanazt az elektromos ellenállást mértük, melynek értékét a Természet határozta meg. A félvezető eszközök eltérő mikroszkopikus tulajdonságainak nyilvánvalóan semmiféle hatásuk nem volt erre az eredményre."* írja visszaemlékezésében Klaus von Klitzing a jelenség felfedezője. Ez előtt a februári nap előtt senki nem sejtette, hogy egy hétköznapi félvezető eszköz extrém körülmények között drámaian új jelenséget képes produkálni. Ráadásul olyat, amelynek magyarázata nem kevés fejtörést okoz majd az elméleti szakembereknek és a szilárdtestfizikai kutatások újabb frontját indítja el.

Mindez kerekén 100 évvel a Edwin Hall felfedezése után történt! Mi is tehát ez a "mérnöki eszközön" produkált meghökkentő jelenség?

A klasszikus Hall-effektussal már foglalkoztunk (III. füzet 18. oldal). Végezzük el a Hall kísérletet egy nagyon vékony (kb. 100 Angström = 10 nanométer vastagságú) Si kristály rétegen, nagyon erős mágneses teret alkalmazva (kb. 20 Tesla) és igen alacsony hőmérsékleten (kb.  $T=0.01$  Kelvin). Ekkor meglepő eredményt tapasztalhatunk! A Hall állandó (szokás Hall ellenállásnak is mondani) a klasszikus mérés szerint arányos az alkalmazott mágneses térrel. Most azonban, a klasszikus egyenes mentén lépcsőszerűn emelkedő görbe adódik.

A lépcsők platói jól meghatározott sorrendben követik egymást:  $\frac{h}{e^2} \cdot \frac{1}{i}$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ). A Hall ellenállás platói

tehát egy elemi egységnél, annak felénél, harmadánál, stb. ...vannak. Az  $\frac{h}{e^2}$  elemi egység értéke 25812.8 Ohm.

Az ohmikus ellenállás a klasszikus esetben állandó, azaz nem függ a mágneses tértől. Most azonban azoknál a mágneses tereknél, ahol a Hall ellenállás állandó, az ohmikus ellenállás a nullára csökken.

Első pillanatra talán nem érthető az effektus nagyon nagy jelentősége. Mindenesetre az elgondolkodtató, hogy a felfedezője Klaus von Klitzing öt (!) évre rá megkapta a fizikai Nobel-díjat. És ez nem véletlen! A kvantált Hall effektus jelenségének elméleti magyarázatára tett erőfeszítések elősegítették (illetve napjainkban is elősegítik) a kölcsönható elektrongázok igen bonyolult elméletének a fejlődését. Ugyanakkor egy nagyon jól reprodukálható ellenállás etalont lehet a segítségével készíteni, aminek a mérés technikai előnye óriási.

Röviden megpróbáljuk vázolni az (egész számú!) kvantált Hall-effektus kvalitatív elméleti magyarázatának az elemeit. A szemléletesség miatt sokszor klasszikus fizikai fogalmakat (képeket) használunk, de a kvantummechanika törvényeit alkalmazzuk majd.

A vékony félvezető rétegben egy kétdimenziós elektrongáz van jelen. A szokásos módon (III.füzet 2.oldal) megmutatható, hogy a kétdimenziós elektrongáz (pálya)állapotsűrűsége állandó, azaz független az energiától. Ha erős mágneses teret kapcsolunk a rendszerre, akkor az elektronok  $\omega_c$  ciklotron körfrekvenciával körpályán fognak mozogni. A mágneses térnek azért kell nagyoknak lenni, hogy a körpályák sugara lényegesen kisebb legyen, mint a kristály makroszkopikus mérete. A kvantummechanika szerint minden oszcilláló rendszer energiája kvantált. Ezért mágneses térbe helyezett kétdimenziós elektrongáz energiája is kvantált lesz (a diszkrét energia értékeket Landau nívóknak nevezik) Az energiaszintek távolsága az oszcillátor kvantálási törvényének megfelelően  $\hbar\omega_c$ . A bekapcsolt mágneses tér nem változtatja meg az elektronrendszer energiáját (a Lorentz erő merőleges a sebességre!) Ezért a létrejött Landau nívóknak degeneráltaknak kell lenni. Egy Landau nívóhoz azok a szabadelektron állapotok fognak majd tartozni amelyek energiája egy  $\hbar\omega_c$  tartományban vannak. Mivel a kétdimenziós elektrongáz állapotossűrűsége állandó, ezért a Landau-nívók degeneráltsága nem függ az energiától csak az alkalmazott mágneses tértől. Így, adott mágneses tér esetén, minden egyes Landau nívóhoz az elektronoknak ugyanakkora térbeli sűrűsége tartozik.

ã OROSZ L. Szilárdtestfizika 53.oldal

Az elektronsűrűség tehát a betöltött Landau nívóhoz tartozó elektronok sűrűségének az összege lesz. A Hall ellenállás így a betöltött Landau nívók számától függ. Ezt pedig az alkalmazott mágneses tér fogja meghatározni a következőképpen.

A kristályban mindig vannak szennyező atomok és rácshibák. Ezek lokalizálni tudják a kétdimenziós elektrongáz "ciklotron" állapotainak egy részét. Tehát szabad és lokalizált állapotok lesznek jelen. (Ennek könnyen belátható topológiai oka van.) Az energia skálán ez úgy jelenik meg, hogy a szennyező atomok és kristályhibák hatására a Landau nívók felhasadnak (sávokká szélesednek), a degeneráltság megszűnik. Az állapotossűrűség függvény jellegzetes, egymástól elkülönülő "púpokból" fog állni. A mágneses tér növelésével az  $\omega_c$  ciklotron körfrekvencia nagyobb lesz, ezért a Landau nívók közötti  $\hbar\omega_c$  távolság növekszik és így az állapotossűrűség "púpjai" ritkábban fognak elhelyezkedni. Tehát a Fermi szint alatt kevesebb betöltött Landau sáv lesz és ezért a Hall ellenállás lépcsőzetesen csökkenni fog. Platókat azokban a térerősség tartományokban kapunk, amikor a Fermi szint két púp közé esik. Ekkor ugyanis a nem változik a Fermi szint alatti betöltött Landau sávok száma. Az ohmikus ellenállás ezekben a tartományokban azért válik nullává, mert a szabad állapotok mind be vannak töltve és a Pauli-elv miatt az elektronok nem mehetnek át alacsonyabb energiájú állapotba és így energia veszteség nélkül haladnak át a kristályon.

A törtszámú kvantum Hall-effektus  $\left( i = \frac{m}{n} \right) \left( pl : i = \frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \dots, \frac{5}{3}, \dots, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \dots, \frac{3}{7}, \dots \right)$  magyarázata lényegesen nehezebb. Ez már jócskán meghaladja (még kvalitatív szinten is) ennek az tantárgynak a színvonalát.

Érdeemes azonban ezzel kapcsolatban megjegyezni a következőket.

Láttuk, hogy ez egész számú kvantált Hall-effektusnál (IQHE) lényegében független, kétdimenziós elektrongáz viselkedését vizsgáljuk erős mágneses térben. A törtszámú kvantált Hall-effektusnál (FQHE) a kétdimenziós elektrongáz a kölcsönhatások miatt igen bonyolult „kollektív” mozgást végez, amelynek eredményeképp az egész rendszer úgy viselkedik, mintha törtszámú elemi töltések lennének jelen. Az elmélet

során olyan állapotfüggvényeket kellett konstruálni, amelyek gyökeresen különböznek a kvantumfizikában eddig használt valamennyi állapotfüggvénytől. 1980 előtt erre még gondolni sem lehetett!

Az FQHE elmélete alapvetően más, mint az IQHE elmélete volt. Sokan a kvantummechanika (és az elméleti szilárdtestfizika) újabb diadaláról beszélnek és nem is véletlenül. Éppen ezért nem is csodálkozhatunk azon, hogy Klitzing után 13 évvel a Nobel-díj bizottság ismét a kvantált Hall-effektussal kapcsolatban ítélte oda a legrangosabb nemzetközi tudományos kitüntetést három amerikai fizikusnak.

Az 1998-as fizikai Nobel-díjat megosztva *Robert B. Laughlin* (Stanford University), *Horst L. Störmer* (Columbia University) és *Daniel C. Tsui* (Princeton University) kapták indoklásul „a törtöltésű gerjesztésekkel rendelkező, új típusú kvantum folyadék felfedezéséért.”

A mai Szilárdtestfizika fejlődése szépen bizonyítja az „elméleti” és a „gyakorlati” kutatások szoros kölcsönhatásának szükségességét és hatékonyságát. Maga Störmer hangsúlyozta, hogy ő nem mérnök, nem ért a mérnöki munkához, de a felfedezésük nem lett volna lehetséges a hihetetlenül magas szintre fejlődött félvezető technika nélkül. Ebben az értelemben a felfedezés sok szakember komoly munkájának az eredménye. Az már „csak” a szerencsétől függ, ha valaki jó időben jó helyen van. Itt érdemes megjegyezni, hogy mindhárom kitüntetett, a jelenség felfedezésekor a Bell-laboratórium munkatársai voltak. Úgy látszik, hogy tényleg „jó helyen” voltak.

## UTÓSZÓ

### Arccal a jövő elektronikája felé: „Jóslat, beteljesülés, törvény”

Az Electronics-c. műszaki tudományos folyóirat **1965. április 19-i** számában egy cikksorozat jelent meg, amelynek összefoglaló címe: „A szakemberek előretékinenek”

Ezen sorozat egyik, mindössze három és fél oldalas tanulmányának (az első pillanatra meglehetősen unalmasnak tűnő) címe a „Több komponens integrált áramkörökbe zsúfolása” volt. A szerzője **Gordon E. Moore** a „Fairchild Camera and Instrument Corporation” neves cég félvezető kutatásának a vezetője, villamosmérnök, aki azonban jelentős fizikai és kémiai ismeretekkel is rendelkezett. A cikkben néhány, igen futurisztikusnak tűnő kijelentés volt olvasható:

„Az integrált áramkörök olyan csodákhoz fognak vezetni, mint az otthoni számítógépek, a gépkocsik automatikus vezérlése, hordozható személyi kommunikációs eszközök.” Tehát „Az integrált elektronika jövője maga a jövő elektronikája.” Ne felejtjük el, hogy **ekkor 1965-öt írunk!** A „szobányi” méretű és a maiakhoz képest igen lassú számítógépek világában a jóslat valóban hihetetlennek tűnt. A szerző később az Intel Corporation (napjaink egyik vezető chip-gyártó cégének) egyik társalapítója lett.

Az akkori merész jóslat mára a mindennapok valóságává vált. Nehéz lenne elképzelni hétköznapi életünket **személyi számítógépek, mobiltelefonok, GPS** szolgáltatások nélkül.

A szerző neve mégsem a látnoki jóslata beteljesülése miatt vált ismertté, hanem a cikkében közölt kis grafikon és az ahhoz fűzött magyarázó megjegyzése révén. Moore azt vette észre, hogy az integrált áramkörök első megjelenése (1959) óta eltelt 6 évben (1959-1965) az egy chipen elhelyezett tranzisztorok száma évente megkétszereződött. Előrejelzése szerint, ha ez a folyamat az elkövetkező tíz évben (1965-1975) folytatódik, akkor ez 1975-ben chipenként 65 000 elemet jelent majd. A valóságban ez a szám 1975-ben „csak” 12 000 volt. Ezért a „megkétszereződés” idejét később egy év helyett 18 hónapra módosították. Mindez azonban az exponenciális növekedési törvény lényegét (amit ma már **Moore törvénynek hívnak**) nem érinti.

„A történelem irányt váltott, nemcsak a az új számítás-, kommunikációs- és hírszerzési technika eredményeként, hanem a Moore-törvény által leírt öngyorsulási ráta megjelenésének köszönhetően is. A sűrű számítógépchipeket még sűrűbb chipek előállítására használták, és így tovább a végtelenségig. A chipenkénti komponensek számának 18 havonkénti megkétszereződése megduplázza a számítógépek hatékonyságát és felére csökkentette a költségeket. A számítógépek egyre kisebbek, gyorsabbak, olcsóbbak és okosabbak lettek és még csak nem is egyenletes arányban, hanem gyorsuló mértékben. A robbanás 1975-ben kezdődött, folytatódott 1985-ben 1995-ben és minden jel arra utal, hogy az állandó gyorsulás legalább 2015-ig tart majd. Mindez, 56 év alatt 37 kétszereződést és a teljesítmény 137 milliárdszoros (137 000 000 000) növekedését jelenti. A technika történetében nincsen példa ilyen hosszán tartó, öngerjesztő fejlődésre.....A mérnökök arra a tapasztalati szabályszerűségekre jutottak, hogy minden 10-szeres mennyiségi változás minőségi változást jelent, azaz egy egyszerű extrapolálás helyett alapvetően új helyzetet teremt. Moore törvénye kb. 3 évente hoz egy 10-szeres szerkezeti változást így minden egyes évtizedre 3 forradalom jut. Egyik forradalom a másik után hullámszik át a számítógépiparon.” (Stewart Brand: „Amíg világ a Világ”-c műve nyomán.)

Izgalmas korban élünk: durván háromévente avulnak el az elektronikus készülékeink.

Felmerülhet joggal a kérdés, vajon meddig tarthat a Moore törvény érvényessége? Mikor jutunk el olyan elemi alkatrész méretig, amikor már az atomi méretek tartományába jutunk. Ahol már csupán csak néhány atom alkot egy „elemi alkatrészt”. Ma már látjuk ezeket a „furcsa” elemeket. „Kvantum fonalak”, „kvantum pöttyök”, „egyelektron tranzisztorok”, „csöpögő elektronok” mind mind a jövő „nanotechnológiaájának” az elemei. A jövő beláthatatlanul érdekesnek ígérkezik. Kvantummechanika nélkül ebben a világban nemhogy eligazodni nem lehet, de még a problémák lényegét és jelentőségét sem lehet megérteni majd.

### **Kinyílik-e újra „Pandora szelencéje”?**

David Deutsch brit fizikus 1984-ben egy számítógép-elméleti konferencián vett részt. Ekkor gondolkozott el azon, hogy a jelenlegi számítógépeink lényegében a „klasszikus fizika elvei alapján működnek” (már ami a jelek manipulálását illeti). A nagyfokú integráltság csak a használt logikai elemek miniaturizálását jelentik. Deutsch-ban az a gondolat fogalmazódott meg, hogy mi lenne, ha már az elemi műveleteknél is a kvantummechanika elvei működnének.

Egy „két állapotú rendszer” (mint amilyen az elektron spinje is) ideális kvantummechanikai tároló elem lenne. Ezt ma „kvantumbit”-nek vagy „qubit”-nek (kiejtése: kju-bit) nevezzük. Egy ilyen tároló elem abban különbözik a klasszikus elemtől, hogy felvehet egy szuperponált állapotot is. Tegyük fel, hogy az elem egyik állapotát (nevezzük ezt a „0” jelű állapotnak) a  $\varphi_0$  állapotfüggvény és a másik állapotát (nevezzük ezt az „1” jelű állapotnak) a  $\varphi_1$  állapotfüggvény reprezentálja. A klasszikus fizika szerint egy tárolóelem vagy a „0” vagy az „1” állapotban van. Na mármost, ha ez a tárolóelem a kvantummechanika törvényeit követi, akkor ő felveheti a két kvantumállapot szuperpozícióját is azaz a  $\varphi = c_0 \cdot \varphi_0 + c_1 \cdot \varphi_1$  állapotot is. Hogy ez valójában a bitek nyelvén mit is jelent nehéz elképzelnünk, de kialakult kvantummechanikai szemléletünk már adhat némi táppontot. Egy biztos, ha „megnézzük” a tárolót, akkor  $|c_0|^2$  valószínűséggel fogjuk őt a „0” állapotban találni (stb.). Ez eddig még olyan lenne, mint egy „pénzdobálás”. Azonban az a dinamika, amely a tárolóelem állapotát meghatározza a kvantummechanika törvényeit követi. És ez már igen lényeges eltérést jelent a jelenleg használt eszközökben lezajló bit-manipulációs eljárásokhoz képest. D. Deutsch 1985-ben publikált dolgozatában részletesen kifejtette egy ilyen, általa elképzelt „kvantumszámítógép” működését.

Rögtön felmerült a kérdés, hogy hogyan kellene programozni egy ilyen „kvantumszámítógépet”?

1994-ben Peter Shor (a New Jersey-beli AT&T Bell Laboratórium munkatársa) készített egy olyan programot, amely segítségével igen nagy számok tényezőkre bontását lehet (elvileg) elvégezni igen rövid idő alatt. Mivel a prímszámfelbontás (jelenleg) minden titkosítási eljárás alapja, nem csodálkozhatunk azon, hogy a kriptográfusok rögtön „elszörnyedtek” a kvantumszámítógép lehetőségének még a gondolatára is.

1996-ban Lov Gover kidolgozott egy nagyszerű programot, amelyik hihetetlen nagy sebességgel tud keresni egy nagy listában. Mint tudjuk a „keresési eljárás” kidolgozása az algoritmuselmélet egyik alapvető „problémája”. Egy kód feltöréséhez éppen ez kell, azaz minden lehetséges kulcsot végig kell próbálni. Ismét csak a titkosítás kerül veszélybe, hiszen egy kvantumszámítógép percek alatt képes megoldani egy olyan keresési feladatot, amire a jelenlegi gépeinknek évekre lenne szüksége. (Éppen ez a titkosítás lényege.).

„A kvantumszámítógép egyelőre még csak a fantázia világában létezik, de az egyénre, a nemzetközi üzleti életre és az általános biztonságra nézve egyaránt potenciális fenyegetést hordoz.” (Simon Singh: Kódkönyv)

Egy biztos, a gondolkodó elme (és az Ember) újabb kihívással találta magát szembe.

A kérdés ugyan filozófiaiinak tűnik, de a feltevése reális: „Szabad-e megalkotni egy valóban jól működő kvantumszámítógépet?” Bár abban, hogy ez gyakorlatilag lehet-e, sokan kételkednek. Az elvi lehetőség azonban megvan és a jól ismert Murphy törvény szerint: „Ami elromolhat, az el is romlik.” Azaz pusztán a lehetőség magában hordozza a megvalósulás esélyét is.

Egy azonban biztos, igazat kell adnunk Daniel Hillis-nek aki a világ egyik vezető számítógép tervezője és aki szerint: **„Ha valaki abban bízik, hogy egyszer csak meglepi valami újfajta számítógép, akkor érdemes a kvantummechanikán tartania a szemét.”**

Hát úgy legyen!



Mindezekből remélhetőleg kitűnik, hogy az alapvető kvantummechanikai ismeretek megszerzése minden leendő villamosmérnök elemi, szakmai-erkölcsi kötelessége. Bár elgondolkozhatunk azon, hogy a mai Magyarországon, egyáltalán van-e ennek a kijelentésnek valamiféle társadalmilag hitelesített értelme.

Vajon van-e értelme manapság „szakmai-erkölcsi kötelezettségről” beszélni?

Én azt gondolom (O.L.), hogy ez egy létező kategória. Meggyőződésem, hogy egy magasan szervezett társadalomban ennek „társadalmilag preferált” értéknek kell lennie. Főleg egy olyan korban, ahol a technikai fejlettség magas szintje miatt a szakmai döntések korrektsége elemi követelmény kell, hogy legyen.

Mindezek megvalósítása **az új mérnökemzedék feladata (is) !**

Ehhez kívánok minden hallgatónak sok sikert, erőt és bátorságot!

Ahogy a Költő mondja: „**Ez a mi munkánk és nem is kevés!**”

Orosz László  
BME Fizika Tanszék