

Elektron mozgása kristályrácsban

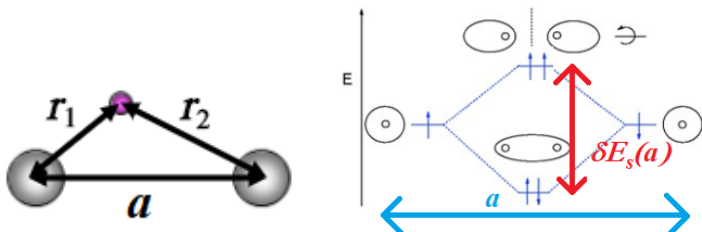
Energiasávok és effektív tömeg

Dr. Berta Miklós

bertam@sze.hu

2017. október 20.

H_2^+ - ion



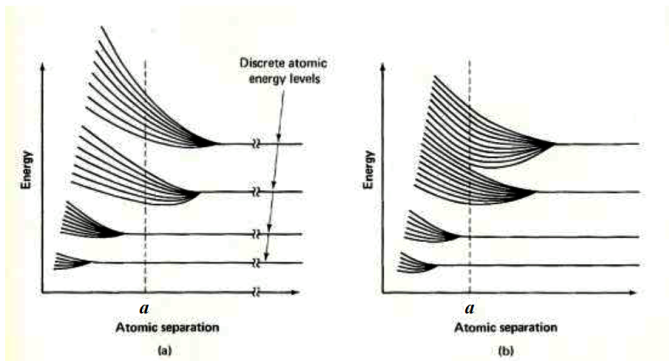
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) \right\} \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r})$$

$$E_n = E_n^{(0)} \pm \delta E_s(a)$$

$$\psi(\underline{r}) \approx c_1 \psi_k(\underline{r}) + c_2 \psi_l(\underline{r})$$

Sok elektron kristályrácsban - Energiasávok

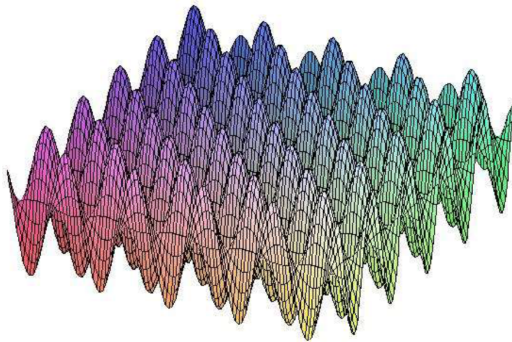
Ha a kristályrács rácsállandója a , akkor $2a, 3a, \dots, ma$ is periódus. Az egyrészecske energiaszintek felhasadnak. A felhasadt szintek száma arányos a kristályrácsban lévő elektronok számával, míg a legnagyobb energiafelhasadás mértéke arányos az a rácsállandóval.



A **Bloch-tétel** alapján az elektron állapotfüggvénye periodikus kristályrácsban szintén periodikus lesz!

$$\psi(\underline{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \underline{r}) u(\underline{r}), \text{ ahol}$$

$$u(\underline{r} + \underline{a}) = u(\underline{r}) \text{ — } \underline{a} \text{ periodikus.}$$

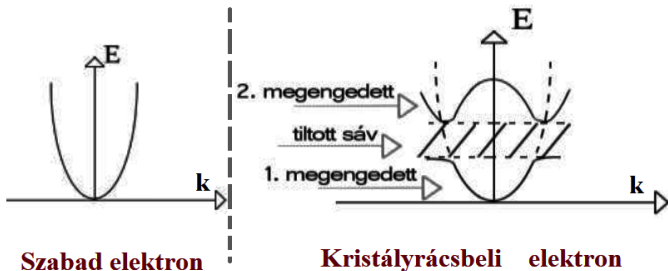


A **diszperziós – reláció** megadja, hogy miként függ az elektron energiája, annak impulzusától.

$$E = f(\underline{p}).$$

Szabad elektronra: $E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2$

Rácsbeli elektronra a diszperzió bonyolultan függ a periodikus rácpotenciáltól! → **TILTOTT SÁVOK!**



Effektív tömeg

Ha kristályrácsot külső elektromos térbe helyezzük, akkor ez a tér hat az elektronokra, de a periodikus ráccspotenciál is hat rájuk:

$$m_e \underline{a} = \underline{F}_{ext} + \underline{F}_{int}.$$

$$m^* \underline{a} = m_e \underline{a} - \underline{F}_{int} = \underline{F}_{ext}.$$

Tehát a külső tér szempontjából az elektron a kristályrácsban úgy mozog, mint egy **m^*** effektív tömegű részecske.

Az aktuális effektív tömege attól függ, hogy a kristályrács ráccspotenciálja éppen milyen hatást fejt ki rá!

Köszönöm a figyelmet!