

Bohrův model atomu
 Základy kvantové mechaniky
 Volný elektron
 Elektron v nekonečné potenciálové jámě
 Kvantový model atomu
 Atom křemíku, kovalentní vazba
 Elektron v poli periodického potenciálu
 Pásová struktura
 Přímý a nepřímý polovodič
 Elektron v krystalu - efektivní hmotnost
 Hustota stavů
 Statistika elektronů

Bohrův model atomu (1913)

Kvantová teorie světla (Planck, Einstein)

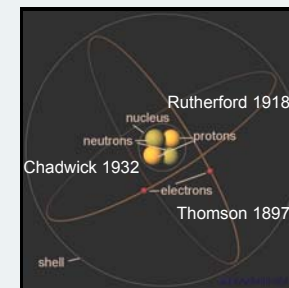
foton kvantum světla – částice

$$\text{energie fotonu } E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

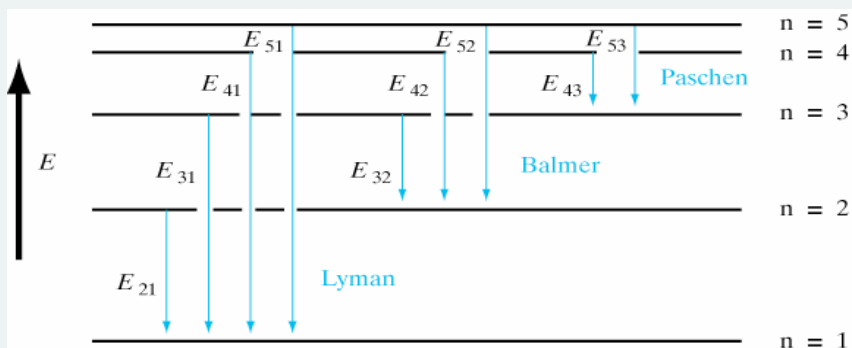
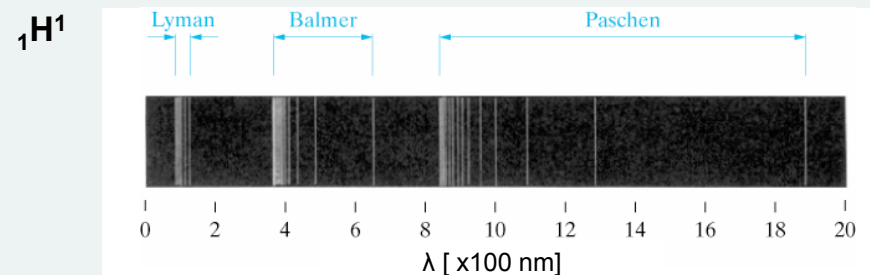
$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$ Planckova konstanta

ν [s^{-1}] kmitočet

c [ms^{-1}] rychlost světla λ [m] vlnová délka



Snaha vysvětlit excitační spektra pozorovaná při výboji v plynech



Spektrální série sledovaných přechodů:

Lymanova: $\nu = cR \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 2, 3, 4, \dots$

Balmerova: $\nu = cR \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, 5, \dots$

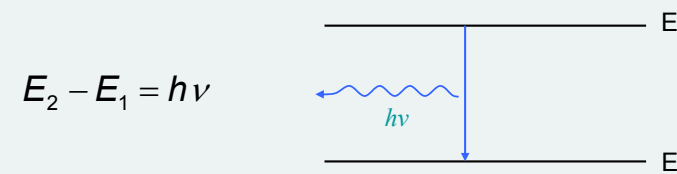
Paschenova: $\nu = cR \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 4, 5, 6, \dots$

R (Rydbergova konstanta) = $10967,8 \text{ m}^{-1}$
 c (rychlost světla) = $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$
 ν (kmitočet) [s^{-1}]

Bohrův (planetární) model atomu - postuláty



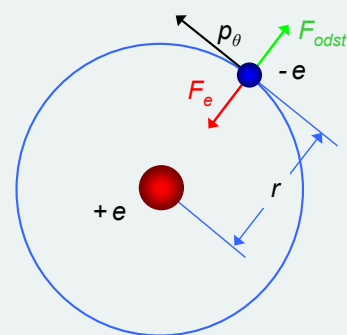
1. Elektrony obíhají okolo jádra po stabilních kruhových drahách (orbitech).
2. Elektrony mohou přeskociť na orbit s vyšší/nížší energií pouze získáním/vyzářením energie rovné rozdílu těchto energií (tj. absorpcí/emisí fotonu o energii $h\nu$).



3. Moment hybnosti elektronu na orbitě je vždy roven celočíselnému násobku Planckovy konstanty dělené 2π .

$$p_\theta = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad \hbar = h/2\pi$$

Bohrův model atomu



$$p_\theta = mvr = n\hbar \quad (1)$$

$$F_e = F_{odst} \quad -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = -\frac{mv^2}{r} \quad (2)$$



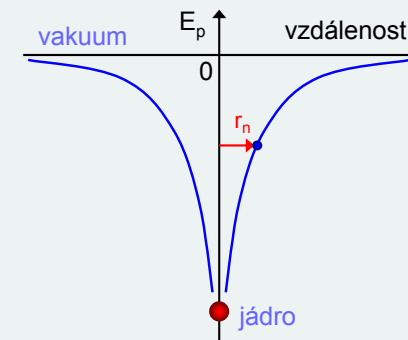
$$m^2 v^2 = \frac{n^2 \hbar^2}{r_n^2} \quad \Rightarrow \quad -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = -\frac{n^2 \hbar^2}{m r_n^3} \quad \Rightarrow \quad r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{m e^2} \quad (3)$$

$$(1) \quad v_n = \frac{n\hbar}{m r_n} \quad + \quad (3) \quad r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{m e^2} \quad \Rightarrow \quad v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 n \hbar} \quad (4)$$

kinetická energie elektronu

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{m e^4}{2 (4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2} \quad (5)$$

Bohrův model atomu



potenciální energie elektronu

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2} \quad (6)$$

celková energie elektronu na n-tém orbitu

$$E_n = E_k + E_p = \frac{m e^4}{2 (4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2} - \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2} = -\frac{m e^4}{2 (4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2} \quad (7)$$

$$E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{m e^4}{2 (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Experiment (Lymanova série)

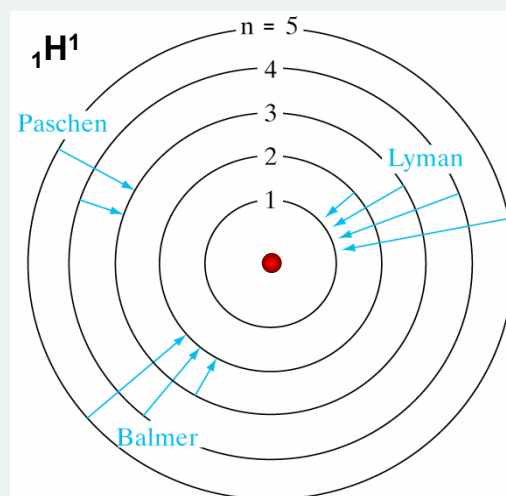
$$\nu = cR \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 2, 3, 4, \dots$$

Bohrův model

$$\nu_{21} = \frac{m e^4}{2 (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 h} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Bohrův model nevysvětluje:

- existenci jemnějších spektrálních struktur
- spektra složitějších atomů
- jak atomy interagují mezi sebou



Klasická (newtonovská) mechanika

Studuje pohyb částic pod vlivem působící síly. Předpokládá, že veličiny typu poloha, hmota, rychlost a zrychlení, je možné přesně měřit. Platí pro makroskopický svět, kde sledujeme objekty složené z velkého množství částic a odchylky od průměrného chování nelze zjistit.

Kvantová mechanika

Vzhledem k tomu, že hodnotu polohy, hybnosti, resp. energie mikročástice nelze jednoznačně zjistit, zkoumá kvantová mechanika vztahy mezi jejich pravděpodobnostmi (poloha → pravděpodobná poloha). Jednoznačně je možné určit pouze střední hodnoty veličin.

Dualismus vlna-částice (de Broglie 1924)

Princip neurčitosti (Heisenberg 1927)

Schrödingerova rovnice (Schrödinger 1926)

Dualismus vlna-částice (de Broglie 1924)



světlo elektromagnetické vlnění ↔ částice - **foton**

energie fotonu $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$

hybnost fotonu $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

elektron částice ↔ **de Broglieho vlna**

vlnová délka $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$

$E = mc^2$ $p = mc$
 $E = pc$ z teorie relativity

$h = 6.63 \times 10^{-34}$ Js Planckova konstanta
 ν [s⁻¹] kmitočet
 c [ms⁻¹] rychlost světla
 λ [m] vlnová délka
 m_0 [kg] klidová hmotnost

Heisenbergův princip neurčitosti (Heisenberg 1927)

Při současném měření polohy ve směru x a hybnosti částice p_x nemůže být součin neurčitosti v určení polohy Δx a hybnosti Δp_x menší než $\hbar/2$.

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$$

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$$



Důsledky

Polohu a hybnost jedné libovolné částice tak nelze stanovit s libovolnou přesností.

Poloha → pravděpodobnost výskytu částice → hustota pravděpodobnosti $P(x)$

pravděpodobnost výskytu v intervalu x až $x+dx$ je $P(x)dx$ → $\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx = 1$

chceme-li zjistit střední hodnotu funkce $f(x)$ závisící na poloze x

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)P(x)dx$$

Kvantová mechanika základní postuláty

- Každá částice je popsána komplexní vlnovou funkcí $\Psi(x,y,z,t)$
 - vlastnosti: $\Psi(x,y,z,t)$ a její prostorové derivace ($\partial\Psi/\partial x + \partial\Psi/\partial y + \partial\Psi/\partial z$) jsou spojité, konečné a jednoznačné
 - význam: sama o sobě nemá, $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ je hustota pravděpodobnosti výskytu částice
- Každé pozorovatelné veličině je přiřazen její operátor působící na vlnovou fci

fyzikální veličina	→	operátor
souřadnice x		x
hybnost $p(x)$		$\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$
celková energie E		$-\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t}$
- Pravděpodobnost, že nalezneme částici v objemu $dx dy dz$ je $\Psi^*\Psi dx dy dz$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx dy dz = 1$$

Střední hodnota veličiny $\langle Q \rangle$ popsané operátorem Q_{op}

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* Q_{op} \Psi dx dy dz$$

Schrödingerova rovnice

klasická rovnice pro celkovou energii částice

$$\frac{1}{2m} p^2 + V = E$$

kinetická energie + potenciální energie = celková energie

přepsaná do operátorové formy aplikované na vlnovou funkci $\Psi(x,t)$ v 1-D

Schrödingerova rovnice 1D

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi(x,t) + V\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x,t)$$

Schrödingerova rovnice 3D

$$\Psi = \Psi(x, y, z, t) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + V\Psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$



Schrödingerova rovnice **separace proměnných 1D**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V \Psi(x,t) = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

separace vlnové funkce $\Psi(x,t)$ na prostorově a časově závislou část $\psi(x)\phi(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x) \phi(t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) \phi(t) = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \psi(x) \phi(t)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi(t) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) \phi(t) = -\frac{\hbar}{j} \psi(x) \frac{\partial \phi(t)}{\partial t}$$

podělení levé a pravé strany $\psi(x)\phi(t)$

separační konstanta E odpovídá energii částice E_n v n-tém stavu popsaném vlnovou funkcí ψ_n

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) = -\frac{\hbar}{j} \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

stacionární (časově nezávislé) řešení

$$-\frac{\hbar}{j} \frac{d\phi(t)}{dt} = E \phi(t)$$

časově závislé řešení

Schrödingerova rovnice **operátorový tvar**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$



$$\hat{H} \psi = E \psi \quad \longleftarrow \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

operátor celkové energie (Hamiltonův operátor)

- vlastním řešením (funkcí) operátorové rovnice jsou příslušné vlnové funkce Ψ
- vlastními hodnotami (číslly) operátoru jsou hodnoty příslušné veličiny (v tomto případě energie E částice)

fyzikální veličina \longrightarrow operátor
 měřitelná hodnota veličiny \longrightarrow vlastní číslo operátoru
 stav částice \longrightarrow vlastní funkce operátoru

Volný elektron ve vakuu $V=0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \quad \longrightarrow \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0$$

řešení pro ustálený stav

$$\psi_k = A \exp(jkx) \quad E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

$$k = 2\pi / \lambda$$

k [m⁻¹] vlnové číslo

časově závislé řešení

$$\Psi(x,t) = \psi_k \exp(-j\omega t) = A \exp[j(kx - \omega t)]$$

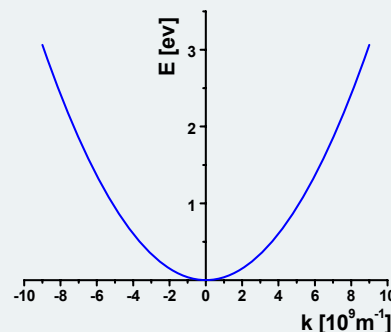
$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{2\pi h\nu}{h} = 2\pi\nu$$

představuje rovinnou vlnu pohybující se doprava pro kladné hodnoty k a doleva pro záporné hodnoty k

$$\text{energie elektronu} \quad E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

$$\text{hybnost elektronu} \quad p = m v = \hbar k$$

výsledné spektrum energií je spojitě



Elektron v nekonečné potenciálové jámě

$V(x) = 0, 0 < x < L$ uvnitř jámy (a)

$V(x) = \infty, x \leq 0, x \geq L$ vně jámy (b)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

uvnitř jámy

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0$$

obecné řešení

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

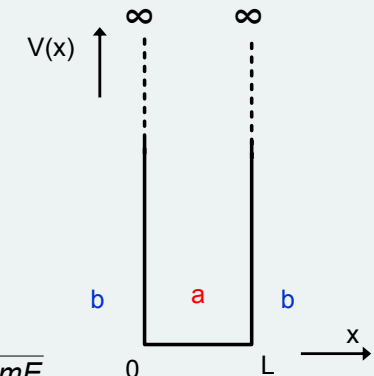
vně jámy

$$\psi = 0$$

z okrajových podmínek – spojitost ψ

$$\psi(x=0) = A \sin(k \cdot 0) + B \cos(k \cdot 0) = 0 \Rightarrow B = 0$$

$$\psi(x=L) = A \sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$



Elektron v nekonečné potenciálové jámě

$$\psi(x) = A \sin kx = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}\right)x$$

úloha má řešení pouze pro diskrétní hodnoty k řešením je stojatá vlna

$$k = \frac{n\pi}{L} = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

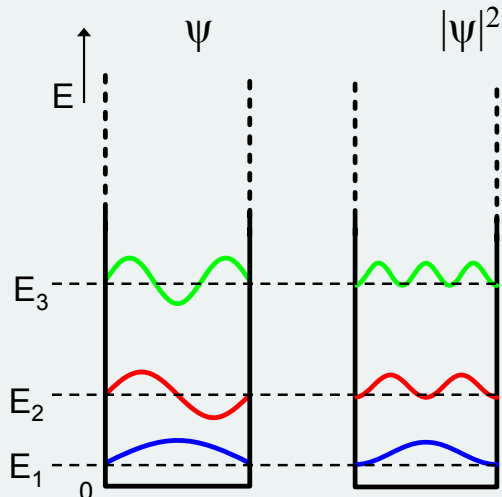
elektron může nabývat pouze diskrétních hodnot energie v závislosti na kvantovém čísle n

Určení amplitudy A

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = A^2 \int_0^L \sin^2 kx dx = \frac{A^2 L}{2} = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\psi_n(x) = A \sin kx = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}\right)x$$



Elektron v potenciálovém poli jádra vodíku

Pro řešení Schrödingerovy rovnice je vhodné užít sférický systém souřadnic

$$V(x,y,z) \rightarrow V(r,\theta,\phi)$$

neboť coulombovský potenciál je závislý pouze na vzdálenosti od jádra

$$V(r,\theta,\phi) = V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

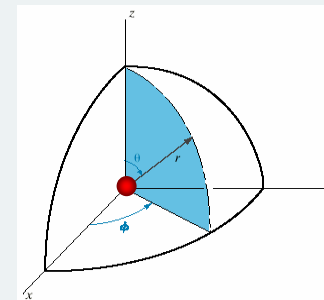
Rovnici lze řešit separací na tři nezávislé rovnice

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Každá z funkcí $R(r)$, $\Theta(\theta)$ a $\Phi(\phi)$ je kvantována dle vlastních výběrových pravidel.

- $R(r)$ hlavní kvantové číslo $n = 1, 2, 3, \dots$
- $\Theta(\theta)$ orbitální (vedlejší) kvantové číslo $l = 0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$
- $\Phi(\phi)$ magnetické kvantové číslo $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$

Vlnová funkce elektronu je pak $\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_n(r)\Theta_l(\theta)\Phi_m(\phi)$



$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\phi \\ y &= r \sin\theta \sin\phi \\ z &= r \cos\theta \end{aligned}$$

Závěr

Každý povolený stav elektronu v atomu vodíku je jednoznačně popsán kvantovými čísly n, m, l doplněnými o spinové kvantové číslo s uvažující vnitřní magnetický moment elektronu ($s = \pm \hbar/2$).

Kvantování energie elektronu je dáno hlavním kvantovým číslem n

Elektrony se stejným hlavním kvantovým číslem mají podobnou energii a nacházejí se v průměru ve shodné vzdálenosti od jádra (slupce).

Orbitální (vedlejší) kvantové číslo l udává kvantování momentu hybnosti L

Magnetické kvantové číslo m udává směr vektoru L ve směru pole

$$E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2}$$

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$$

$$L_{||} = m\hbar$$

Elektron v atomu vodíku může mimo základní stav Ψ_{100} obsadit libovolný excitovaný stav. Energetické vzdálenosti mezi jednotlivými stavy pak určují vlnové délky přechodů ve vodíkovém spektru.

Symbolické označení stavů atomů vodíku

slupka	sharp s $l = 0$	principal p $l = 1$	diffuse d $l = 2$	fundamental f $l = 3$	g $l = 4$	h $l = 5$	
K	$n = 1$	1s					
L	$n = 2$	2s	2p				
M	$n = 3$	3s	3p	3d			
N	$n = 4$	4s	4p	4d	4f		
O	$n = 5$	5s	5p	5d	5f	5g	
P	$n = 6$	6s	6p	6d	6f	6g	6h
počet stavů	2	6	10	14	18	22	

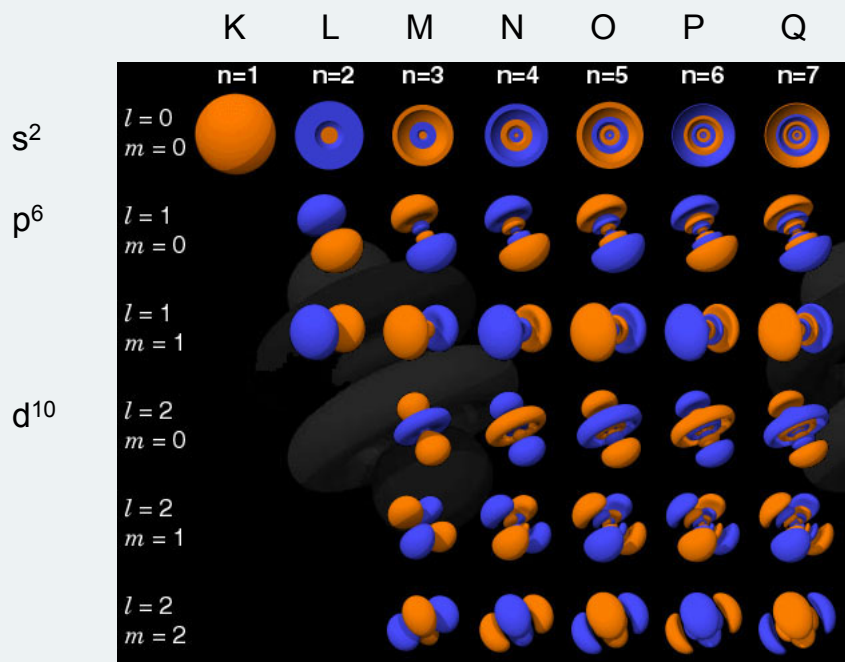
Žádné dva elektrony v atomu nemohou existovat ve stejném kvantovém stavu.

Pauli 1925

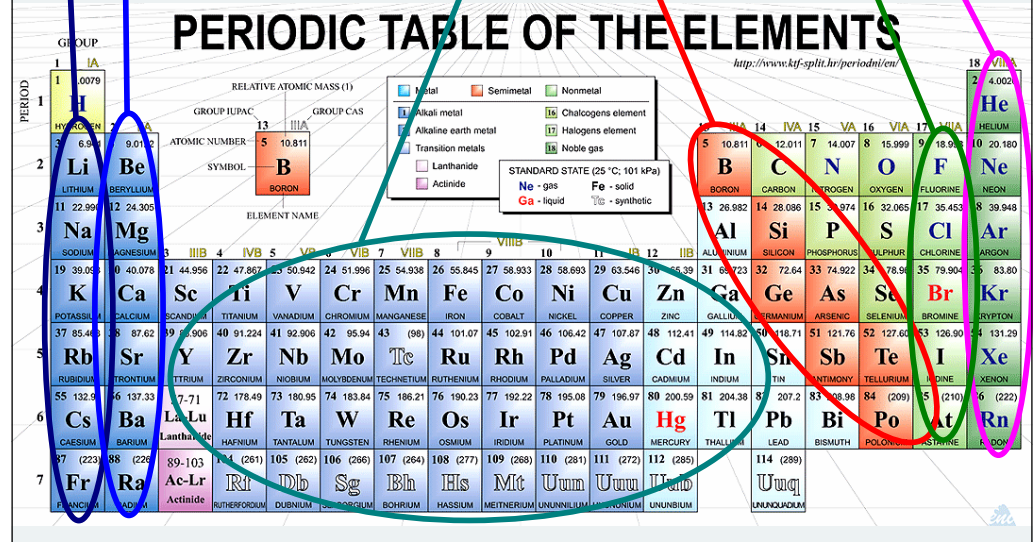
Kdykoli je to možné, elektrony zůstávají nespárované.

Hund 1926

Atom vodíku – orbitály elektronů

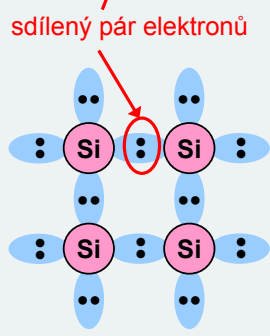
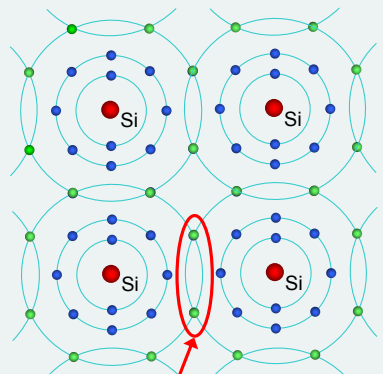
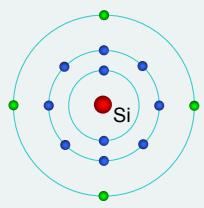
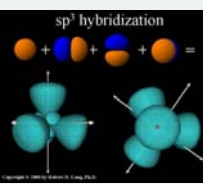


Alkalické kovy
Kovy alkalických zemin
Přechodové kovy
Inertní plyny
Halogeny
Polokovy



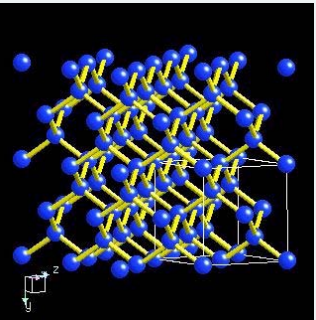
Krystal křemíku $_{14}\text{Si}^{28}$

konfigurace $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ - 4 valenční elektrony



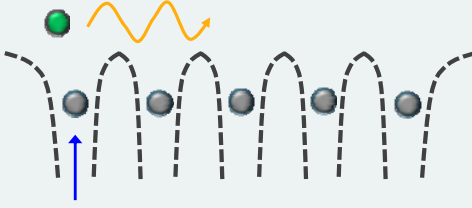
kovalentní vazba : doplnění valenční slupky sdílením 8 elektronů se 4 atomy

význačná je směrovost daná úhly hybridizace sp^3



Elektron v periodickém potenciálovém poli

elektron



atomová jádra

$V(r)$
periodický potenciál krystalu

Schrödingerova rovnice pro jeden elektron v krystalu

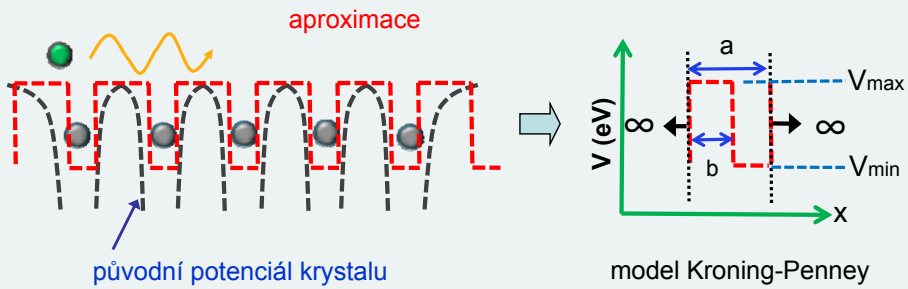
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = E \psi(\mathbf{r}, \mathbf{k})$$

periodický potenciál krystalu

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$$

\mathbf{R} vektor krystalické mříže

Elektron v periodickém potenciálovém poli

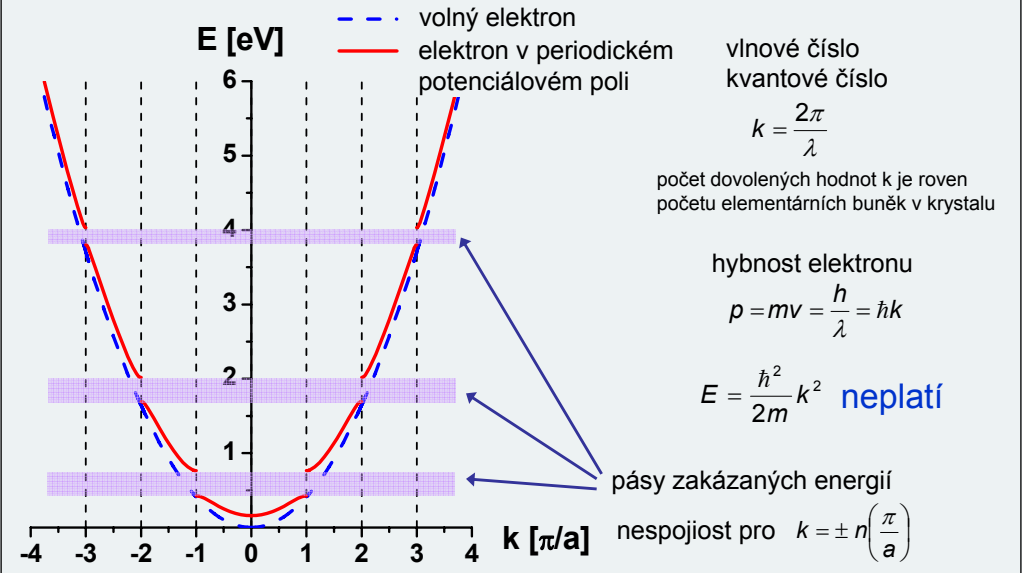


Řešení Schrödingerovy rovnice má tvar Blochovy funkce

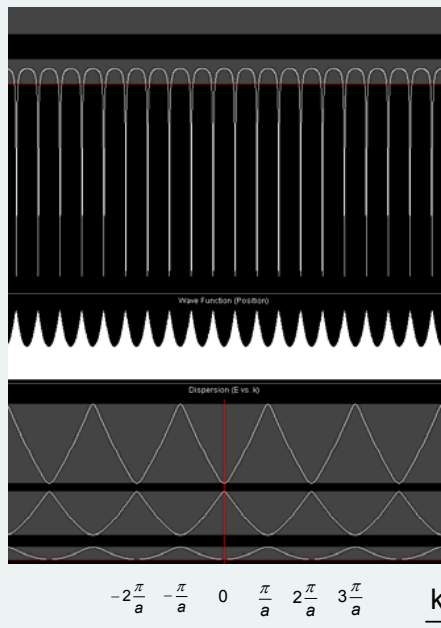
$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$$

↑
funkce vyjadřující periodicitu krystalové mříže
↑
rovinná vlna

Elektron v periodickém potenciálovém poli



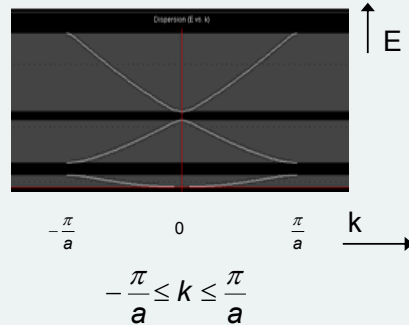
Elektron v periodickém potenciálovém poli



v prostoru reálné mříže \mathbf{R} je energie elektronu periodickou funkcí k
 $k' = k + \frac{2\pi}{a}n$

v prostoru reciproké mříže \mathbf{G} lze závislost $E(\mathbf{k})$ studovat pouze v redukované zóně

$$e^{j\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$$



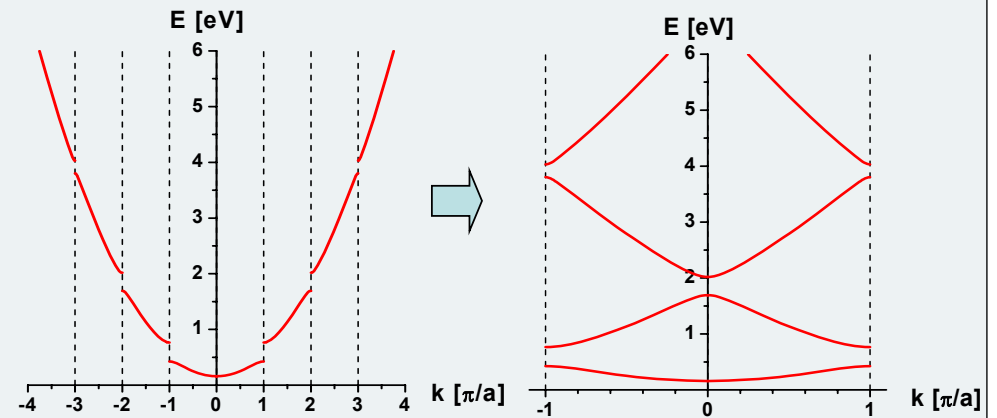
Redukovaná zóna

vektor krystalové mříže

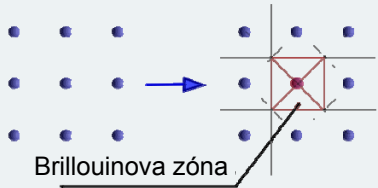
$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}, \mathbf{k}) = e^{j\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r} + \mathbf{R})} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}, \mathbf{k}) = e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$$

řešení je periodické pokud platí $e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$ vektor reciproké mříže

pokud použijeme místo \mathbf{k} souřadnice \mathbf{G} reciproké mříže $e^{j\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$ lze závislost $E(\mathbf{k})$ studovat pouze v redukované zóně reciproké mříže (Brillouinova zóna).



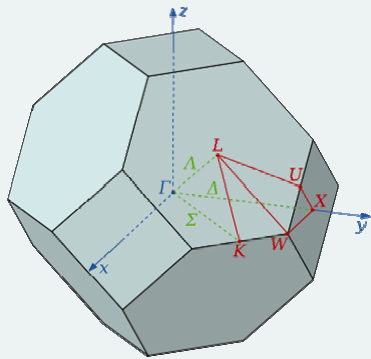
Brillouinova zóna



První Brillouinova zóna (PBZ) je Wiegnerova-Seitzova buňka reciproké mřížky.

Wiegnerova-Seitzova buňka je geometrické místo bodů, kterým je daný bod mřížky nejbližší.

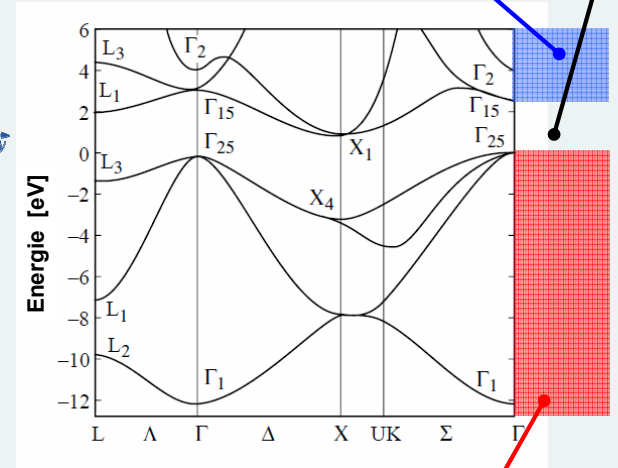
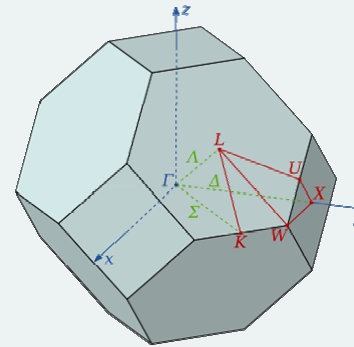
PBZ plošně centované mřížky (fcc)



Význačné body symetrie

- Γ -bod: $k_x = 0 = k_y = k_z$
- X -bod: $k_y = 2\pi/a; k_x = k_z = 0$
- L -bod: $k_x = k_y = k_z = \pi/a$

Reálná pásová struktura křemíku



zakázaný pás

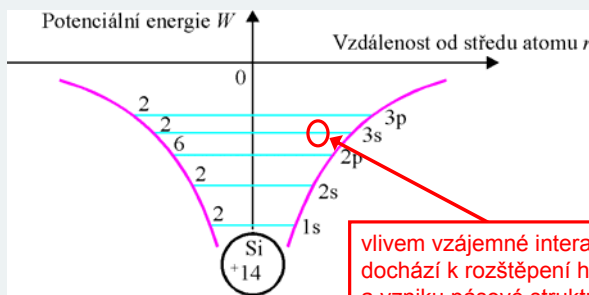
vodivostní pás

valenční pás

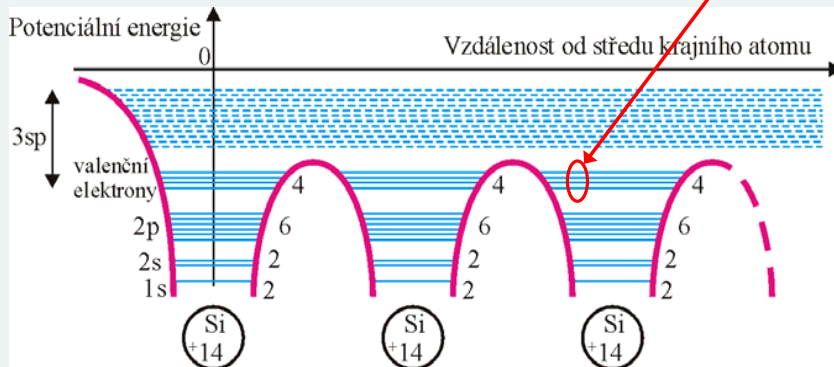
Izolovaný atom Si



3 atomy Si v mřížce

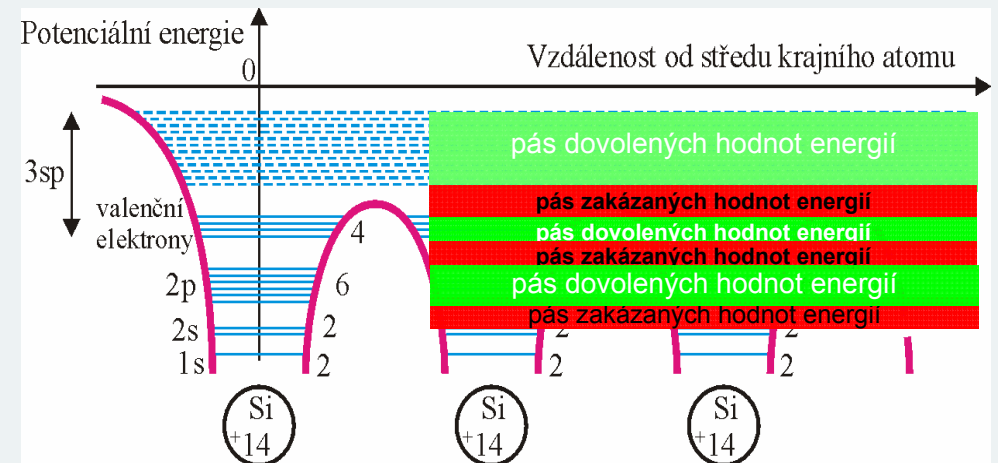


vlivem vzájemné interakce dochází k rozštěpení hladin a vzniku pásové struktury

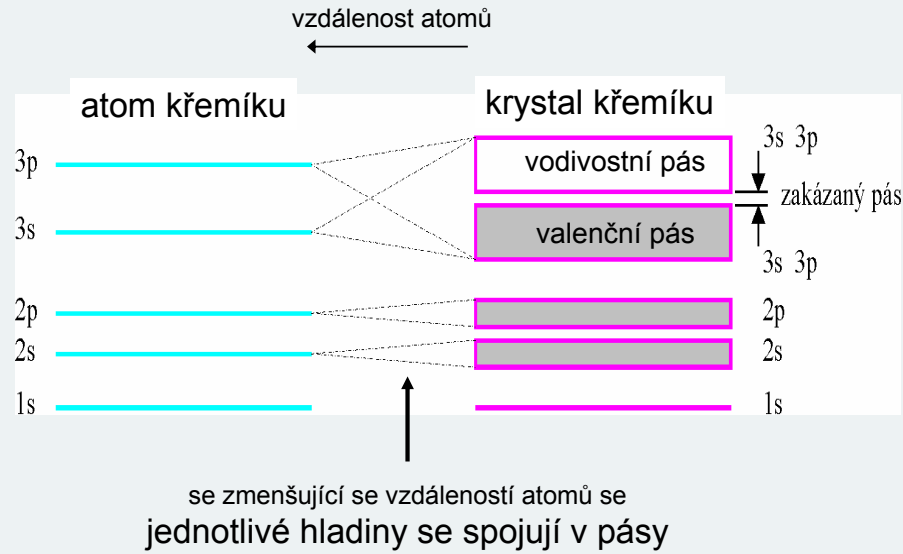


Vznik pásové struktury

velký počet atomů v krystalu křemíku ($5 \cdot 10^{22}$ atomů v cm^3) vede k rozštěpení diskrétních hladin a vzniku pásové struktury



Vznik pásové struktury



Pásová struktura křemíku

podslupka	stavů/elektronů
	3s3p 4N/0
	3s3p 4N/4N
	2p 6N/6N
	2s 2N/2N
	1s 2N/2N

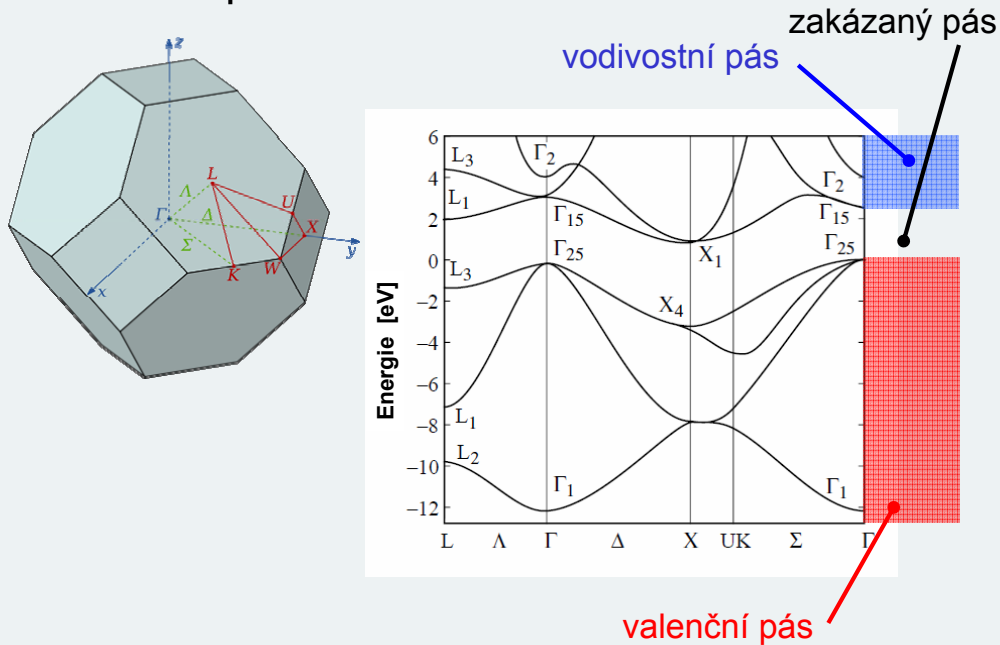
N ... počet atomů v krystalu

Vnější valenční slupka (n=3) obsahuje 2N elektronů z 3s a 2N elektronů z 3p stavů. Vlivem sp³ hybridizace se štěpí na dva pásy (každý obsahuje po 4N stavech) oddělené zakázaným pásem. Spodní (valenční pás) je zcela zaplněn 4N elektrony, horní (vodivostní) je prázdný.

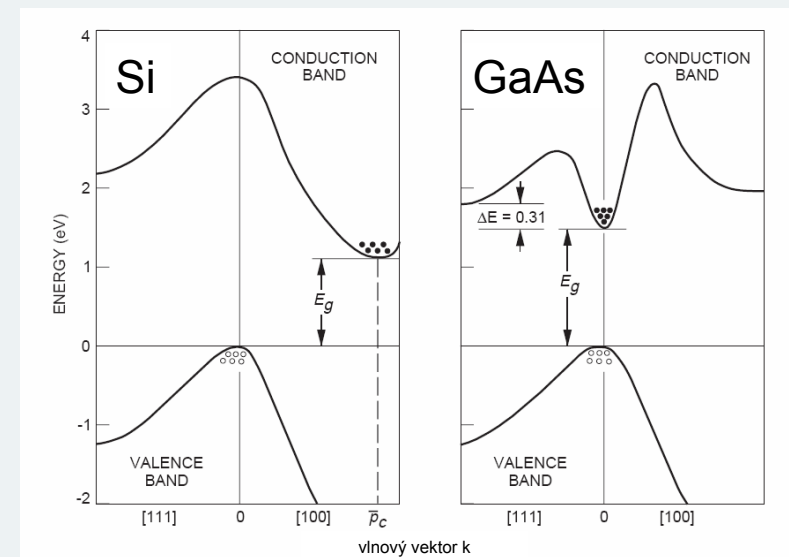
Střední slupka (n=2) je plně obsazena 2N elektrony z 2s a 6N elektrony z 2p stavů, které jsou pevně vázány k jádru.

Vnitřní slupka (n=1) je plně obsazena 2N elektrony z původních 1s stavů, které jsou pevně vázány k jádru.

Reálná pásová struktura křemíku

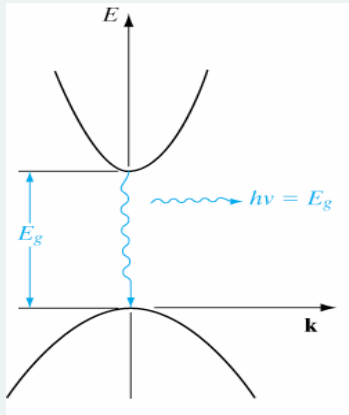


Pásový diagram Si a GaAs



Přímý polovodič

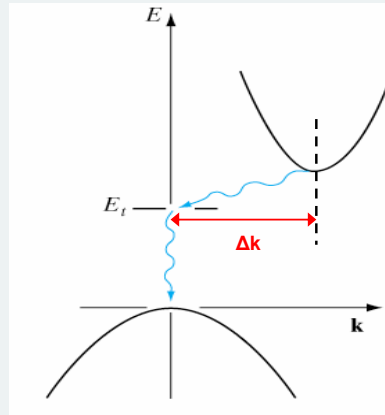
GaAs, GaP, GaN, GaAlAs



Minimum vodivostního a maximum valenčního pásu nastává pro shodná k (při přechodu není nutná změna hybnosti $\Delta k=0$). Přechod je možný interakcí s fotonem ($k \approx 0$).

Nepřímý polovodič

Si, Ge



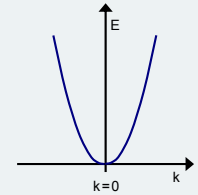
Minimum vodivostního a maximum valenčního pásu nastává pro různá k (při přechodu je nutné změnit hybnost $\Delta k \neq 0$). Pro přechod je nutná interakce s fononem (kmitem mříže).

Elektrony v krystalu

volný elektron

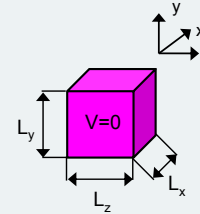
libovolná hybnost $p = mv = \hbar k$

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



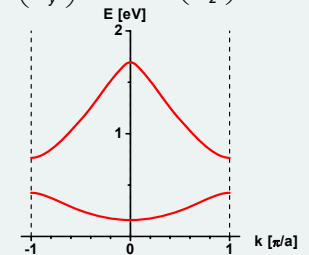
elektron v krystalu

krystal představuje trojrozměrnou kvantovou jámu hybnost i energie elektronu jsou kvantovány



$p = \hbar k$ $k_x = \pm n_x \left(\frac{2\pi}{L_x} \right), k_y = \pm n_y \left(\frac{2\pi}{L_y} \right), k_z = \pm n_z \left(\frac{2\pi}{L_z} \right)$

$E_{x,y,z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$



vlivem periodicity potenciálu vzniká pásová struktura

Efektivní hmotnost elektronu

aproximace pohybu v periodickém potenciálovém poli vztahem pro volný elektron s tzv. **efektivní hmotností m^***

$p = m^* v = \hbar k$

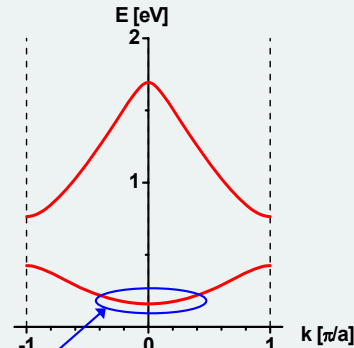
$E = \frac{1}{2} m^* v^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2$

$\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m^*}$

$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$

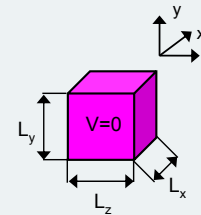
většinou se udává v poměru ke klidové hmotnosti volného elektronu m_0

$m_n^* = 0.98 m_0$



- aproximace okraje pásu parabolou
- efektivní hmotnost je nepřímo úměrná zakřivení grafu E(k) - pásu
- závisí na orientaci (k-prostoru, krystalu)

Hustota stavů v dovolených pásích 3D

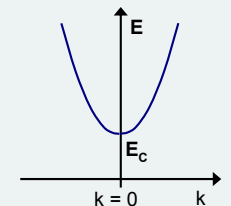


$p = \hbar k$ $k_x = \pm n_x \left(\frac{2\pi}{L_x} \right), k_y = \pm n_y \left(\frac{2\pi}{L_y} \right), k_z = \pm n_z \left(\frac{2\pi}{L_z} \right)$

jeden stav pak zaujímá objem $\left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{8\pi^3}{V}$

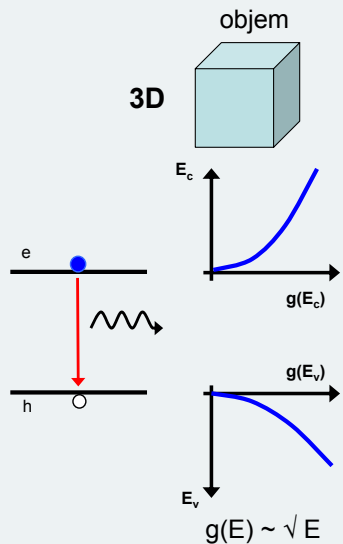
$g(E)dE = g(k)dk = \frac{2}{8\pi^3} 4\pi k^2 dk$ $k = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E - E_c)}$
 (Annotations: 'objem 1 stavu' points to the fraction 2/8pi^3, 'přírůstek objemu kulového k-prostoru s dk' points to the 4pi k^2 dk term, 'substituce' points to the k expression.)

$g(E) = \frac{1}{\pi^2} \frac{mk}{\hbar^2} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$

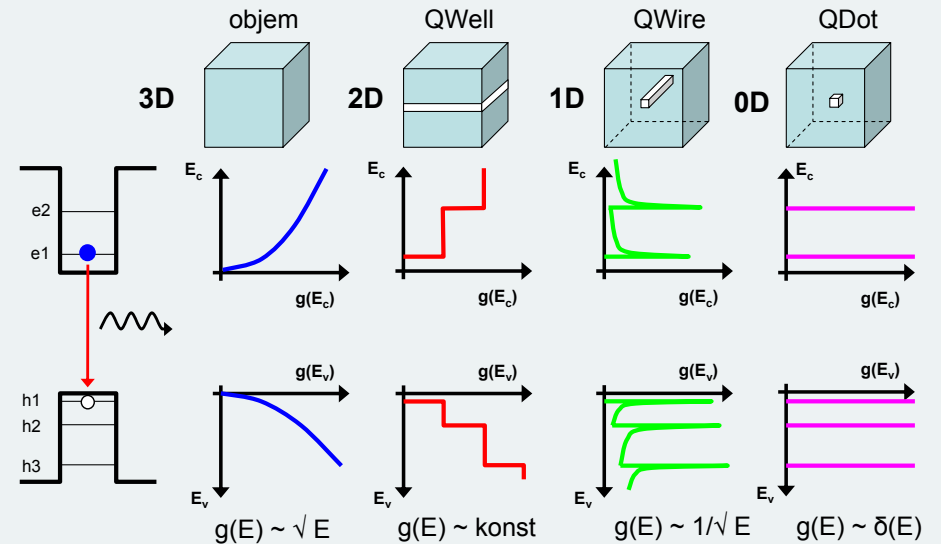


hustota stavů narůstá s odmocninou energetické vzdálenosti od hrany pásu

Hustota stavů a kvantové omezení



Hustota stavů a kvantové omezení



Pravděpodobnost obsazení energetických stavů

elektrony musí splňovat Pauliho vylučovací princip (v jednom kvantovém stavu může být pouze jeden elektron) => Fermi-Diracovo statistika

Fermi-Diracova rozdělovací funkce

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$

- E energie elektronu
- E_F ... Fermiho hladina
- k ... Boltzmannova konstanta
 $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$
- T ... absolutní teplota

je-li $E - E_F > 4kT$



Fermiho hladina = energie, kde $f_{FD} = 1/2$
význam chemický potenciál

Maxwell-Boltzmannova rozdělovací funkce

$$f_{FD} \approx f_{MB}(E) = \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)$$

Pravděpodobnost obsazení dané energetické hladiny E elektronem exponenciálně klesá s rostoucí hodnotou energie E této hladiny.

Pravděpodobnost obsazení dané energetické hladiny E exponenciálně roste s rostoucí teplotou T.

Fermi-Diracova rozdělovací funkce

pro $T = 0K$

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F) / kT}}$$

$$E < E_F : f(E) = \frac{1}{1 + e^{-\infty}} = 1$$

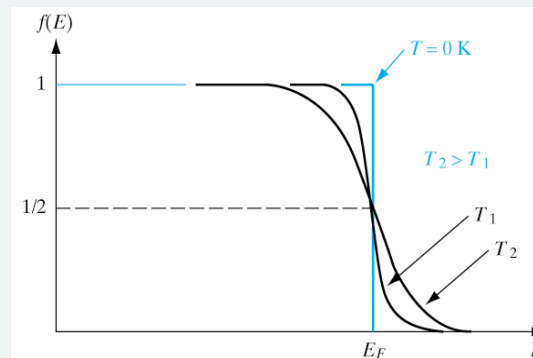
$$E > E_F : f(E) = \frac{1}{1 + e^{\infty}} = 0$$

Při $T = 0K$ jsou všechny stavy pod Fermiho hladinou E_F obsazeny a stavy nad ní jsou prázdné.

Při $T > 0K$ existuje nenulová pravděpodobnost $f_{FD}(E)$ toho, že stav nad E_F je zaplněn, a odpovídající pravděpodobnost $[1 - f_{FD}(E)]$, že stav pod E_F je prázdný.

Pravděpodobnost toho, že stav s energií $E_F + \Delta E$ je zaplněn je shodná s pravděpodobností toho, že hladina $E_F - \Delta E$ je prázdná, tj. f_{FD} je symetrická okolo E_F .

$$f_{FD}(E_F + \Delta E) = [1 - f_{FD}(E_F - \Delta E)]$$



Obsazení energetických hladin v polovodiči

