$\sigma = \frac{ne^2}{m}\tau$ vezetőképesség fémben

$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{elasztikus}}} + \frac{1}{\tau_{\text{inelasz}}}$

$\frac{1}{\tau_{\text{inelasz}}} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum |\langle 1|1|2\rangle|^2 \delta(\,)$

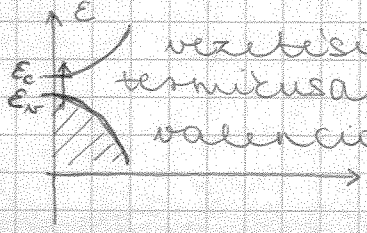
$\frac{1}{\tau_{\text{inelasz}}} \propto T^{\alpha} \quad \alpha \approx 1$

szigetelő $\varrho(T) \approx$ konstans

ha az ellenállás valamilyen exponenciális hőmérséklettípust mutat, akkor hívjuk félvezetőnek

$\varrho(T) \sim e^{-\frac{\varepsilon_g}{2k_B T}}$

(régi definíció a szobahőmérsékleti ellenállás értéke alapján volt)



(feltesszük, hogy 1 van)

töltéshordozók mozgékonysága:

$\vec{j} = -e n \vec{v}_d = -e n \mu \vec{E}$

szilícium, germánium félvezető, (szén)

$3s^2 3p^2$ $4s^2 4p^2$ $2s^2 2p^2$

↳ gömbszimm. pot

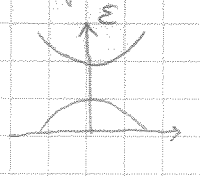
$\varepsilon_g = 1{,}12$ eV $\varepsilon_g = 0{,}67$ eV

nem lehet Si, Ge { tetragonális szerk.
grafén az élet alapja

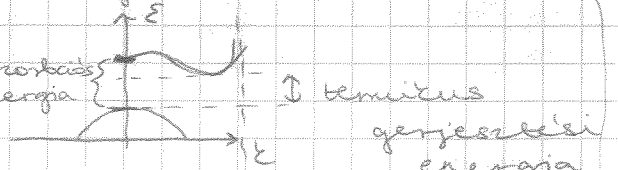
⇓

mind szilícium alapú élet

direkt félvezető

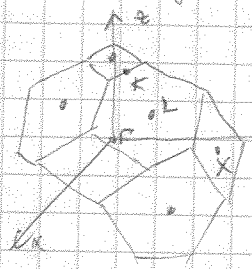


indirekt félvezető



ezzel foglalkozunk

elemi cella valós térben lapcentrált köbös
reciprokrács csonkolt oktaéder (gyémánt reciprok)
8 hatszög, 6 négyzet határolja



$\Gamma = (0,0,0)\frac{2\pi}{a}$

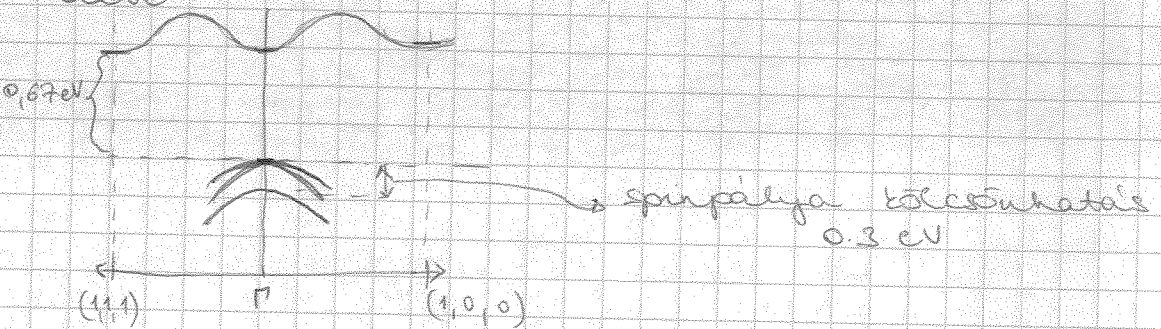
$X = (0,0,1)\frac{2\pi}{a}$ → X négyzet közepe

$L = (1,1,1)\frac{2\pi}{a}$ → hatszög közepe

$K = (3/4, 3/4, 0)\frac{2\pi}{a}$ → □ élközepe

ezek adják a kristálytani főirányokat

(Ge) sávszerkezete



extrémenergiás felületek ellipszoidok (4 db)
↓
alacsony energiára abszolút forgás-szimmetrikus

Ge vezetési sáv $\frac{m_\parallel}{m} = 1,6$

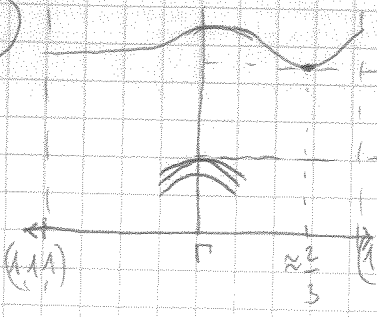
$\frac{m_\perp}{m} = 0,082$

valencia sáv $\frac{m_{h1}}{m} = 0,28$ nehéz lyuk tömeg

$\frac{m_{h2}}{m} = 0,044$ könnyű -"-

a négyzetes diszperzió erős közelítés pl a degenerált pontban nem használható

(Si)



6 ekvivalens forgási ellipszoid

vezetési sáv $\frac{m_\parallel}{m} = 0,916$

$\frac{m_\perp}{m} = 0,191$

valencia sáv $\frac{m_{h1}}{m} = 0,54$ $\frac{m_{h2}}{m} = 0,15$

$$n_c(T) = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} d\varepsilon\, g_c(\varepsilon) \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\varepsilon_B T}} + 1}$$ — betöltések

$$p_v(T) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} d\varepsilon\, g_v(\varepsilon) \left(1 - \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{\varepsilon_B T}} + 1}\right)$$ — lyukak

$\varepsilon_c - \mu \gg \varepsilon_B T \Rightarrow$ Boltzmann-statisztikát lehet csinálni

$\mu - \varepsilon_v$

$n_c(T) = p_v(T)$

$$n_c(T) = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} d\varepsilon\, g_c(\varepsilon)\, e^{\frac{\mu-\varepsilon}{\varepsilon_B T}} = e^{\frac{\mu-\varepsilon_c}{\varepsilon_B T}} \int_{\varepsilon_c}^{\infty} d\varepsilon\, g_c(\varepsilon)\, e^{\frac{\varepsilon_c-\varepsilon}{\varepsilon_B T}} =$$

$$= e^{\frac{\mu-\varepsilon_c}{\varepsilon_B T}} N_c(T)$$

$g_c(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c}$

$N_c(T) \sim T^{3/2}$

$$p_v(T) = P_v(T)\, e^{\frac{\varepsilon_v-\mu}{\varepsilon_B T}}$$

$$p_v(T) = n_c(T) = n_i(T) = \sqrt{n_c(T)\, p_v(T)} =$$

n_i intrinsic

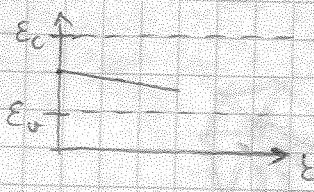
$$= \sqrt{N_c(T)\, P_v(T)}\, e^{-\frac{\varepsilon_g}{2\varepsilon_B T}}$$

$$\mu = \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_v}{2} + \frac{\varepsilon_B T}{2} \ln \frac{P_v(T)}{N_c(T)}$$ a kémiai potenciál

a sávok között van $T = 0$-nál pont középen

$$\approx \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_v}{2} + \frac{3}{4}\varepsilon_B T \ln \frac{m_v}{m_c}$$ a tömegektől függ

melyik irányba megy nem 0 hőm-en



adalékolt félvezetők

ugyanabba a kristályba beraknak egy szomszéd oszlopból egy atomot

V. főcsoportból $\Rightarrow$ +1 elektron $\rightarrow$ hidrogén-szerű

kötött állapot, de a Bohr-sugár sokkal nagyobb, mint az atomi távolság $\Rightarrow$ nem Coulomb-Eh.

$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ helyett $\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\frac{1}{\epsilon}$ és m helyett m^*

$$E_0 = \frac{m^* e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \varepsilon_r^2} \frac{1}{2\hbar^2} = 13{,}6\ \text{eV} \cdot \frac{m^*}{m} \frac{1}{\varepsilon_r^2}$$

↑ kötési energia kicsi

$\varepsilon_r \approx 10 - 30 - 50$

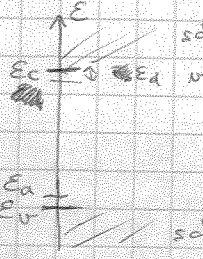
$10^{-2} - 10^{-3}$

Bohr - sugara: $r_0 = a_0 \varepsilon_r \frac{m}{m^*}$ 10 - 20 rácsállandó

többi atomot, mint hátteret vehetjük figyelembe

Si $E_d \sim 20$ meV

Ge $E_d \sim 55$ meV



donorállapot $\Rightarrow \varepsilon_d$

ha III. főcsoporttól adunk hozzá, akkor lesz egy hiány $\Rightarrow$ lyuk

$\Rightarrow$ inverz H atom, akceptorenergia valenciasáv tetője fölött

azt a donorállapotot számítanak, amik felgerjeszthetőek a sávba, mert a donorállapotot nem akarnak sávot

$\left.\begin{matrix} \varepsilon_c - \varepsilon_d \\ \varepsilon_a - \varepsilon_v \end{matrix}\right| \approx 10$ meV $\Rightarrow$ szobahőmérsékleten is jelentős

$\varepsilon_c - \varepsilon_v \approx 1$ eV

töltéshordozók sűrűsége:

$$\langle n_i \rangle = \frac{\sum_i N_i e^{-\frac{E_i - \mu N_i}{k_B T}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i - \mu N_i}{k_B T}}}$$

$$\text{betöltöttség } \langle n_d \rangle = \frac{2 e^{-\frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_d - \mu}{k_B T}}}{e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}} + 2 e^{-\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_d - \mu}{k_B T}}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{\varepsilon_d - \mu}{k_B T}}}$$

$$n_d = \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{\varepsilon_d - \mu}{k_B T}}}$$

üres nívók eloszlása: $1 - n_d = \frac{N_d}{1 + 2e^{\frac{\mu - \varepsilon_d}{k_B T}}}$

ugyanez elmondható az akceptor nívókra, de lehet 1 lyuk 2 lyuk, de 0 nem lehet

$n_a - 1 = \frac{N_a}{1 + 2e^{\frac{\varepsilon_a - \mu}{k_B T}}}$ ionizált akceptorokra

$n_c + n_d = N_d - N_a + p_v + p_a$ ← akceptor lyuk

↑ ↑ valencia lyuk

negatív töltések = pozitív töltések

$N_c e^{-\frac{\varepsilon_c - \mu}{k_B T}} + N_d \frac{1}{1 + 2e^{\frac{\varepsilon_d - \mu}{k_B T}}} = N_d - N_a + \dots$

$n_c(T) = N_c e^{-\frac{\varepsilon_c - \mu}{k_B T}} = N_c e^{-\frac{\varepsilon_c - \mu_i}{k_B T}} e^{\frac{\mu - \mu_i}{k_B T}} = n_i(T) e^{\frac{\mu - \mu_i}{k_B T}}$

$p_v(T) = n_i(T) e^{\frac{\mu_i - \mu}{k_B T}}$

↑ adalékolás nélküli

$n_c p_v = n_i^2$

Tfh. csak donornívók vannak (μ-t azanjuk)

$n_c = p_v + n_d^+$

↑ ionizált donornívók száma

alacsony hőmérsékleten elhagyható

$N_c(T) e^{-\frac{\varepsilon_c - \mu}{k_B T}} = N_d \frac{1}{1 + 2e^{\frac{\mu - \varepsilon_d}{k_B T}}}$

Ezt már meg lehet oldani μ-re

$\mu = k_B T \ln\left(\frac{1}{4} e^{\frac{\varepsilon_d}{k_B T}} \left[\sqrt{1 + \frac{8 N_d}{N_c(T)} e^{\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_d}{k_B T}}} - 1\right]\right)$

alacsony hőm-en $\mu \xrightarrow[\varepsilon_c - \varepsilon_d \gg T k_B]{} \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_d}{2} + k_B T \ln \frac{N_d}{2 N_c(T)}$

ε_c ↑ μ

ε_d ↑

$\mu \xrightarrow[\varepsilon_c - \varepsilon_d \ll k_B T]{} \varepsilon_c + k_B T \ln \frac{N_d}{N_c(T)}$?

→ T

vezetési sávban lévő elektronok száma:

$$n_c(T) = N_c(T) e^{\frac{\varepsilon_c - \mu}{\varepsilon_B T}} = \sqrt{\frac{N_c(T) N_d}{2}} e^{-\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_d}{\varepsilon_B T}} \quad \text{ha } \varepsilon_c - \varepsilon_d \gg \varepsilon_B T$$

$$n_c = N_c(T) e^{\ln \frac{N_d}{N_c(T)}} = N_d \quad \text{ha } \varepsilon_c - \varepsilon_d \ll \varepsilon_B T$$

↑ összes donornívó ionizálódik

⇒ kimerülési tartomány

tiszta félvezetőre $n_c = p_v$

adalékolt félvezető $n_c - p_v = \Delta n$

$$n_c p_v = n_i^2 \qquad n_i(T) = \sqrt{N_c(T) P_v(T)}\, e^{-\frac{\varepsilon_g}{2\varepsilon_B T}}$$

$$n_c = \frac{1}{2}\left(\sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_i^2} + \Delta n\right)$$

$$p_v = \frac{1}{2}\left(\sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_i^2} - \Delta n\right)$$

n_i kicsi ⇒ általában $|\Delta n| \gg n_i$

ha $\Delta n > 0$ $\quad n_c \approx \Delta n + \frac{n_i^2}{\Delta n}$ ⇒ többségi töltéshordozó

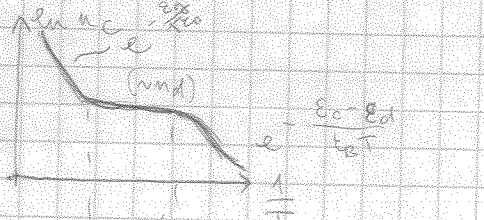
$$p_v \approx \frac{n_i^2}{\Delta n}$$ ⇒ kisebbségi -"-

mindig jelentkezik (adalékolástól függetlenül) kisebbségi töltéshordozó!

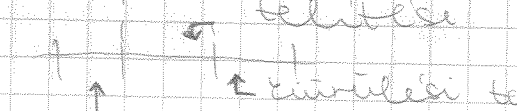
ha $\Delta n > 0$ n típusú } félvezető

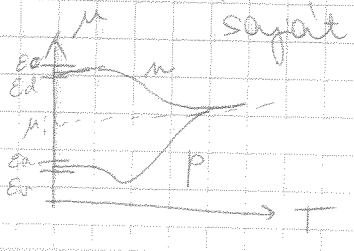
ha $\Delta n < 0$ p típusú }

töltéshordozók száma tekintve összefoglalás:



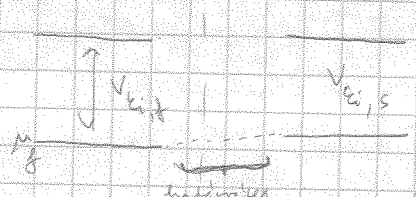
n típusú





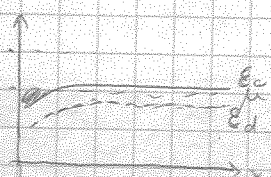
donor v. akceptornívó koncentrációja $10^{12} - 10^{14}$ / cm³

fém - félvezető érintkezés



a két ~~fém~~ kémiai potenciálnak ki kell egyenlítődni → elektronok átvándorolnak → a határrétegben (makroszkopikus) feltöltődés egy ΔV potenciál, ami kiegyenlíti

$|\Delta V| = |\mu_s - \mu_f|$



⇒ felületen a vezetési sáv alja a kémiai potenciál alá ~~kerül~~ ⇒ makroszkopikusan betöltött ~~volt~~ ⇒ ~~kvázi~~ 2D elektrongáz

---

a kváziklasszikus közelítés volt → félvezetőre működik legjobban

Boltzmann - egyenlet:

Kváziklasszikus közelítés → hullámcsomagok ⇒ $\underline{r}$, $\underline{\xi}$ paraméterek eltérve

$\underline{r}$, $\underline{\xi}$ pont körül hány részecske van? (elektronállapot)

$$dN(\underline{\xi}, \underline{r}, t) = f(\underline{\xi}, \underline{r}, t) \frac{dt\, d\underline{x}}{(2\pi)^3}$$

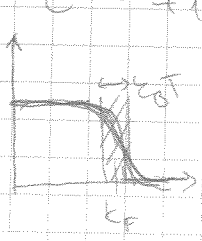
eloszlásfüggvény

$f(\underline{\xi}, \underline{r}, t)$ elektronokra $f_0(\underline{\xi}) = \frac{1}{e^{\frac{\xi - \mu}{k_B T}} + 1}$ (Fermi)

stacionárius $\mu = \mu(\underline{r})$

$T = T(\underline{r})$

lassú változás



$$f_0(\underline{r},\underline{\xi}) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_\xi - \mu(\underline{r})}{k_B T(\underline{r})}} + 1}$$

valóban lassan változó teret is betápláltunk

$f(\underline{\xi}, \underline{r}, t)$ nem lehet sorfejteni a ε_ξ-nél az ugrás miatt

$$f(\underline{\xi} + d\underline{\xi},\ \underline{r} + d\underline{r},\ t + dt) = f(\underline{\xi}, \underline{r}, t) + \frac{\partial f}{\partial t} dt + \frac{\partial f}{\partial \underline{r}} \dot{\underline{r}}\, dt + \frac{\partial f}{\partial \underline{\xi}} \dot{\underline{\xi}}\, dt$$

$$\dot{\underline{r}} = \underline{v}_\xi = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_\xi}{\partial \underline{\xi}}$$

$$\dot{\underline{\xi}} = \frac{1}{\hbar}(-e)(\underline{E} + \underline{v}_\xi \times \underline{B})$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{coll} \rightarrow \text{ütközési tag} \rightarrow \text{részecskeáram változik}$$

$$= \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{in} - \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{out}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\underline{r}} \frac{\partial f}{\partial \underline{r}} + \dot{\underline{\xi}} \frac{\partial f}{\partial \underline{k}} = \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{coll} \quad \text{fáristérfogat megmarad}$$

$$\underline{v}_\xi \frac{\partial f}{\partial \underline{r}} + \left(\frac{e}{\hbar}(\underline{E} + \underline{v}_\xi \times \underline{B})\right) \frac{\partial f}{\partial \underline{\xi}} + \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{coll}$$

* $f = f_0 + f_1$ (nem sorfejtés)

külső térekben csak első rendig nézzük

stacionáriusban esetében $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ $\rightarrow$ tfh. $\exists$ ilyen

$$\frac{\partial f_0}{\partial \underline{r}} = \frac{\partial f_0}{\partial\left(\frac{\varepsilon_\xi - \mu(\underline{r})}{k_B T(\underline{r})}\right)} \frac{\partial\left(\frac{\varepsilon_\xi - \mu(\underline{r})}{k_B T(\underline{r})}\right)}{\partial \underline{r}} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\xi} k_B T(\underline{r}) \left(-\frac{1}{k_B T(\underline{r})} \frac{\partial \mu(\underline{r})}{\partial \underline{r}} - \frac{\varepsilon_\xi - \mu(\underline{r})}{(k_B T(\underline{r}))^2} \frac{\partial T(\underline{r})}{\partial \underline{r}}\right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \underline{\xi}} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\xi} \frac{\partial \varepsilon_\xi}{\partial \underline{\xi}} = \hbar\, \underline{v}_\xi \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\xi}$$

$$-\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\xi}\right) \underline{v}_\xi \left(-e\left(\underline{E} + \frac{\nabla \mu(\underline{r})}{e}\right) - \frac{\varepsilon_\xi - \mu(\underline{r})}{k_B T(\underline{r})} \nabla T(\underline{r})\right) =$$

$$= \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{coll} - \underline{v}_\xi \frac{\partial f_1}{\partial \underline{r}} + \frac{e}{\hbar}(\underline{E} + \underline{v}_\xi \times \underline{B}) \frac{\partial f_1}{\partial \underline{\xi}}$$

csak ε_ξ-nél $\neq 0$ — ütközésnél ≈ 0 — másodrendű

Fermi - rendszer a Boltzmann - egyenlet arra alkalmazható, mert az eloszlásfv. deriváltja éles Dirac - delta szerű függvény alacsony hőmérsékleten Bose - rendszerre is fel szokták írni, de arra ez nem igaz

$\underline{k}$ állapot → kiszóródik $W_{\underline{k}\underline{k}'} f(\underline{k})(1-f(\underline{k}'))$

→ beszóródik $W_{\underline{k}'\underline{k}} f(\underline{k}')(1-f(\underline{k}))$

átmenési amplitúdó → feltesszük, hogy csak $\underline{k}$ és $\underline{k}'$ - től függ



$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{in} - \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{out}$$

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{in} = (1-f(\underline{k}))\int \frac{d\underline{k}'}{(2\pi)^3} W_{\underline{k}\underline{k}'} f(\underline{k}')$$

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{out} = f(\underline{k})\int \frac{d\underline{k}'}{(2\pi)^3} W_{\underline{k}\underline{k}'} (1-f(\underline{k}'))$$

Ezek az integrodifferenciálegyenlet

f - fo egyensúlyban

$$W_{\underline{k}\underline{k}'} e^{-\frac{\varepsilon_{\underline{k}}}{k_B T}} = W_{\underline{k}'\underline{k}} e^{-\frac{\varepsilon_{\underline{k}'}}{k_B T}}$$ mérlegegyenlet

$$f_0(\underline{k})(1-f_0(\underline{k})) = -k_B T \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\underline{k}}}$$

ha W - ét tudjuk elvileg megoldható, de bonyolult ⇒ további feltételezéseket tesznek

$f(\underline{k}) - f(\varepsilon_{\underline{k}})$ feltevés, hogy csak $\varepsilon_{\underline{k}}$ - n keresztül függ a $\underline{k}$ - tól

(ezért irodalmi Fermi - felület esetén jó)

legegyszerűbb eset → elasztikus átmeneteket vesznek csak: $W_{\underline{k}\underline{k}'} = W_{\underline{k}'\underline{k}}$ $\varepsilon_{\underline{k}} = \varepsilon_{\underline{k}'}$

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = \int \frac{d\underline{k}'}{(2\pi)^3} W_{\underline{k}\underline{k}'} \left\{(1-f(\underline{k}))(f(\underline{k}')) - f(\underline{k})(1-f(\underline{k}'))\right\}$$

$$f(\underline{k}) = f_0(\underline{k}) + f_1(\underline{k})$$

$f_1(\underline{\xi})$-nek feltesszük, hogy $= -\tau_{\xi}\underline{v}_{\xi}\dfrac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\xi}}\,K(\underline{\xi})$

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = -\int \frac{d\underline{\xi}'}{(2\pi)^3}\,\delta\left(-\tau_{\xi}\underline{v}_{\xi}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\xi}}\right) W_{\xi\xi'}\left(1 - K(\underline{\xi}')/K(\underline{\xi})\right) K(\underline{\xi}) =$$

$$= -\left(f(\underline{\xi}) - f_0(\underline{\xi})\right)\int \frac{d\underline{\xi}'}{(2\pi)^3} W_{\xi\xi'}\left(1 - \frac{K(\underline{\xi}')}{K(\underline{\xi})}\right)$$

ha csak külső $\underline{E}$ tér van, akkor $K(\underline{\xi})$ pl. -t olyan alakban keressük, hogy $K(\underline{\xi}) = a(\xi)\,\underline{\xi}\underline{E}$

$|\underline{\xi}| = |\underline{\xi}'|$

$$\frac{K(\underline{\xi})}{K(\underline{\xi})} \approx \cos\Theta_{\xi\xi'}$$

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = -\left(f(\underline{\xi}) - f_0(\underline{\xi})\right)\int \frac{d\underline{\xi}'}{(2\pi)} W_{\xi\xi'}\left(1 - \cos\Theta_{\xi\xi'}\right) = -\frac{f(\underline{\xi}) - f_0(\underline{\xi})}{\tau_{tr}(\underline{\xi})}$$

$$\frac{1}{\tau_{\xi}} = \int \frac{d\underline{\xi}'}{(2\pi)^3} W_{\xi\xi'}$$

↑ ξ állapot élettartama — csak a nagyszögű szórások számítanak

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} \approx -\frac{f(\underline{\xi}) - f_0(\underline{\xi})}{\tau_{tr}}$$ ← transzport relaxációs idő definíciója

tovább közelítjük $\approx -\dfrac{f(\varepsilon_{\xi}) - f_0(\varepsilon_{\xi})}{\tau_{tr}(\varepsilon_{\xi})}$

$$-\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\xi}}\right)\underline{v}_{\xi}\left(-e\left(\underline{E} + \frac{\nabla\mu}{e}\right) - \frac{\varepsilon_{\xi} - \mu}{T}\frac{\partial T}{\partial \underline{x}}\right) = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} \approx -\frac{f(\varepsilon_{\xi}) - f_0(\varepsilon_{\xi})}{\tau(\varepsilon_{\xi})}$$

$$\boxed{f(\boldsymbol{\varepsilon}_{\xi}) = f_0(\varepsilon_{\xi}) + \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\xi}}\right)\tau(\varepsilon_{\xi})\,\underline{v}_{\xi}\left(-e\left(\underline{E} + \frac{\nabla\mu}{e}\right) - \frac{\varepsilon_{\xi} - \mu}{T}\nabla T\right)}$$

ez volt a megoldás ebben a közelítésben

most alkalmazzuk ⇒

elektromos áram:

$$\underline{j} = -e\frac{1}{V}\sum_{\xi,\sigma}\underline{v}_{\xi}\left(f(\underline{\xi}) - f_0(\varepsilon_{\xi})\right)$$ csak $\underline{E}$ van

$$= -e2\int \frac{d\underline{\xi}}{(2\pi)^3}\underline{v}_{\xi}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\xi}}\right)\tau(\varepsilon_{\xi})(-e)\left(\underline{v}_{\xi}\cdot\underline{E}\right)$$

↑ spin

$\underline{j} = \underline{\underline{\sigma}}\,\underline{E}$

↑ vezetési tenzor $\underline{\underline{\sigma}} = e^2 \int \frac{d\underline{\xi}}{4\pi^3} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\underline{\xi}}}\right) \tau(\varepsilon_{\underline{\xi}}) (\underline{v}_{\underline{\xi}} \circ \underline{v}_{\underline{\xi}})$

köbös kristály esetén

$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma \delta_{\alpha\beta}$

$\underline{v}_{\underline{\xi}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\underline{\xi}}}\right) = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial \underline{\xi}}$

$\sigma = e^2 \tau(\varepsilon_F) \int \frac{d\underline{\xi}}{4\pi^3} \underline{v}_{\underline{\xi}} \left(-\frac{1}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial \underline{\xi}}\right) = e^2 \tau(\varepsilon_F) \int \frac{d\underline{\xi}}{4\pi^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\underline{\xi}}}{\partial \underline{\xi}} f_0(\varepsilon$

↑ Fermi-felületen transport relaxációs idő

$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\underline{\xi}}}{\partial \underline{\xi}} = \left(\frac{1}{m^*}\right)$ $= e^2 \tau(\varepsilon_F) \int \frac{d\underline{\xi}}{4\pi^3} \frac{1}{m^*(\xi)} f_0(\varepsilon_{\underline{\xi}})$

= effektív tömegtenzor

$\sigma = e^2 \tau(\varepsilon_F) \frac{1}{m^*} n$

↑ rétegelektronokra sűrűsége

pont ez volt a Drude modell eredménye

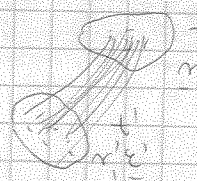
csak τ és m^* másképpen jön

↓ nem elektrontömeg, hanem sávtömeg

más a relaxációs idő definíciója, mint a $\vec{E}$ tűtörés közötti átlagos idő

mágneses tér a sebességben van benne

általánosítsuk ~~mágneses térre~~ a beszóródás és újraszóródás fogalmát



ha benne maradnak

$d\underline{r}\, d\underline{\xi} = d\underline{r}'\, d\underline{\xi}'$ Liouville-tétel

$\frac{dt'}{\tau(\underline{\xi}(t'), \underline{r}(t'))} f_0\left(\underline{r}(t), \underline{\xi}(t')\right) \frac{d\underline{r}'\, d\underline{\xi}'}{(2\pi)^3}$ beszóródó elektronok száma

annak a valószínűsége hogy t'-től t-ig nincs szóródás

$$dN = \int_{-\infty}^{t} \frac{dt'}{\tau(\underline{r}(t'), \underline{\xi}(t'))} f_0\left(\underline{r}(t), \underline{\xi}(t')\right) P\left(\underline{r}, \underline{\xi}, t, t'\right) \frac{d\underline{r}\, d\underline{\xi}}{(2\pi)^3}$$

$$dN = f\left(\underline{r}, \underline{\xi}, t\right) \frac{d\underline{r}\, d\underline{\xi}}{(2\pi)^3}$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{t} \frac{dt'}{\tau(t')} f_0(t') P(t,t')$$

$P(t,t) = 1$

$P(t,-\infty) = 0$ ⇐ termikus egyensúlyból

$P(t,t') = P(t,t'+dt')\left(1 - \frac{dt'}{\tau(t')}\right)$

$$\frac{\partial P(t,t')}{\partial t'} = \frac{P(t,t')}{\tau(t')} \qquad P(t,t') = \exp\left\{-\int_{t'}^{t} \frac{dt''}{\tau(t'')}\right\}$$

$$f(t) = \int_{-\infty}^{t} \frac{dt'}{\tau(t')} f_0(t') P(t,t') = \int_{-\infty}^{t} dt' f_0(t') \frac{\partial P(t,t')}{\partial t'} =$$

$$= f_0(t) - \int_{-\infty}^{t} dt' P(t,t') \frac{d}{dt'} f_0(t')$$

$$\frac{df_0(t)}{dt'} = \frac{\partial f_0(t')}{\partial \varepsilon_\xi} \frac{\partial \varepsilon_\xi}{\partial t'} + \frac{\partial f_0(t')}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t'} + \frac{\partial f_0(t')}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial t'}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_\xi}{\partial t'} = \frac{\partial \varepsilon_\xi}{\partial \underline{k}} \frac{\partial \underline{k}}{\partial t'}$$

↑ ebben van a mágneses tér Lorentz-erőn keresztül

$$\frac{\partial T}{\partial t'} = \frac{\partial T}{\partial \underline{r}_c} \frac{\partial \underline{r}_c}{\partial t'}$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial t'} = \frac{\partial \mu}{\partial \underline{v}_c} \frac{\partial \underline{v}_c}{\partial t'}$$

$$f(t) = f_0(t) + \int_{-\infty}^{t} P(t,t') \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\xi}\right) \underline{v}_\xi(t') \left[e\left(\underline{E}(t') + \frac{\underline{v}_\xi(t') \underline{B}(t')}{c}\right) - \right.$$

$$\left. - \frac{\varepsilon_\xi - \mu}{T(\underline{r},t')} \underline{\nabla} T(t',\underline{r}) \right]$$

$\tau(\varepsilon(t), \underline{r}(t)) \approx \tau(\varepsilon_\xi)$ feltesszük $\Rightarrow P(t,t') = e^{-\frac{t-t'}{\tau(\varepsilon_\xi)}}$

ez a legegyszerűbb közelítés

stacionárius tenzor E, T, μ nem függ t'-től

$$\Rightarrow \left[\int_{-\infty}^{t} dt' P(t,t') \underline{v}_\xi(t') \frac{1}{\tau(\varepsilon_\xi)} = \underline{\psi}_\xi(t) \right] \Leftarrow$$

ha $\underline{v}_\xi(t) = \underline{v}_\xi \Rightarrow \underline{\psi}_\xi(t) = \underline{v}_\xi$

mágneses tér hatása, hogy a sebesség nem konstans

relaxációs időt kell a helix pályája periódusidejével összehasonlítani

Chambers megoldás → lényege, hogy lépésenként vesszük a történetet → beszóródás kiszóródás

$$\underline{v}_\varepsilon \longrightarrow \underline{w}_\varepsilon(t) = \frac{1}{\tau(\varepsilon_\varepsilon)} \int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{-\frac{t-t'}{\tau(\varepsilon_\varepsilon)}} \underline{v}_\varepsilon(t)$$

$$f(t) = f_0 + \left(-\left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right) \tau(\varepsilon_\varepsilon) \underline{w}_\varepsilon(t) \left[-e\left(\underline{E} + \frac{\nabla \mu}{e}\right) - \frac{\varepsilon_\varepsilon - \mu}{T} \nabla T \right]\right.$$

$\underline{E} = \underline{E}(\omega) e^{-i\omega t}$ esetén vezetőképesség?

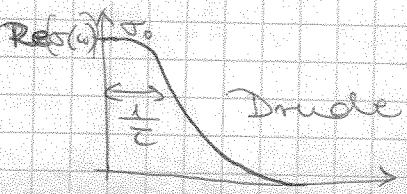
$$f(t) = f_0 + e \int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{-\frac{t-t'}{\tau(\varepsilon_\varepsilon)}} e^{-i\omega t'} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right)(-e) \underline{v}_\varepsilon \underline{E}(\omega) =$$

$$= f_0 - e^{-i\omega t} \frac{1}{\frac{1}{\tau(\varepsilon_\varepsilon)} - i\omega} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right) e \underline{v}_\varepsilon \underline{E}(\omega)$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = e \int \frac{d\underline{\varepsilon}}{(2\pi)^3} \oint_{\varepsilon} 2 v_\alpha(\varepsilon) v_\beta(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right) \frac{1}{\tau(\varepsilon_\varepsilon) - i\omega}$$

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau(\varepsilon_\varepsilon)} \qquad \sigma_0 = \frac{n e^2}{m^*} \tau$$

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{\omega + \frac{i}{\tau}} \frac{i}{\tau} = \frac{n e^2}{m_{opt}} \frac{i}{\omega + \frac{i}{\tau}}$$



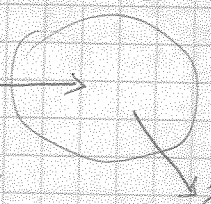
Drude-csúcs

minden fém alapvető jellemzője → optikailag megállapítható, hogy fém-e

pormintán is elvégezhető → nem kell kontaktus

$$\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} = -\frac{1}{\tau(\varepsilon_\varepsilon)} \left[f(\underline{r}, \underline{\varepsilon}, t) - f_0(\underline{r}, \underline{\varepsilon}) \right]$$

↑ kiszóródás ↖ beszóródás



feltesszük, hogy a környezet egyensúlyban van

közelítés, hogy csak Markov-folyamatok vannak → kiszóródás után elfelejti a múltját → 3D-ben jó

↓ → 2D a kritikus dimenzió (Pólya-Szegő tétel)

$$\sigma = \frac{n e^2}{m_{op}} \frac{i}{\omega + M(\omega)} \qquad \omega \to 0 \quad M(\omega \to 0) = \frac{i}{\tau}$$

$M(\omega)$ – ra lehet perturbációszámítást csinálni
$\rightarrow \frac{1}{\tau}$ lehet kis paraméter $\Rightarrow$ törvetlenül
a veretőképességre nem lehet felírni perturbá-
ciószámítást $\Rightarrow \tau$-val megy $\sigma_0 \sim \tau$
$M(\omega) \rightarrow$ memóriafüggvény

külső mágneses és elektromos tér esetén figyelembe kell venni az elhagyott másodrendű tagot

gyenge, konstans mágneses és elektromos tér

$$e\underline{E}\,\underline{v}_\varepsilon\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right) = -\frac{f_1}{\tau} + \frac{e}{\hbar}(\underline{v}_\varepsilon \times \underline{B})\frac{\partial f_1}{\partial \underline{\varepsilon}}$$

$$f_1 = f - f_0 = -e\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right)\tau\,\underline{v}_\varepsilon\,\underline{A}$$

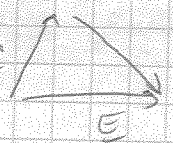
$$e\underline{E}\cdot\underline{v}_\varepsilon\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right) = -e\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right)\underline{v}_\varepsilon\,\underline{A} - \frac{e^2}{\hbar}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_\varepsilon}\right)(\underline{v}_\varepsilon \times \underline{B})\cdot \tau\,\frac{\partial}{\partial \underline{\varepsilon}}(\underline{v}_\varepsilon\,\underline{A})$$

$$\underline{v}_\varepsilon = \frac{\hbar\underline{\varepsilon}}{m^*}$$

$$\underline{E}\,\underline{v}_\varepsilon = \underline{v}_\varepsilon\,\underline{A} - \frac{e\tau}{m^*}(\underline{v}_\varepsilon \times \underline{B})\,\underline{A}$$

$$\underline{j} = \sigma_0\,\underline{A}$$

$$\underline{E} = \underline{A} - \frac{e\tau}{m^*}(\underline{B} \times \underline{A})$$



$\parallel B \parallel$ komponens: $E_\parallel = A_\parallel$

$$j_\parallel = \sigma_0 E_\parallel$$

$\perp B \perp$ komponens:

$$\underline{A}_\perp = a\underline{E}_\perp + b(\underline{B} \times \underline{E}_\perp)$$

$$\underline{A}_\perp = \frac{\underline{E}_\perp + \frac{e\tau}{m^*}(\underline{B} \times \underline{E}_\perp)}{1 + \left(\frac{e\tau}{m^*}\right)^2 B^2}$$

teljesen izotróp eset

$$j_\perp = \sigma_0 A_\perp$$

$$\underline{E} = \frac{1}{\sigma_0}\underline{j} - \frac{e\tau}{m^*}\frac{1}{\sigma_0}(\underline{B} \times \underline{j})$$

ha $\underline{B} \perp \underline{j}$ $\quad E_{Hall} = -\frac{e\tau}{m^*} \rho_0 B j$

pl.: $B \parallel z$ $\quad j \parallel x \Rightarrow E_{Hall} \parallel y$

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} = \frac{\rho_{yx}(B)}{B}$$

$$R_H = -\frac{e\tau}{m^*}\rho_0 = -\frac{1}{nee}$$

$\rho_{yx}(B) = \rho_{yx}(-B)$ alapján $\rightarrow$ mérésre

$Z_H = \frac{1}{2B}(\rho_{yx}(B) - \rho_{yx}(-B))$ alapján számolhatunk mágneses tér hogyan befolyásolja az elektronokat

külső $\underline{E}$ és $\underline{B}$ tér $(\underline{E} \perp \underline{B})$

ciklotronfrekvencia $\omega_c = \frac{eB}{m}$ $\quad \underline{B} \parallel z$

$v_z(t) = \text{konstans} = v_z$

$v_x(t) = v_\perp \cos(\omega_c t + \phi)$

$v_y(t) = v_\perp \sin(\omega_c t + \phi)$

$v_x(t=0) = v_\perp \cos\phi$

$v_y(t=0) = v_\perp \sin\phi$

$$\underline{v}_\varepsilon(t) = \left[v_x \cos(\omega_c t) - v_y \sin(\omega_c t),\ v_x \sin(\omega_c t) + v_y \cos(\omega_c t),\ v_\parallel \right]$$

$$\underline{w}_\varepsilon = \frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{t} e^{-\frac{t-t'}{\tau}}\ \underline{v}_\varepsilon\, dt'$$

$$\frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{t} dt'\ e^{-\frac{t-t'}{\tau}} \left\{ \begin{matrix} \cos\omega_c t' \\ \sin\omega_c t' \end{matrix} \right\} = \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2} \left\{ \begin{matrix} 1 \\ -\omega_c\tau \end{matrix} \right\}$$

$$\underline{w}_\varepsilon(t) = \left(\frac{v_x}{1+(\omega_c\tau)^2} + \frac{v_y\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2},\ \frac{v_y}{1+(\omega_c\tau)^2} - \frac{v_x\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2},\ v_\parallel \right)$$

$$\sigma_{xx}(B) = \sigma_0 \begin{pmatrix} \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2} & -\frac{\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ \frac{\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2} & \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m}\tau$$

$$\rho_{\alpha\beta}(B) = \rho_0 \begin{pmatrix} 1 & \omega_c\tau & 0 \\ -\omega_c\tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ez az izotróp eset is érdekes → gömbi Fermi-felület

$$\omega_c\tau = \frac{eB}{m}\tau$$

extrém nagy mágneses tér esetén $\omega_c\tau \gg 1$

$$\sigma_{xx} = A_{xx} + \frac{C_{xx}}{B^2} + \dots$$

$$\sigma_{xy} = \frac{B_{xy}}{B} + \dots \quad \text{antiszimmetrikus}$$

zárt pálya esetén $A_{xx} = A_{yy} = 0$ elég nagy mágneses térben

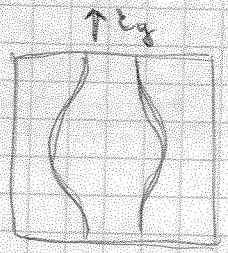
$B \parallel z$

$$\sigma_{\alpha\beta}(B) = \begin{pmatrix} \frac{C_{xx}}{B^2} & \frac{B_{xy}}{B} & \frac{B_{xz}}{B} \\ -\frac{B_{xy}}{B} & \frac{C_{yx}}{B^2} & \frac{B_{yz}}{B} \\ -\frac{B_{xz}}{B} & -\frac{B_{yz}}{B} & A_{zz} \end{pmatrix}$$

$\rho_{xx} \sim \frac{C_{yx}A_{zz} + B_{yz}^2}{A_{zz}\cdot B_{xy}^2}$

transzverzális mágneses ellenállás

$\Rightarrow$ véges ha $\omega_c\tau \gg 1$ $\left(\frac{\tau}{T_c} \gg 1\right)$



ilyen alak esetén az x komponens nem átlagolódik ki

$\Rightarrow$ nyílt pálya esetén

$$\begin{pmatrix} A_{xx} & \frac{B_{xy}}{B} & A_{xz} \\ -\frac{B_{xy}}{B} & \frac{C_{yy}}{B^2} & \frac{B_{yz}}{B} \\ A_{xz} & -\frac{B_{yz}}{B} & A_{zz} \end{pmatrix}$$

$\rho_{xx} \to$ telítésbe megy

$\rho_{yy} \to \alpha B^2$

$\Rightarrow$ kimérhető mennyi van zárt és nyílt pálya

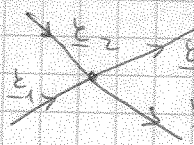
kvantummechanika megértése Feynman - féle pályákkal → belátható, hogy R ellenállás függ a mágneses térből önmagába visszatérő pálya két dimenzióban lehet véges valószínűséggel → belátható, hogy függ a vezető a bezárt mágneses térből és fluxustól

---

relaxációs idő hőmérsékletfüggése?

elasztikus ütközés: $\Rightarrow$ $\tau_{elasztikus}$ nem függ a hőmérséklettől $\sim$ konst

elektron - elektron ütközés:



$$\varepsilon_{\underline{\varepsilon}_1} + \varepsilon_{\underline{\varepsilon}_2} = \varepsilon_{\underline{\varepsilon}_3} + \varepsilon_{\underline{\varepsilon}_1+\underline{\varepsilon}_2-\underline{\varepsilon}_3}$$

$$\varepsilon_{\underline{\varepsilon}_1} > 0 \qquad \varepsilon_{\underline{\varepsilon}_2} < 0$$

$$\varepsilon_{\underline{\varepsilon}_3} > 0 \qquad \varepsilon_{\underline{\varepsilon}_1+\underline{\varepsilon}_2-\underline{\varepsilon}_3} > 0$$

$\frac{1}{\tau}$ és $\frac{1}{\tau_{tr}} \sim T^2$

$\sigma_{Cu-ra} \sim T^2$

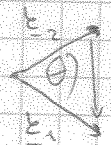
elektron - fonon ütközés: $T > \Theta_D$ elég nagy T

a legfontosabb hány fonon van?

$\frac{1}{\tau} \sim n_B(\omega_{fonon}) \sim \frac{T}{\Theta_D}$ lineáris minden hőm. függés ebből

$\hbar q \ll \varepsilon_F$ alacsony hőmérsékleten vagyunk

hány elbocsátó



csak alacsony energiás hosszú hullámhosszú fononok

$q \sim \underline{\varepsilon}_2 - \underline{\varepsilon}_1$

$g_{ee-fonon} \sim \sqrt{q}$ $\quad |g|^2 \to q$

$\sum_q \sim \int q^2 dq$ lineáris diszperzió

$\frac{1}{q}\int q^2 dq\, q \to \frac{1}{\tau} \sim q_{max}^3 \sim T^3$ elektron

relaxációs idő $\frac{1}{\tau_{tr}} \sim T^5$!!!

Elektronok mágneses térben

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + e\underline{A}\right)^2 \Psi = \varepsilon\Psi$$

$\underline{A} \to \underline{A} + \nabla f$ mértékinvariancia

ügy. $\underline{B} \parallel z$

Landau-mérték $\underline{A} = (0, Bx, 0)$

(szimmetrikus mérték $\underline{A} = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0)$)

$$\left[\frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2m}(p_y + eBx)^2 + \frac{1}{2m}p_z^2\right]\Psi = \varepsilon\Psi$$

$$\left.\begin{aligned}\dot{p}_y &= \frac{1}{i\hbar}[H, p_y] = 0\\ \dot{p}_z &= \frac{1}{i\hbar}[H, p_z] = 0\end{aligned}\right\}$$ megmaradó mennyiséget

$$\Psi(x,y,z) = u(x)\, e^{ik_y y} e^{ik_z z}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_y + \frac{eBx}{\hbar}\right)^2 u(x) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}u(x) = \varepsilon u(x)$$

új jelölések $x_0 = -\frac{\hbar k_y}{eB}$

$$\frac{eB}{m} = \omega_c$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{m}{2}\omega_c^2 (x - x_0)^2 u(x) = \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right)u(x)$$

harmonikus oszcillátor x_0 körül ω_c frekvenciával

$$\varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$u(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\ell_H^{1/2}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\frac{x - x_0}{\ell_H}\right) e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\ell_H^2}}$$

$$\ell_H = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \approx \frac{26{,}65\ \text{nm}}{\sqrt{B(\text{Tesla})}}$$

ha $B = 0$ $\quad \varepsilon(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$

$$k_\alpha = \frac{2\pi}{L_\alpha} \qquad \alpha = x, y, z$$

3 kvantumszám

ha $B \neq 0$ $\quad \varepsilon(k_z, n) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)$

elvileg tetszőleges állapot, tehát minden n-hez degenerálttnak kell lenni

$0 < x_0 < L_x$ (legyen x_0 a mintában)

$x_0 = -\ell_H^2 k_y$

$-L_x/\ell_H^2 < k_y < 0$ $\quad k_y$ lehetséges értékeinek száma

maximális értéke $\frac{2\pi}{L_y} N_p \quad \rightarrow N_p = \frac{L_x L_y}{2\pi \ell_H^2}$

elemi fluxus kvantum

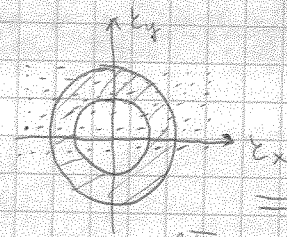
$\Phi_0 = \frac{h}{e} \quad \rightarrow N_p = \frac{L_x L_y B}{\Phi_0}$ → mintán átmenő összes fluxus

$n \Rightarrow$ Landau nívók

n. és $n+1$. Landau nívó közül mi van?

$\varepsilon_\perp = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2\right) = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)$

$\hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right) < \varepsilon_\perp < \hbar\omega_c\left(n+\frac{3}{2}\right)$ → nézzük ezt az esetet



2 kör $\quad \updownarrow \frac{2\pi}{L_y}$ egységekben kvantálva

$\leftrightarrow \frac{2\pi}{L_x}$

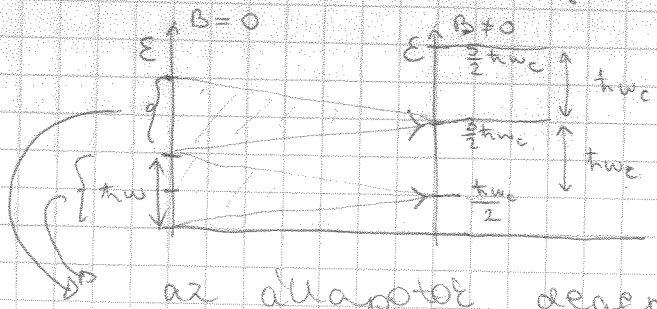
$\Rightarrow$ gyűrű területe: $\pi\left(k_{\perp,n+1}^2 - k_{\perp,n}^2\right)$

$= \pi \frac{2m}{\hbar^2}\left(\varepsilon_{\perp,n+1} - \varepsilon_{\perp,n}\right) =$

$= \pi \frac{2m}{\hbar^2} \hbar\omega_c$

ezt osztjuk a pontok sűrűségével:

$$\frac{\pi \frac{2m}{\hbar^2} \hbar\omega_c}{\frac{2\pi}{L_x}\frac{2\pi}{L_y}} = N_p = \frac{L_x L_y B}{\Phi_0}$$



az állapotok degenerálódnak $B \neq 0$ esetben

1 - 1 állapotba bele formálisan

Kör területe $\underline{k}$ térben $A = \pi k_\perp^2$

$$A_n = \frac{2\pi}{\ell_H^2}\left(n+\frac{1}{2}\right) \Big) \cdot \ell_H^4$$

$\underline{r}$ térben

$$A_n\,(\underline{r}\text{ térben}) = 2\pi \ell_H^2 \left(n+\tfrac{1}{2}\right) = \frac{\Phi_0}{B}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$BA_n = \Phi_0\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

mágneses fluxus

állapotsűrűség

- $k_z = \pm\sqrt{2m\left(\varepsilon - \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)\right)}$

$$dk_z = \frac{dk_z}{d\varepsilon}\,d\varepsilon = \pm\sqrt{2m}\,\frac{d\varepsilon}{2\sqrt{\varepsilon-\hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)}}$$

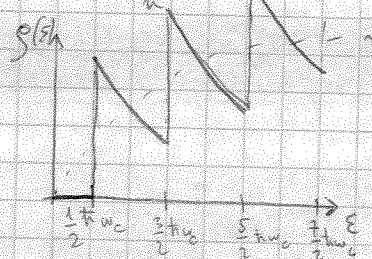
$(k_z,\ k_z+dk_z)$ – ben állapotok száma adott n-re $dN_n = N_p \frac{L_z}{2\pi}\,dk_z =$

$$= \frac{eB}{(2\pi)^2}\frac{V}{\hbar}\,dk_z$$

spin $\to$ 2es faktor

pontig legyen gyök alatt ≥ 0 $\quad (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c \leq \varepsilon$

$$g(\varepsilon) = \sum_n g_n(\varepsilon) = \frac{eB}{(2\pi\hbar)^2}\sqrt{2m}\sum_{n=0}^{n_{max}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}}$$



rögzített energián mi a B függés ?



$\frac{1}{B}$ – ben periodikus

állapotsűrűség

$$B_0 = \frac{\varepsilon m}{\hbar e}$$

spin $\to$ csak szabad elektronok esetén igaz, hogy kettes faktort ad

$\to$ de $B \neq 0$ esetén

$\sigma = \pm 1$

$$E_\sigma(n, k_z) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c\left(n+\tfrac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}|g_e|\,\mu_B B\sigma$$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ → elektronok $|g_e| \approx 2$

$\frac{1}{2} |g_e| \mu_B B \sigma = \frac{\hbar \omega_c \sigma}{2}$

a két spinállapot egymáshoz képest pont $\hbar\omega_c$ -vel tolódik el

! szabad elektronok esetén Zeeman - felhasadás = Landau - nívók felhasadása ha de a ciklotron tömeg és a Bohr - magnetonban levő tömeg nem lesz ugyanaz ha nem szabad az elektron ⇒ két különböző felhasadás

a kvantálás x-y vetületben marad tér, de belevesszük ε_z -t is ⇒ Landau - csö kény Landau - csö van betöltve ?

pl. $10^4 - 10^5$ db

$T = 0$ - nál $\quad n = \int_0^{\mu(B)} g(\varepsilon)\, d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} g_0(\varepsilon)\, d\varepsilon$ ← kémiai potenciál 10.18.

$$g_0(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}$$

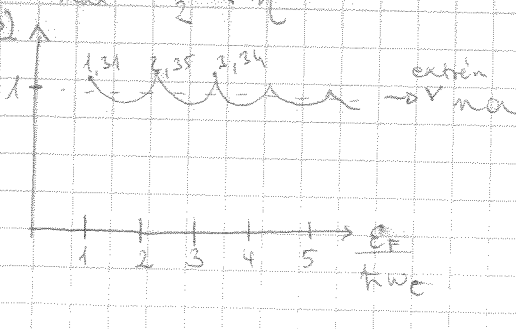
$$g(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{\hbar\omega_c}{2} \sum_{n=0}^{n_{max}} \left(\varepsilon - \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right)^{-1/2}$$

$$\frac{\hbar\omega_c}{2} \int_0^{\mu(B)} \sum_{n=0}^{n_{max}} \left(\varepsilon - \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\right)^{-1/2} d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} \sqrt{\varepsilon}\, d\varepsilon$$

$\eta = \frac{\mu(B)}{\hbar\omega_c}$ $\quad \eta_0 = \frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega_c}$ új változók

$$\sum_{n=0}^{n_{max}} \left(\eta - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right)^{1/2} = \frac{2}{3} \eta_0^{3/2}$$

$n_{max} + \frac{1}{2} \leq \eta$



ha $B \sim 1\,T$

$\hbar\omega_c \sim 10^{-4}\,eV \sim 1\,K$

$\varepsilon_F \sim eV$

1) $T \ll 1\,K$

$\frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} \sim 10^4$ db Landau-nívó sűrűség → kvázi folyt.

alapállapoti energia becslése

$$E_0 = V \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon \rho(\varepsilon)\, d\varepsilon = \dots =$$

$$= N\varepsilon_F - \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar}\right)^{3/2} \hbar\omega_c \sum_{n=0}^{n_{max}} \left(\varepsilon_F - (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c\right)^{3/2}$$

Euler-Maclaurin formula

$$\sum_{n=0}^{n_0} f(n+\tfrac{1}{2}) = \int_0^{n_0+1} f(x)\,dx - \frac{1}{24}\left(f'(n_0+1) - f'(0)\right)$$

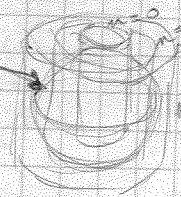
$$|f(n+1) - f(n)| \ll f(n)$$

$$E_0 = \left(1 - \frac{2}{5}\right) N\varepsilon_F - \frac{V}{24\pi^2}(eB)^2 \frac{\varepsilon_F}{m}$$

az oszcillációs tagokat elhanyagoltuk, ezek magasabb hatványai jönnének ki

$$\chi = -\mu_0 \frac{e^2 k_F}{3m} \frac{1}{(2\pi)^2} \qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \text{ Bohr-magneton}$$

$$\boxed{\chi = -\frac{1}{2}\mu_0 \mu_B^2 \rho(\varepsilon_F)} \rightarrow \text{Landau diamágnesség}$$



3D:

$$(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \le \varepsilon_F$$

ha növeljük a mágneses teret nőnek a csövek → egyre kevesebb lesz a Fermi-gömbön belül → ami végül 0 lesz a betöltöttségük

egy Landau pálya degenerációja nő és ε_z-ben is átrendeződnek

B növelésével periodikus viselkedés mérhető jelenségek

Bloch-állapotok, kvázirelativisztikus közelítés

$B \parallel z$ (m_1^*, m_2^*, m_3^*) effektív tömeget

$$\omega_c = \frac{eB}{\sqrt{m_1^* m_2^*}} \qquad m_\parallel^* = m_3^*$$

$$\varepsilon = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_\parallel^*}$$

$$\varepsilon(n+1) - \varepsilon(n) = h\nu$$

$$\nu_c = T_c^{-1} = \frac{eB}{\hbar^2}\left(\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}\right)^{-1}$$ mágneses tér merőleges metszet

$$\varepsilon(n+1, k_z) - \varepsilon(n, k_z) = \frac{2\pi e B}{\hbar}\left(\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}\right)^{-1}$$

$$\frac{\partial A}{\partial \varepsilon} = \frac{A(n+1, k_z) - A(n, k_z)}{\varepsilon(n+1, k_z) - \varepsilon(n, k_z)}$$

$$A(n+1, k_z) - A(n, k_z) = \frac{2\pi e B}{\hbar}$$

$$A(n, k_z) = \frac{2\pi e B}{\hbar}(n + \gamma)$$ pl. szabad elektronra $= \frac{1}{2}$

↑ valami konstans

↑ metszet $\underline{k}$ térben

metszet x térben $F_n = 2\pi k_n^2 (n+\gamma)$

$\Phi = \Phi_0(n+\gamma)$ fluxus kvantált

feltételezzük, hogy a valódi eset nagyon hasonló a szabad elektronoshoz

általában működik, mert n nagy $\sim 10^4 \Rightarrow \gamma$ mindá

(ma már lehet $n < 1$ mintát is csinálni, ott nem jó ez a közelítés)

(2D) kvantumoszcillációk

nívó degenerációja $N_\Phi = \frac{L_x L_y}{\Phi_0} B$

$$B_0 = \frac{\Phi_0 N_\Phi}{L_x L_y} \hookrightarrow N_\Phi = N$$

B_0-nál csak $n = 0$ van betöltve (telítésen)

$N_e = (n+1) N_\Phi$ $\qquad B_n = \frac{B_0}{n+1}$

↑ n-edik teljesen betöltve

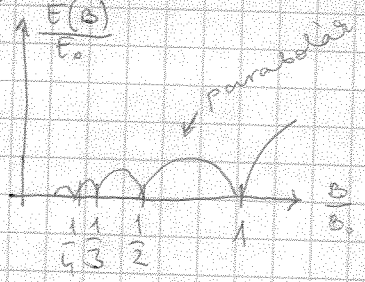
$n+1$-dik üres

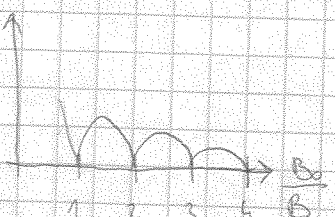
ha $B = B_n$ $\quad E(B_n) = E(0) \rightarrow$ minthe new lehet mágneses tér.

$$E(B) = N_p \sum_{l=0}^{n-1} \hbar\omega_c \left(l+\frac{1}{2}\right) + (N - nN_p)\hbar\omega_c \left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$\hookrightarrow B_0/(n+1) < B < B_0/n$

$$E(B) = \hbar\omega_c N \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(n+1)n\frac{B}{B_0}\right)$$





mágnesezettség $-\frac{\partial E}{\partial B} = M \rightarrow$ ugrásai vannak

(3D) $\quad \xi_z$ és $\xi_z + d\xi_z$ közötti állapotok száma?

$$\varepsilon_F'(\xi_z) = \varepsilon_F - \frac{\hbar^2\xi_z^2}{2m}$$

$$n \leq \frac{\varepsilon_F'(\xi_z)}{\hbar\omega_c} - \frac{1}{2}$$

$$\frac{\varepsilon_F'(\xi_z)}{\hbar\omega_c} - \frac{3}{2} < n_{max} < \frac{\varepsilon_F'(\xi_z)}{\hbar\omega_c} - \frac{1}{2}$$

$$\varepsilon_F'(\xi_z) = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar e}{m} B_n'(\xi_z)$$

$$\frac{1}{B_n'(\xi_z)} = \frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar e}{m}}{\varepsilon_F'(\xi_z)}$$

$$A(\xi_z) = \pi\xi_z^2 = \frac{2\pi}{\hbar^2} m\left(\varepsilon_F - \frac{\hbar^2\xi_z^2}{2m}\right) = \frac{2\pi}{\hbar^2} m\varepsilon_F'(\xi_z)$$

$\frac{1}{B'}$ - ben lesz periodikus viselkedés $\rightarrow$ Lifshitz-Onsager

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{\hbar e}{m\varepsilon_F'(\xi_z)} = \frac{2\pi e}{\hbar A(\xi_z)}$$

$$N(B, \xi_z)\,d\xi_z = N_p (n+1)\frac{L_z}{2\pi} d\xi_z = \underbrace{(n+1)\frac{V}{(2\pi)^2\hbar}}_{g(\xi_z, B)\,V} d\xi_z = V g(\xi_z, B)\,d\xi_z = V g(B)\,d\xi_z$$

állapotsűrűség $\rightarrow$ a ξ_z magasságban

$$g(B) = (n+1)\frac{eB}{(2\pi)^2\hbar} = \frac{m}{(2\pi\hbar)^2}(n+1)\hbar\omega_c$$

$$E(B, \xi_z)\,d\xi_z = N_p \frac{L_z}{2\pi} d\xi_z \sum_{l=0}^{n} \hbar\omega_c\left(l+\frac{1}{2}\right) + N_p\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{L_z}{2\pi} d\xi_z \frac{\hbar^2\xi_z^2}{2m}$$

$$E(B, \xi_z)\,d\xi_z = V\,d\xi_z \left[\frac{(2\pi\hbar)^2}{2m} g^2(B) + g(B)\frac{\hbar^2\xi_z^2}{2m}\right]$$

(ha $B = B_n$ akkor $g(B_n) = g(0)$)

$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar A(k_z)}$ → periodicitás

max $\int dk_z \frac{1}{f}\left(\frac{1}{A(k_z)}\right) \sim \int dA(k_z) \frac{1}{\left|\frac{\partial A(k_z)}{\partial k_z}\right|} f\left(\frac{1}{A(k_z)}\right)$

⇒ ha $\frac{\partial A(k_z)}{\partial k_z} \approx 0$ akkor adják a fő járulékot

↳ Fermi-felület szélső extrémei

ezek a pontok adják az oszcillációkat a többi olyan, mint egy háttérzaj

$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar A_{ext}}$

mágnesezettségbe is ezek szántanak

➡ deHaas-vanAlphen effektus

ellenállás változásai

➡ Subnikov-deHaas effektus

változtatva a mágneses tér irányát ezzel feltérképezhető a Fermi-felület

nagyon alacsony hőmérséklet kell

$\omega_c \gg \frac{1}{\tau}$ relaxációs idő

Optika

10.21.

$c \gg v_F$

$q \sim 0$ -t tudjuk nézni optikával

$\operatorname{rot} \vec{B} = \mu_0 \left(\vec{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}\right)$ $\mu_0 = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2}$

$\operatorname{div} \vec{B} = 0$

$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$

} Maxwell-egyenletek

ha $\rho = |\vec{j}| = 0$ akkor

$\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$ ⇒ $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega\left(t - \frac{\hat{q}\vec{r}}{c}\right)}$

$\vec{B} = \vec{B}_0 e^{-i\omega\left(t - \frac{\hat{q}\vec{r}}{c}\right)}$

$\vec{E}_0 \perp \vec{B}_0 \perp \vec{q}$ → hullámterjedés iránya

$\vec{B}_0 = \frac{1}{c} \vec{q} \times \vec{E}_0$

anyagban → töltéshordozók, áramok

$\rho = \rho_{szabad} + \rho_{kötött}$

$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$

$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}$

$\rho, \vec{j}$ ⇒ szabad töltéshordozók

$\mathrm{rot}\, \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$ $\quad \mathrm{div}\, \vec{D} = \rho$ → egyenletek megváltoztak

lineáris közelítés kis intenzitású térerőnél általában megfelelő

$\frac{1}{\varepsilon_0} \vec{P}(\vec{q}, \omega) = \chi_{el}(q, \omega) \vec{E}(q, \omega)$ $\quad \underline{\underline{\chi_e}}$

↑ lehet tenzor is, de csak bonyolítja a dolgot → tfh. izotrópia

$\vec{M}(q, \omega) = \chi_m(q, \omega) \vec{H}(q, \omega)$ $\quad \underline{\underline{\chi_m}}$

ellenét az anyagra jellemző egyenletek

$\vec{j} = \underline{\underline{\sigma}} \vec{E}$ (itt is izotróp esetet lehet nézni)

azt mondjuk, hogy az anyag nem mágneses (magnetooptika nem most)

dielektromos fv-ek

$\vec{D} = \varepsilon_0 (1 + \chi_{el}(q, \omega)) \vec{E}(q, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon_r(q, \omega) \vec{E}(q, \omega)$

$\vec{B} = \mu_0 (1 + \chi_m(q, \omega)) \vec{H}(q, \omega) = \mu_0 \mu_r(q, \omega) \vec{H}(q, \omega)$

$\mu_r \approx 1$ általában

$\nabla^2 \vec{E} = \frac{\varepsilon_r(q, \omega)\, \mu_r(q, \omega)}{\varepsilon_0 \mu_0} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial \omega^2}$

$N = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r}$ $\quad q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} N^2$

$c \to \frac{c}{N}$ $\quad \mu_r \approx 1$

$N = n + \kappa$ ← "csillapodás" (abszorpció)

törésmutató

$\vec{E} = \vec{E}_0 \, e^{-i\omega\left(t - \frac{n}{c}\hat{q}\vec{r}\right)} e^{-\frac{\omega\kappa}{c}\hat{q}\vec{r}}$

transzverzális továbbra is az em hullám

de csillapodik

abszorbciós együttható $\alpha = -\frac{1}{I}\frac{\partial I}{\partial r}$ → intenzitás (négyzetes)

$\alpha = \frac{2\kappa\omega}{c} = \frac{4\pi\kappa}{\lambda}$ $(\lambda \gg a)$

kauzalitás → retardált válaszfv-ek

$f(\omega) \to f(z)$ kiterjesztés komplexbe

↓

analitikus a felső félsíkon

ha $\lim_{z\to\infty} |f(z)| \leq \frac{1}{z}$



$$\oint_C \frac{f(z)}{z-\omega}\,dz = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' f(\omega')}{\omega'-\omega} + \int_C \frac{dz\, f(z)}{z-\omega} = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega' f(\omega')}{\omega'-\omega} = i\pi f(\omega)$$ főértékű integrál

$\lim_{\omega\to\infty} \varepsilon_r(\omega) = 1$ $\quad \varepsilon_r \to \varepsilon_r - 1$ lecseng

$\lim_{\omega\to\infty} \varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_r(\infty)$ $\quad f(\omega) = f'(\omega) + i f''(\omega)$

ε_r helyett $\to \varepsilon_r(\omega) - \varepsilon_r(\infty)$

$f'(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{f''(\omega')}{\omega'-\omega}$, $f''(\omega) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{f'(\omega)}{\omega'-\omega}$ ---

Kramers – Kronig transzformációk

szabad töltések vannak $\varrho \neq 0$

$$\nabla^2\vec{E} = \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0 c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} + \frac{\sigma}{\varepsilon_0 c^2}\frac{\partial E}{\partial t}$$ $\quad \vec{j} = \sigma\vec{E}$

optikai vezetőképesség = transzverzális vezetőképesség

$\sigma_{tr}(q\to 0) = \sigma_{long}(q\to 0)$

(longitudinális $\vec{\xi} \cdot \hat{e} \to \vec{\pi}$

transzverzális $\uparrow\vec{E} \quad \hat{q} \to \uparrow\vec{\pi}$)

$(\vec{q}, \omega)$ diszperziós relációt keressük:

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\left(\underbrace{\varepsilon_r(\omega) + i\frac{\sigma}{\varepsilon_0\omega}}_{\varepsilon_r(q,\omega)}\right)$$

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_r(\infty) - \frac{\mathrm{Im}\,\sigma(\omega)}{\varepsilon_0\omega}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)}{\varepsilon_0\omega}$$

$q \to 0$ azt jelenti, hogy $\frac{\lambda}{a} \gg 1$

$$n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_r(\infty) - \frac{\mathrm{Im}\,\sigma(\omega)}{\varepsilon_0\omega}$$

$$2n\kappa = \frac{\mathrm{Re}\,\sigma(\omega)}{\varepsilon_0\omega}$$

reflektivitás: $R = \frac{(1-n)^2+\kappa^2}{(1+n)^2+\kappa^2}$ → lehet mérni



alacsony frekvencián $R \approx 1$

10 %-ával szóródnak a porton, mert attól függ milyen szélességnél fognak meg a felületet

$$m\ddot{\vec{r}} = -e\vec{E}$$

$$\omega^2 m\vec{r} = e\vec{E}$$

$$\vec{p} = -n_e e\vec{r}$$

↑ sűrűség

$$q^2\vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2}\vec{E} - \frac{\omega^2}{c^2}\frac{n_e e}{\varepsilon_0}\vec{r}$$

$$\vec{r} = \frac{e}{\omega^2 m}\vec{E}$$

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\left(1 - \frac{n_e e}{m\varepsilon_0}\frac{1}{\omega^2}\right) = \frac{\omega^2}{c^2}\left(1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}\right)$$

$$\frac{n_e e^2}{m\varepsilon_0} = \omega_{plazma}^2$$

$$\varepsilon_r = 1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}$$

ha $\omega \ll \omega_{pl}$ $\quad n \approx 0 \quad \kappa \neq 0$

$\omega \gg \omega_{pl}$ $\quad n \neq 0 \quad \kappa \approx 0$

ígyan be a mozgásegyenletbe csillapítást

$$m\ddot{\vec{r}} = -e\vec{E} - \frac{1}{\tau} m\dot{\vec{r}}$$

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\left(1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2 + i\frac{\omega}{\tau}}\right)$$

$\varepsilon_r(\omega)$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{Re\,\sigma}{\varepsilon_0 \omega}$$

$$\sigma_0 = \frac{n e^2}{m \varepsilon_0}\tau \quad \text{(longitudinális)}$$

ígyan be τ-ban

$$\Rightarrow \tau$$

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pl}^2 \tau^2}{1 + \omega^2\tau^2}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\omega_{pl}^2 \tau}{\omega(1+\omega^2\tau^2)}$$

$\omega \ll \omega_{pl}$ $\quad n \approx \kappa \approx \sqrt{\frac{\omega_{pl}^2 \tau}{2\omega}} = \sqrt{\frac{\sigma_0}{2\varepsilon_0\omega}} \gg 1$

$$R = 1 - 2\left(\frac{2\omega\varepsilon_0}{\sigma_0}\right)^{1/2}$$ Hagen-Rubens összefüggés

ha már tudjuk, hogy fém v. nem fém akkor már lehet vizsgálni abból a szempontból

11.04.

Kötött elektronok

kényszerített oszcillátor kölcsönhat a fénnyel

$$m\ddot{\vec{r}} + m\omega_0^2\vec{r} = -e\vec{E} - \frac{1}{\tau} m\dot{\vec{r}}$$

τ csillapítás

$$m\left(-\omega^2 + \omega_0^2 - i\frac{\omega}{\tau}\right)\vec{r} = -e\vec{E}$$

$$\vec{r} = -\frac{e}{m}\frac{\vec{E}}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}}$$

polarizálhatóság $\quad \alpha(\omega) = -\frac{e\vec{r}}{\vec{E}}$ ↙ dipólmomentum

V térfogatban N db oszcillátor → összeadjuk őket ⇒ polarizáció $\vec{P} = \frac{N e^2}{m}\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}}$

$\frac{N}{V} = n$

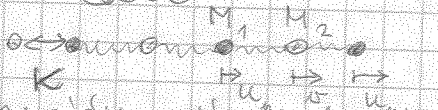
$$\varepsilon_r = 1 + \frac{ne^2}{m\varepsilon_0}\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}} \qquad \frac{ne^2}{m\varepsilon_0} = \omega_{pl}^2$$

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}}$$

ha különböző típusú oszcillátorok az elektronok

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{e^2}{m\varepsilon_0}\sum_j \frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\frac{\omega_j}{\tau_j}}$$

lineáris lánc



$$M_1\ddot{u}_n = -K(2u_n - v_{n-1} - v_n) + eEe^{-i\omega t}$$

$$M_2\ddot{v}_n = -K(2v_n - u_n - u_{n+1}) + eEe^{-i\omega t}$$

$$M_1\ddot{u}_q = -2K(u_q - v_q) + eEe^{-i\omega t}$$

$$M_2\ddot{v}_q = -2K(v_q - u_q) - eEe^{-i\omega t}$$

$$\ddot{u}_q - \ddot{v}_q = (-K(u_q - v_q) + eEe^{-i\omega t})\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)$$

$$\omega_{T_0}^2 = K\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)$$

$$(u_q - v_q)(\omega_{T_0}^2 - \omega^2) = \frac{eEe^{-i\omega t}}{K}\omega_{T_0}^2$$

polarizálhatóság:

$$e(u_q - v_q) = \frac{e^2}{K}\frac{\omega_{T_0}^2}{\omega_{T_0}^2 - \omega^2}$$

$$\varepsilon_r = a + b\frac{\omega_{T_0}^2}{\omega_{T_0}^2 - \omega^2}$$

$$\varepsilon_r(0) = a + b \qquad \varepsilon_r(\infty) = a$$

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_r(\infty) + (\varepsilon_r(0) - \varepsilon_r(\infty))\frac{\omega_{T_0}^2}{\omega_{T_0}^2 - \omega^2}$$

$\varepsilon_r(0) - \varepsilon_r(\infty) > 0$ Kramers – Kronig összefüggés levezethető

$$\varepsilon_r(0) - \varepsilon_r(\infty) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty d\omega' \frac{\varepsilon_r''(\omega')}{\omega'}$$

$$\omega\varepsilon_\alpha''(\omega) > 0$$

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_r(\infty)\,\frac{\frac{\varepsilon_r(0)}{\varepsilon_r(\infty)}\omega_{T_0}^2 - \omega^2}{\omega_{T_0}^2 - \omega^2}$$

$$\frac{\varepsilon_r(0)}{\varepsilon_r(\infty)}\,\omega_{T_0}^2 = \omega_{L_0}^2 \quad \text{behelyettesítve}$$

$$\frac{\varepsilon_r(\omega)}{\varepsilon_r(\infty)} = \frac{\omega_{L_0}^2 - \omega^2}{\omega_{T_0}^2 - \omega^2}$$

Lyddane-Sachs-Teller reláció $\quad \frac{\omega_{L_0}^2}{\omega_{T_0}^2} = \frac{\varepsilon_r(0)}{\varepsilon_r(\infty)} > 1$

ω_{T_0} = transzverzális módus $\quad (q \to 0)$

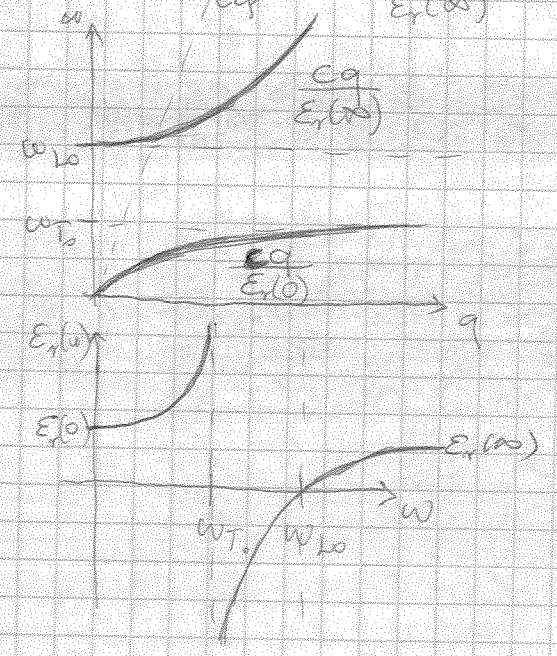
ω_{L_0} = longitudinális módus (hosszúhullámhosszú 10^{-3})

ezt az egyszerű modellt általánosítani kell

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\,\varepsilon_r(\omega)$$

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\,\varepsilon_r(\infty)\,\frac{\omega_{L_0}^2 - \omega^2}{\omega_{T_0}^2 - \omega^2}$$

$$\omega^2(q) = \frac{1}{2}\left(\omega_{L_0}^2 + \frac{c^2q^2}{\varepsilon_r(\infty)}\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{c^2q^2}{\varepsilon_r(\infty)} + \omega_{L_0}^2\right)^2 - 4\,\frac{c^2q^2}{\varepsilon_r(\infty)}\,\omega_{T_0}^2}$$



$q \approx 0$ - nak teruthető mindig, de csak megoldás után $q \to 0$ határesetet

reflektivitás
$R \approx 1$

ha beraknánk az oszcillátorokba csillapítást

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_r(\infty) + (\varepsilon_r(0) - \varepsilon_r(\infty))\,\frac{\omega_{T_0}^2}{\omega_{T_0}^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \qquad \left(\gamma = \frac{1}{\tau}\right)$$

$\max \mathrm{Re}\,\varepsilon_r(\omega) \longrightarrow$ transzverzális gerjesztések / módusok definíciója

$\max \mathrm{Re}\, \frac{1}{\varepsilon_r(\omega)}$ → longitudinális gerjesztések

- longitudinális és transzverzálisnál csak a főtengelyek irányában van értelme de a definíciót lehetnek általánosítva
- a főtengelyek irányában ténylegesen megkülönböztethető a mozgás
- infravörös, alacsonyenergiás spektroszkópiával próbáljuk a rendszer alacsonyenergiás gerjesztéseit és állapotait meghatározni
- a tér amit alkalmazunt nem nagy

$$\mathcal{H}_{int} = -\int \vec{E}(\vec{r})\,\vec{P}(\vec{r})\,d\vec{r}$$

$$\left(\mathcal{H}_{int} = -\int \vec{B}(\vec{r})\,\vec{M}(\vec{r})\,d\vec{r} \quad \text{mágneses térnél}\right)$$

legyen a külső tér x irányú

$$\vec{E}(t) = \frac{1}{2} E_x \hat{x} \left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right) e^{-|\varepsilon| t}$$ ← bekapcsoljuk

perturbációszámítás, lineáris válasz

$t = -\infty$ -ben a rendszer alapállapotban van

$\Phi_0, \Phi_1, \ldots$ rendszer állapotai } tudjuk

$E_0, E_1, \ldots$ energiája

bekapcsoljuk a kölcsönhatást

$$\Psi(t) = c_0(t)\,\Phi_0(r)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} + \sum_{j\neq 0} c_j(t)\,\Phi_j(r)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}$$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial c_j(t)}{\partial t} = \int \Phi_j^*(r)\,\mathcal{H}_{int}\,\Phi_0(r)\,d\vec{r}\; e^{\frac{i}{\hbar}(E_j - E_0)t}$$

dipól közelítés

$$\mathcal{H}_{int} = e\vec{E}(\vec{r},t)\vec{r} \qquad \hbar\omega_{j0} = E_j - E_0$$

(lineáris polarizáció)

$$x_{j0} = \int d\vec{r}\,\Phi_j^*(\vec{r})\, x\, \Phi_0(\vec{r})$$

dipólátmenet

$$\langle x \rangle = -\frac{1}{2}\frac{e E_x}{\hbar}\sum_j |x_{j0}|^2 \left\{ \frac{2\omega_{j0}}{\omega_{j0}^2 + \omega^2 + i\delta\omega} e^{i\omega t} + \frac{2\omega_{j0}}{\omega_{j0}^2 - \omega^2 - i\omega\delta} e^{-i\omega t} \right\}$$

$\vec{p} = e\langle \vec{r} \rangle$

polarizálhatóság $\alpha(\omega) = \sum_j \frac{e^2 |x_{j0}|^2}{\varepsilon_0 \hbar} \frac{2\omega_{j0}}{\omega_{j0}^2 - \omega^2 - i\omega\delta}$

$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{N}{V}\alpha(\omega) = 1 + \frac{N}{V} \sum_j \frac{e^2 |x_{j0}|^2}{\varepsilon_0 \hbar} \frac{2\omega_{j0}}{\omega_{j0}^2 - \omega^2 - i\omega\delta}$ V térfogat, N részecske

bevezetik az optikusok: oszcillátorerősség:

$f_j = \frac{2m}{\hbar^2} \hbar\omega_{j0} |x_{j0}|^2$

$\sum_j f_j = Z \rightarrow$ atomi szám

ezek az atomi állapotok nem végtelen életűek

Elektronok: $\delta \rightarrow \Gamma_j = \frac{1}{\tau_j}$ jobb vesszük figyelembe

$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m} \sum_j f_j \frac{1}{\omega_{j0}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_j}$

szabad elektron gázban (jellium), ugyanez a közelítés:



$\vec{\varepsilon}$ betöltött elektronállapot

$\vec{\varepsilon} + \vec{q}$ üres $\quad -"-$

$\bigcirc\!\!\!\!\!\!\bigcirc\!\!\!\!\!\!\bigcirc\!\!\!\!\!\!

$$\lim_{\omega\to 0}\lim_{q\to 0}\varepsilon_r(q,\omega) \neq \lim_{q\to 0}\lim_{\omega\to 0}\varepsilon_r(q,\omega) \quad !$$

$$\lim_{\substack{q\to 0\\ \omega\neq 0}}\varepsilon_r(q,\omega) = 1 - \frac{ne^2}{\varepsilon_0\omega^2} \qquad \lim_{q\to 0}\varepsilon_r(q,\omega\neq 0) = 1 + \frac{\alpha}{q^2}\varrho(\varepsilon_F)$$

$$\alpha\varrho(\varepsilon_F) = \varkappa_{TF}^2$$

Thomas-Fermi leárnyékolás $\Leftarrow$ Thomas-Fermi hullámszám

(kölcsönhatásmentes gázra is)

$q\to 0$ $(v_F \ll c)$

$$\varepsilon_r(q\to 0,\omega) = 1 + \frac{e^2}{\varepsilon_0 m}\frac{1}{V}\sum_{\xi nn'}\frac{f_{nn'\xi}}{\omega_{nn'\xi}^2 - \omega^2}$$

$$\omega_{nn'\xi} = \frac{1}{\hbar}(\varepsilon_{n'\xi} - \varepsilon_{n\xi})$$

$$f_{nn'\xi} = \frac{2m}{\hbar}\omega_{nn'\xi}\, f_0(\varepsilon_\xi)\cdot\lim_{q\to 0}\left(|\langle n,\vec{\xi}|e^{i\vec{q}\vec{r}}|n',\vec{\xi}+\vec{q}\rangle|^2\frac{1}{q^2}\right)$$

sáv-sáv átmenet

$$\varepsilon''(\omega) = \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0 m\omega}\sum_{nn'\xi} f_{nn'\xi}\,\delta(\omega-\omega_{nn'\xi})$$

mondjuk, hogy $f_{nn'\xi} \approx$ konstans (rögzített n, n')

$$\frac{1}{V}\sum_\xi \delta(\hbar\omega - \varepsilon_\xi) = \underset{\omega \text{ helyen}}{\text{állapotsűrűség}} = \varrho(\omega)$$

$$\frac{1}{V}\sum_\xi \delta(\omega-\omega_{nn'\xi}) = \varrho_{nn'}(\omega) \Rightarrow nn' \text{ sáv egyesített állapot-sűrűsége}$$

$$\frac{1}{V}\sum_\xi \to \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{\xi}\ldots$$

$$\varrho_{nn'}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{S(\xi)}\frac{dS}{|\nabla_\xi(\varepsilon_{n\xi}-\varepsilon_{n'\xi})|}$$

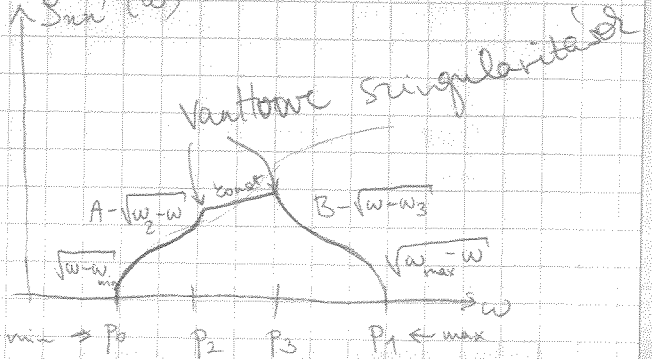
↑ konstans energiájú felület

jellegzetes pontok: $|\nabla_\xi(\varepsilon_{n\xi}-\varepsilon_{n'\xi})| = 0$

$\Rightarrow$ sorfejtve ξ szerint ered körül

- min
- max
- nyeregpont

ebből meghatározhatók a sáv-szerkezet tulajdonságai



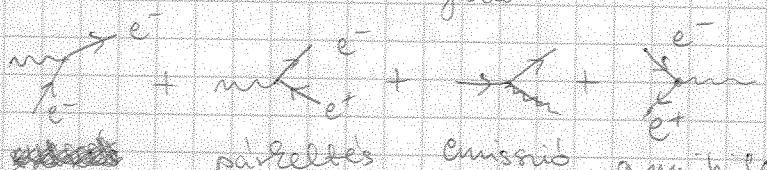
Kvázirelativisztikus közelítés:

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[\frac{1}{2m_e} \left(\vec{p}_i + e\vec{A}(\vec{r}_i) \right) + U(\vec{r}_i) \right]$$

1) $\vec{A}$ -ban lineáris tagig megyünk el

$$\mathcal{H}_{int} = -\sum_i \frac{ie\hbar}{m_e} \vec{A}(\vec{r}_i)\vec{\nabla}_i$$

$\vec{A}$ és $\vec{E}$ kifejthető $\uparrow$ keltő + eltüntető operátorokkal
foton



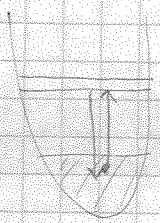
abszorbció párkeltés emisszió annihiláció ← infravörös spektroszkópia

A^2-es tag, két fotonos folyamatok



↑ Raman szórás

pl mérhető és fontos információkkal szolgál
↳ Fermi-felület környéki viselkedés
Raman-spektroszkópia



a kétfele spektroszkópia komplementer mérési eszköz

Elektron-fonon kölcsönhatás:

$m_e \ll M_{ion}$

↓

ionok mozgását elektronok azonnal követik

↓

Jó tudjuk választani a rendszer szabadsági fokait: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ion} + \mathcal{H}_{ee} \leftarrow$ elektron rendszer $+ \mathcal{H}_{ee\text{-}ion}$

↑ rövid hatótávolságú erő, fononok / rácsrezgések; kvantálás szerinti tárgyalás; kölcsönhatás

$\mathcal{H}_{el\text{-}ion} = V_{el\text{-}ion}(\{\vec{r}_i\}\{\vec{R}_\ell\}) = V_{el\text{-}ion}\left(\{\vec{r}_i\}\{\vec{R}_\ell^{\,0} + \vec{u}_\ell(\vec{R}_\ell^{\,0})\}\right)$

hőmérséklet mérve az elvadásponttól → elegendően stabil rács

u_ℓ: egyensúlyi helyzettől való kitérés kicsi → harmonikus közelítés

$= V_{el\text{-}ion}(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_\ell^{\,0}\}) + \sum_\ell \vec{u}_\ell(\vec{R}_\ell^{\,0}) \left.\frac{\partial V_{el\text{-}ion}(\{\vec{r}_i\}\{\vec{R}_\ell\})}{\partial \vec{R}_\ell}\right|_{u_\ell(R_\ell)=0}$

↓ periodikus pot. →

nem a kölcsönhatás lesz

Kell valami közelítés adni, hogyan függ az elektron koordinátáitól → többiest ezt elhanyagolhatjuk általában ⇒ egyelektron energiák összege

$V_{el\text{-}ion}(\{\vec{r}_i\}\{\vec{R}_\ell^{\,0}\}) = \sum_{\ell,i} V_{el\text{-}ion}(\vec{r}_i, \{\vec{R}_\ell^{\,0}\})$

$\mathcal{H}_{el\text{-}ion} = \sum_{\ell,i} \vec{u}_\ell(\vec{R}_\ell^{\,0}) \frac{\partial V_{el\text{-}ion}(\vec{r}_i, \{\vec{R}_\ell^{\,0}\})}{\partial \vec{R}_\ell^{\,0}}$

$\vec{u}(\vec{R}_\ell^{\,0}) = \sum_{q,\lambda} \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_\lambda(\vec{q})}\right)^{1/2} \vec{e}_\lambda(\vec{q})\, e^{i\vec{q}\vec{R}_\ell^{\,0}} (a_{q\lambda} + a^\dagger_{-q\lambda})$

↑ nullaponti rezgés; ↑ polarizáció

$[a_{q\lambda}, a^\dagger_{q',\lambda'}] = \delta_{qq'}\delta_{\lambda\lambda'}$

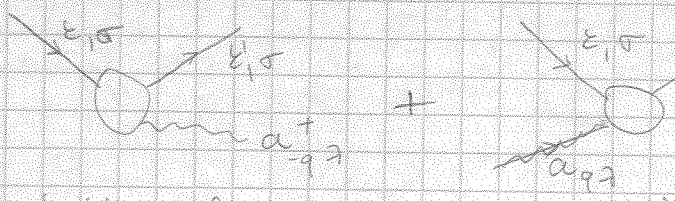
másodkvantált formalizmus

$\sum_i f(\vec{r}_i) = \sum_{\varepsilon,\varepsilon',\sigma} \int d\vec{r}\, \psi^\dagger_{\varepsilon'\sigma}(\vec{r}) f(\vec{r}) \psi_{\varepsilon\sigma}(\vec{r})\, c^\dagger_{\varepsilon'\sigma} c_{\varepsilon\sigma}$

(↳ egyrészecskés operátor alakja ☺)

$\mathcal{H}_{el\text{-}ion} = \sum_{q,\lambda} \sum_{\varepsilon,\varepsilon',\sigma} D_{\lambda,\sigma}(\varepsilon',\varepsilon,q)\, c^\dagger_{\varepsilon'\sigma} c_{\varepsilon\sigma} (a_{q\lambda} + a^\dagger_{-q\lambda})$

↑ derivált és a tenzor faktorok



kvázirészecske megmaradás: $\vec{\varepsilon} + \vec{q} = \vec{\varepsilon}' + \vec{G}$ ← reciprokrács vektor

kölcsönhatás $|\vec{R}^0_\ell - \vec{r}_i|$ - től függ, mindent (ψ) el lehet tolni rácsvektorral, annyiból lesz egy fázisfaktor

$$e^{i(\vec{\varepsilon}-\vec{\varepsilon}')\vec{R}^0_\ell} \int d\vec{r}\ \psi^+_{\varepsilon'\sigma}(\vec{R}^0_\ell - \vec{r})\, \vec{e}_{q\lambda}\, \frac{\partial V_{\text{elektron}}(\vec{R}^0_\ell - \vec{r})}{\partial \vec{R}^0_\ell}\, \psi_{\varepsilon\sigma}(\vec{R}^0_\ell - \vec{r})$$

$\vec{R}^0_\ell$ - től független

BZ.



visszatranszformáció

még mindig túl bonyolult

hosszúhullámú limesz → folytonos változó a diszkrét rácsvektorok helyett

$\vec{R}^0_\ell \to r$

$$\sum_\ell e^{i(\vec{\varepsilon}-\vec{\varepsilon}'+\vec{q})\vec{R}^0_\ell} = N\,\delta_{\vec{\varepsilon}-\vec{\varepsilon}'+\vec{q}}$$

elektronokra ható erő rövid hatótávolságú és a töltéssűrűség változásától függ

⇒

Deformációs potenciál közelítés

$\frac{\delta V}{V}$ relatív térfogatváltozás $= \frac{\partial \vec{u}(\vec{r})}{\partial \vec{r}} = \Delta(\vec{r})$

$U_{def} = C\,\Delta(\vec{r})$ $\quad H_{def} = C \int \Delta(\vec{r})\, n_e(\vec{r})\, d\vec{r}$

$$n_e(\vec{r}) = \sum_{\varepsilon\varepsilon'\sigma} e^{i(\vec{\varepsilon}-\vec{\varepsilon}')\vec{r}}\, u^*_{\varepsilon'\sigma}(\vec{r})\, u_{\varepsilon\sigma}(\vec{r})\, c^+_{\varepsilon'\sigma} c_{\varepsilon\sigma}$$

$$\Delta(\vec{r}) = i \sum_{q,\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_\lambda(\vec{q})}}\, \vec{e}_\lambda(\vec{q})\, e^{i\vec{q}\vec{r}}\, (a_{q\lambda} + a^+_{-q\lambda})\, \vec{q}$$

látható, hogy ebben a longitudinális fotonok adnak járulékot, mert a longitudinális mozgás okoz térfogatváltozást

⇒ 1. deformációs pot. közelítés ⇝ longitudinális fononokra jó

2. akusztikus fononokra $\omega_q(q) = cq \Rightarrow \Delta(r) \sim \sqrt{q}$ $q \to 0$ eltűnik

optikai fononokra:

eldeformálják a rácsot, elektromos polarizáció

$$\vec{P} = F \sum_q \vec{e}(q)\left(b_q e^{i\vec{q}\vec{r}} + b_{-q}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r}}\right)$$

vagy vízjut le a longitudinális optikai fononokat

$\vec{e}(q) = \frac{\vec{q}}{q}$

szabad töltés nincs, $\operatorname{div}\vec{D} = 0 \Rightarrow \vec{q}\vec{D} = 0$

$\varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = 0$

$$\vec{E} = -F \sum_q \frac{\vec{q}}{q} \frac{1}{\varepsilon_0}\left(b_q e^{i\vec{q}\vec{r}} + b_{-q}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r}}\right)$$

$\vec{E} = -\operatorname{grad}\Phi \qquad \Phi(\vec{r}) = -i\frac{F}{\varepsilon_0}\sum_q \frac{1}{q}\left(b_q e^{i\vec{q}\vec{r}} + b_{-q}^+ e^{-i\vec{q}\vec{r}}\right)$

Ellentétben az akusztikus fononokkal az optikai fononokat a $q \to 0$ is lényeges

$\mathcal{H}_{el-ion} = -e\int d\vec{r}\,\Phi(\vec{r})\rho(\vec{r})$

$F^2 = \frac{\hbar\omega_{LO}\varepsilon_0}{2V}\left(\frac{1}{\varepsilon_r(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon_r(0)}\right)$ szigetelőkre, félvezetőkre

akusztikus fonon - elektron csatolás

$q \sim \sqrt{q}\sqrt{\frac{m}{M}}$



elsőrendű folyamatok elektron - lyuk párkeltés, rekombináció



az elektront a fonon felöltöztetik

fonon energia rezonanciában mérhető

fermionok körüli boson cserefolyadék vagy csatolás (első rendben mindig) ezek magyarázzák a szupravezetést

átmeneti valószínűség

$$W_{\vec{\varepsilon}} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_q \left|\langle \vec{\varepsilon} - \vec{q}\,|q|\,\mathcal{H}_{elfon}\,|\vec{\varepsilon}\rangle\right|^2 \delta(\varepsilon_\varepsilon - \varepsilon_{\varepsilon-q} - \hbar\omega_q)$$

$$\frac{1}{\tau_\varepsilon} = W = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_q \left|\langle \vec{\varepsilon} - \vec{q}\,|q|\,\mathcal{H}_{elfon}\,|\vec{\varepsilon}\rangle\right|^2 \delta(\varepsilon_\varepsilon - \varepsilon_{\varepsilon-q} - \hbar\omega_q) + \left|\langle \vec{\varepsilon}'\,|\,\mathcal{H}_{elfon}\,|\varepsilon_1, |q\rangle\right|^2 \delta(\varepsilon_\varepsilon + \hbar\omega_q - \varepsilon_{\varepsilon+q})$$

$$\tilde{\varepsilon}_\xi = \varepsilon_\xi + \sum \frac{|\langle \vec{\xi}-\vec{q}, 1_q | \mathcal{H}_{elfon} | \vec{\xi} \rangle|^2}{\varepsilon_\xi - \varepsilon_{\xi-q} - \hbar\omega_q} + \frac{|\langle \vec{\xi}+\vec{q} | \mathcal{H}_{elfon} | \vec{\xi}, 1_q \rangle|^2}{\varepsilon_\xi - \varepsilon_{\xi+q} + \hbar\omega_q}$$

$$\mathrm{Im}\, \tilde{\varepsilon}_\xi (\varepsilon_\xi \to \varepsilon_\xi + \delta) = -\pi \frac{1}{\tau_\xi}$$

$T \neq 0$ pontosabban $\xi \approx \varepsilon_F$ → betöltési sraűgr figyelembe vétele → mindenhora Fermi-eloszlásfv.
Így a hőmérsékletfüggést is meg lehet kapni

$\varepsilon_F T \ll \hbar\omega_D$ $\quad \varepsilon_\xi \sim \varepsilon_F$ $\quad \omega_D \to$ fononok legvalószínűbb frekvenciája

$\frac{1}{\tau} \sim T^3$

ha $\varepsilon_F T \sim \hbar\omega_D$, akkor $\frac{1}{\tau} \sim T$

elektronállapot energiája megváltozik, mert fononok vannak körülötte

$$|\xi\rangle^{(1)} = |\xi\rangle + \sum_{q,\lambda} \frac{\langle \xi - q, 1_q | \mathcal{H}_{elfon} | \xi \rangle}{\varepsilon_\xi - \varepsilon_{\xi-q} - \hbar\omega_q} \cdot$$

↑ elsőrendű perturbációszámítás

↑ nem valódi fonon

↑ ~~nem valódi fonon~~ gerjesztett egy fonont

$$\langle n_{fonon} \rangle = {}^{(1)}\langle \xi | \sum_{q,\lambda} a^+_{q\lambda} a_{q\lambda} | \xi \rangle^{(1)} =$$

$$= \sum_{q,\lambda} \frac{|\langle \xi - q, 1_q | \mathcal{H}_{elfon} | \xi \rangle|^2}{(\varepsilon_\xi - \varepsilon_{\xi-q} - \hbar\omega_q)^2}$$

növető rendben a fononok száma

deformációs pot. közelítésben

$$|\langle 1 | 1 \rangle|^2 \approx \frac{C^2 \hbar N |q|}{2MC}$$

↑ átmeneti mátrixelem

↑ ion tömeg

↑ hangseb.

felületnél $\xi \approx 0$ $\quad \langle n_{fonon} \rangle = \frac{1}{\pi^2} \frac{m^* N C^2}{\hbar^3 C M} \ln \frac{q_{max}}{q_{min}}$

$\langle n_{fonon} \rangle \sim 10^{-2} - 10^{-3}$ abszorbeált fononszám

egy elektront tevés abszorbeált fonon végül vezet

optikai fononok esetén hasonlan változik fel az elektron

M. 15.

$$\tilde{\varepsilon}_\xi = \varepsilon_\xi + \sum \frac{|\langle \xi - q, 1_q | \mathcal{H}_{elfon} | \xi \rangle|^2}{\varepsilon_\xi - \varepsilon_{\xi-q} - \hbar\omega_q} + \frac{|\langle \xi + q | \mathcal{H}_{elfon} | \xi, 1_q \rangle|^2}{\varepsilon_\xi - \varepsilon_{\xi+q} + \hbar\omega_q}$$

$$\langle n_{fonon} \rangle = \sum_q {}^{(1)}\langle \xi | a^+_q a_q | \xi \rangle^{(1)}$$

optikai fonon → longitudinális az érdekes

energiája ≈ $\hbar\omega_{LO}$

$$\langle n_{fonon} \rangle = \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0\hbar\omega_{LO}} \left(\frac{2m\omega_{LO}}{\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon_r(0)}\right)$$

sorbasor jelölés $\langle n_{fonon} \rangle = \frac{1}{2}\alpha$ → megváltozik a diszperzió

$$\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k - \alpha\left(\hbar\omega_{LO} + \frac{\hbar^2k^2}{12m}\right)$$

perturbáció

↑ sávtömeg első rendjében

$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$ → ↳ olyan mintha a tömeg megváltozna: $\frac{m^*}{1-\frac{\alpha}{6}} = m$ $\quad m^* \approx m\left(1+\frac{\alpha}{6}\right)$ a felöltöztetett tömeg a perturbáció első rendjében

elektron + fononfelhő = polaron

polaron tömege m^* , mérete ?

energiabizonytalansága az elektronnak $\Delta\varepsilon \sim \hbar\omega_{LO}$

$$\frac{\hbar^2(\Delta k)^2}{2m} = \hbar\omega_{LO} \qquad (\Delta x)(\Delta p) \approx 1$$

(bizonytalanság)

csupasz elektron helybizonytalansága = polaron mérete $r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}}}$

ennek akkor van értelme ha $r_0 >> a$ → nagy polaron

félvezetőben, szobahőmérsékleten α nagyságrendje 1-3

(effektív tömeg mérhető) $r_0 \sim (10-100)a$

r_0 ha összemérhető a -val ($\alpha > 3$) → kis polaron

fononokkal való kölcsönhatás az elektronállapotok véges élettartamához vezet, és meg tud növelni az effektív tömeg

ma de mi történik a fononokkal a kölcsönhatáskor ?

fémben $\max_q$ $\vec{k}_{\xi+q}$, $\vec{k}_\xi$, $\vec{q}$ $\quad \hbar\omega_q \ll \varepsilon_F$

Fermi tengerben elektron - lyuk állapot

$$|\xi+q, \xi\rangle = c^+_{\xi+q} c_\xi |FS\rangle$$

$$\varepsilon_{\xi+q} > \varepsilon_F \;,\; \varepsilon_\xi < \varepsilon_F$$

$$\hbar\tilde{\omega}_q = \hbar\omega_q + \sum_\xi \frac{|\langle \xi, \xi+q | \mathcal{H}_{elph} | 1q\rangle|^2}{\hbar\omega_q - (\varepsilon_{\xi+q} - \varepsilon_\xi)}$$

$$(1 - n_F(\varepsilon_{\xi+q}))(n_F(\varepsilon_\xi))$$

$\varepsilon_{\xi+q}$ üres, ε_ξ betöltött terület

$$\hbar\tilde{\omega}_q = \hbar\omega_q + g^2 \sum_\xi \frac{n_F(\varepsilon_\xi)[1 - n_F(\varepsilon_\xi - q)]}{\hbar\omega_q - (\varepsilon_{\xi+q} - \varepsilon_\xi)}$$

$|\varepsilon_{\xi+q} - \varepsilon_\xi| \gg \hbar\omega_q$

$\varepsilon_{\xi+q} \cong \varepsilon_\xi \quad q \neq 0$

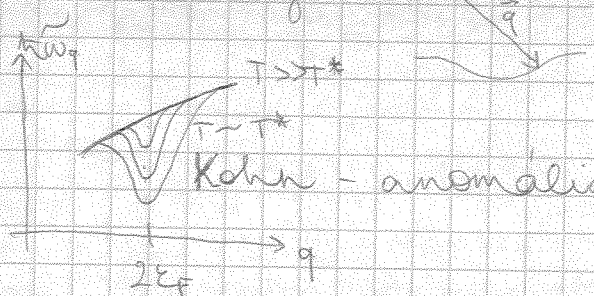


$q \approx 2\xi_F$



$\Leftrightarrow$ 1 pontba $\to 0$ a nevező $\Leftrightarrow$ véges tart.-ban

ha a Fermi-felületnek vannak közel párhuzamos részei $\Rightarrow$ nesting $\quad$ nagy tartományban kicsi a nevező



$$(\hbar\tilde{\omega})^2 = (\hbar\omega_q)^2 - \hbar\omega_q g^2 \sum_\xi \frac{n_F(\varepsilon_\xi)[1 - n_F(\varepsilon_{\xi+q})]}{\hbar\tilde{\omega}_q - (\varepsilon_{\xi+q} - \varepsilon_\xi)}$$

ez a pontosabb kifejezés

mi van ha a megoldás $\hbar\tilde{\omega}_q \to 0$ $(q = 2\xi_F$ -nél)?

állandó rácstorzulás (végtelen hullámhosszú fonon)

Dimerizációt a megoldás

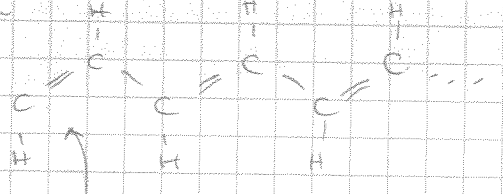
$$k_B T_C = 2{,}28 \varepsilon_F \, e^{-\frac{\hbar\omega_{q=2\xi_F}}{g^2 \mathcal{D}(\varepsilon_F)}}$$

$(\hbar\omega_{q=2\xi_F} = 0)$



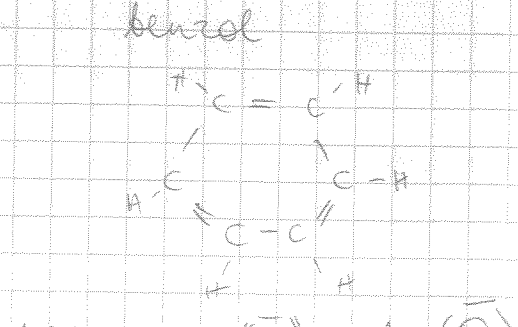
elemi cella a kétszeresére nő $\Rightarrow$ Peierls átalakulás

poliacetilén



ez rövidebb mint az egyes kötés

benzol



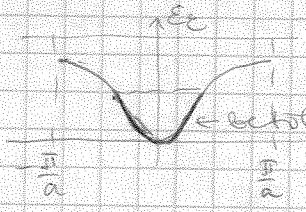
vagy do

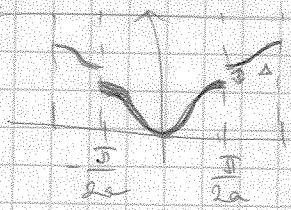
benzolnál a C-C távolságot ugyanazok tehát tudnák deloralizálódni az elektronok a poliacetilén "végtelen" hosszú így nem tudnák delokalizálódni az elektronpályák.
Peierls torzulás csak néhány %-os a rácstávolságot csak kicsit változtatnak

elektronsűrűség

a töltéssűrűségben találnak egy hullám, amivel a hullámhossza a Peierls torzulás távolsága
ezért egydimenziós anyagoknál (vagy 2D) meg lehet figyelni

1D-s anyag elektron-fonon kölcsönhatás tekintetében instabil a torzulással szemben mindig:

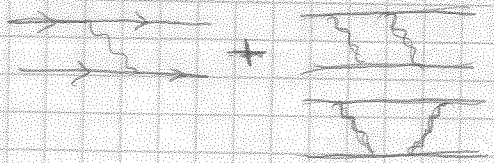




kinetikus energia > rácstorzulásból származó energia

poliacetilénnél pl. H helyére nagyobb elektronegativitású oldallánc → nem lesznek az elektronállapotokban → szabad töltéshordozók lesznek → jobb vezető, mint a réz

Elektronok körüli fononkicserélődés



egy időpillanatban egy fonon fononlétra - elektronok körüli fononkicserélődés

$$\mathcal{H} = \sum \varepsilon_\xi c_\xi^+ c_\xi + \sum \hbar\omega_q a_q^+ a_q + i \sum D_q c_{\xi+q}^+ c_\xi (a_q + a_{-q}^+)$$

Fröhlich

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1$ $\tilde{\mathcal{H}} = e^S \mathcal{H} e^{-S}$ kanonikus transzformáció úgy, hogy $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{O}(\lambda^2) + \mathcal{O}(\lambda^3) + \dots$

$\lambda \mathcal{H}_1 + [S, \mathcal{H}_0] = 0$ → úgy transzformáljuk ki

$\mathcal{H}_1$-ből nemdiagonális elemei $\neq 0$ ha fononok száma a két állapotban eggyel különböző → S is ilyen

$$\langle (n+1)_q | S | n_q \rangle = i D_q \sum_\varepsilon c^+_{\varepsilon - q} c_\varepsilon \frac{1}{\varepsilon_\varepsilon - \varepsilon_{\varepsilon-q} - \hbar\omega_q}$$

$$\langle n_q | S | (n+1)_q \rangle = i D_q \sum_{\varepsilon'} c^+_{\varepsilon'+q} c_{\varepsilon'} \frac{1}{\varepsilon_{\varepsilon'} - \varepsilon_{\varepsilon'+q} + \hbar\omega_q}$$

$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{eff}$

$\mathcal{O}(\lambda^2)$

$$\mathcal{H}_{eff} = \sum_q D_q^2 \sum_{\varepsilon\varepsilon'} c^+_{\varepsilon' q} c_{\varepsilon'} c^+_{\varepsilon - q} c_\varepsilon \frac{\hbar\omega_q}{(\varepsilon_\varepsilon - \varepsilon_{\varepsilon'-q})^2 - \hbar^2\omega_q^2}$$

ha $|\varepsilon_\varepsilon - \varepsilon_{\varepsilon-q}| < \hbar\omega_q$

↳ vonzó csatolás elektronok között !!!!!!!!

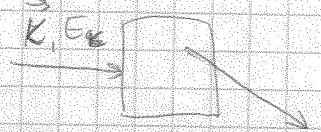
$|\varepsilon_\varepsilon| \gg \hbar\omega_q$

elektronsűrűség Fourier-transzformáltja

$$\sum_\varepsilon c^+_{\varepsilon-q} c_\varepsilon = \delta_q$$

mit mérünk szórásüzletekben?

neutronszórás



$\Delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}'$

$\Delta E = E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}$

anyag gerjesztését tudjuk mérni

röntgen-szórásnál kicsi az impulzusátadás a rácsra → sűrűséggel hat kölcsön, tehát a folyamatot sűrűség-sűrűség korrelációs fv. írja le

sűrűségoperátor $\sum_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \xrightarrow{FT} \sum_i e^{-i\vec{k}\vec{R}_i}$

struktúrafaktor: $S(\vec{k})$ $\vec{k} - \vec{k}' \to \vec{K}$

$$S(\vec{K}) = \frac{1}{N} \sum_{m,n} \left(e^{-i\vec{K}\vec{R}_m} e^{i\vec{K}\vec{R}_n} \right)$$

$\vec{R}_n \to \vec{R}_n + \vec{u}(n,t)$

dinamikus struktúrafaktor definíciója:

$$S(\vec{K},\omega) = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \sum_{m,n} \left\langle e^{-i\vec{K}(\vec{R}_m + \vec{u}(m,t))} e^{i\vec{K}(\vec{R}_n + u(n,0))} \right\rangle$$

$$S(\vec{K},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \sum_{m,n} e^{i\vec{K}(\vec{R}_m - \vec{R}_n)} \left\langle e^{-i\vec{K}\vec{u}(m,t)} e^{i\vec{K}\vec{u}(n,0)} \right\rangle$$

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

$$C = \sum_q \left(\gamma_q a_q + \gamma_q^* a_{-q}^+ \right)$$

$$\langle e^{iC} \rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle C^2 \rangle}$$

$$\langle e^{iA} e^{iB} \rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle A^2 \rangle} e^{-\frac{1}{2}\langle B^2 \rangle} e^{-\langle AB \rangle}$$

$$A = -i\vec{K}\vec{u}(m,t) \qquad B = i\vec{K}\vec{u}(n,0)$$

$$e^{-\frac{1}{2}\langle (\vec{K}\vec{u}(m,t))^2 \rangle} = e^{-W}$$

$$S(\vec{K},\omega) = e^{-2W} \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \sum_{m,n} e^{-i\vec{K}(\vec{R}_m - \vec{R}_n)} \left(1 + \dots\right)$$

↑ sorba fejtettük az $e^{-\langle AB \rangle} - 1$

$$\sum_n e^{-i\vec{K}(\vec{R}_n - \vec{R}_m)} = \delta_{\vec{K},\vec{G}}$$

$\vec{K}$ átadott impulzus – reciprokrács vektor

Bragg – csúcsok

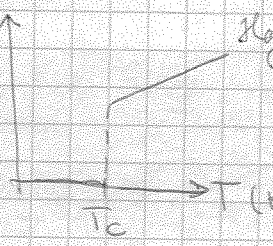
$$W = \frac{1}{2}\langle (\vec{K}\vec{u}(m,t))^2 \rangle = \sum_q \frac{\hbar}{MN\omega_\lambda(q)} \left(\vec{K}\vec{e}_m\right)^2 \left(n_\lambda(q) + \frac{1}{2}\right)$$

↑ polarizációja az $\omega_\lambda(q)$

Debye-Waller faktor (csökken ↑ fonon ↑ az intenzitás)

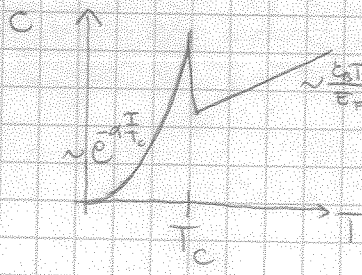
11.18.

Szupravezetés jelenomenologikus elmélete

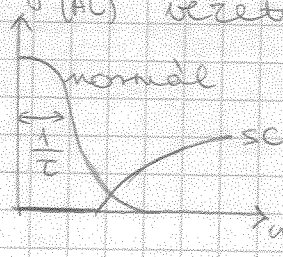


permanens áram folyik

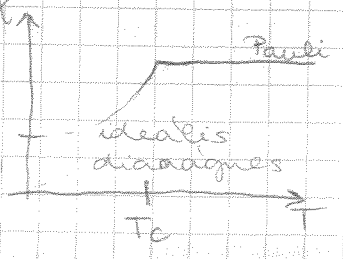
$\rho(T < T_c) \approx 0$



fajhő

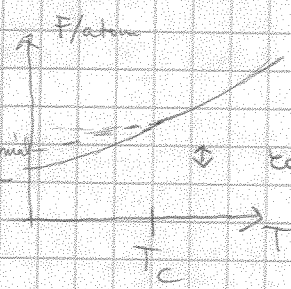


mágneses tulajdonságot mutatják jól, hogy szupravezetővé vált az anyag szuszceptibilitásméréshez bármilyen minta jó nekünk



elég ha a minta egy része valik szupravezetővé
így is látjuk a törést
tiszta anyagnál -1 - be megy a szuszceptibilitás → ideális diamágnes

egy atomra eső sávbeli energia

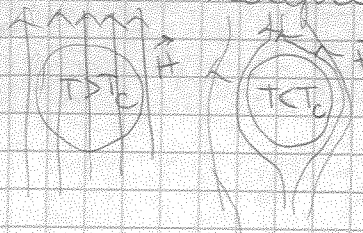


↕ kondenzációs energia

$\frac{N(E_F)(k_B T_c)^2}{E_F} \ll 1$

az elektronok csak kis részük vesz részt a szupravezetésben

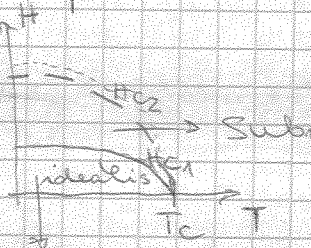
mintát mágneses térbe helyezzük ($\mu_r \approx 1$)



T_c alatt kiszorítja a mágneses teret

ha növeljük a mágneses teret megszűnik a szupravezetés

anyagfüggő, hogy van-e H_{c_2}



Subnitov fázis → részben behatol a mágneses tér

Meissner-fázis

pici effektus energia szempontjából
$T_c \sim e^{-\frac{1}{g}}$ (nem perturbatív elmélet)

London-elmélet: (London testvéret 20-as évek)

$$\vec{j}_s = -e^* n_s^* \vec{v}_s \quad / \quad m^* \frac{d\vec{v}_s}{dt} = -e^* \vec{E}$$

$$\frac{d\vec{j}_s}{dt} = \frac{n_s^* e^{*2}}{m^*} \vec{E} \quad , \quad \mathrm{rot}\,\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\vec{B} + \frac{m^*}{n_s^* e^{*2}} \mathrm{rot}\,\vec{j}_s\right) = 0$$

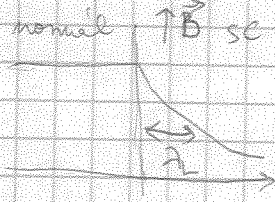
$$\boxed{\mathrm{rot}\,\vec{j}_s = -\frac{n_s^* e^{*2}}{m^*}\vec{B}}$$ London I.

$$\vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A} \quad , \quad \vec{j}_s = -\frac{n_s^* e^{*2}}{m^*}\vec{A}$$

$\vec{A} \to \vec{A} + \vec{\nabla}\ell$ mértékinvarianciát sért.

$\lambda_L^2 = \frac{m^*}{n_c^* e^{*2} \mu_0}$, $\vec{B} = -\mu_0 \lambda_L^2 \operatorname{rot} \vec{j}_s$

$\frac{1}{\mu_0} \operatorname{rot} \vec{B} = \vec{j}_s \to$ $\operatorname{rot}\operatorname{rot} \vec{B} = -\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}$



ilyk a megoldás: $B = \begin{cases} B_0 & x < 0 \\ B_0 e^{-\frac{x}{\lambda_L}} & x > 0 \end{cases}$

λ_L: London-féle behatolási mélység

$30\,nm < \lambda_L < 2000\,nm$

$j_s \neq 0$ $\lambda_L > x > 0$ → felületben folyik az áram



$I = 2\pi R \lambda_L^2 j_s$

$\vec{j}_s = \frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \vec{A}$

$I = 2\pi R \frac{\vec{B}}{\mu_0}$

$I < 2\pi R \frac{B_c}{\mu_0}$ maximális áram

$\vec{j}_s \sim \vec{A}$ lokális, London, másodfajú (II) szupravezető

$\vec{j}_s = \frac{3}{4\pi \mu_0} \frac{1}{\xi_0 \lambda_L^2} \int dr' \frac{\vec{R}(\vec{R}\vec{A}(\vec{r}'))}{R^4} e^{-\frac{R}{\xi_0}}$

↳ $R = |\vec{r} - \vec{r}'|$



Pippard, nemlokális, elsőfajú szupravezető

$\Delta E \approx k_B T_c$ Fermi-felület környezetén

↑ energiabizonytalanság

$\Delta p = \frac{k_B T}{v_F}$

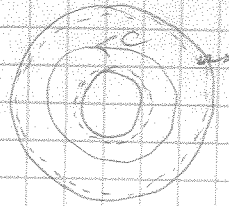
$\Delta x > \frac{\hbar}{\Delta p} \approx \frac{\hbar v_F}{k_B T_c}$ ξ_0 nagyságrendileg Δx

$1_8 - 2\,nm < \xi_0 < 2000\,nm$ anyagtól függően

λ_L és ξ_0 nagyságrendje alapján I v. II fajú

Fluxuskvantálás:

gyűrű alakú minta



$\oint \vec{p}\, d\vec{\ell} = n\hbar$ (Bohr)

$\vec{p} = m^* \vec{v}_s - e^* \vec{A}$

$\oint_C e^* \vec{A}\, d\vec{\ell} = n\hbar \to e^* \int_F d\vec{S} \underbrace{\operatorname{rot} \vec{A}}_{\vec{B}} = n\hbar$

$e^* \int_F d\vec{s}\,\vec{B} = nh$

$\Phi = n\frac{h}{e^*} = n\Phi_0$ ← $2e$ ↳ elemi fluxus

fluxus ↑ egész szám

rossz feltevések vannak az elméletben, de jók a következtetések

termodinamika:

T, V rögzített $F = E - TS$ Helmholtz } szabad energia

T, p rögzített $G = E - TS + pV$ Gibbs

$\delta V = 0$ (elhanyagolható)

mágneses tér: $\delta\mathcal{E} = Td\mathbf{S} + \mu_0 \vec{H}\delta\vec{M}$

↑ első energia törvényét egyszerre

$\delta\mathcal{E} = Td\mathbf{S} + \mu_0\vec{H}\delta\vec{M} + \mu_0\vec{H}\delta\vec{H} = Td\mathbf{S} + \vec{H}\delta\vec{B}$

$\delta f(T,B) = -\mathbf{S}dT + \vec{H}\delta\vec{B}$

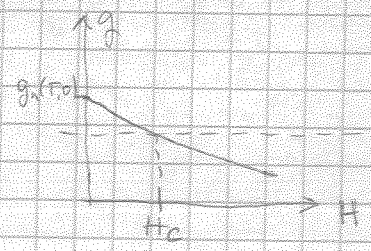
$\vec{H}$-t fixen: $\delta g(T,H) = -\mathbf{S}dT - \vec{B}d\vec{H}$

$S = -\left.\frac{\delta g(T,H)}{\delta T}\right|_H$, $\vec{B} = \left.\frac{\delta g(T,H)}{\delta H}\right|_T$

$g(T,H) = g(T,0) - \int_0^H dH'\, B(H')$

normál állapot: $\mu_r \approx 1$ $B = \mu_0 H$

$g_n(T,H) = g_n(T,0) - \frac{\mu_0 H^2}{2}$



szupravezető állapot: $B = 0$

$g_s(T,H) = g_s(T,0)$

definíció: szupravezető és normál állapotra $g_s(T,0) - g_n(T,0) = -\frac{1}{2}\mu_0 H_c^2$

termodinamikai kritikus tér → elválaszt szemben tőre H_{c_1} és H_{c_2} - höz

$g_s(T,H) = g_n(T,H) + \frac{1}{2}\mu_0\left(H_c^2 - H^2\right)$

$S_s - S_n = \mu_0 H_c \frac{dH_c}{dT}$

latens hő $q = T(S_n - S_s) = -T\mu_0 H_c \frac{dH_c}{dT}$

$q=0$ ha $T=0$ vagy $H_c=0$, $T=T_c$

elsőrendű átvitel $T=0$ v. T_c esetén

fázisátmenet

tiszta ólom: $H_c(T) = H_c(0)\left(1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right)$

Landau - Ginzburg - Bogoljubov - de Gennes

$T<T_c$ esetén létezik $\neq 0$ rendparaméter

$T>T_c$ rendparaméter $=0$

$F[\Psi] \sim F[|\Psi|^2]$ (Ψ rendp.)

$F[\Psi] = F_0 + \alpha(T)|\Psi|^2 + \frac{\beta(T)}{2}|\Psi|^4 + *$

$\beta(T)>0$ stabilitás

$\alpha(T) = \begin{cases} >0 & T>T_c \\ <0 & T<T_c \end{cases}$

$|\nabla\Psi|^2$ szimmetriát miatt $\Rightarrow$ pl. donenfalat

Ginzburg - Landau elméletben bele tett ebbe venni a mágneses teret, ami csatolódik a rendparaméterhez, amit nem tudunk mi

$* + \frac{1}{2}\frac{1}{m^*}\left|\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi\right|^2 + \frac{1}{2\mu_0}B^2$ G-L szabad energia

Ψ, Ψ^* $\Rightarrow$ két paraméter $\Psi = |\Psi|e^{i\varphi}$

lehet variációszámítással minimalizálni $\Rightarrow$ 2 egyenlet

$$\boxed{\frac{1}{2m^*}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)^2\Psi + \alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi = 0}$$

$$\boxed{\frac{1}{\mu_0}\operatorname{rot}\vec{B} = \vec{j} = -\frac{e^*}{2m^*}\Psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi + c.c}$$

határfelület $\hat{n}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi = i\lambda\Psi$ $\Rightarrow$ nem folyik át áram

felület normálisa

$\alpha(T) = a(T-T_c)$ a legegyszerűbb fenomenológia

$$f_s = f_n + \alpha(T)|\Psi|^2 + \frac{\beta(T)}{2}|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*}\left|\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi\right|^2 + \frac{B^2}{2\mu_0}$$

11.22.

$\alpha(T) = \begin{cases} <0 & T<T_c \\ >0 & T>T_c \end{cases}$ legegyszerűbb alak $\alpha(T) = a(T-T_c)$

$\beta(T) > 0$

ez a szabad energia nem sorfejtés

az ilyen típusú közelítés nem jó közvetlenül a fázis-átalakulási pontban, mert a fluktuációk egyre nőnek

ha $\left|\frac{T-T_c}{T_c}\right| < \alpha$ akkor a fluktuációk dominálnak

szupravezetés esetén $\frac{|T-T_c|}{T_c} \sim 10^{-8}$ a kritikus tartomány → nem lehet mérni

tehát ez a Landau elmélet, mint átlagtérelmélet rh. mindenhol működik (nincs "kritikus tartomány")

ez a szabadenergia nagyon jó közelítés a teljes hőmérséklettartományra, $T = 0$ -ra is

szórásos variációszámítással minimalizáljuk a Landau funkcionált ⇒ a rendparaméterre 2 egyenlet:

$$\begin{cases} \frac{1}{2m^*}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)^2\Psi + \alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi = 0 & \text{rendparam.} \\ \vec{j} = -\frac{e^*}{2m^*}\Psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi + \text{c.c.} \end{cases}$$

← nem lsf.!

$$\hat{n}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi = \begin{cases} 0 \\ i\lambda\Psi \end{cases}$$ a határfeltétel



szupravezető - normál átmenet:



proximity effektus ⇒ normálban is van szupravezetés

alagúteffektus mérhető

ha a megoldás: $\Psi(\vec{r})$, $\vec{A}(\vec{r})$

mindenhol csak $\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)$

$$\begin{cases} \Psi'(\vec{r}) = \Psi(\vec{r})\, e^{i\phi(\vec{r})} \\ \vec{A}'(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r}) - \frac{\Phi_0}{2\pi}\vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \end{cases}$$ ← tetszőleges fv.

az alapállapot végtelenül

↳ nyílt a megoldás ! degenerált

$\Psi(r) = |\Psi(r)| e^{i\phi(r)}$ $\quad \vec{j} = -\frac{e^{*2}}{m^*} |\Psi|^2 \left(\vec{A} + \frac{\hbar}{e^*} \vec{\nabla}\phi\right)$

$\frac{\Phi_0}{2\pi}$

$e^* = 2e$

$m^* = 2m_e$

$|\Psi|^2 = n_s$ → szupravezetésben részt vevő elektronok sűrűsége

$B = 0$ esetben

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\Psi + \alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi = 0$$

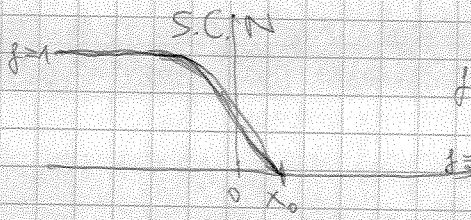
homogén megoldás: $|\Psi_0|^2 = -\frac{\alpha}{\beta} > 0$

$\Psi = \Psi_0 f$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 f + \alpha f - \alpha|f|^2 f = 0$

$$\xi^2(T) = \frac{-\hbar^2}{2m^*\alpha(T)} = \frac{\hbar^2}{2m^*a(T_c - T)}$$

$$\xi^2(T)\nabla^2 f + f - |f|^2 f = 0$$

ξ hosszjellegű mennyiség → milyen hosszskálán tud a rendparaméter változni



$f(x) = -\text{th}\frac{x_0 - x}{\sqrt{2}\xi(T)}$ $\quad \xi(T)$ korrelációs hossz

$\xi(T) >>$ atomi távolság → cella

$\xi(T) \sim (T_c - T)^{-1/2}$ végtelenné válik az átalakulásnál

Meissner-effektus

$$\vec{j} = -\frac{e^{*2}}{m^*}|\Psi_0|^2 \vec{A}(\vec{r})$$

↑ egyensúlyival korcolítva

$$\lambda_L^2(T) = \frac{m^*}{\mu_0 e^{*2}|\Psi_0|^2} = \frac{m^* B}{\mu_0 e^{*2} a(T_c - T)}$$

a, β paramétereket helyettesítve ξ, λ_L

$\lambda_L \sim (T_c - T)^{-1/2}$

$\frac{\lambda_L^2}{\xi^2} = \frac{2m^{*2}\rho}{\mu_0 e^{*2}\hbar^2}$ egyenes hőmérsékletfüggő mérése során

$\kappa_{G-L} = \frac{\lambda_L}{\xi}$ → Ginzburg-Landau paraméter

a rendparaméter változását ξ korrelációs hossz, a mágneses tér változását a λ_L behatolási mélység határozza meg, de az egyetlen érdekes paraméter κ_{G-L}

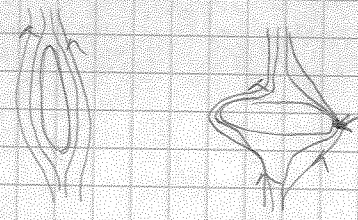
$\Phi = \int_{\mathcal{F}} \vec{B} d\vec{F} = \oint_C \vec{A} d\Gamma$ ha C olyan, hogy $\vec{J} \approx 0$

fluxus $\Phi = n \frac{h}{2e} = n\Phi_0$ fluxuskvantálás

$\Phi_0 = 2{,}067 \cdot 10^{-7}$ Gauss cm^2

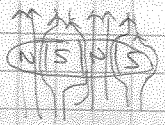
(a minta méretskálájának sokkal nagyobbnak kell lenni, mint a korrelációs hossz ξ)

$\vec{B}$ ↑ $E_{mágneses} \sim \frac{B^2}{2\mu_0}$



nagyon nagy energia

→ kedvezőbb, ha valamennyi fluxus átmegy a mintán



$\Phi = \int \vec{\kappa} = n\tilde{\Phi}$

ha a falenergia > 0, akkor a fal területét minimalizálni kell, ha falenergia < 0, akkor maximalizálni

> 0 esetén nagy makroszkópikus tartományok

< 0 esetén nagyon sok nagyon vékony cső

mennyi a falenergia?

$g = f - \vec{H}\vec{B}$ $\quad g_s(T,H) = f_n(T,0) + \alpha(T)|\Psi|^2 + \frac{\beta(T)}{2}|\Psi|^4 +$

$+ \frac{1}{2m^*}\left|\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi\right|^2 + \frac{B^2}{2\mu_0} - \vec{H}\vec{B}$

$f_s(T,0) = f_n(T,0) - \frac{1}{2}\mu_0 H_c^2$

felületi energia sűrűsége

végtelen fal $\quad \sigma_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty}(g_s - g_n)dx = \ast$

$H = H_c$ - t nézzük!

$$\mathcal{H} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\alpha(T)|\Psi|^2 + \frac{\beta(T)}{2}|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*}\left|\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi\right|^2 + \frac{1}{2\mu_0}(B-\mu_0 H_c)^2 \right]$$

↑ mind2 egy irányba ⊥ x

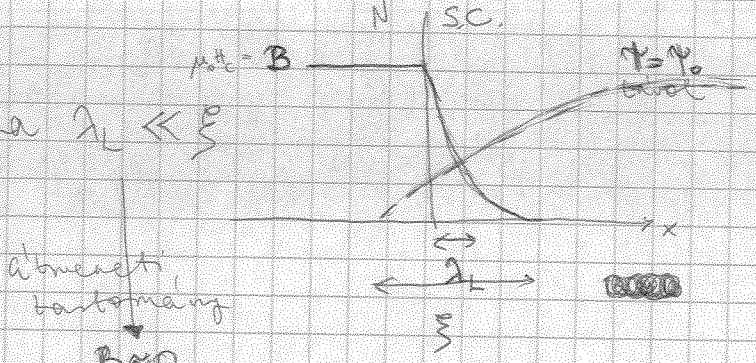
① Ginzburg – Landau egyenletek

Variáljuk Ψ^*-gal bal és integráljuk:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\alpha(T)|\Psi|^2 + \beta(T)|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*}\left|\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)\Psi\right|^2 \right) dx = 0$$

$$\sigma_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[-\frac{\beta(T)}{2}|\Psi|^4 + \frac{(B-\mu_0 H_c)^2}{2\mu_0} \right]$$

(Ψ, B a G–L egyenletek megoldásai erre a határfeltételre)



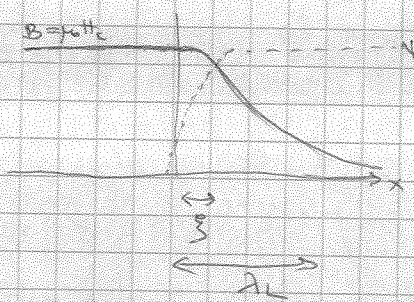
ha $\lambda_L \ll \xi$

árnyéki tartomány

$B \approx 0$

és $|\Psi| \ll |\Psi_0|$, ha $x \lesssim \xi \longrightarrow \sigma_{ns} \approx \frac{\mu_0 H_c^2}{2}\xi > 0$

ha $\lambda_L \gg \xi$



$B \approx \mu_0 H_c$ ha $x \leq \lambda_L$

$$\sigma_{ns} \approx -\frac{1}{2}\lambda\mu_0 H_c^2$$

$\kappa_{G-L} = \frac{\lambda_L}{\xi}$ $\gg 1$ felületi energia < 0 II. fajú

$\ll 1$ > 0 I. fajú szupravezető

$\sigma_{ns} = 0$ ha $\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}}$

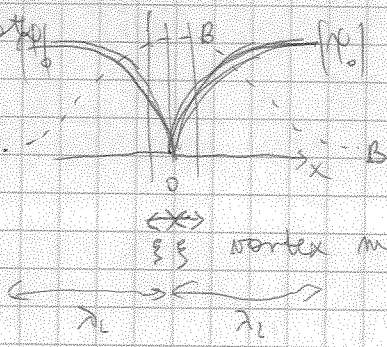
I. fajúban nagyobb, mint a doménetnél → nagy makroszkópikus tartományok

II. fajúban csövekben hatol be a mágneses tér
↳ vortexek → ξ sugarú cső, ahol $H \neq 0$

vortex belseje normál állapotú

↓

hengerszimmetrikus valami



$$\vec{A} + \mu_0 \lambda_L^2 \vec{j} = -\frac{1}{2\pi} \Phi_0 \vec{\nabla} \phi$$

$$\oint_C \left(\vec{A} + \mu_0 \lambda_L^2 \vec{j}\right) d\vec{r} = n\Phi_0$$

vortex csak $n\Phi_0$ fluxust tartalmazhat (ki fog jönni $n=1$)

$$\oint_C \left(\vec{A} + \lambda_L^2 \operatorname{rot} \vec{B}\right) d\vec{r} = n\Phi_0$$

$$\oint_C \left(\vec{A} + \lambda_L^2 \operatorname{rotrot} \vec{A}\right) d\vec{r} = n\Phi_0$$

$$\int_F \left(\underbrace{\operatorname{rot} \vec{A}}_{\vec{B}} + \lambda_L^2 \operatorname{rotrot} \vec{B}\right) d\vec{F} = n\Phi_0$$

↑ ξ-ből elég messze tetszőleges felület

$$\vec{B} + \lambda_L^2 \operatorname{rotrot} \vec{B} = n\Phi_0 \hat{B} \delta^{(2)}(\vec{r})$$

hengerkoordinátarendszerben $\vec{B} \parallel z$ (x,y) a sík

$$B_z + \lambda_L^2 \nabla^2 B_z = \Phi_0 \hat{z} \delta^{(2)}(\vec{r})$$

$$B_z(\vec{r}) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} K_0\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2} \begin{cases} \left(\frac{\pi}{2}\frac{\lambda_L}{r}\right)^{1/2} e^{-\frac{r}{\lambda_L}} & r \to \infty \quad (r \gg \lambda_L) \\ \ln\frac{\lambda_L}{r} + 0{,}18 & \xi \ll r \ll \lambda_L \end{cases}$$

módosított Bessel-fv.

olyan alakú, mint a diszlokáció energiája

11.25.

$$\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi} \sim \sqrt{b}$$

$\kappa \gg 1$ -vel fogunt foglalkozni

$\xi < r < \lambda_L$ az érdekes tartomány

$\lambda_L, \xi \sim (T_c - T)^{-1/2}$

minden méret nagyobb, mint az atomi távolság

szupravezetés érzékeny a pontszerű nem-mágneses szennyezésekre (rácshibákra)

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{-\Phi_0}{2\pi\lambda_L^2 \mu_0} K_1\left(\frac{r}{\lambda_L}\right) \sim \begin{cases} \frac{1}{r} & \xi < r < \lambda_L \\ e^{-\frac{r}{\lambda_L}} & r \gg \lambda_L \end{cases}$$

szuperáram ↔ leárnyékoló áram

vortex energia: (egységnyi hosszra)

$$\oint \vec{p}\,d\vec{l} = nh = m^* \oint \vec{v}_s\, d\vec{l} = m^* v_s 2\pi r$$

$$v_s = \frac{n\,h}{m^* 2\pi r} = \frac{n\hbar}{m^* r}$$

$$E_{kin} = n_s^* \int_{\xi}^{\lambda_L} \frac{m^* v_s^2}{2} 2\pi r\, dr = \frac{\pi n_s^* \hbar^2}{m^*} \ln \frac{\lambda_L}{\xi} = \frac{\Phi_0^2}{4\pi \mu_0 \lambda_L^2} \ln \varkappa$$

$\Phi_0 \to n\Phi_0$ $\quad E_{vortex} \sim (n\Phi_0)^2$

⇓

egy vortex csak 1 fluxuskvantumot hordoz, mert így kisebb az energia

vortexek közötti kölcsönhatási energia is megbecsülhető

$$\hbar L = n_s^* \int_{\xi}^{\lambda_L} r\, v_s\, m^* 2\pi r\, dr = n_s^* \pi \hbar \lambda_L^2$$

$$n_s^* = |\Psi|^2 \approx |\Psi_0|^2 = -\frac{\alpha}{\beta} = \frac{a(T_c - T)}{\beta}$$

$$\mu = \frac{e^*}{2m^*} \hbar L = \frac{\Phi_0}{4\mu_0}$$

↑ mágneses momentum

kölcsönhatási energia: $F_{12} = \frac{\Phi_0^2}{8\pi \lambda_L^2} \left(\ln \frac{\lambda_L}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + 0{,}12 \right)$

→ taszító kölcsönhatás

a vortexek taszítják egymást $(\xi < r < \lambda_L)$

legalacsonyabb energia ⇒ háromszögrács (Abrikosov)

Elméletileg meg lehet figyelni

(magashőmérsékletű szupravezetőkben nem ilyen egyszerű a helyzet → anizotróp, van hogy anyagi üregszerű állapotban a vortexek CuO_2-ak tartalmaznak → rétegekben ered)

H_{c1} és H_{c2} jelentése

↳ megszűnik a szupravezetés

↓

első vortex megjelenik

Gibbs-féle szabadenergia $\sim \vec{B}\vec{H}$

energiaveszteség 1 vortexnél $= E_{vortex}$

$$-\int \vec{B}\vec{H}\, dV = -LH\int B\, dF = +LH\Phi$$

$$H = \frac{E_{vortex}}{\Phi_0} = H_{c_1} = \frac{\Phi_0}{\lambda_L^2 \pi 4\mu_0} \ln \chi$$

ha olyan sok a vortex, hogy majdnem normál állapot $\rightarrow \Psi$ kicsi $\Rightarrow$ hagyjuk el a hamadrendűt

$$\frac{1}{2m^*}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + e^*\vec{A}\right)^2\Psi = -\alpha\Psi - \beta|\Psi|^2\Psi$$

↳ ennek a megoldása a Landau-egyenlet megoldásához hasonló a rendparaméter energia $-\alpha = a(T_c - T)$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c^* \quad \rightarrow \text{minimuma } n=1$$

$$\hbar\omega_c^* = \hbar\frac{2e^*B}{m^*}$$

$\Rightarrow \frac{1}{2}\hbar\omega_c^* \leq -\alpha$ ekkor van megoldás

$\Rightarrow$ maximum a H_{c_2}-nél

$$H_{c_2} = \frac{\hbar}{2e\mu_0\xi^2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0\xi^2}$$ kísérlettel összhangban

$$H_c = \frac{\Phi_0}{2\sqrt{2}\,\pi\mu_0\lambda_L\xi}$$

$$H_{c_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\chi}H_c \ln\chi$$

$$H_{c_2} = \sqrt{2}\,\chi H_c$$

$\chi > \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow H_{c_1} < H_c < H_{c_2}$

H_{c_1} és H_{c_2} mérésből χ, H_c kiszámolható

Szupravezetés mikroszkópikus elmélet (Cooper féle)

elektron - elektron fonon kicserélődés miatt effektív vonzó kölcsönhatás, ha ε_ξ és $\varepsilon_{\xi'}$ közel a Fermi-felülethez



ellentétes spinű elektronok Cooper-párt alkothatnak (↓↑) (alkalmasan szinglet az alapállapot)

Cooper-pár bozon!

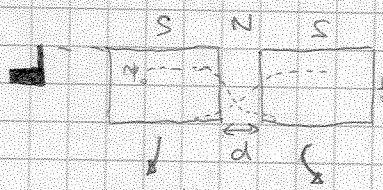
↳ mérete $\approx 10^3 - 10^4 \times$ elektronok közötti átlagos táv.

⇒ nincs értelme azt mondani, hogy kondenzálódnak a párok, mivel egy helyen $10^3 - 10^6$ pár van egyszerre

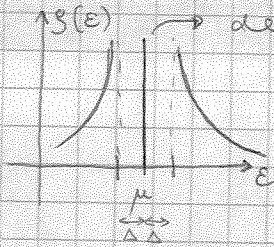
Cooper-párok összessége egy merev hullámfv. lesz, amit nem nagyon lehet deformálni, tehát a fluktuációk elhanyagolhatók

rendparaméter ~ Cooper-pár hullámfv. (kétrészecske állapot korrelációs fv.)

Josephson alagút effektus



$|\Psi_0| e^{i\Phi_L}$ $|\Psi_2| e^{i\Phi_R}$ jó mesze



delta fv → szupravezető állapot

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = \mu\Psi(t)$$

most csatoljuk a két szupravezetőt, de gyengén

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi_L}{\partial t} = \mu_L \Psi_L + T\Psi_R$$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi_R}{\partial t} = \mu_R \Psi_R + T\Psi_L$$

(Feynman)

Josephson

$$\frac{\partial |\Psi_L|}{\partial t} e^{i\Phi_L} + |\Psi_L| e^{i\Phi_L} \frac{\partial \Phi_L}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\mu_L |\Psi_L| e^{i\Phi_L} - \frac{i}{\hbar} T |\Psi_R| e^{i\Phi_R}$$

$$\frac{\partial |\Psi_R|}{\partial t} e^{i\Phi_R} + \dots$$

valós és képzetes részek:

$$\frac{\partial |\Psi_L|}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} T |\Psi_R| \sin(\Phi_R - \Phi_L)$$

$$\frac{\partial |\Psi_R|}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} T |\Psi_L| \sin(\Phi_R - \Phi_L)$$

$|\Psi|^2 = n_s$ szupravezető elektron sűrűség

bal oldalon úgy változhat időben a sűrűség, hogy a jobb oldalról jön vagy megy és fordítva.

$$\frac{\partial \Phi_L}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar}\mu_L - \frac{1}{\hbar} T \frac{|\Psi_R|}{|\Psi_L|}\cos(\Phi_R - \Phi_L)$$

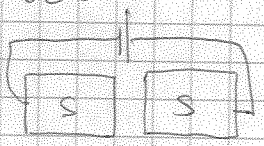
$$\frac{\partial \Phi_R}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar}\mu_R - \frac{1}{\hbar} T \frac{|\Psi_L|}{|\Psi_R|}\cos(\Phi_R - \Phi_L)$$

$$\vec{j} = -e^* \frac{\partial |\Psi_R|^2}{\partial t} = \frac{2e^*}{\hbar} T |\Psi_R||\Psi_L| \sin(\Phi_R - \Phi_L)$$

ha $|\Psi_R| = |\Psi_L|$ ↳ áram, ha van fáziskülönbség

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Phi_L - \Phi_R) = -\frac{1}{\hbar}(\mu_L - \mu_R)$$

mindkét szupravezető legyen elég nagy és a csatolás legyen kicsi ⇒ kevés megy át



kapcsoljunk rájuk feszültséget, úgy a kémiai potenciál különbséget el lehet tolni

$$\mu_R - \mu_L = -e^* V = -2eV$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Phi_R - \Phi_L) = 2\frac{eV}{\hbar} \qquad \Phi_R - \Phi_L = 2\frac{eV}{\hbar} t$$

$$I_s = I_0 \sin\left(\delta\Phi + 2\frac{eV}{\hbar} t\right)$$

↳ oszcillál áram egyenfeszültség hatására

frekvencia: $\omega = \frac{2eV}{\hbar} = 2\pi \frac{V}{\Phi_0}$

$1\,\mu V \cong 483{,}6$ MHz ⇒ nagyon pontos feszültséget lehet mérni (feszültség definíciója)

ez független attól, hogy milyen szupravezető anyag

kapcsoljunk rá váltófeszültséget

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Phi_R - \Phi_L) = \frac{2e}{\hbar} V_0 + \frac{2e}{\hbar} V_\omega \cos(\omega t)$$

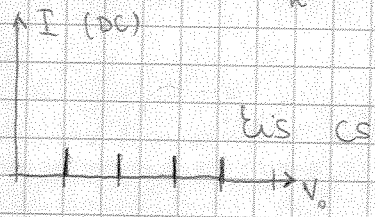
$$\Phi_R - \Phi_L = \frac{2e}{\hbar} V_0 t + \delta\Phi_0 + \frac{2e}{\hbar}\frac{V_\omega}{\omega}\sin(\omega t)$$

$$I_J = I_0 \sin\left(\frac{2e}{\hbar} V_0 t + \delta\phi_0 + \frac{2e}{\hbar}\frac{V_\omega}{\omega}\sin\omega t\right)$$

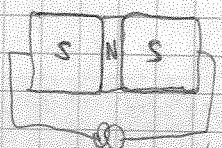
sorbafejtjük Bessel-fv-ek szerint ...

$$I_J = I_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n J_n\left(\frac{2eV_\omega}{\hbar\omega}\right) \sin\left(\delta\phi_0 + \left(\frac{2eV_0}{\hbar} - n\omega\right)t\right)$$

ha $n\omega = \frac{2eV_0}{\hbar}$ → egyenáram



Ez csúcsot az egyenáramú komponens

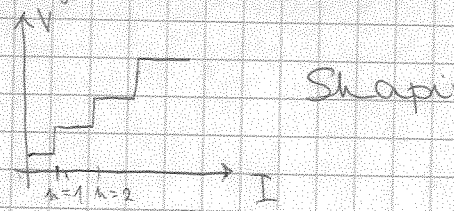


vegyük figyelembe a N (normál) rész ellenállását

áramgenerátorral $I = I_0 \sin(\phi_2 - \phi_1) + \frac{V}{R}$

$I = \text{áll}$

és $V = t$ mérjük ↑ ellenállás



Shapiro lépcső

a kvantummechanikai fázis eltérést makroszkópikus testek esetén is → ez jó bizonyíték, hogy van kvantummechanika makroszkópikusan

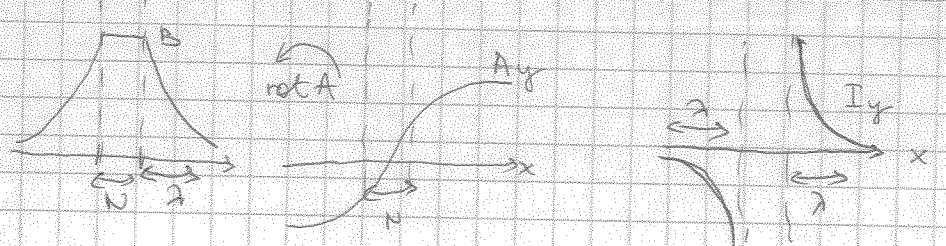
11.29.

Mössbauer-effektus



$I = I_0 \sin(\phi_L - \phi_R)$

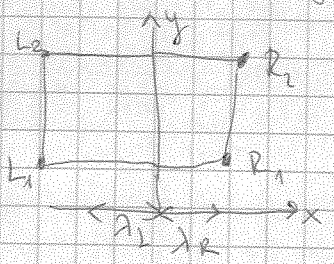
$\vec{H} \parallel z$



$$j = -\frac{e^* \hbar}{m^*} |\psi|^2 \left(\vec{\nabla}\phi + \frac{e^*}{m}\vec{A}\right)$$

$j = 0$, ha $|x| \gg \lambda$ ⇒ $\vec{\nabla}\phi = -\frac{e^*}{\hbar}\vec{A}$

fázisváltozást szeretnénk mérni



→ pontokban

$$\Phi(L_2) - \Phi(L_1) = \frac{e^*}{\hbar} \int_{L_1}^{L_2} \vec{A}\, d\vec{\ell}$$

$$\Phi(R_2) - \Phi(R_1) = -\frac{e^*}{\hbar} \int_{R_1}^{R_2} \vec{A}\, d\vec{\ell}$$

$$\Delta\Phi(L_2 - R_2) - \Delta\Phi(L_1 - R_1) = \Phi(L_2) - \Phi(R_2) - \Phi(L_1) + \Phi(R_1) =$$

$$= \frac{e^*}{\hbar} \left(\int_{L_1}^{L_2} \vec{A}\, d\vec{\ell} - \int_{R_1}^{R_2} \vec{A}\, d\vec{\ell} \right) = *$$

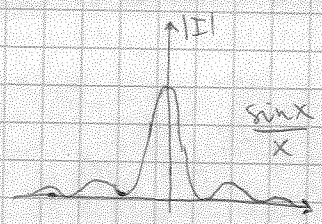
$\vec{A} \parallel y \Rightarrow A_x = 0 \Rightarrow \int_{L_1}^{R_1} \vec{A}\, d\vec{\ell} = 0$, mert $d\vec{\ell} \perp \vec{A}$

$$* = -\frac{e^*}{\hbar} \oint \vec{A}\, d\vec{\ell} = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}$$ → bezárt fluxus

$$\Phi \cong B \underbrace{(d + \lambda_L + \lambda_R)}_{\text{bezárt terület}} y = \Phi(y)$$

$$\int_0^{L_y} I\, dy = \int_0^{L_y} I_0 \sin\left(\Delta\Phi_0 + 2\pi \frac{\Phi(y)}{\Phi_0}\right) = I_0 L_y \sin(\Delta\Phi_0) \frac{\sin\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)}{\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}}$$

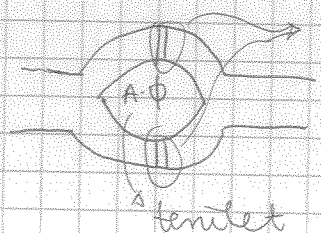
↓ mintavastagsága



Fraunhofer-ábra

B nem mérhető ebből, mert λ_L, λ_R hibája túl nagy d-hez képest

SQUID



→ kicsi területet → elhanyagolható

terület

m.o.: $I_y = I_0 \left(\sin(\Delta\Phi(L_1 - R_1)) + \sin(\Delta\Phi(L_2 - R_2))\right)$

$$I = \int dy\, I_y = 2 I_0 \sin(\Delta\Phi_0) \cos\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)$$

$\Phi \propto B \cdot A$

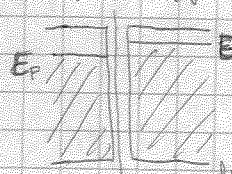
ezzel szépen lehet kis teret használni

pl. 100 m-ről a kő vetése óta tér is mérhető

nagy terek esetén nem cos( ), mert a kis területet fókusza is bejön

Josephson-effektus: fázistulajdonság hatására áram indul → kvantummechanikai jelenség makroszkopikusan is észlelhető

Alagúteffektus



$E_F = \varepsilon_F + eV$

↳ elektromos teret kapcsolunk rá

átmenet valószínűsége: $I = |T|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE \, \underbrace{\rho_L(E)}_{\text{állapotsűrűség}} \rho_R(E+eV) \cdot$

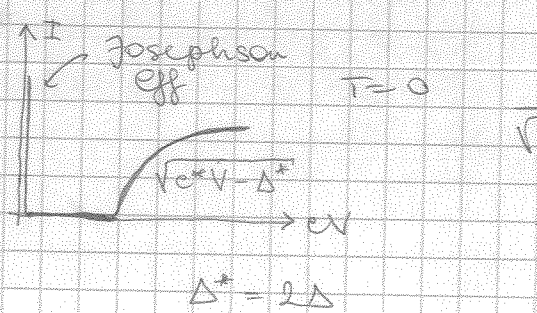
$$\cdot \Big(\underbrace{u_F(E)\,(1-u_F(E+eV))}_{\text{átugorhat}} - \underbrace{u_F(E+eV)\,(1-u_F(E))}_{\text{nem megy vissza}} \Big)$$

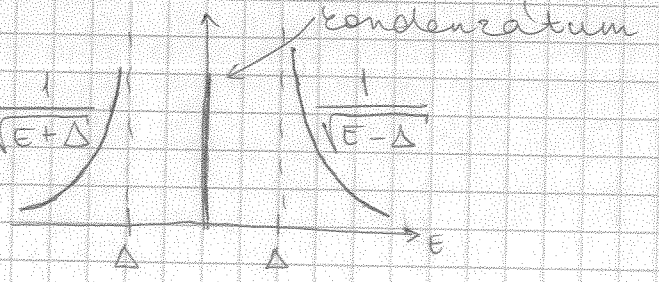
$$I = |T|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE \, \rho_L(E)\,\rho_R(E+eV)\big(u_F(E) - u_F(E+eV)\big)$$

$I \sim |T|^2 \rho_L(\varepsilon_F)\rho_R(\varepsilon_F) eV$ ← Ohm-tól

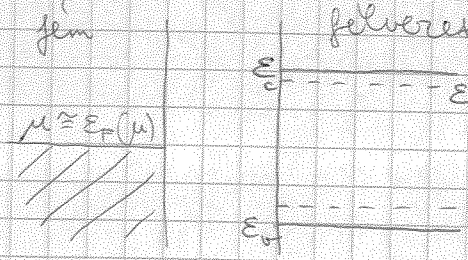
konduktancia

$$\frac{1}{e}\left.\frac{dI}{dV}\right|_{V=0} = |T|^2 \int dE \, \rho_L(E)\left(-\frac{\partial u_F(E)}{\partial E}\right)\rho_R(E)$$





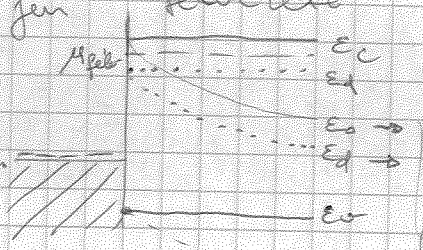
Fém - félvezető határréteg:



vegyük ezt az esetet:
n típusú félvezető,
nincs donornivó
$\varepsilon_d < \mu < \varepsilon_c$

kilépési munka
↳ két kilépési munka különbözik

$\Phi_{fém} > \Phi_{felvezető}$



csatlakozásnál a kémiai potenciálnak folytonosnak kell lenni
} azért kialakult sínek

$$n(x) = N_c(T) \exp\left\{-\frac{\varepsilon_c - \mu - eV(x)}{\varepsilon_0 T}\right\}$$

Boltzmann - statisztika a kialakult pot. hatására

ionizált donornivó

$$n_d^+(x) = \frac{n_d}{1 + 2\exp\left\{\frac{\mu - \varepsilon_c + eV(x)}{\varepsilon_0 T}\right\}}$$

kiürülési tartomány:

$$\varrho(x) = -e\left[n_c(x) - n_d^+(x) - p(x)\right]$$

→ valenciasáv lyuk ≈ 0

$n_d^+(x) = n_d^+$ és $p(x) \approx 0$

Poisson egyenlet

$$\nabla^2 V(x) = -\frac{1}{\varepsilon}\varrho(x) = -\frac{1}{\varepsilon_r \varepsilon_0}(-e)\left[n_c(x) - n_d\right]$$

határfeltételek

$$n_c(\infty) = n_d$$

V_0 kontakt potenciál
kilépési munkák különbsége

$$n(x) = n(\infty)\exp\left\{\frac{e(V(x) - V(\infty))}{\varepsilon_0 T}\right\}$$

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{e}{\varepsilon} n_d \left[\exp\left\{ \frac{e(V(x)-V_0)}{\varepsilon_B T} \right\} - 1 \right]$$

dimenziótlanítunk

$$\tilde{V}(x) = \frac{e(V(x)-V_0)}{\varepsilon_B T} \Rightarrow \frac{d^2\tilde{V}}{dx^2} = \underbrace{\frac{e^2 n_d}{\varepsilon_B T \varepsilon}}_{1/\lambda_D^2} \left(e^{\tilde{V}(x)} - 1 \right)$$

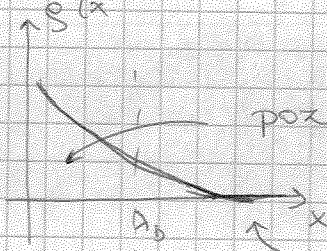
λ_D Debye hossz

$\lambda_D \sim 10^{-6}$ cm

ha $\tilde{V}(x)$ kicsi

$$\frac{d^2\tilde{V}}{dx^2} = \frac{1}{\lambda_D^2} \tilde{V}(x)$$

↳ határfeltételekkel $V(x) = V_0 \left(1 - e^{-\frac{x}{\lambda_D}}\right)$

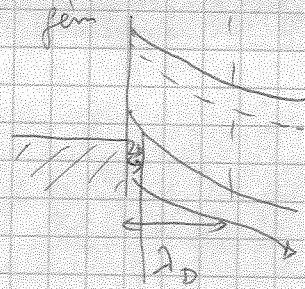


pozitív, mert a töltések átmentek a fémbe → kiürülési tart.

nincs töltésátrendeződés

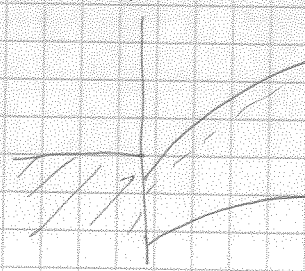
kilépési munka különbséget töltésátrendeződés pótolta

Ha rákapcsolunk feszt:



2Dimenziós rendszerben szabadon mozgó töltések

Ha $\Phi_{fém} < \Phi_{félvezető}$



ugyanezek a lehetőségek

Ha szigetelőt raknánk a két réteg közé:

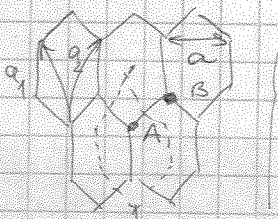
MOS = metal oxid semiconductor

potenciálgrad a szigetelőben lesz
ez jobban terelhető, nem függ annyira az illesztéstől

12.02.

Sávszerkezet számolás

2D



grafén

elemi cella

bázisvektorok

$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3})$

$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$

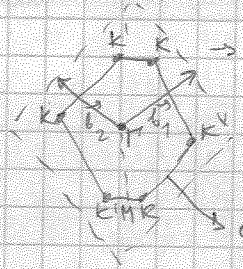
$R_{AB} = \frac{a}{\sqrt{3}}(\pm 1, \sqrt{3})$

Reciprokrácsvektorok

$\vec{a}_i \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ ↷ papírból tíjek

$\vec{b}_1 = \frac{2\pi (\vec{a}_2 \times \vec{z})}{\vec{a}_1 (\vec{a}_2 \times \vec{z})}$ $\quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi (\vec{z} \times \vec{a}_1)}{\vec{a}_2 (\vec{z} \times \vec{a}_1)}$

$\vec{b}_{1,2} = \frac{b}{2}(\pm\sqrt{3}, 1) \quad b = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$



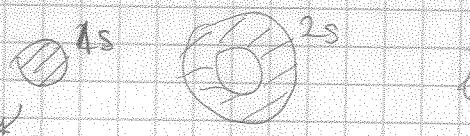
→ reciprokrács elemi cellája

K' pontok ekvivalensek
K pontok ekvivalensek
} mert reciprokrácsvektorral egymásba vihetők

első BZ

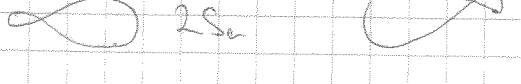
$\vec{K} = \frac{b}{\sqrt{3}}(1, 0) \quad \vec{K}' = \frac{b}{\sqrt{3}}(1, 0)$

^{12}C elektronkonfigurációja $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$



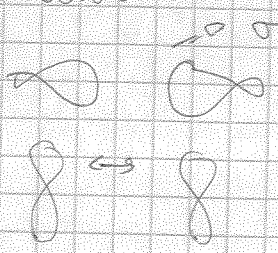
magon mélyen van — ezek hibridizálódnak

Hibridpályák $(2s + 2p)$



SZILÁRDTESTFIZIKA 12.02

benzolban



σ pályák (mélyebben)

síkban a kötés sp^2

π pályák

gyémántnál: sp^3 hibridizáció

⇒ máshol miért nincs?

C-nél gömbszimmetrikus (1s) potenciálból

évernek a 2s, 2p pályák, ellenben a

többinél nem ⇒ szilícium alapú élet

nincs, mert nincs hibridizáció

Ezek lineárkombinációjából építjük fel a

hullámfv-t



A, B is síkon, csak más

pontja a rácsnak

$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R,\alpha} e^{i\vec{q}\vec{R}_\alpha} \varphi_\alpha(\vec{r} - \vec{R}_\alpha)$ → Bloch-síkú

p_z pályák

$H_{\varepsilon\varepsilon}(q) = \langle \Psi_\varepsilon | H | \Psi_\varepsilon \rangle = \int d^3r \, \Psi_\varepsilon^* \hat{H} \Psi_\varepsilon(r)$ ← Edcsönhatás

$\alpha: \{A, B\}$

$\beta: \{A, B\}$

$H_{\alpha\beta}(q) = \frac{1}{N} \sum_{R_\alpha R_\beta} e^{i\vec{q}(\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta)} \langle \varphi_\beta(\vec{r} - \vec{R}_\beta) | \hat{H} | \varphi_\alpha(\vec{r} - \vec{R}_\alpha) \rangle$

$S_{\varepsilon\varepsilon} = \langle \Psi_\varepsilon | \Psi_\varepsilon \rangle$ átfedési integrál

$\det |H - \varepsilon S| = 0$ → túl bonyolult

Tfh. a kölcsönhatás mátrixelemek a távolsággal

gyorsan lecseng ⇒ első szomszéd közelítés

(második, harmadik szomszéd Eb. nagyjából mérhető)

Első szomszéd közelítés ≡ A és B között van

kölcsönhatás

$$H_{AB}(q) = t_0 \left[e^{i\vec{q}\vec{R}_1} + e^{i\vec{q}\vec{R}_2} + e^{i\vec{q}\vec{R}_3} \right] =: t_0 f(q)$$ ↗ struktúra faktor

↓ első szomszédok közötti átfedési integrál

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{2p} & t_0 f(q) \\ t_0 f^*(q) & \varepsilon_{2p} \end{vmatrix} - \varepsilon(q) \underline{\underline{S}} = 0$$

↳ legyen $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow$ ø átfedés

$$\varepsilon_{NN}(q) = \frac{\varepsilon_{2p} \pm t_0 |f(a)|}{1 \pm S_{AB} |f(a)|}$$

↓ nearest neighbour

↳ $0 \Rightarrow \underline{\underline{S}}$ offdiagonális elemei, de

$$H_{NN} = \varepsilon_{2p} \sum c^+_{j\alpha} c_{j\alpha} + t_0 \sum c^+_{j\alpha} c_{\ell\alpha}$$ (másodkvantált alak)

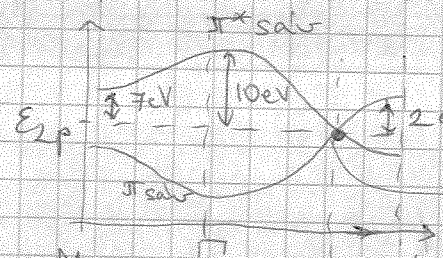
↓ mint a spin → izospin

$\alpha = \{A, B\}$

$$f(q) = e^{i\vec{q}\vec{R}_{AB}} \left(1 + e^{i\vec{q}\vec{a}_1} + e^{i\vec{q}\vec{a}_2} \right)$$

↑ $\vec{R}_{AB} = \vec{R}_1$

$t_0 = -2{,}7\,eV$



→ ehhez fitteli a méréseket (grafén elektronjai eddig vannak bebörtönözve)

$\vec{q} = \vec{K} + \vec{k}$

↳ kicsi $\qquad \vec{K}\vec{a} = 2\pi$

↓ K körül sorbafejtjük

$$f(k) \cong \frac{\sqrt{3}}{2}(k_x - i k_y) + \mathcal{O}(k^2)$$

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} t_0 (k_x - i k_y) \\ \frac{\sqrt{3}}{2} t_0 (k_x + i k_y) & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F \left(\hat{\sigma}_x k_x + \hat{\sigma}_y k_y \right) = \hbar v_F \vec{\sigma} \vec{k} \quad (*)$$

$\rightarrow \frac{\sqrt{3}}{2} t_0 a \simeq \frac{c}{300}$

Ez emlékeztet a Dirac-egyenletre

$H = \beta m c^2 + c \vec{\alpha} \vec{p}$ $\quad \beta, \vec{\alpha}$ mátrixok

Pauli elv → $\vec{\alpha}, \beta$-kat követnie kell a Clifford-algebrát $N \times N$-esek $N = 2, 4, \ldots$

2 dimenzió: $H^{2D} = c\vec{\sigma}\vec{p} + mc^2\sigma_z$ ← Pauli mátrixok

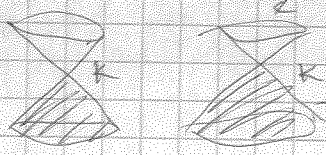
3. dimenzió: $H^{4D} \Rightarrow \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2\times2} & 0 \\ 0 & \mathbb{1}_{2\times2} \end{pmatrix}$ $\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}$

megoldások: 4 dimenziós spinorok $(\underbrace{\chi_1, \chi_2}_{\varepsilon>0}, \underbrace{\chi_1, \chi_2}_{\varepsilon<0})$

χ_i, χ_i, $i = 1,2$ spin

(*) tömeg nélküli 2D Dirac egyenlet

$H_{\xi'} = H_\xi [\sigma \to \sigma^*]$ diszperzió.



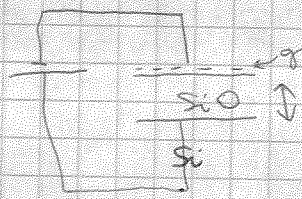
→ betöltve

K és K' nem ekvivalens

2 db 2×2-es mátrix

+2× spin = 8×8 mátrix

A számolásokat minden lehetőséget megpróbáltak ráírni a grafénre



ezzel el lehet tolni a potenciált → meddig legyen betöltve

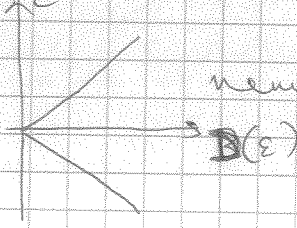
legyen $n = 10^{12}\ cm^{-2}$ elektron a grafénben } jó vezető

mobilitás $2\ 10^5\ cm^2 V^{-1} s^{-1}$

ellenállás $10^{-6}\ \Omega cm$

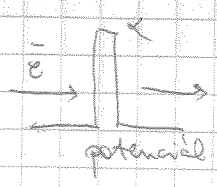
$$n = \frac{g_s g_v}{2\pi} \int d\vec{k}\, \Theta(\varepsilon_F - |\vec{k}|) = \frac{\varepsilon_F^2}{\pi}$$

állapotsűrűség $D(\varepsilon) = \frac{2|\varepsilon|}{\pi v_F^2 \hbar^2}$



nem tönk.

Klein paradoxon



nem csökken le, mert a tömeggel arányosan tűnne, de ϕ a tömeg ha 1 jön

1) Landau pályákat nézzük szabad elektronokra

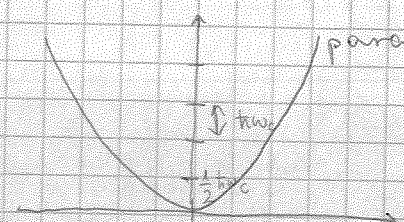
2D rendszert nézzük

$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m}$ szabad rendszer

$\pi = p_x + i p_y \Rightarrow \mathcal{H} = \frac{\pi\pi^* + \pi^*\pi}{4m}$

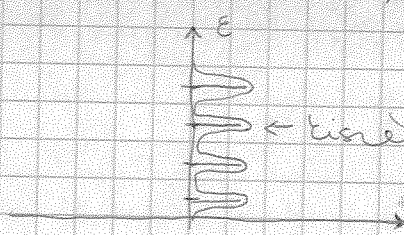
$\Rightarrow \varepsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$ kvantált állapotok

$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A}$



$\pi^* \ell_i = \ell_{i+1}$

$\pi \ell_i = \ell_{i-1}$



← kiélesedik a Dirac-delta

ha nem teljesen

2D vagy ha szennyezett

$\omega_c = \frac{eB}{m_e}$

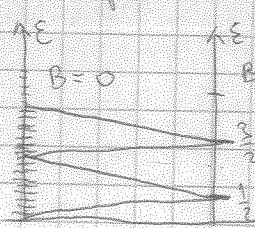
$B \sim 1\,T$ esetén $\hbar\omega_c \sim 10^{-4}\,eV \Rightarrow$ nagyon szűrt

magas hőmérsékleten kontinuumnak tekinthető

$10^{-4}\,eV \sim 1\,K$ már magas hőm.

nem tiszta, vékony anyagon, alacsony hőmérsékleten lehet

Landau rép magyarázat interpretációja



→ nagy degenerációjú állapotok

szűrűn kvantálva

$N_p = \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y$

$\Delta k \sim \frac{1}{L}$

$\Delta\varepsilon \sim \frac{1}{V}$

teljesen betöltött mező/sáv nem vezet.

mágneses tér jelenlétében a vezetés:

$$\sigma_{\alpha\beta}(B) = \sigma_0 \begin{pmatrix} \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2} & -\frac{\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2} \\ \frac{\omega_c\tau}{1+(\omega_c\tau)^2} & \frac{1}{1+(\omega_c\tau)^2} \end{pmatrix} \Big)^{-1}$$

$$\sigma_0 = \frac{ne^2}{m}\tau \quad \text{(Drude-féle)}$$

$$\rho_{\alpha\beta}(B) = \rho_0 \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c\tau \\ \omega_c\tau & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_0 & -\frac{B}{ne} \\ \frac{B}{ne} & 1 \end{pmatrix} \leftarrow \text{Hall-eff.}$$

$$n_e = \frac{eB}{2\pi\hbar}\nu = \frac{e}{h}B\nu$$

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \qquad \sigma_{xy} = -\frac{\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}$$

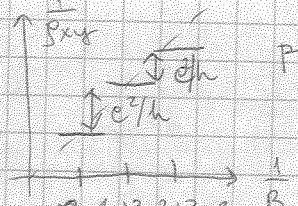
ha teljesen betöltött sáv: $\rho_{xx} = 0$, $\sigma_{xx} = 0$

$(\rho_{xy} \neq 0)$

$$\sigma_{xy} = -\frac{1}{\rho_{xy}} = -\frac{ne}{B} = -\nu\frac{e^2}{h}$$

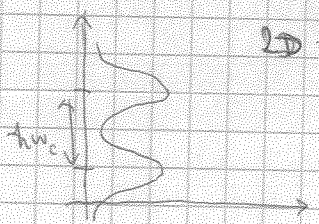
$\frac{e^2}{h} = \frac{1}{R_K}$ $\quad R_K \cong 25{,}8\ k\Omega$ (ellenállás mértékének definíciója)

↳ von Klitzing



plátók az egyenes helyett

⇒ kvantált Hall-effektus



2D-ben (a vezetés minden bolyongási probléma



egyik pontból a másikba a lehetséges pályákra összegezni



az ilyen hurkos pálya kivétel

⇒ 2 pálya interferál

adott pontba visszatérés valószínűsége 2D-ben

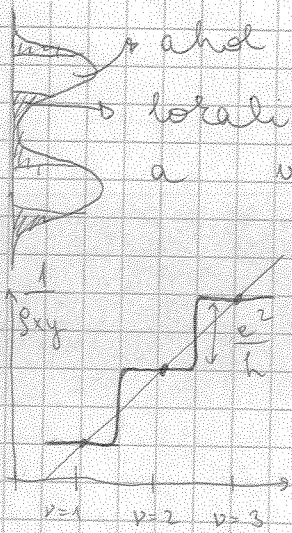
véges (2D a határeset)

az elektronok lokalizált állapotba kerülnek,

gyenge lokalizáció → szórhullám vár egy adott

a lokalizációs hossz ≫ bolyongási lépéseket

≪ minta mérete



ahol nagy a $\rho(E)$ → szabad állapot

→ lokalizált állapotok → nem vesznek részt a vezetésben

ν egész számoknál $\rho \to 0$

$\sigma \to 0$

ellenőrizhető

grafén → 2D-snek tekinthető

(a legellenőrizhetőbben)

$$H_K = \hbar v_F (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) \Rightarrow$$

$$H_K^2 = H_{p\,\text{Pauli}} = v_F^2 \left((-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A})^2 - e\hbar\sigma_z B \right)$$

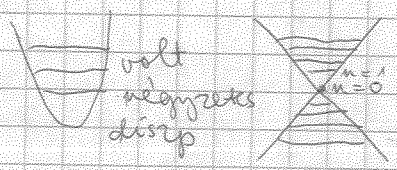
↑ Zeeman tag (belső)

$H_p \to$

$$E_n = 2e\hbar v_F^2 B (n + \tfrac{1}{2})$$

$H_K \to$

$$\pm\sqrt{E_n} = \pm v_F \sqrt{2e\hbar B} \sqrt{(n}$$



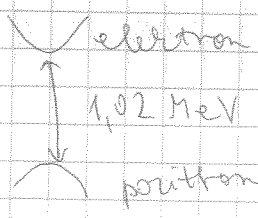
$$\nu = \pm 2, \pm 6, \pm 10$$

$$\sigma_{xy} = \pm (4n+2) \frac{e^2}{h}$$

nincs alapállapot

elektron- és lyukállapotok

normál 3D

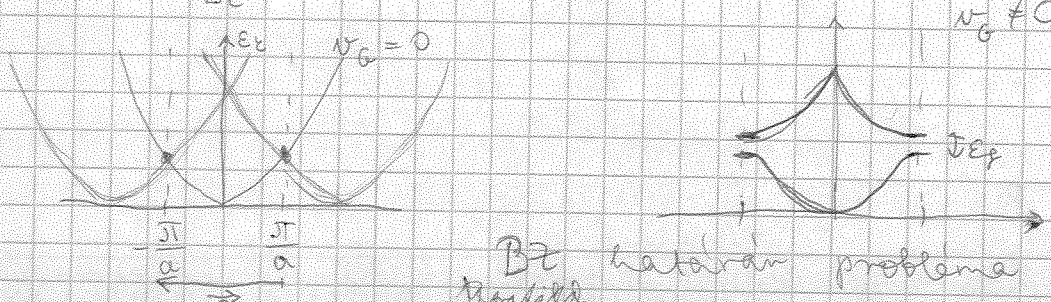


2) Kváziklasszikus közelítés érvényessége ???

$$\Phi(\vec{r},t) = \sum_{k'} g(k') \exp\left\{ i\left(\vec{k}'\vec{r} - \frac{\varepsilon(k')t}{\hbar}\right)\right\}$$ hullámcsomag

k' k körüli Δk környezet $\quad \Delta k \ll \frac{1}{a}$

$\Delta r \sim \frac{1}{\Delta k} \qquad L \gg \Delta r \gg a$



BZ határán probléma

Bordás

Bloch - hullámokból állítsuk elő

$$\Phi_{nk}(\vec{r},t) = \sum_{k'} u_{nk'}(r)\, g(k') \exp\left\{ i\left(\vec{k}'\vec{r} - \frac{\varepsilon(\vec{k}')t}{\hbar}\right)\right\}$$

közelítés: csak egy sávot nézek egyszerre

nincs sáv - sáv átmenet

$\hbar\omega < e_g$ (gap)

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(H_0 + e\vec{E}\vec{r}\right)\Psi$$

$$\Psi_{nk}(\vec{r},t) = e^{i\vec{k}\vec{r}}\, u_{nk}(\vec{r})\, e^{-i\varepsilon_k t/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi_{nk}}{\partial t} = -\frac{\hbar}{i}\left.\frac{\partial \Psi_{nk}}{\partial t}\right|_k - \frac{\hbar}{i}\left.\frac{\partial \Psi_{nk}}{\partial k}\right|_t \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \varepsilon_k \Psi_{nk} + \frac{1}{i} e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot$$

$$\cdot e\vec{E}\left(i\vec{r} + \frac{\partial}{\partial \vec{k}}\right) u_{nk}\, e^{-i\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}} =$$

$$= \left(\varepsilon_k + e\vec{E}\vec{r} + \frac{1}{i} e\vec{E}\frac{\partial u_{nk}}{\partial \vec{k}}\right)\Psi_{nk}(\vec{r},t)$$

új tag → ennek kell kicsinek lenni

$\frac{\partial \varepsilon_{nk}}{\partial k}\Delta k \sim e_g$ ekkor a BZ határán (ez az érdekes)

$$\frac{\partial \ln u_{nk}}{\partial k} = \frac{1}{u_{nk}}\frac{\partial u_{nk}}{\partial k} \approx \frac{1}{\Delta k} \sim \frac{1}{e_g}\frac{\hbar^2 k}{m^*}$$ ilyen

nagyságrendűnek kell lennie

$eE\frac{1}{\varepsilon_g}\frac{\hbar^2 k}{m^*} \ll \varepsilon_g$ kell ezenkívül a becslés szerint

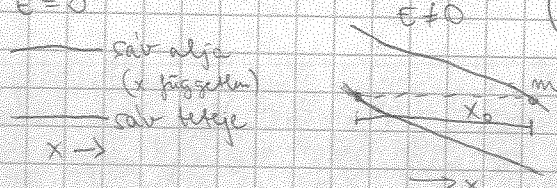
$k \sim \frac{1}{a}$ $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \sim \varepsilon_F$ $\left[eEa \ll \frac{\varepsilon_g^2}{\varepsilon_F}\right]$

ha úgynevezett mágneses térrel is megcsinálnánk

$\left[\hbar\omega_c \ll \frac{\varepsilon_g^2}{\varepsilon_F}\right]$ jönne ki

ez E-re és B-re korlát, hogy ne legyen

sáv-sáv átmenet



át tud alagutazni elvileg-

tiltott állapotba

↓

véges valószínűség $\sim e^{-\text{távolság}}$

eEx_0 az ugrás

ha ez ε_g nagyságrendű akkor tud

átugrani

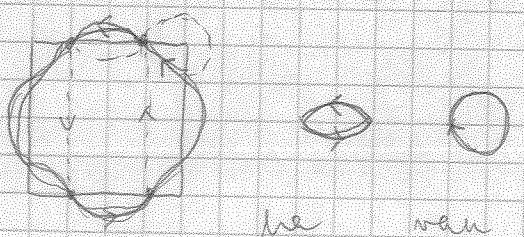
$$\wp \sim \exp\left\{-C\frac{\varepsilon_g^2}{eEa\varepsilon_F}\right\}$$

ugyanaz a feltétel jön ki

ebből a Zener alagutrázásból

$B \sim 1\,T \rightarrow \hbar\omega_c \sim 10^{-4}\,eV$

$\varepsilon_g \sim 10^{-2}\,eV$ } van sáv-sáv átmenet



mintha ilyen pályák lennének

de van sáv-sáv átmenet, lehet nem

az elvezetés pontba, hanem másik sávba

ugrik → hogy lesz a minden

esetet tükröző részben a kváziklasszikus közelítés

jól működik

Livrables :

- nagy tenk
- nagyon kis gap