

Juhtivus. Takistus. Ohmi seadus.

Indrek Mandre

14. aprill, 2009

Metallid kui elektrijuhid

- Metallid on elektrijuhid. Samas nad üldjuhul ei juhi elektrit ideaalselt, vaid kehtib Ohmi seadus

$$U = IR$$

Pingelang on proportsionaalne voolutugevusega.

- Mis on takistus, millest ta tuleb ja kuidas ta käitub temperatuuri muutudes? Ehk siis mis protsessid materjali ehituses tekitavad takistuse.
- Esimese ühe tuntuma mudeli selle kohta, kust tekib aines elektritakistus, töötas 1900-l aastal välja Paul Drude.
- Antud hetkel ei olnud kvantmehaanikat veel olemas ja isegi Rutherfordi aatomimudel oli avastamata. Seega on antud teooria väga primitiivne ja kutsutakse klassikaliseks teooriaks.

Drude mudel

- Drude vaatas metallides leiduvaid elektrone kui gaasi ja rakendas selle peal gaaside kineetilist teooriat.
- Gaasis on osakesed identsed kerad, mis liiguvad sirgelt, kuni põrkuvad vastastikku kokku.
- Drude eeldas, et ioonid seisavad praktiliselt paigal ja positiivne laeng on nende külge fikseeritud.
- Elektronid on gaas, kollisioonid toimuvad elektronide ja ionide vahel.



Paul Drude (1863-1906)
(pilt wikipediast)

Elektronide gaas

Metallide valentsielektronid suudavad siis vabalt ringi liikuda ja neid kutsutakse juhtivuselektronideks. Vabade elektronide arvu saab arvutada järgnevalt. Igas moolis aines on $0.6022 \cdot 10^{24}$ aatomit (Avogadro arv) ja ainet on ρ_m/A mooli kuupsentimeetris (A on aatommass), kus siis ρ_m on metalli tihedus (g/cm^2). Kui iga aatomi kohta tuleb Z vaba elektroni, siis vabade elektronide arv kuupsentimeetris tuleb

$$n = \frac{N}{V} = 0.6022 \cdot 10^{24} \frac{Z\rho_m}{A}.$$

Aine iseloomustamiseks saab defineerida ka raadiuse r_s , mis on kera raadius, mille ruumala on võrdne ruumalaga ühe elektroni kohta.

Seega

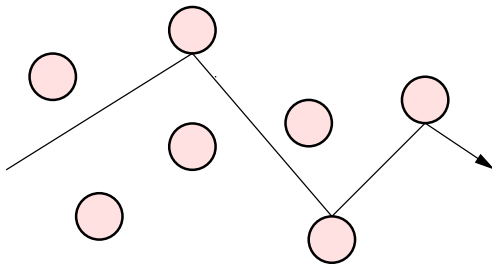
$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4\pi r_s^3}{3} \Rightarrow r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Vabad elektronid metallides

Element	Z	n ($10^{22}/\text{cm}^3$)	r_s (Å)	r_s/a_0
Cs (5K)	1	0.91	2.98	5.62
Cu	1	8.47	1.41	2.67
Ag	1	5.86	1.60	2.67
Be	2	24.7	0.99	1.87
Fe	2	17.0	1.12	2.12
Al	3	18.1	1.10	2.07

Elektronide tihedus mõnedes metallides (300K). Raadius r_s on kera raadius, mille ruumala on võrdne ruumalaga ühe elektroni kohta. a_0 on Bohri raadius. Allikas: Ashcroft.

Naiivne pilt Drude mudelist



Siin me võime näha väga naiivset pilti elektroni liikumisest ionide vahel. Samas on kasulik (et mitte jõuda valedele järeldustele) mitte antud juhul minna liiga spetsiifiliseks selle koha pealt, mis täpselt elektrone hajutab ja meile oluliseks suuruseks on relaksatsiooniaeg

τ .

Drude mudeli eeldused I

- Põrgete vahepeal ei toimu ei elektronide ega elektronide ja ionide vahel mingeid interaktsioone. Ehk siis teiste elektronide ja ionide poolt tekitatud elektrivälju ja Coulombi jõude me ignoreerime. Seega muude jõudude puudumisel liiguvad elektronid sirgjooneliselt. Elektronide omavahelise interaktsiooni ignoreerimist nimetatakse *sõltumatu elektroni lihtsustuseks*. Elektronide-ionide omavahelise interaktsiooni ignoreerimist nimetatakse *vaba elektroni lihtsustuseks*.
- Põrked osakeste vahel toimuvad kiiresti ja põrke tagajärjel tekib koheselt uus suund ja kiirus. Põrked toimuvad elektronide ja ionide vahel. Elektronide vahel toimuvaid põrkeid me ignoreerime.

Drude mudeli eeldused II

- Tõenäosus, et elektron põrkub ajaühikus, on võrdne $1/\tau$. See tähendab, et väikeses ajavahemikus dt on põrke tõenäosus dt/τ . Aega τ nimetatakse relaksatsiooniajaks ja on määratud keskmise ajaga kahe järjestikuse põrke vahel. Drude mudel eeldab, et aeg τ ei sõltu elektroni positsioonist ega kiirusest.
- Elektronid saavutavad termodünaamilise tasakaalu keskkonnaga ainult läbi põrgete. See tekib järgmiselt: peale iga põrget saadud uus elektroni kiirus ei sõltu eelnevast kiirusest vaid ainult antud kohas olevast temperatuurist. Lisaks liigub elektron peale põrget täiesti juhuslikus suunas.

Voolutihedus juhis

Olgu juhis elektrivälja \mathbf{E} , mis tekitab voolutiheduse \mathbf{j} . Eritakistus ρ on defineeritud kui proportsionaalsuskonstant elektrivälja \mathbf{E} ja tema poolt tekitatud voolutiheduse \mathbf{j} vahel:

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}.$$

Olgu meil vool I läbi juhi pikkusega L ja olgu voolu suunaga risti olev juhi läbilõike pindalaga A . Voolutihedus on siis $\mathbf{j} = I/A$. Kuna juhis pikkusega L on pingelang võrdne $U = EL$, siis saame

$$U = \frac{I\rho L}{A} \quad \text{ja} \quad R = \frac{\rho L}{A}.$$

Tulle tagasi Drude mudeli juurde, liikugu meie n elektroni ruumalaühiku kohta kiirusega \mathbf{v} . See tekitab voolutiheduse

$$\mathbf{j} = -nev,$$

kus $-e$ on elektroni laeng ($1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$).

Elektronide keskmine kiirus

- Juhul kui puudub elektriväli, liiguvad elektronid metallis täiesti juhuslikult ja keskmine elektronide liikumise kiirus $\mathbf{v} = 0$ ja seega ka voolutihedus on 0.
- Välise elektrivälja \mathbf{E} korral samas tekib elektronide keskmine liikumine väljale vastupidises suunas.
- Olgu aeg t möödunud eelmisest kokkupõrkest iooniga ja olgu elektron saanud algkiiruse \mathbf{v}_0 koheselt peale kokkupõrget. Sellisel juhul on kiirus \mathbf{v} aja t möödudes

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 - \frac{e\mathbf{E}t}{m}.$$

Soovides leida keskmist sellest kiirusest \mathbf{v} , paneme tähele, et algkiirus \mathbf{v}_0 on peale iga kokkupõrget suvaline. Seega keskmine elektronide kiirus sõltub ainult teisest komponendist ehk triivkiirusest $-\frac{e\mathbf{E}t}{m}$.

Ohmi seadus

- Keskmise aeg kokkupõrgete vahel on τ ja seega

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m}; \quad \mathbf{j} = \left(\frac{ne^2\tau}{m} \right) \mathbf{E}.$$

See suhe on tavaliselt määratud läbi erijuhtivuse $\sigma = 1/\rho$:

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}; \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}.$$

Esimene neist valemitest ongi Ohmi seadus.

Relaksatsiooniaeg

- Me saame mõõta muid suurusi ja läbi nende määrata relaksatsiooniaja:

$$\tau = \frac{m}{\rho n e^2}.$$

- Ruumitemperatuuril on τ suurusjärgus $10^{-14} \dots 10^{-15}$ sekundit. Siin võib vaadata ka keskmist vaba liikumise teepikkust, mis oleks $l = v_0 \tau$. Drude mudeli järgi arvutades tuleb see $1 \dots 10 \text{Å}$ kanti, samas reaalsuses võib ta madalatel temperatuuridel ulatuda sentimeetritesse.
- Drude mudel ei ole seega antud kontekstis kuigi adekvaatne. See vihjab faktile, et elektronid lihtsalt ei pörka vastu ioone ja meie mudel on väga naiivne ning ei vasta tegelikkusele.

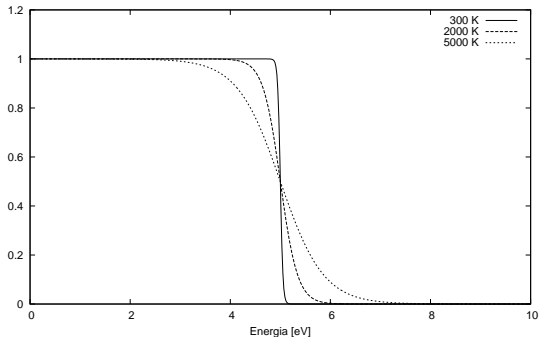
Energiajaotus

- Klassikaliselt leiti elektronide algkiirus peale pörget kasutades Boltzmanni jaotust ($mv_0^2 = \frac{3}{2}k_B T$). Samas elektronide energiad piirab Pauli printsiip, mis keelab mitmel elektronil olla samal energial (või täpsemalt samal energial saab olla kaks vastupidise spinniga elektroni).
- Selle alusel tuleb hoopis kasutada Fermi-Diraci jaotust:

$$f_{FD}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} + 1},$$

funktsioon f näitab, mis tõenäosusega on orbitaalne energia ϵ okupeeritud ja μ on keemiline potentsiaal (madalatel temperatuuridel võrdne Fermi energiaga).

Fermi-Diraci jaotus



Fermi-Diraci jaotus erinevatel temperatuuridel, $\mu = 5$ eV.

Boltzmanni transpordivõrrand: motivatsioon

- Kvantmehaanika rakendus metallide elektritakistuse uurimisel näitab, et perioodilises potentsiaaliväljas peaks ideaalse kristalli juhtivus olema lõpmatu.
- Takistuse tekitavad defektid ja võre võnkumine, mis hajutavad elektrone.
- Elektronide hajumise matemaatiliseks modelleerimiseks on kvantmehaanika otsene kasutus ebapraktiline ja tavaliselt liginetakse nn. poolklassikalise meetodiga, mille aluseks on Boltzmanni transpordivõrrand.
- See võimaldab meil modelleerida elektronidele mõjuvaid väliseid jõude nagu elektriväli, magnetväli ja temperatuurigradient.

Boltzmanni võrrand: tuletus I

- Olgu meil funktsioon $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$, mis näitab elektronide jaotust punktis \mathbf{r} , lainevektoriga \mathbf{k} ajahetkel t . Siis ajahetkel t on faasiruumi osas $d\mathbf{k}d\mathbf{r}$: $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)d\mathbf{k}d\mathbf{r}$ osakest.
- Juhul kui ei toimu hajumist, siis Liouvilli teoreemi järgi funktsiooni gradiendi sihis liikumisel tihedus ei muutu. Seega

$$f(\mathbf{k} + d\mathbf{k}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, t + dt) = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$$

ehk

$$f(\mathbf{k} + d\mathbf{k}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, t + dt) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = 0.$$

- Kui toimub hajumine, siis lisandub paremale poole seda kirjeldav element:

$$f(\mathbf{k} + d\mathbf{k}, \mathbf{r} + d\mathbf{r}, t + dt) - f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = dt \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{hajum}}$$

Boltzmanni võrrand: tuletus II

- Siit saame

$$dt \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) + d\mathbf{r} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = dt \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{hajum}}$$

ja kuna

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}; \quad \mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt},$$

siis saame kokkuvõttes valemi

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{hajum}}.$$

Vasakul pool on esimene komponent elektronide kontsentratsiooni muutus ajas, teine kirjeldab difusiooni ja kolmas välise jõu mõjul toimuvat muutust.

Lineariseeritud Boltzmanni võrrand

- Hajumise kirjeldamisel tullakse tavaliselt tagasi relaksatsiooniaja juurde. Olgu elektronide jaotus tasakaaluolekus f_0 (kus ei toimu mingisugust liikumist), siis hajumine on defineeritud eksponentsiaalselt läbi

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{hajum}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad \text{ehk} \quad f - f_0 \propto e^{-\tau t}.$$

Defineerides tiheduse f ise kui

$$f = f_0 + \delta f,$$

kus δf on häiritus tasakaaluolekust ja $\delta f \ll f_0$, saame

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_0 + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_0 = -\frac{\delta f}{\tau}.$$

Seda nimetatakse *lineariseeritud Boltzmanni valemiks*.

Boltzmanni valem: alalisvool

Kui elektronidele mõjub konstantne jõud \mathbf{F} , siis isotermilisel tingimusel ($\partial\delta f/\partial t = 0$) on kombeks kirjutada

$$\frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathbf{k}}f_0 = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial f_0}{\partial E}\nabla_{\mathbf{k}}E = \mathbf{v}\frac{\partial f_0}{\partial E}$$

ja

$$\nabla_{\mathbf{r}}f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E}\nabla_{\mathbf{r}}E_F.$$

E on siin energia ja E_F on Fermi energia. Võttes $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E}e\mathbf{v} \cdot \left(\mathbf{E} - \frac{1}{e}\nabla_{\mathbf{r}}E_F\right) = -\frac{\delta f}{\tau}$$

ehk

$$\delta f = e\tau\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}\frac{\partial f_0}{\partial E}; \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{E} - \frac{1}{e}\nabla_{\mathbf{r}}E_F,$$

kus $\boldsymbol{\varepsilon}$ on elektromotoorjõud. Relaksatsiooniaeg sõltub aga leinevektorist ehk $\tau = \tau(\mathbf{k})$.

Erijuhtivus I

Arvutame nüüd voolutiheduse:

$$\mathbf{j} = -\frac{2e}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v} \delta f \, d\mathbf{k} = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int \tau \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \frac{\partial f_0}{\partial E} \, d\mathbf{k} = \sigma \boldsymbol{\varepsilon},$$

kus

$$\sigma = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int \tau \mathbf{v} \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} \, d\mathbf{k}.$$

Seda võib vaadata kui eritakistuse tensorit defineerides voolutiheduse läbi

$$j_i = \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} \varepsilon_j,$$

kus

$$\sigma_{ij} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int \tau v_i \frac{\partial f_0}{\partial E} v_j \, d\mathbf{k}.$$

Erijuhtivus II

Edasi kirjutame integraali läbi

$$dk = \frac{dS dE}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|} = \frac{dS dE}{\hbar v},$$

kus dS on konstantse energiaga pinnaosa. Tähele võib ka panna, et osatuletis $\partial f_0 / \partial E$ käitub madalatel temperatuuridel nagu Diraci delta-funktsioon ümber Fermi energia E_F , nii et iga funktsiooni $b(E)$ korral saame kirjutada

$$\int b(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} dE = b(E_F)$$

Juhtivustensori komponent tuleb siis

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int_{E_F} \tau \frac{v_i v_j}{v} dS,$$

kus E_F on Fermi energia.

Erijuhtivus III

Isotroopses materjalis peaks vektor \mathbf{j} olema sõltumatu elektromotoorjõu suunast ja seega toimub lihtne keskmistamine:

$$\mathbf{j} = \left(\frac{e^2}{12\pi^3\hbar} \int_{E_F} \tau \mathbf{v} dS \right) \boldsymbol{\varepsilon}$$

ja juhtivustensor muutub lihtsaks skalaariks:

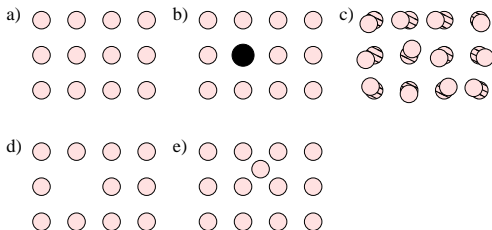
$$\sigma_0 = \frac{\mathbf{j}}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{e^2 S_{E_F} \bar{\tau} \bar{v}}{12\pi^3 \hbar},$$

kus S_{E_F} on Fermi pind. Vabade elektronide jaoks on Fermi pind kera raadiusega $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$, kus n on juhtivuselektronide tihedus. Kuna $S_{E_F} = 4\pi k_F^2$ ja $\bar{v} = \hbar k_F / m$ ning tähistades $\tau_F = \bar{\tau}$, saame valemi

$$\sigma_0 = \frac{ne^2 \tau_F}{m},$$

mis ühtib juba vaadatud Drude valemiga.

Takistuse põhjused



Elektronide hajumise põhjused: a) ideaalne juhtivus, hajumist ei ole; b) lisandi aatomid; c) kristallivõre võnkumine; d) defekt kristallivõres - aatom puudu; e) defekt kristallivõres - liigne aatom.

Matthiesseni reegel

Eritakistuse metallides põhjustavad defektid kristallivõres ja kristallivõre võnkumine. Madalatel temperatuuridel domneerivad defektid ja kõrgetel temperatuuridel kristallivõre võnkumine. Tõenäosuste alusel saab kirja panna suhted relaksatsiooniaegade vahel:

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \frac{1}{\tau_d(\mathbf{k})} + \frac{1}{\tau_l(\mathbf{k})},$$

kus τ on kogu relaksatsiooniaeg, τ_d on defektidest tingitud relaksatsiooniaeg ja τ_l on võre võnkumistest tingitud relaksatsiooniaeg. Kui viimased on isotroopsed, siis Matthiesseni reegli järgi saame valemi eritakistusele:

$$\rho = \rho_d + \rho_l.$$

Kui $T \rightarrow 0$, siis $\rho_l \rightarrow 0$ ja järgi jääbki ainult defektidest tulenev eritakistus ρ_d .

Takistuse temperatuurisõltuvus

Madalatel temperatuuridel vaadatakse eritakistuse sõltuvust temperatuurist kasutades Debye mudelit ja Bloch-Grüneiseni valemit:

$$\rho_L(T) = C \frac{T^5}{\theta_D^6} \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^5 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})},$$

kus C on materjali muudest omadustest sõltuv võrdetegur ja θ_D on Debye temperatuur. Kui $T \ll \theta_D$, kehtib nn. Blochi T^5 seadus

$$\rho_L \propto T^5.$$

Kõrgematel temperatuuridel muutub domineerivaks Umklapp-hajumine (foononitel on suur energia, et nad võivad lainevektori k ümber pöörata) ja eritakistus tuleb

$$\rho \propto T.$$

Halli efekt

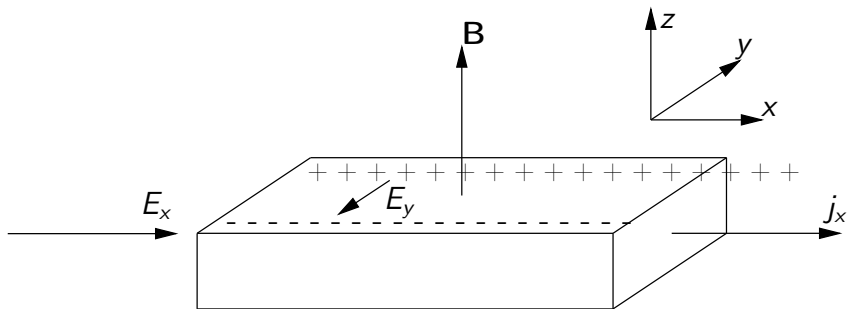
- Vaadates Lorentzi jõudu

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

tekib küsimus, et kui juht, milles on vool ehk liikuvad elektronid, pannakse magnetvälja, mis siis juhtub? Elektronid peaksid kogema mingit jõudu, mis on risti nende liikumissuunaga ja lanegukandjad peaksid kogunema juhi ühte serva.

- Olgu z -telje suunas magnetväli \mathbf{B} ja x -telje suunas elektriväli E_x . Viimane tekitab voolutiheduse j_x . Samas Lorentzi jõud surub liikuvad laengud juhi servadesse ja see indutseerib elektrivälja y -teljega vastupidises suunas. Tasakaaluolekus on selle elektrivälja E_y poolt tekitatud jõud ja Lorentzi jõud võrdsed ning laengud voolavad ainult x -telje sihis.

Halli efekt, illustratsioon



Halli efekti karakteristikud

Meid huvitab siin kaks suurust:

$$\rho_H = \frac{E_x}{j_x},$$

mis on siis eritakistus kui funktsioon magnetväljast ja kutsutakse magnettakistuseks. Teine suurus on Halli tegur, mis annab seose magnetvälja, voolu ja tekkiva elektrivälja vahel:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B}.$$

Liikumisvõrrandid

Relaksatsiooniaja lihtsustuses kehtib Langevini valem:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{e}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{\mathbf{v}}{\tau},$$

kus \mathbf{v} on elektronide keskmine kiirus ja τ on relaksatsiooniaeg. Voolutihedus on siis $\mathbf{j} = -nev$, kus n on elektronide kontsentratsioon. Sellest valemis saame liikumisvõrrandid

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_x = -e(E_x + Bv_y);$$

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_y = -e(E_y + Bv_x);$$

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_z = -eE_z.$$

Halli väli

Tasakaaluolekus on v tuletised aja järgi nullid, ja järgi jääb:

$$v_x = -\frac{e\tau}{m}E_x - \omega_c\tau v_y; \quad v_y = -\frac{e\tau}{m}E_y + \omega_c\tau v_x; \quad v_z = -\frac{e\tau}{m}E_z,$$

kus $\omega_c = eB/m$ on elektroni gürosagedus.

Rakendades neid valemeid Halli efektile on selge, et elektronid ei saa liikuda y -telje sihis, kuna juht on seal piiratud. Seega peab eksisteerima vastupidine elektriväli

$$0 = -\frac{e\tau}{m}E_y + \omega_c\tau \left(-\frac{e\tau}{m}E_x\right)$$

$$E_y = -\omega_c\tau E_x = -\frac{eB\tau}{m}E_x.$$

Halli karakteristik

- Suuruse R_H saame asendada

$$j_x = \frac{ne^2\tau E_x}{m}$$

valemisse ning välja tuleb

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} = \frac{-\frac{eB\tau}{m} E_x}{\frac{ne^2\tau E_x}{m} B} = -\frac{1}{ne}.$$

See väärtus on siis negatiivne elektronidest laengukandjate jaoks. Suurust R_H saab mõõta eksperimentaalselt ja selle alusel leitakse laengukandjate tihedust.

- Magnetakistus on tavaliselt antud kui

$$\rho_H = BR_H = \frac{E_y}{j_x} = -\frac{B}{ne}.$$

Paar näidet

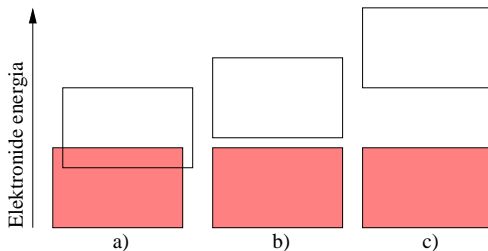
Metall	Meetod	Eksperim. R_H	Laenguk.	Arvut. $-1/nec$
Li	tavaline	-1.89	1 elektron	-1.48
Na	helicon	-2.619	1 elektron	-2.603
Al	helicon	+1.136	1 auk	+1.135
Cu	tavaline	-0.6	1 elektron	-0.82

Halli tegur erinevatel ainetel 10^{-24} CGS ühikutes. Allikas: Kittel. Nagu näha, on mõnede ainete Halli tegur positiivne. See on seletatav läbi kvantmehaanika, kus Heisenberg kutsus positiivseid laengukandjaid aukudeks.

Tsoonid

- Materjalid on erinevad: juhid, dielektrikud, pooljuhid. Miks on nad erinevad, miks osad juhivad elektrit hästi ja osad ei juhi üldse?
- Põhjust peitub selles, et elektronide võimalikel energiatel on keelutsoonid. Kui juhtivustsoon on täielikult elektronidest täidetud (dielektrikud), siis ei jää neil ruumi liikuda. Samas metallidel on juhtivustsoon kas kattuv või poolenisti täidetud, võimaldades elektronidel kergelt omandada suuremaid energiasid, et ringi liikuda.
- Tsoonide tekkimist saab näidata kasutades kvantmehaanikat läbi Blochi lainefunktsiooni.

Tsoonid, illustratsioon



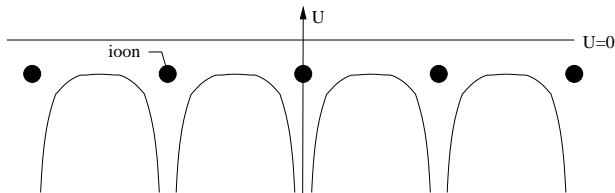
Energiatsoonid: a) metall, kus juhtivustsoonid kattuvad; b) pooljuht, kus keelutsoon on väike; c) dielektrik suure keelutsooniga.

Blochi lainefunktsioon

Kristallivõre struktuur on perioodiline. Seega peab ka potentsiaaliväli $U(\mathbf{r})$ olema perioodiline:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}),$$

kus \mathbf{R} on mingi baasvektorite kombinatsioon. Saab näidata, et sellele perioodilisele potentsiaalile vastav lainefunktsioon sisaldab seda perioodilisust ja tema kuju määrab Blochi teoreem.



Blochi teoreem

Blochi teoreem ütleb, et Hamiltoniaanile

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})$$

vastava funktsiooni saab valida kujul tasaline korda mingi perioodiline funktsioon:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

kus siis

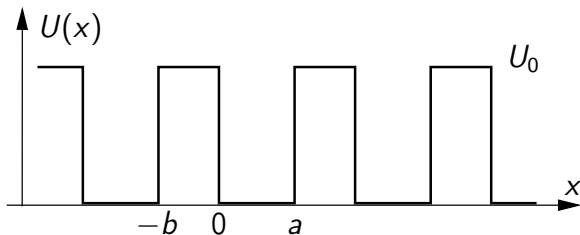
$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

ehk ekvivalentselt

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Kronig-Penney mudel

Kronig-Penney mudel on lihtsustus, kus ruum on võetud ühedimensionaalseks ja potentsiaal on määratud lihtsa perioodilise nelinurkse funktsiooniga.



Kronig-Penney tuletus I

Olgu

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + B^{-ikx} \quad (0 < x < a)$$

kus $k^2 = 2mE/\hbar^2$ ja

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} \quad (-b < x < 0)$$

kus $\kappa^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2$. Blochi teoreemi kohaselt otsime lahendit, mille puhul

$$\psi(a < x < a + b) = \psi(-b < x < 0)e^{ik(a+b)}.$$

Kronig-Penney tuletus II

Paneme paika rajatingimused, et leida konstandid:

$$\psi(0) : A + B = C + D$$

$$\psi'(0) : ikA - ikB = \kappa C - \kappa D$$

ja kasutades Blochi teoreemi:

$$\psi(a) : Ae^{ika} + Be^{-ika} = (Ce^{-\kappa b} + De^{\kappa b}) e^{iq(a+b)}$$

$$\psi'(a) : ikAe^{ika} - ikBe^{-ika} = (\kappa Ce^{-\kappa b} - \kappa De^{\kappa b}) e^{iq(a+b)}$$

kus q on Blochi lainenumber.

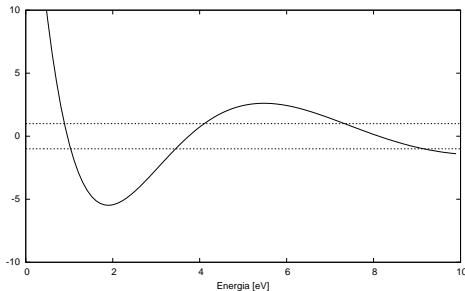
Kronig-Penney tuletus III

Antud neljal rajatingimusel on lahend ainult siis, kui A, B, C ja D koefitsentide determinant on 0. See kehtib järgmisel tingimusel:

$$\cos(q(a+b)) = \cos(ka) \cosh(\kappa b) + \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \right) \sin(ka) \sinh(\kappa b). \quad (1)$$

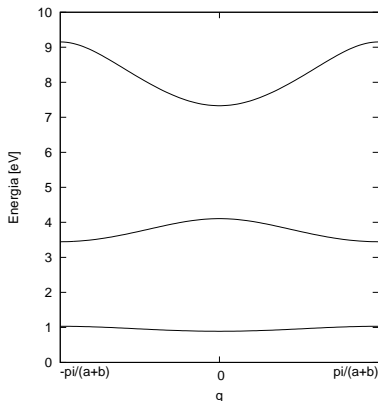
Sellest valemist saab näha, et teatud tsoonides olevad energiaväärtused ei ole lubatud. Valemi vasak pool (koosinus funktsioon) võib võtta väärtusi ainult -1 ja 1 vahel. Valides $ka = n\pi$, jääb paremale poolele alles $\pm \cosh(\kappa b)$. Samas viimane on absoluutväärtuselt alati ühest suurem. Seega valemile ei sobi väärtus $k = n\pi/a$, mis tähendab, et energia $E = (\hbar^2/2m)(n\pi/a)^2$ ei sobi ja samuti selle naabruses olevad energiad.

Kronig-Penney lubatud energiad








Võrrandi parem pool funktsioonina energiast. Lubatud energia väärtused on kahe punktiiriga joone vahel (-1..+1). Nagu näha on lubatud tsoonid 2, 4 ja 8eV ümbruses. Kasutatud parameetrid: $a = 5\text{\AA}$, $b = 1.5\text{\AA}$, $U_0 = 10\text{eV}$.

Vähendatud tsoonipilt



Tsoonistruktuur samadel parameetritel funktsioonina lainearvust q .

-  Neil. W. Ashcroft ja N. David Mermin, "Solid State Physics"
-  Charles Kittel, "Introduction to Solid State Physics, 7th edition"
-  Alexander O. E. Animalu, "Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids"
-  Feng Duan ja Jin Guojun "Introduction to Condensed Matter Physics, Volume 1"
-  Eoin P. O'Reilly "Quantum Theory of Solids"