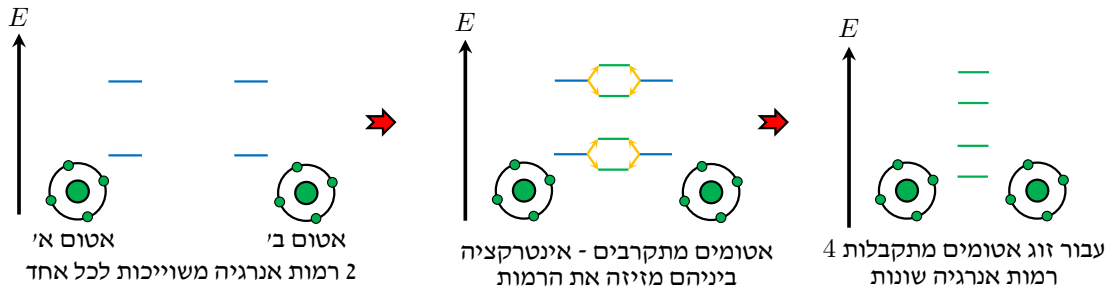


תרגול 12 - מודל קרונינג-פני ומבנה פסים

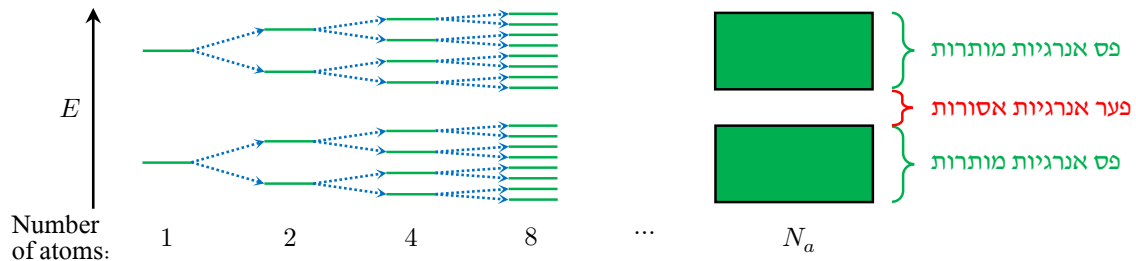
- פסי אנרגיה
- מודל קרונינג-פני
- מבנה הפסים
- מסה אפקטיבית וחורים

פסי אנרגיה:

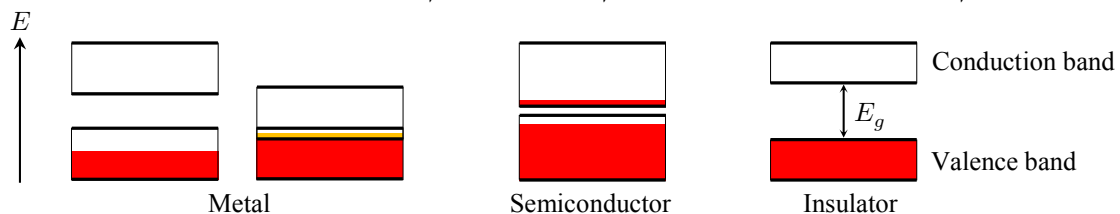
כפי שכבר ציינו בשיעורים קודמים, באטומים קיימות מס' רמות אנרגיה דיסקרטיות, אשר לכל אחת מהן קוראים אורביטל אטומי. אם מספר אטומים נמצאים במרחק קטן (המאפשר מנהור) אחד מהשני (למשל במולקולה) יש לקחת בחשבון אינטראקציה שבין שני האטומים, וכתוצאה האורביטלים האטומיים מתפצלים. כלומר, נוצרת הסרה של הניוון ברמות האנרגיה: מספר האורביטלים המולקולאריים (רמות האנרגיה לאחר הסרת הניוון) פרופורציוני למספר האטומים.



כאשר מספר האטומים רב מאוד כמו במוצק, מספר הרמות עצום וההפרש האנרגטי בין הרמות קטן מאוד, רמות האנרגיה יכולות להיחשב כרצף או פס של אנרגיה. למרות זאת מרווחים מסוימים של אנרגיה אינם מכילים רמות אנרגיה ללא תלות במספר האטומים, וכך נוצרים פסי אנרגיה ופסים אסורים כפי שמומחש באיור הבא:



אם כל מצבי האנרגיה בפס מלאים, הפס אינו תורם להולכה בטמפרטורה $T = 0$. לכן מבודד הוא המצב שבו כל הפסים מלאים לחלוטין. הגדרה זאת כוללת גם את המוליך למחצה. אולם במוליך למחצה פער האנרגיה בין הפס המאוכלס האחרון לפס הפנוי שאחריו, E_g , קטן מספיק כדי לאפשר מעבר של אלקטרונים מהפס המלא לפס הריק הבא. זאת ניתן לראות באיור הבא:



בפועל נתייחס לשני פסים: פס הערכיות הוא פס האנרגיה האחרון המלא לחלוטין. פס ההולכה הוא פס האנרגיה הראשון שאינו מלא.

(נדבר בהמשך על איך וכמה אלקטרונים מאכלסים את הפסים).

נרצה לחשב אנליטית את מבנה הפסים עבור גביש כלשהו, לשם כך נבנה מודל שמטפל במערכת מחזורית. כדי לפתור מודל כזה, נצטרך להשתמש במשפט בלוך.

משפט בלוך

ננסה להבין את התכונות של אלקטרונים הממוקמים בתוך סריג מחזורי אינסופי. במקרה זה כל אטום בסריג יהווה בור פוטנציאל. נתבונן על פוטנציאל מחזורי כללי:

$$V(r) = V(\vec{r} + \vec{T})$$

כאשר $\vec{T}$ מוגדר להיות אחת מנקודות הסריג. מפתרון משוואת שרדינגר עבור הפוטנציאל $V(r)$ נקבל כי פונ' הגל תהיה מהצורה:

$$\psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

כאשר $\vec{k}$ הוא וקטור הגל, $u_k(\vec{r})$ - פונ' מחזורית כלשהי שאורך המחזור שלה הוא כמחזור הסריג:

$$u_k(\vec{r} + \vec{T}) = u_k(\vec{r})$$

כל פונ' גל המתאימה לתיאור זה נקראת **פונ' בלוך**, ע"ש הפיזיקאי פליקס בלוך. באופן אלטרנטיבי, נוכל לרשום את פונ' הגל בצורה הבאה:

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{T}) = \psi_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}$$

לפי הצגה זו ניתן לראות כי כל פתרון של משוואת שרדינגר עבור הפוטנציאל המחזורי ניתנים ע"י אותה פונ' גל $\psi_k(\vec{r})$ השונה עד כדי פאזה בכל נקודה בסריג הישר. מכאן נובע ישירות כי ההסתברות למצוא את האלקטרון בכל אחת מהנקודות האקוויולנטיות בסריג הישר הינה אותה הסתברות. בנוסף, ניתן להבחין כי פונ' הגל הינה מחזורית, ואורך המחזור שלה הוא אורך מחזור הסריג. הפתרון שמצאנו עד כה הינו פתרון של פונ' הגל בבסיס המיקום. באופן אנלוגי ניתן להציג את פונ' הגל בבסיס התנע p ובבסיס $k = \frac{p}{\hbar}$. במקרה זה נקבל פונ' גל שהיא $\psi(\vec{k})$, כאשר החישוב שלה מתבצע ע"י התמרת פורייה. באופן כללי, התמרת פורייה של פונקציה מחזורית נותנת גם כן פונקציה מחזורית. על כן, אם פונ' הגל בבסיס המקום הינה מחזורית (בגלל מבנה הגביש) מתקבל שגם פונ' הגל בבסיס התנע (k) הינה מחזורית.

המבנה המחזורי של פונקצית הגל בבסיס התנע מוגדר על ידי וקטורי סריג הופכי (הסריג של התמרת פורייה), שנשמנם כאן ע"י $\vec{G}$. עבור המקרה החד-מימדי בו אורך המחזור הוא a לכיוון x , נקבל $\vec{G} = \frac{2\pi n}{a} \hat{x}$ כש- n הוא מספר שלם.

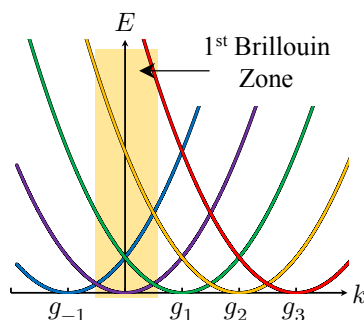
ניתן להסיק כי במידה ואנו יודעים את פונ' הגל עבור ערך כלשהו של k , אנו יודעים לחשב בעזרתה את פונ' הגל עבור אינסוף ערכי k שמקיימים $k' = k + \vec{G}$ נוספים. לדוגמה, נניח כי $\psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ היא פונקציית בלוך המהווה פתרון למשוואת שרדינגר של סריג מסוים, אזי הפונקציה

$$\psi_{k+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_k(\vec{r})e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$$

היא גם פתרון למשוואת שרדינגר, כאשר $\vec{G}$ זהו וקטור כלשהו השייך לסריג ההופכי.

כעת נתבונן בערכי האנרגיה אותם יכול החלקיק לקבל. ערכי האנרגיות תלויים בתנע k - $E(k)$, אך מכיוון שעבור קפיצות של $\vec{G}$ בתנע נקבל את אותה פונקציה גל (עד כדי פאזה קבועה), נקבל שהאנרגיה של מצבים כאלה שווה:

$$E(k) = E(k + G)$$

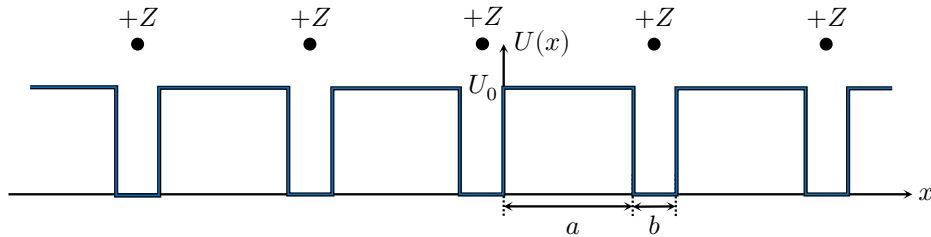


מכאן אנו יכולים לראות כי עבור כל ערך אנרגיה של חלקיק E , ישנם מספר ערכי תנע אפשריים. כפי שצינו, $E(k)$ זהו אופיין של תנע כתלות באנרגיה. ניתן להסיק כי כל הזזה בכפולה שלמה של וקטור סריג הופכי $\vec{G}$ יכולה להוות נק' התחלה של $E(k)$, וזאת בעקבות מחזוריות פונ' הגל. נניח מצב שבו $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ (יחס דיספרסיה פרבולי דומה לחלקיק חופשי) - השפעת המבנה המחזורי נראית בשרטוט הבא:

ניתן לראות שכל ערך אנרגיה מופיע עבור הרבה ערכי k , ומצד שני, כל האנרגיות מופיעות בתחום שבין $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ - תא ויגנר זייץ (במימד 1) בסריג ההופכי, שנקרא גם **"איזור ברילואין הראשון"**.

מודל קרוניג-פני (Kronig-Penney):

מודל קרוניג-פני מתאר התנהגות של פוני גל בפוטנציאל מחזורי. בדומה לסריג של אטומים, הפוטנציאל מתואר כסדרה מחזורית של בורות פוטנציאל. בניגוד לסריג אמיתי של אטומים, הבורות הם בורות מרובעים עם גובה מוגדר והמודל פתיר אנליטית. נסתכל על פוטנציאל מחזורי של בורות מרובעים בגובה U_0 :



במערכת זו כל בור מייצג אטום, וביניהם נוצר מחסום פוטנציאל. אלקטרון הקשור ($0 < E < U_0$) במערכת כזו יכול למנהר בין בור אחד לשני, כך שיש אפשרות באופן כללי למעבר זרם. עם זאת, לא בהכרח קיים לכל ערך של אנרגיה מצב פיסיקלי אשר מאפשר את תנאי המערכת הזו. **נרצה לחפש את תנאי זה לאנרגיה, כלומר, אילו מצבי תנע סריגי מאפשרים את תנאי המערכת, ועל כן האנרגיה שלהן מותרת ואלו לא.**

הפתרונות לבור אחד כבר ידועים לנו (פתרון של חלקיק בתוך בור פוטנציאל סופי), כעת אנחנו צריכים לכתוב את אותם פתרונות, אבל לשלב גם את תנאי השפה המחזוריים של הבעיה החדשה. לצורך כך, נשתמש בפורמליזם של בלוך כדי לפתור את הבעיה. נבחין כי תא היחידה של בעיה זו מורכב משני אזורים באופן כללי - מחוץ לבור ובתוך הבור. כאמור, הפתרונות השונים לבעיה מחזורית מוגדרים ע"י וקטור התנע הסריגי, k . נפתור את משוואת שרדינגר בתחום $x \in [-b, 0]$ (אותו פתרון מתקיים עבור שאר הבורות):

$$\psi_k(-b < x < 0) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \quad K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

שימו לב ש K מייצג את התנע ה"רגיל" ומוגדר לפי האנרגיה ולא את k , התנע הסריגי אשר מגדיר את המצב.

מחוץ לבור, עבור חלקיק שהאנרגיה שלו $E < U_0$, ספציפית בתחום $x \in [0, a]$:

$$\psi_k(0 < x < a) = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \quad Q = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

לפי משפט בלוך:

$$\psi_k(x = -b) = \psi_k(x = a)e^{ik(a+b)}$$

נשים לב ש- k הוא התנע הסריגי, והוא זה שמגדיר את המצב עבורו אנו פותרים. הגודל $a + b$ הוא פרמטר הסריג - אורך המחזור. באמצעות משפט בלוך ניתן לקבל את התנהגות הפונקציה על כל x , אבל נסתפק לעת עתה רק בתחום זה.

כעת נתפור את הפונקציה כפי שאנו יודעים לעשות - נדרוש שהפונקציה תהיה רציפה על כל המרחב, ושגם הנגזרת של הפוני תהיה רציפה על כל המרחב.

מסיבה זו, בנקודה $x = 0$ נקבל:

$$(i) \quad A + B = C + D$$

$$(ii) \quad iK(A - B) = Q(C - D)$$

ובנקודה a נדרוש לפי התנאי הנ"ל שוויון לנק' $x = -b$ כפול פונקצית בלוך:

$$\psi_k(-b) = \psi_k(a)e^{ik(a+b)}$$

$$(iii) \quad Ae^{-iKb} + Be^{iKb} = (Ce^{Qa} + De^{-Qa})e^{ik(a+b)}$$

ורציפות הנגזרת באותו אופן:

$$(iv) \quad iK(Ae^{-iKb} - Be^{iKb}) = Q(Ce^{Qa} - De^{-Qa})e^{ik(a+b)}$$

ארבע המשוואות הללו מקבלות פתרון רק אם דטרמיננטת המקדמים מתאפסת :

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ iK & -iK & -Q & Q \\ e^{-iKb} & e^{iKb} & -e^{Qa}e^{ik(a+b)} & -e^{-Qa}e^{ik(a+b)} \\ iKe^{-iKb} & -iKe^{iKb} & -Qe^{Qa}e^{ik(a+b)} & Qe^{-Qa}e^{ik(a+b)} \end{vmatrix} = 0$$

האלגברה שכרוכה בפתירת המשוואה הזו מייגעת מאוד, לכן נדלג ישירות לפתרון הפתרון הישיר של המערכת הזו הוא :

$$\left(\frac{Q^2 - K^2}{2KQ}\right) \sinh(Qa) \sin(Kb) + \cosh(Qa) \cos(Kb) = \cos(k(a+b))$$

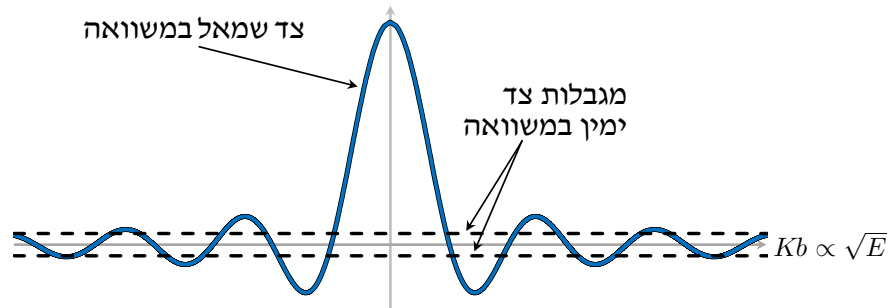
אבל, אם נקרב את גובה המחסום לאינסוף ($Q, U_0 \rightarrow \infty$) ואת רוחב המחסום לאפס ($a \rightarrow 0$) המשוואה מצטמצמת לצורה הבאה :

$$\left(\frac{Q^2 a}{2K}\right) \sin(Kb) + \cos(Kb) = \cos(kb)$$

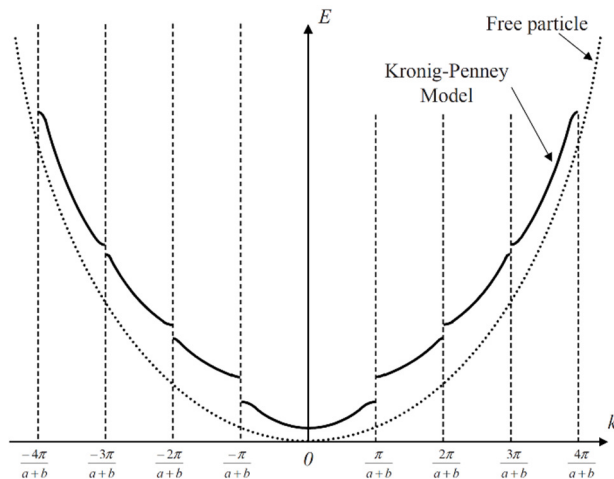
נציב חזרה את ההגדרה של K, Q :

$$\left(\sqrt{\frac{m}{2E}} \frac{a(U_0 - E)}{\hbar}\right) \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} b\right) + \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} b\right) = \cos(kb)$$

את המשוואה הזו ניתן לפתור בצורה גרפית. מכיוון שפונקציית קוסינוס מוגבלת בין $[-1, 1]$, ערכי E שמביאים את אגף שמאל להיות בתחום הזה, מקיימים פתרון למשוואה. במילים אחרות, רק אזורי הפונקציה משורטטת (אגף שמאל) שנמצאים בין הקווים המרוסקים (התוחמים את ערכי קוסינוס האפשריים), מהווים פתרון. על כן קיימים תחומי אנרגיה בהם אין k המהווה פתרון אפשרי, ועל כן לא קיים מצב פיסיקלי המתאים להם - אלו הם הפסים האסורים.

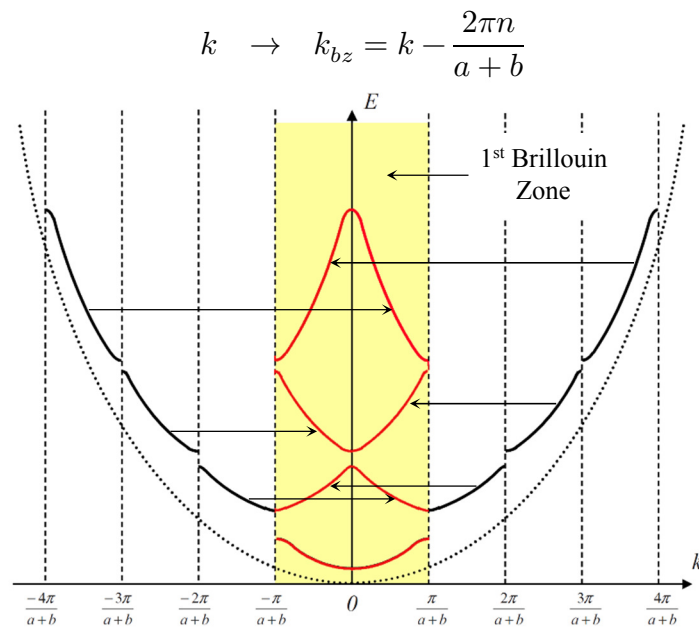


הצגת התוצאות במרחב המצומצם תתן לנו תמונה של פסי אנרגיה עם פער בין הפסים :



נשים לב, שגודל הפערים בין הפסים תלוי בפרמטרים של הבעיה U_0, a, b : ככל ש- U_0 ו- a יותר גדולים, כך גם האמפליטודה של הסינוס גדולה, ולכן יהיה אזור גדול יותר שלא קטן מ-1, כלומר אזור של אנרגיות אסורות. זה מקביל להגבהת המחסום (U_0) והרחבתו (a), אשר מורידות את ההסתברות למנהור, ובכך מקטינות את מספר המצבים שיוכלו לקיים חלקיק הנע בחופשיות בגביש.

דיאגרמה זו הינה אינסופית על ציר k , אך למעשה ניתן לקפל אותה לאזור ברילואין הראשון - הוא תא ויגנר זיץ של המרחב ההופכי. זו תהיה ההגדרה הכללית, ובמקרה החד-מימדי, תא ויגנר זיץ יהיה פשוט התחום שבו $k \in [-\frac{\pi}{a+b}, \frac{\pi}{a+b}]$, וכל ערך k שנמצא מחוץ לתחום ממופה פנימה ע"י חיסור של $\frac{2\pi n}{a+b}$ המתאימים:



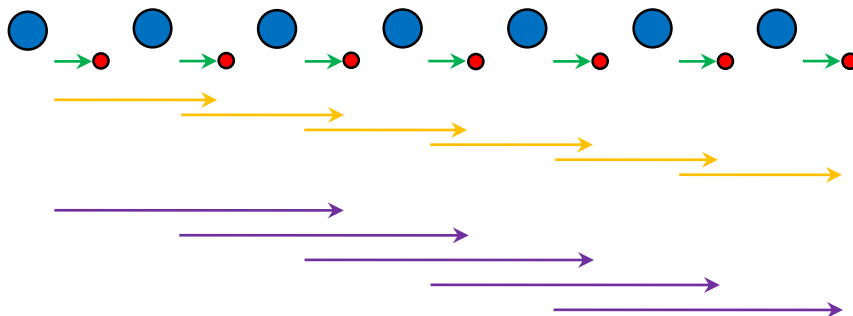
הסיבה שניתן לעשות זאת היא שבגביש, בגלל המבנה המחזורי שלו, תוספת של $\frac{2\pi}{a+b}$ לתנע נותנת אפקטיבית את אותו התנע. שימו לב שבמקרה זה, הוא יהיה מקושר לאנרגיה אחרת!

דרך אינטואיטיבית להסביר את זה תהיה לתאר את התנע בתור האופרטור שמתאר את מידת השינוי במקום: (בכחול אטומים, באדום אלקטרונים)



קידום של האלקטרונים באמצעות תנע מסויים, משמעותו הזזה מרחבית.

נניח תוספת קטנה של $k < \frac{2\pi}{a+b}$:



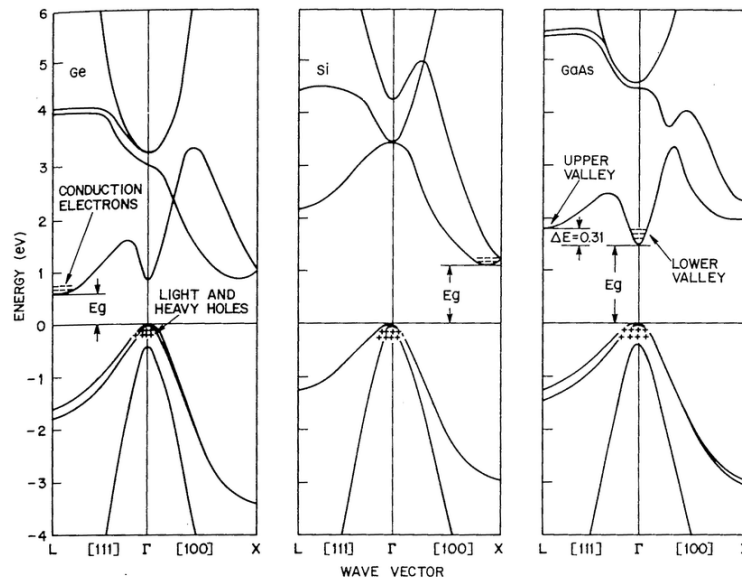
היא תהיה שקולה לכל הזזה של $k + \frac{2\pi n}{a+b}$.

דיאגרמת E-k

דיאגרמת E-k היא ייצוג גרפי של מבנה הפסים במונחים של תנע האלקטרונים במצבי אנרגיה שונים, כלומר תיאור גרפי של יחס הנפיצה (הדיספרסיה) $E(k)$. נזכר שלפי קשר דה-ברוילי, חלקיקים קוונטיים (בעלי דואליות חלקיק-גל) בעלי תנע p יתנהגו כגלים עם מספר גל k , לפי הקשר $p = \hbar k$. מכאן שדיאגרמת E-k מלמדת אותנו על האנרגיה של האלקטרון במרחב התנע, כלומר במרחב k .

הדיאגרמה משורטטת עם האנרגיה של האלקטרון E בציר y ומספר הגל k בציר x . כמו כן יש לציין שהתלות של האנרגיה ב- k תלויה בכיוון הגבישי, לכן ציר x מחולק למספר כיוונים גבישיים עיקריים (כיווני סימטריה) אך במסגרת הקורס לא ניגע בנושא זה.

דיאגרמות E-k של מוליכים למחצה הן מורכבות למדי, כפי שניתן לראות באיור עבור גרמניום, סיליקון וגאליום-ארסניד (משמאל לימין). הן מכילות מספר פסי אנרגיה מלאים וריקים לחלוטין. כמו כן ישנם מספר פסים שאינם מלאים לחלוטין. למרבה המזל, אנו יכולים לפשט את הדיאגרמות הנ"ל מכיוון שמירב ההשפעה על התנהגות המוליך למחצה נובעת מאלקטרונים בראש פס שאינו מלא לחלוטין (פס הערכיות) ואלקטרונים בתחתית פס שאינו ריק לחלוטין (פס ההולכה).



Energy band diagram of (a) germanium, (b) silicon and (c) gallium arsenide.

נוכל לראות באיור כיצד נקבע את E_C כמינימום פס ההולכה, את E_V כמקסימום פס הערכיות ואת E_G ההפרש בינם. נבחין כי בגאליום-ארסניד המעבר האנרגטי בין E_V ל- E_C אינו מצריך שינוי תנע (אותו k) כלומר זהו מ"מ ישיר. לעומת זאת, בסיליקון המעבר האנרגטי בין E_V ל- E_C מצריך שינוי תנע כלומר זהו מ"מ שאינו ישיר (מל"מ עקיף). כאשר יש לנו את כל המידע הזה נוכל לעבור לעבוד עם דיאגרמות אנרגיה פשוטות יותר.

מעברים אופטיים בין פסים

אלקטרון יכול לעבור מפס הערכיות לפס ההולכה ע"י התגברות על הפער האסור. מעבר זה יכול לקרות באחת מהדרכים הבאות:

- חימום (אנרגיה מהתנגשות)
- בליעת פוטון
- תוצאה משדה חשמלי

דוגמא:

כאשר גביש מואר, מגיעים אליו פוטונים בכל אורכי הגל. כאשר פוטונים בעלי אורך גל המתאים לאנרגיה מותרת לבליעה (אנרגיה שתיקח אלקטרון שיושב ברמה מסוימת ומעבירה אותו לרמה פנויה בעלת אנרגיה גבוהה יותר, בהפרש השווה בדיוק לאנרגיית הפוטון) פוגעים בגביש, הם נבלעים. לכן, יוסר אורך הגל (הצבע) הנ"ל מספקטרום הצבעים, כלומר לא יוחזר מהגביש אור בצבע זה ולא יעבור דרך הגביש. כתוצאה, בהארה באור לבן למשל, נראה שחוזר מהגביש או עובר דרכו רק שאר הצבעים שלא נבלעים. כל אורך גל שאיננו נבלע בחומר מועבר דרכו (שקוף לאורך גל זה) או מוחזר ממנו, כך שאל העין יגיעו אורכי הגל **שלא נבלעו**.

- א. מה הקשר בין אורך הגל הארוך ביותר של פוטונים הנבלעים לבין E_g ?
- ב. קבעו מהו התחום של E_g שמאפשר בליעה מלאה/חלקית/אפסית של אור נראה לעין האנושית.
- ג. קבע אם גביש גרמניום יהיה שקוף או אטום לאור נראה, אם נתון $E_g(\text{Ge}) = 0.67\text{eV}$.

פתרון:

א. אנו יודעים שאנרגיית הפוטון נתונה ע"י $E_{ph} = \hbar\omega$, כאשר ω הוא התדר ו- $\hbar$ הוא קבוע פלאנק. הקשר בין התדר לאורך הגל הוא: $c = \frac{\lambda\omega}{2\pi}$, כאשר λ הוא אורך הגל ו- c - מהירות האור. לכן, אם נסתכל על אורך הגל הארוך ביותר (התדר הקצר ביותר):

$$E_g = \hbar\omega_{min} = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{max}} \Rightarrow \lambda_{max} = \frac{2\pi\hbar c}{E_g}$$

E_g היא האנרגיה הנמוכה ביותר האפשרית לאלקטרון על מנת לעבור מפס הערכיות לפס ההולכה. הוא לא יכול לבלוע פוטון באנרגיה נמוכה יותר מכיוון שאין מצבים בתוך הפס האסור. כתוצאה יש חסם עליון על אורך הגל שיכול להיבלע בחומר.

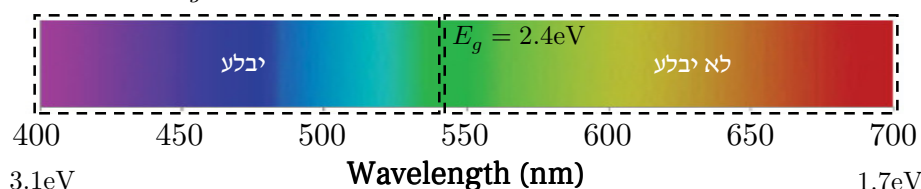
- ב. ספקטרום האור הנראה לעין הוא בין $400\text{nm} - 700\text{nm}$. על מנת שכל האור הנראה ייבלע, נדרוש אנרגיית פער נמוכה מהאנרגיה של הפוטון הכי נמוך באנרגיה - כלומר האנרגיה המתאימה ל- 700nm :

$$E_g = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{max}} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34} \text{Js} \cdot 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{7 \cdot 10^{-7} \text{m}} = 2.83 \cdot 10^{-19} \text{J} = 1.7\text{eV}$$

גביש יהיה שקוף (לאור הנראה) אם הפער האנרגטי שלו יהיה גבוה מאנרגיית הפוטון הכי אנרגטי שלו (400nm):

$$E_g = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{min}} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34} \text{Js} \cdot 3 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{4 \cdot 10^{-7} \text{m}} = 4.97 \cdot 10^{-19} \text{J} = 3.1\text{eV}$$

לסיכום, גביש בעל פער אנרגטי נמוך מ- 1.7eV ייבלע את כל האור הנראה, בעוד גביש בעל פער אנרגטי גבוה מ- 3.1eV לא ייבלע כלל את האור הנראה. בין לבין, ייבלעו הצבעים ה"יותר אנרגטיים" (יחסית לגודל הפער), כלומר הסגול והכחול ייעלמו ראשונים ככל שנוריד את הפער האנרגטי מ- 3.1eV וישארו הצבעים האחרים. לדוגמה, עבור $E_g = 2.4\text{eV}$:



- ג. לפי סעיף ב' אנו רואים שגרמניום בולע את כל האור בעל צבע נראה מכיוון שאנרגיית הפער שלו נמוכה מ- 1.7eV . נוכל לראות שאורך הגל המקסימלי שגביש גרמניום יבלע הוא:

$$\lambda_{max} = \frac{hc}{E_g} = \frac{(6.62 \times 10^{-34} \text{Js})(3 \times 10^8 \text{ms}^{-1})}{1.07 \times 10^{-19} \text{J}} = 1853\text{nm}$$

כלומר, הגביש יבלע כל אורך גל נמוך מ- 1853nm , כלומר את כל אורכי הגל בתחום הנראה.

מסה אפקטיבית:

אחת התכונות החשובות לתיאור תנועה של אלקטרונים בתווך מוליך או מוליך למחצה היא מהירות האלקטרון. תנועה מכוונת של אלקטרונים מתרחשת כאשר האלקטרונים מושפעים ע"י כוח חיצוני, כלומר, תחת שדה חשמלי. חלקיקים כמו אלקטרונים מתוארים ע"י חבילת גלים ומהירותם מתוארת ע"י מהירות התקדמות מעטפת החבילה ולא ע"י התקדמות כל גל בנפרד. מהירות המעטפת מכונה מהירות החבורה (Group Velocity).

הארה: ההגדרה של מסה היא מידת ההאצה של גוף כתוצאה מהפעלת כוח חיצוני. מכיוון שכעת לכח חיצוני (שדה חשמלי) נוספים כל הכוחות הפנימיים של מבנה החומר, ובסך הכל מתקבלת מסה אפקטיבית.

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

ראינו בכיתה שאלקטרונים מצייתים לחוק השני של ניוטון:

$$F = ma = m \frac{dv_g}{dt}$$

נציב, כעת, אל תוך החוק השני של ניוטון את ההגדרה למהירות החבורה ונקבל:

$$F = m \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} \right) = m \left(\frac{dk}{dt} \right) \frac{\partial}{\partial k} \left(\frac{\partial \omega}{\partial k} \right) = m \left(\frac{dk}{dt} \right) \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \right)$$

כאשר במעבר האחרון השתמשנו בכלל השרשרת.

אנו יודעים גם שהכח מוגדר כך:

$$F = \frac{dp}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt}$$

נציב תוצאה זו חזרה אל תוך המשוואה ונקבל:

$$\hbar \frac{dk}{dt} = m \left(\frac{dk}{dt} \right) \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \right) \Rightarrow m = \frac{\hbar}{\left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \right)}$$

מאחר ואנו זוכרים שעבור גל - $E = \hbar \omega$, נוכל לכתוב:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)}$$

נסתכל על דוגמא של פס אנרגיה ונמצא את המסה האפקטיבית במרכז הפס.

דוגמא:

נקח פס אנרגיה עם עקומת דיספרסיה שנתונה ע"י הביטוי הכללי הבא:

$$E(k) = E_0 + \alpha k^2$$

נמצא את המסה האפקטיבית של האלקטרונים בפס האנרגיה:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)} = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2}{\partial k^2} (E_0 + \alpha k^2)} = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial}{\partial k} (2\alpha k)} = \frac{\hbar^2}{2\alpha}$$

"חורים"

כאשר מעוררים אלקטרון מפס הערכיות לפס ההולכה, יש חוסר באלקטרון בפס הערכיות. "המקום" ממנו נלקח האלקטרון יכול להשתנות (אלקטרון אחר ימלא את מקומו, וכעת ייוצר מקום ריק חדש מאיפה שהוא הגיע - בדומה למכונות שעומדות בפקק, ולפתע מתפנה מקום - כל מכונתית תתקדם צעד קדימה, ואז החלל עובר אל מאחוריהן). אם נעקוב אחרי המקום הריק, נבחין כי הוא מסוגל לנוע, יש לו מטען חיובי יחסית לסביבתו (כלומר - שדה אשר יימשוך אלקטרונים "ימלא" את המקומות הפנויים בקרבתו (וייצור מקומות ריקים רחוק יותר), ולכן אפקטיבית ידחה את החורים. כתוצאה קיבלנו "קוואזי" חלקיק.

דרך נוספת לתאר חורים אינטואיטיבית, היא בועות אוויר בתוך מים, שלמעשה מתארות אזור של חוסר בטיפות מים, אבל יותר קל לטיפול כחלקיק "הופכי" לטיפה. מעבר לכך, בעוד כח הכבידה הפועל על המים יוריד אותם למטה, הבועות בפועל יעלו למעלה - משמע, בזמן שהמים שואפים להגיע לאנרגיה נמוכה, החורים "יישאפו" להגיע לאנרגיה גבוהה. אם מולקולות המים היו נושאות מטען, ניתן היה לתאר את הבועות בתור בעלות מטען שלילי יחסית לרקע של המים.

לחורים מסה אפקטיבית שונה משל האלקטרונים - מכיוון שהיא נגזרת מעקומת הדיספרסיה של פס הערכיות, ולא של ההולכה. להזכירם:

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E_c(k)}{\partial k^2}}$$

כך שבהתאמה:

$$m_h^* = - \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E_v(k)}{\partial k^2}}$$

בכל מקרה, מסה היא גודל אי-שלילי, וכדי לא להתייחס לסימנים נגדיר פשוט $m^* = \left| \frac{\hbar^2}{(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2})} \right|$.

לרוב מסת החור תהיה גבוהה יותר, ולעתים נמצא חפיפה בין שתי עקומות דיספרסיה לחורים, ונוכל לחשב שתי מסות אפקטיביות לחורים - אשר אחד יקרא **חור קל** והשני **חור כבד**. כך למשל, בגרמניום, בפסגת פס הערכיות יש שתי "פרבולות" אשר כל אחת נותנת מסה אפקטיבית אחרת:

