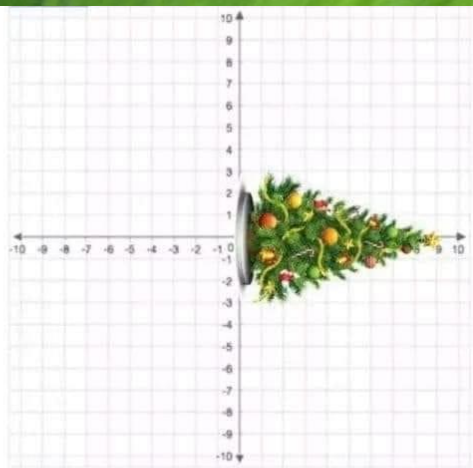


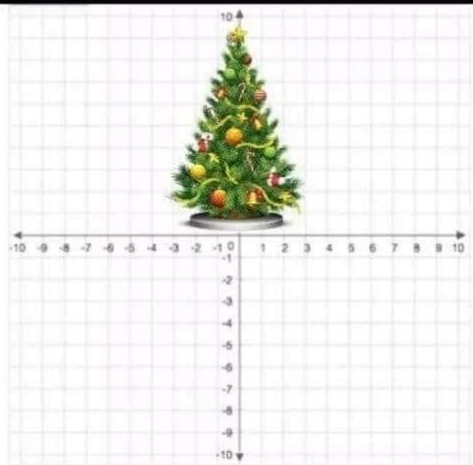
Wstęp do Optyki i Fizyki Materii Skondensowanej

1100-3003

X-mas tree



Y-mas tree



Ciało stałe 3

Wydział Fizyki UW

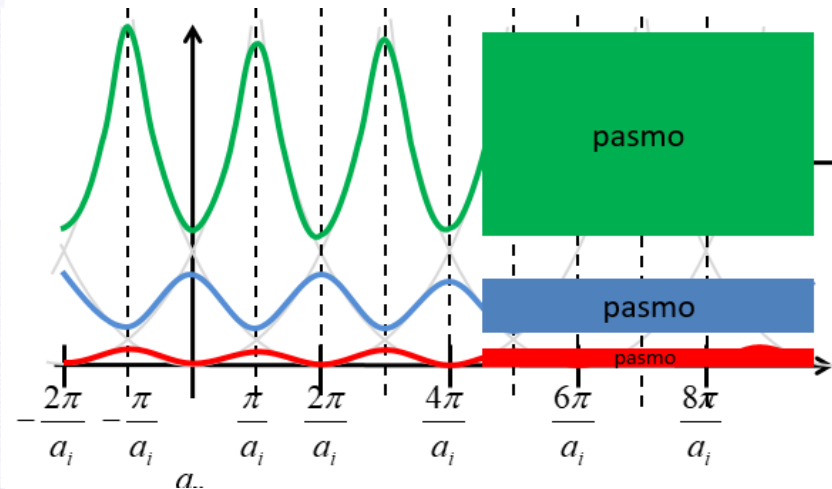
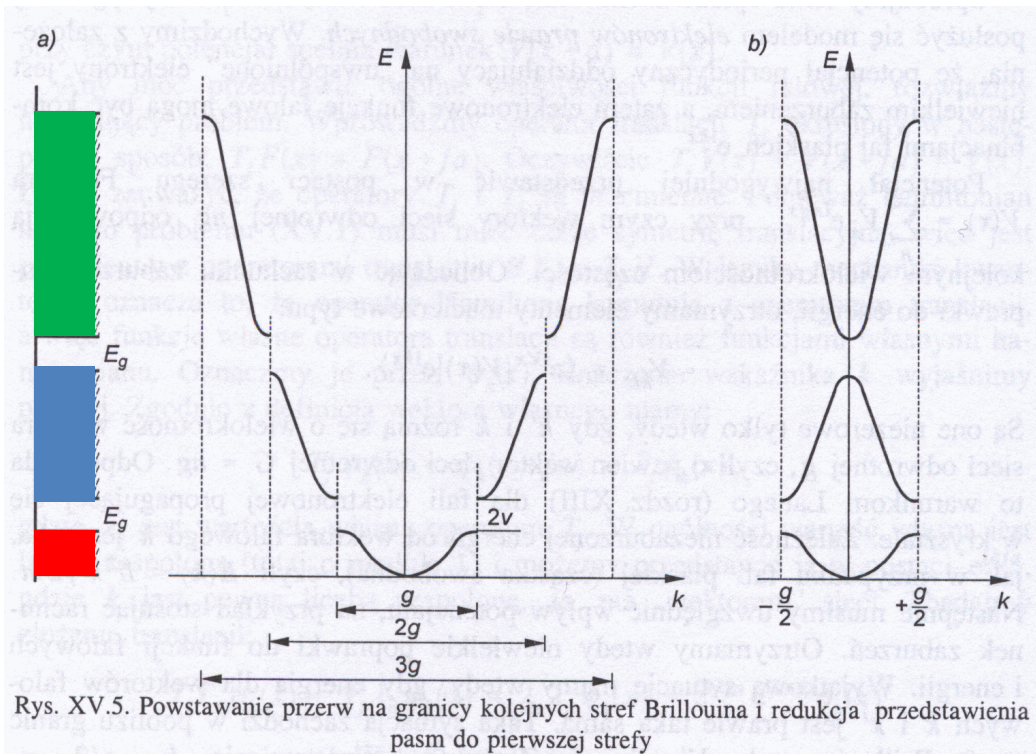
Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

Piotr.Fita@fuw.edu.pl

Nasz cel:

Twierdzenie Blocha

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$



Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Przybliżenia:

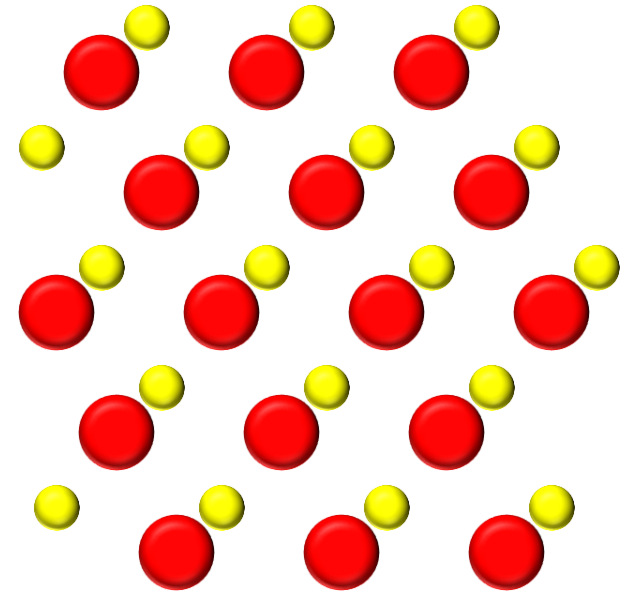
Rdzenie nieruchome, ustawione w sieć przestrzenną.

Przybliżenie jednoelektronowe (przybliżenie Hartree'ego)

$$\Psi_{el}^k(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots) = \varphi_1(\vec{r}_1) \cdot \varphi_2(\vec{r}_2) \cdot \varphi_3(\vec{r}_3) \cdot \dots \cdot \varphi_n(\vec{r}_n)$$

lub przybliżenie Hartree-Focka (wyznacznik Slatera).

Metoda pola samouzgodnionego - sprowadzamy zagadnienie wieloelektronowe do rozważania jednego elektronu znajdującego się w potencjale pochodzącym od jonów w węzłach i pozostałych elektronów.



$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \varphi_n(\vec{r}_n) = E_n \varphi_n(\vec{r}_n)$$

„Jednoelektronowe” równanie Schrödingera

Potencjał efektywny, periodyczny z okresem sieci, jednakowy dla wszystkich elektronów.

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

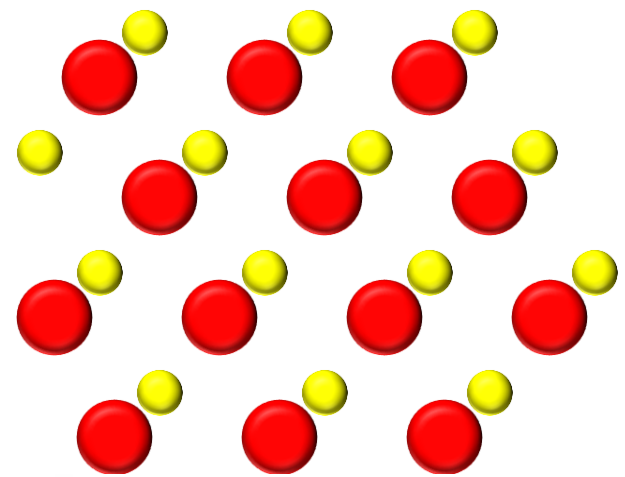
Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Jeśli potencjał jest periodyczny $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$
to rozwiązania równania Schrödingera

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})\right) \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}} \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Wektory sieci Bravais



mają postać:

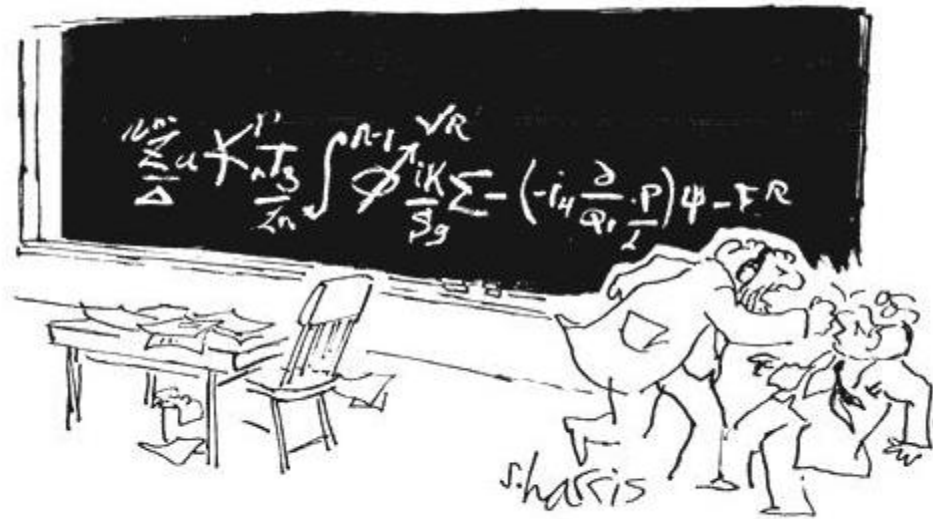
fala płaska

funkcja Blocha,
stan Blocha

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

gdzie tzw. f. Blocha:

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$
$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \varphi_{n,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r})$$



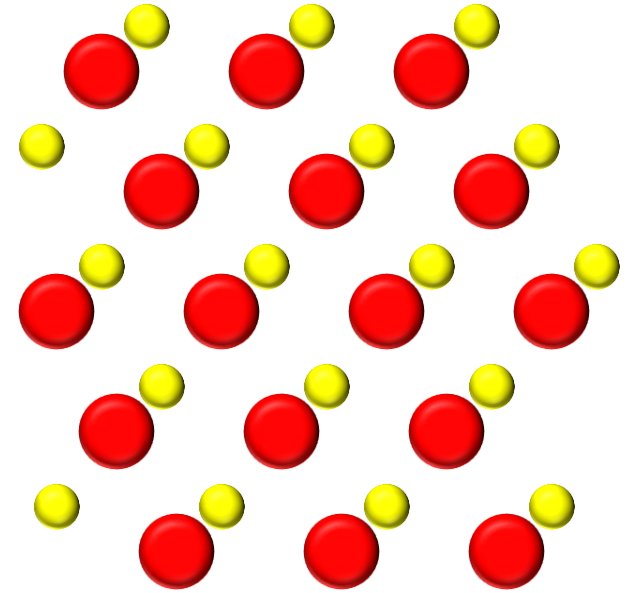
"You want proof? I'll give you proof!"

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

funkcja Blocha,
stan Blocha



Pokazaliśmy, że rozwiązanie jednoelektronowego równania Schrödingera w potencjale periodycznym ma postać modulowanej fali płaskiej o okresie sieci:

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

Wprowadziliśmy oznaczenie n dla różnych rozwiązań odpowiadających temu samemu \vec{k} (*indeks pasm*). Wektor \vec{k} należy wtedy do *pierwszej strefy Brillouina*.

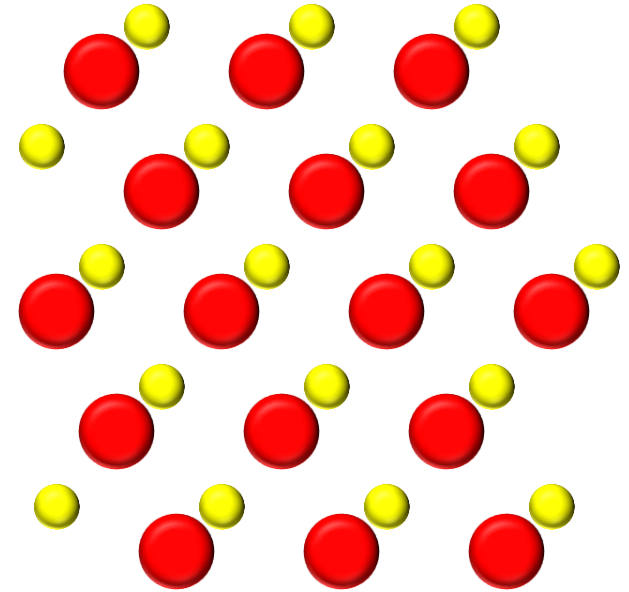
$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Właściwości funkcji Blocha: $\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$

1. $u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$
2. $\varphi_{n,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$
3. $E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$
4. Inwersja w przestrzeni $E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$
5. Inwersja w czasie (bez pola magnetycznego)
 $E_n(\vec{k}, \uparrow) = E_n(-\vec{k}, \downarrow)$



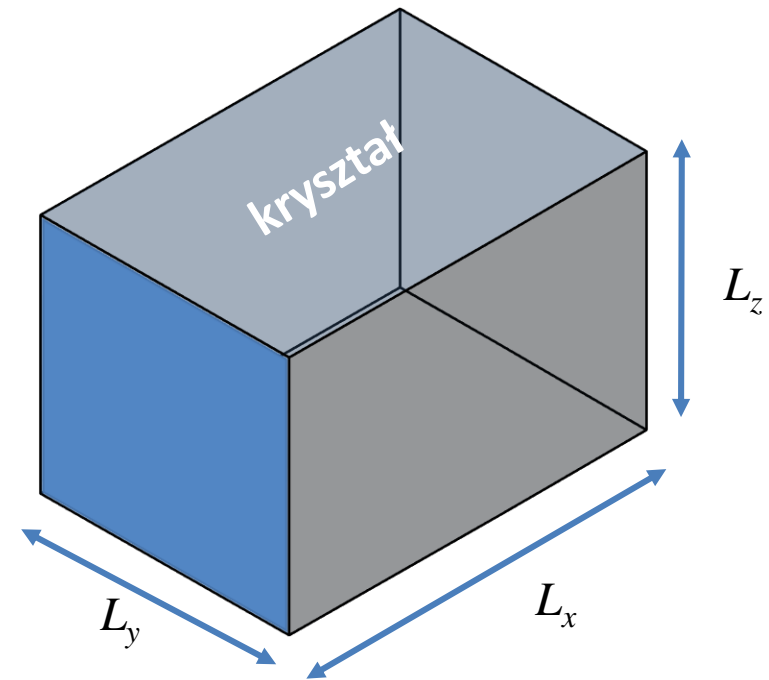
Potencjał periodyczny

W przypadku funkcji Blocha $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}$:

$$\begin{aligned}\varphi_{\vec{k}}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) &= u_{\vec{k}}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) e^{i\vec{k}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j)} \\ &= u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{k}N_j \vec{a}_j}\end{aligned}$$

Musimy zażądać, żeby $e^{i\vec{k}N_j \vec{a}_j} = 1$

$$\vec{k}_j = 0, \pm \frac{2\pi}{L_j}, \pm \frac{4\pi}{L_j}, \dots, \pm \frac{2\pi N_j}{L_j}$$



dozwolone wektory falowe stanowią dyskretną sieć punktów równomiernie rozłożoną w przestrzeni wektora falowego; komórkę elementarną sieci odwrotnej (strefę Brillouina) wypełnia

$$N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$$

takich punktów. Tyle też będzie stanów w każdym paśmie. N_1, N_2, N_3 mogą być różne, ale najczęściej przyjmujemy takie same

Gęstość stanów

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów \mathbf{k} jest skończony (choć olbrzymi!), np. możemy przyjąć okresowe warunki brzegowe i wtedy:

Warunki Born-Karmana

Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

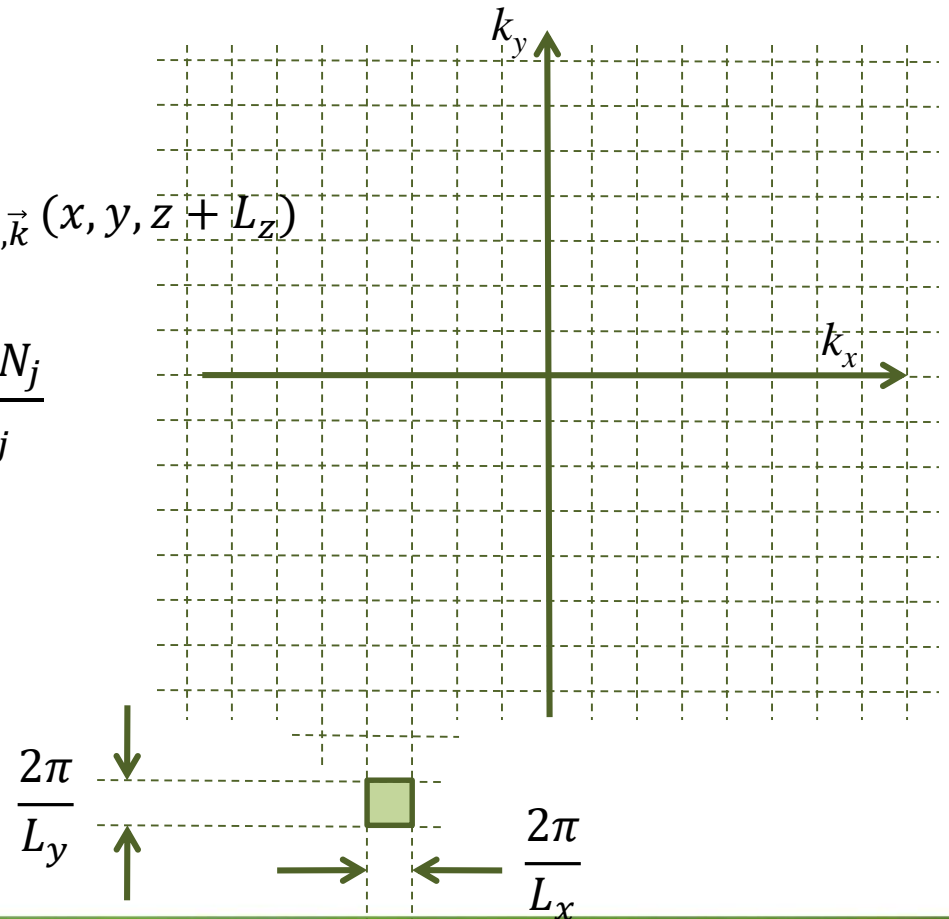
$\psi_{n,\vec{k}}$ – postać funkcji Blocha

$$\psi_{n,\vec{k}}(x + L_x, y, z) = \psi_{n,\vec{k}}(x, y + L_y, z) = \psi_{n,\vec{k}}(x, y, z + L_z)$$

$$\begin{aligned} e^{ik_x L_x} &= 1 \\ e^{ik_y L_y} &= 1 \\ e^{ik_z L_z} &= 1 \end{aligned}$$

$$\vec{k}_j = 0, \pm \frac{2\pi}{L_j}, \pm \frac{4\pi}{L_j}, \dots, \pm \frac{2\pi N_j}{L_j}$$

$$\text{Ilość stanów w objętości} = \frac{2}{\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} \times \frac{2\pi}{L_z}} = \frac{2V}{(2\pi)^3}$$



Density of states

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów \mathbf{k} jest skończony (choć olbrzymi!), np. możemy przyjąć okresowe warunki brzegowe i wtedy:

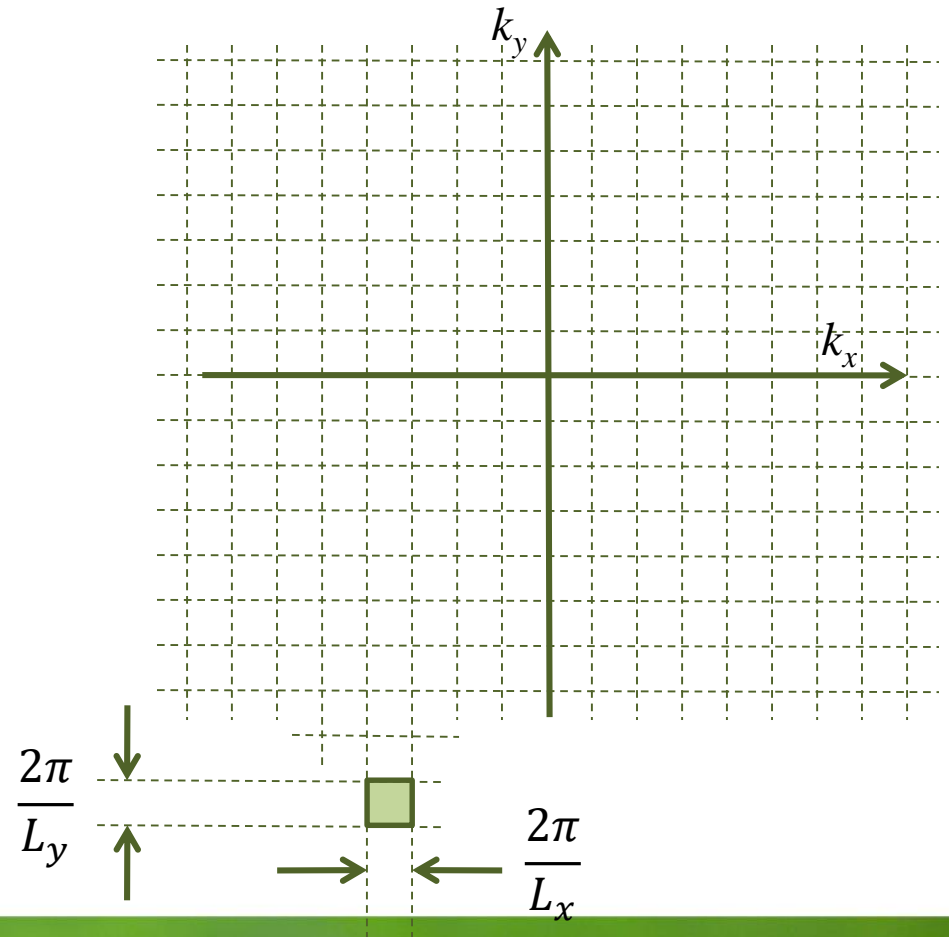
Gęstość stanów w przestrzeni k
 n wymiarowej (na jednostkę objętości)

$$\text{Case 3D: } \rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3$$

$$\text{Case 2D: } \rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2$$

$$\text{Case 1D: } \rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^1$$

$$\text{Ilość stanów w objętości} = \frac{2}{\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} \times \frac{2\pi}{L_z}} = \frac{2V}{(2\pi)^3}$$



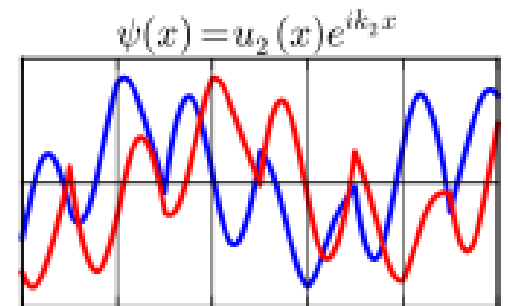
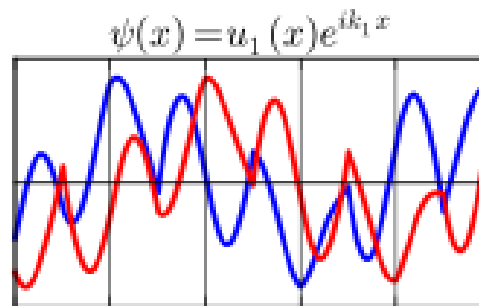
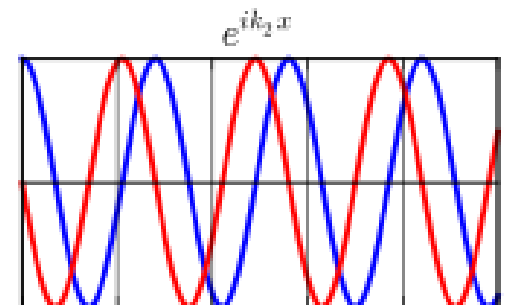
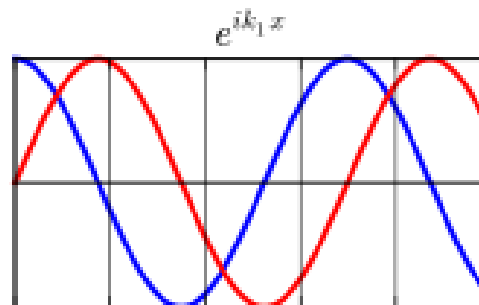
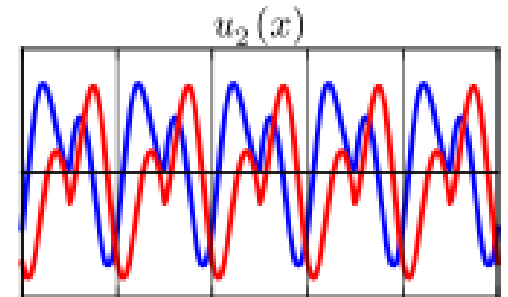
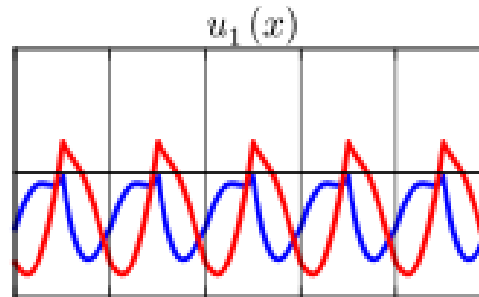
Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Funkcje Blocha, których wektory falowe różnią się o wektor sieci odwrotnej są IDENTYCZNE!

$$\psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$$

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



$$\vec{k}_1 - \vec{k}_2 = \vec{G}$$

Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

Funkcje Blocha, których wektory falowe różnią się o wektor przestrzeni odwrotnej \vec{G} są takie same!

$$\psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$$

$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

Co z energią?

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) = E(n, \vec{k}) \psi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$$

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) \psi_{n, \vec{k} + \vec{G}}(\vec{r})$$

Energia jest periodyczną funkcją wektora falowego \vec{k} !

$$\Rightarrow E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$$

Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

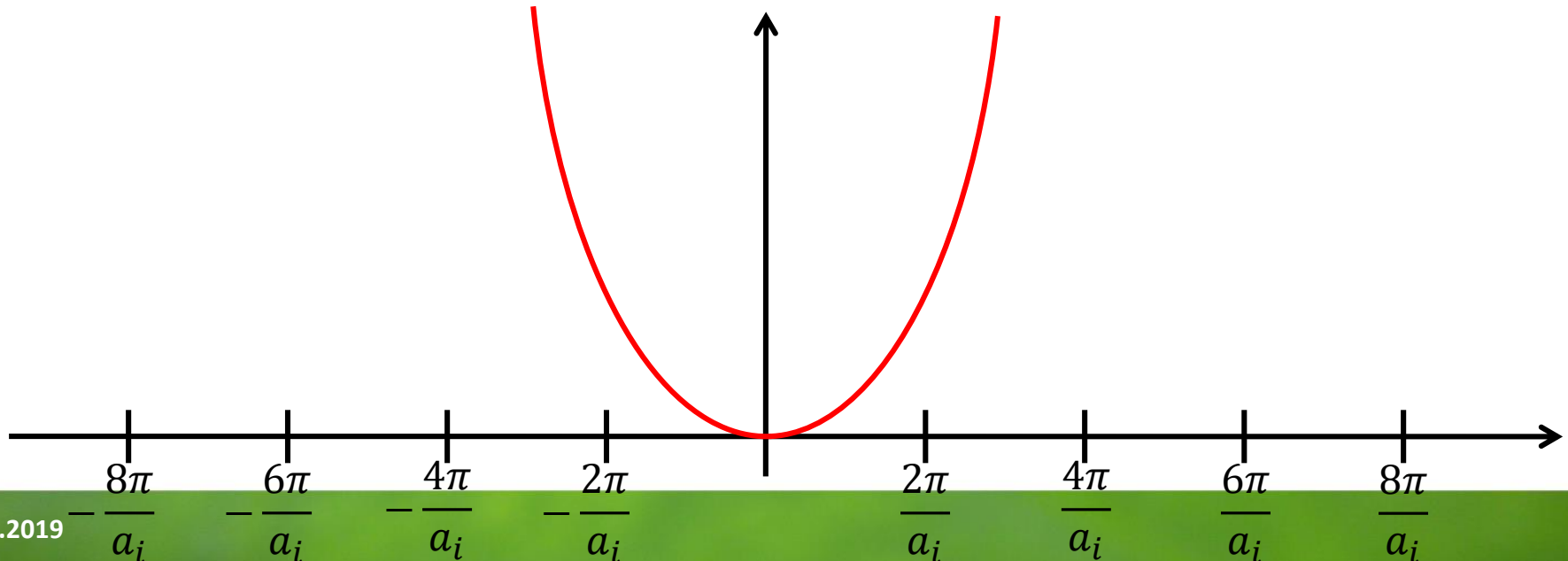
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

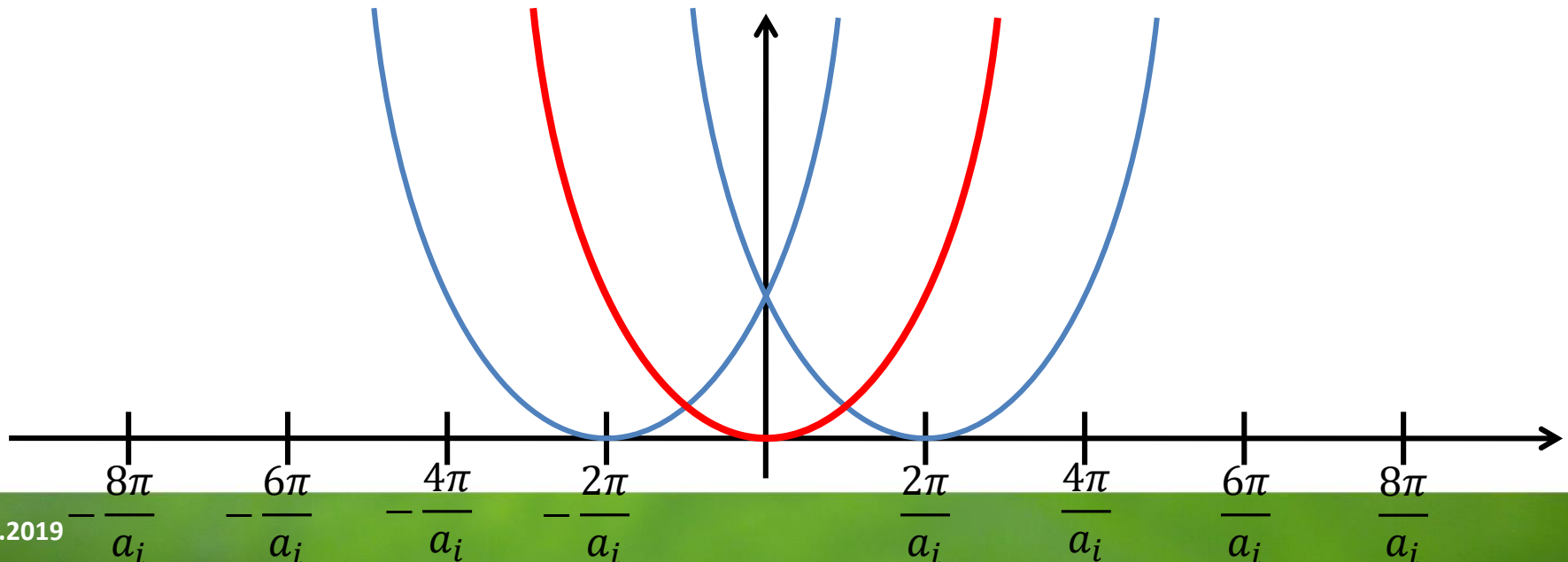
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

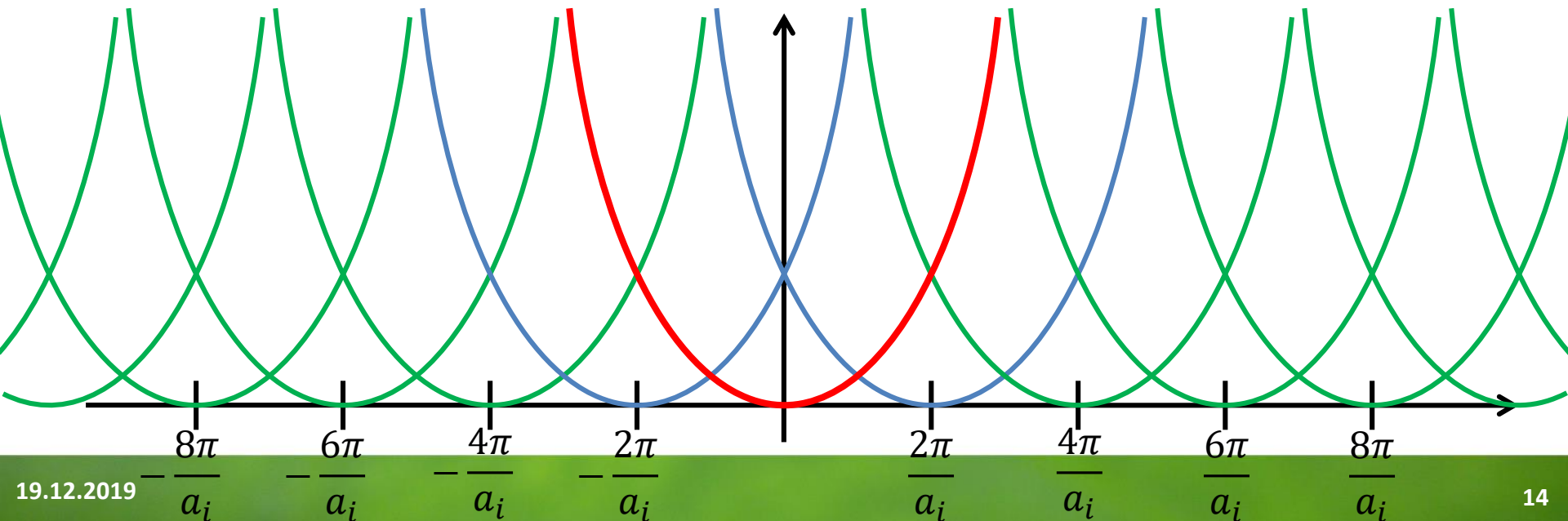
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

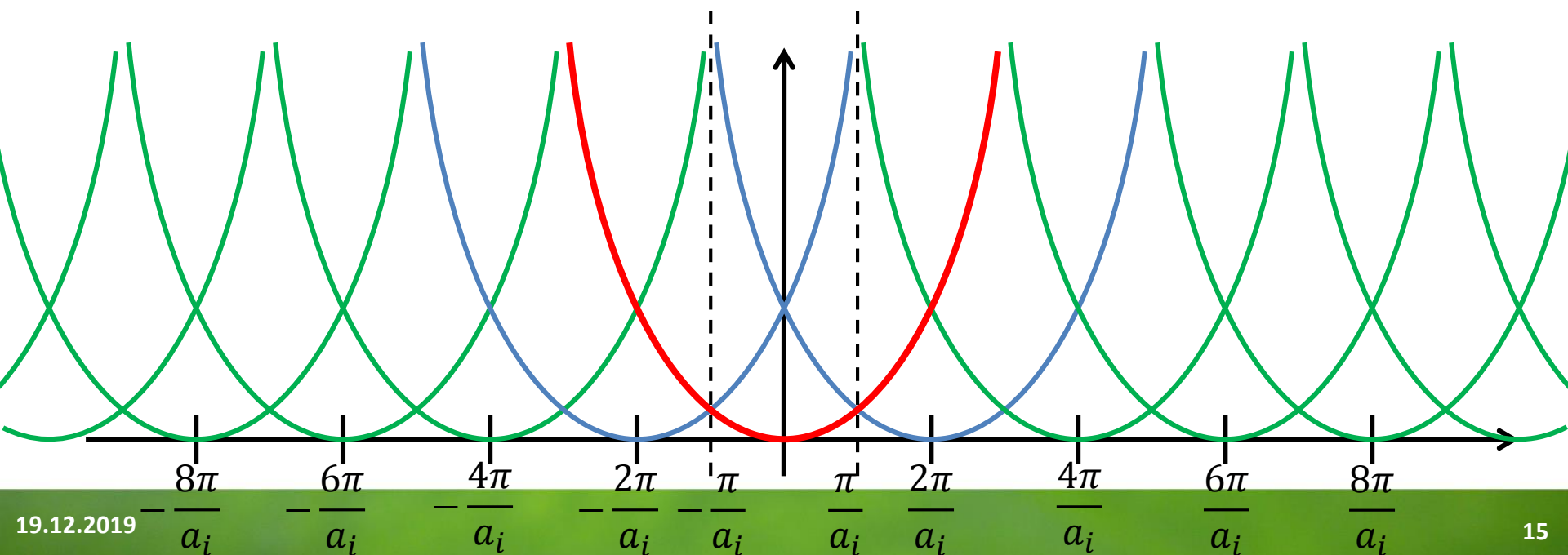
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

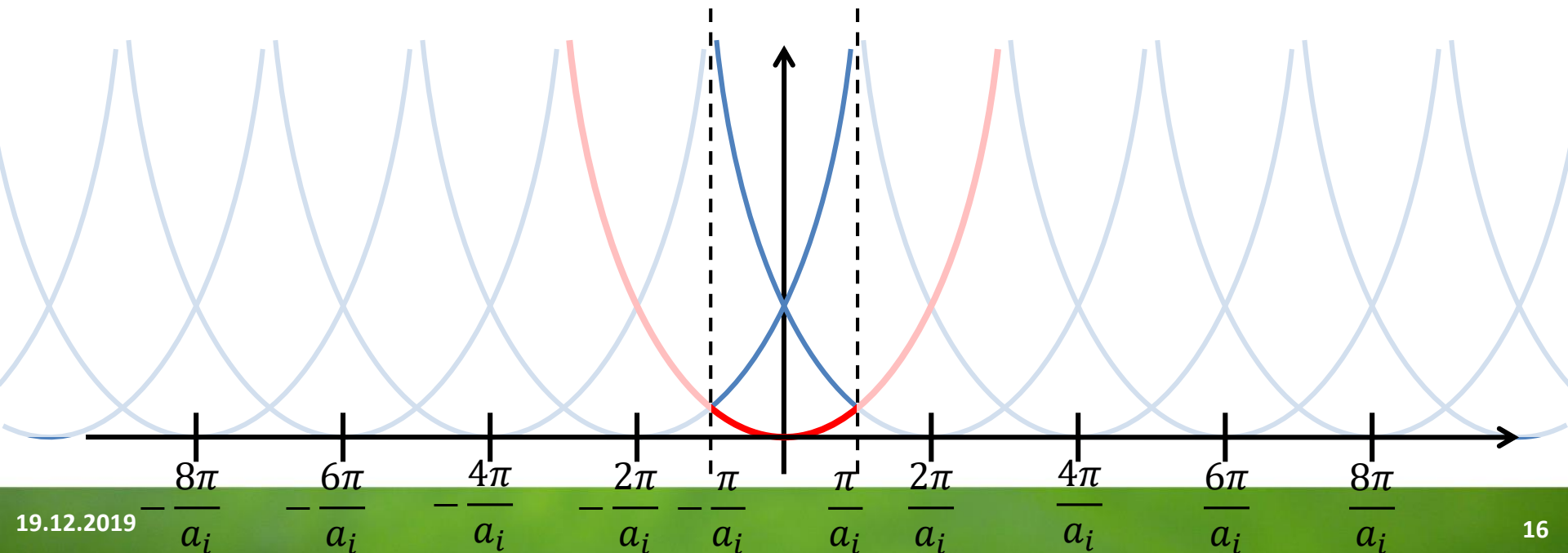
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Potencjał periodyczny

Model prawie swobodnych elektronów

Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k .

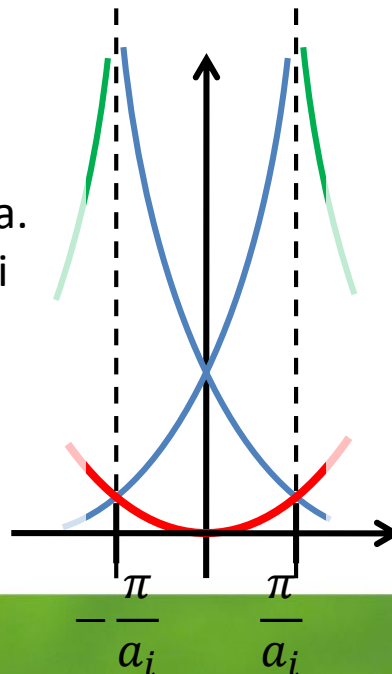
$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{|\vec{a}_i|}$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} + \vec{G})$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E_{n=1}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E_n(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

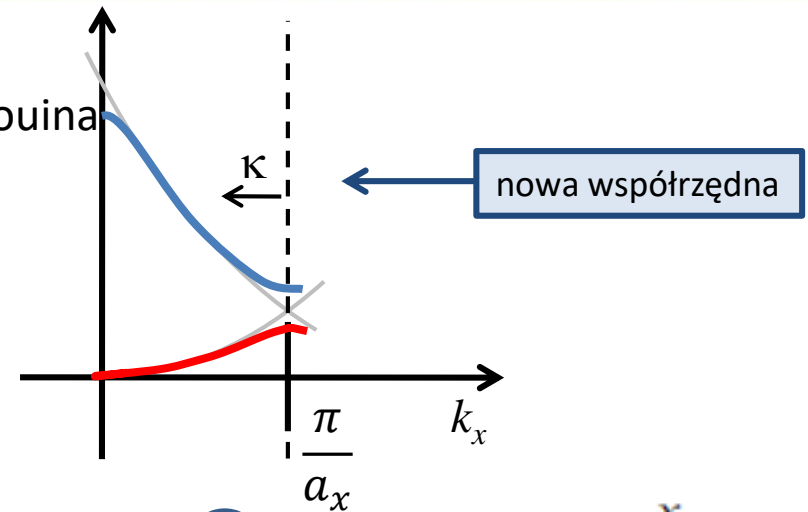
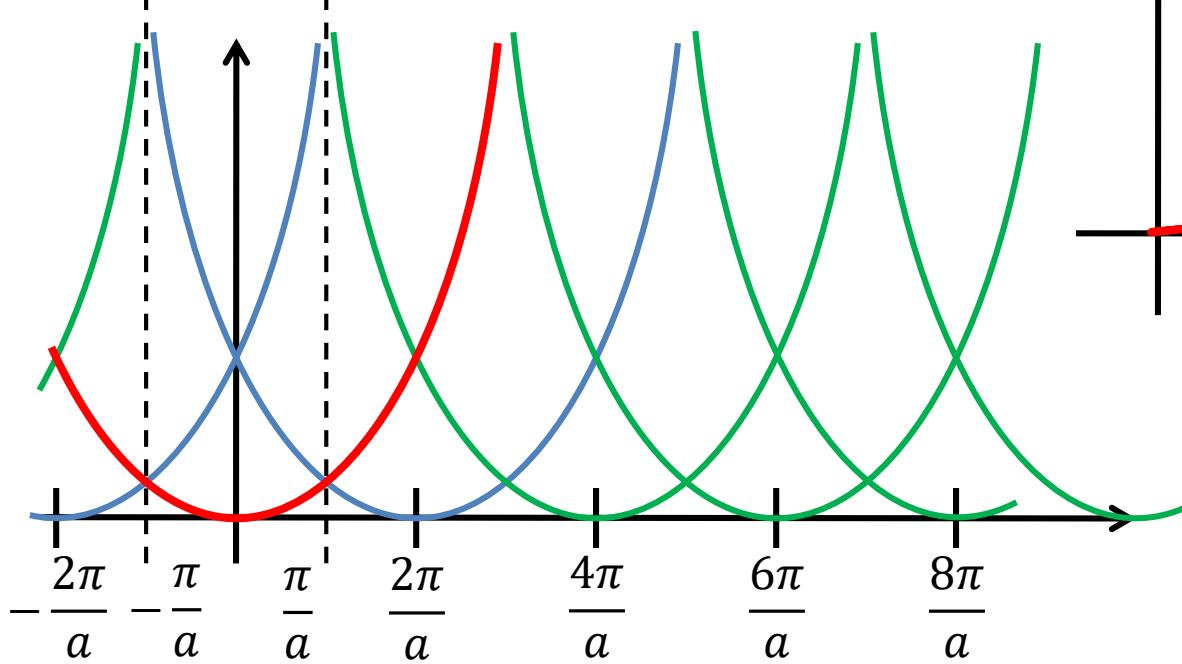
Jest tzw. zredukowana strefa Brillouina.
Na granicy strefy $\pm G/2 = \pm \pi/a$ wartości energii są zdegenerowane.



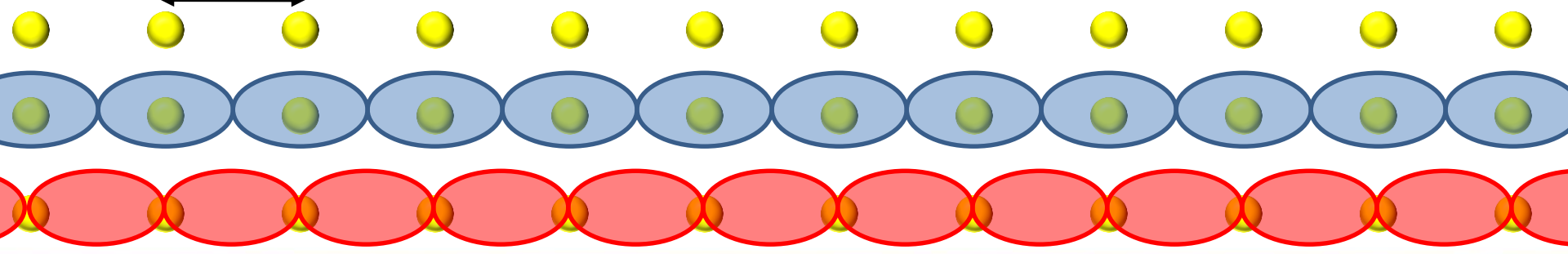
Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



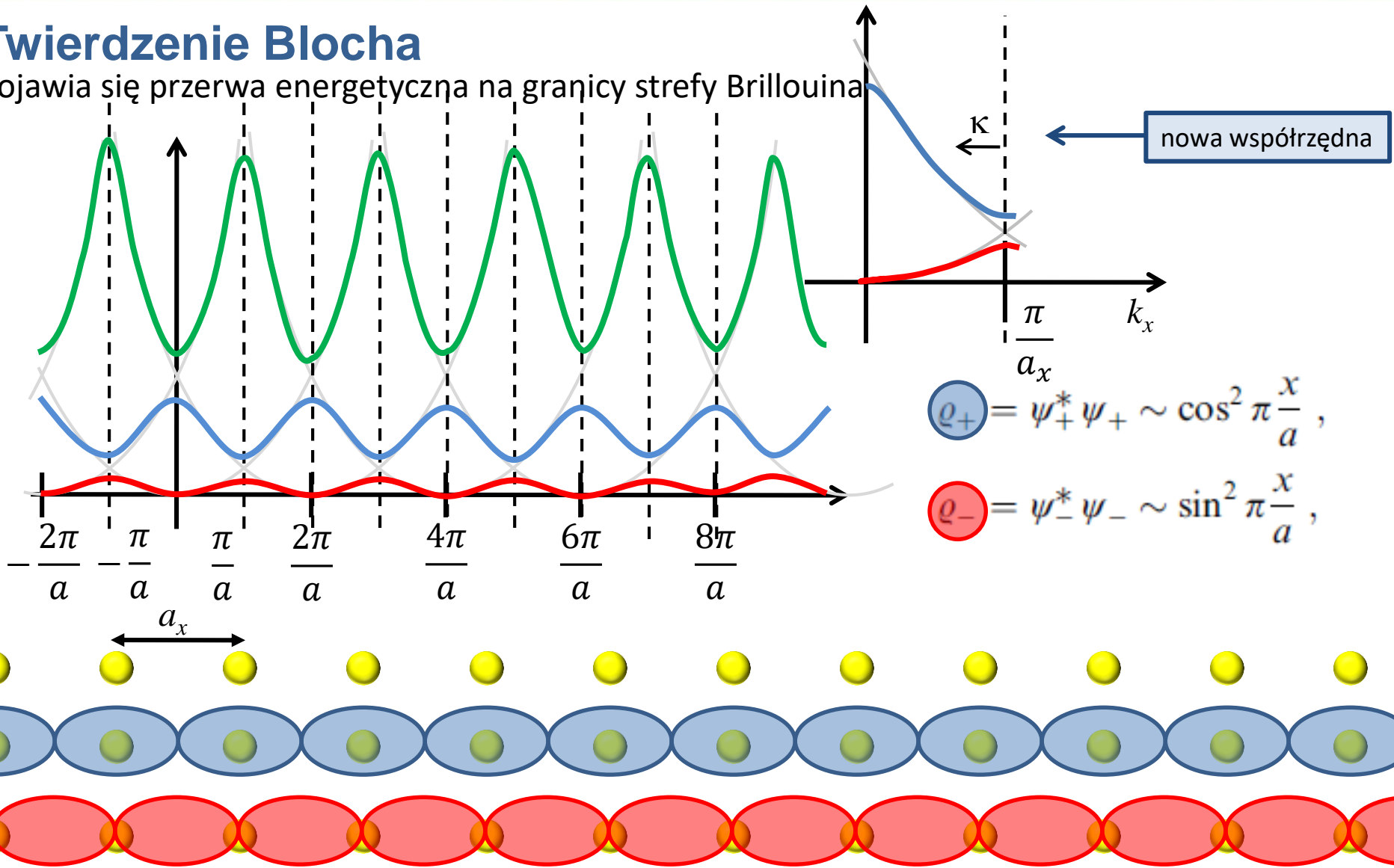
$$\rho_+ = \psi_+^* \psi_+ \sim \cos^2 \pi \frac{x}{a},$$
$$\rho_- = \psi_-^* \psi_- \sim \sin^2 \pi \frac{x}{a},$$



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

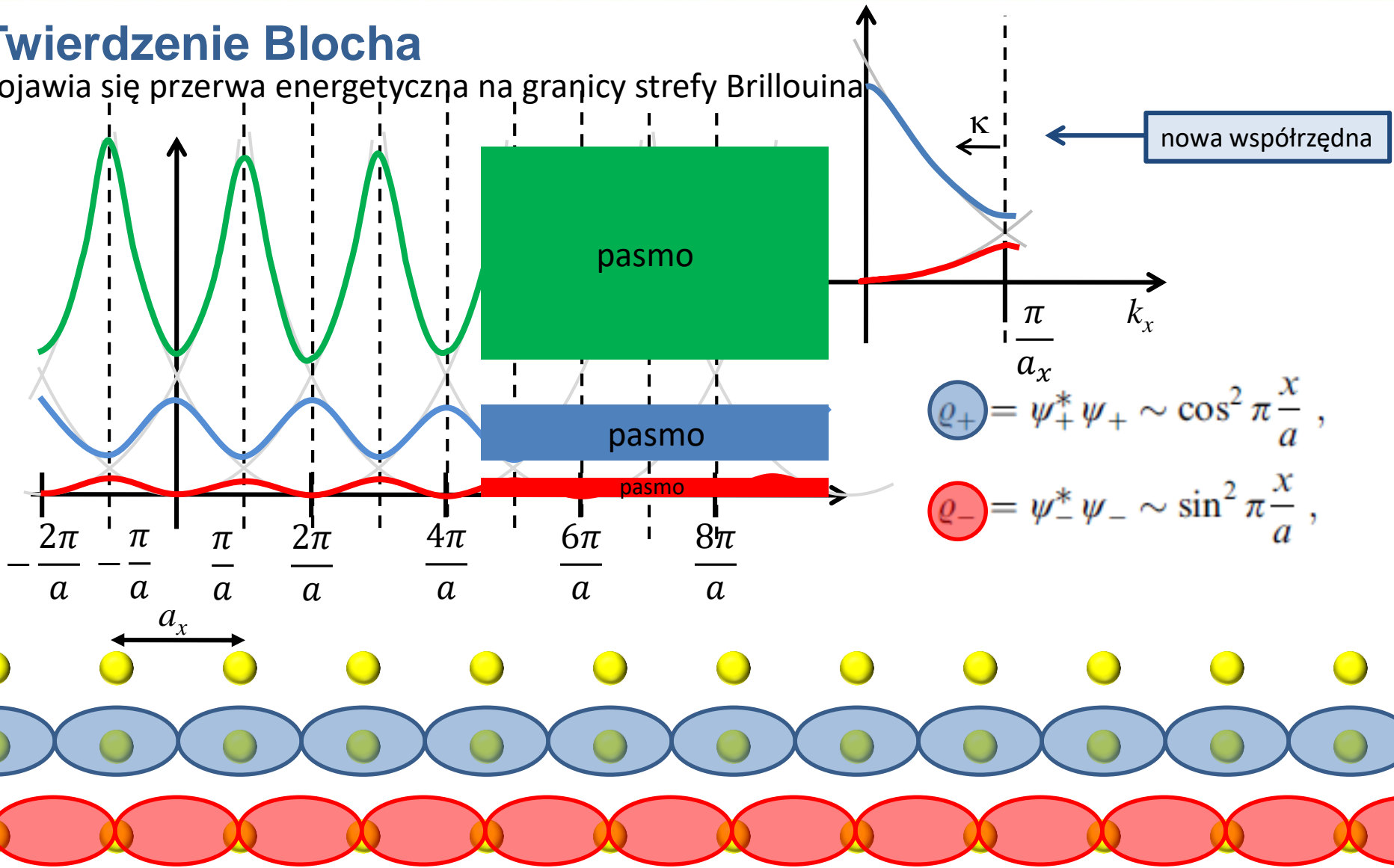
Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



$$\varrho_+ = \psi_+^* \psi_+ \sim \cos^2 \pi \frac{x}{a},$$

$$\varrho_- = \psi_-^* \psi_- \sim \sin^2 \pi \frac{x}{a},$$

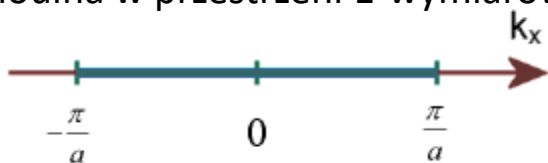
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

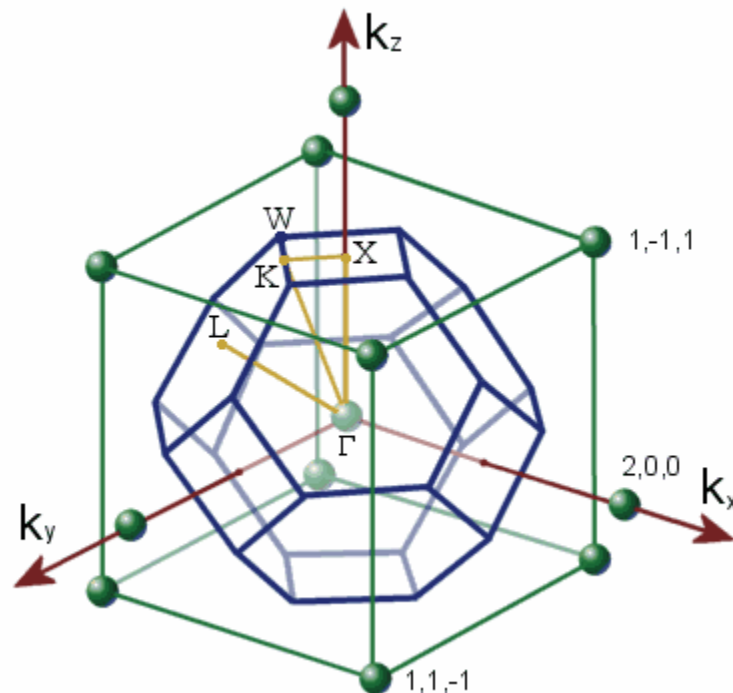
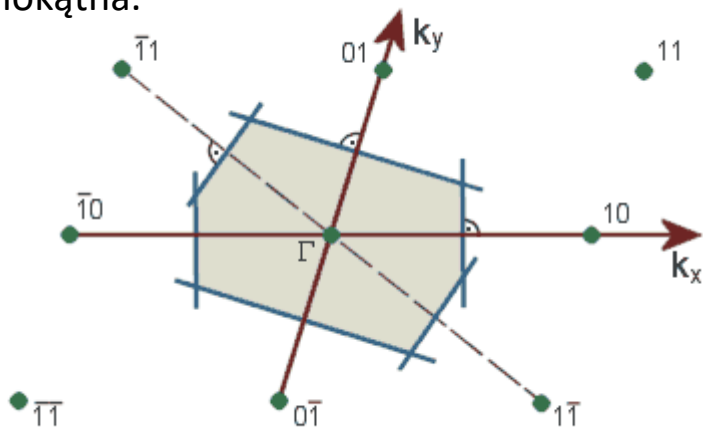
$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

Strefa Brillouina w przestrzeni 1-wymiarowej



Strefa Brillouina w przestrzeni 2-wymiarowej, sieć ukośnokątna.



Strefa Brillouina dla sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej (fcc). Ograniczające strefę ściany kwadratowe i sześciokątne pochodzą, odpowiednio, od punktów sieci odwrotnej typu $(2,0,0)$ i $(1,1,1)$.

Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3,$$

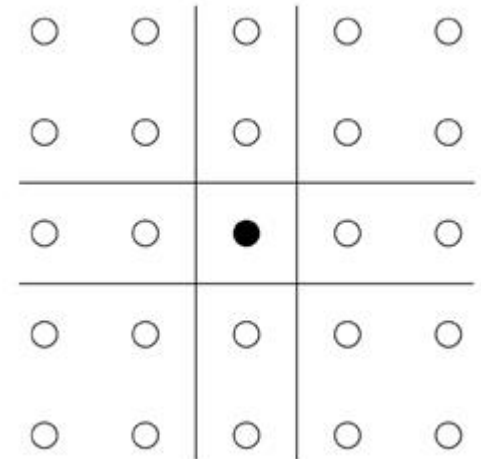
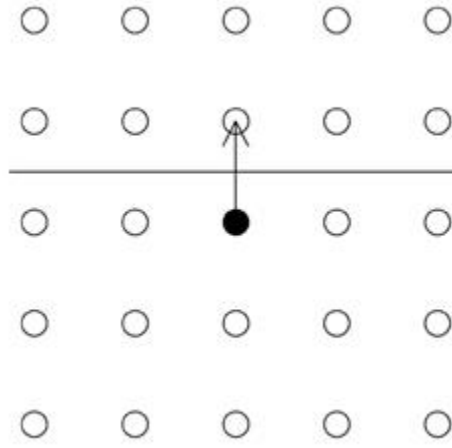
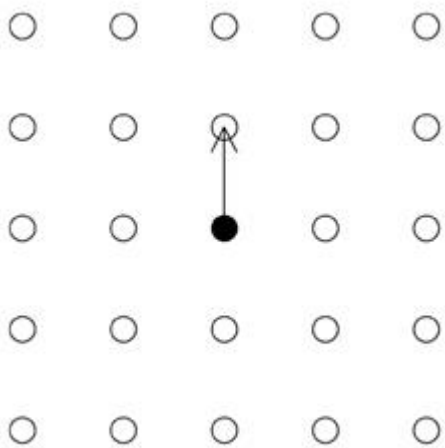
$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*,$$

$$n_i \in \mathbb{Z}$$

$$m_i \in \mathbb{Z}$$

Konstrukcja stref Brillouina w dwuwymiarowej, kwadratowej sieci odwrotnej

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



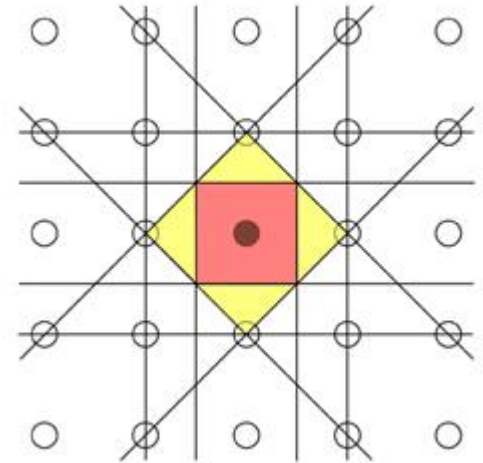
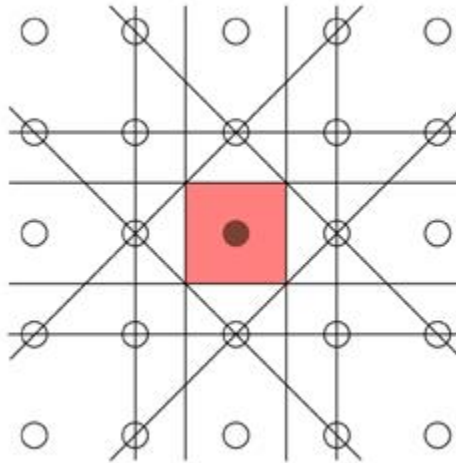
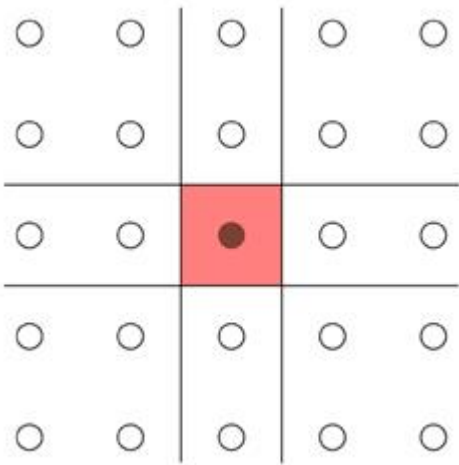
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php

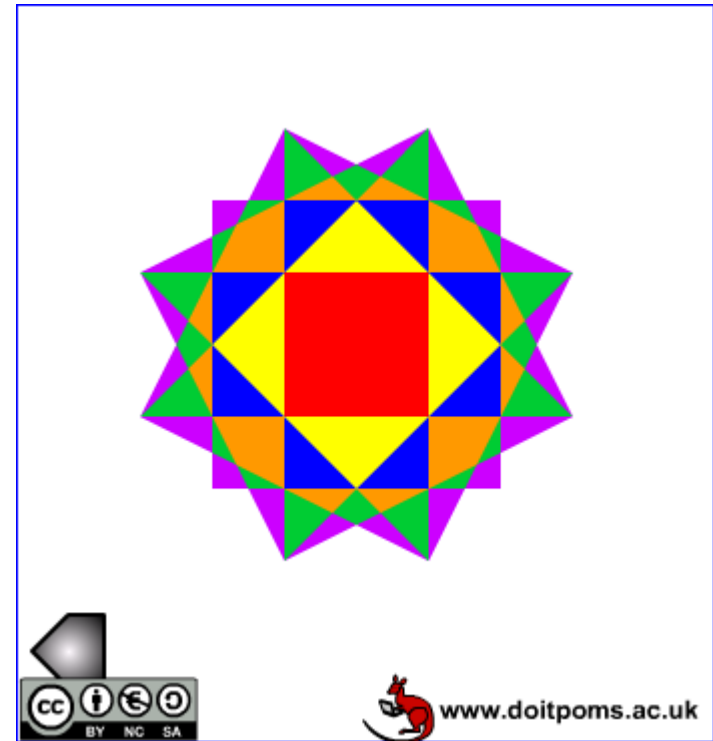
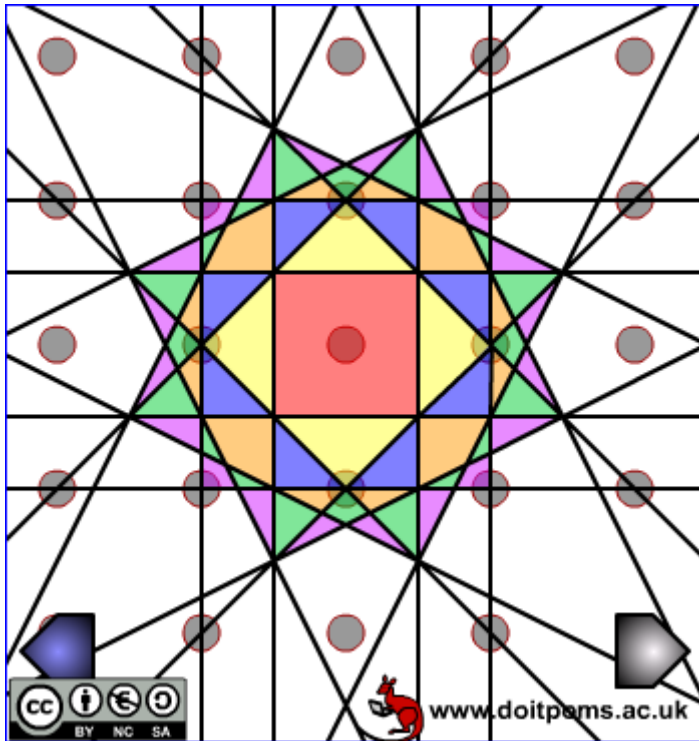
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php

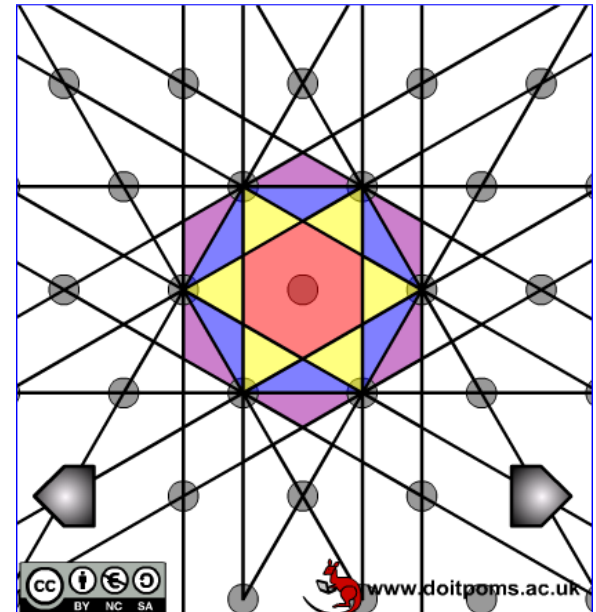
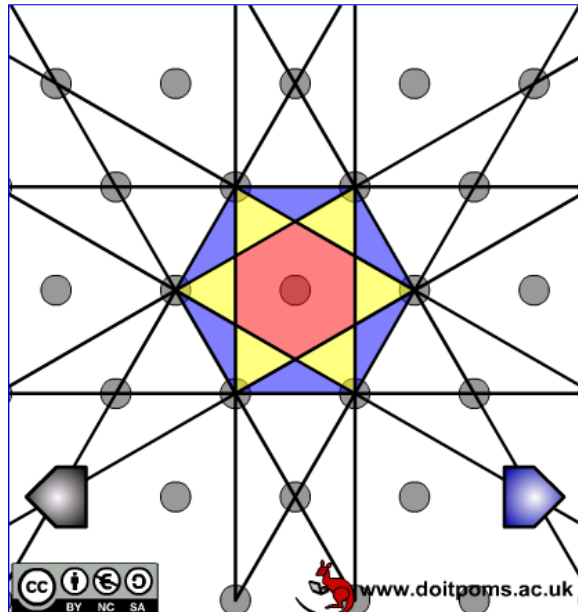
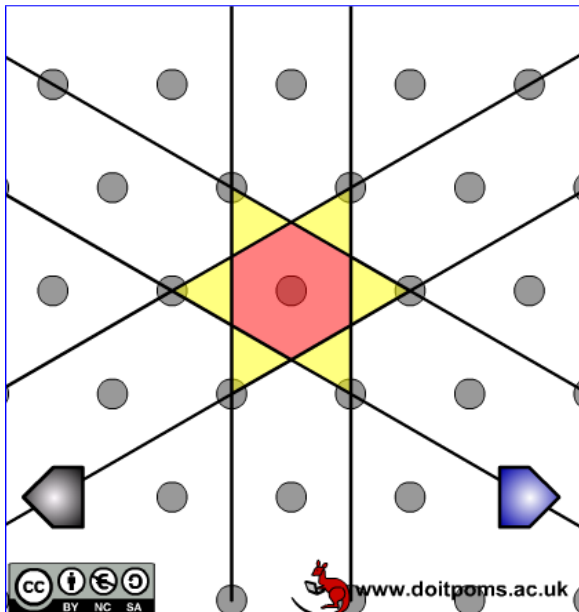
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php

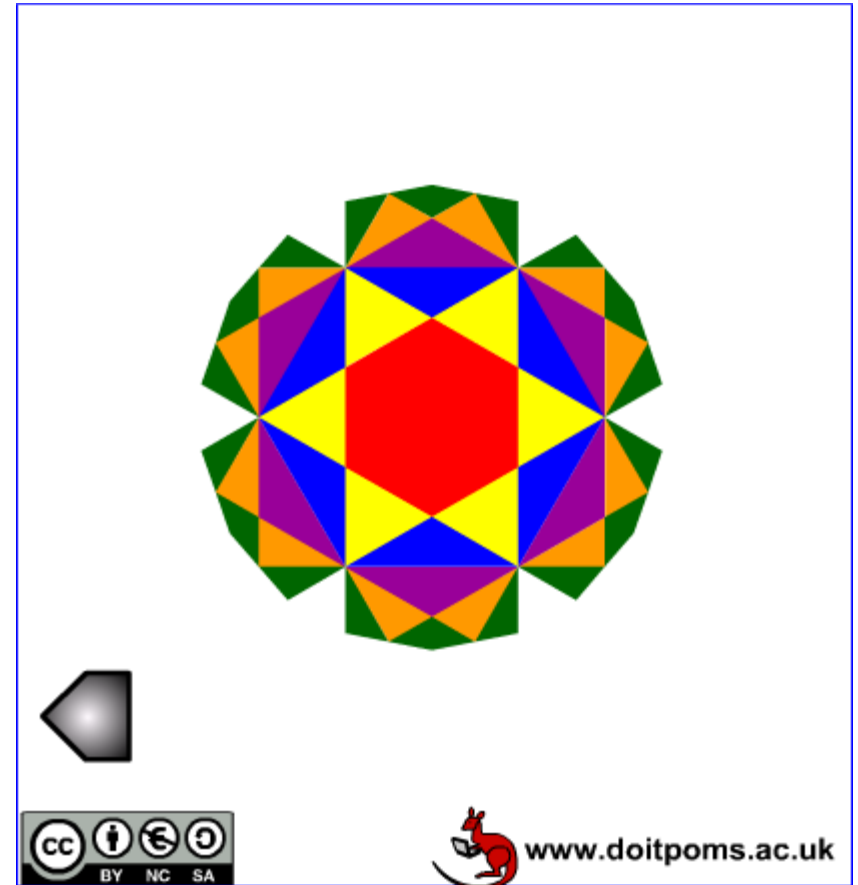
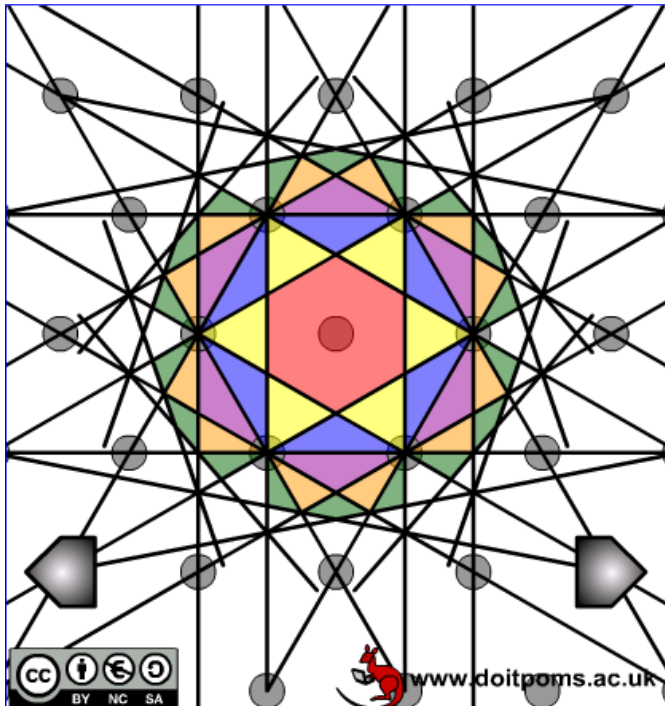
Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*, \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$$



http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/brillouin_zones/zone_construction.php

Potencjał periodyczny

Strefy Brillouina

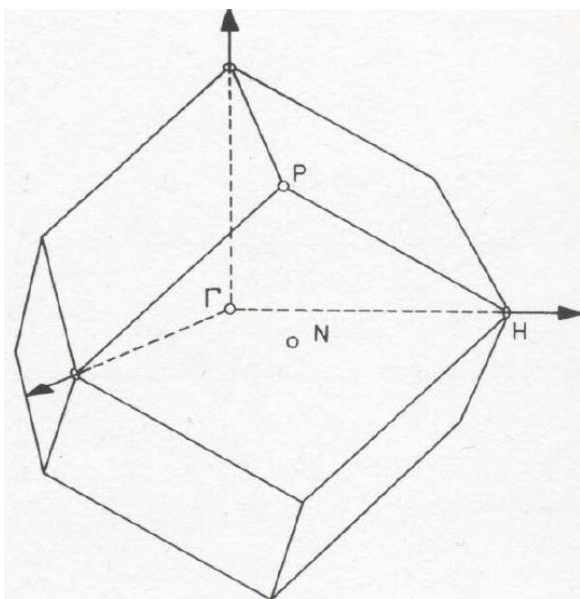
$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3,$$

$$n_i \in \mathbb{Z}$$

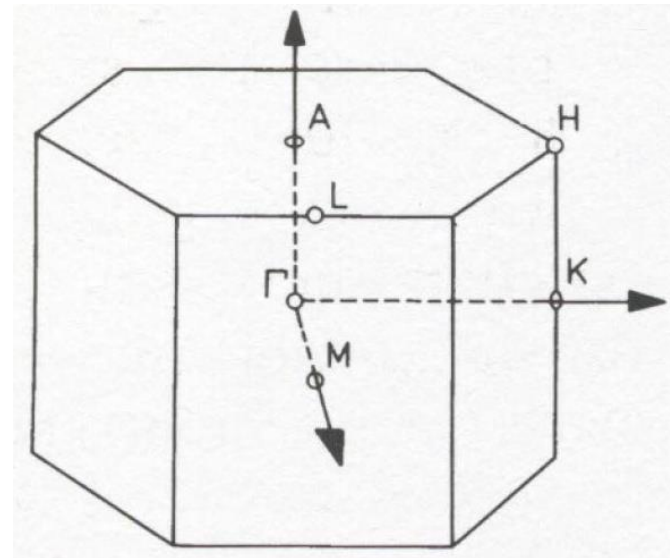
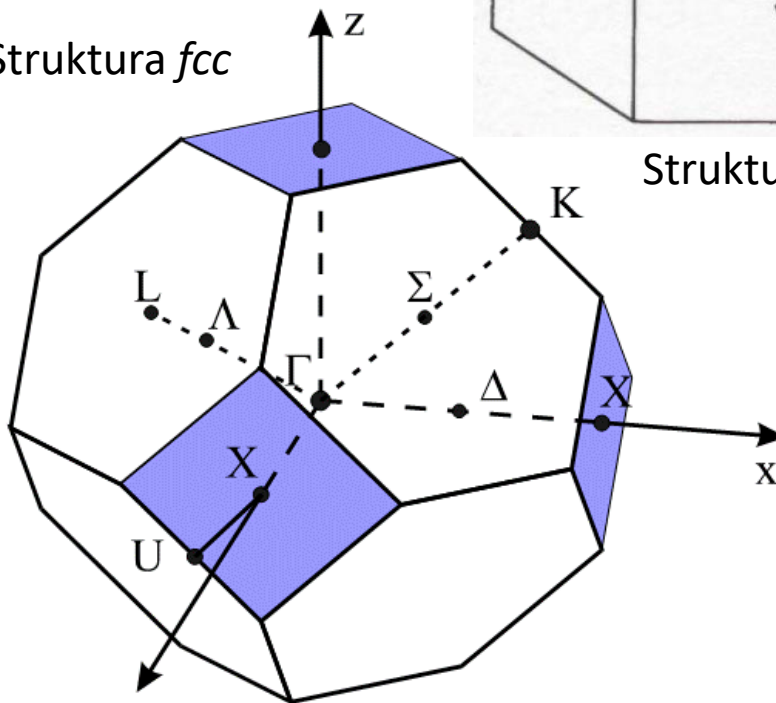
$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^*,$$

$$m_i \in \mathbb{Z}$$

Struktura *bcc*



Struktura *fcc*



Struktura *heksagonalna*

Potencjał periodyczny

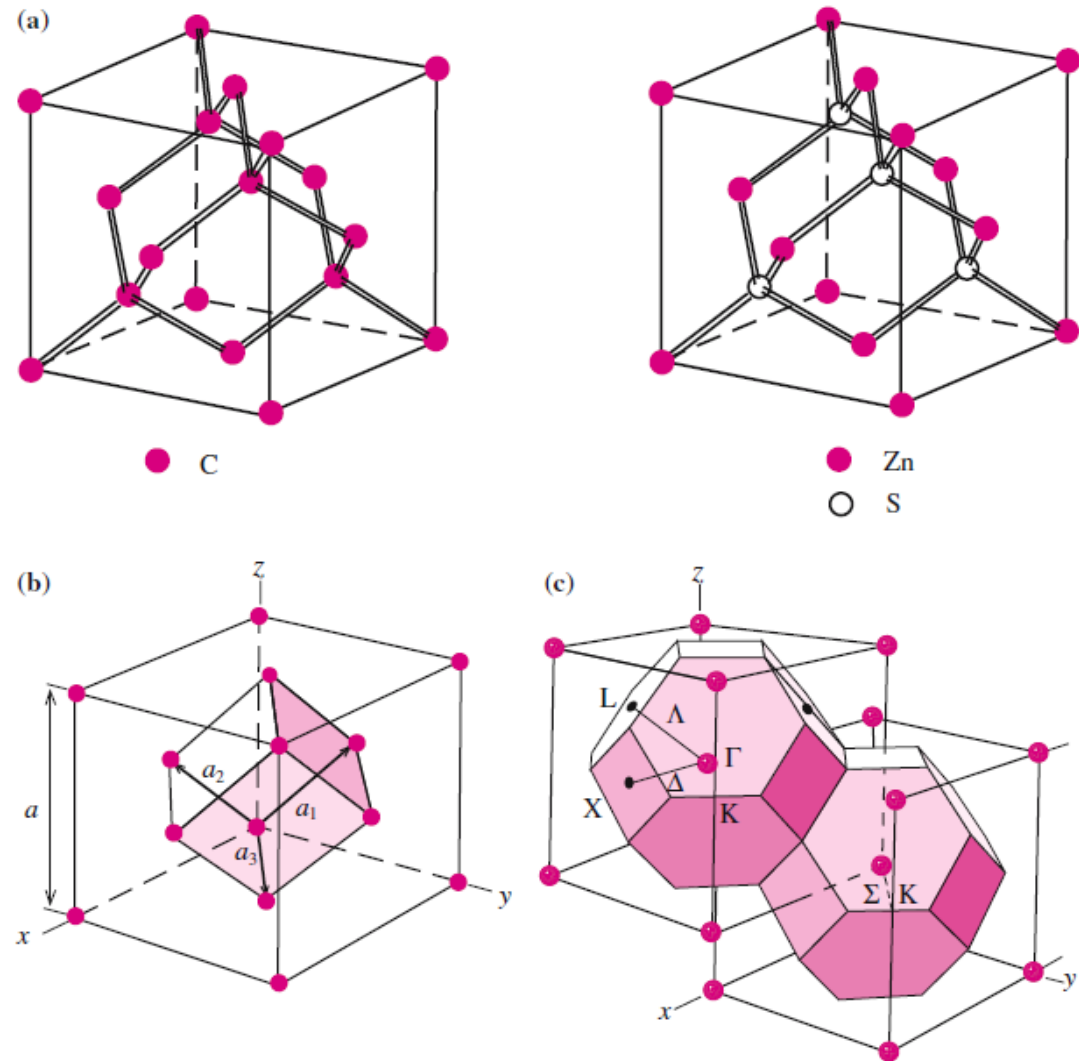


Fig. 2.2. (a) The crystal structure of diamond and zinc-blende (ZnS). (b) the fcc lattice showing a set of primitive lattice vectors. (c) The reciprocal lattice of the fcc lattice shown with the first Brillouin zone. Special high-symmetry points are denoted by Γ , X , and L , while high-symmetry lines joining some of these points are labeled as Λ and Δ

Metoda ciasnego wiązania - wnioski

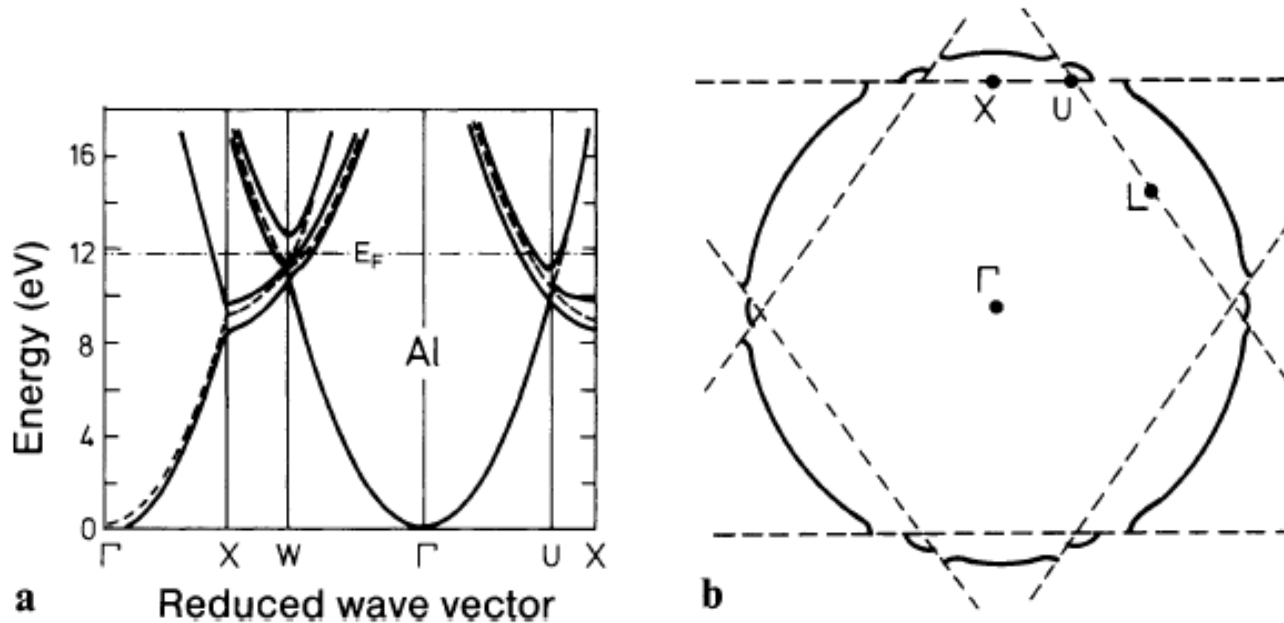
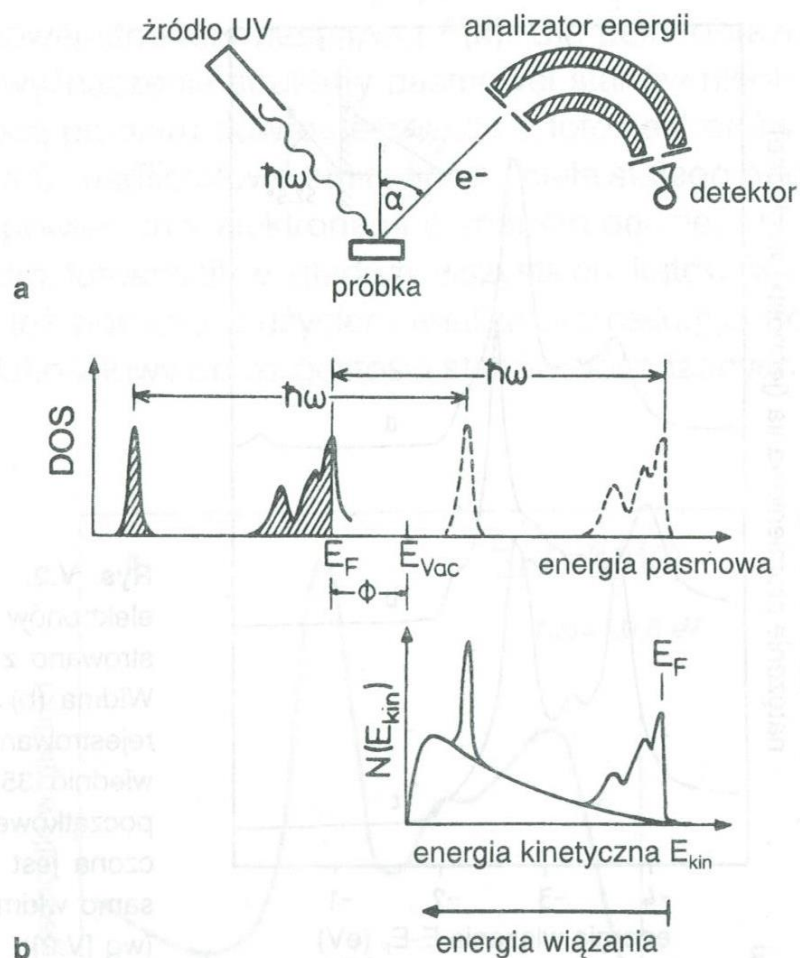


Fig. 7.11. (a) Theoretical bandstructure $E(k)$ for Al along directions of high symmetry (Γ is the center of the Brillouin zone). The dotted lines are the energy bands that one would obtain if the s - and p -electrons in Al were completely free ("empty" lattice). After [7.3]. (b) Cross section through the Brillouin zone of Al. The zone edges are indicated by the dashed lines. The Fermi "sphere" of Al (—) extends beyond the edges of the first Brillouin zone

Spektroskopia fotoemisyjna



$$\hbar\omega = \phi + E_{kin} + E_b$$

praca wyjścia bariera potencjału

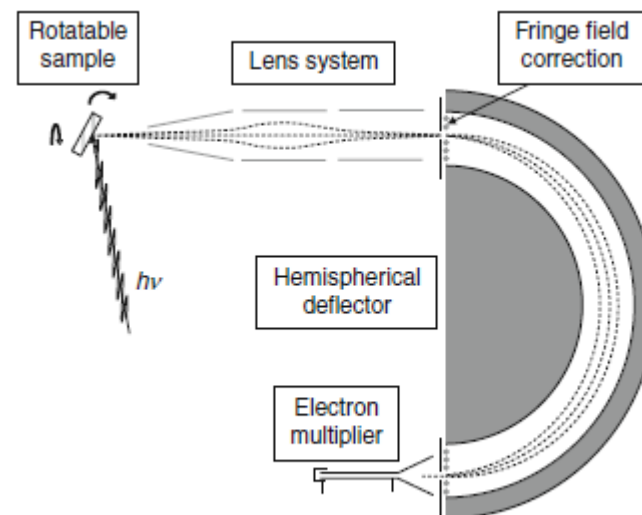


Fig. V.1. Experimental setup for photoemission spectroscopy

Spektroskopia fotoemisyjna

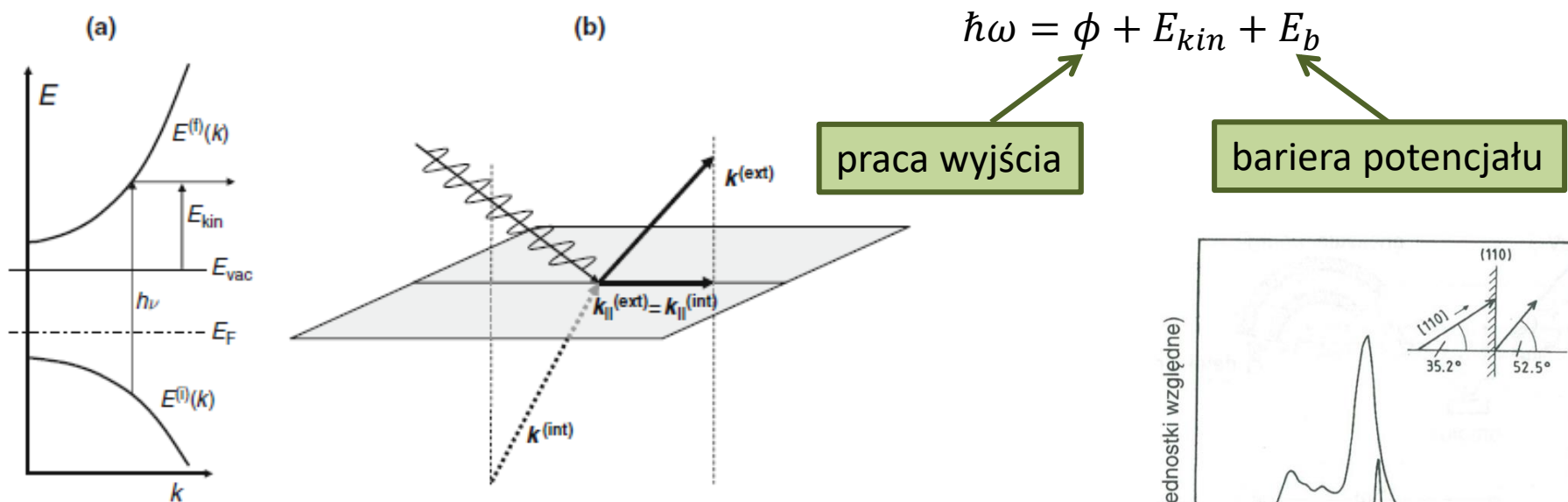
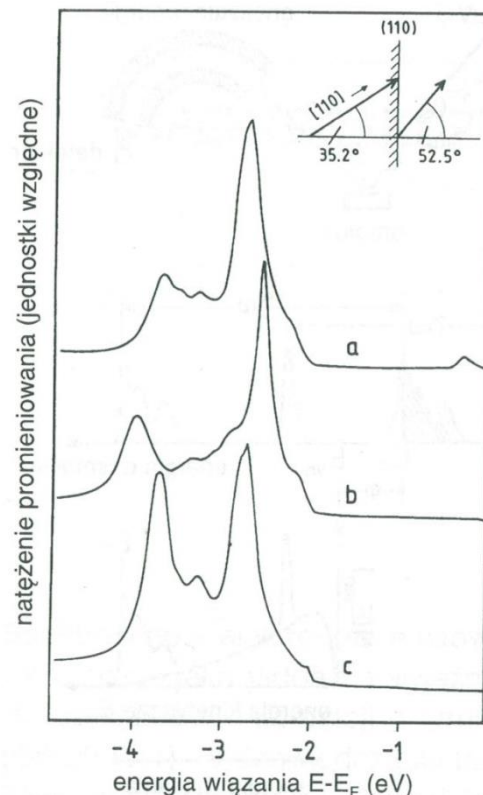


Fig. V.3. Illustration of the photoemission process. (a) A photon of energy $h\nu$ excites an electron from the initial state $E^{(i)}(k)$ to the final state $E^{(f)}(k)$ above the vacuum level E_{vac} . The kinetic energy of the photoemitted electron is $E_{kin} = E^{(f)}(k) - E_{vac}$. (b) The wave vectors of the electron inside $k^{(int)}$ and outside $k^{(ext)}$ have the same parallel components since the spatial phase $i\mathbf{r}_{||}k_{||}$ has to be identical to make the wave function continuous at any given point $\mathbf{r}_{||}$ of the surface

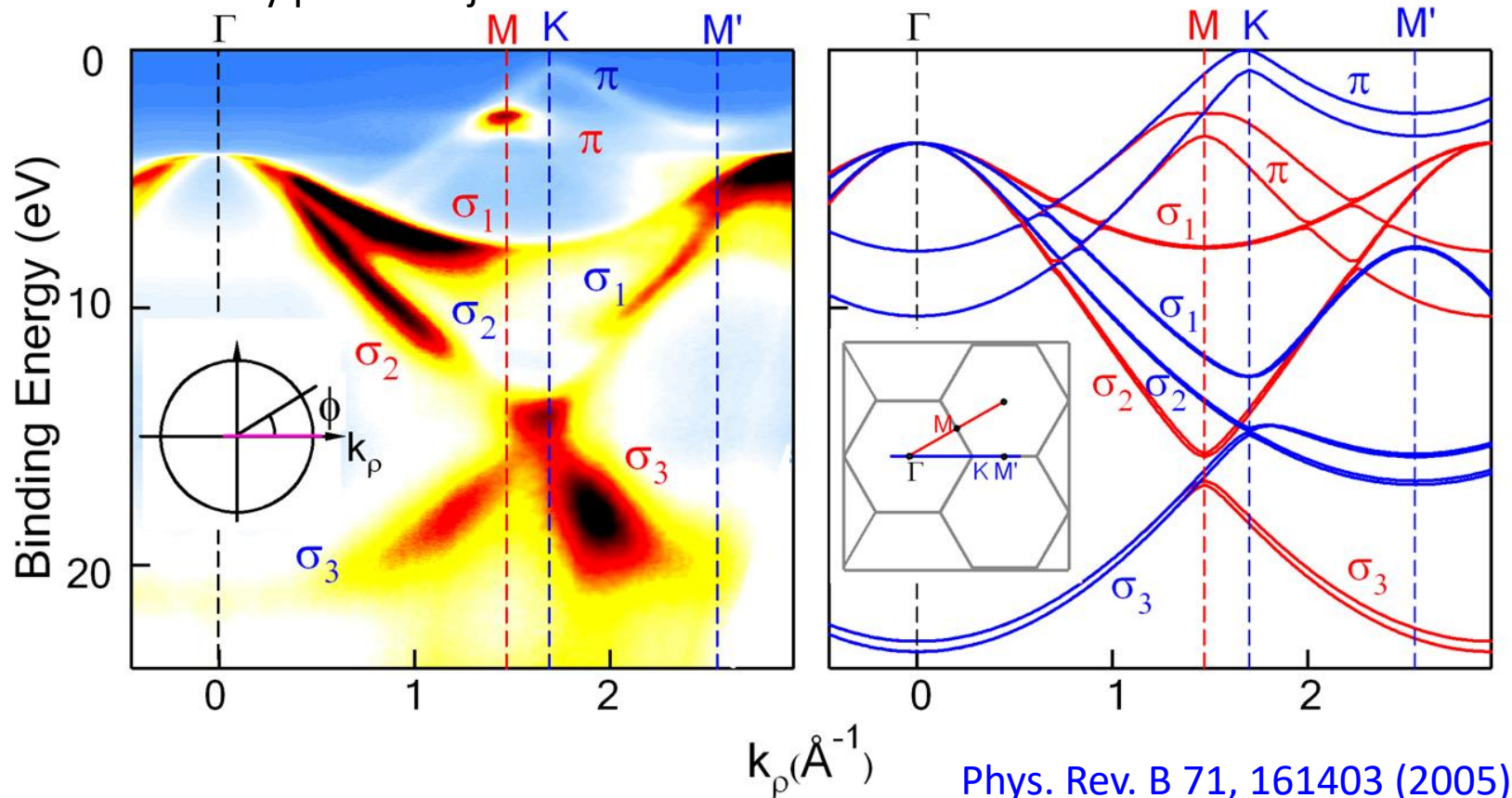
Rys. V.2. Pomiar rozkładu kątownego widma fotoelektronów z powierzchni miedzi. Widmo (a) zarejestrowano z powierzchni Cu(111) w kierunku [111]. Widma (b) i (c) pochodzą z powierzchni Cu(110) i rejestrowane były pod kątami biegunowymi odpowiednio $35,2^\circ$ i $52,5^\circ$. Wielkość wektora \mathbf{k} stanu początkowego odpowiadającego widmu (a) wyznaczona jest przez rzut wektora \mathbf{k} , dla którego takie samo widmo rejestrowane jest z powierzchni (110) (wg [V.2])



Spektroskopia fotoemisyjna

Struktura pasmowa ciał stałych

Wyznaczanie struktury pasmowej



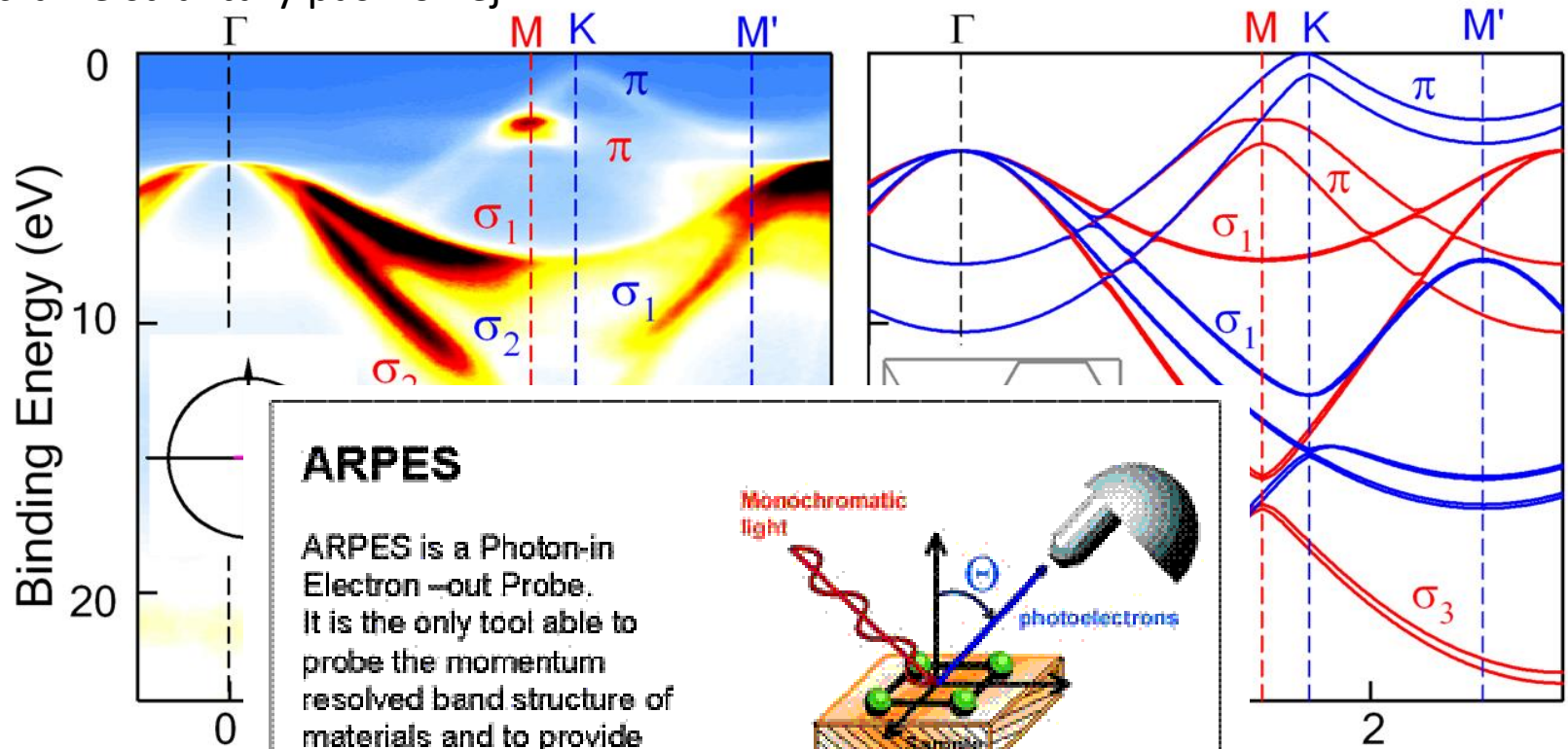
Phys. Rev. B 71, 161403 (2005)

<http://www.physics.berkeley.edu/research/lanzara/research/Graphite.html>

Spektroskopia fotoemisyjna

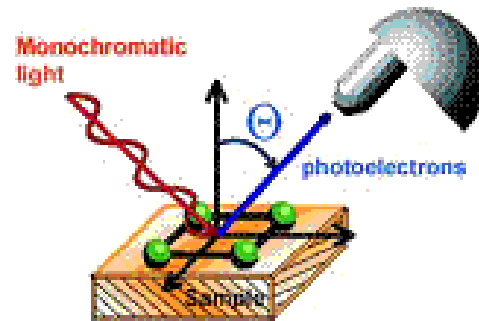
Struktura pasmowa ciał stałych

Wyznaczanie struktury pasmowej



ARPES

ARPES is a Photon-in Electron-out Probe. It is the only tool able to probe the momentum resolved band structure of materials and to provide direct insight on the many interaction in solids.

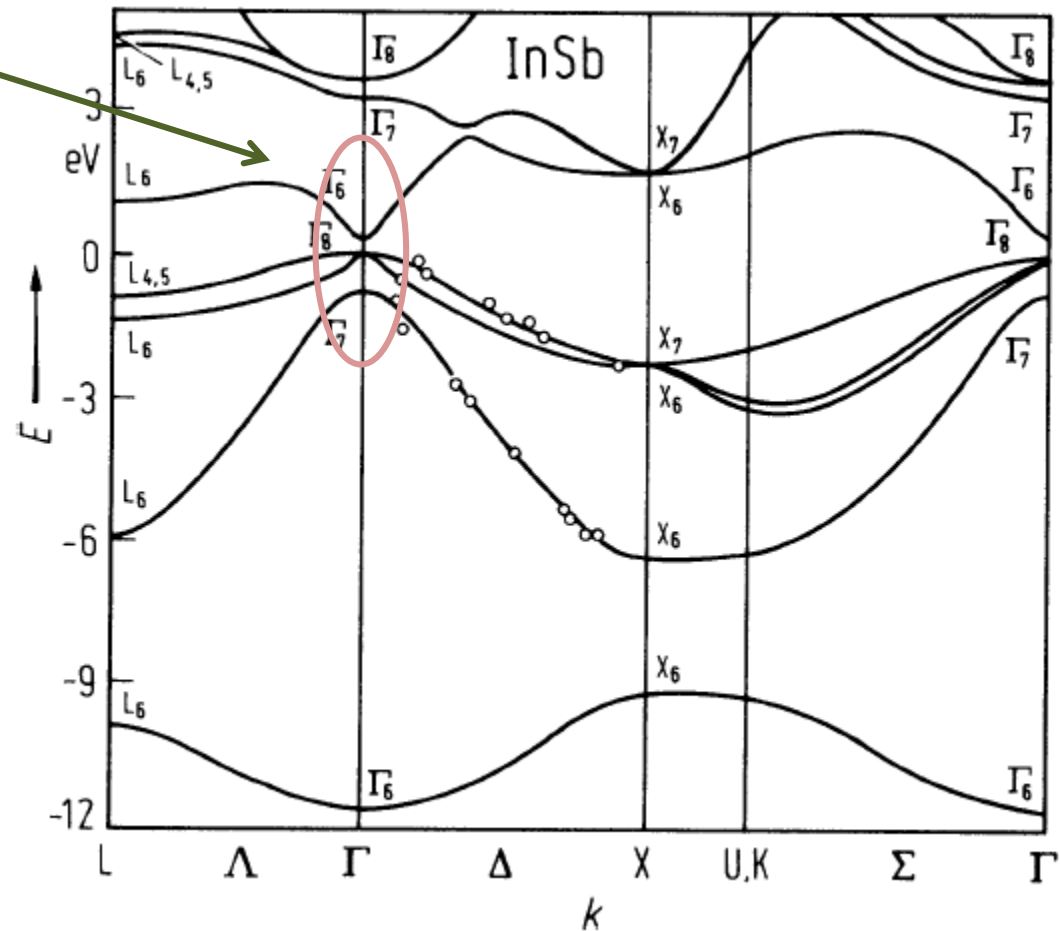


71, 161403 (2005)

ra/research/Graphite.html

Równanie kp – masa efektywna

Blisko leżące pasma



Rozwijamy $E_n(\vec{k}) = \left(E_n - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right)$ wokół punktu ekstremalnego, np. $k = 0$:

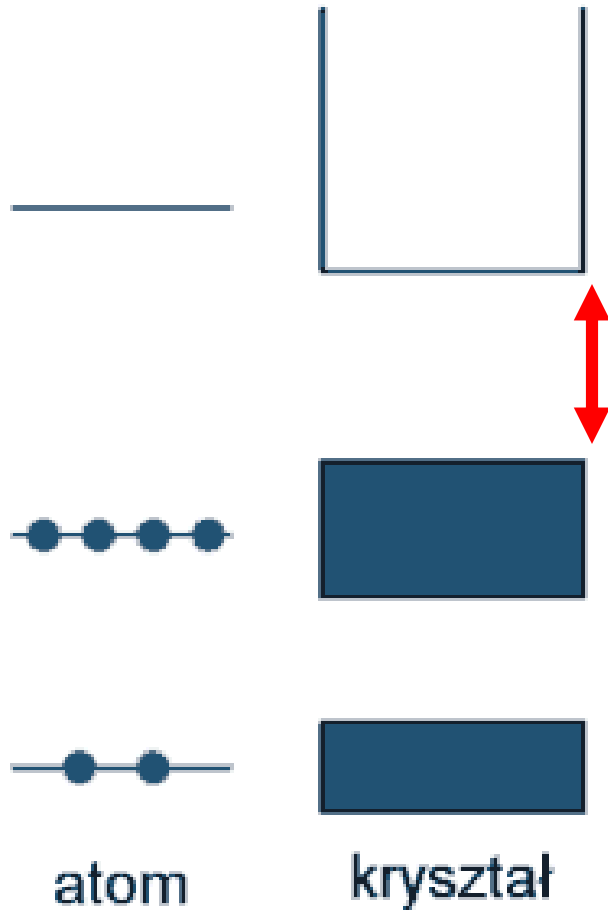
Landolt-Boernstein

Poziomy energetyczne



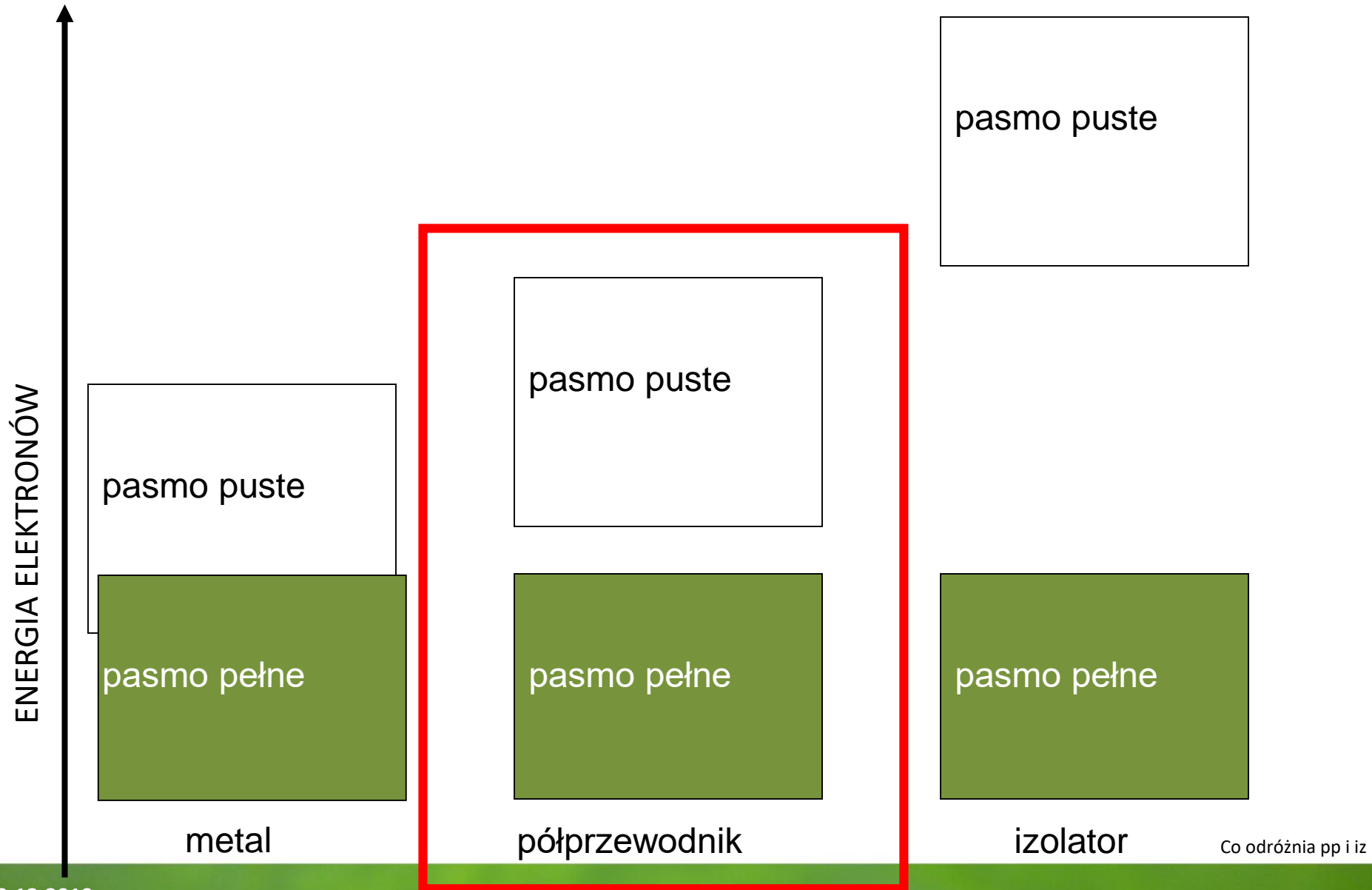
Teoria pasmowa ciał stałych.

Energia
 ε



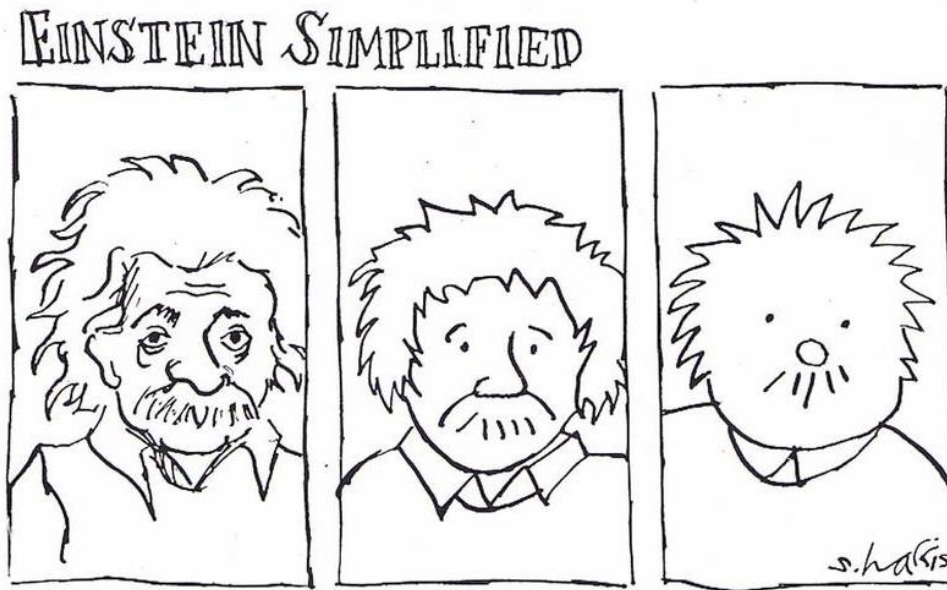
Przerwa energetyczna

Teoria pasmowa ciał stałych.



Struktura pasmowa ciał stałych

Make things as simple as possible, but not simpler.



Równanie kp – masa efektywna

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Wektor \vec{k} nie jest pędem (operator pędu $\hat{p} = -i\hbar\nabla$)

$$\hat{p}\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = -i\hbar \left(u_{n,\vec{k}} i\vec{k} + \nabla u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \right) e^{i\vec{k}\vec{r}} \neq \hbar\vec{k}\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Funkcja Blocha w równaniu Schrödingera:

$$\Delta\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \dots = \left(\Delta u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) + 2i\vec{k}\nabla u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) - \vec{k}^2 u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \right) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Po wstawieniu do równania i uproszczeniu przez $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ dostajemy równanie na $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{\hbar}{m} i\vec{k}\nabla + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k}\hat{p} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Równanie Schrodingera na obwiednię $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k}\hat{p} + V(\vec{r}) \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(E_n - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Równanie kp – masa efektywna

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Wektor \vec{k} nie jest pędem (operator pędu $\hat{p} = -i\hbar\nabla$)

$$\hat{p}\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = -i\hbar \left(u_{n,\vec{k}} i\vec{k} + \nabla u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \right) e^{i\vec{k}\vec{r}} \neq \hbar\vec{k}\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Funkcja Blocha w równaniu Schrödingera:

$$\Delta\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \dots = \left(\Delta u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) + 2i\vec{k}\nabla u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) - \vec{k}^2 u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \right) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Po wstawieniu do równania i uproszczeniu przez $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ dostajemy równanie na $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{\hbar}{m} i\vec{k}\nabla + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k}\hat{p} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Równanie Schrodingera na obwiednię $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k}\hat{p} + V(\vec{r}) \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(E_n - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Równanie kp – masa efektywna

Równanie Schrodingera na obwiednię $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \hat{p} + V(\vec{r}) \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(E - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Jest to tzw. równanie kp wykorzystywane do obliczeń energii i funkcji falowych wokół pewnego znanego rozwiązania dla $\vec{k} = \vec{k}_0$.

Pełny hamiltonian

$$\hat{H}_{\vec{k}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \left(\hat{H}_{\vec{k}_0} + \hat{H}' \right) u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Zaburzenie:

$$\hat{H}' = \frac{\hbar}{m} (\vec{k} - \vec{k}_0) \hat{p}$$

Funkcję $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ oraz energię $E_n(\vec{k})$ znajdujemy w rachunku zaburzeń

Równanie kp – masa efektywna

Rozwijamy $E_n(\vec{k}) = \left(E_n - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\right)$ wokół punktu ekstremalnego, np. $k = 0$:

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + H'_{nn} + \sum_{l \neq n} \frac{|H'_{nl}|^2}{E_n(0) - E_l(0)} + \dots$$

Dla

$$H'_{nl} = \int u_{n,0}(\vec{r}) \hat{H}' u_{l,0}(\vec{r}) d^3r = -\frac{i\hbar}{m} \vec{k} \int u_{n,0}(\vec{r}) \nabla u_{l,0}(\vec{r}) d^3r = \sum_{i=1}^3 a_i k_i$$

Liniowe w \vec{k}

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \sum_{i=1}^3 a_i k_i + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \delta_{ij} + b_{ij} \right) k_i k_j + \dots$$

W ekstremum człony liniowe znikają

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{1}{m^*} \right) \frac{\hbar^2 k_i k_j}{2} + \dots$$

Równanie kp – masa efektywna

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{1}{m_{ij}^*} \right) \frac{\hbar^2 k_i k_j}{2} + \dots$$

Wprowadzamy tzw. tensor odwrotności masy efektywnej:

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{\delta_{ij}}{m} + \frac{2\hbar^2}{m^2} \sum_{l \neq n} \frac{\int u_{n,0} \frac{\partial}{\partial x_i} u_{l,0} d^3r \cdot \int u_{n,0} \frac{\partial}{\partial x_j} u_{l,0} d^3r}{E_n(0) - E_l(0)}$$

Tensor jest symetryczny ($m_{ij} = m_{ji}$). Jeśli ekstremum energii jest w punkcie $\Gamma(\mathbf{k}=0)$ to powierzchnia stałej energii jest elipsoidą w przestrzeni \vec{k} , która po sprowadzeniu do osi głównych ma postać:

$$E_n(\vec{k}) \approx E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{m_1^*} + \frac{k_2^2}{m_2^*} + \frac{k_3^2}{m_3^*} \right)$$

Gdzie m_i^* to masy efektywne w kierunku osi głównych.

Równanie kp – masa efektywna

Energia $E_n(\mathbf{k})$ wokół ekstremum dla kryształu jednoosiowego (np. GaN):

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{m_{\perp}^*} + \frac{k_3^2}{m_{\parallel}^*} \right)$$

Dla kryształu kubicznego:

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad \text{tzw. pasmo sferyczne}$$

W pobliżu ekstremum (np. punkt $\Gamma(\mathbf{k}=0)$) możemy ograniczyć się do przybliżenia parabolicznego – **pasmo paraboliczne**.

W ogólności w zależności energii od wektora falowego występują człony wyższego rzędu, które zostały zaniedbane (wyższe rzędy rachunku zaburzeń).

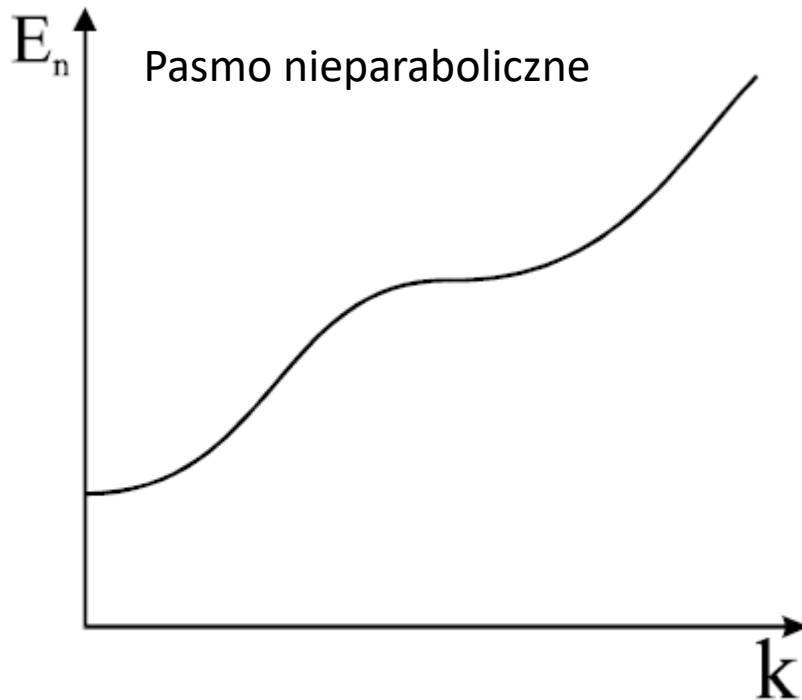
W ogólności energia elektronu jest funkcją składowych wektora falowego $\mathbf{k}=(k_1, k_2, k_3)$.

Powierzchnia stałej energii w ogólnym przypadku może mieć skomplikowany charakter, a jej kształt zależy od wszystkich pasm.

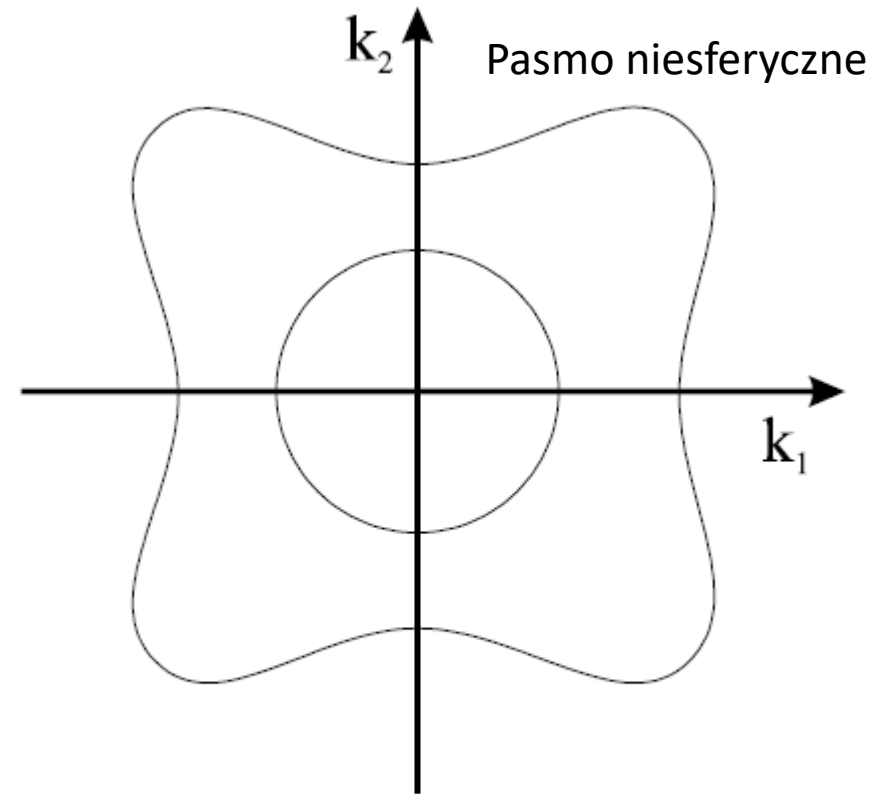
Badanie tensora masy efektywnej to jeden z głównych problemów fizyki ciała stałego.

Równanie kp – masa efektywna

Energia $E_n(\mathbf{k})$ wokół ekstremum



Przykładowa zależność energii stanów pasma n od wektora falowego \mathbf{k} .



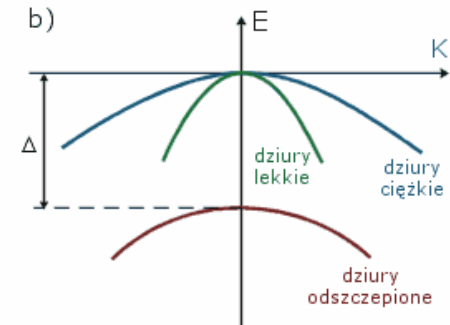
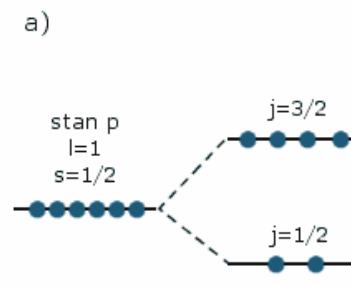
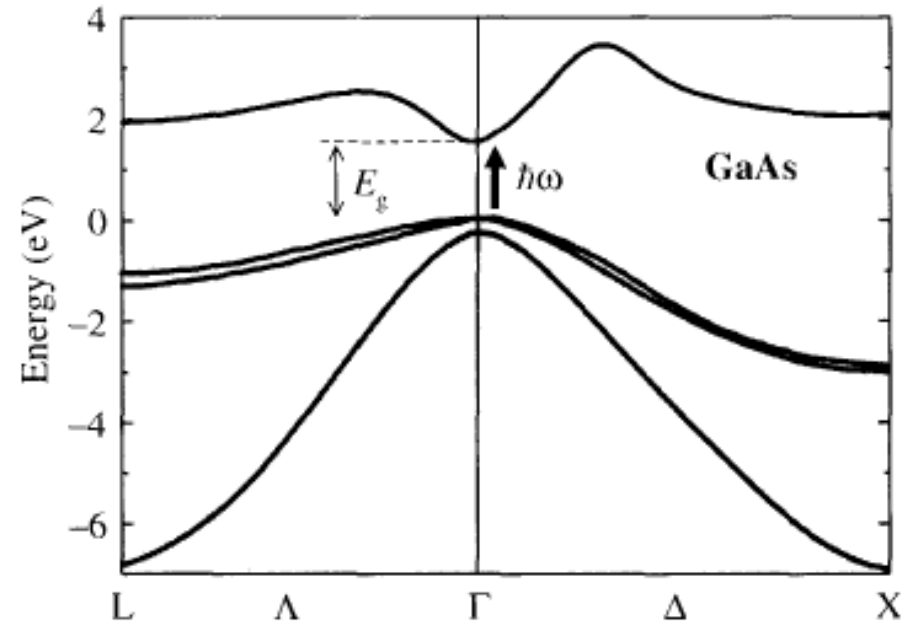
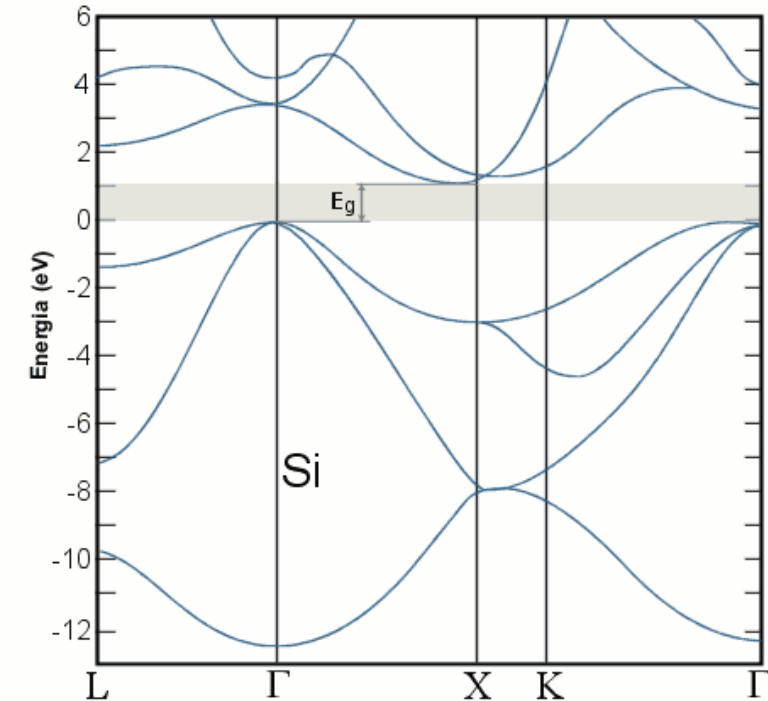
Przykładowe powierzchnie stałej energii w dwuwymiarowej przestrzeni \mathbf{k} .

R. Stępniewski

Równanie kp – masa efektywna

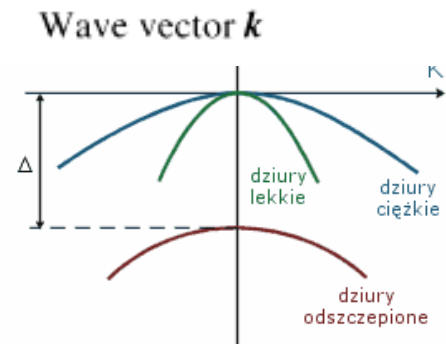
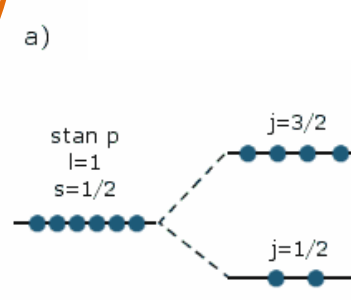
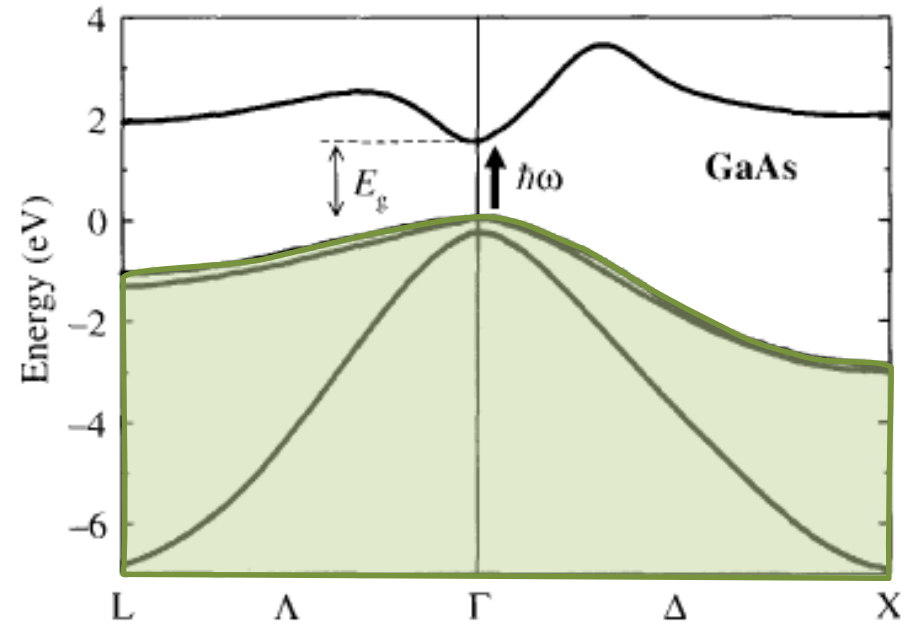
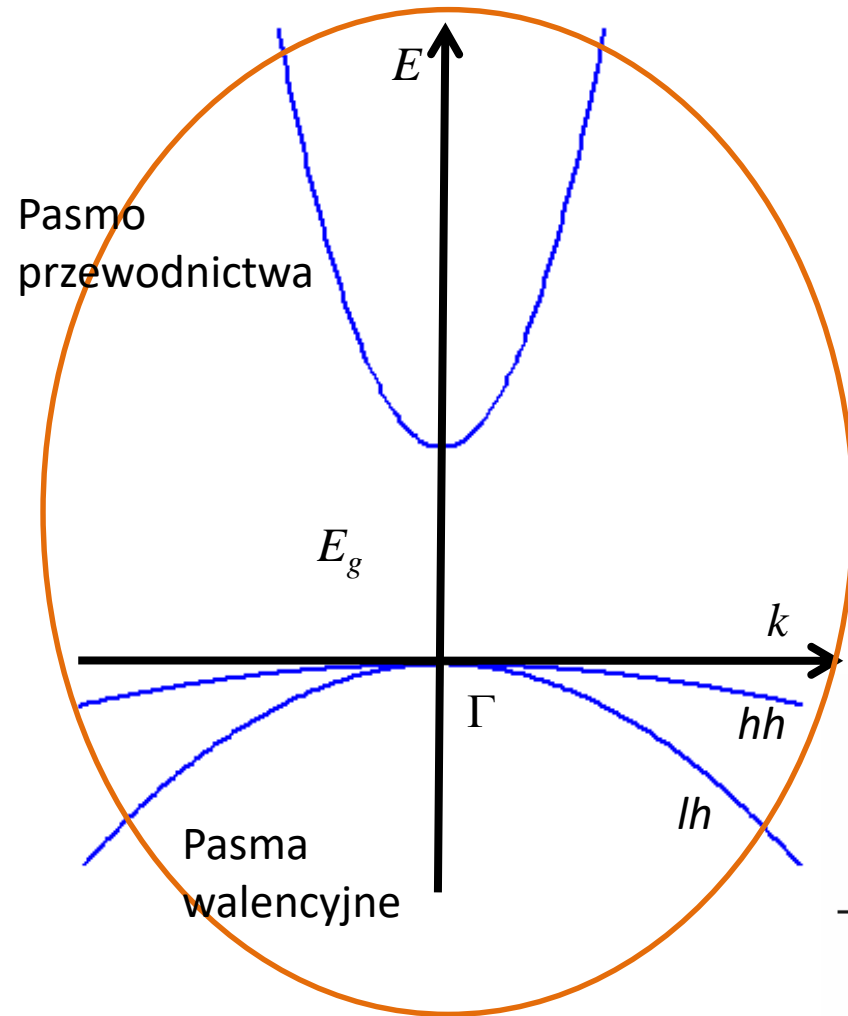
Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:



Równanie kp – masa efektywna

Struktura pasmowa ciał stałych



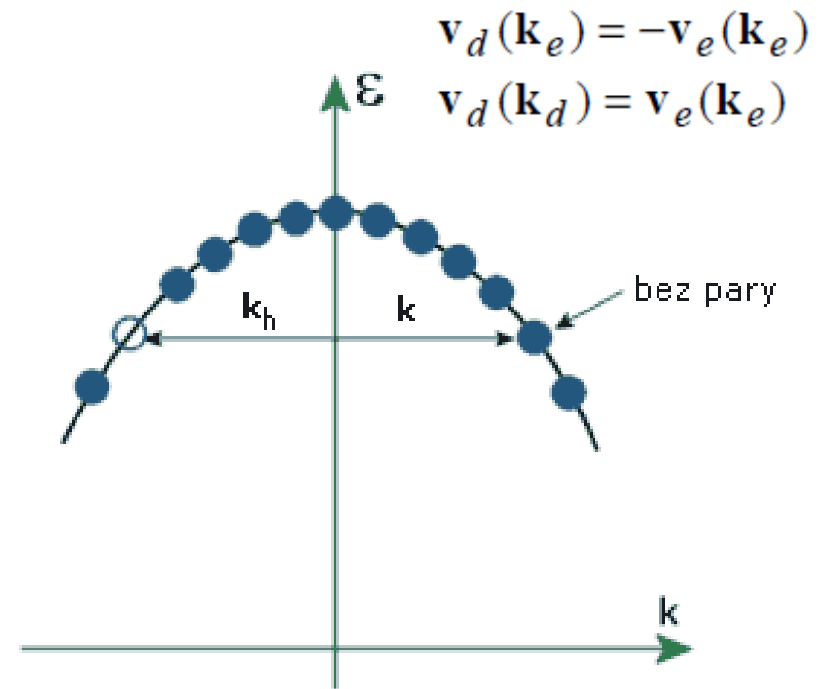
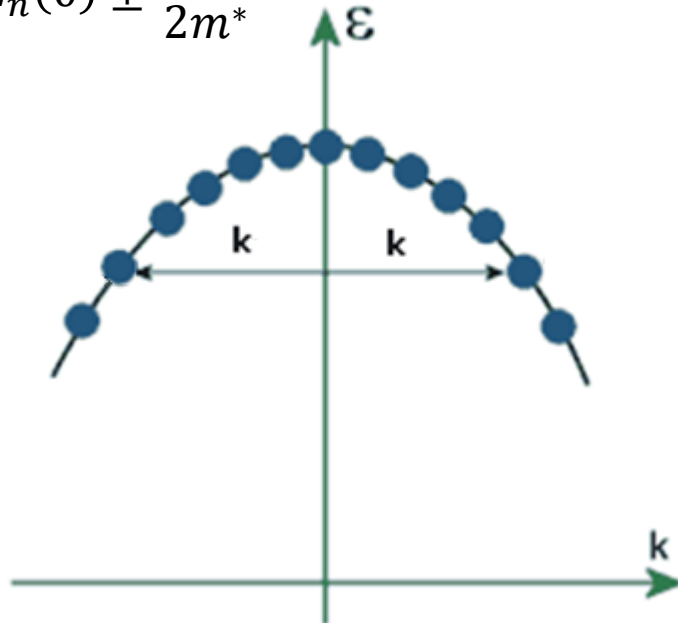
Równanie kp – masa efektywna

The energy $E_n(\mathbf{k})$ around extremum for the uniaxial crystal (np. GaN):

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{m_{\perp}^*} + \frac{k_3^2}{m_{\parallel}^*} \right)$$

For a cubic crystal:

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) \pm \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$



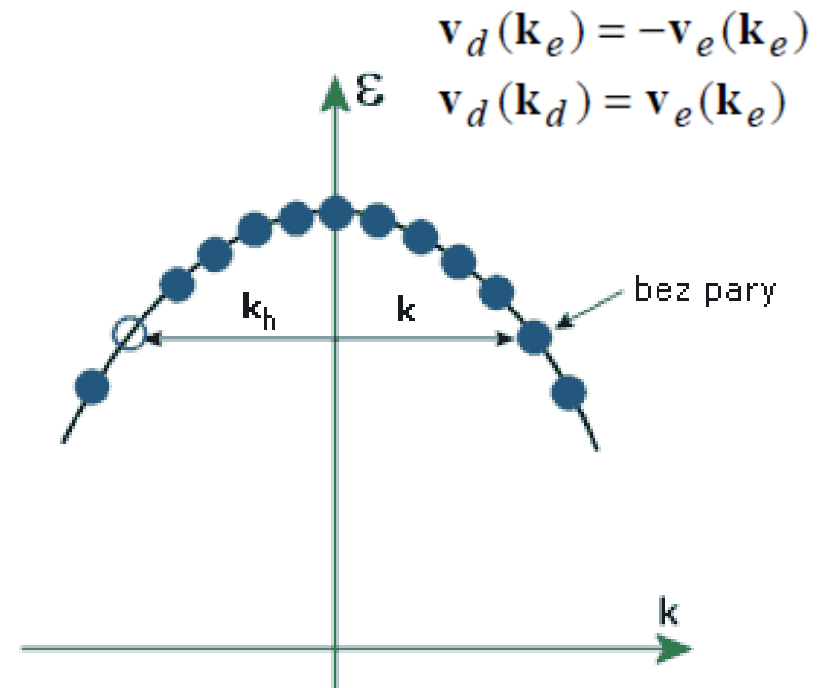
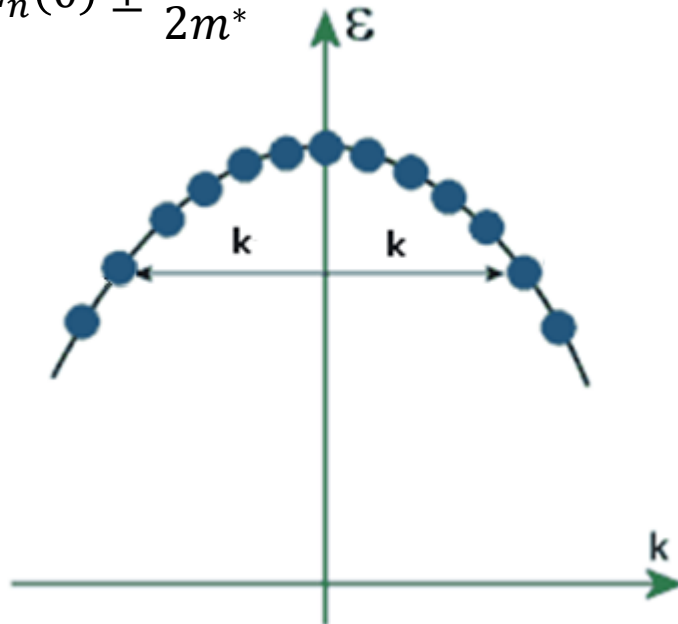
Równanie kp – masa efektywna

Elektrony i dziury

$$f_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} f(\mathbf{k}_i)$$

$$\mathbf{k}_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} \mathbf{k}_i = \sum_{i=1}^{2N} \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) \pm \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$



Tight-Binding Approximation

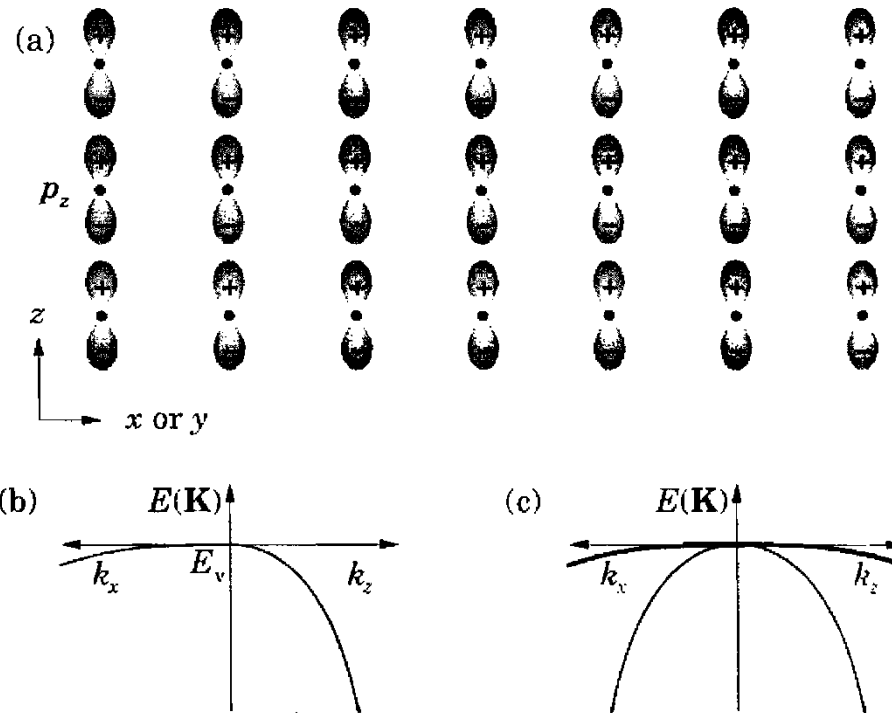


FIGURE 2.17. Valence bands constructed from p orbitals. (a) Lattice of p_z orbitals. (b) Band structure of the p_z orbitals only; the band is 'light' along k_z to the right and 'heavy' along k_x (or k_y) to the left. (c) Total bands from all three p orbitals, showing a doubly degenerate 'heavy' band and a single 'light' band.

Równanie kp – masa efektywna

Elektrony i dziury

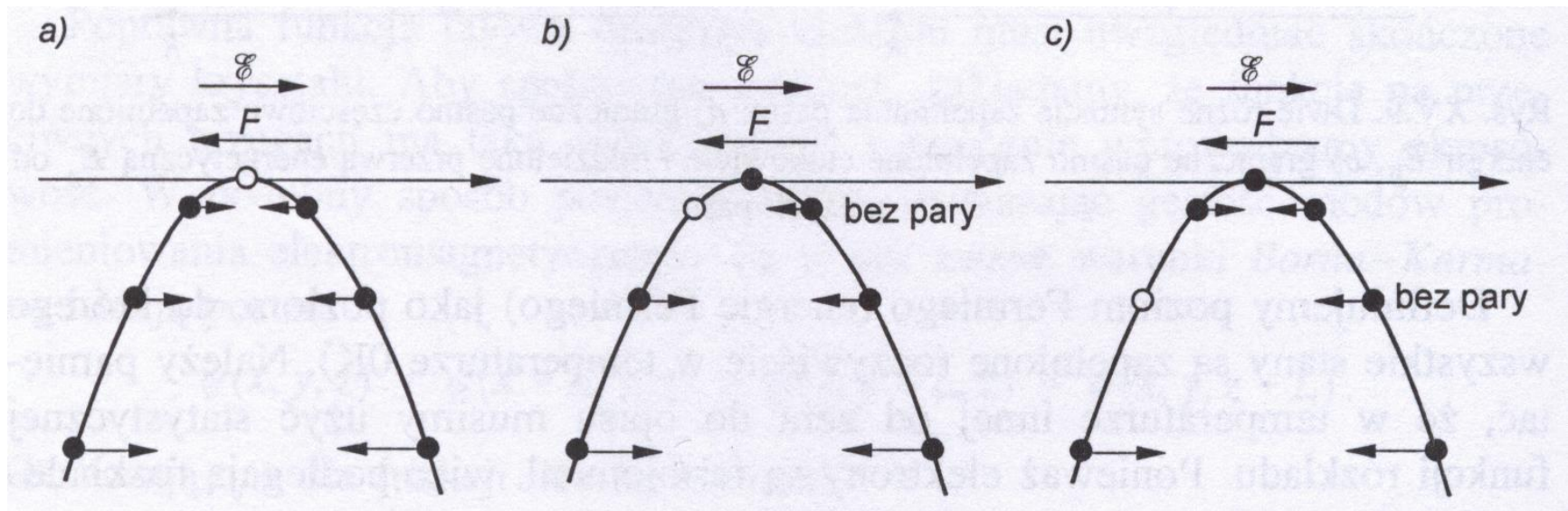
$$f_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} f(\mathbf{k}_i)$$

$$\mathbf{k}_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} \mathbf{k}_i = \sum_{i=1}^{2N} \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) \pm \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$\mathbf{v}_d(\mathbf{k}_e) = -\mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$$

$$\mathbf{v}_d(\mathbf{k}_d) = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$$



Potencjał kulombowski (ekscyton)

NAJPIERW:

Potencjał kulombowski 3D w półprzewodniku o stałej dielektrycznej ϵ_r , masie efektywnej m^* :

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

$$Ry = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{m}{2\hbar^2} = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} = 13.6 \text{ eV}$$

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_0e^2} = 0.5 \text{ \AA}$$

$$E_n = -Ry \frac{1}{n^2}$$

$$E_n = -\left(\frac{m^*}{m_0}\right) \frac{1}{\epsilon_r^2} Ry \frac{1}{n^2}$$

$$a_B^* = \frac{4\pi\epsilon_r\epsilon_0\hbar^2}{m_0e^2} \left(\frac{m_0}{m^*}\right) = a_B \epsilon_r \left(\frac{m_0}{m^*}\right)$$

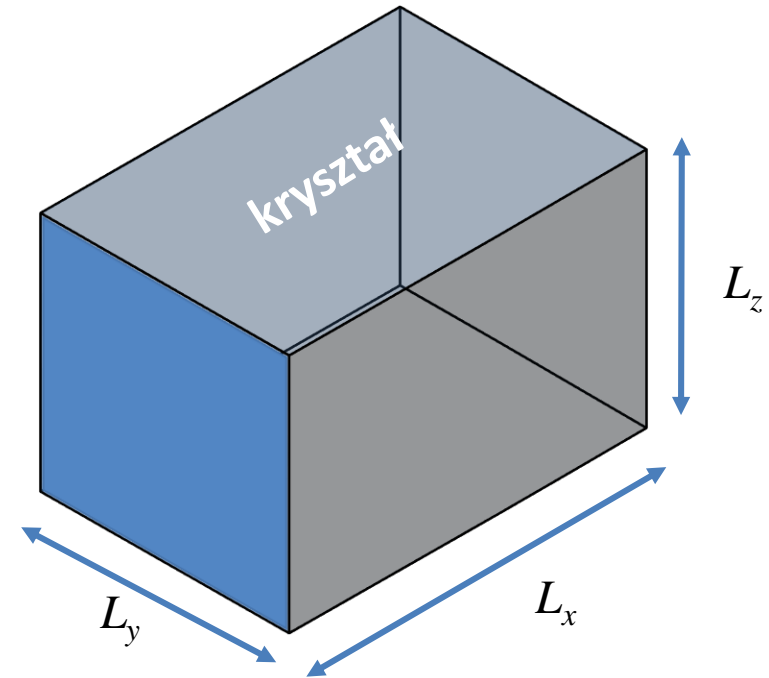
Potencjał periodyczny

W przypadku funkcji Blocha $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}$:

$$\begin{aligned}\varphi_{\vec{k}}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) &= u_{\vec{k}}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j) e^{i\vec{k}(\vec{r} + N_j \vec{a}_j)} \\ &= u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{k}N_j \vec{a}_j}\end{aligned}$$

Musimy zażądać, żeby $e^{i\vec{k}N_j \vec{a}_j} = 1$

$$\vec{k}_j = 0, \pm \frac{2\pi}{L_j}, \pm \frac{4\pi}{L_j}, \dots, \pm \frac{2\pi N_j}{L_j}$$



dozwolone wektory falowe stanowią dyskretną sieć punktów równomiernie rozłożoną w przestrzeni wektora falowego; komórkę elementarną sieci odwrotnej (strefę Brillouina) wypełnia

$$N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$$

takich punktów. Tyle też będzie stanów w każdym paśmie. N_1, N_2, N_3 mogą być różne, ale najczęściej przyjmujemy takie same

Gęstość stanów

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów \mathbf{k} jest skończony (choć olbrzymi!), np. możemy przyjąć okresowe warunki brzegowe i wtedy:

Warunki Born-Karmana

Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

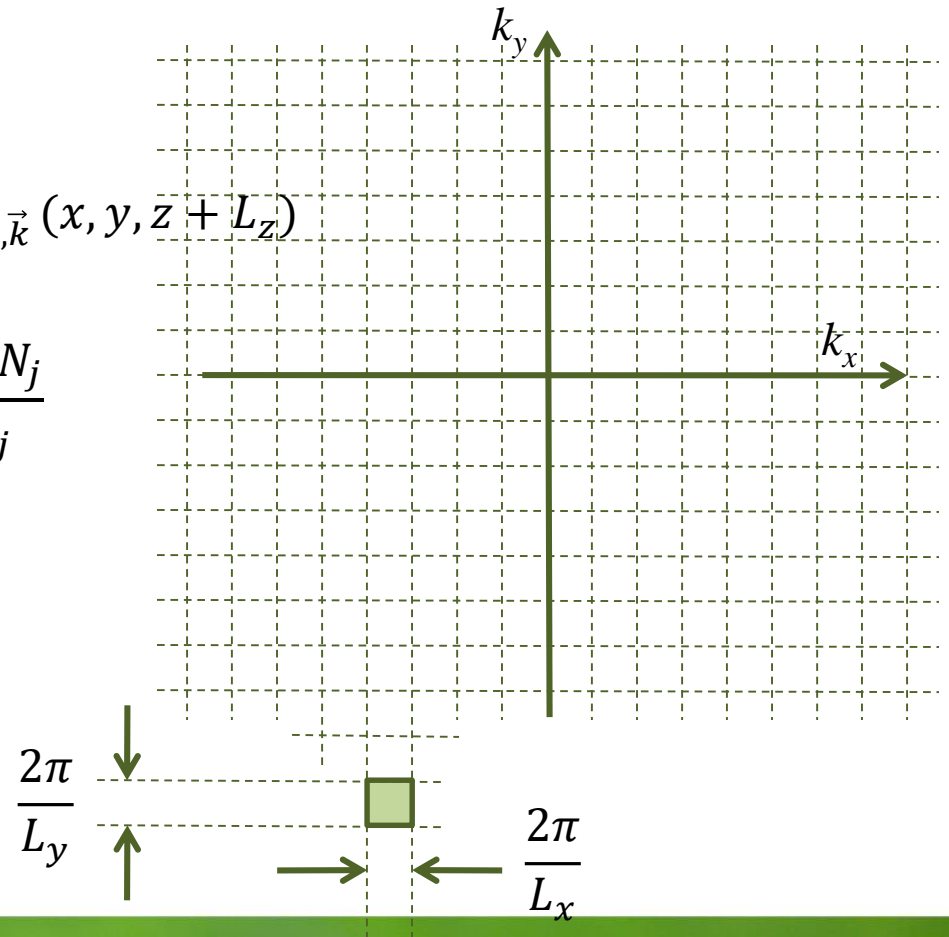
$\psi_{n,\vec{k}}$ – postać funkcji Blocha

$$\psi_{n,\vec{k}}(x + L_x, y, z) = \psi_{n,\vec{k}}(x, y + L_y, z) = \psi_{n,\vec{k}}(x, y, z + L_z)$$

$$\begin{aligned} e^{ik_x L_x} &= 1 \\ e^{ik_y L_y} &= 1 \\ e^{ik_z L_z} &= 1 \end{aligned}$$

$$\vec{k}_j = 0, \pm \frac{2\pi}{L_j}, \pm \frac{4\pi}{L_j}, \dots, \pm \frac{2\pi N_j}{L_j}$$

$$\text{Ilość stanów w objętości} = \frac{2}{\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} \times \frac{2\pi}{L_z}} = \frac{2V}{(2\pi)^3}$$



Gęstość stanów

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Gęstość stanów w przestrzeni k o wymiarach n (w jednostkowej objętości) $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^n$

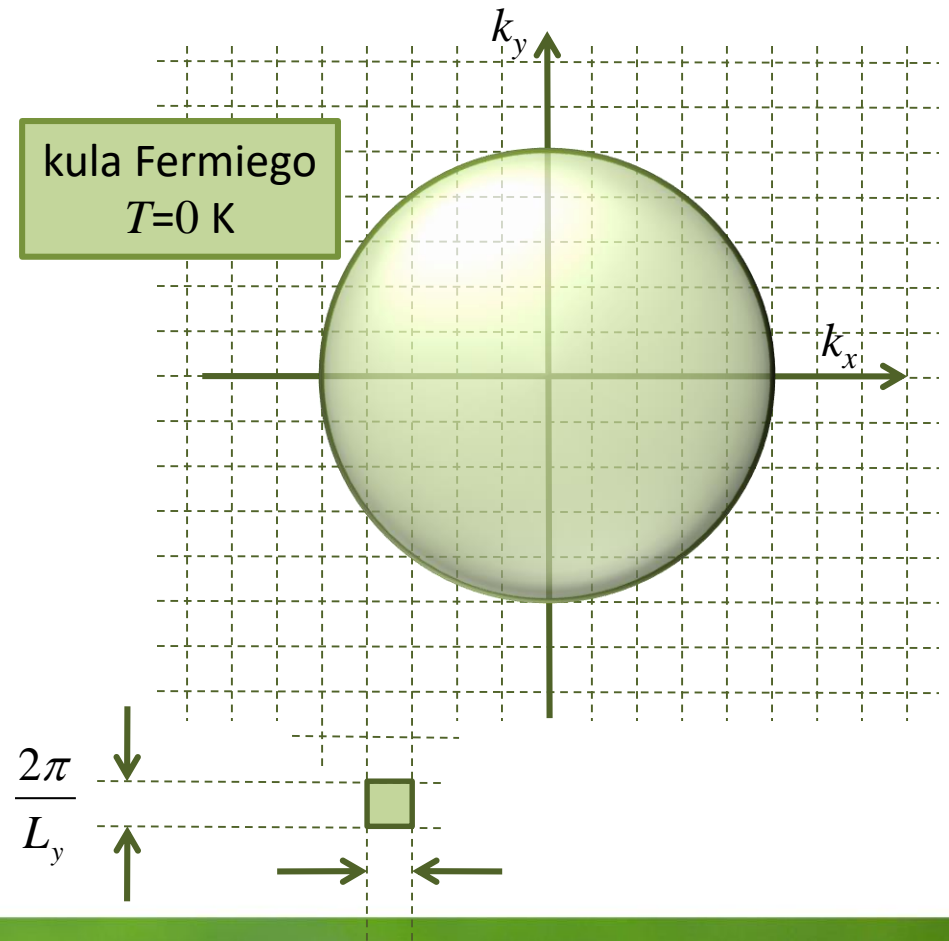
Przypadek 3D

$$\rho^{3D}(E)dE = \rho_k^{3D}d\vec{k} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 4\pi k^2 dk$$

Dla pasma sferycznego i parabolicznego:

$$\rho_c^{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_0 m_c^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c}$$

$$\rho_v^{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_0 m_h^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E}$$



Gęstość stanów

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Gęstość stanów w przestrzeni k o wymiarach n (w jednostkowej objętości) $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^n$

Przypadek 3D

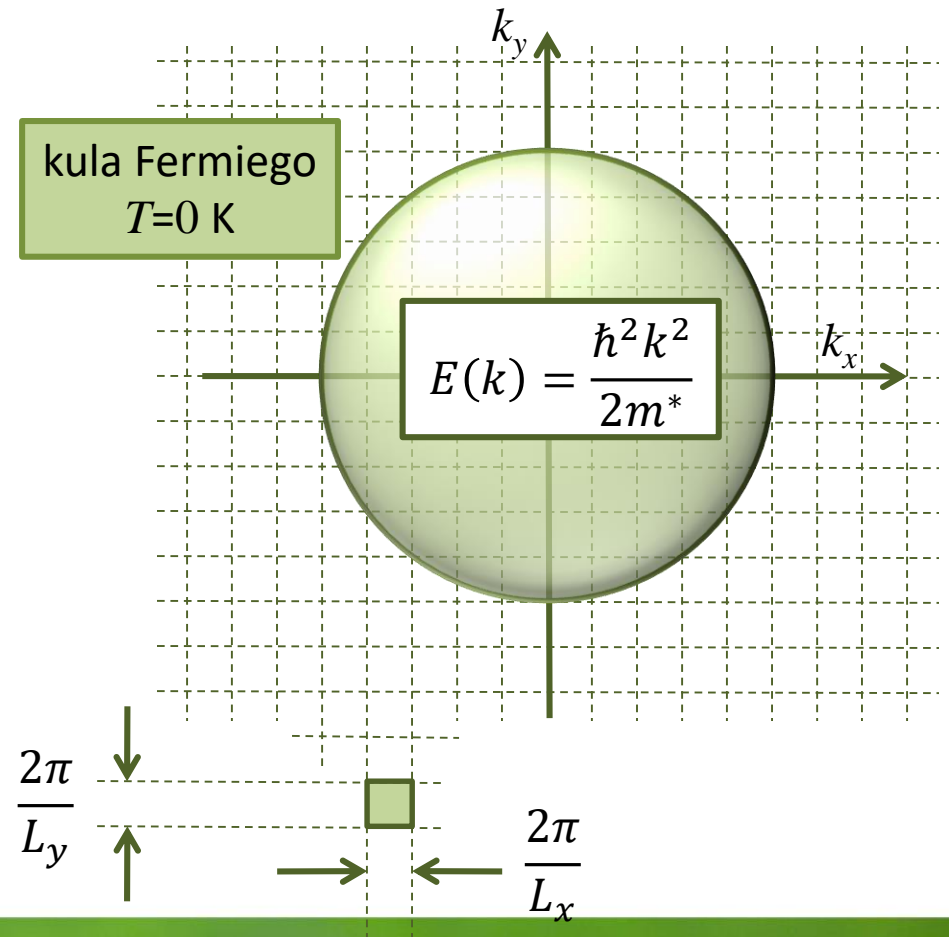
$$\rho^{3D}(E)dE = \rho_k^{3D}d\vec{k} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 4\pi k^2 dk$$

Przypadek 2D

$$\rho^{2D}(E)dE = \rho_k^{2D}d\vec{k} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 2\pi k dk$$

Przypadek 1D

$$\rho^{1D}(E)dE = \rho_k^{1D}d\vec{k} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^1 2 dk$$



Gęstość stanów 3D

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Gęstość stanów w przestrzeni k o wymiarach n (w jednostkowej objętości) $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^n$

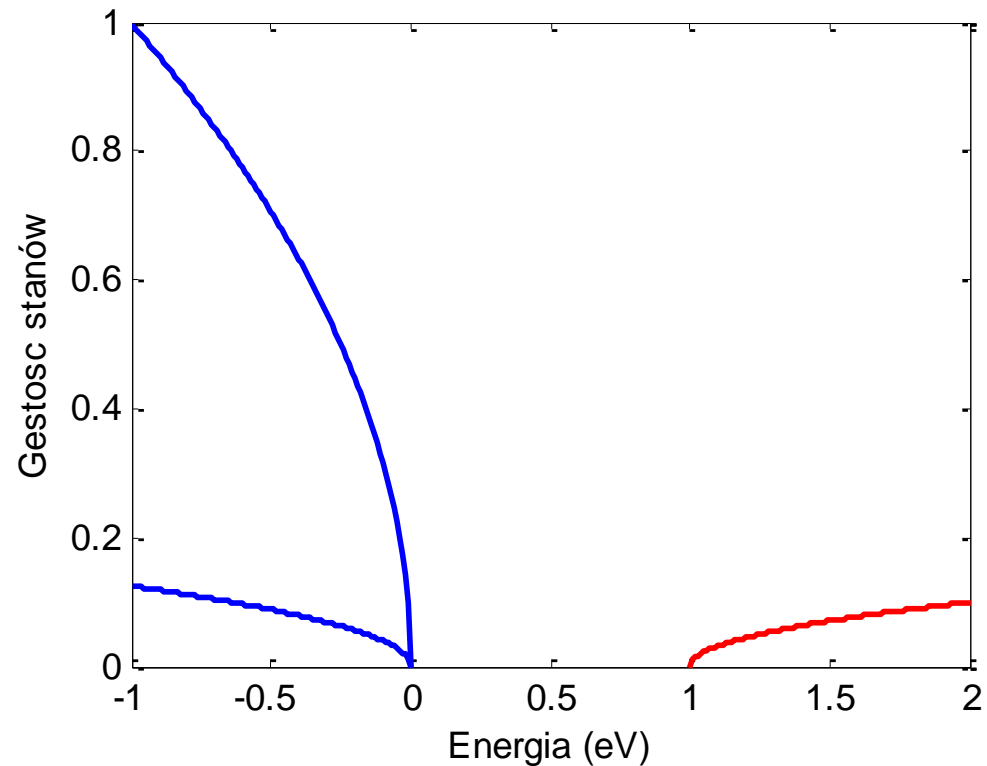
Przypadek 3D

$$\rho^{3D}(E)dE = \rho_k^{3D}d\vec{k} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 4\pi k^2 dk$$

Dla pasma sferycznego i parabolicznego:

$$\rho_c^{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_0m_c^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c}$$

$$\rho_v^{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_0m_h^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E}$$



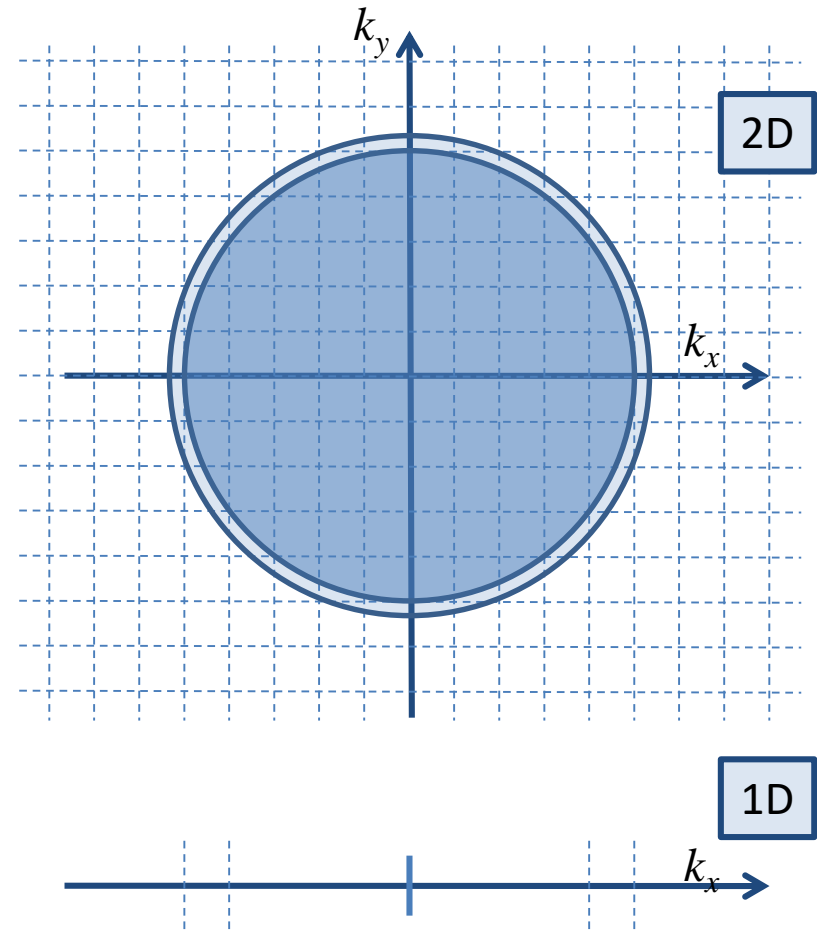
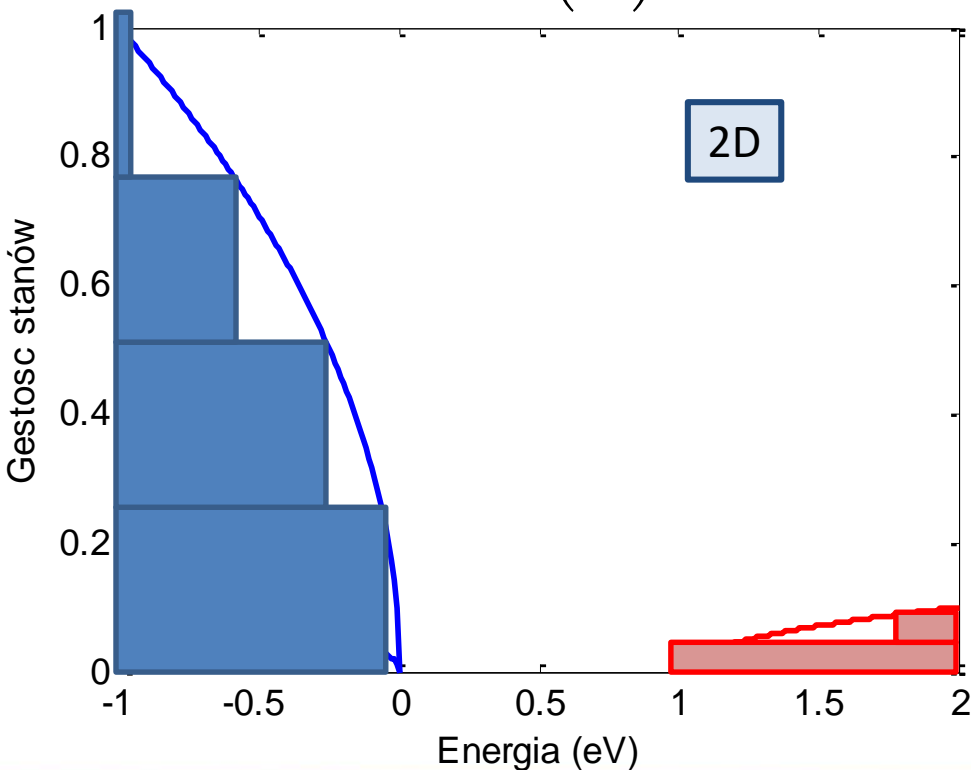
Gęstość stanów

Gęstość stanów Ilość stanów na jednostkę energii $\rho^{nD}(E)$ (zależy od ilości wymiarów)

Gęstość stanów w przestrzeni k o wymiarach n (w jednostkowej objętości) $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^n$

Przypadek 2D

$$\rho^{2D}(E)dE = \rho_k^{2D} d\vec{k} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 2\pi k dk$$



Gęstość stanów

Wewnątrz studni:

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) e^{-i\omega t}$$

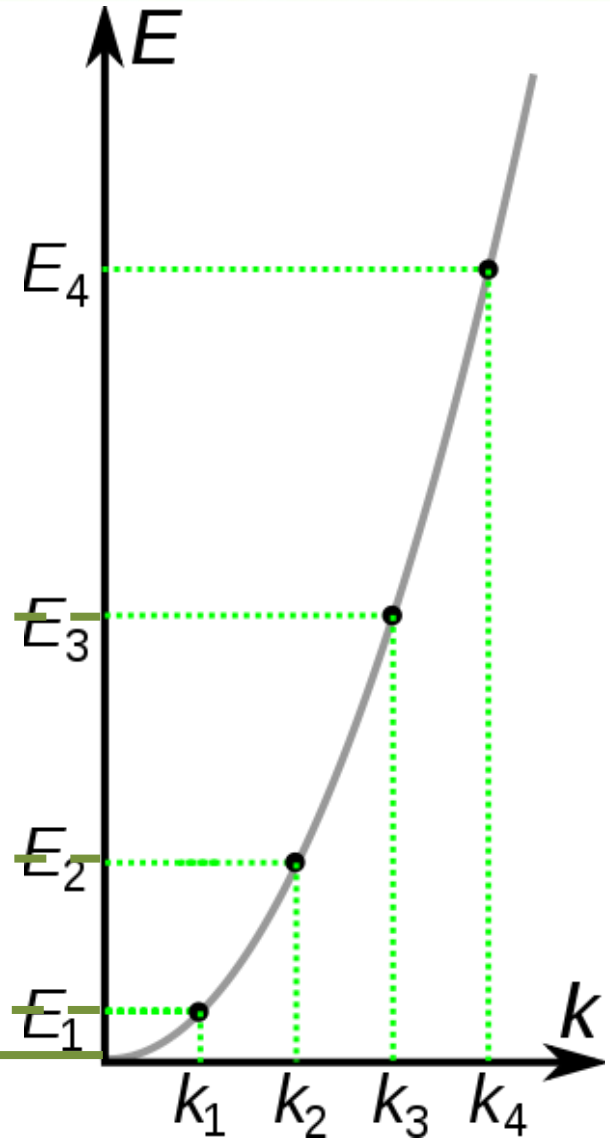
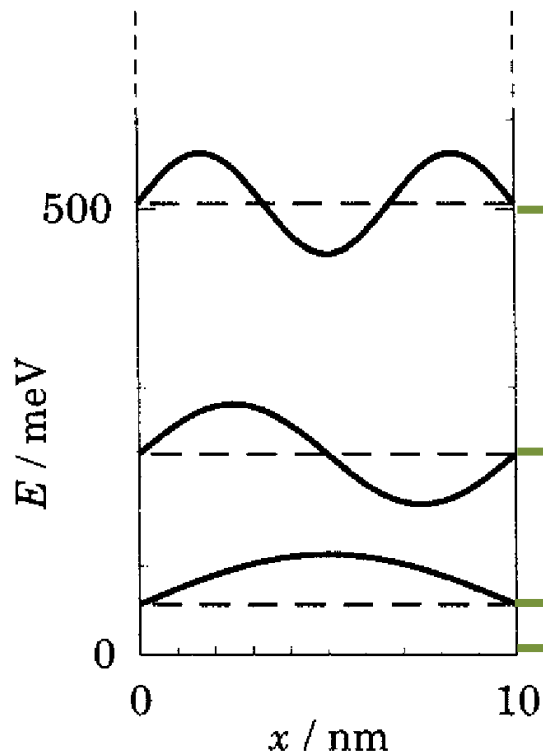
$$k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}$$

$$\varepsilon_3 = E_c + \frac{9\hbar^2 \pi^2}{2m_0 m^* L^2}$$

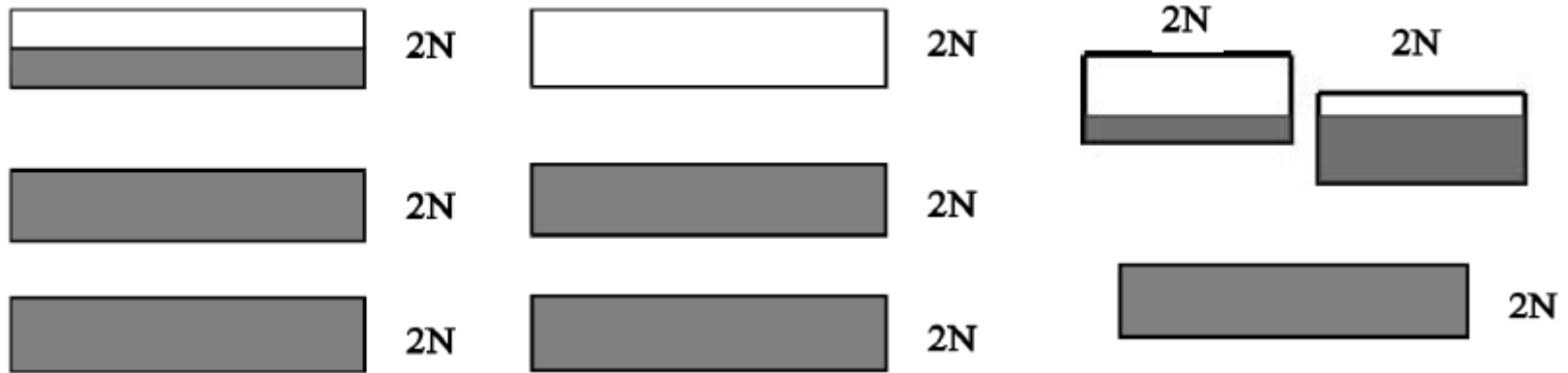
$$\varepsilon_2 = E_c + \frac{2\hbar^2 \pi^2}{m_0 m^* L^2}$$

$$\varepsilon_1 = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 m^* L^2}$$



Tight-Binding Approximation

If a crystal with a primitive cubic lattice contains N atoms and thus N primitive unit cells, then an **atomic energy level E_i** of the free atom will split into N states (due to the interaction with the rest of $N - 1$ atoms). **Each band can be occupied by $2N$ electrons.**



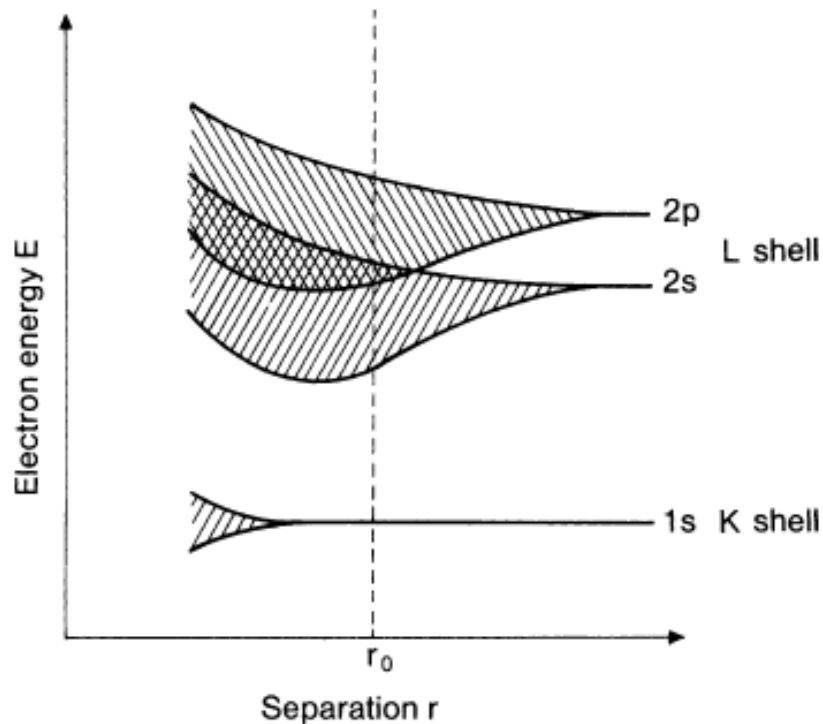
An odd number of electrons per cell (metal)

An even number of electrons per cell (non-metal)

An even number of electrons per cell but overlapping bands (metals of the II group, e.g. Be → next slide!)

Tight-Binding Approximation

The existence of the band structure arising from the discrete energy levels of isolated atoms due to the interaction between them. We can classify the electronic states as belonging to the electronic shells s, p, d etc.



The existence of a forbidden gap is not tied to the periodicity of the lattice! Amorphous materials can also display a band gap.

If a crystal with a primitive cubic lattice contains N atoms and thus N primitive unit cells, then an **atomic energy level** E_i of the free atom will split into N states (due to the interaction with the rest of $N - 1$ atoms).

Each band can be occupied by $2N$ electrons.

Fig. 1.1. Broadening of the energy levels as a large number of identical atoms from the first row of the periodic table approach one another (schematic). The separation r_0 corresponds to the approximate equilibrium separation of chemically bound atoms. Due to the overlap of the $2s$ and $2p$ bands, elements such as Be with two outer electrons also become metallic. Deep-lying atomic levels are only slightly broadened and thus, to a large extent, they retain their atomic character

Tight-Binding Approximation

The states can mix: for instance sp^3 hybridization.

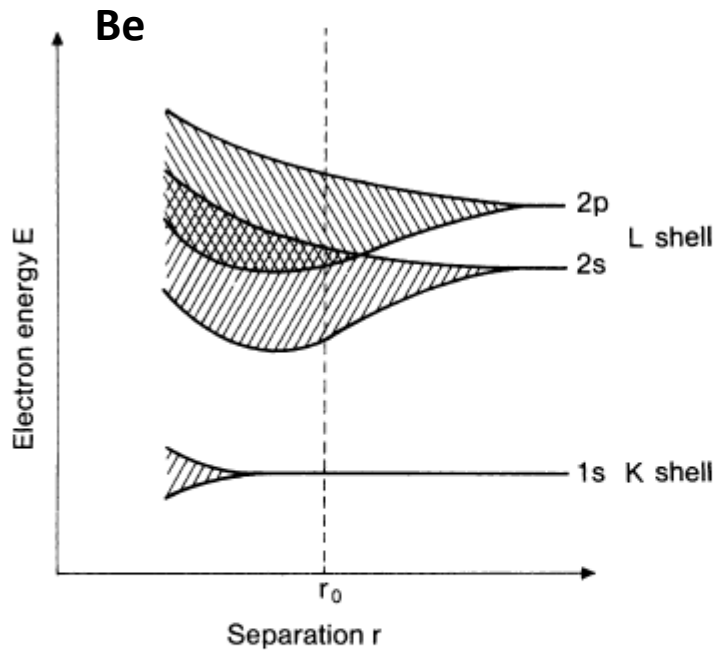


Fig. 1.1. Broadening of the energy levels as a large number of identical atoms from the first row of the periodic table approach one another (schematic). The separation r_0 corresponds to the approximate equilibrium separation of chemically bound atoms. Due to the overlap of the $2s$ and $2p$ bands, elements such as Be with two outer electrons also become metallic. Deep-lying atomic levels are only slightly broadened and thus, to a large extent, they retain their atomic character

C, Si, Ge

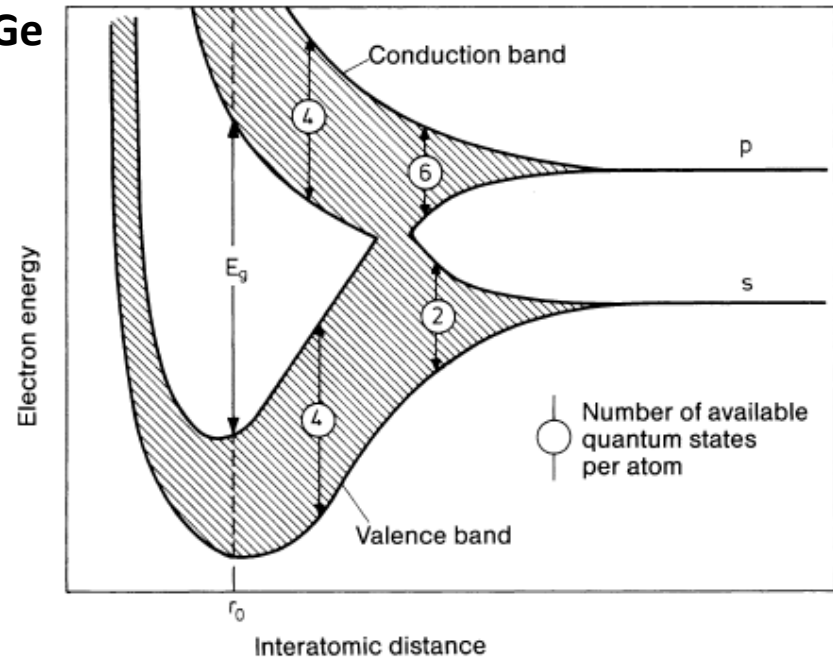


Fig. 7.9. Schematic behavior of the energy bands as a function of atomic separation for the tetrahedrally bound semiconductors diamond (C), Si, and Ge. At the equilibrium separation r_0 there is a forbidden energy gap of width E_g between the occupied and unoccupied bands that result from the sp^3 hybrid orbitals. For diamond, the sp^3 hybrid stems from the $2s$ and $2p^3$ atomic states, for Si from the $3s$ and $3p^3$, and for Ge from the $4s$ and $4p^3$. One sees from this figure that the existence of a forbidden energy region is not tied to the periodicity of the lattice. Thus amorphous materials can also display a band gap. (After [7.1])

Gęstość stanów

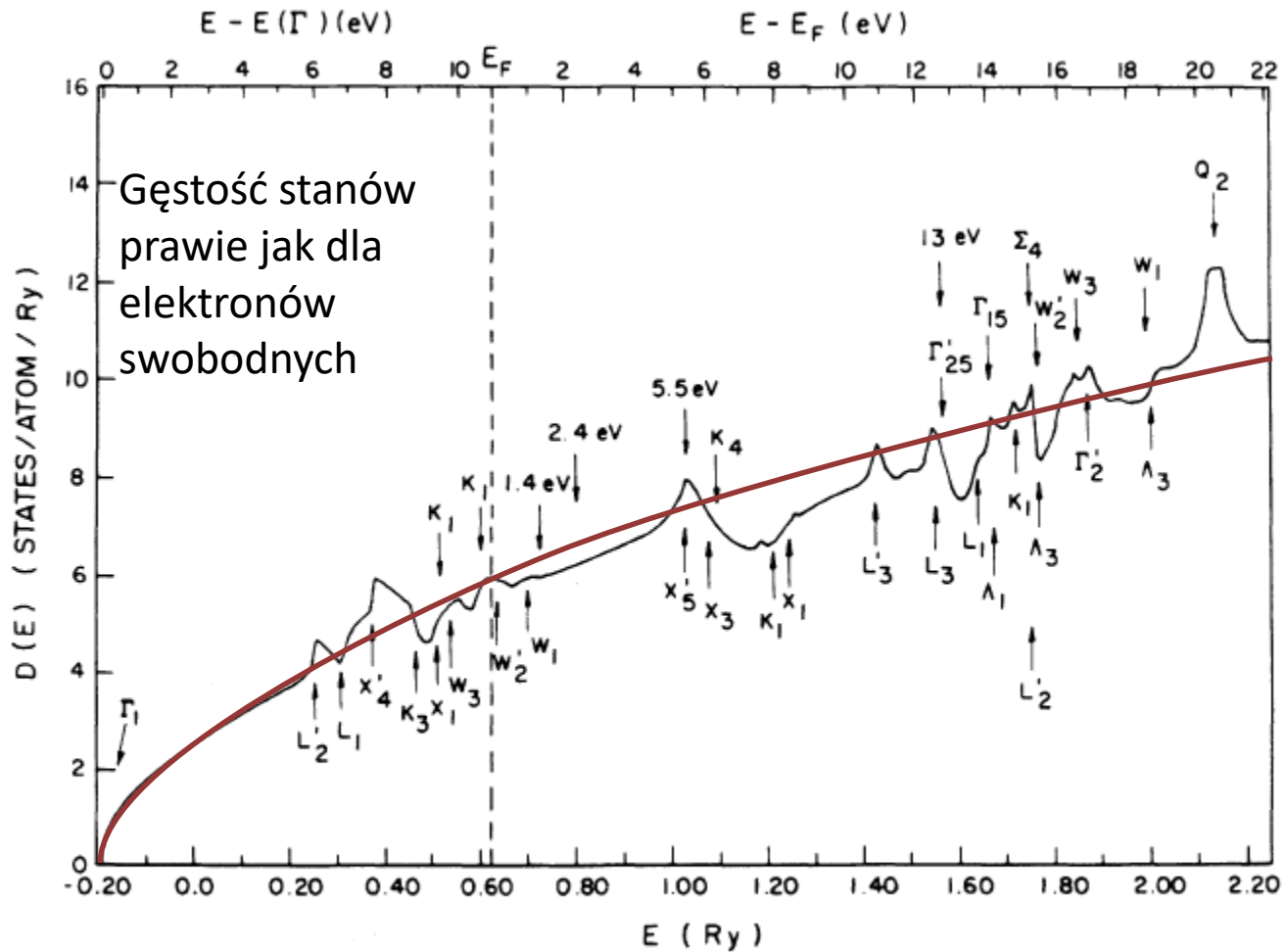


FIG. 2. Density of states of Al. The states responsible for structure are indicated by letters denoting their irreducible representations. The arrows at 1.4, 2.4, 5.5, and 13 eV indicate the location of structure in the experimental K absorption in Ref. 6.

Michał Baj

Szmulowicz, F., Segall, B.: Phys. Rev. B21, 5628 (1980).

The band theory of solids.

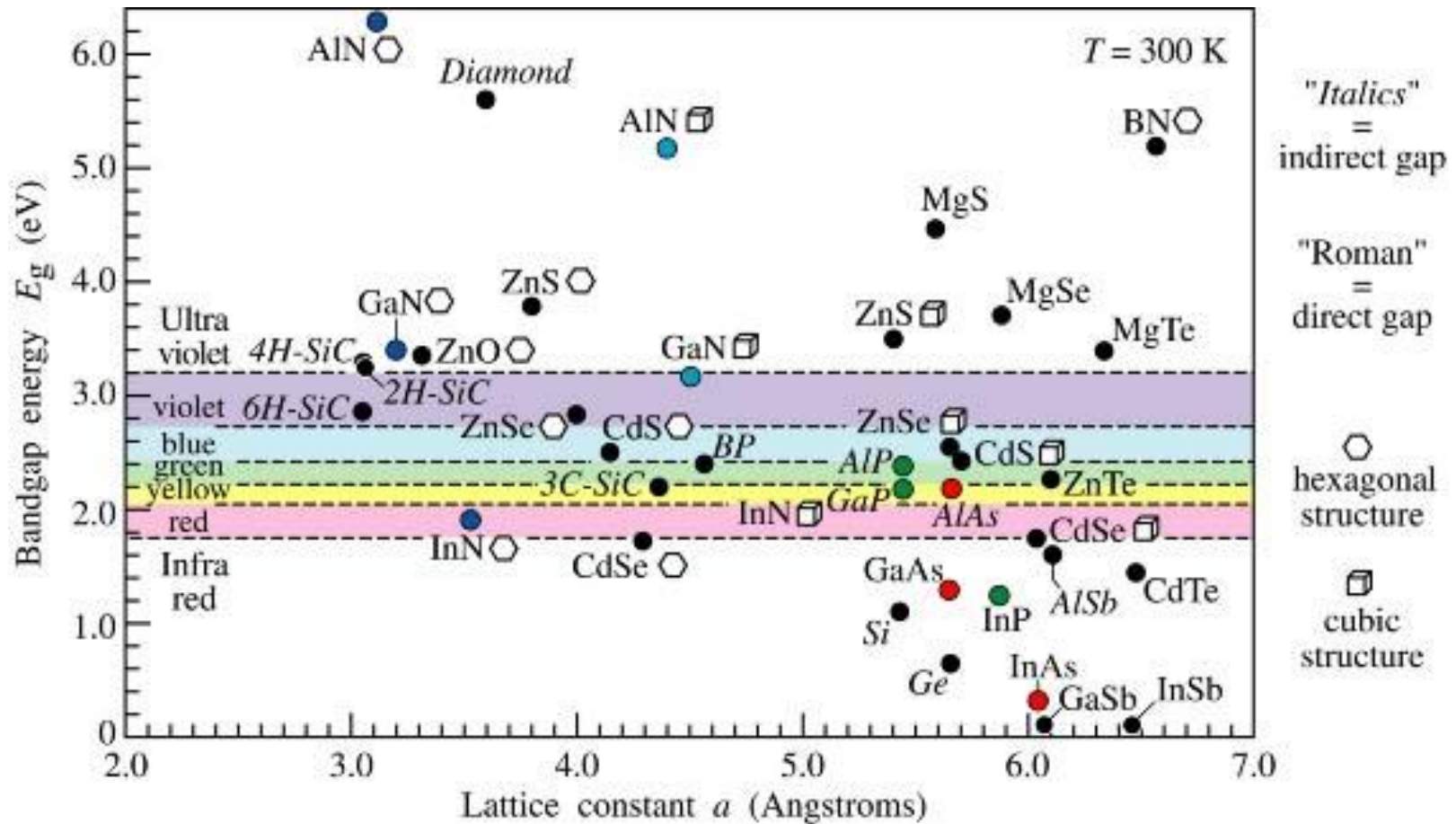
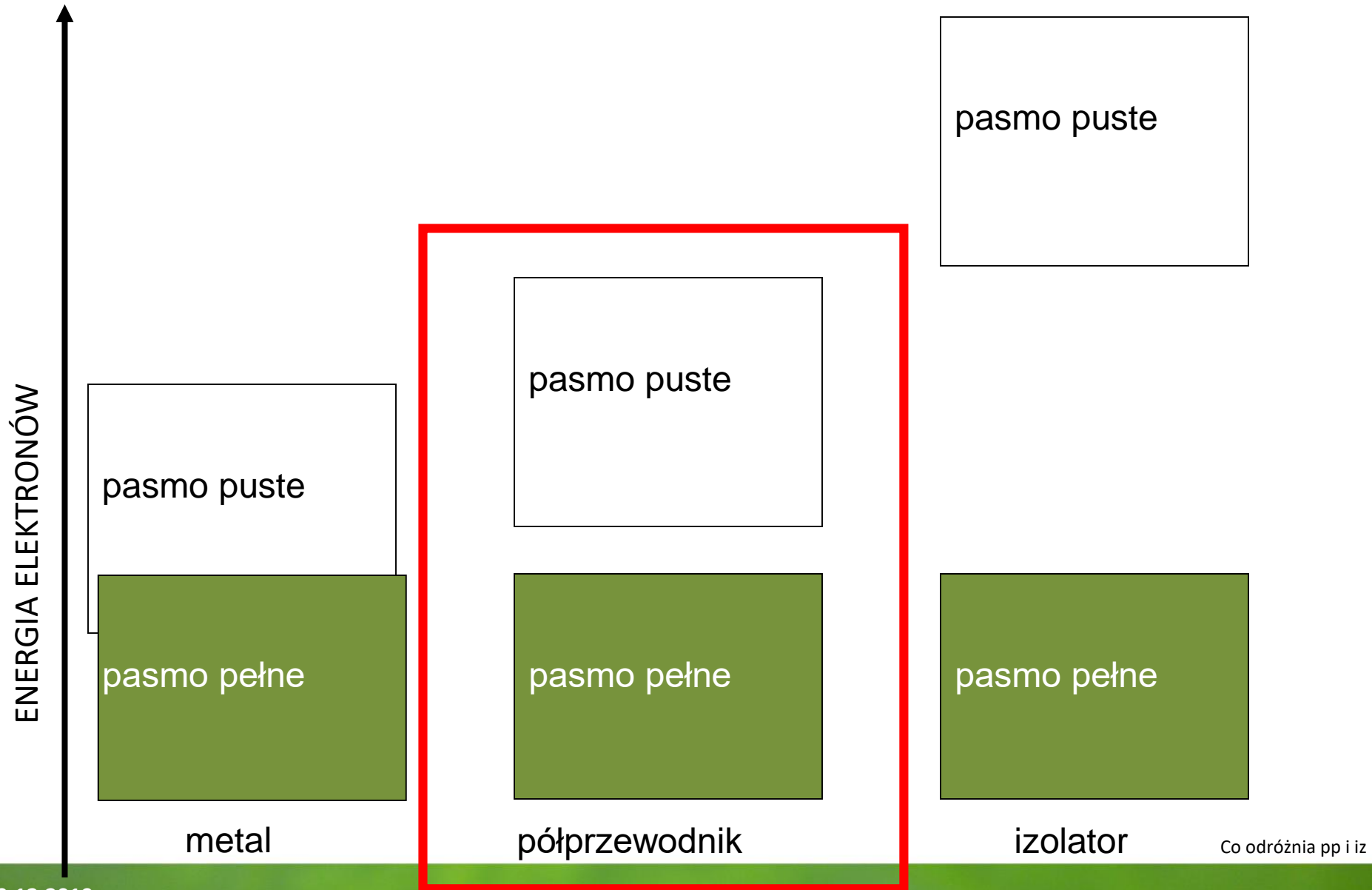


Fig. 11.4. Room-temperature bandgap energy versus lattice constant of common elemental and binary compound semiconductors.

Teoria pasmowa ciał stałych.



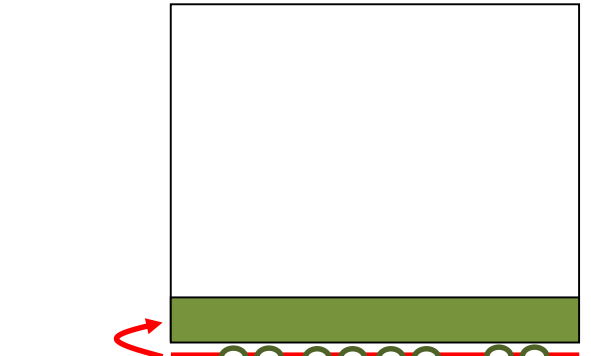
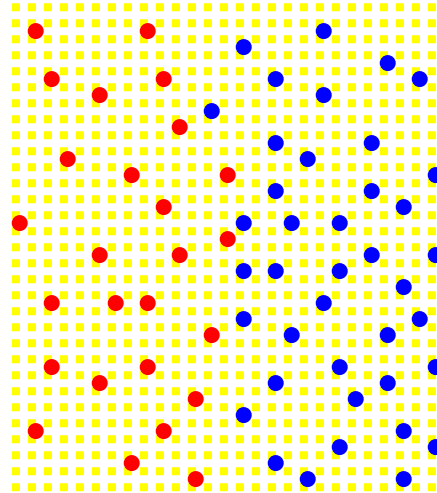
Teoria pasmowa ciał stałych.



Akceptory



półprzewodnik typu p



Donory

półprzewodnik typu n

Domieszki i defekty

Model wodoropodobny

Atom o wartościowości wyższej o jeden niż atom macierzysty staje się źródłem potencjału kulombowskiego zmodyfikowanego stałą dielektryczną kryształu, wywołanego dodatkowym protonem w jądrze. Dodatkowy elektron będący w paśmie przewodnictwa odczuwa ten potencjał. Jego stany są opisane równaniem masy efektywnej:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \quad U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\epsilon_r r}$$

$$[T + U]\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$$

II	III	IV	V	VI
Be	B	C	N	O
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te

Grupa IV: diament, Si, Ge

Grupy III-V: GaAs, AlAs, InSb, InAs...

Grupy II-VI: ZnSe, CdTe, ZnO, SdS...

Domieszki i defekty

Model wodoropodobny

Ostatecznie zagadnienie sprowadza się do problemu atomu wodoru z nośnikiem swobodnym o masie m^* , w ośrodku dielektrycznym ze stałą ϵ i małą „poprawką” do potencjału.

$$E_n = - \left(\frac{m^*}{m_0} \right) \frac{1}{\epsilon_r^2} Ry \frac{1}{n^2}$$

$$a_B^* = \frac{4\pi\epsilon_r\epsilon_0\hbar^2}{m_0e^2} \left(\frac{m_0}{m^*} \right) = a_B\epsilon_r \left(\frac{m_0}{m^*} \right)$$

Dla typowych półprzewodników $m_e^* \approx 0.1m_e$
 $\epsilon_s \approx 10$:

Dla wodoru

$Ry = 13.6 \text{ eV}$ oraz $a_B = 0.053 \text{ nm}$

Dla GaAs

$Ry^* \approx 5 \text{ meV}$ oraz $a_B^* \approx 10 \text{ nm}$

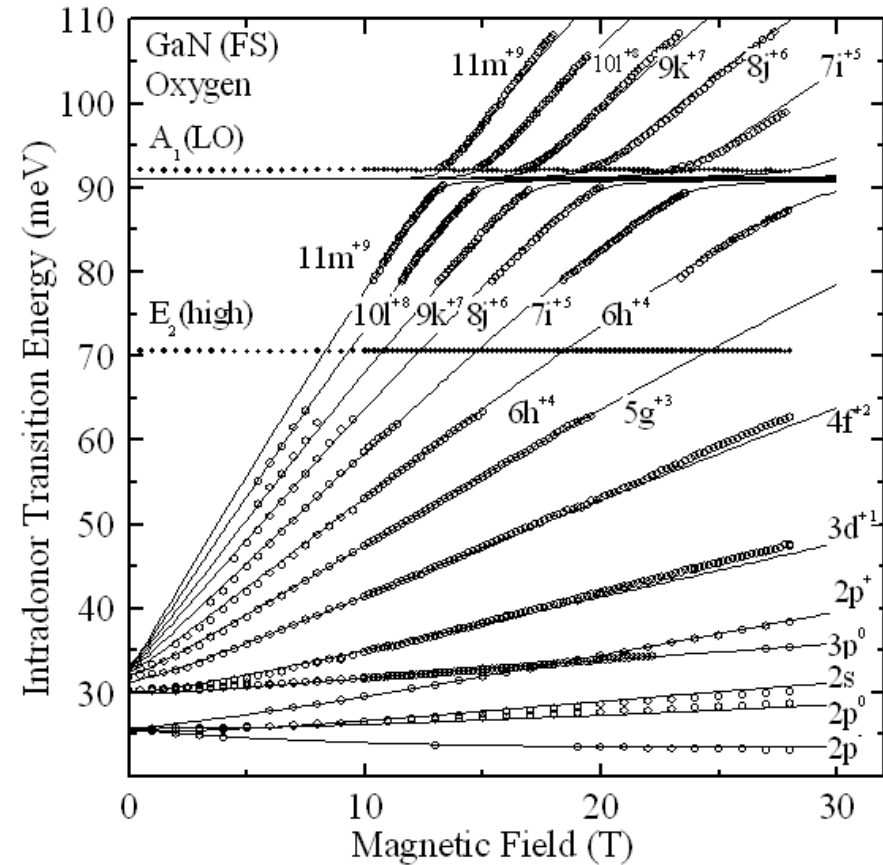
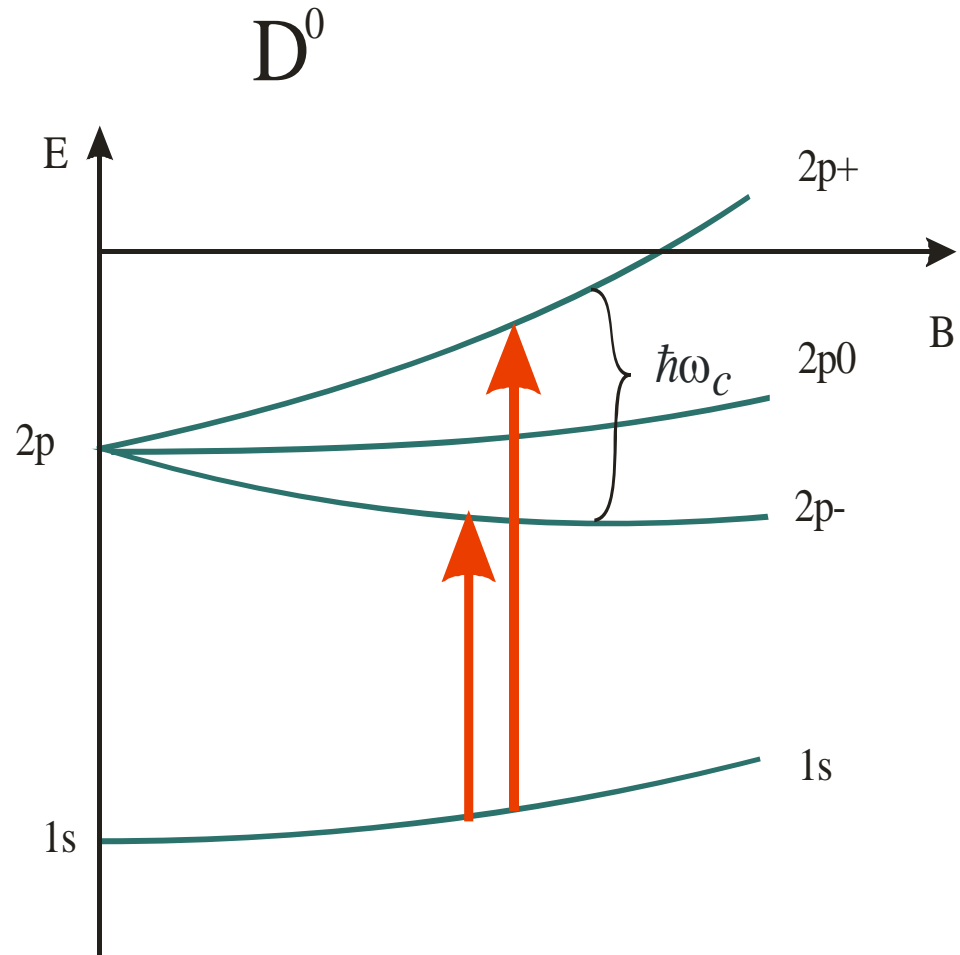
II	III	IV	V	VI
Be	B	C	N	O
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te

Grupa IV: diament, Si, Ge

Grupy III-V: GaAs, AlAs, InSb, InAs...

Grupy II-VI: ZnSe, CdTe, ZnO, SdS...

Spektroskopia w dalekiej podczerwieni

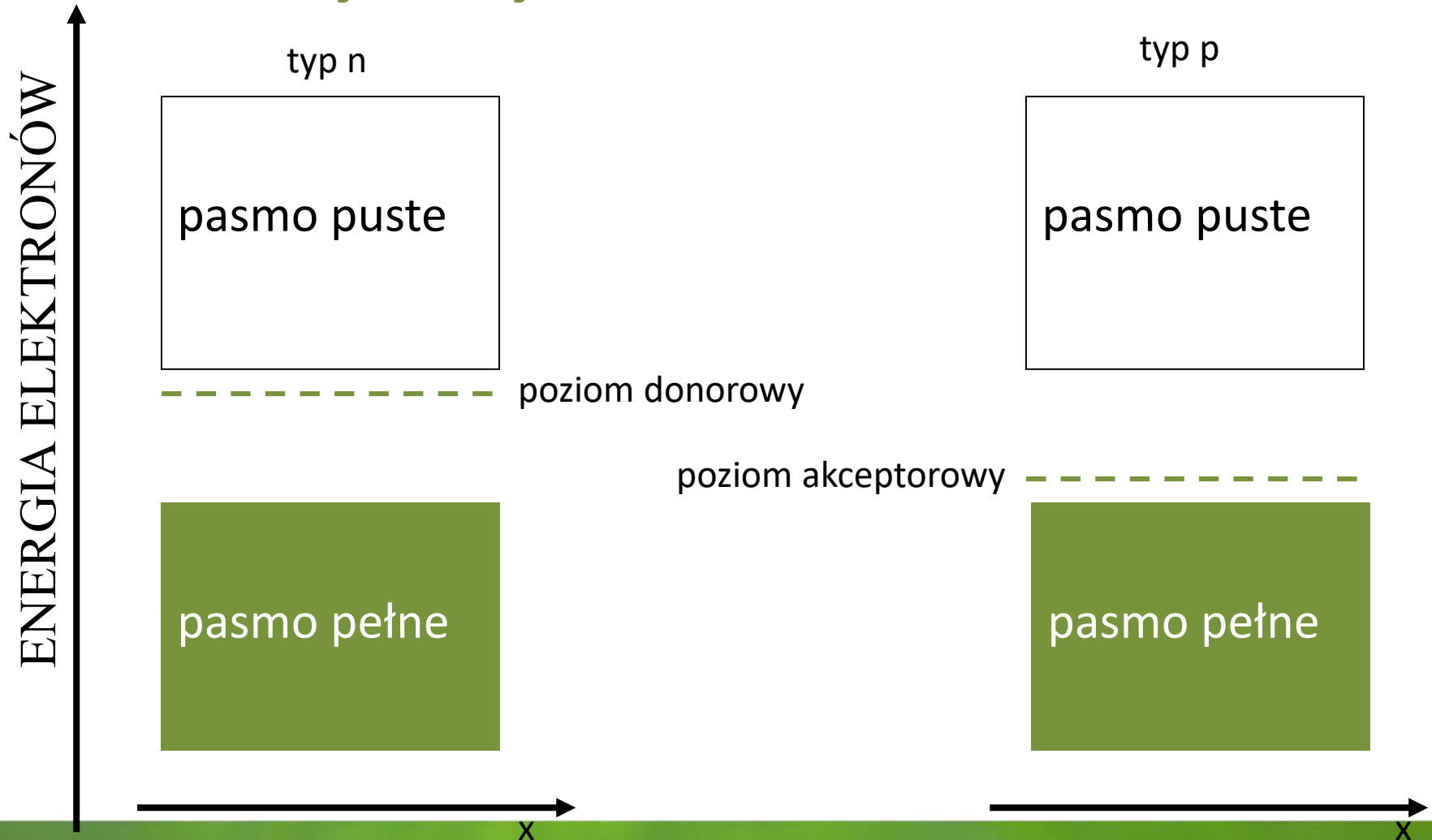


Oxygen

$R_V = 30.28(5)$ meV

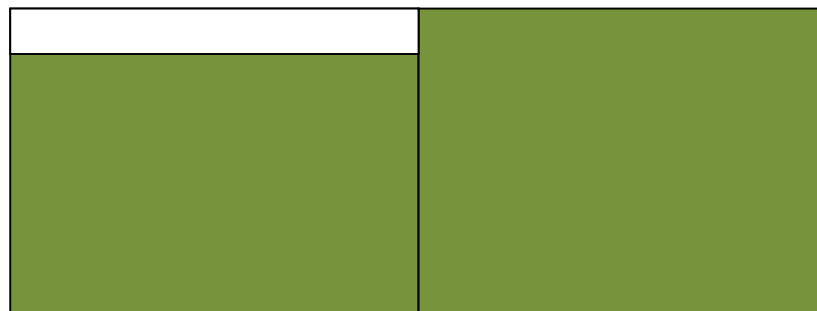
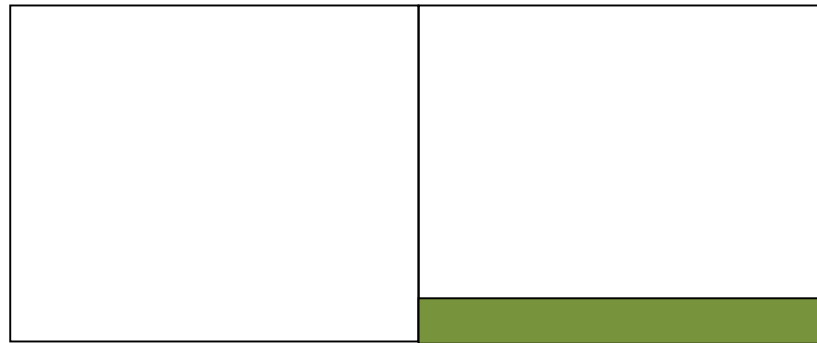
Domieszki i defekty

Model wodoropodobny – jonizacja domieszki



Teoria pasmowa ciał stałych.

Dioda – czyli złącze $p-n$



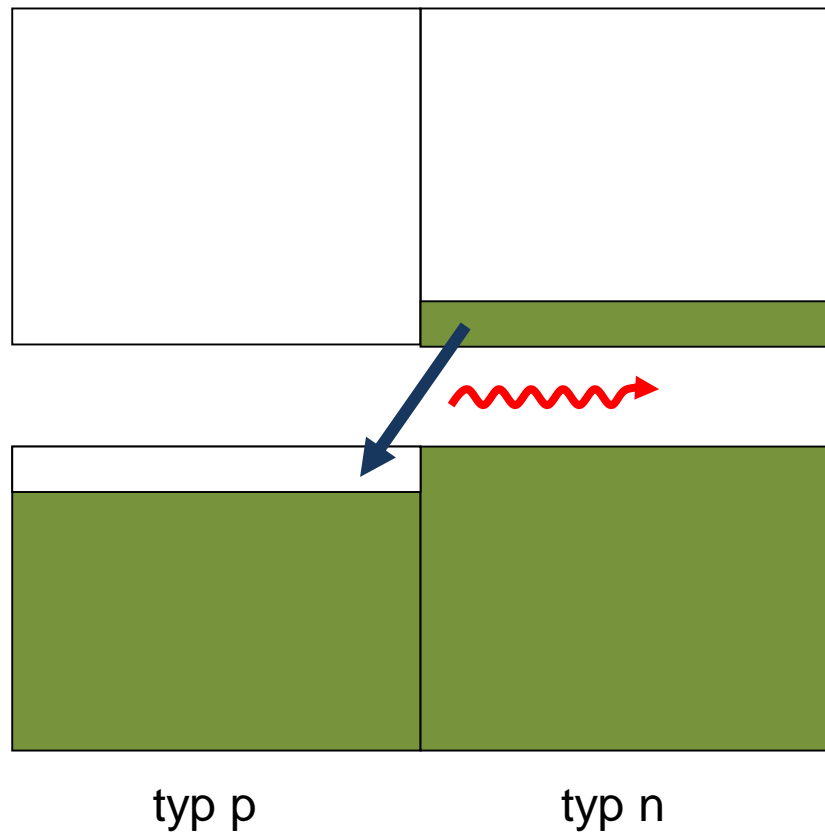
typ p

typ n

Flat band

Teoria pasmowa ciał stałych.

Dioda – czyli złącze p - n



Flat band

Teoria pasmowa ciał stałych.

Dioda – czyli złącze p-n

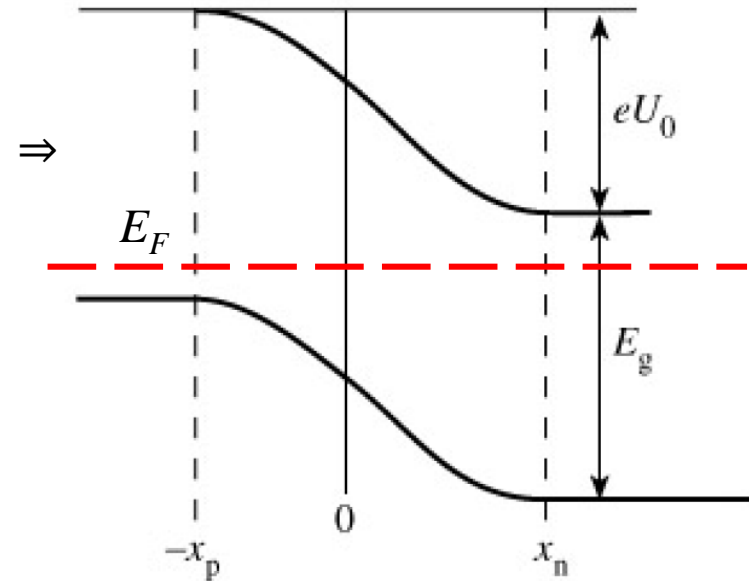
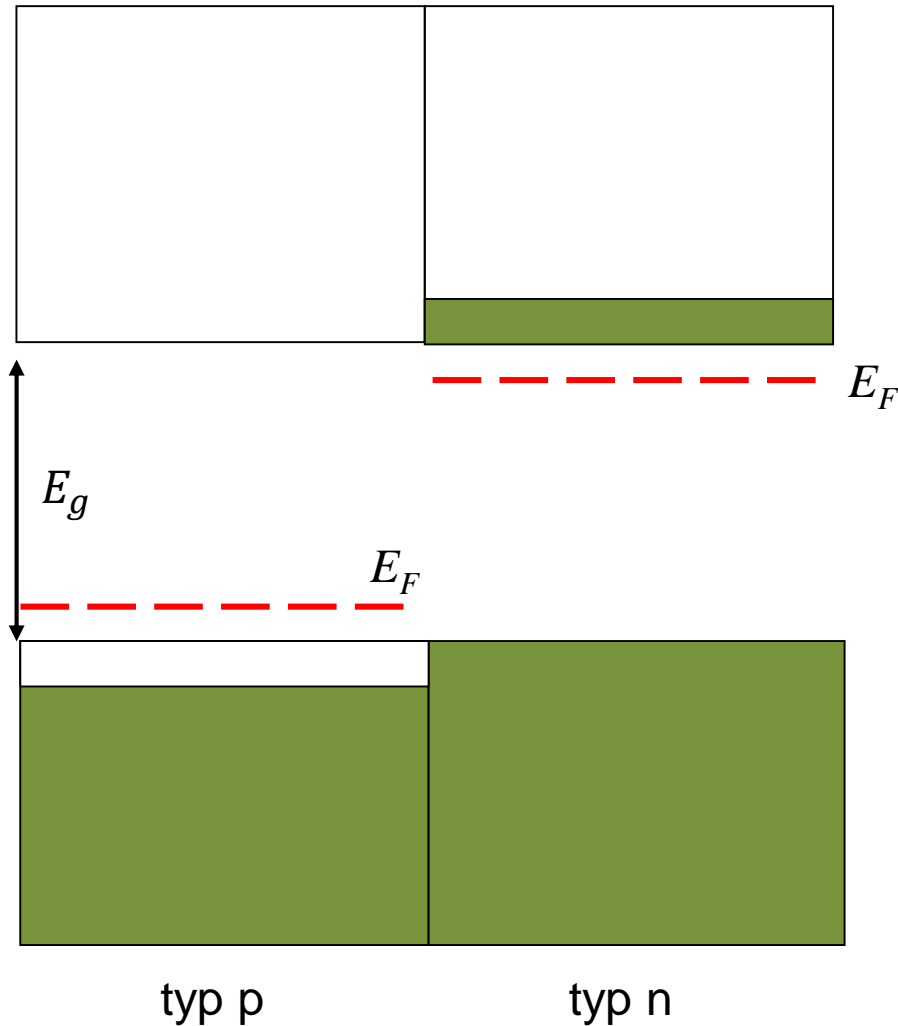


Figure 9.3: The energy diagram for the transition region of a p-n junction.

Flat band

Domieszkowanie półprzewodników

Heterozłącze (heterojunction)

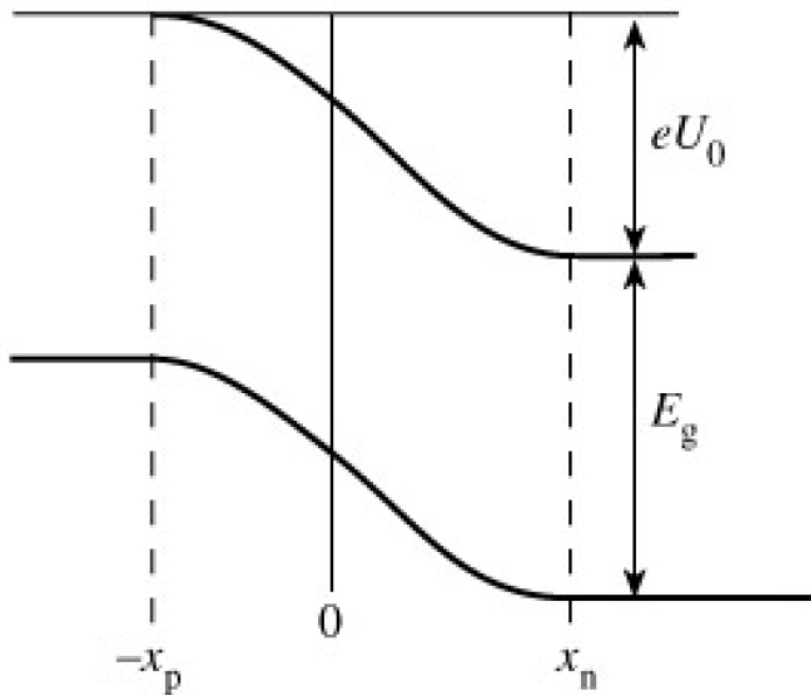
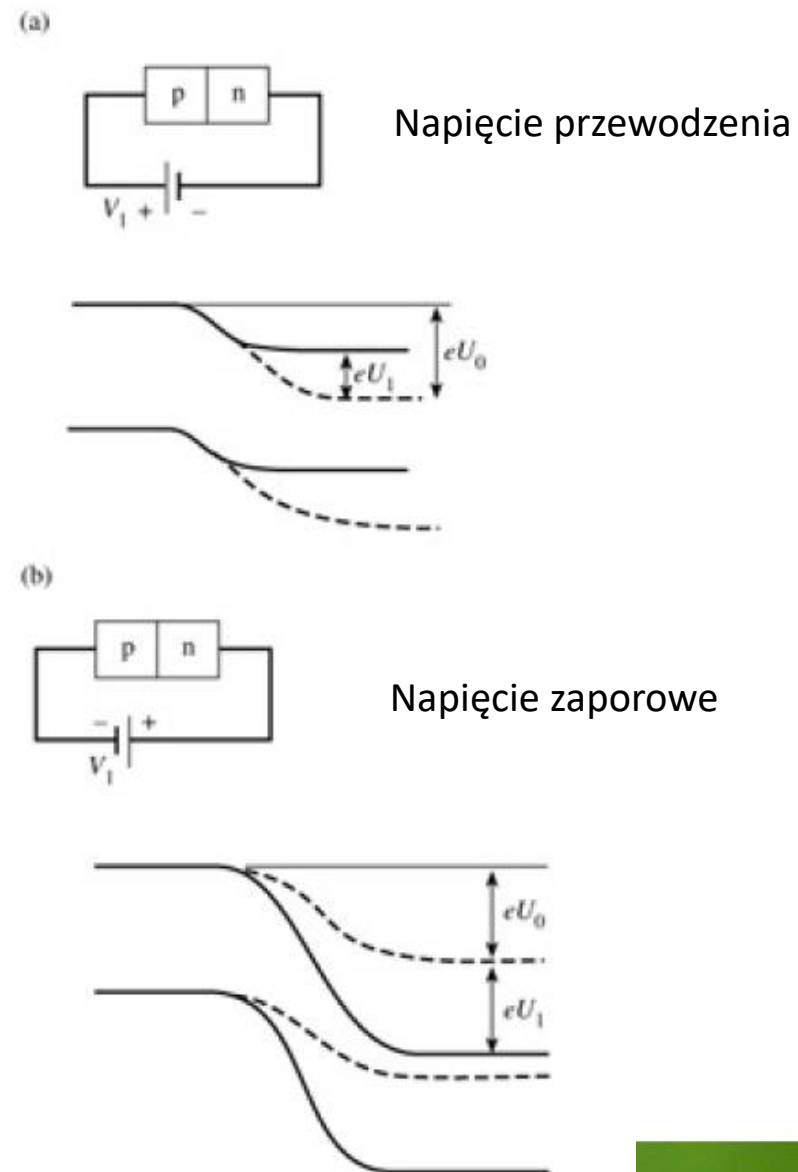


Figure 9.3: The energy diagram for the transition region of a p-n junction.



Obsadzenie poziomów domieszkowych

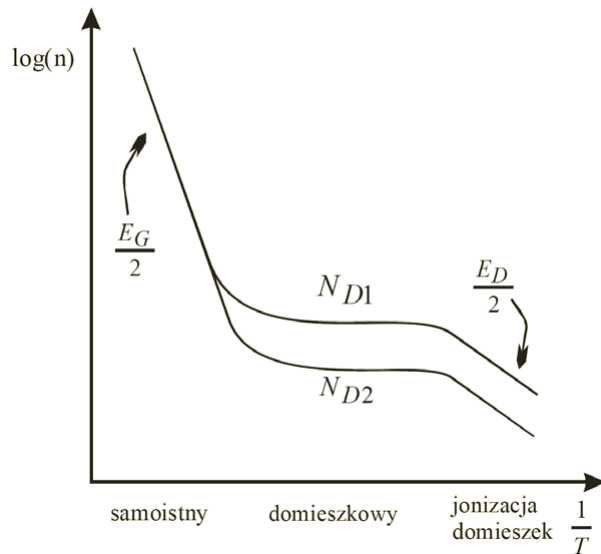
dla półprzewodników skompensowanych w niskich temperaturach energia aktywacji termicznej wynosi E_D , a nie $\frac{E_D}{2}$

jeśli domieszek jest dużo, tak, że funkcje falowe związanych na nich elektronów się przekrywają – energie jonizacji maleją, tworzą się pasma domieszkowe

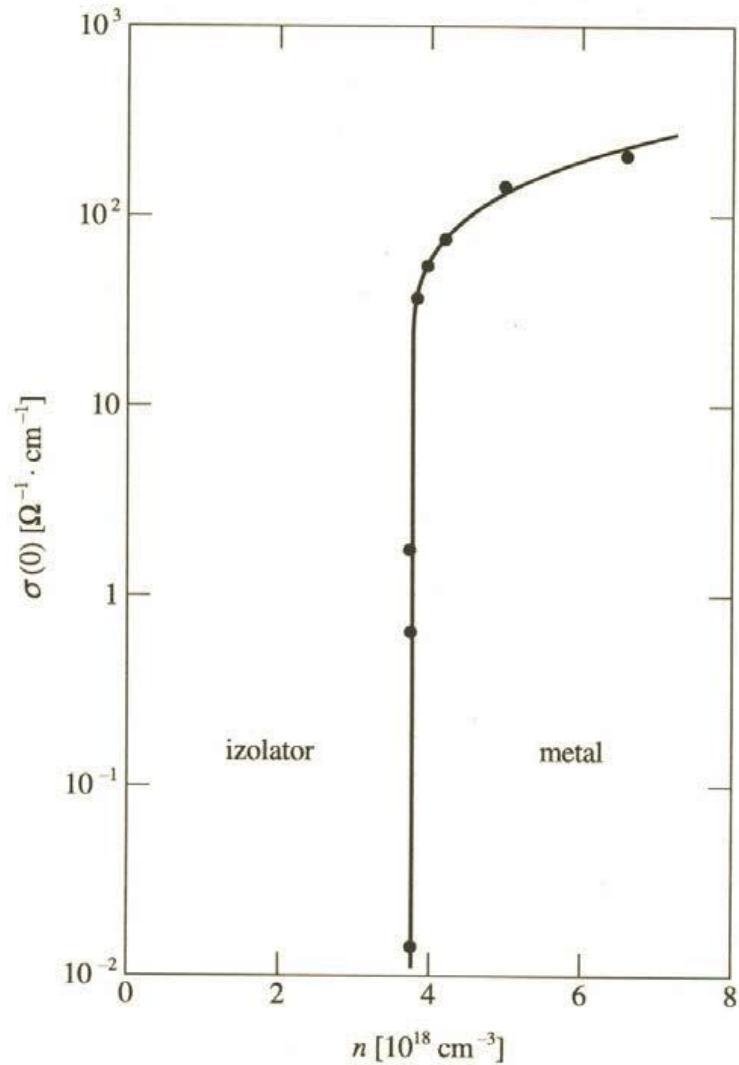
przy koncentracjach domieszek rzędu:

$$a_B^* \cdot (N_D)^{\frac{1}{3}} \approx 0.26$$

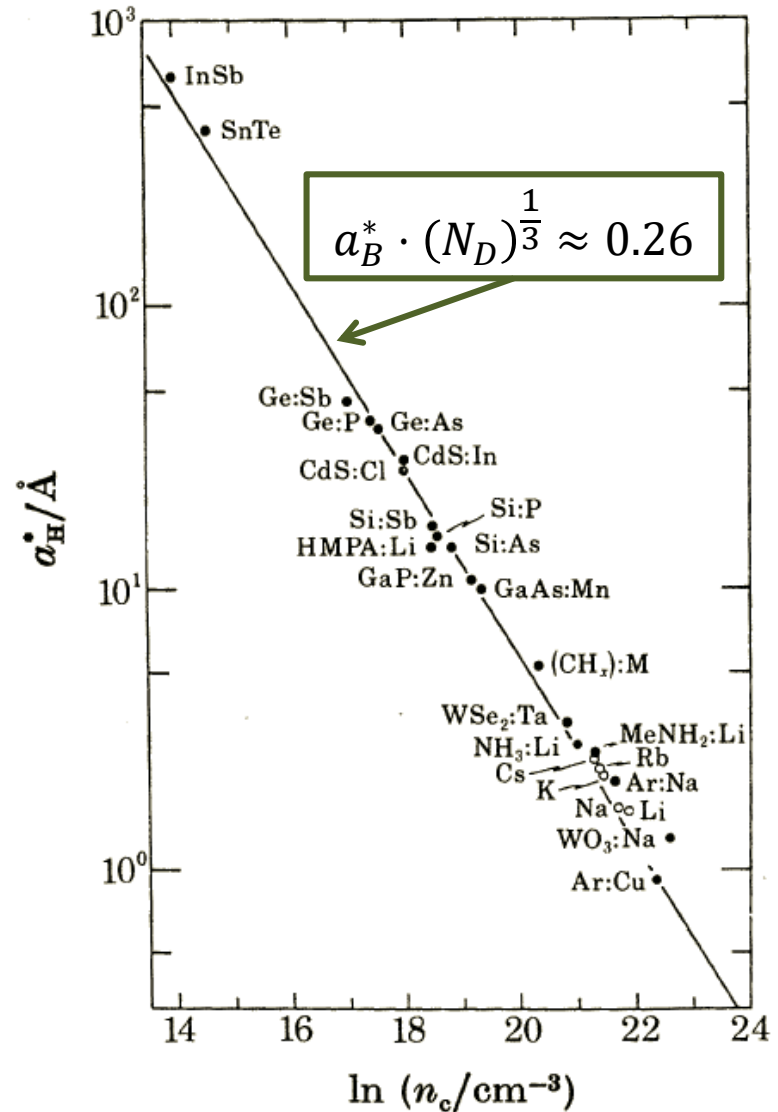
zachodzi przejście fazowe niemetal-metal (tzw. przejście Motta)



Obsadzenie poziomów domieszkowych

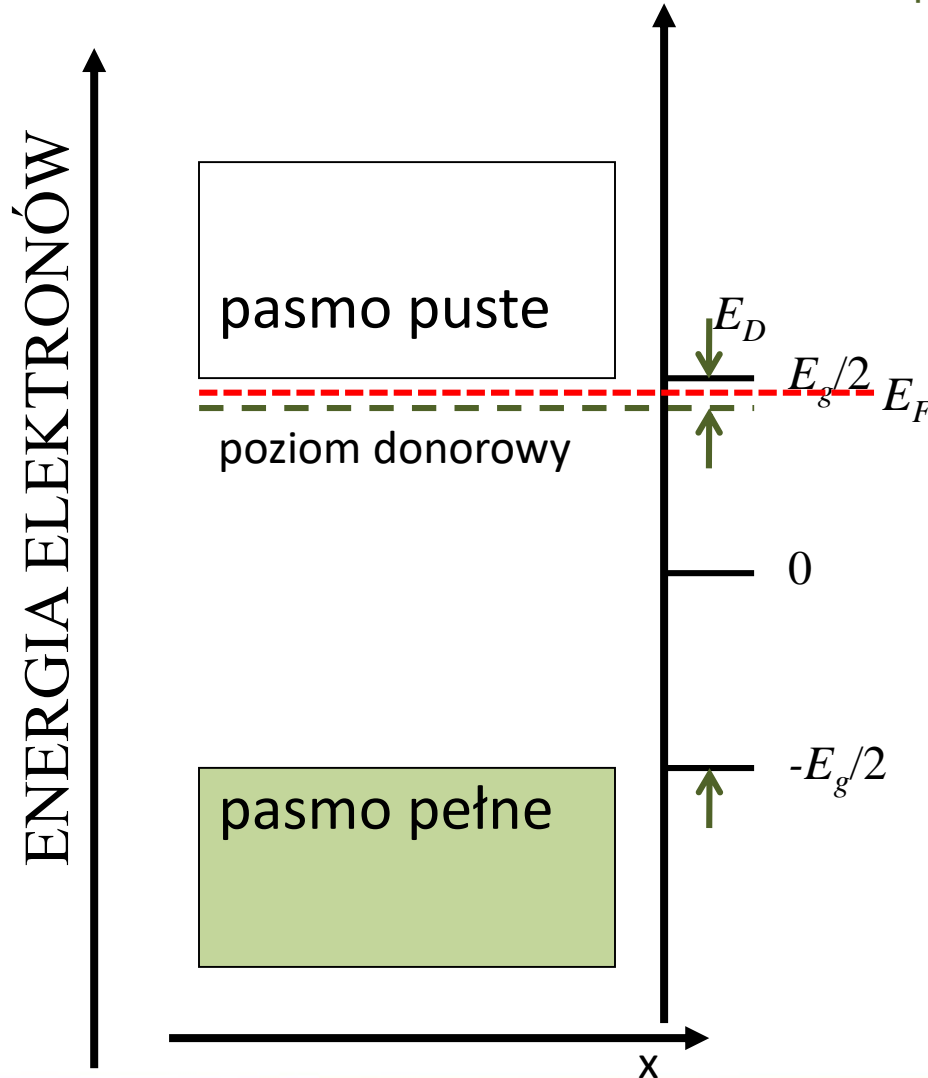


P.P. Edwards, M.J. Sienko, *J. Am. Chem. Soc.* **103**, 2967 (1981)



Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności – niska temperatura, obszar jonizacji termicznej domieszek



Niska temperatura, obszar jonizacji termicznej domieszek

Rozważmy półprzewodnik, w którym:

$N_A \approx 0$ – koncentracja akceptorów

N_D – koncentracja donorów

N_A^0 – koncentracja neutralnych akceptorów

N_D^0 – koncentracja neutralnych donorów

n – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa

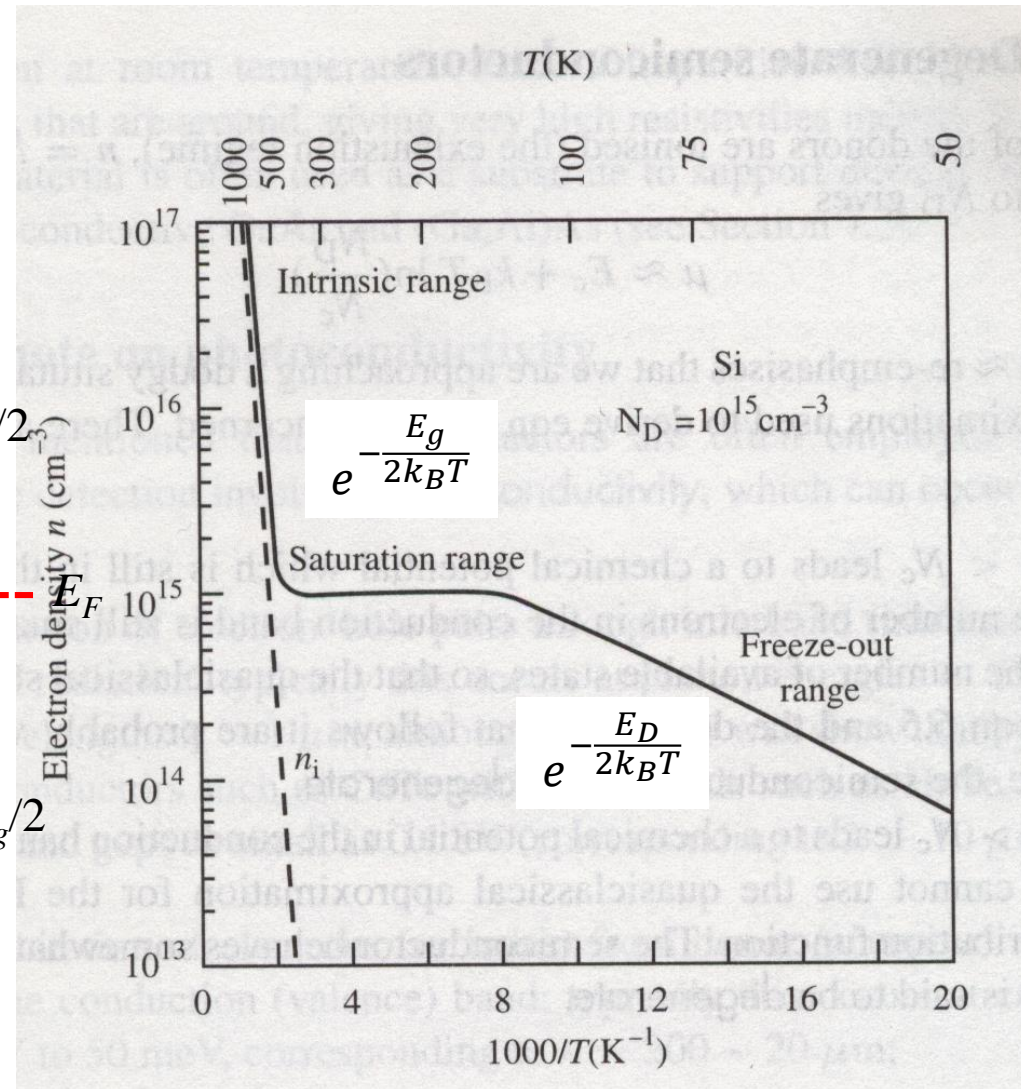
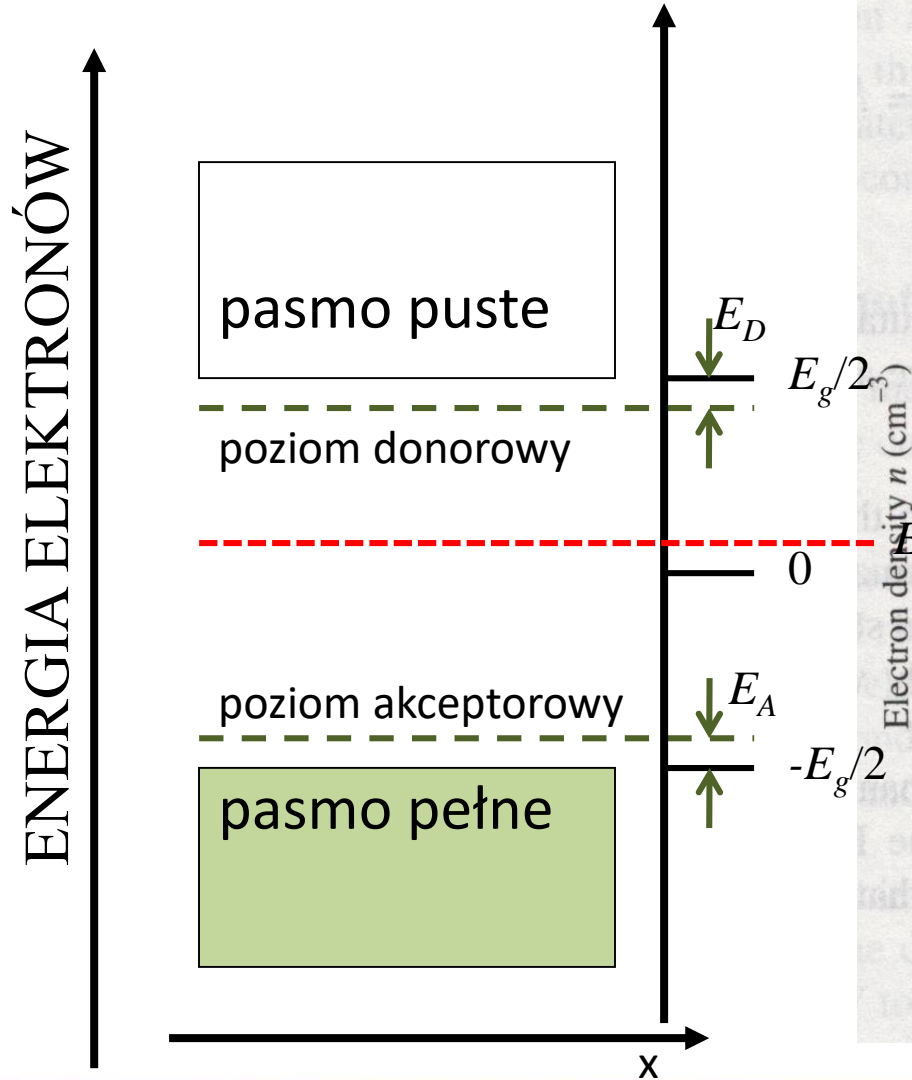
$p \approx 0$ – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

Z warunku neutralności kryształu:

$$n = N_D - N_D^0$$

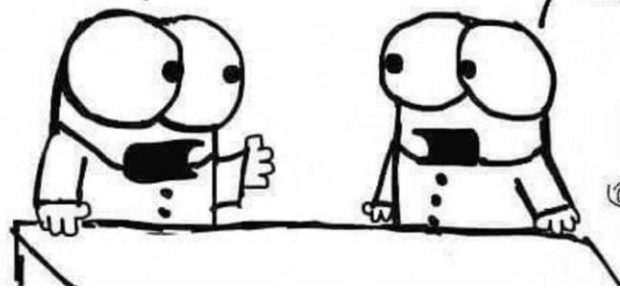
Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności



I ASKED
SANTA
FOR A
RESEARCH
GRANT.

YOU STILL
BELIEVE IN
RESEARCH
GRANTS?



© THE
UPTURNED
MICROSCOPE