

Teoretyczny opis właściwości kryształów

- Opis ścisły (praktycznie) niemożliwy
– są to układy zbyt skomplikowane.
- $1 \text{ cm}^3 \rightarrow 10^{23}$ atomów

Rozdział: Pasma energetyczne



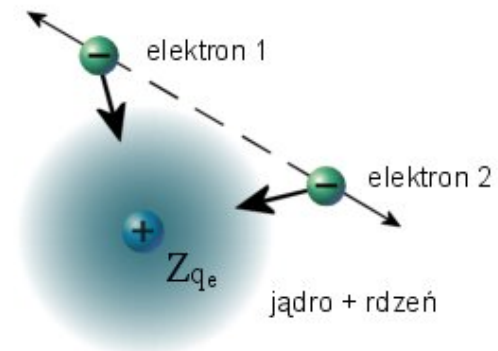
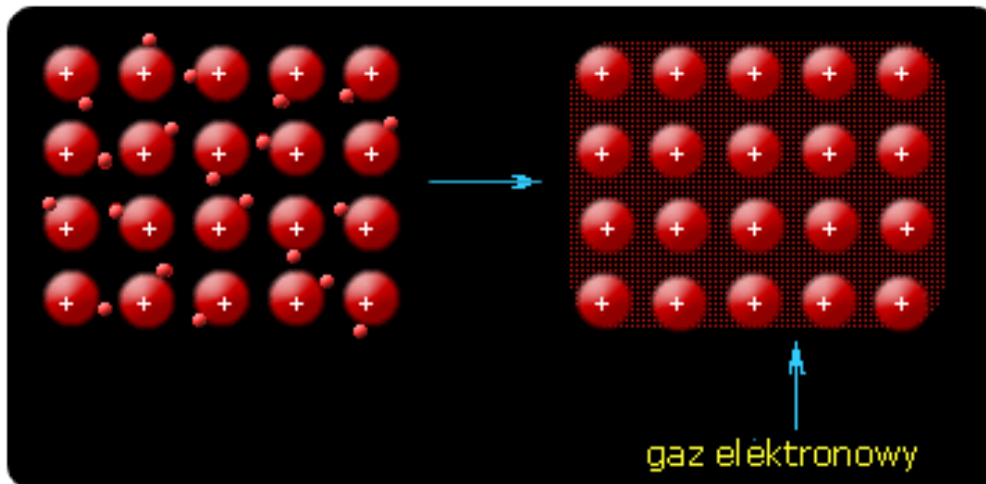
- Rozdział ten nie należy do najłatwiejszych rozdziałów w książce, ale przedstawione są w nim sprawy najważniejsze...

Metale. Model elektronów prawie swobodnych

- Jądra + elektrony powłok zamkniętych → nierozdzielne jony – rdzenie atomowe
- Elektrony walencyjne – stosunkowo słabo związane.
- W wyniku oddziaływań odrywają się od macierzystych rdzeni i poruszają się niemal swobodnie w całej objętości kryształu.
- Kryształ związany dzięki elektrostatycznym oddziaływaniom pomiędzy ujemną chmurą elektronową a dodatnimi jonami.

Właściwości:

- duże przewodnictwo elektryczne
- Kowalność - ponieważ jony metalu nie są ze sobą ściśle związane i mogą się względem siebie stosunkowo łatwo przesuwać, niewielkimi siłami można zmienić kształt...



Metale. Model elektronów prawie swobodnych

- Przybliżenia:
- Rdzenie nieruchome, ustawione w sieć przestrzenną.
- Przybliżenie jednoelektronowe (przybliżenie Hartree' ego)

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \Psi_1(\vec{r}_1) \Psi_2(\vec{r}_2) \dots \Psi_n(\vec{r}_n)$$

- „Jednoelektronowe” równanie Schrödingera

$$\left(\frac{\vec{p}_n^2}{2m_0} + V_n(\vec{r}_n) \right) \Psi_n(\vec{r}_n) = E_n \Psi_n(\vec{r}_n)$$

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

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

Metale. Model elektronów prawie swobodnych

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

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

- Potencjał słaby – można go potraktować jako zaburzenie hamiltonianu elektronów swobodnych.
- Opisujemy rozchodzenie się fali elektronowej w periodycznym ośrodku, przy czym oddziaływanie elektronu z tym ośrodkiem jest niewielkie.
- Zagadnienie podobne do rozpraszania promieni X w kryształach.
- Powinniśmy oczekiwać silniejszych efektów tylko wtedy gdy interferencja fal, które uległy dyfrakcji na poszczególnych centrach, a więc efekty istotne dla fal elektronowych o takich wektorach falowych dla których spełnione są warunki Lauego

Model jedowymiarowy

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Potencjał ma taką samą periodyczność jak sieć, to można go rozwinąć w szereg

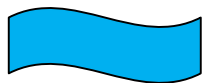
Fouriera:

$$V(x) = \sum_n V_n e^{ingx} \quad \bullet \quad g=2\pi/a - \text{wektor sieci odwrotnej}$$

Poszukiwana funkcja falowa może być wyrażona w postaci funkcji Blocha:

$$\Psi(x) = e^{ikx} \sum_n c_n(k) e^{ingx} = e^{ikx} u_k(x)$$

k – wektor z pierwszej strefy Brillouina



Funkcja Blocha

$$\Psi_k(x) = e^{ikx} \sum_n c_n(k) e^{ingx} = e^{ikx} u_k(x)$$

$$\hat{H}\Psi_k = E(k)\Psi_k$$

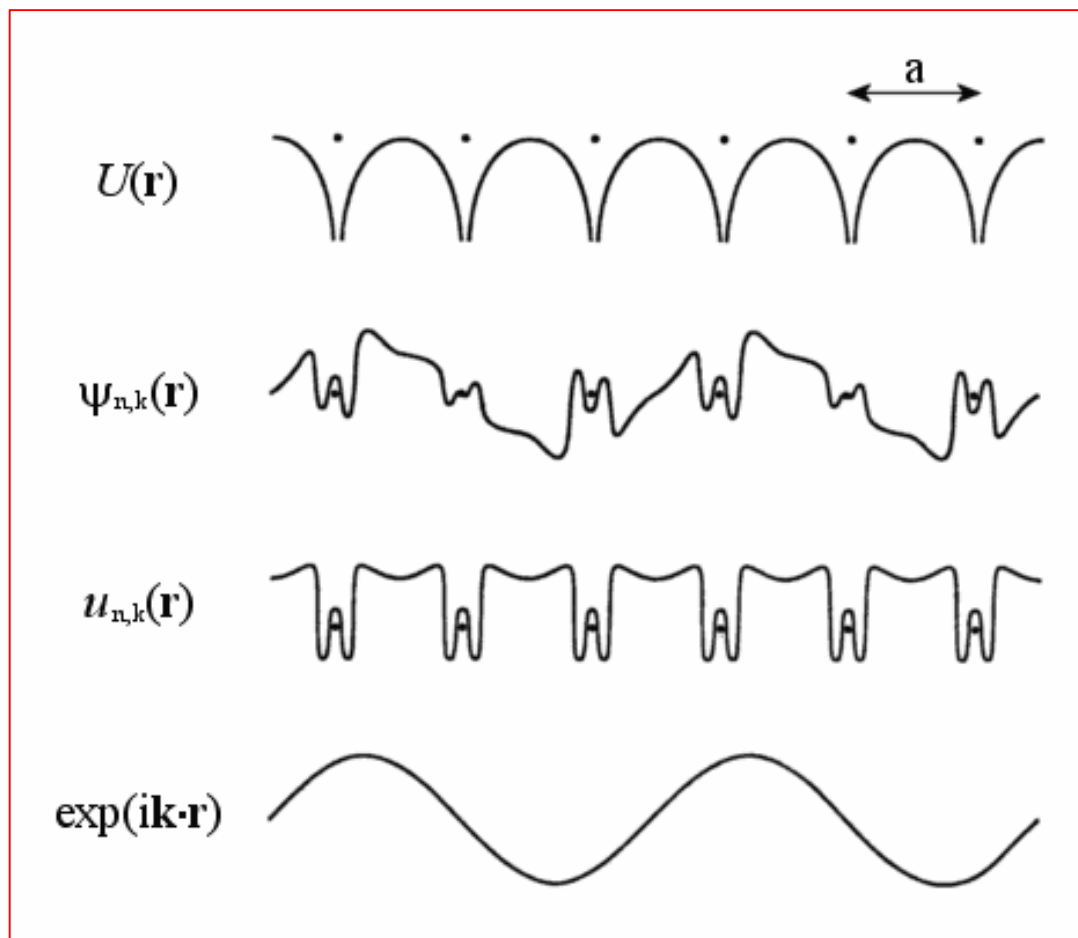
$$\hat{H}\Psi_{k+G} = E(k+G)\Psi_{k+G}$$

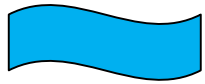
$$\Psi_{k+G}(\vec{r}) = \Psi_k(\vec{r})$$

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

Uwaga!

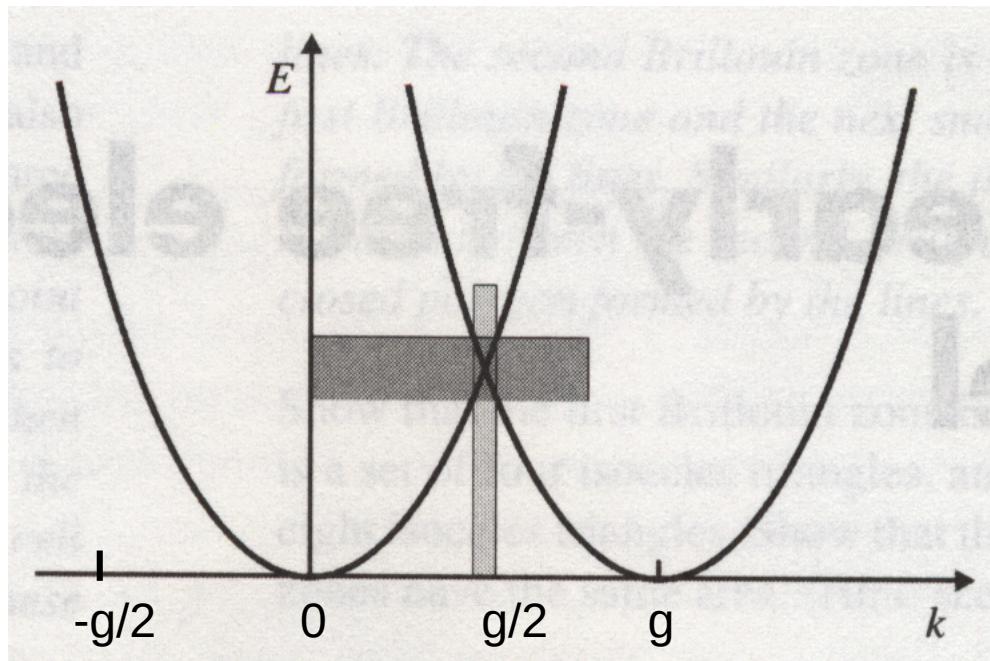
Otrzymana postać funkcji falowej jest prawdziwa dla dowolnego potencjału periodycznego, niezależnie czy potencjał jest silny czy słaby.

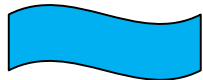




Ważny wniosek!

- Z ogólnego warunku periodyczności wynika, że możliwe stany elektronowe nie są ograniczone do pojedynczej paraboli w przestrzeni k , lecz równie dobrze mogą być znalezione na parabolach przesuniętych o dowolny wektor $\mathbf{G}$.
- W przypadku granicy strefy, tam gdzie przecinają się dwie parabole rachunek zaburzeń dla zdegenerowanych stanów własnych.





Dalsze uproszczenia

$$V(x) = -2V \cos(gx) = -V(e^{igx} + e^{-igx})$$

- Rozważmy stan w pobliżu granicy strefy, $\mathbf{k} = \mathbf{g}/2 - \boldsymbol{\eta} = \pi/a - \boldsymbol{\eta}$ ($\boldsymbol{\eta}$ – bardzo małe)
- Możemy wówczas pominąć przyczynki od bardziej odległych stanów energetycznych.
- Pamiętajmy, że

$$e^{i\left[\left(\frac{g}{2}\right) - g\right]x} = e^{-i\frac{g}{2}x}$$

Wtedy funkcja falowa
ma postać:

$$\Psi(x) = c_1 e^{i\left(\frac{g}{2} - \eta\right)x} + c_2 e^{i\left(-\frac{g}{2} - \eta\right)x}$$

Podstawiamy tej postaci funkcji falową

$$\Psi(x) = c_1 e^{i\left(\frac{g}{2} - \eta\right)x} + c_2 e^{i\left(-\frac{g}{2} - \eta\right)x}$$

do hamiltonianu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Mnożymy przez funkcję

$e^{-i\left(\frac{g}{2} - \eta\right)x}$ i całkujemy po obszarze
komórki elementarnej ...

$e^{i\left(\frac{g}{2} + \eta\right)x}$ i całkujemy po obszarze
komórki elementarnej ...

$$\begin{cases} \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} - \eta \right)^2 - E \right] c_1 - V c_2 = 0 \\ -V c_1 + \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} + \eta \right)^2 - E \right] c_2 = 0 \end{cases}$$

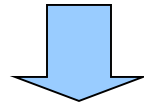


**Otrzymujemy dwa
rozwiązania na energię w
okolicach granicy strefy
Brillouina :**

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} - \eta \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} + \eta \right)^2 \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} - \eta \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} + \eta \right)^2 \right)^2 + 4V^2} \right\}$$

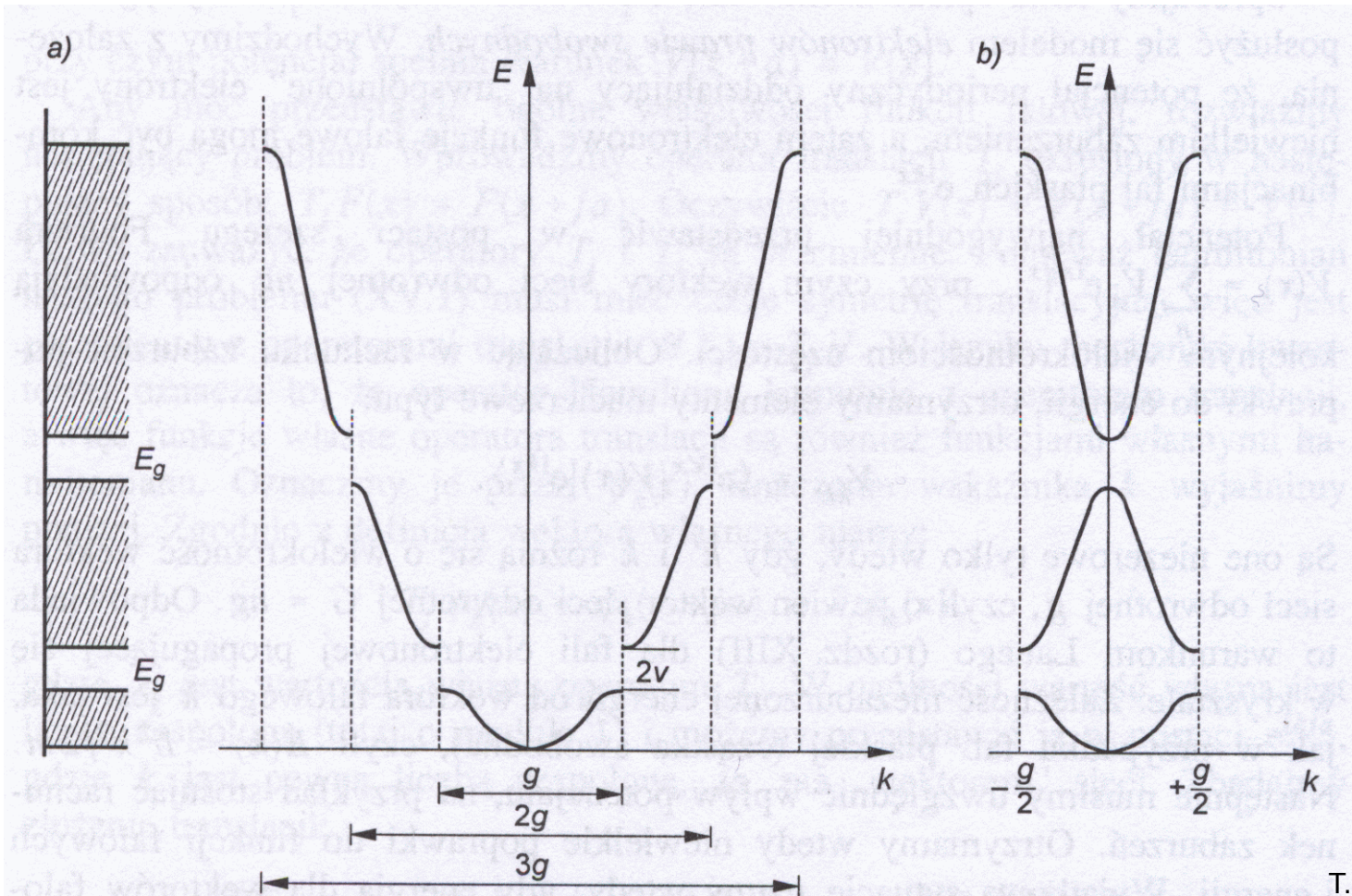
Na granicy strefy pojawia się przerwa energetyczna,
dla $\eta \rightarrow 0$ otrzymujemy:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \right] \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \right)^2 + 4V^2}$$



$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{g}{2} \right)^2 \pm V$$

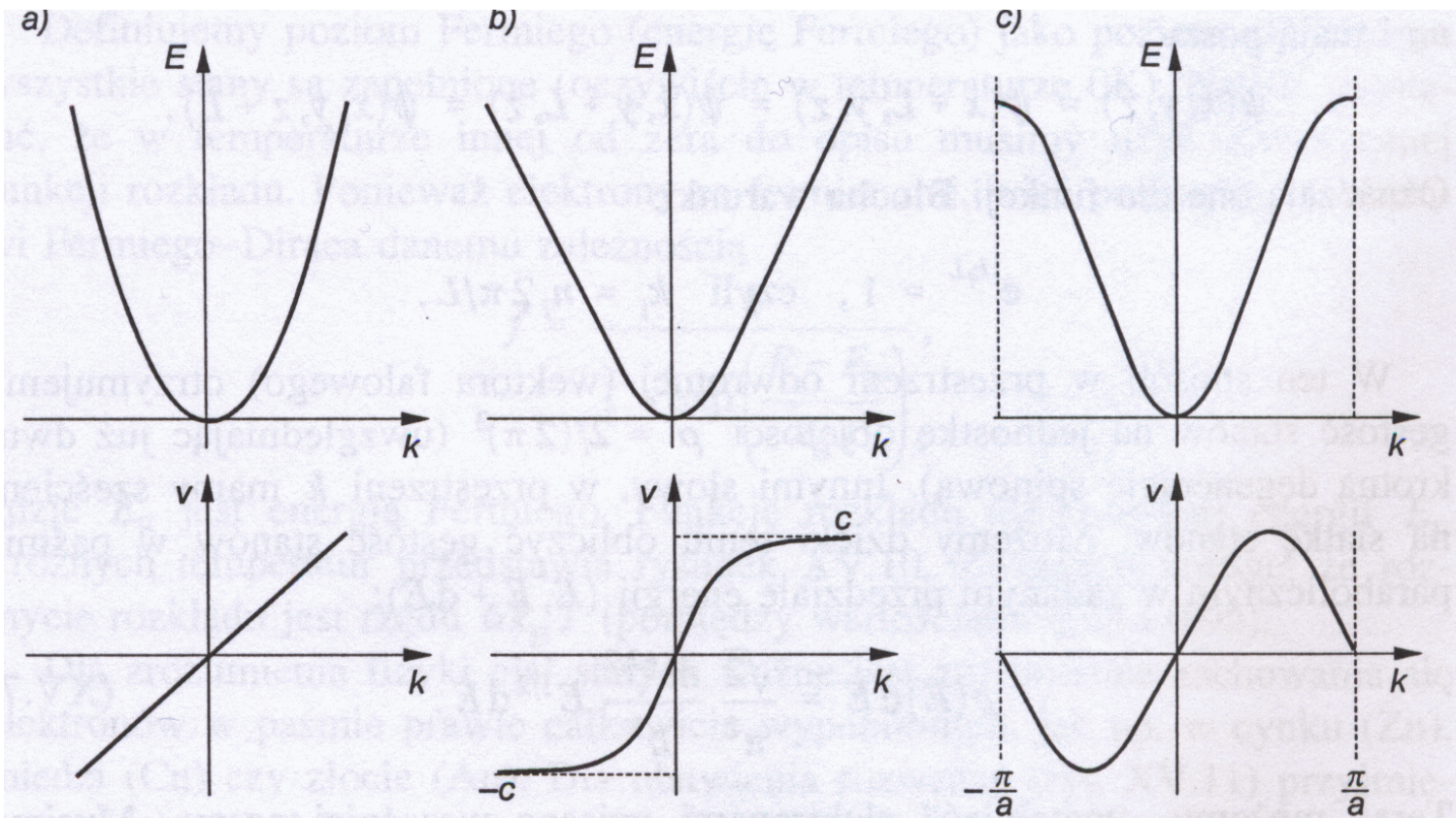
- Ponieważ funkcja Blocha przesunięta o wektor sieci odwrotnej nie zmienia się to wygodnie jest przedstawiać **wyniki tylko w pierwszej strefie Brillouina**. Trzeba wówczas **numerować pasma energetyczne**.
- **Stan elektronu** w ciele stałym zadany jest przez **wektor falowy z pierwszej strefy, numer pasma** oraz **rzut spinu**.



T. Stacewicz & A. Witowski

Rys. XV.5. Powstawanie przerw na granicy kolejnych stref Brillouina i redukcja przedstawienia pasm do pierwszej strefy

- Zależność $E(k)$ dla elektronu w ciele stałym różni się od zależności dla elektronu swobodnego (próżni), ponieważ elektron w kryształce stale oddziałuje z pozostałymi cząstkami układu – elektronami i jądrami.
- **Quasicząstka → elektron w ciele stałym.**



Prędkość grupowa

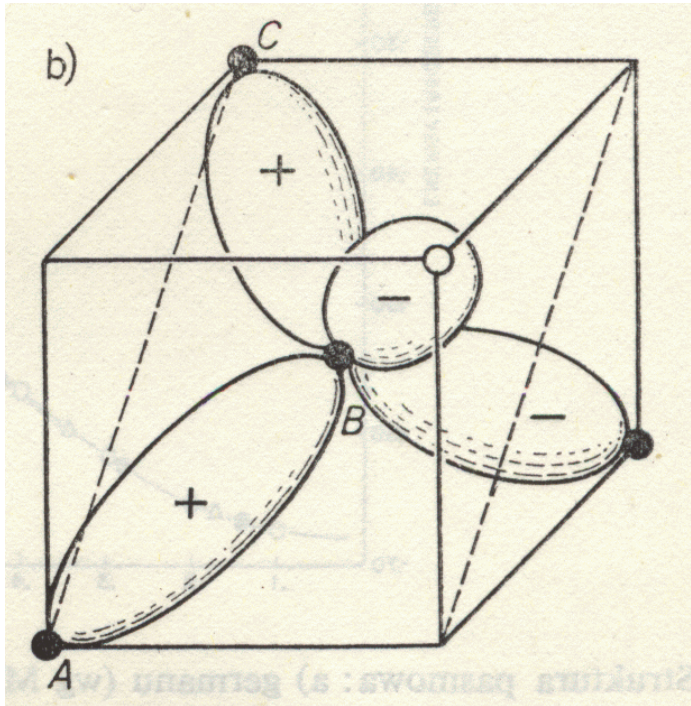
$$\vec{V}_{gr} = \frac{d\omega}{d\vec{k}}$$

$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$$

Rys. XV.8. Prędkość jako funkcja wektora falowego dla różnych zależności $E(k)$: a) cząstka swobodna, b) cząstka relatywistyczna, c) elektron w kryształce

Kryształy kowalencyjne

- Atomy $\rightarrow$ rdzenie atomowe + elektrony walencyjne
- Elektrony walencyjne są zlokalizowane



Metoda ciasnego wiązania (zmodyfikowana metoda orbitali molekularnych)

$$\hat{H} = \hat{H}_A + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_A(\vec{r} - \vec{r}_n) + v(\vec{r} - \vec{r}_n)$$

- V_A – potencjał swobodnego atomu

$$v(\vec{r} - \vec{r}_n) = \sum_{m \neq n} V_A(\vec{r} - \vec{r}_m)$$

$$E(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_k | \hat{H} | \Psi_k \rangle}{\langle \Psi_k | \Psi_k \rangle}$$

Szukamy rozwiązań
przybliżonych w postaci
kombinacji atomowych
funkcji własnych...

$$E(\vec{k}) \leq \frac{\langle \Phi_k | \hat{H} | \Phi_k \rangle}{\langle \Phi_k | \Phi_k \rangle}$$

Stosujemy metodę wariacyjną...

Metoda ciasnego wiązania

- Stany energetyczne $E(k)$ elektronu w kryształ, wywodzące się z poziomu energetycznego E_i swobodnego atomu.
- Zakładamy, że funkcja falowa jest kombinacją liniową atomowych funkcji własnych

$$\Phi_k = \sum_n a_n \Phi_A(\vec{r} - \vec{r}_n) = \sum_n e^{i\vec{k}\vec{r}_n} \Phi_A(\vec{r} - \vec{r}_n)$$

$$\langle \Phi_k | \Phi_k \rangle = \sum_{n,m} e^{i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)} \int \Phi_A^*(\vec{r} - \vec{r}_m) \Phi_A(\vec{r} - \vec{r}_n) d\vec{r}$$

Dla elektronu zlokalizowanego funkcja Φ_A ma znaczące wartości tylko w sąsiedztwie węzła sieci $\vec{r}_m$. Dlatego uwzględniamy tylko wyrażenia dla których $m=n$

N – liczba atomów w kryształ.

$$\langle \Phi_k | \Phi_k \rangle \approx \sum_n \int \Phi_A^*(\vec{r} - \vec{r}_n) \Phi_A(\vec{r} - \vec{r}_n) d\vec{r} = N$$

Metoda ciasnego wiązania

$$E(\vec{k}) \approx \frac{1}{N} \sum_{n,m} e^{i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)} \int \Phi_A^*(\vec{r} - \vec{r}_m) [E_i + v(\vec{r} - \vec{r}_n)] \Phi_A(\vec{r} - \vec{r}_n) d\vec{r}$$

Dla wyrazów zawierających **zaburzenie** $v(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)$ uwzględniamy przekrywanie funkcji falowych zlokalizowanych **na najbliższych sąsiadach**.

$$A_i = - \int \Phi_i^*(\vec{r} - \vec{r}_n) v(\vec{r} - \vec{r}_n) \Phi_i(\vec{r} - \vec{r}_n) d\vec{r}$$

$$B_i = - \int \Phi_i^*(\vec{r} - \vec{r}_m) v(\vec{r} - \vec{r}_n) \Phi_i(\vec{r} - \vec{r}_n) d\vec{r}$$

$$E(\vec{k}) \approx E_i - A_i - B_i \sum_m e^{i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)}$$

Suma po m zawiera tylko te wartości, dla których r_m opisuje najbliższych sąsiadów r_n . $A_i > 0$

Sieć regularna prosta

$$\vec{r}_n - \vec{r}_m = (\pm a, 0, 0); (0, \pm a, 0); (0, 0, \pm a)$$

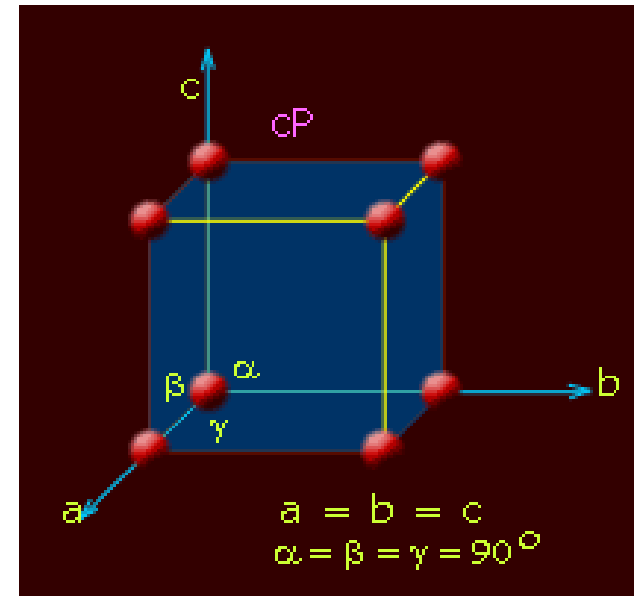
$$E(\vec{k}) \approx E_i - A_i - 2B_i(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$$

Uwaga!

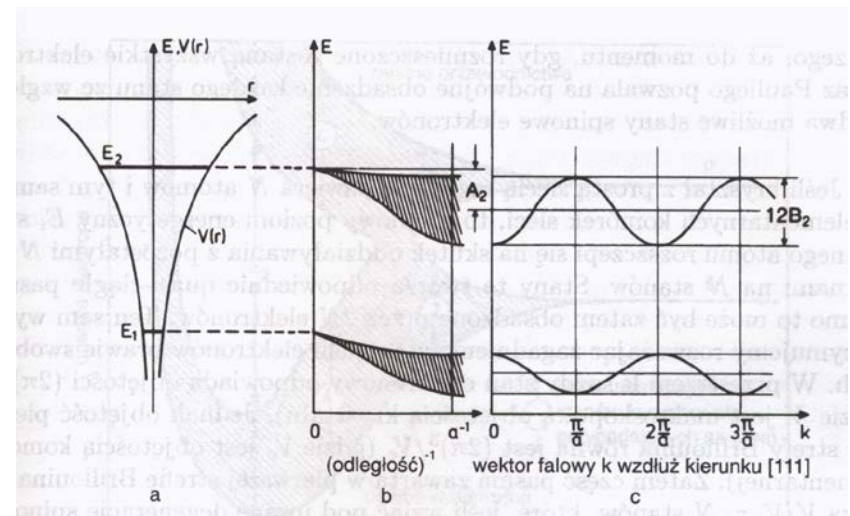
w pobliżu $k = 0$

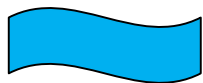
$$E(\vec{k}) \approx E_i - A_i - 6B_i + B_i a^2 k^2$$

Szerokość pasma tym większa im większe B_i
(przekrywanie się funkcji falowych
sąsiadujących atomów).

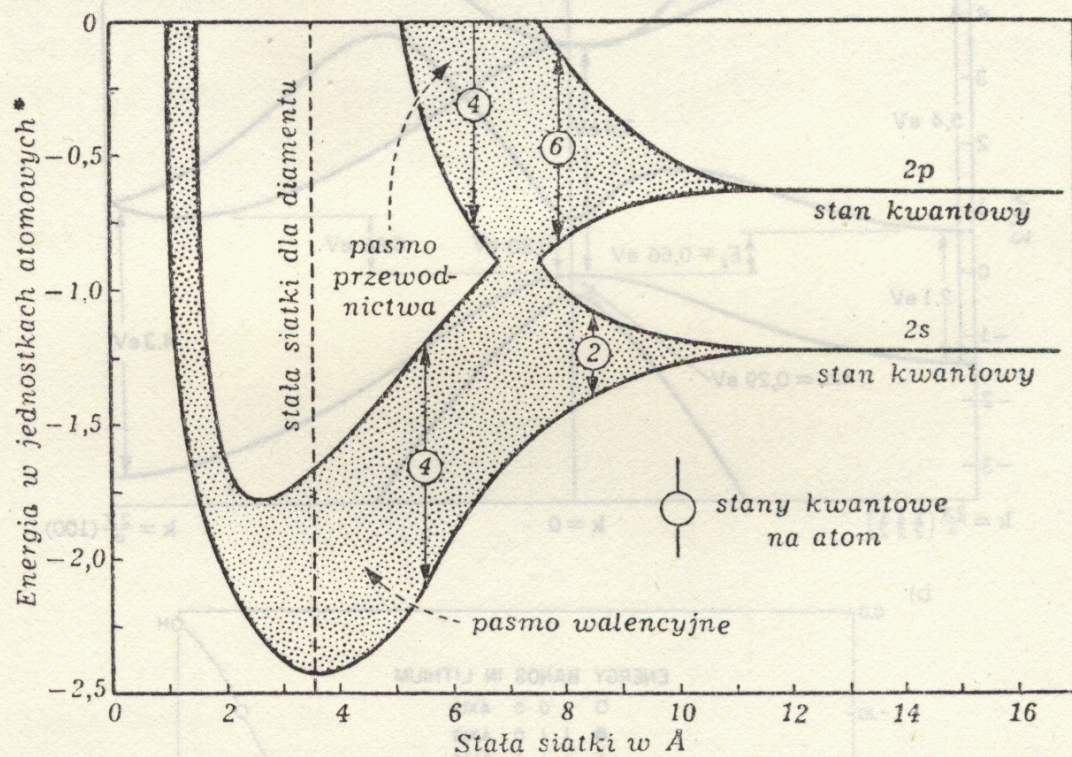


W. Ibach



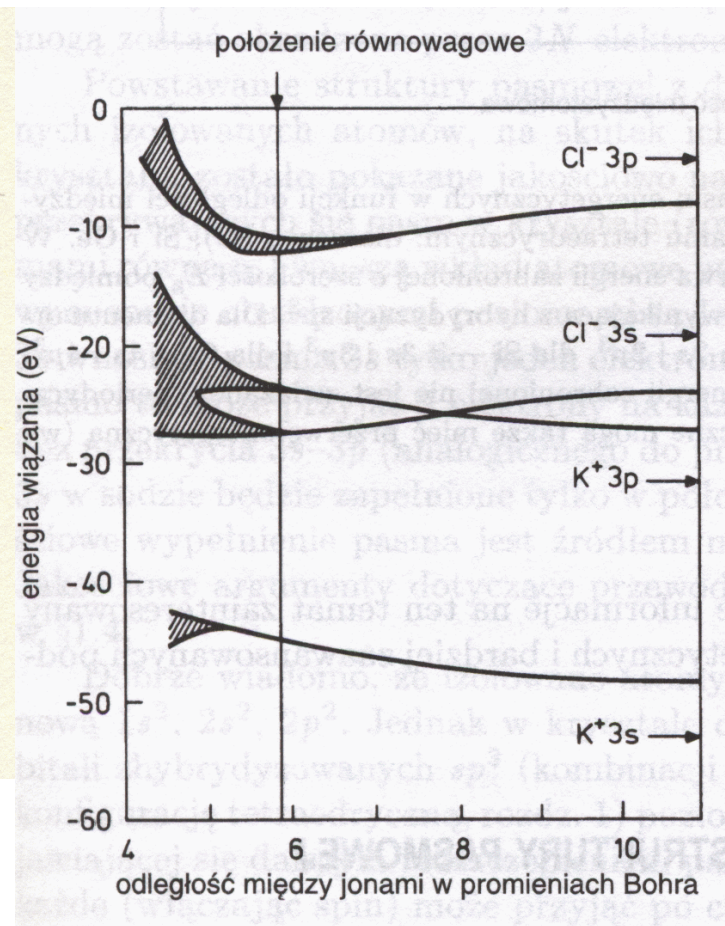


Przykłady



J. Ginter

Silne przekrywanie – szerokie pasma...



Słabe przekrywanie – wąskie pasma...

Rola zakazu Pauliego - metal, izolator

Przykład

- Sieć regularna prosta - **N atomów** przypada na **N komórek elementarnych**
- W wyniku oddziaływania **poziom energetyczny swobodnego atomu** ulega **rozszczeniu** z pozostałymi $N-1$ atomami na **N stanów**.
- Stany te utworzą **kwazi-ciągłe pasmo**, które ze względu na **degeneracje spinową** może być obsadzone, przez **$2N$ elektronów!**

Kryształ sodu

Konfiguracja atomowego sodu $1s^2, 2s^2, 2p^6, \mathbf{3s^1}$

Do przekrywających się pasm w kryształ wnoszą atomowe poziomy $3s, 3p$

Poziom atomowy $\mathbf{3s^1}$ wnosi do pasma $3s$ tylko jeden elektron na komórkę elementarną, jednak pasmo $3s$ może przyjąć dwa elektrony na każdą komórkę sieci.

Tak więc (nawet bez przekrycia pasm $3s-3p$) pasmo **$3s$ będzie wypełnione w połowie**. Mamy więc do czynienia z **metalem!**

Metal, izolator

Przykład - diament

Izolowane atomy węgla – konfiguracja $1s^2$, $2s^2$, $2p^2$

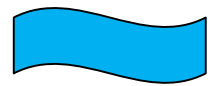
W przypadku diamentu na każdą komórkę elementarną przypadają po dwa atomy węgla. Na jeden atom w komórce przypadają po cztery elektrony walencyjne...

Hybrydyzacja sp^3 (stanów $2s$ i $2p$)

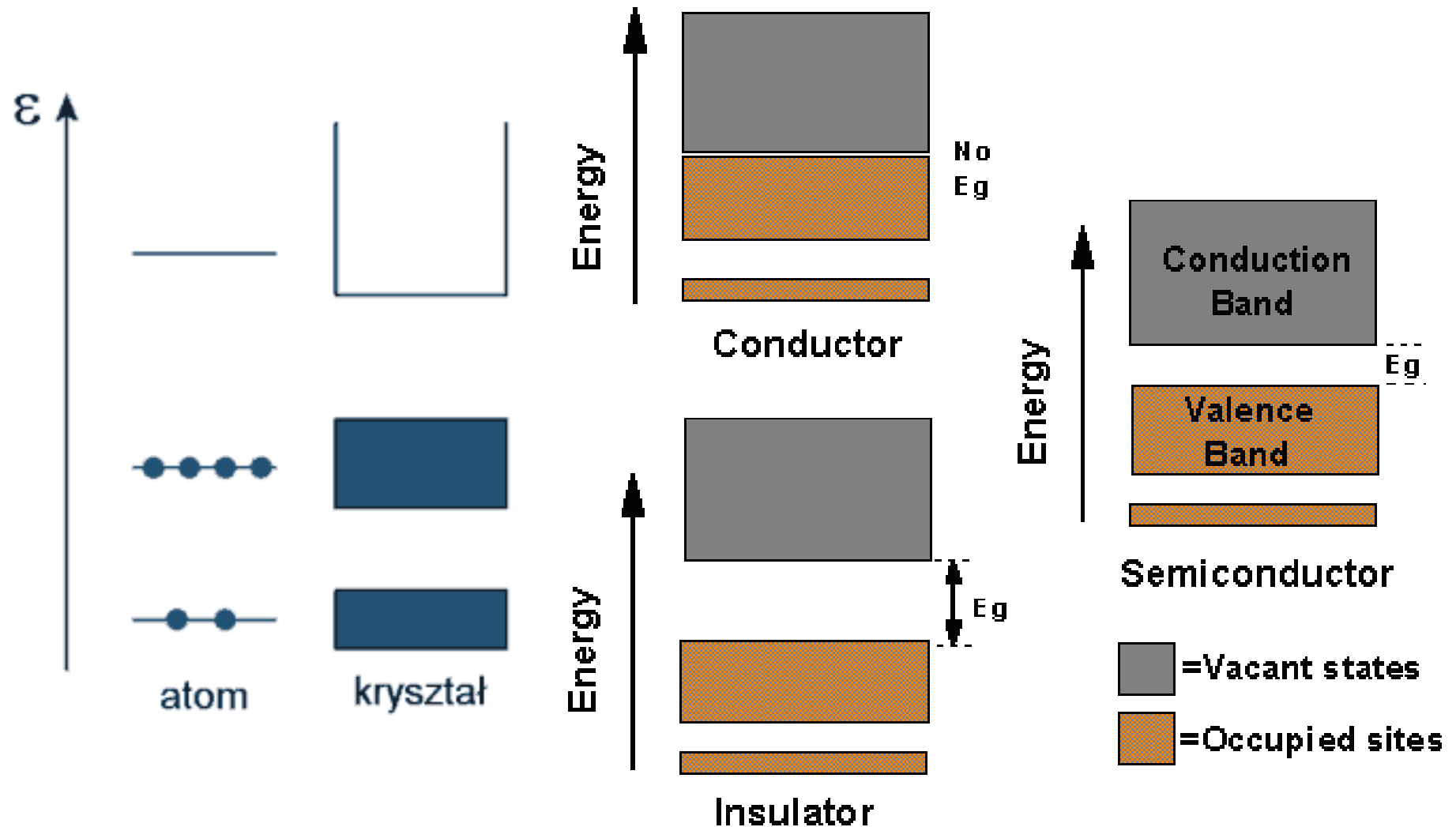
Oddziaływanie pomiędzy hybrydami sp^3 powoduje rozszczepienie stanów na dwa pasma, z których **każde (wyłączając spin)** może przyjąć po **cztery elektrony**.

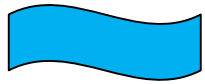
Cztery elektrony ze stanów $2s$ i $2p$ (w sumie osiem) **zapełniają całkowicie dolną część pasma sp^3** , **górne pasmo** pozostaje **puste** i jest oddzielone od dolnego **przerwą energetyczną**...

Mamy więc do czynienia z **izolatorem**.



Przewodniki i izolatory





Przewodniki i izolatory

Półprzewodniki – (najczęściej) substancje krystaliczne, których przewodnictwo właściwe może być zmieniana w szerokim zakresie poprzez **domieszkowanie**.

Wartość przerwy energetycznej dla różnych półprzewodników
W temperaturze pokojowej:

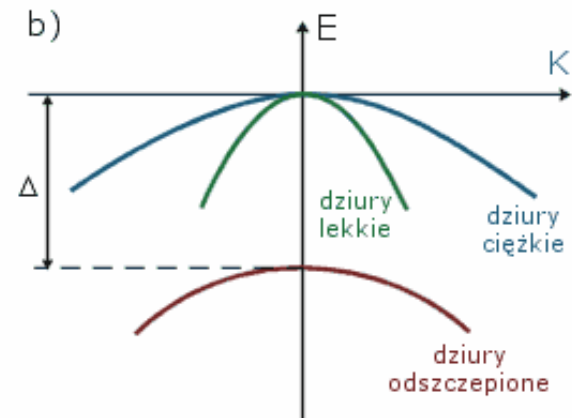
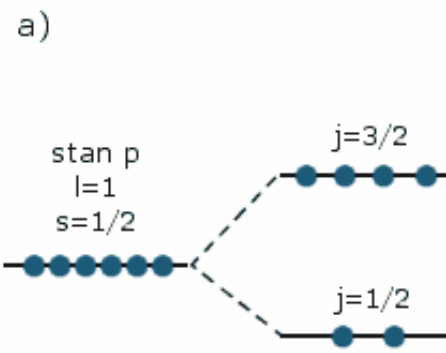
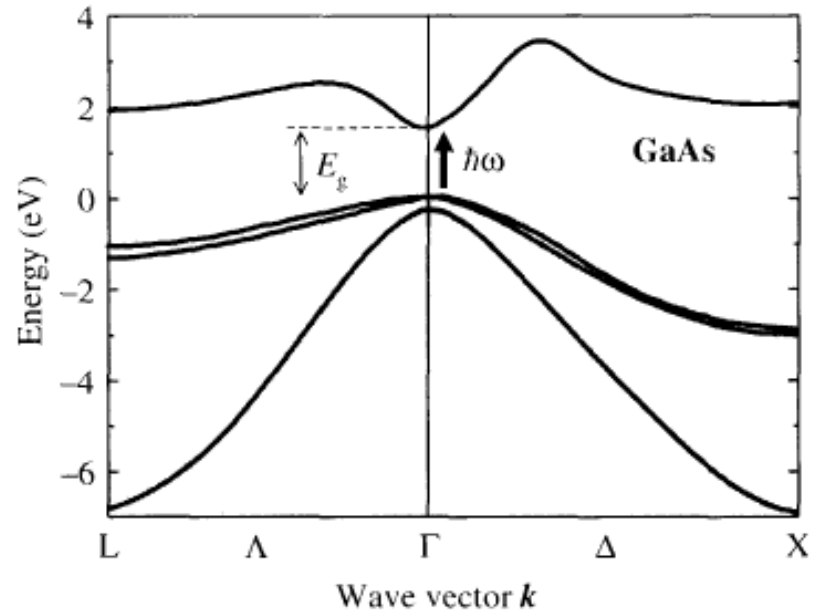
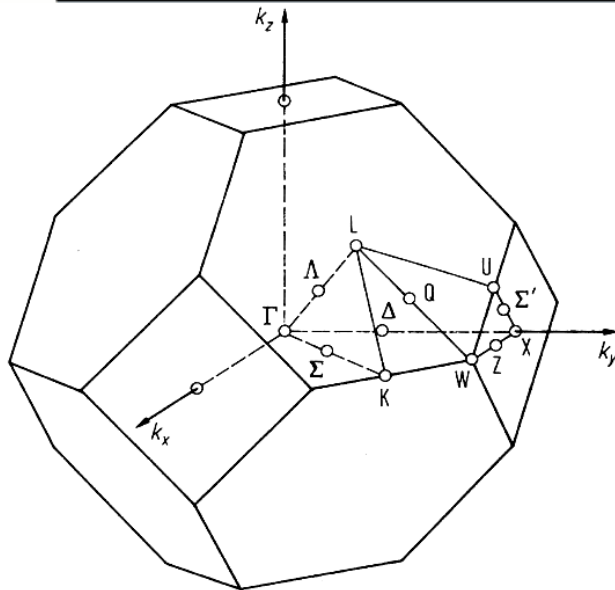
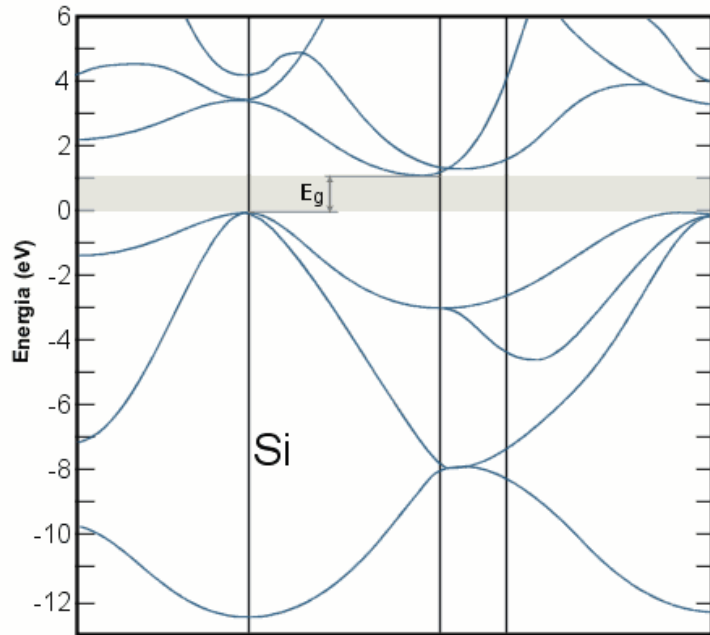
Ge 0,7 eV, Si 1,1 eV , GaAs 1,4 eV, GaN 3,4 eV, AlN 6,2 eV

Półprzewodniki szerokoprzerwowe – wielkość przerwy energetycznej jak dla izolatorów...

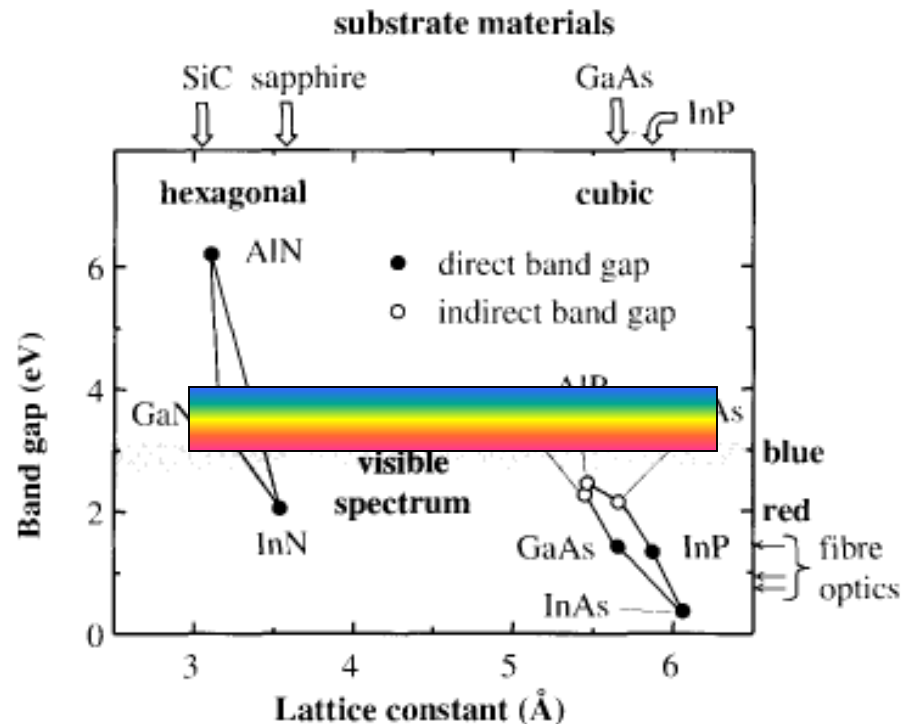
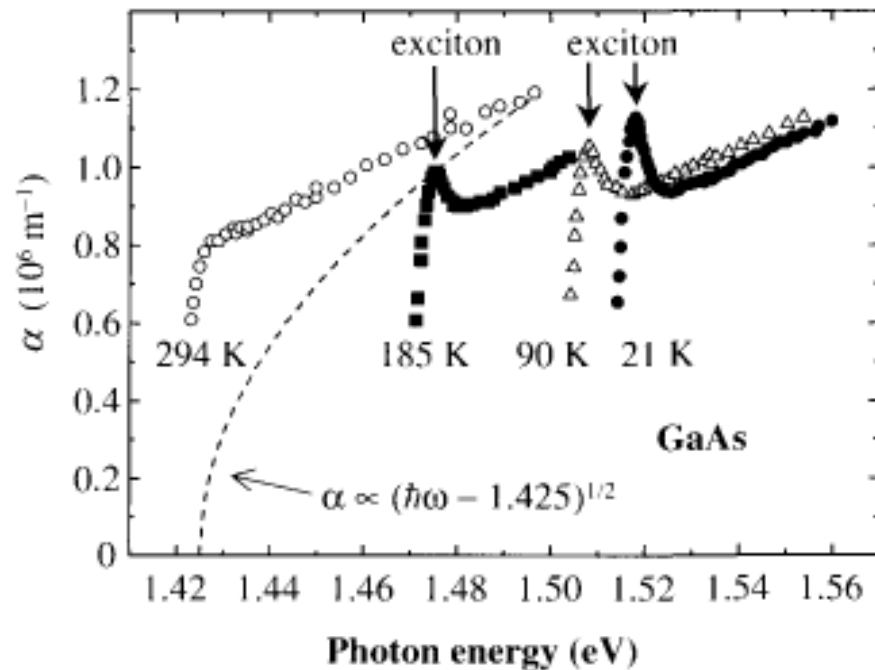
Kiedyś stosowano podział dla $E_g < 3$ eV – półprzewodnik
dla $E_g > 3$ eV izolator, jednak możliwość zmian przewodnictwa (przez domieszkowanie) jest znacznie ważniejsza.

Przykład: diament domieszkowany jest półprzewodnikiem...

Przykłady



Doświadczalne metody wyznaczania przerw energetycznych



Jeśli jest przerwa energetyczna to można ją wyznaczyć badając transmisję światła, odbicie, luminescencję, itd...

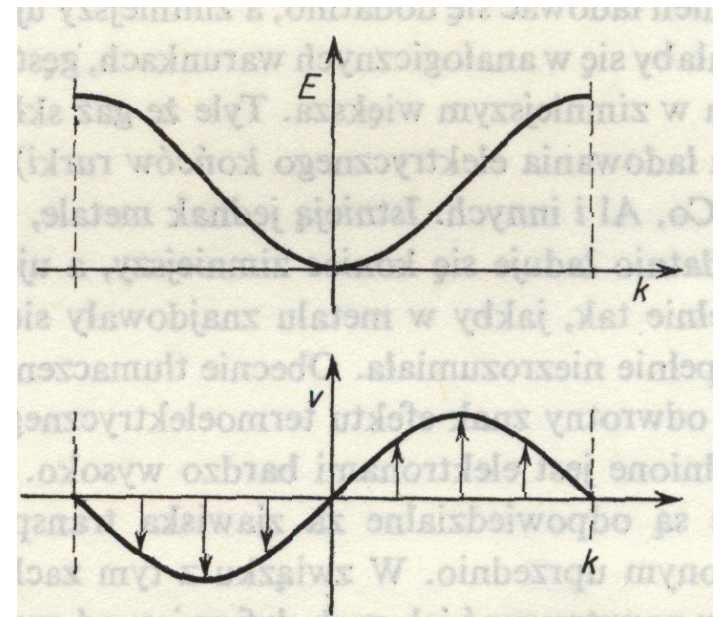
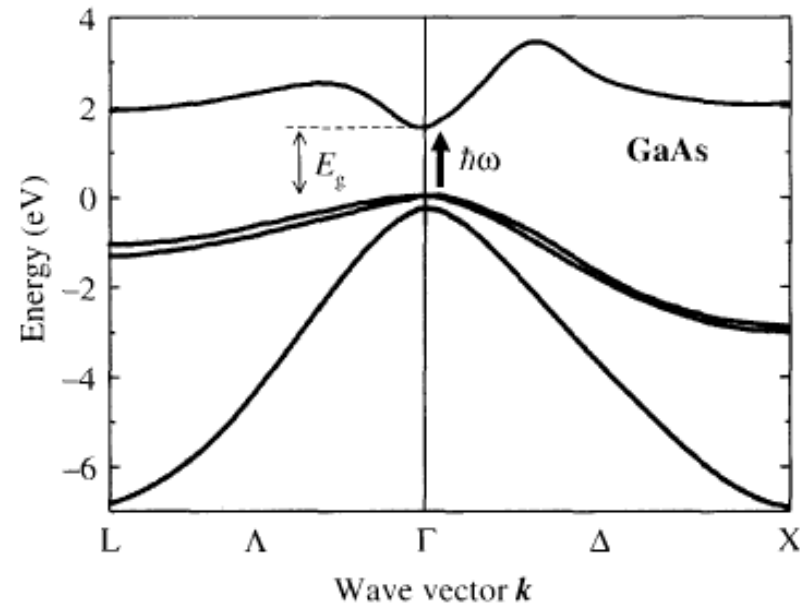
Półprzewodniki

- Co to jest k ?
- Wielkość $\hbar k$ ma wymiar pędu, ale nie jest pędem ponieważ funkcja Blocha nie jest funkcją własną operatora pędu
- k jest liczbą kwantową opisującą stany Blocha.

Prędkość grupowa

$$\vec{V}_{gr} = \frac{d\omega}{d\vec{k}}$$

$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$$



Masa efektywna

W okolicach ekstremum

$$E_n \approx E_n(0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 E_n}{dk^2} \right)_0 k^2 \approx E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

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

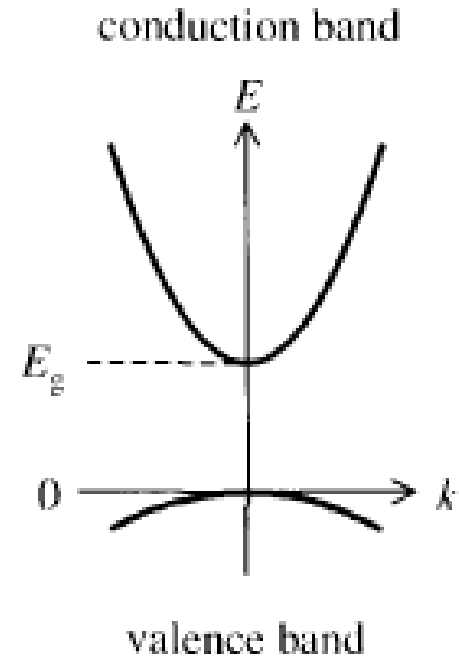
$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{m^*} \hbar \vec{k}$$

$$\hbar \vec{k} = m^* \vec{V}$$



Kwazipęd

Pasma paraboliczne
(„dyspersja paraboliczna”)



Crystal	E_g (eV) (0 K)	E_g (eV) (300 K)	Δ (eV)	m_c^*	m_{lh}^*	m_{lh}^*	m_{so}^*
GaAs	1.519	1.424	0.34	0.067	0.5	0.08	0.15
GaSb	0.81	0.75	0.76	0.041	0.28	0.05	0.14
InP	1.42	1.34	0.11	0.077	0.6	0.12	0.12
InAs	0.42	0.35	0.38	0.022	0.4	0.026	0.14
InSb	0.24	0.18	0.85	0.014	0.4	0.016	0.47

Siła zewnętrzna

$$\vec{F} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$$

Elektron w ciele stałym zachowuje się inaczej niż w próżni, ponieważ oddziałuje z siecią krystaliczną.

$$\vec{V} \equiv \vec{V}_{gr} = \frac{d\omega}{d\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$$

- prędkość elektronu utożsamiamy z prędkością grupową

$$\Delta E = FV\Delta t$$

zmiana energii elektronu:

$$\Delta E = \frac{dE}{dk} \Delta k = \hbar V \Delta k$$

← formalnie możemy to zapisać

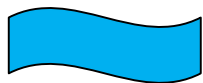
porównując wzory dostajemy:

$$\hbar \Delta k = F \Delta t$$

zmiana kwazipędu = popęd
czyli bardzo podobnie jak dla
cząstki swobodnej, ale...

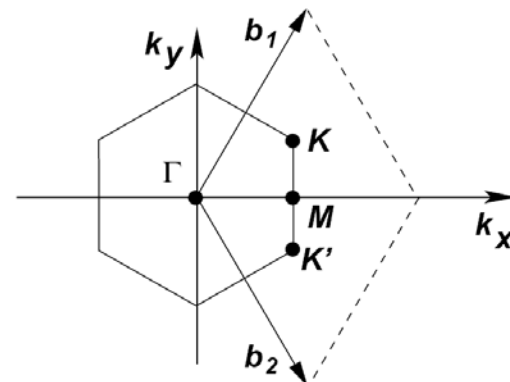
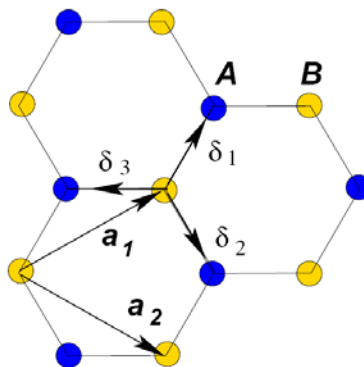
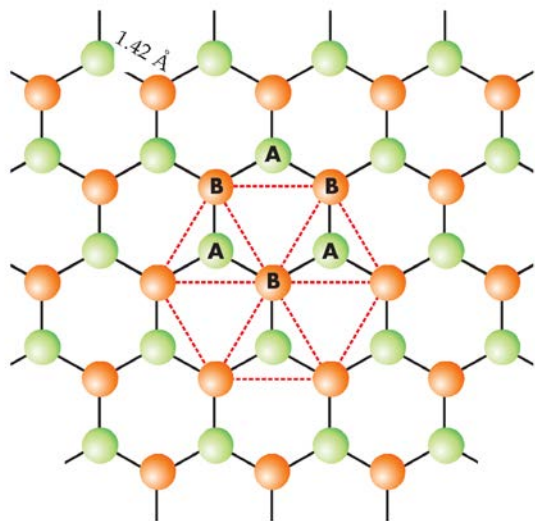
$$\Rightarrow a = \frac{dV}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F = \frac{1}{m^*} F$$

masa efektywna



Wykład 13 Struktura pasmowa grafenu – liniowa dyspersja

...znana od lat: (P.R. Wallace, *Phys. Rev.* (1947))

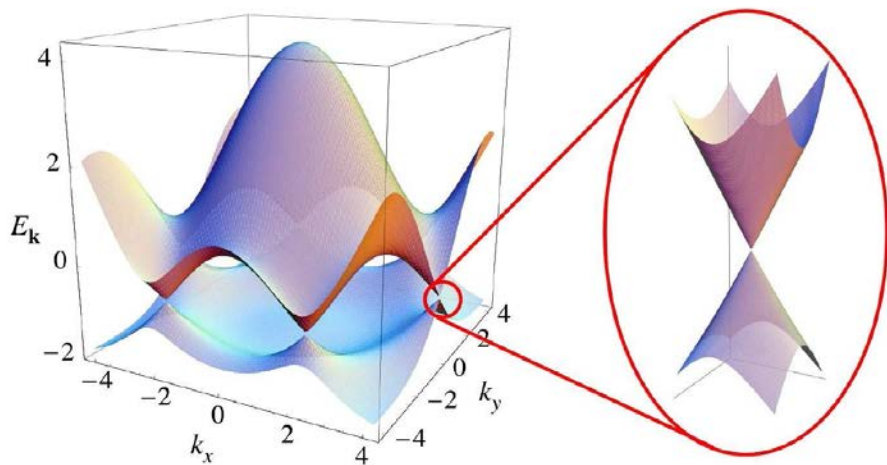


$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}),$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$$

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}),$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3})$$



$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}$$

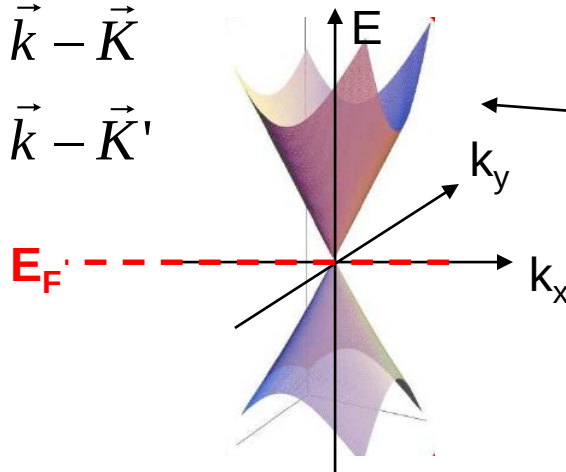
$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)$$

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right)$$

Bezmasowe fermiony Diraca w pobliżu punktów K, K'

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \vec{K}$$

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \vec{K}'$$



$$\varepsilon = \pm \tilde{c} \cdot |\vec{p}|$$

Relacja dyspersyjna jak dla fotonu

$$c \rightarrow \tilde{c} \approx c / 300$$

$$\frac{3}{2} t \cdot a$$

$$\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$$

$$\hat{H} = \tilde{c} \hat{\sigma} \cdot \vec{p} = \hbar \tilde{c} \hat{\sigma} \cdot \vec{k} = \gamma \hat{\sigma} \cdot \vec{k}$$

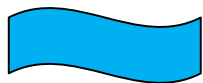
$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y) \\ \gamma(\hat{k}_x + i\hat{k}_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F^A(\mathbf{r}) \\ F^B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} F^A(\mathbf{r}) \\ F^B(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

Równanie Diraca dla bezmasowych fermionów!



grafen

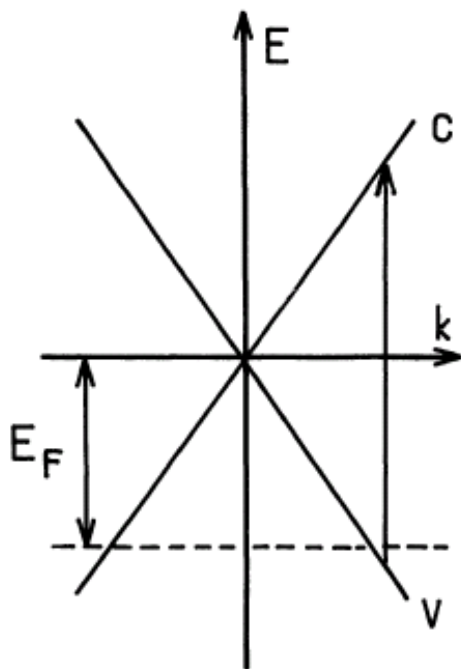


Fig. 4. — Zero gap band structure of the first stage.

*J. Blinowski et al.,
J. Physique 41 (1980) 47-58*

HgTe

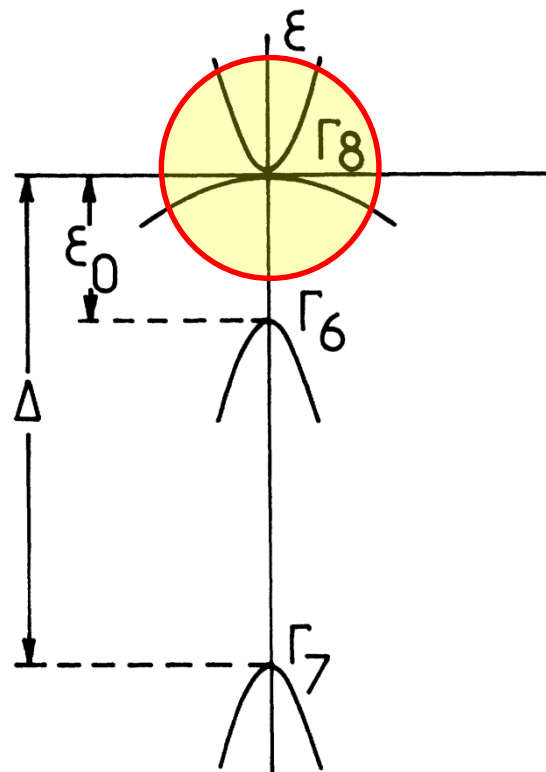


FIG. 1. Inverted band structure of HgTe.

Y. Guldner, ...M. Grynberg, ...
Phys. Rev. B 8, 3875 (1973)

phys. stat. sol. 20, 113 (1967)

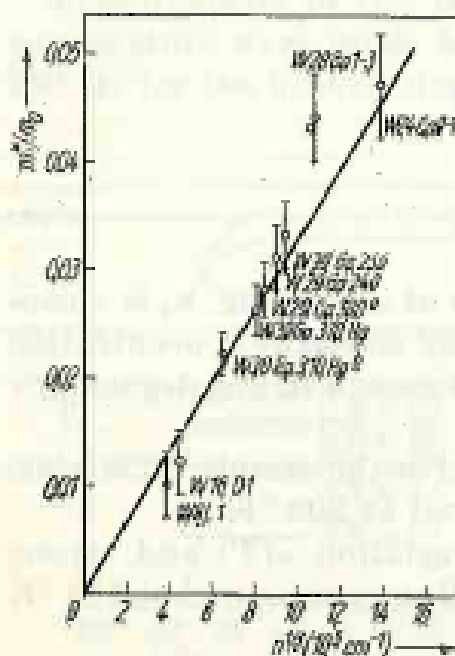
Subject classification: 13.1; 22.4.3

Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw (a)
and Institute of Experimental Physics, Warsaw University (b)

Conduction Band Structure of $\text{Cd}_{0.1}\text{Hg}_{0.9}\text{Te}$

By

R. R. GALĄZKA (a) and L. SOSNOWSKI (a, b)



of $\Delta\alpha (H = \infty)$.

As equation (2) indicates the effective mass m^* depends on concentration.

The results given in Table 1 may be presented in graphical form (Fig. 5).

Fig. 5 gives a linear variation of the effective mass with k in the measured range of concentration.

**Liniowe relacje dyspersji
występują nie tylko w grafenie!**

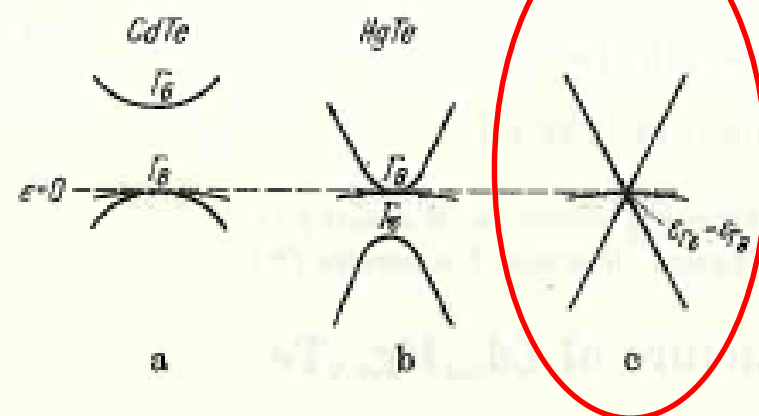


Fig. 5. Experimental dependence of the effective mass on $n^{1/3}$ (in the case of strong degeneracy $n^{1/3} \sim k$)

Warunki Borna-Kármána

Wyobrażamy sobie pewien fikcyjny obszar w kryształach nieskończonym w postaci sześcianu o boku L i żądamy aby funkcja falowa posiadała periodyczność dla tego obszaru:

$$\Psi(x + L, y, z) = \Psi(x, y + L, z) = \Psi(x, y, z + L) \quad (\Psi - \text{funkcja Blocha})$$

Stąd: Stany te wyznaczają w przestrzeni odwrotnej siatkę o gęstości $V/(2\pi)^3$
Zatem **gęstość stanów** na jednostkę obj. trójwymiarowej przestrzeni k

$$e^{ik_x L} = 1$$

$$e^{ik_y L} = 1$$

$$e^{ik_z L} = 1$$

$$k_i = n_i \frac{2\pi}{L}$$

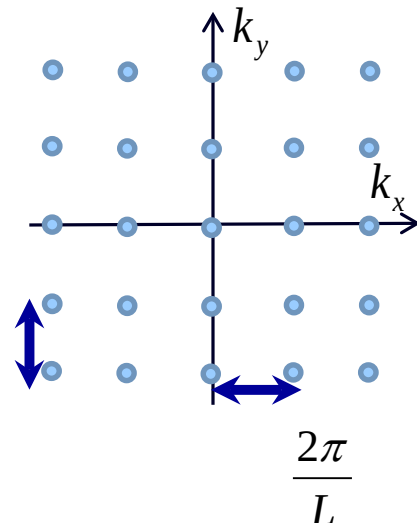
$$\rho_k = \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

$$\rho_k = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$$

Zwykle przyjmuje się, że wyróżniony obszar ma objętość jednostkową mamy (w trzech wymiarach), zatem po **uwzględnieniu degeneracji spinowej**:

$$\rho_k = \rho(k) = \frac{2}{(2\pi)^3}$$

$$\frac{2\pi}{L}$$



Gęstość stanów
W przestrzeni k jest stała!

Ile stanów jest w przedziale energii ($E, E + dE$)?

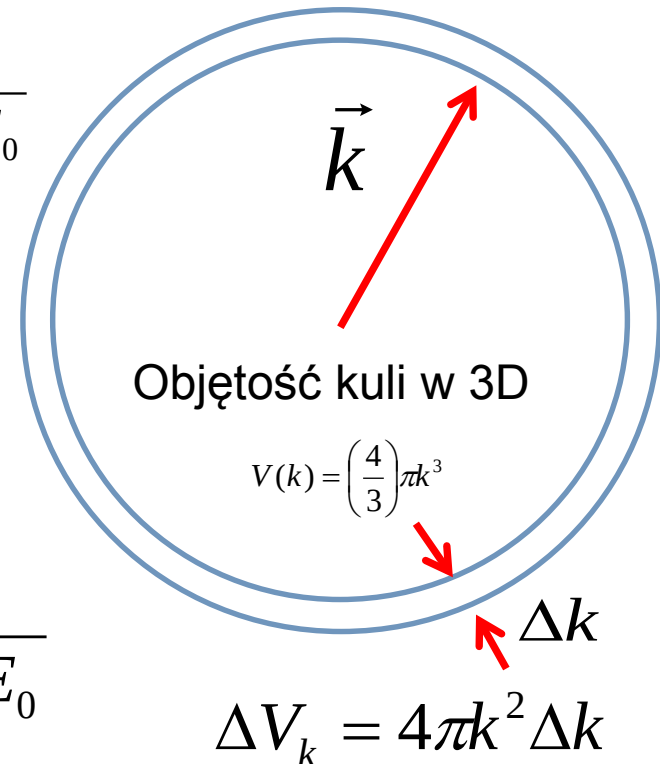
- Pasmo paraboliczne i sferyczne

$$E(k) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad k(E) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \sqrt{E - E_0}$$

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$$

$$n(k) = \rho_k V(k) = \frac{2}{(2\pi)^3} \left(\frac{4}{3} \right) \pi k^3$$

$$\rho_E = \frac{dn}{dE} = \frac{dn}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_0}$$



Uwaga -tak jest w 3 wymiarach dla dyspersji parabolicznej!

Gęstość stanów - inny sposób liczenia

$$\rho(E)\Delta E = \rho_k \Delta V_k \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{Liczba stanów w przestrzeni energii} = \\ \text{= Liczba stanów w przestrzeni pędów} \end{array}$$

$$\Delta V_k = 4\pi k^2 \Delta k$$



$$\rho(E)\Delta E = \rho_k 4\pi k^2 \Delta k$$



$$\rho(E) = \rho_k 4\pi k^2 \frac{\Delta k}{\Delta E}$$

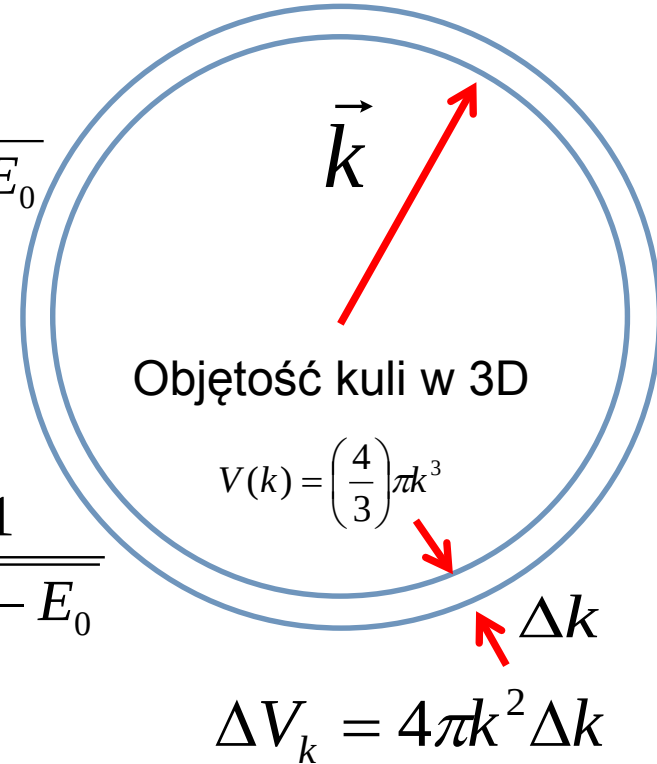
$$\leftarrow \frac{\Delta k}{\Delta E} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{E - E_0}}$$



$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_0}$$

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$k(E) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \sqrt{E - E_0}$$

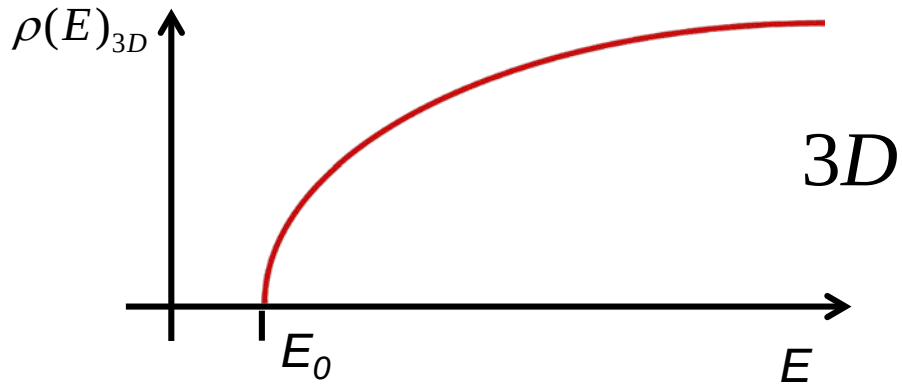


$$\rho(k) = \frac{1}{(2\pi)^3} \quad \rho(E) = \frac{dN(E)}{dE}$$

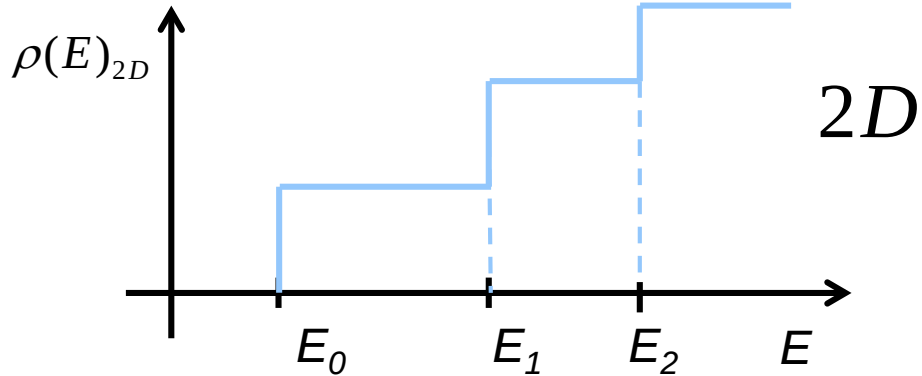
Zadanie na ćwiczenia ☺

D=1	D=2	D=3
$N(E) = 2k(E)\rho_k$ $= k(E) \frac{2 \cdot 2}{2\pi}$	$N(E) = \pi[k(E)]^2 \rho_k$ $= \pi[k(E)]^2 \frac{2}{(2\pi)^2}$	$N(E) = \frac{4}{3}\pi[k(E)]^3 \rho_k$ $= \frac{4}{3}\pi[k(E)]^3 \frac{2}{(2\pi)^3}$
$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$		
$k = \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}$	$k^2 = \frac{2m^* E}{\hbar^2}$	$k^3 = \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$
$N(E) = \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{4}{2\pi}$	$N(E) = \pi \frac{2m^* E}{\hbar^2} \frac{2}{(2\pi)^2}$	$N(E) = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{(2\pi)^3}$
$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{E}}$	$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \frac{m^*}{\hbar^2}$	$\rho(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}$

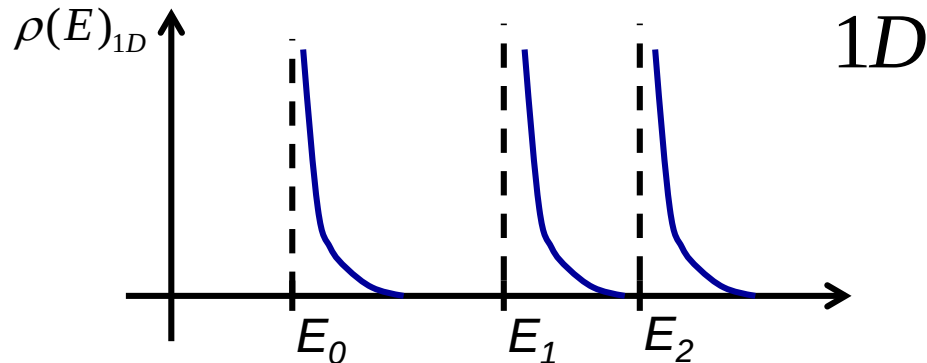
Gęstość stanów dla pasma parabolicznego



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



gdy mamy więcej pasm,
w studni kwantowej



gdy mamy więcej pasm,
np. w nanodrucie

Małe podsumowanie

- Wektor falowy k jest wielkością numerującą stany w 1
- Każde pasmo jest oznaczane indeksem j .
- Prędkość elektronu w paśmie.

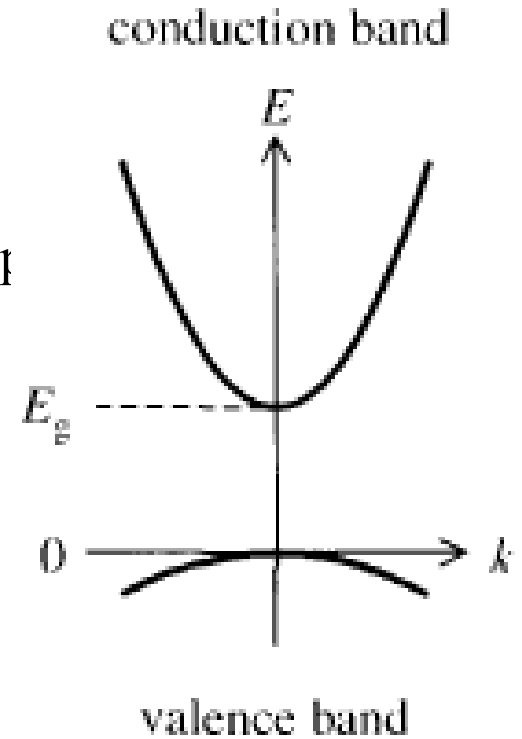
- Zmiana wektora falowego pod wpływem siły. $\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{m^*} \hbar \vec{k}$

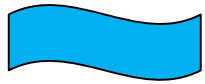
- Funkcja falowa jest postaci $\vec{F} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$

$$\Psi_k(x) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{j\vec{k}} \text{ (nieperiodyczna z okresem sieci)}$$

$$u_{j\vec{k}}(\vec{r}) = u_{j\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) \text{ (periodyczna z okresem sieci)}$$

- Funkcja ta opisuje stany, które są stacjonarnymi rozwiązaniami równania Schrödingera z potencjałem periodycznym.



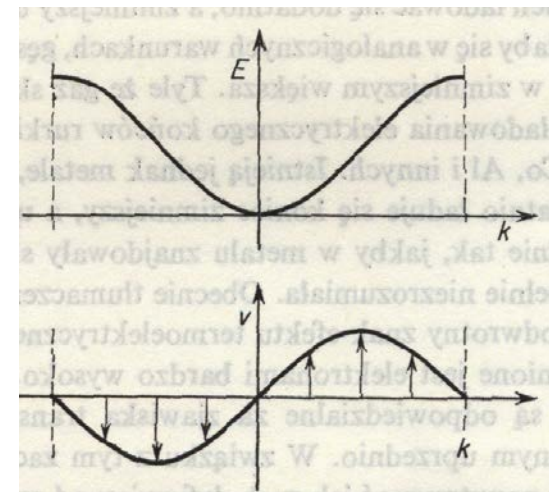
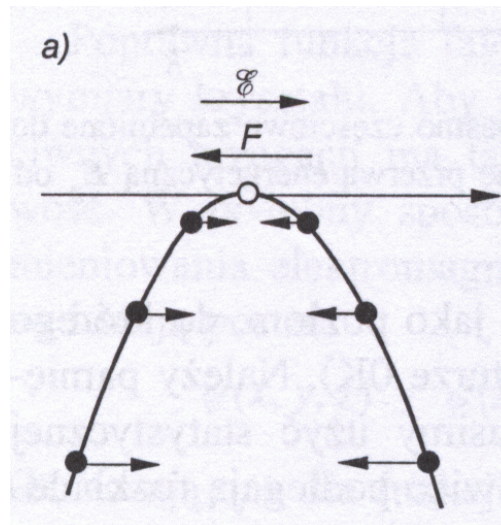
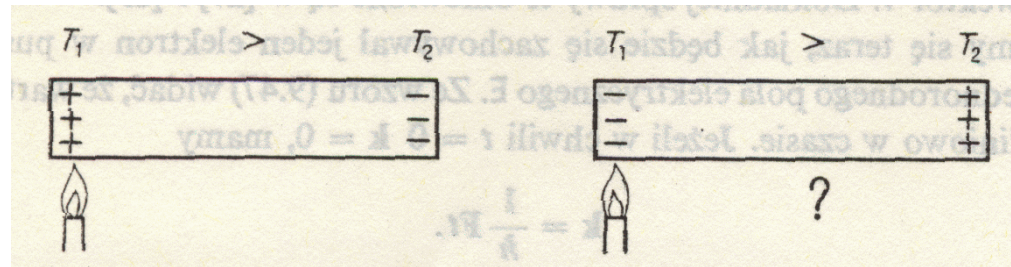


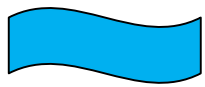
- W idealnym nieskończonym kryształe elektron nie ulega rozproszeniom. Droga swobodna w niskich temperaturach czystych kryształach metali jest „ogromna” ~ mm lub nawet cm
- Mechanizm rozpraszania - wszelkie odstępstwa od periodyczności.

Zjawisko termoelektryczne

- Na, K, Co, Al – elektrony
- Zn, Cu, Au - ???
- Pasmo prawie całkowicie wypełnione elektronami.
- Masa efektywna ujemna.
- Jeden stan pusty.
- Całkowity pęd

$$\vec{j} = -\sum_i e\vec{v}_i = 0$$





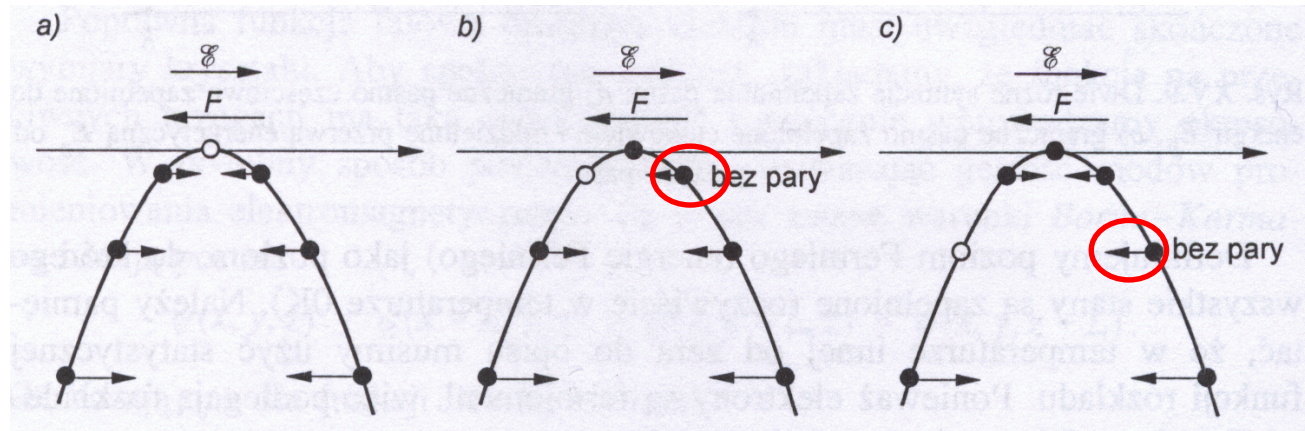
Quasi - cząstka dziura

Efekt w polu elektrycznym:

$$\vec{j} = -e\vec{v}_{e\text{-bez-pary}}$$

$$\vec{j} = +e\vec{v}_{e\text{-w-pustym-miejscu}}$$

$$\vec{v}_h = \vec{v}_{e\text{-w-pustym-miejscu}}$$



J. Ginter

Dziura quasi cząstka z dodatnią masą efektywną, która opisuje właściwości zbioru elektronów w ciele stałym o masie ujemnej z jednym stanem pustym

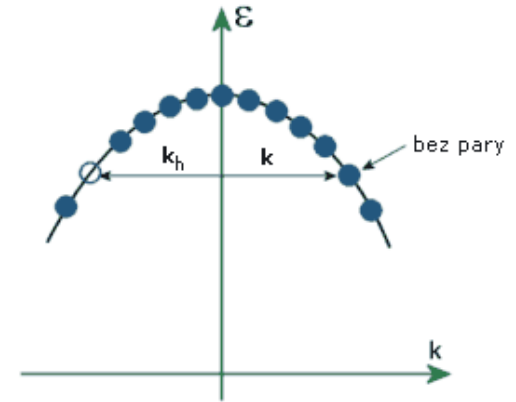
Quasi - cząstka dziura

Pseudopęd dziury

$$\hbar \vec{k}_h = \sum_i \hbar \vec{k}_i$$

Suma pseudopędów
wszystkich elektronów
w paśmie walencyjnym

$$\hbar \vec{k}_h = \hbar \vec{k}_e \quad \begin{array}{l} \text{pseudopęd dziury =} \\ \text{= pseudopęd elektronu bez pary} \end{array}$$

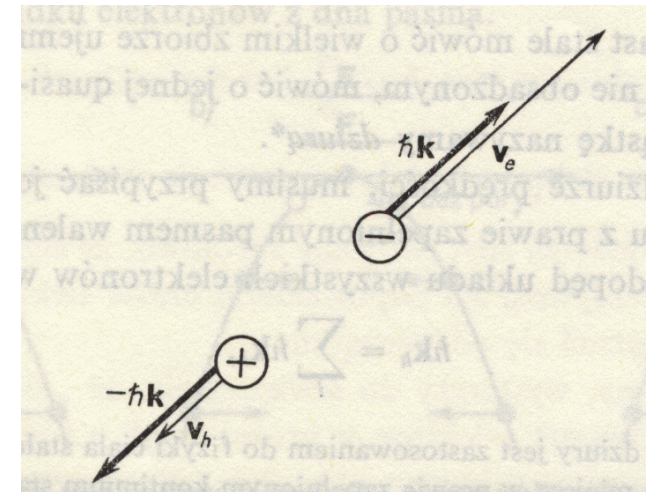
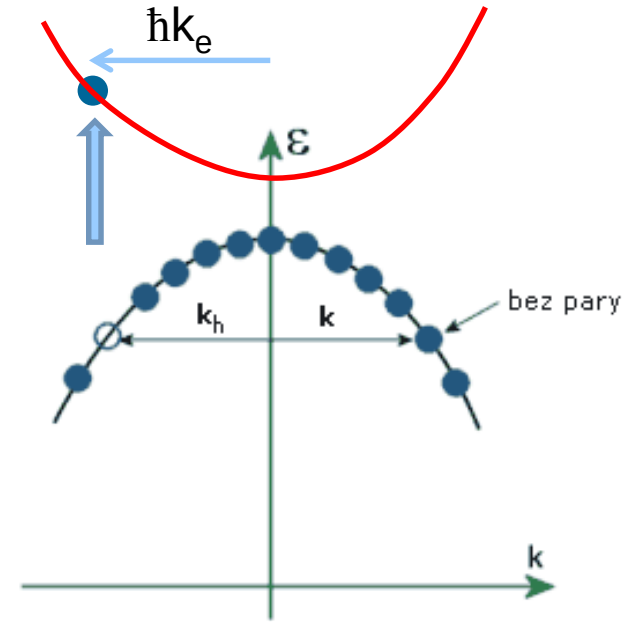


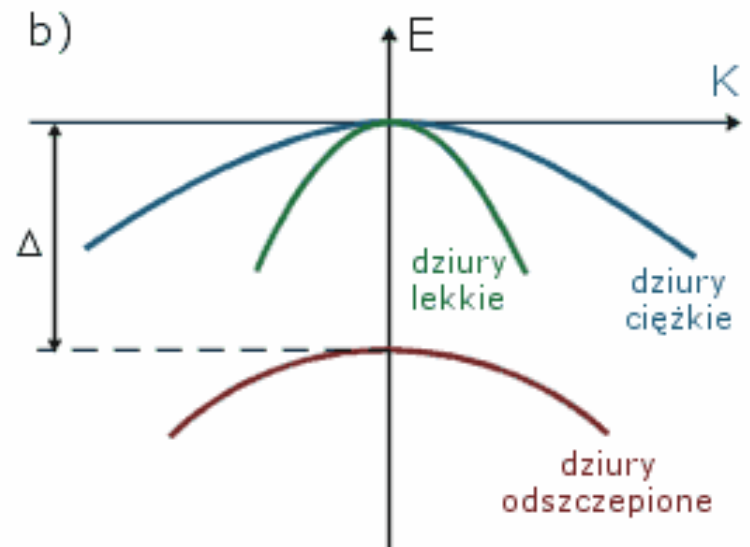
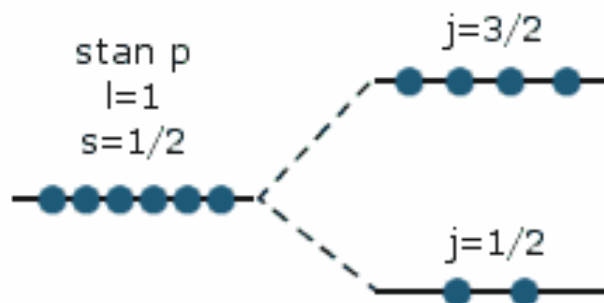
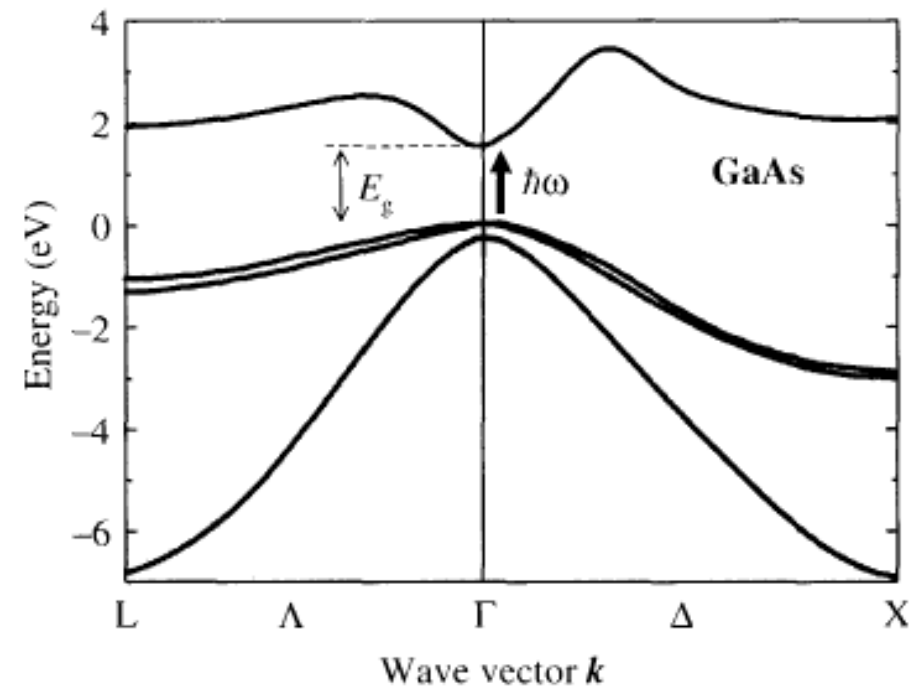
Masa efektywna elektronu w paśmie walencyjny jest ujemna:

$$\begin{aligned} \vec{v}_h &= \vec{v}_{e-w-pustym-miejsu} = -\vec{v}_{e-bez-pary} = -\frac{\hbar \vec{k}_{e-bez-pary}}{m^*} = \\ &= \left(-\frac{1}{m^*} \right) \hbar \vec{k}_{e-bez-pary} = \frac{1}{m_h^*} \hbar \vec{k}_h \end{aligned}$$

Quasi - cząstka dziura

- **Przeniesienie jednego elektronu o pseudopędzie $\hbar k$ z pasma walencyjnego do pasma przewodnictwa powoduje powstanie jednego „elektronu w ciełe stałym” o psudopędzie $\hbar k$ i prędkości $\hbar k/m_e^*$**
- **Zwalnia się jeden stan w paśmie walencyjnym. Powstaje jedna dziura o równym co do wartości, ale przeciwnie skierowanym pseudopędzie – $\hbar k$**
(taki jest całkowity pseudopęd wszystkich elektronów w prawie pełnym paśmie walencyjnym, czyli elektorny „bez pary”).
Prędkość dziury – $\hbar k/m_h^*$





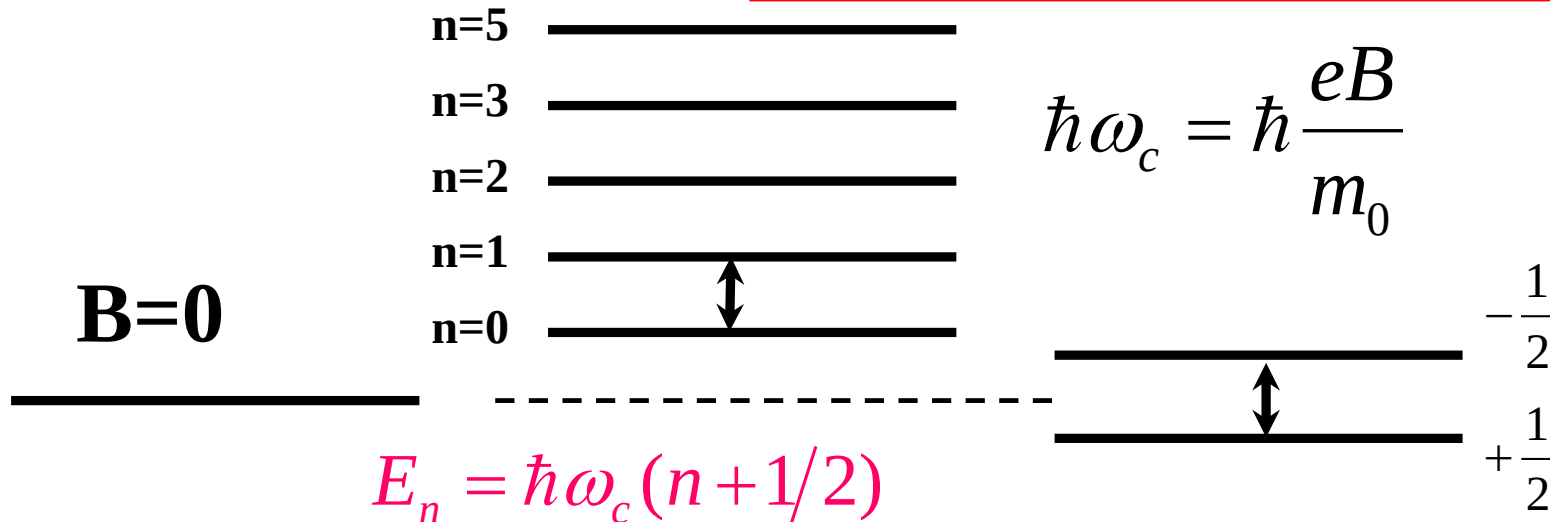
Masy efektywne dziur z różnych podpasz różnią się!

Elektron swobodny (dziura swobodna) w polu magnetycznym

Poziomy Landaua



$$E_{n,s,k_z} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c \pm \frac{1}{2}g\mu_B B$$



$$\frac{\hbar e}{m_0} = 0,116 \text{ meV/T}$$

$$\Delta E = g\mu_B B \quad g = 2$$

$$\mu_B = 0,058 \text{ meV/T}$$

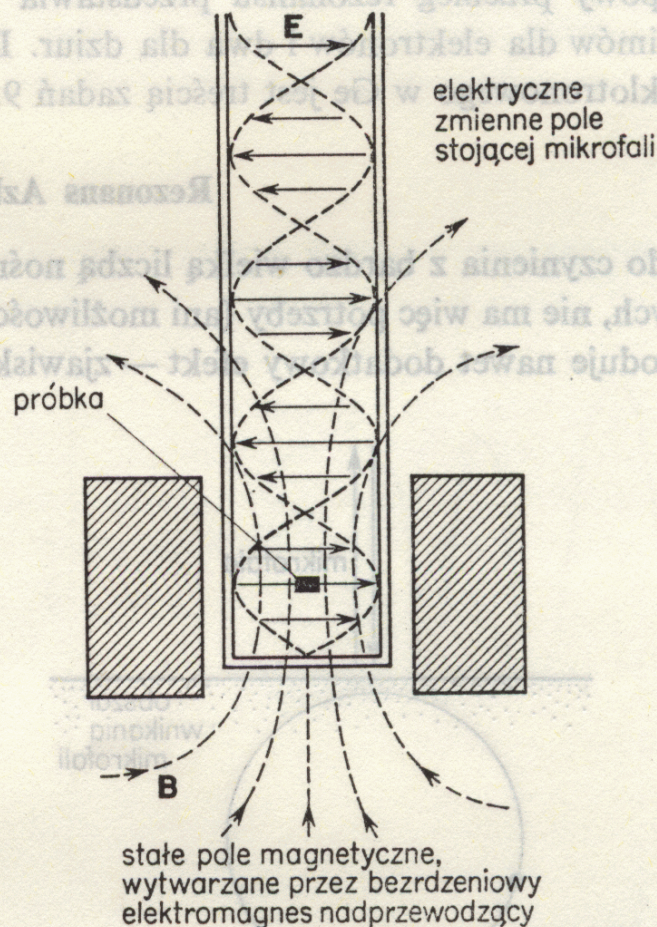
Rezonans cyklotronowy

- absorpcja światła przez elektron
w polu magnetycznym poruszający się
po orbitach cyklotronowych
(przejścia optyczne
pomiędzy poziomami Landaua)

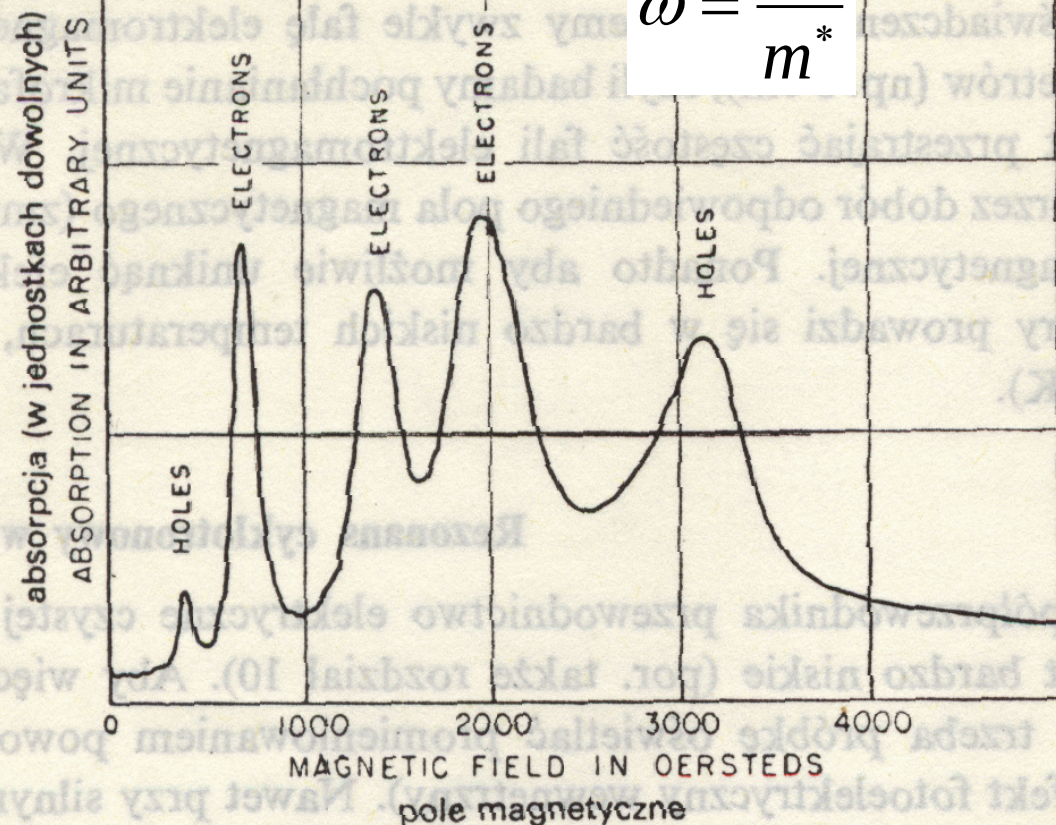
**Elektronowy Rezonans Spinowy
(EPR)** – bardzo użyteczne badanie

Wyznaczanie masy efektywnej elektronów i dziur

Rezonans cyklotronowy (dziury i elektrony absorbują światło o przeciwnych polaryzacjach kołowych!)



$$\omega = \frac{eB}{m^*}$$



Przewodnictwo



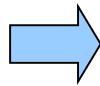
Paul Karl Ludwig Drude
1863-1906

- Model Drudego – 1900 r

$$m \frac{dv}{dt} + \frac{m}{\tau} v_D = -eE$$

$$\frac{dv}{dt} = 0 \Rightarrow v_D = -\frac{e\tau}{m} E$$

Ruchliwość



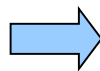
$$\mu = \frac{e\tau}{m}$$

Przewodnictwo

$$\vec{j} = -env_D = ne\mu E = \sigma E$$

$$\sigma = ne\mu$$

Dwa rodzaje nośników



$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_p$$

Efekt Halla

(dla jednego rodzaju nośników)

W sytuacji równowagowej składowa y siły Lorentza jest równoważona przez pole elektryczne powstające prostopadłe do prądu...

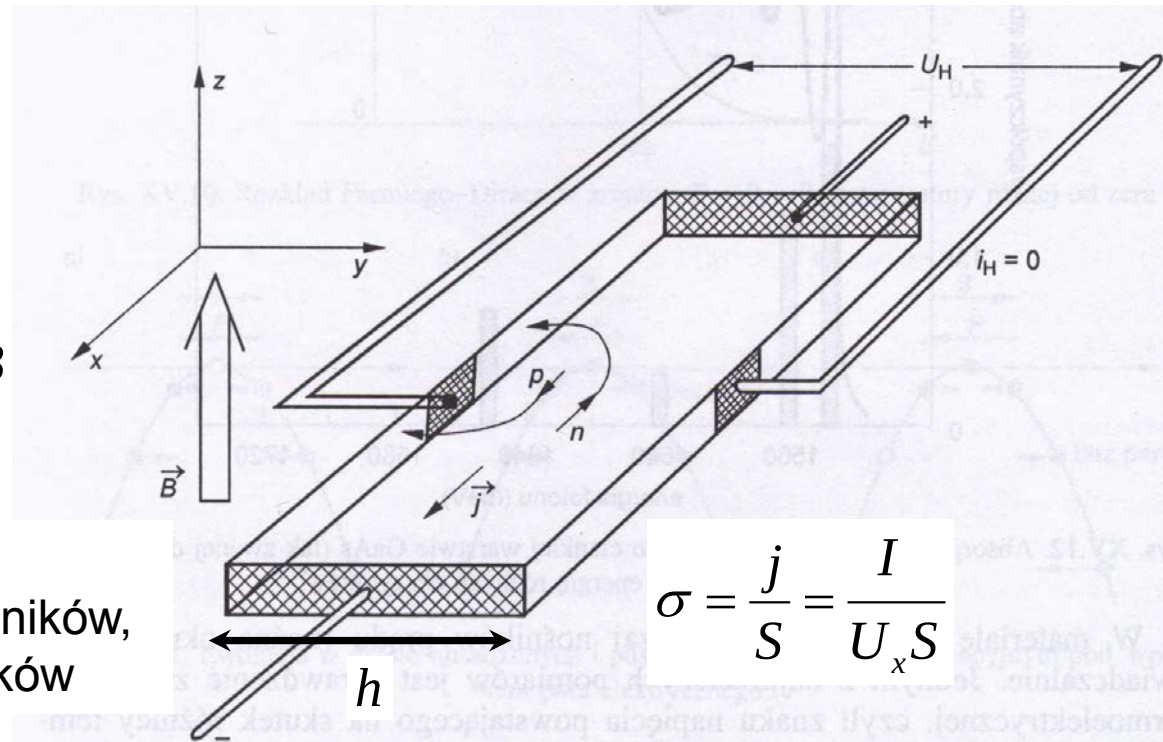
$$\vec{F} = q\vec{E} + q(\vec{v} \times \vec{B}) = 0$$

$$U_H/h = E_y = v_x B = \frac{jB}{nq} = R_H jB$$

$$R_H = \frac{1}{nq}$$

$$\sigma = qn\mu$$

znak nośników,
koncentracja nośników,
ruchliwość nośników



$$\sigma = \frac{j}{S} = \frac{I}{U_x S}$$

Rys. XV.13. Schemat pomiaru i powstawania napięcia Halla U_H

Na ćwiczeniach sprawdzicie jak to jest dla wielu nośników...

Kwantowy efekt Halla

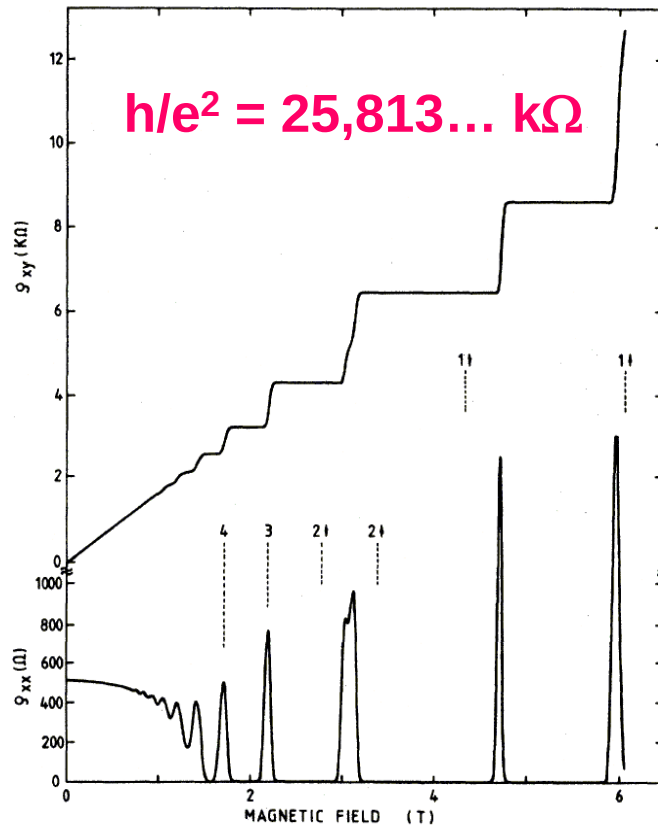


FIG. 14. Experimental curves for the Hall resistance $R_H = \rho_{xy}$ and the resistivity $\rho_{xx} \sim R_x$ of a heterostructure as a function of the magnetic field at a fixed carrier density corresponding to a gate voltage $V_g = 0$ V. The temperature is about 8 mK.

Klaus von Klitzing

"for the discovery of the quantized Hall effect"

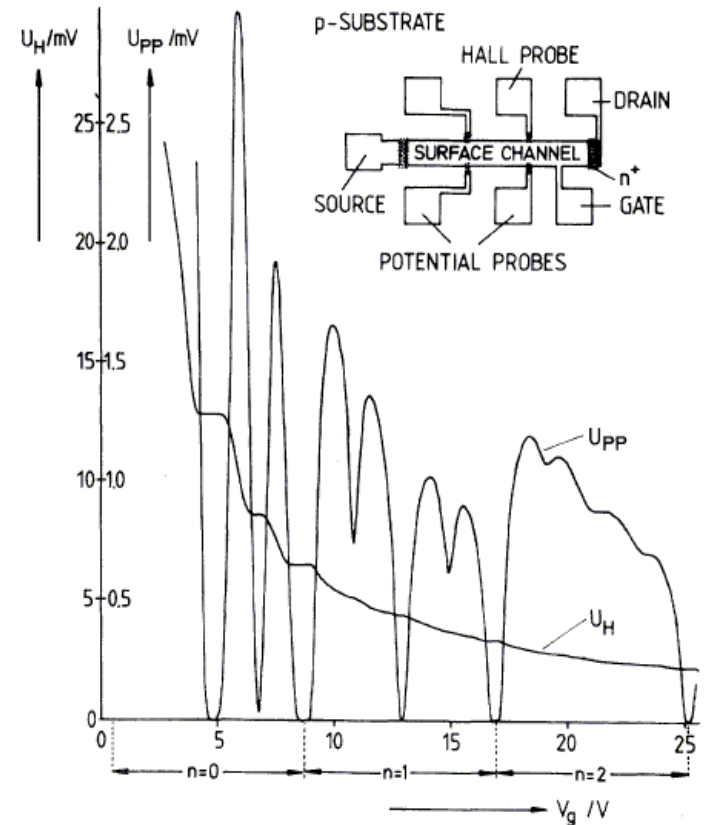
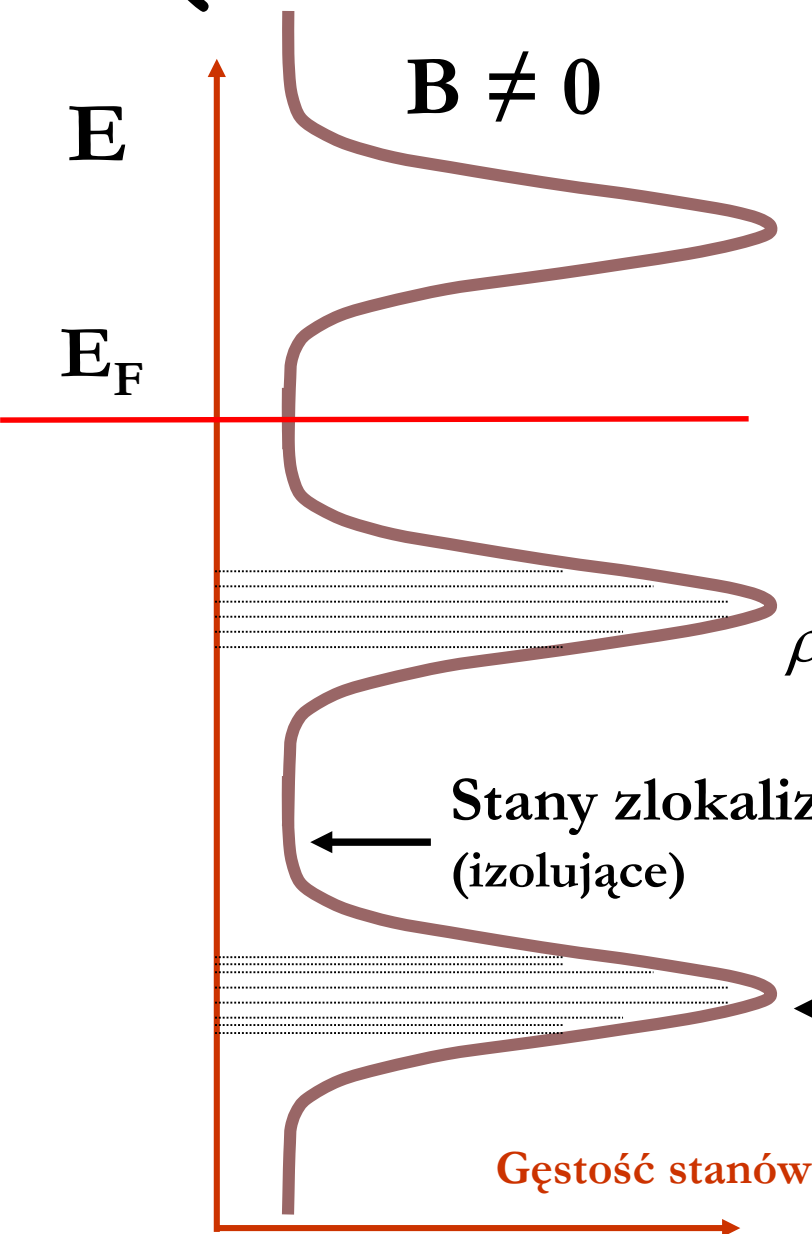


FIG. 1. Recordings of the Hall voltage U_H , and the voltage drop between the potential probes, U_{pp} , as a function of the gate voltage V_g at $T = 1.5$ K. The constant magnetic field (B) is 18 T and the source drain current, I , is 1 μ A. The inset shows a top view of the device with a length of $L = 400 \mu\text{m}$, a width of $W = 50 \mu\text{m}$, and a distance between the potential probes of $L_{pp} = 130 \mu\text{m}$.

QHE



Na każdym poziomie Landaua mieści się

$$\rho(E) \hbar \omega_c = \frac{1}{2\pi} \frac{m^* \hbar e B}{\hbar^2 m^*} = \frac{eB}{h}$$

elektronów (przy zniesionej degeneracji spinowej, stąd czynnik $\frac{1}{2}$)

Gdy poziom Fermiego przechodzi przez stany zlokalizowane (nie dające wkładu do prądu), napięcie Halla (opór Hall'owski) nie zmienia się przy zmianie pola B :

$$\rho_{xy} = \frac{U_H}{hj} = R_H B = \frac{1}{ne} B = \frac{1}{v \frac{eB}{h} e} B = \frac{1}{v} \frac{h}{e^2}$$

v – współczynnik wypełnienia
mówi o wypełnieniu poziomów landauowskich

Ułamkowy efekt Halla

Nagroda Nobla 1998

Robert B. Laughlin,
Horst L. Stoermer,
and Daniel C. Tsui

***"for their discovery of a new form
of quantum fluid with fractionally
charged excitations."***

Fractional quantum Hall effect

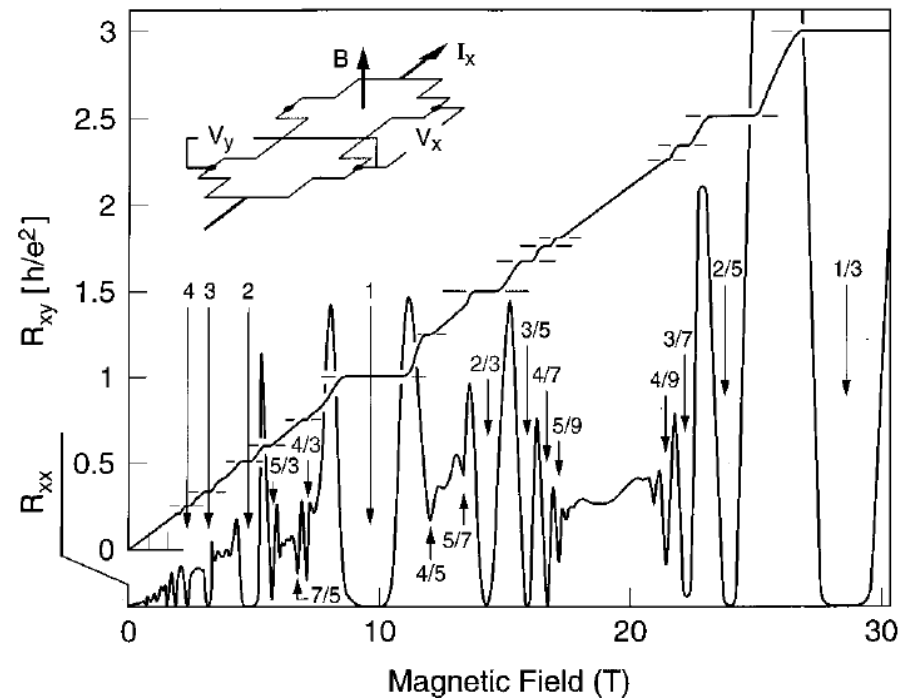
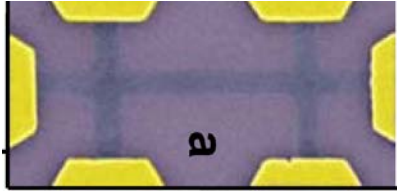


FIG. 1. Composite view showing the Hall resistance $R_{xy} = V_y/I_x$ and the magnetoresistance $R_{xx} = V_x/I_x$ of a two-dimensional electron system of density $n = 2.33 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ at a temperature of 85 mK, vs magnetic field. Numbers identify the filling factor ν , which indicates the degree to which the sequence of Landau levels is filled with electrons. Instead of rising strictly linearly with magnetic field, R_{xy} exhibits plateaus, quantized to $h/(e^2 \nu)$ concomitant with minima of vanishing R_{xx} . These are the hallmarks of the integral ($\nu = i = \text{integer}$) quantum Hall effect (IQHE) and fractional ($\nu = p/q$) quantum Hall effect (FQHE). While the features of the IQHE are the results of the quantization conditions for individual electrons in a magnetic field, the FQHE is of many-particle origin. The insert shows the measurement geometry. B =magnetic field, I_x =current, V_x =longitudinal voltage, and V_y =transverse or Hall voltage. From Eisenstein and Stormer, 1990.

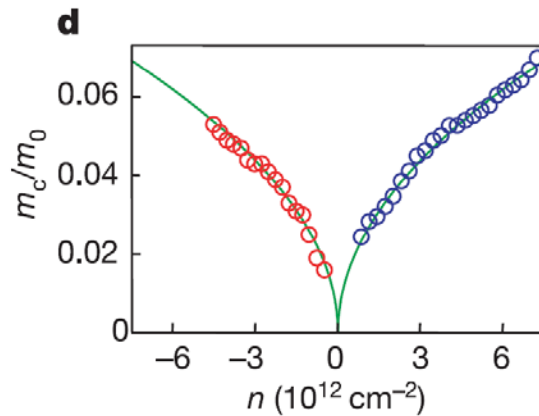
Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene

K. S. Novoselov¹, A. K. Geim¹, S. V. Morozov², D. Jiang¹, M. I. Katsnelson³, I. V. Grigorieva¹, S. V. Dubonos²
& A. A. Firsov²

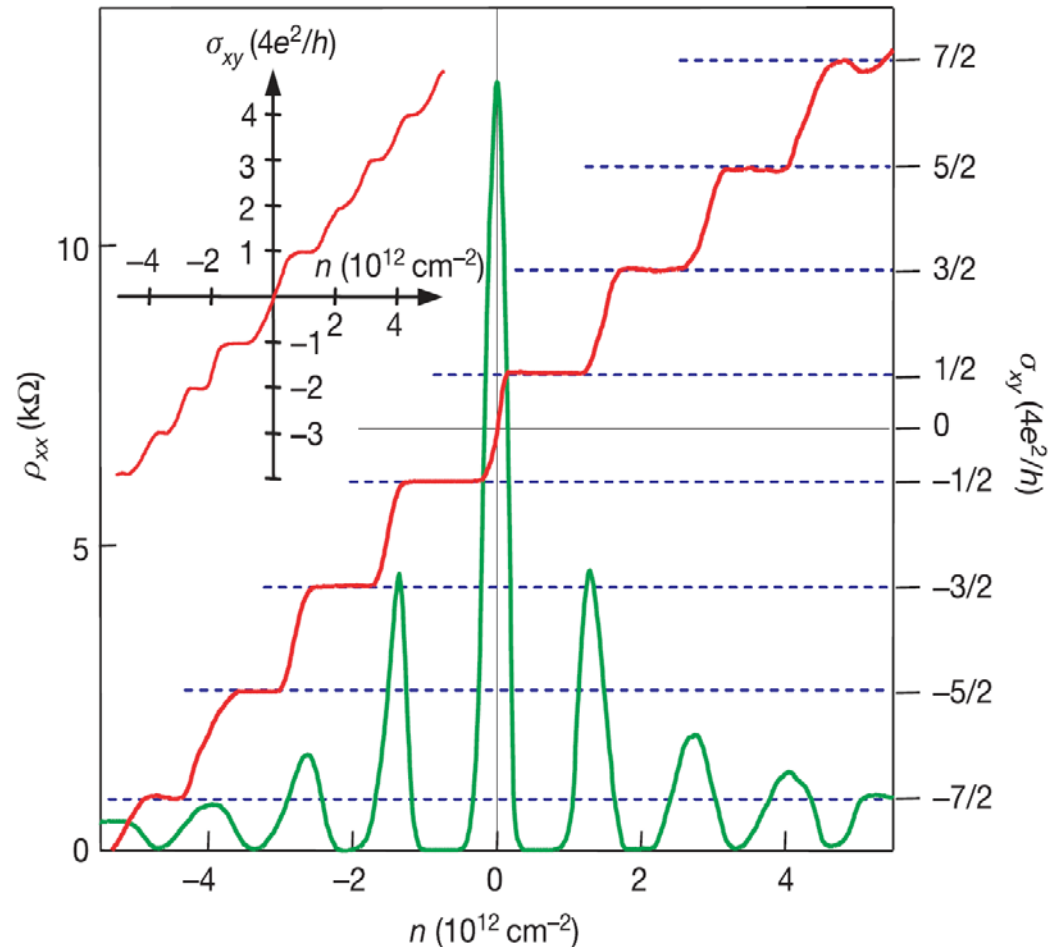


Anomálny kwantowy efekt Halla

Pierwiastkowa zależność energii od pola magnetycznego!

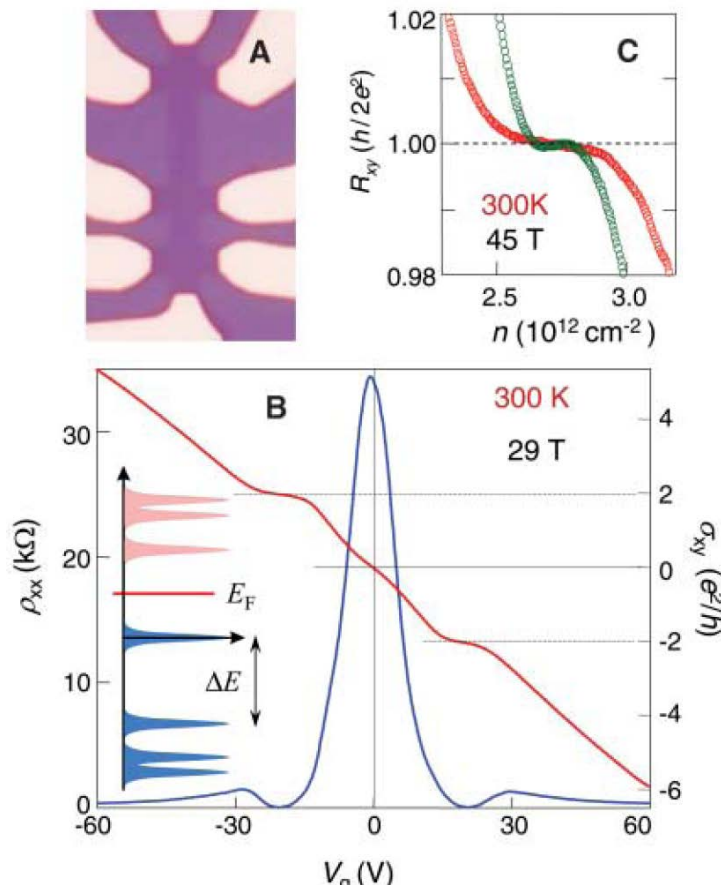


K. Novoselov *et al.*, Nature (2005)



Kwantowy efekt Halla w temperaturze pokojowej!

K.S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H.L. Stormer, U. Zeitler, J.C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim, A.K. Geim, Science 315, 1379 (2007)



Metrologia – możliwość zastosowania (w temperaturze ciekłego azotu)