

Wstęp do Optyki i Fizyki Materii Skondensowanej

1100-3003



Ciało stałe 5

Wydział Fizyki UW

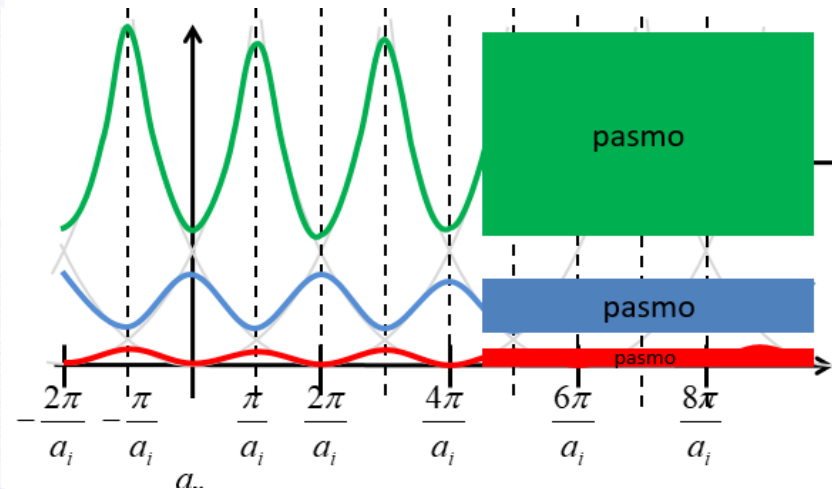
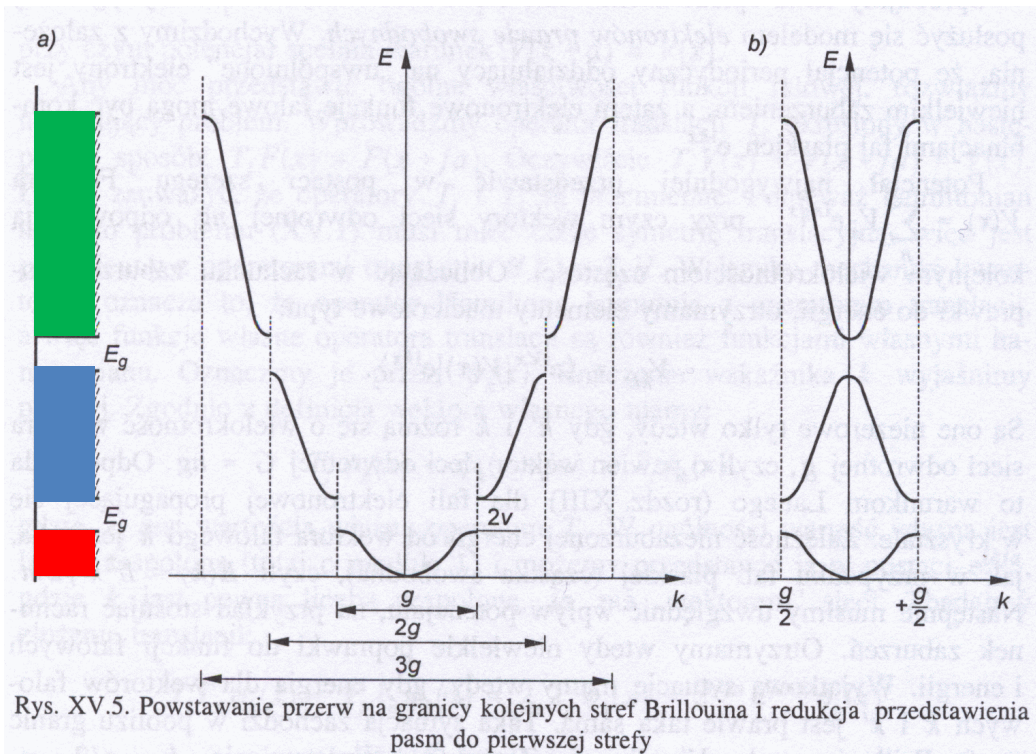
Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

Piotr.Fita@fuw.edu.pl

Nasz cel:

Twierdzenie Blocha

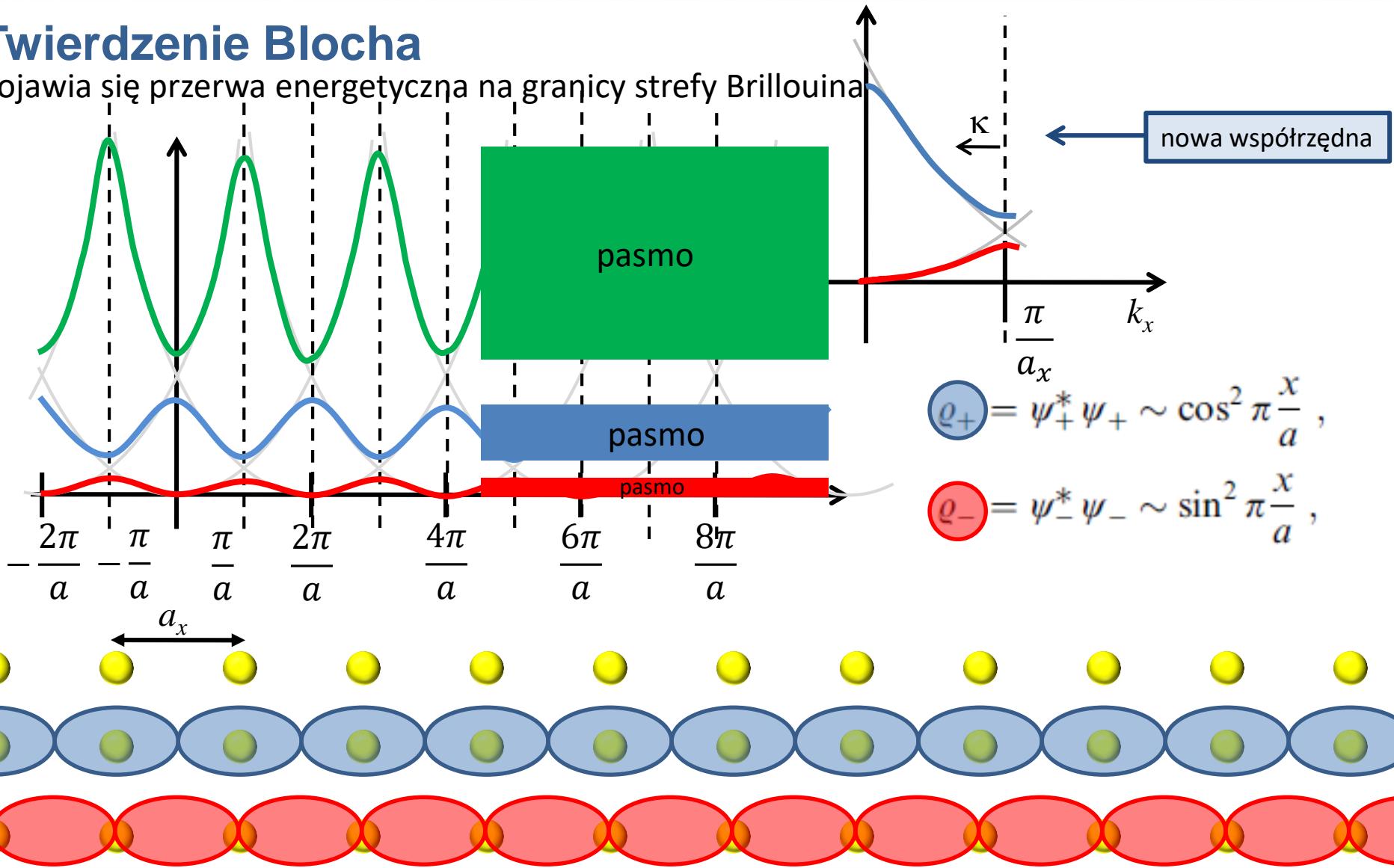
$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$$



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

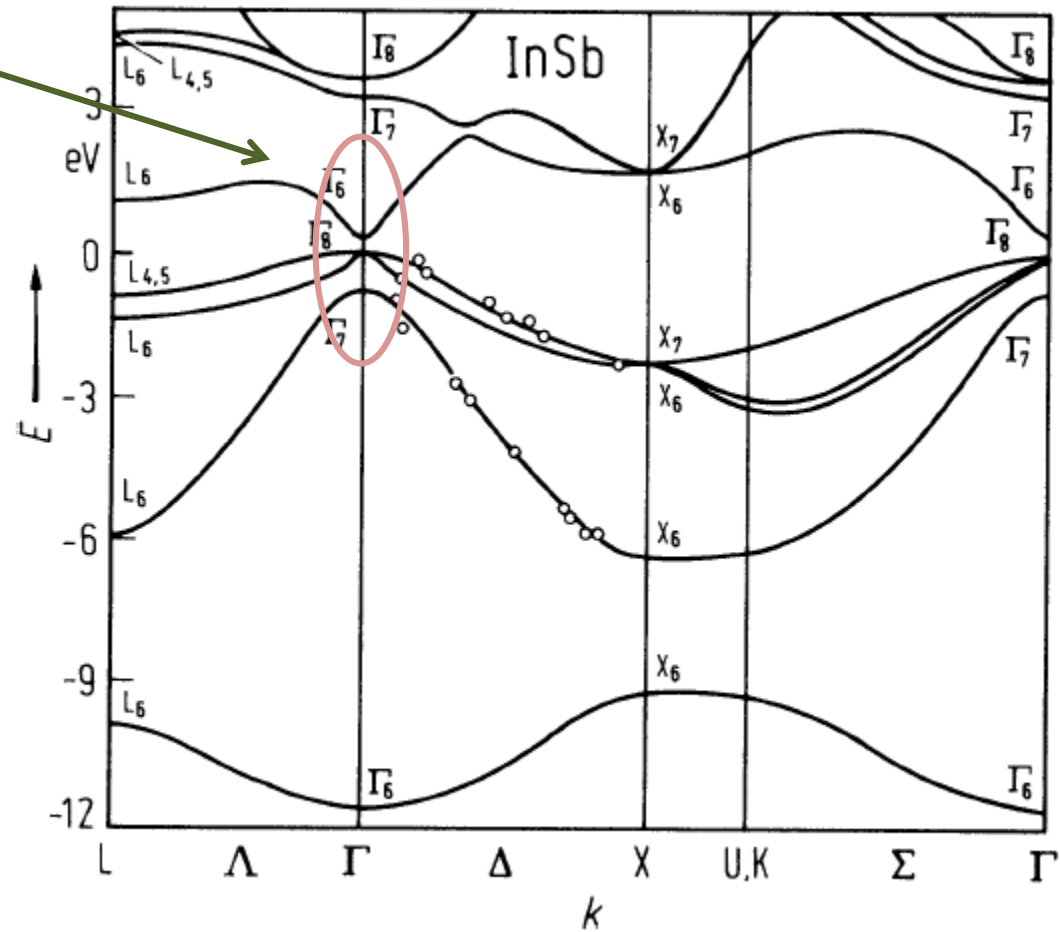
Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



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

Równanie kp – masa efektywna

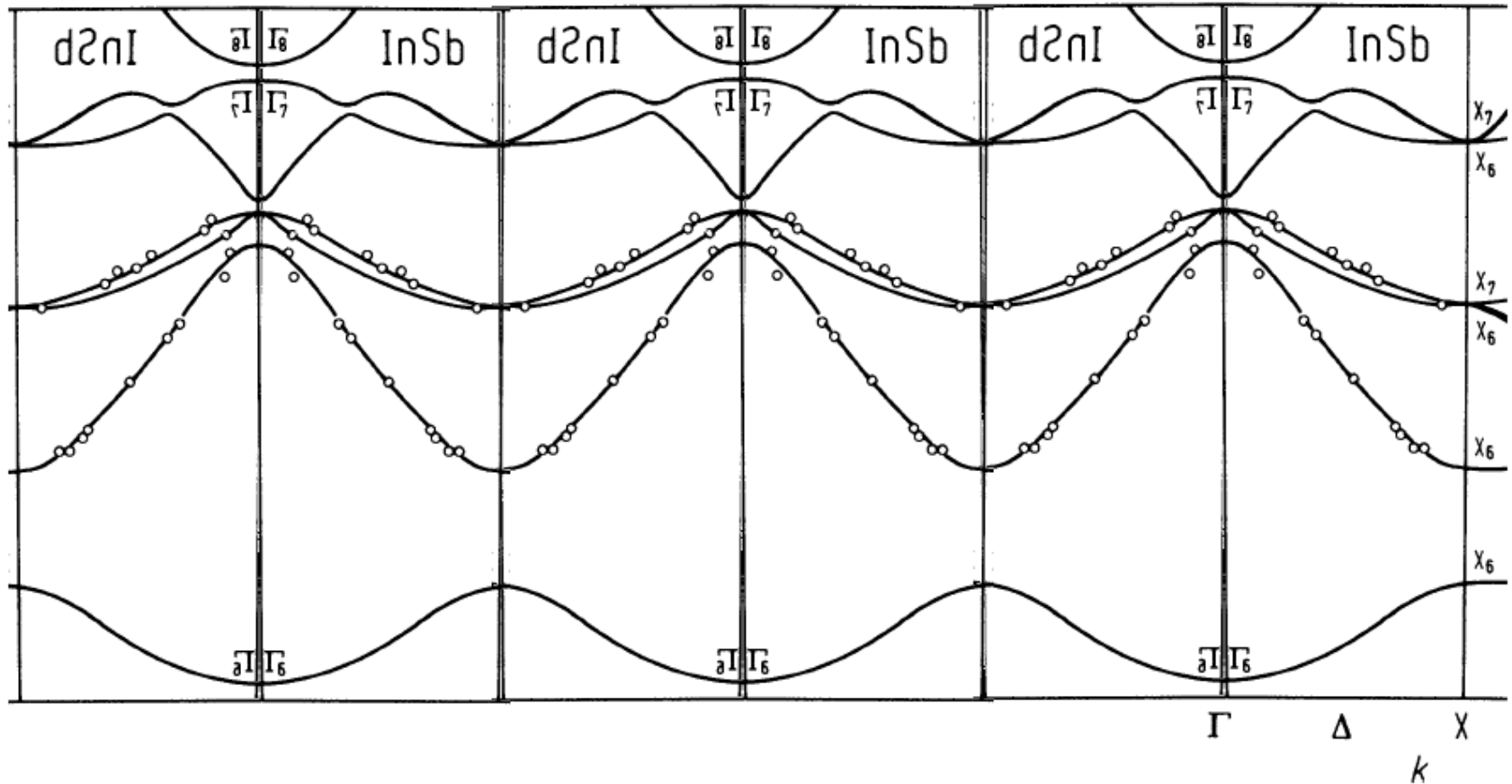
Blisko leżące pasma



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

Landolt-Boernstein

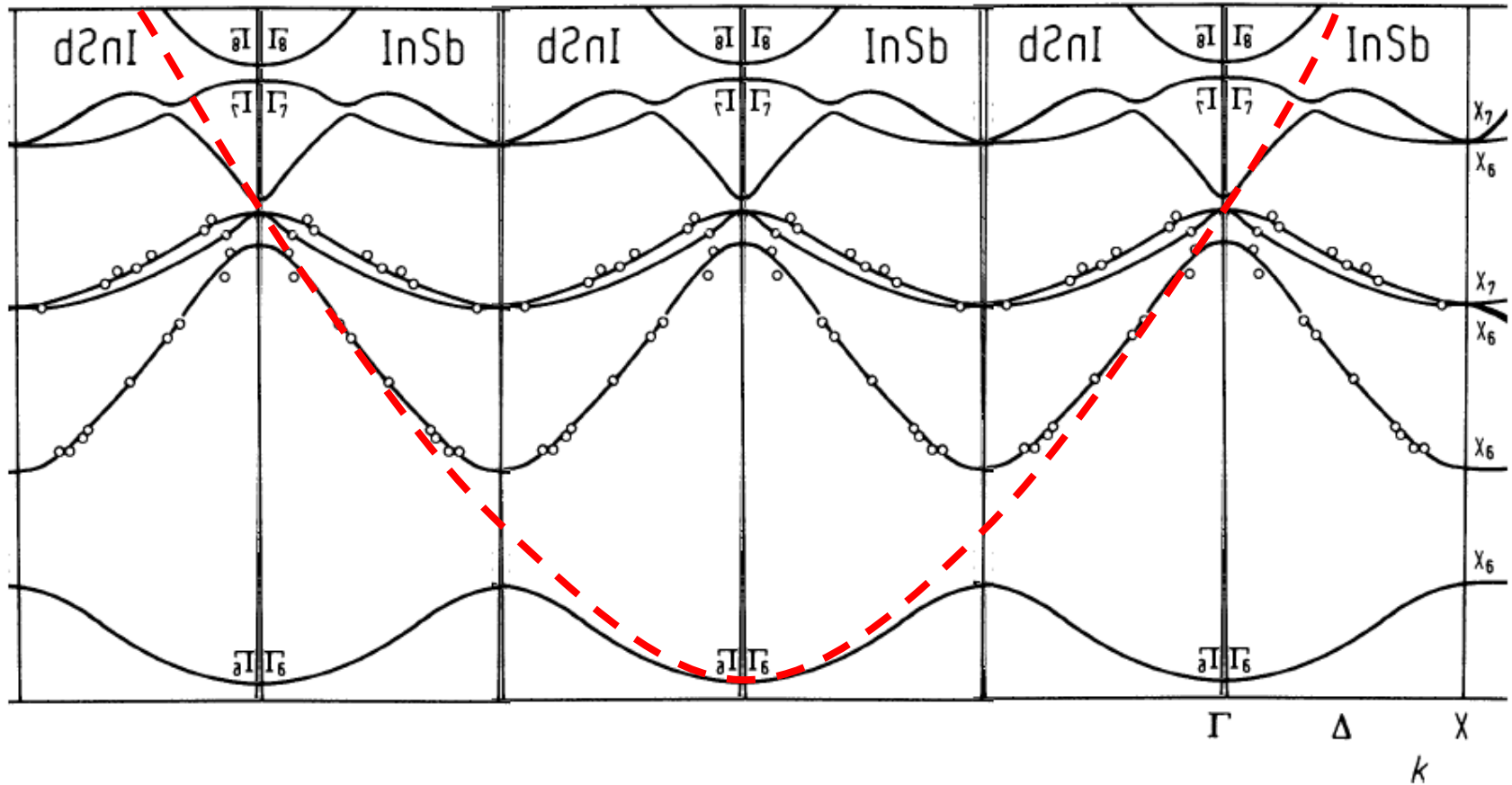
The electronic band structure



Expanding $E_n(\vec{k}) = \left(E_n - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right)$ near extremum, e.g. $k = 0$:

Landolt-Boernstein

The electronic band structure



Expanding $E_n(\vec{k}) = \left(E_n - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right)$ near extremum, e.g. $k = 0$:

Landolt-Boernstein

The electronic band structure

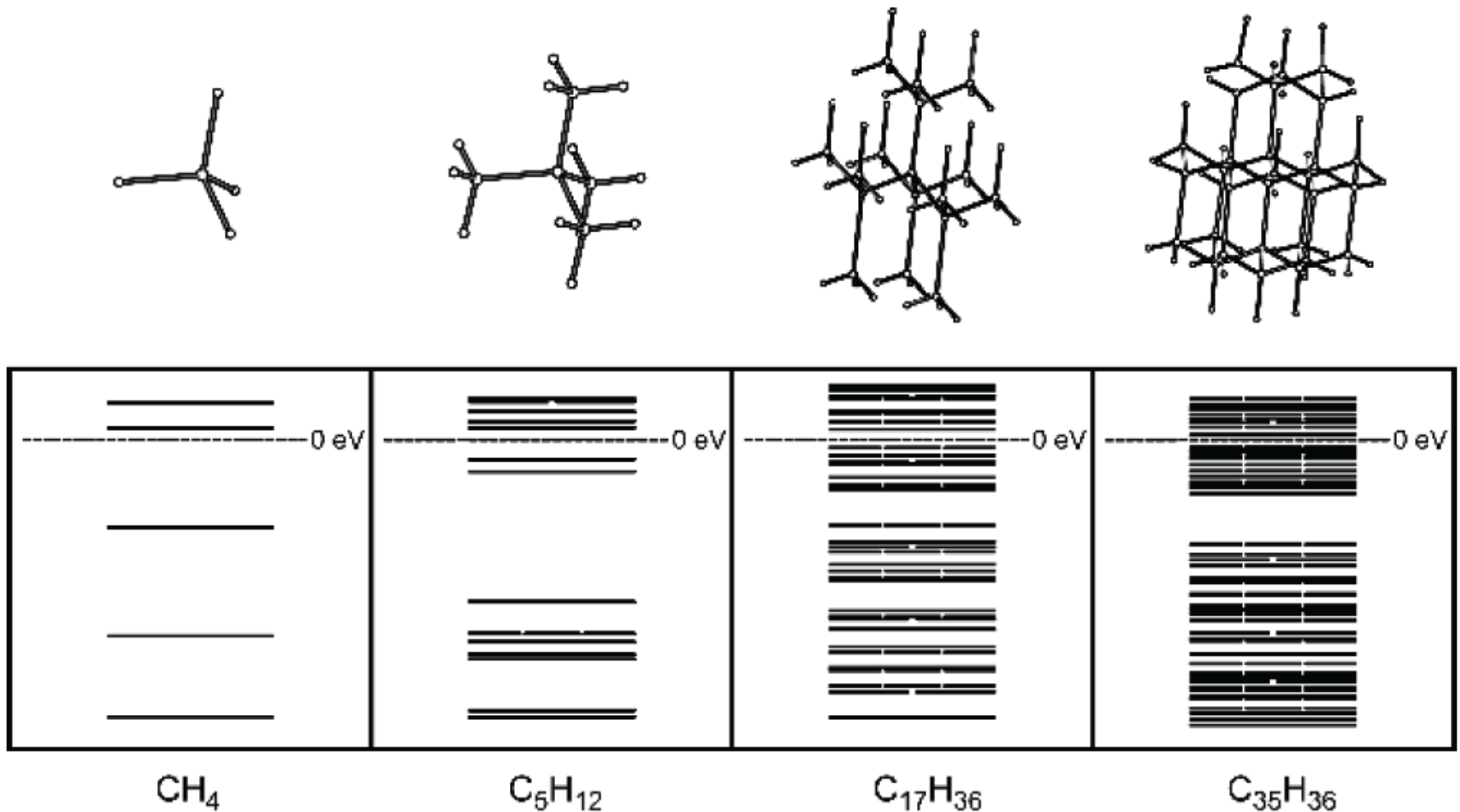


Fig. 2.3 Development of the diamond band gap

Tight-Binding Approximation

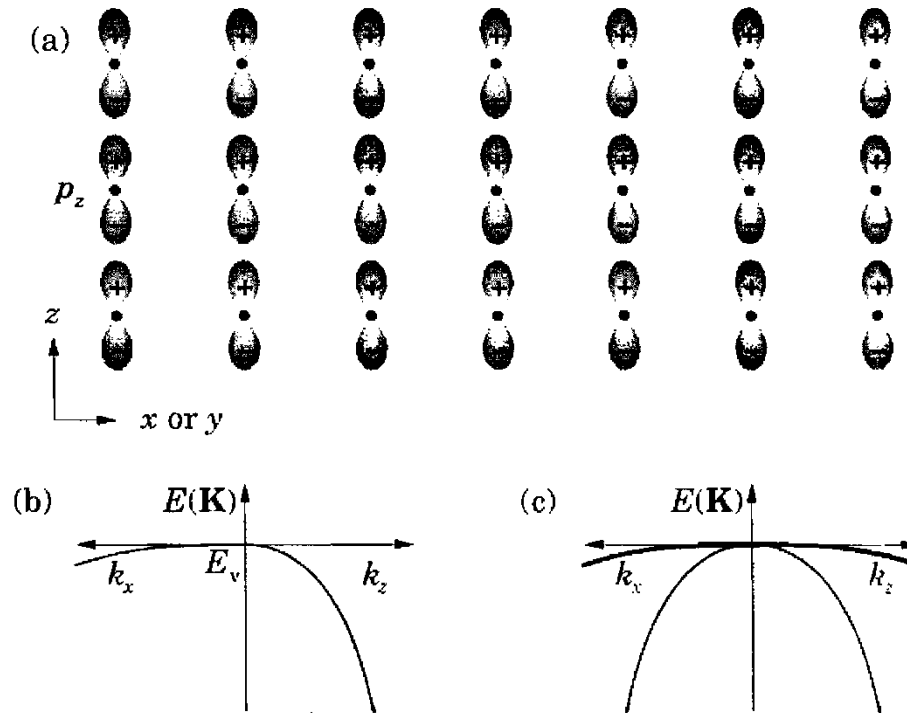


FIGURE 2.17. Valence bands constructed from p orbitals. (a) Lattice of p_z orbitals. (b) Band structure of the p_z orbitals only; the band is 'light' along k_z to the right and 'heavy' along k_x (or k_y) to the left. (c) Total bands from all three p orbitals, showing a doubly degenerate 'heavy' band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

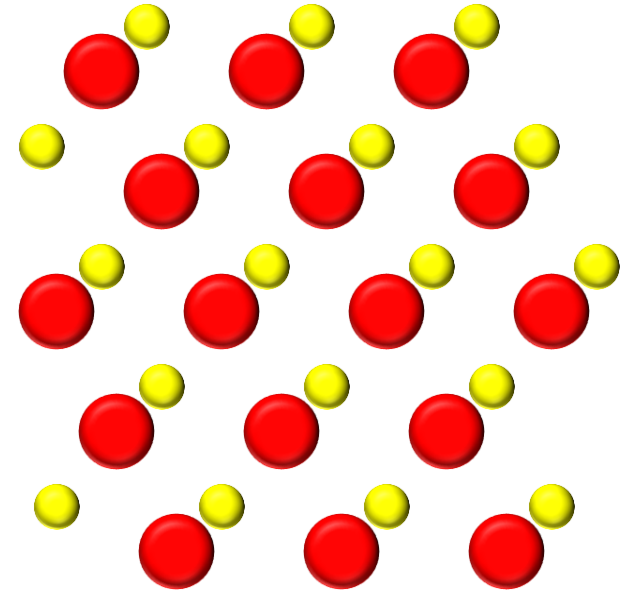
Potencjał periodyczny

Twierdzenie Blocha

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

funkcja Blocha,
stan Blocha

amplituda Blocha,
obwiednia 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*.

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



"Mr. Osborne, may I be excused? My brain is full."



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

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

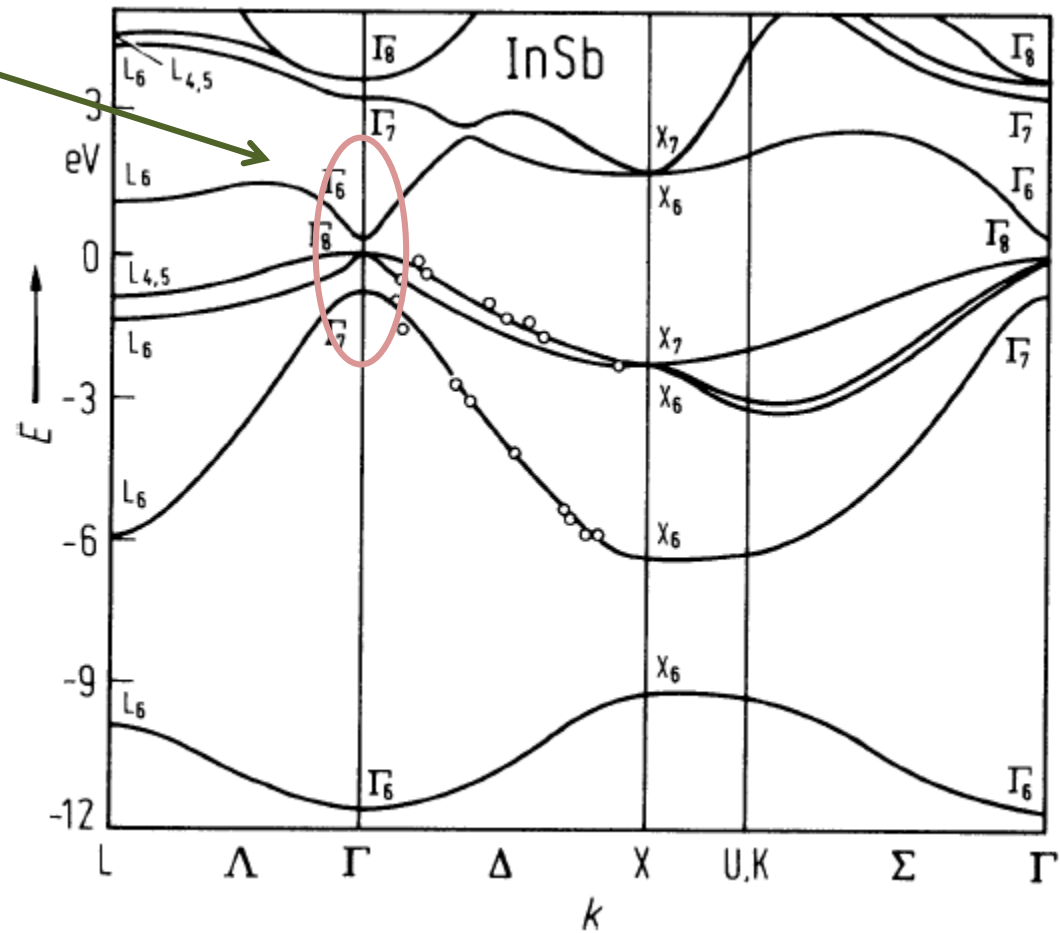
Zaburzenie:

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

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

Równanie kp – masa efektywna

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

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).

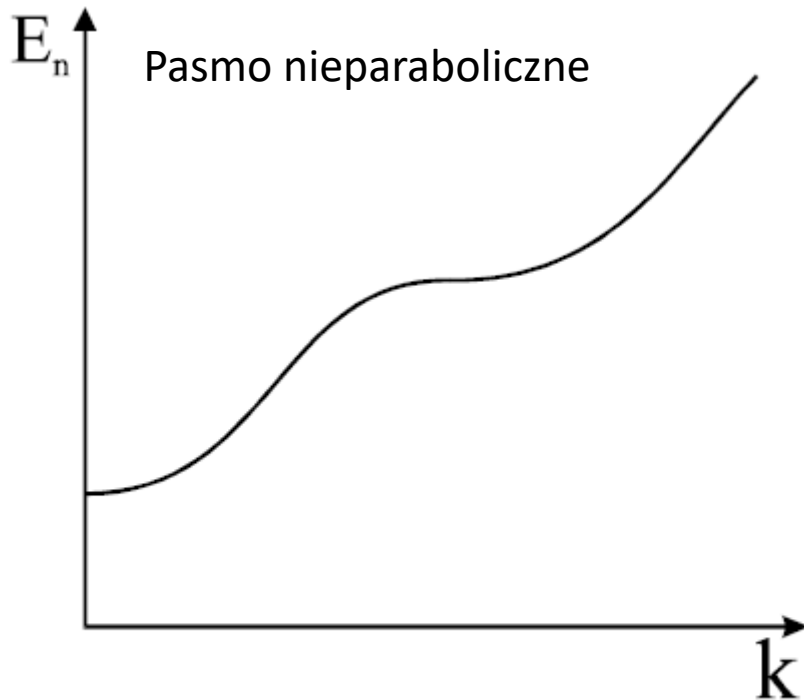
W ogólności energia elektronu jest funkcją składowych wektora falowego $\mathbf{k}=(k_1, k_2, k_3)$.

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

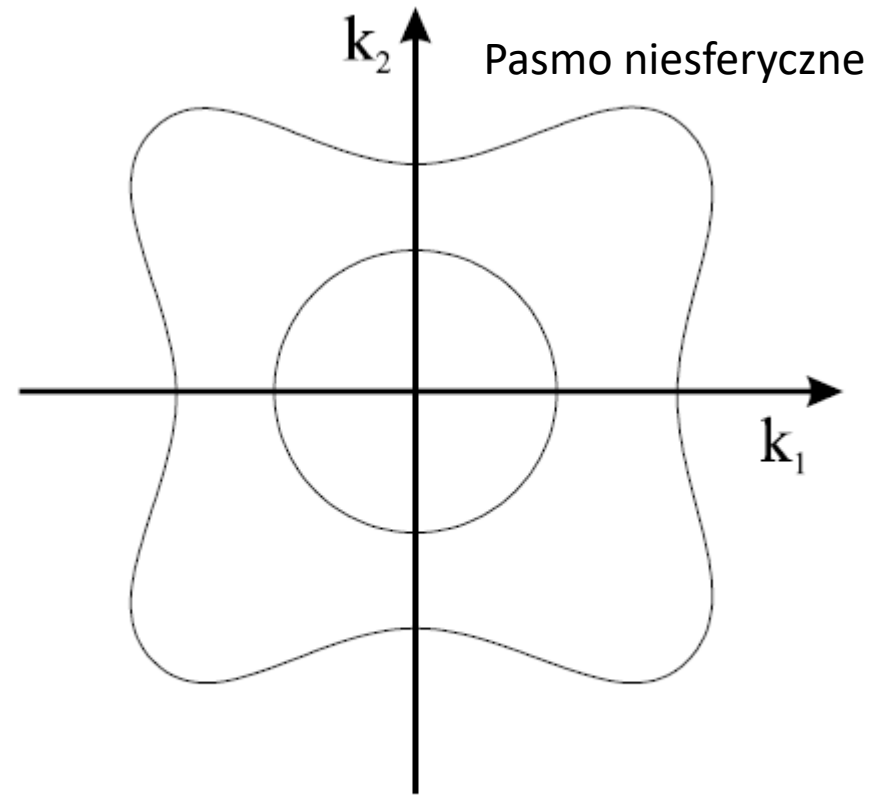
Badanie tensora masy efektywnej to jeden z głównych problemów fizyki ciała stałego.

Równanie kp – masa efektywna

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



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



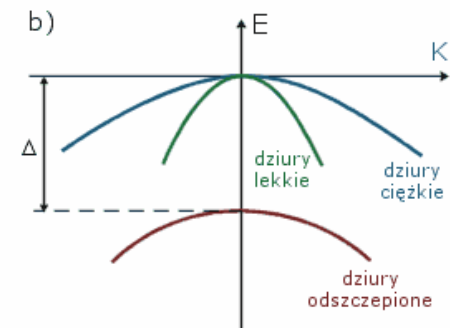
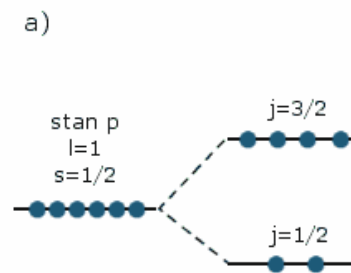
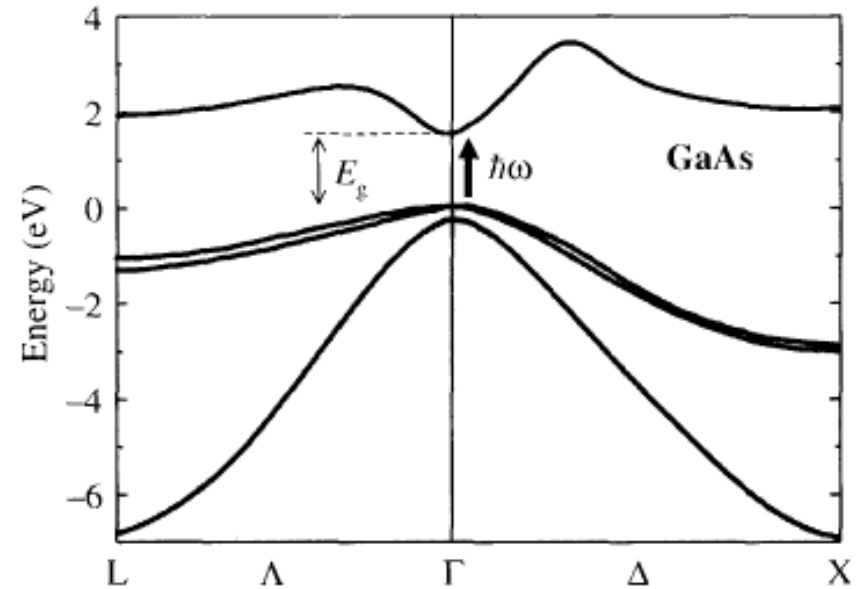
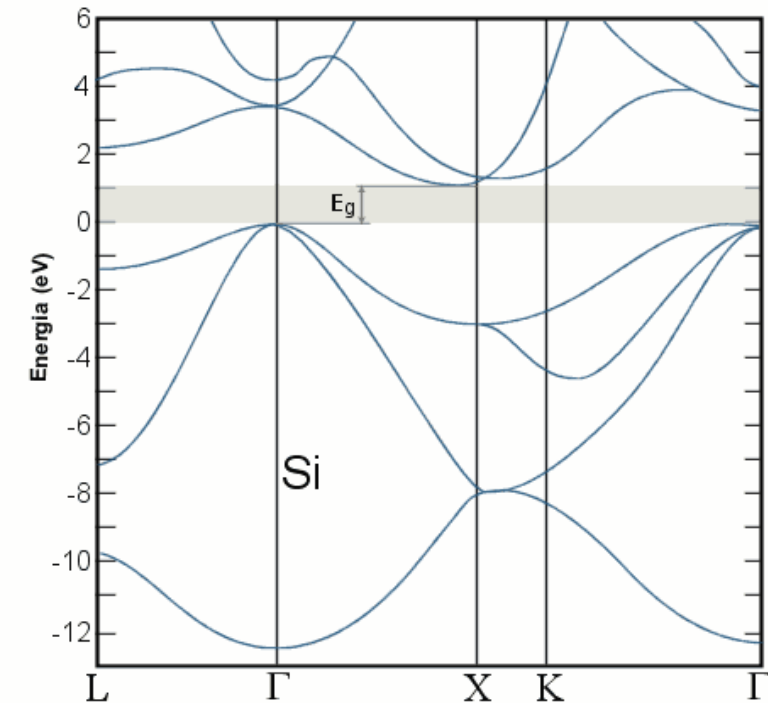
Przykładowe powierzchnie stałej energii w dwuwymiarowej przestrzeni \mathbf{k} .

R. Stępniewski

Równanie kp – masa efektywna

Struktura pasmowa ciał stałych

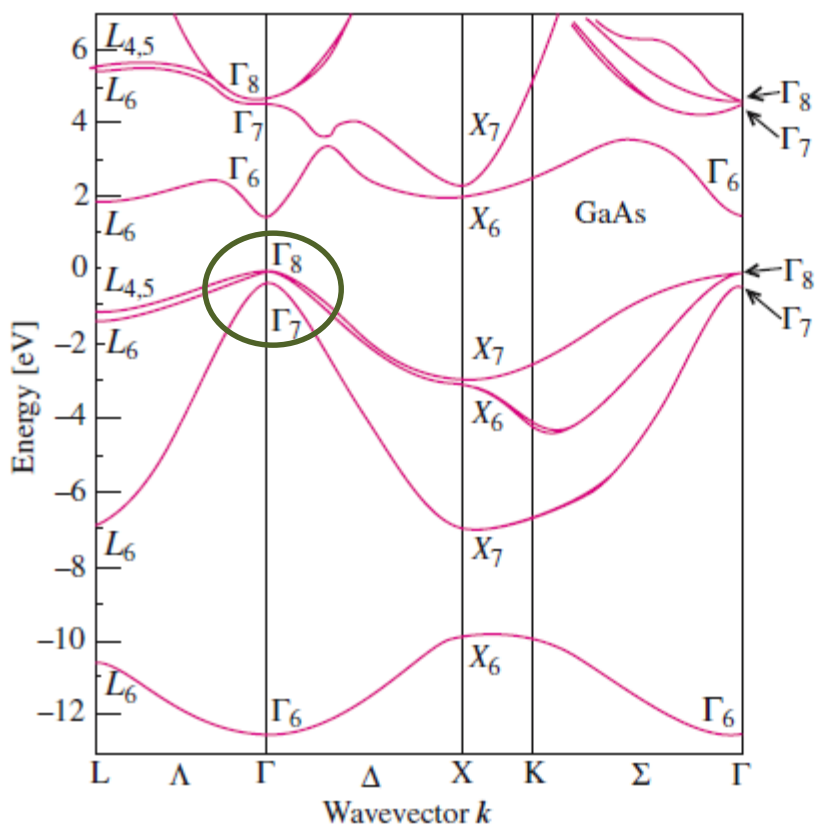
Przykłady:



D. Wasik.

Struktura pasmowa

Yu, Cardona *Fundamentals of semiconductors*



$$|lm_l\rangle = \begin{cases} |1\ 1\rangle & = -(x + iy)/\sqrt{2}, \\ |1\ 0\rangle & = z, \\ |1\ -1\rangle & = (x - iy)/\sqrt{2}. \end{cases}$$

$$|jm_j\rangle = \begin{cases} |3/2, 3/2\rangle = |1, 1\rangle\alpha \\ |3/2, 1/2\rangle = (1/\sqrt{3})(|1, 1\rangle\beta + \sqrt{2}|1, 0\rangle\alpha) \\ |3/2, -1/2\rangle = (1/\sqrt{3})(|1, -1\rangle\alpha + \sqrt{2}|1, 0\rangle\beta) \\ |3/2, -3/2\rangle = |1, -1\rangle\beta \\ |1/2, 1/2\rangle = (1/\sqrt{3})(|1, 0\rangle\alpha - \sqrt{2}|1, 1\rangle\beta) \\ |1/2, -1/2\rangle = (1/\sqrt{3})(|1, 0\rangle\beta - \sqrt{2}|1, -1\rangle\alpha) \end{cases}$$

Fig. 2.14. Electronic band structure of GaAs calculated by the pseudopotential technique. The energy scale and notation (double group) are similar to those for Fig. 2.13 [Ref. 2.8, p. 103]

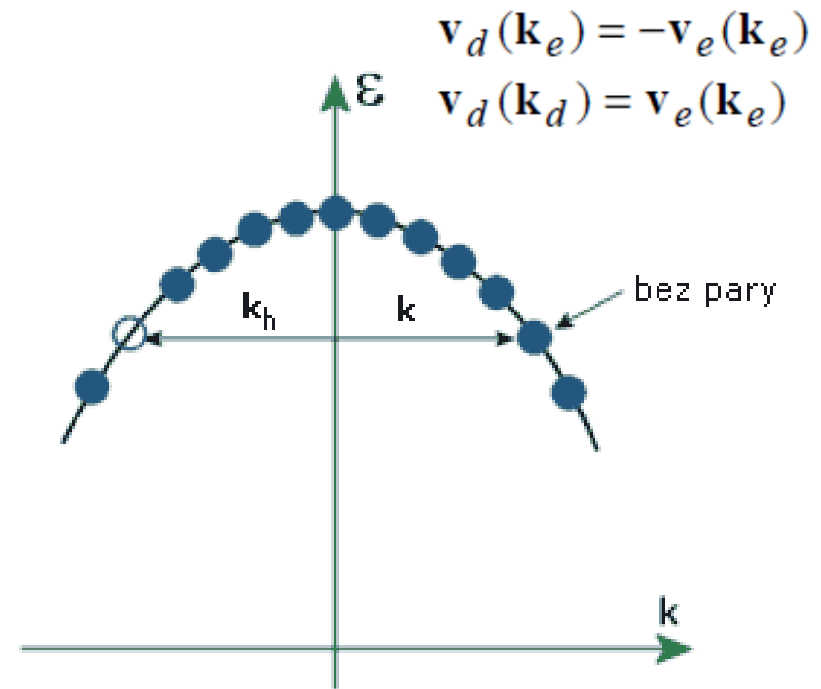
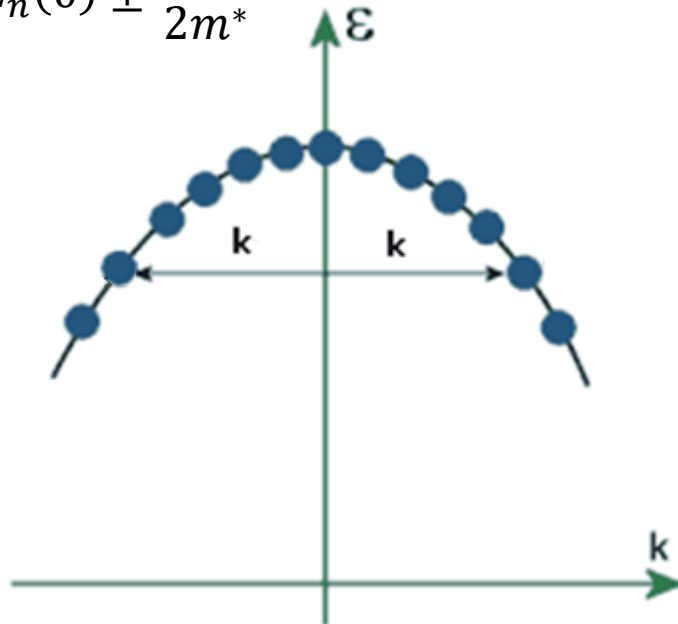
Równanie kp – masa efektywna

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:

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



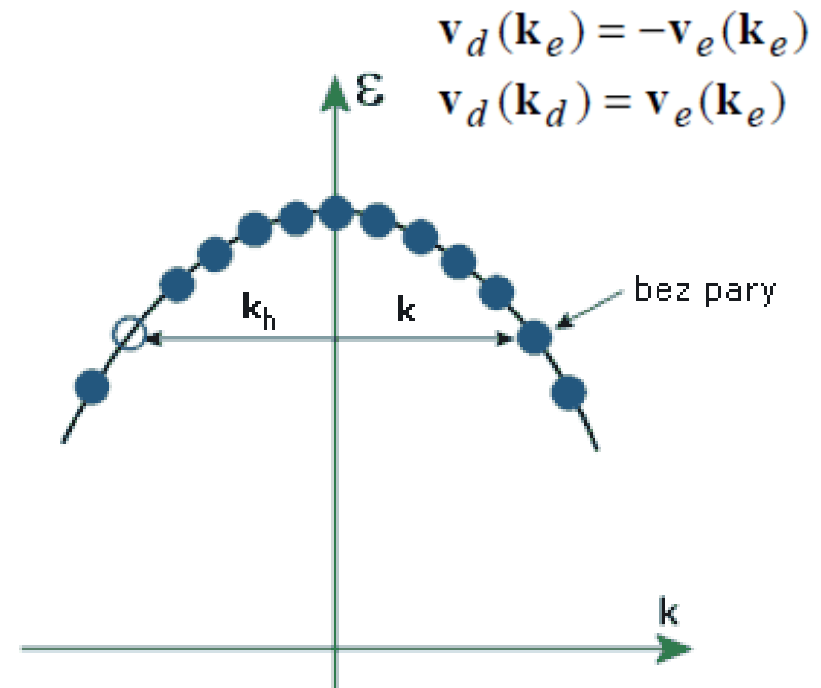
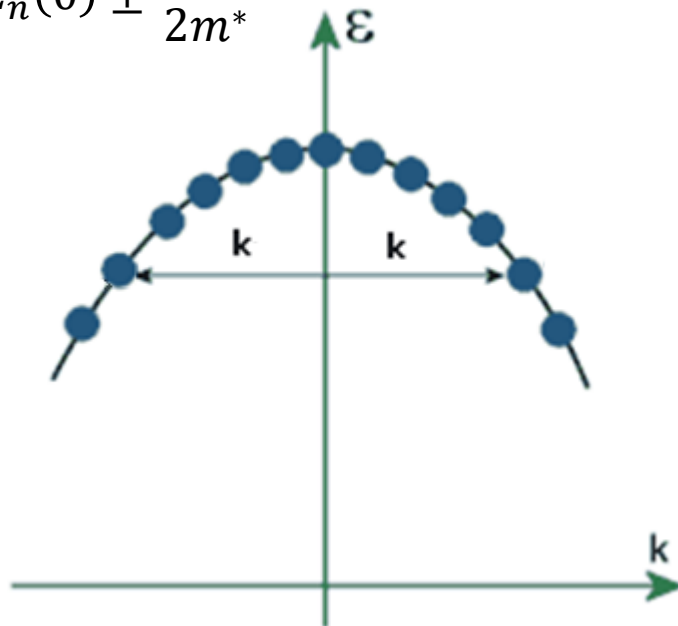
Równanie kp – masa efektywna

Elektrony i dziury

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

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

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



Równanie kp – masa efektywna

Elektrony i dziury

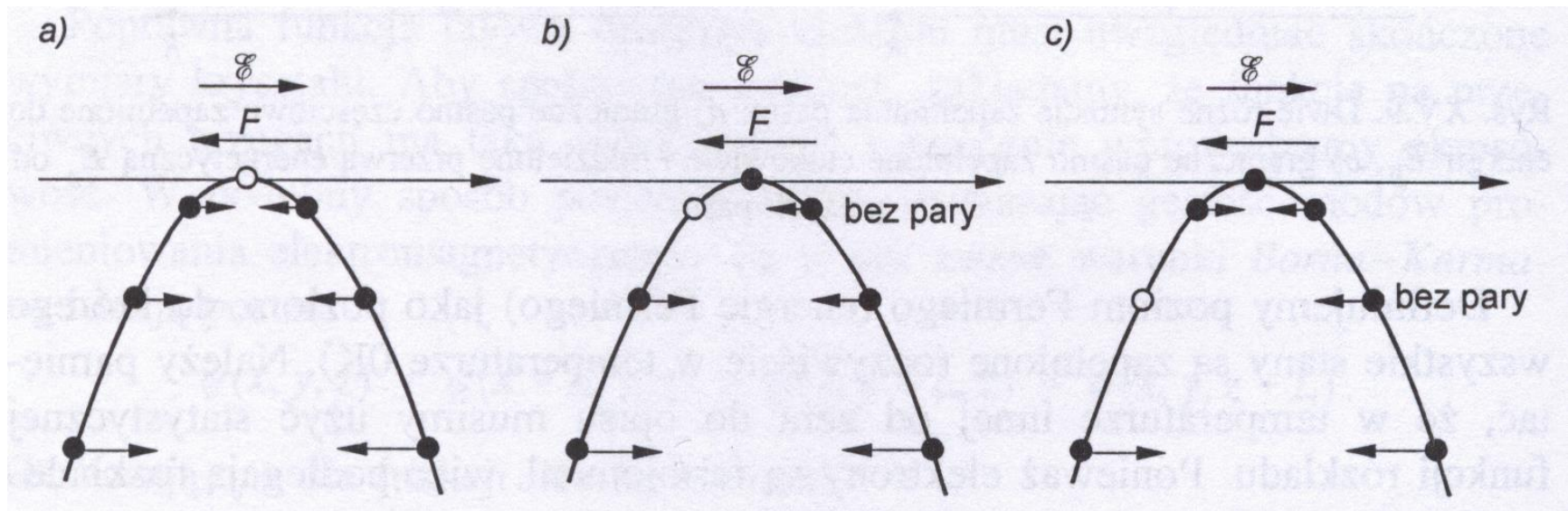
$$f_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} f(\mathbf{k}_i)$$

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

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

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

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



Potencjał kulombowski (ekscyton)

NAJPIERW:

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

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

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

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

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

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

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



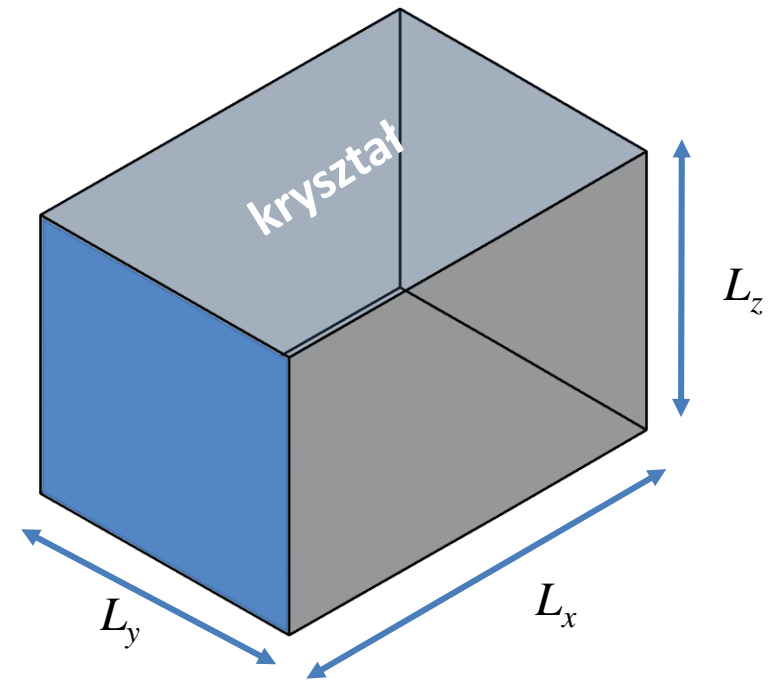
Potencjał periodyczny

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

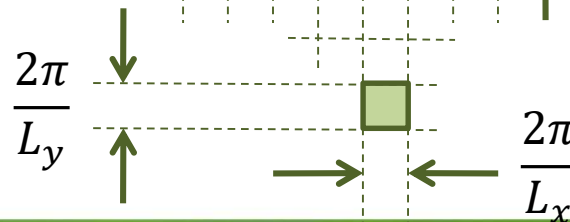
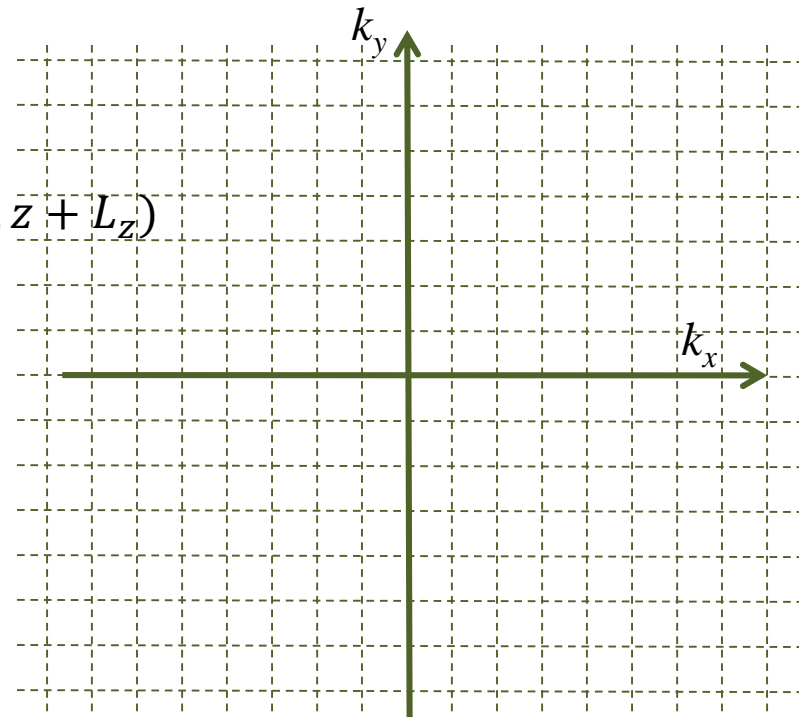
Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

$\psi_{n,\vec{k}}$ – 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) $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^n$

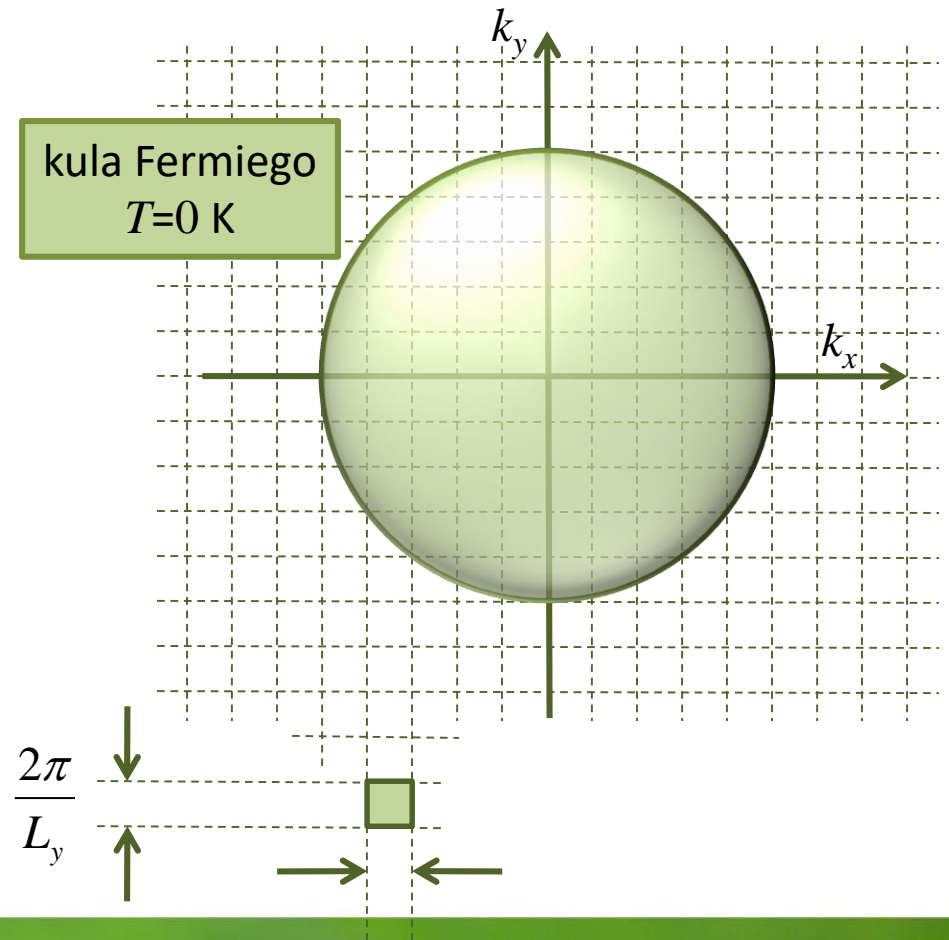
Przypadek 3D

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

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

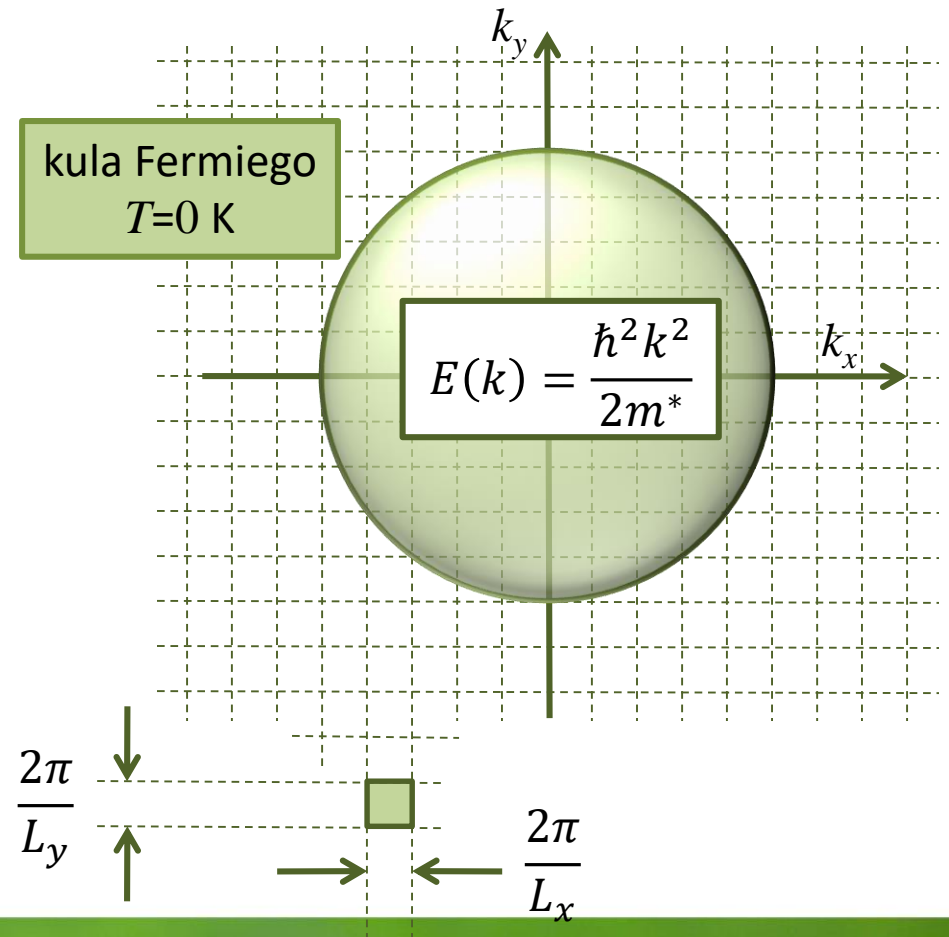
$$\rho^{3D}(E)dE = \rho_k^{3D}d\vec{k} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 4\pi k^2 dk$$

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) $\rho_k^{nD} = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^n$

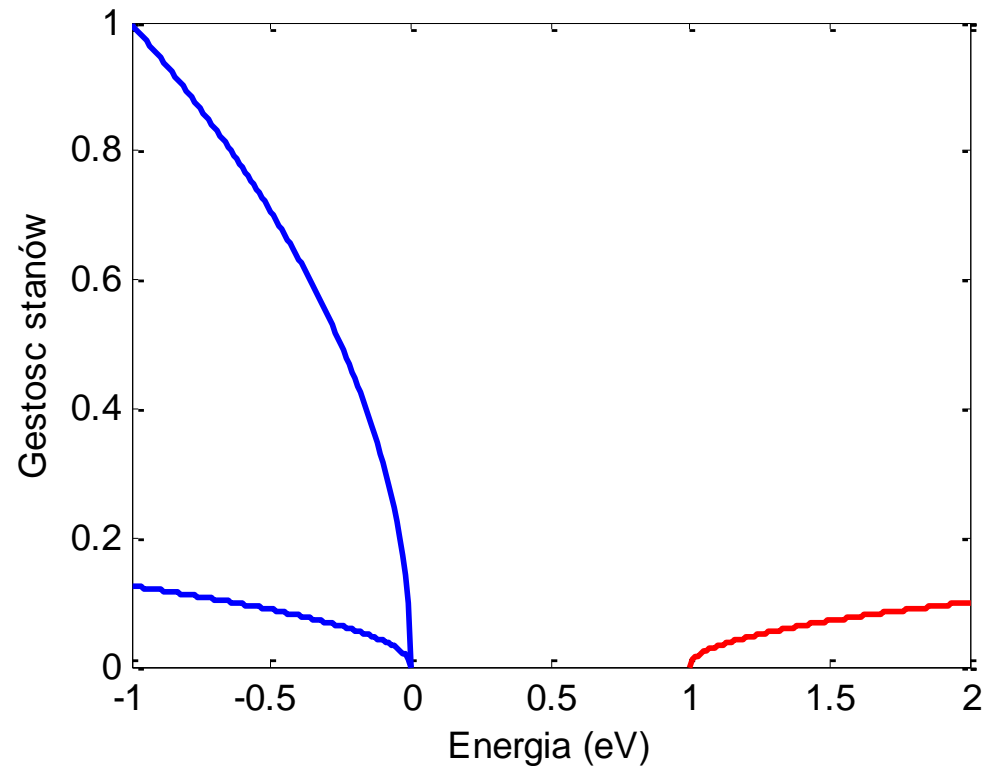
Przypadek 3D

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

Dla pasma sferycznego i parabolicznego:

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

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



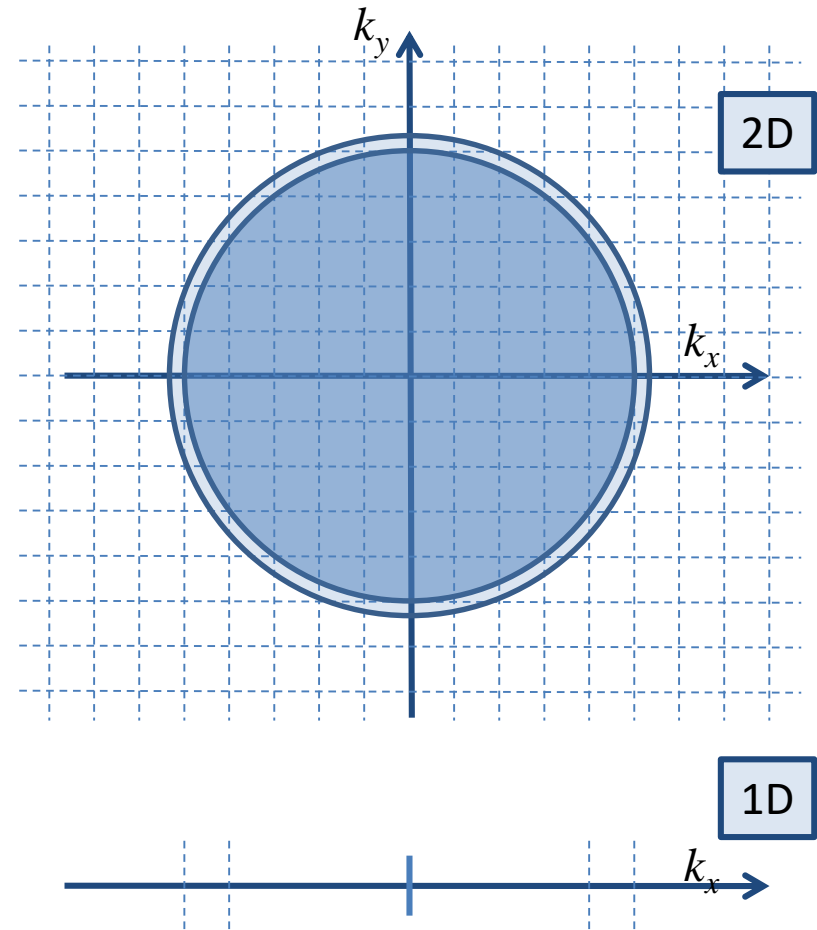
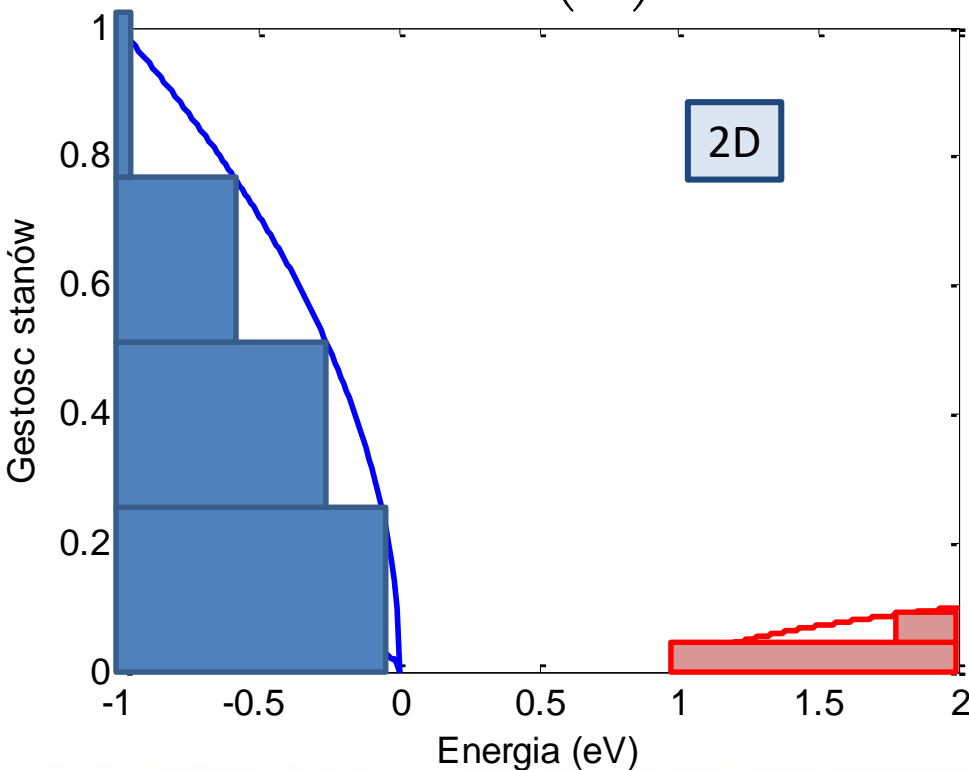
Gęstość stanów

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:

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

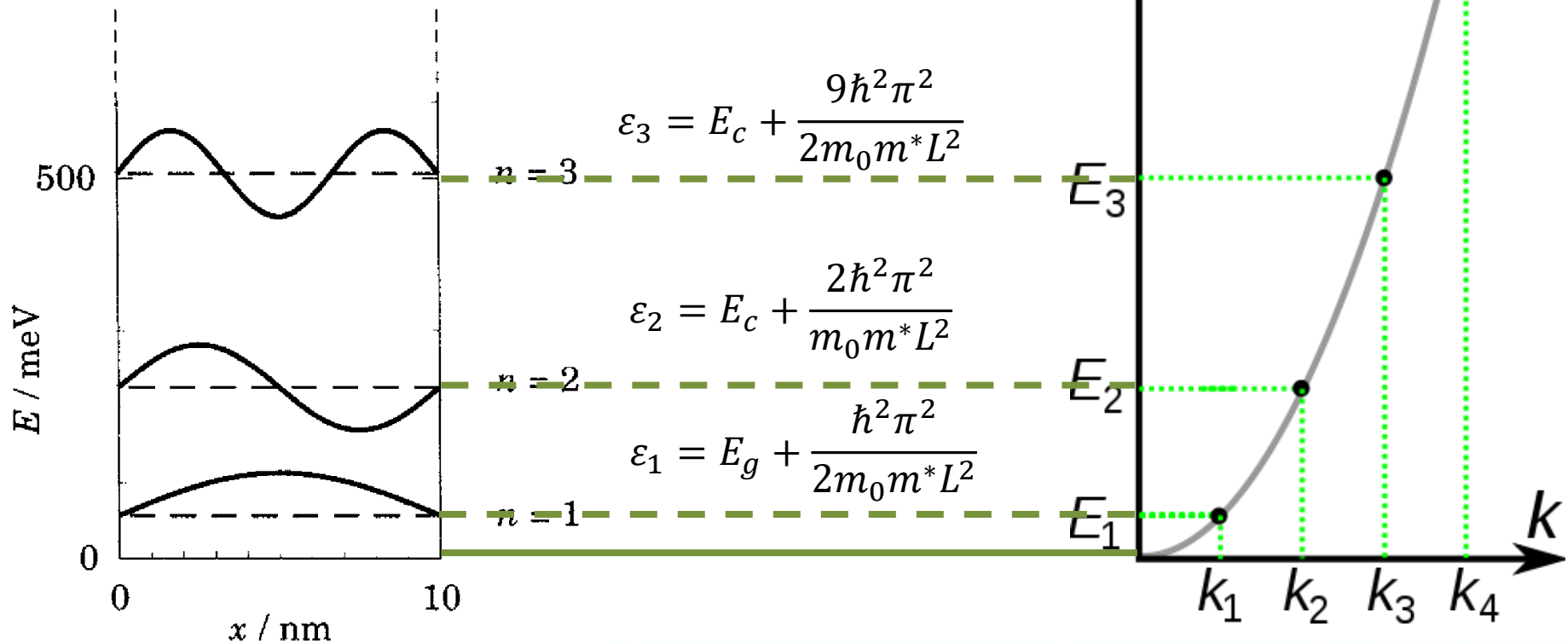
$$k_n = \frac{n\pi}{L}$$

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

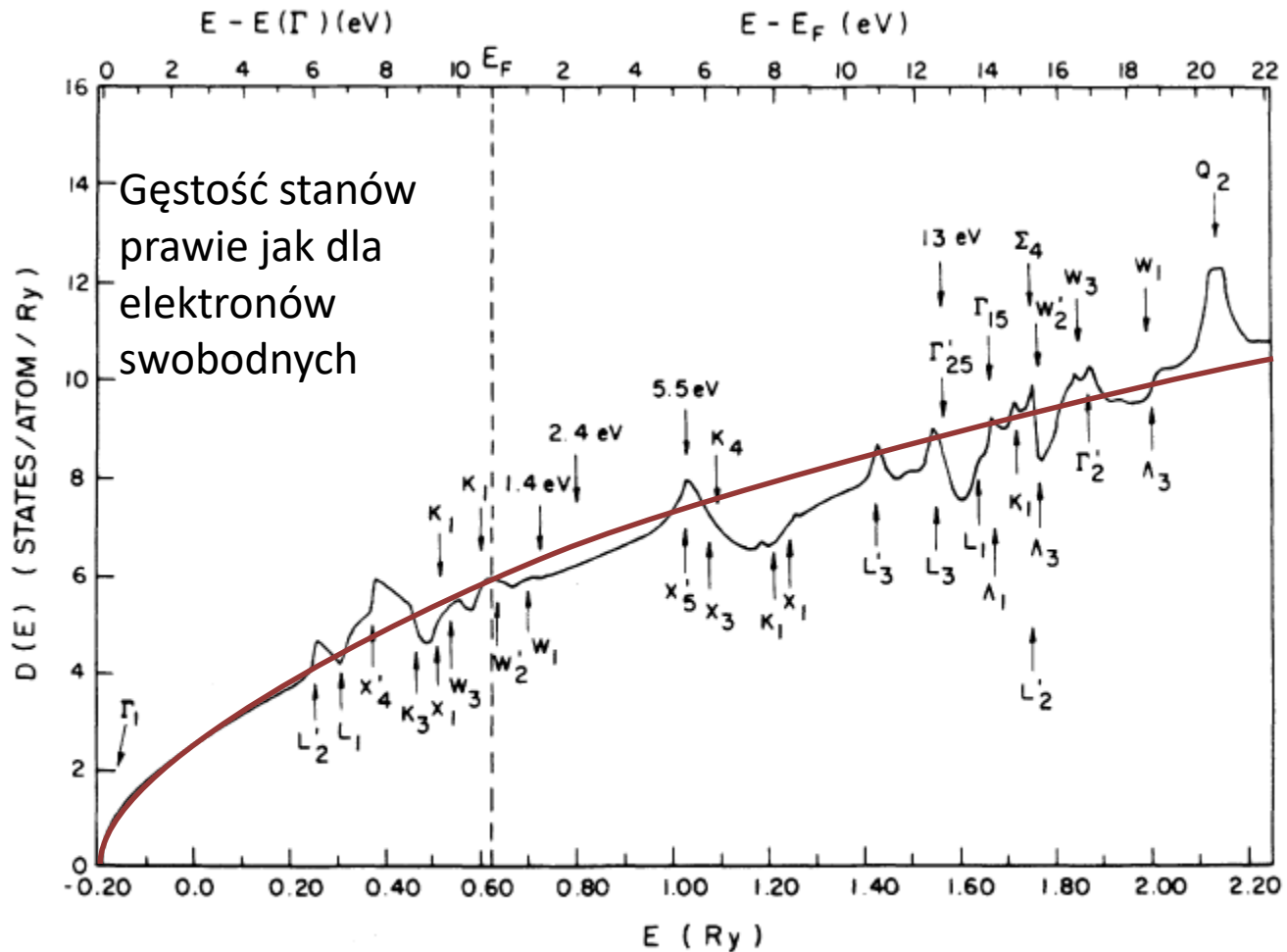
$$\varepsilon_3 = E_c + \frac{9\hbar^2 \pi^2}{2m_0 m^* L^2}$$

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

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



Gęstość stanów



Gęstość stanów
prawie jak dla
elektronów
swobodnych

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

Fermi surfaces of metals

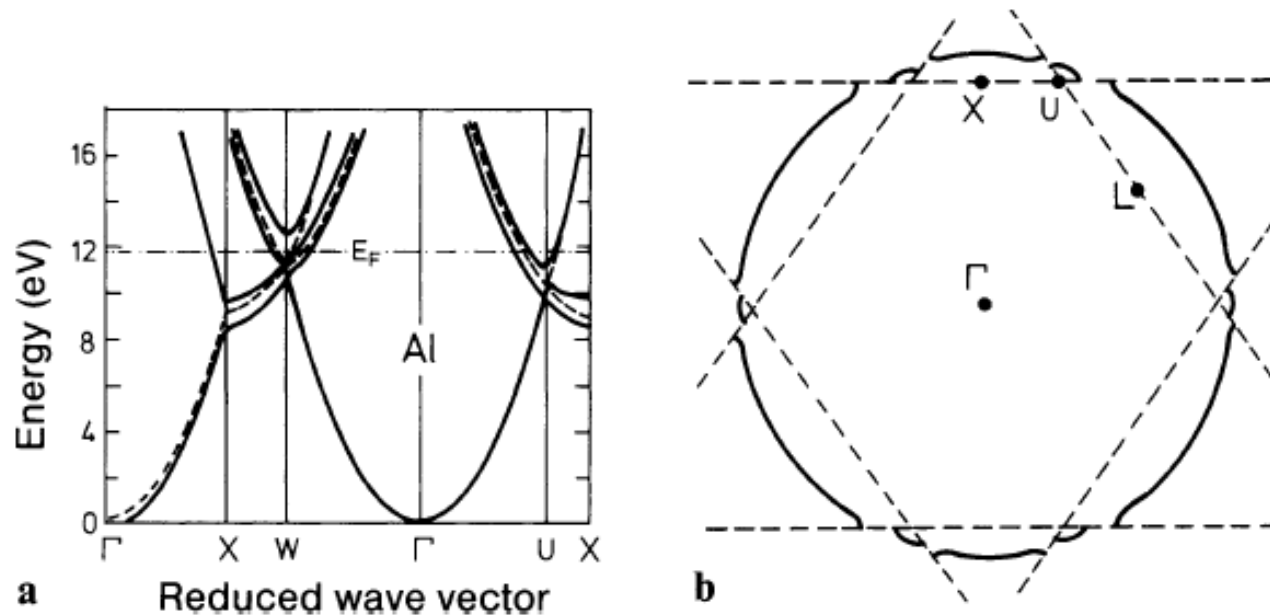


Fig. 7.11. (a) Theoretical bandstructure $E(\mathbf{k})$ for Al along directions of high symmetry (Γ is the center of the Brillouin zone). The dotted lines are the energy bands that one would obtain if the s - and p -electrons in Al were completely free (“empty” lattice). After [7.3]. (b) Cross section 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

The band theory of solids.

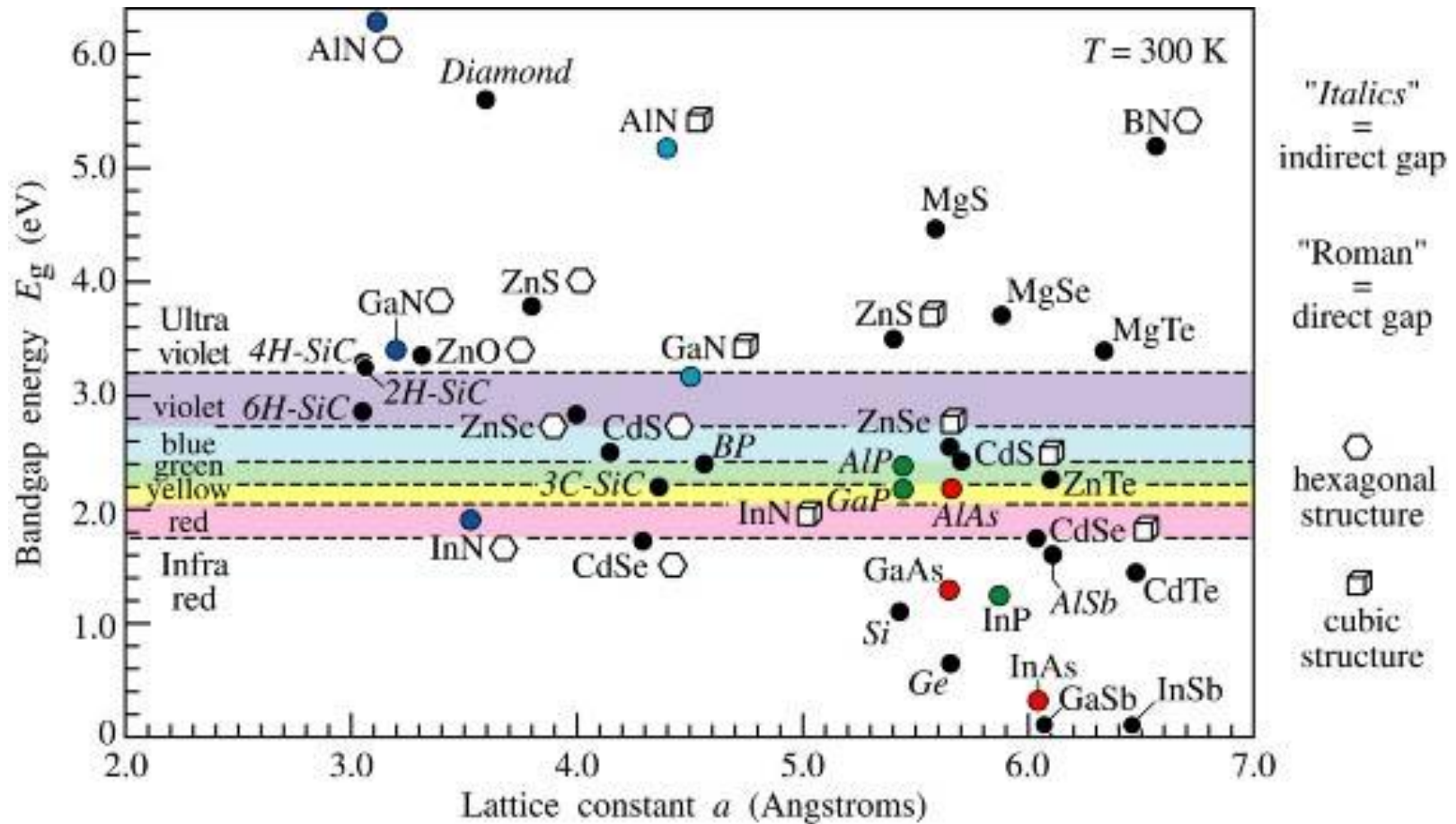
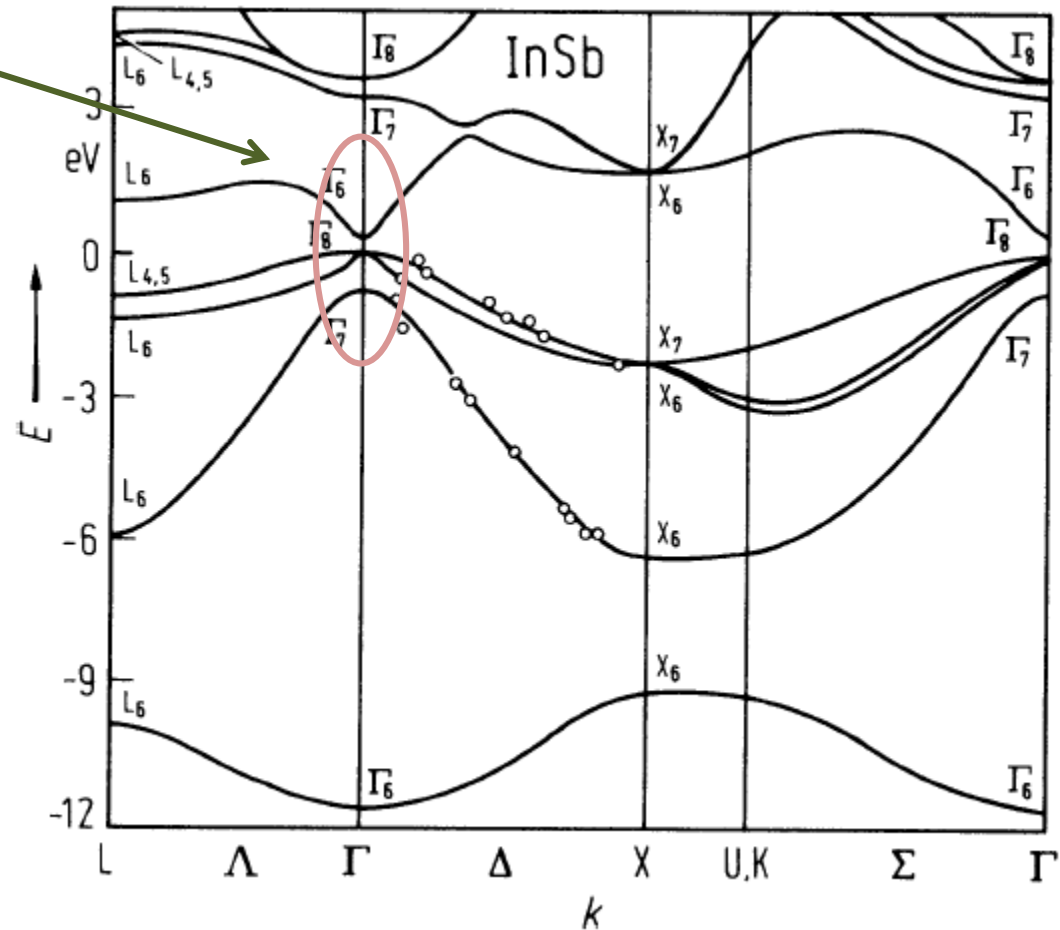


Fig. 11.4. Room-temperature bandgap energy versus lattice constant of common elemental and binary compound semiconductors.



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

Rozkłady statystyczne

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu kwantowego o energii E

E_F – potencjał chemiczny

Fermions:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$

Electrons

Holes

Triions (charged excitons)

Bosons:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} - 1}$$

Polaritons

Phonons

Magnons

Excitons, biexcitons

Plasmons

Boltzman distribution:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} \pm 1} \approx e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}}$$

$$E_F = \frac{\partial F}{\partial n}$$

$$F = U - TS$$

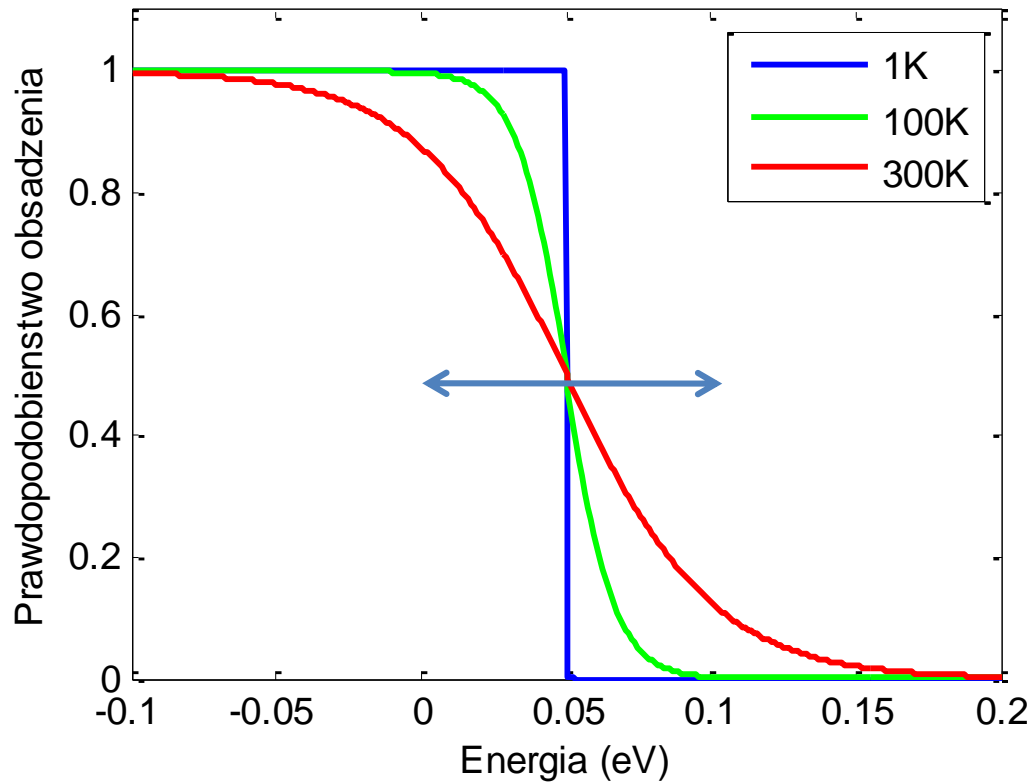
Anyons – eg. composite fermions $|\Psi_1 \Psi_2\rangle = e^{i\theta} |\Psi_2 \Psi_1\rangle$

Slave fermions (chargon, holon, spinon) = fermion+bozon with the charge-spin separation

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$



Enrico Fermi
1901 – 1954

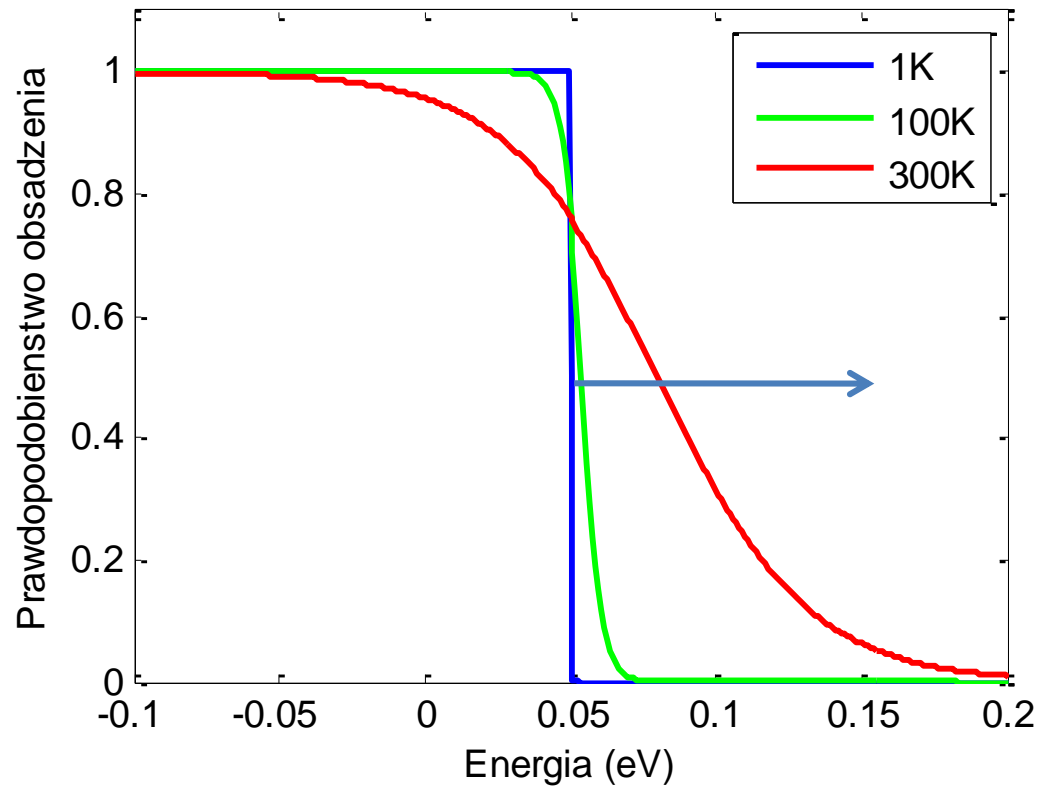


Paul Adrien
Maurice Dirac
1902 – 1984

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

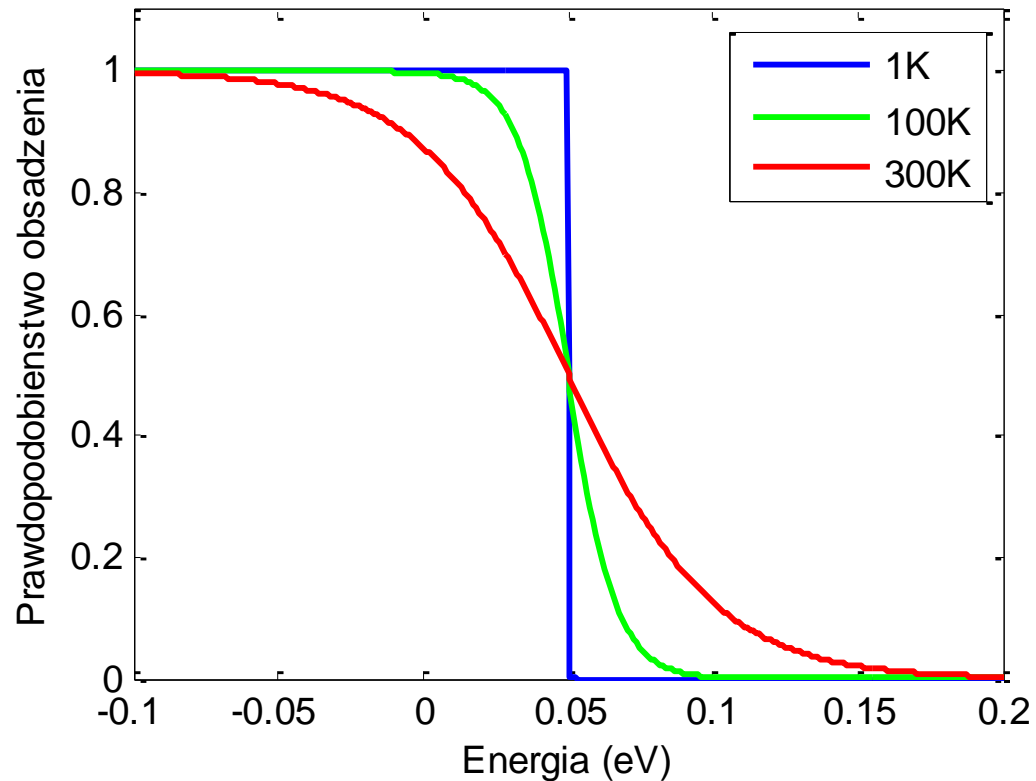
$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$



Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$



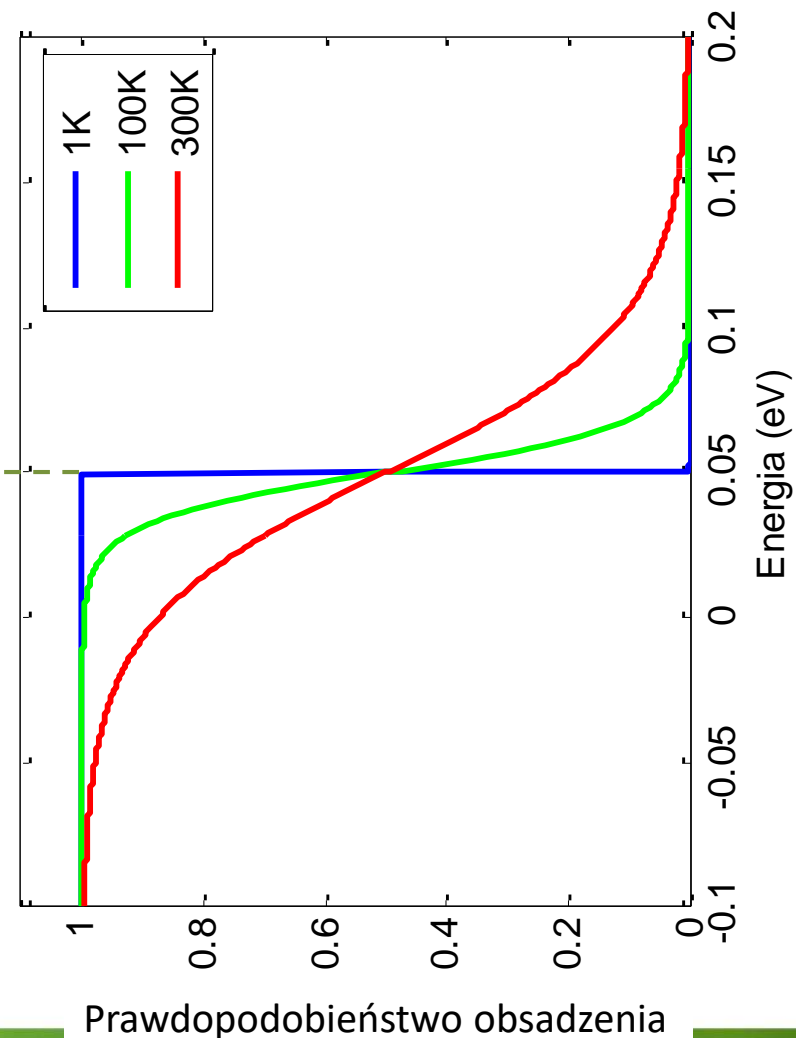
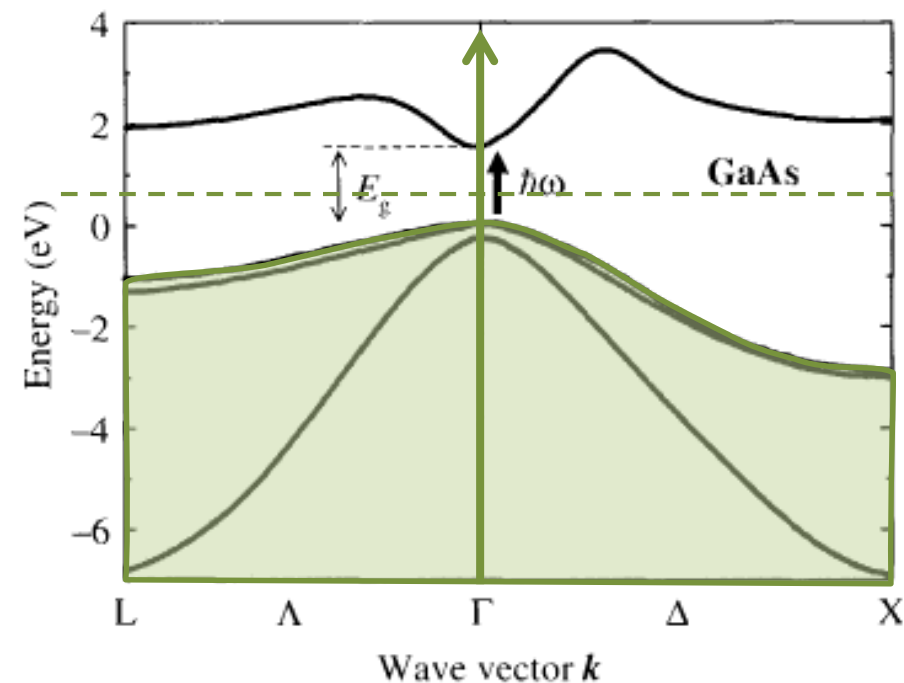
Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu kwantowego o energii E

E_F – potencjał chemiczny

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$



Funkcja rozkładu

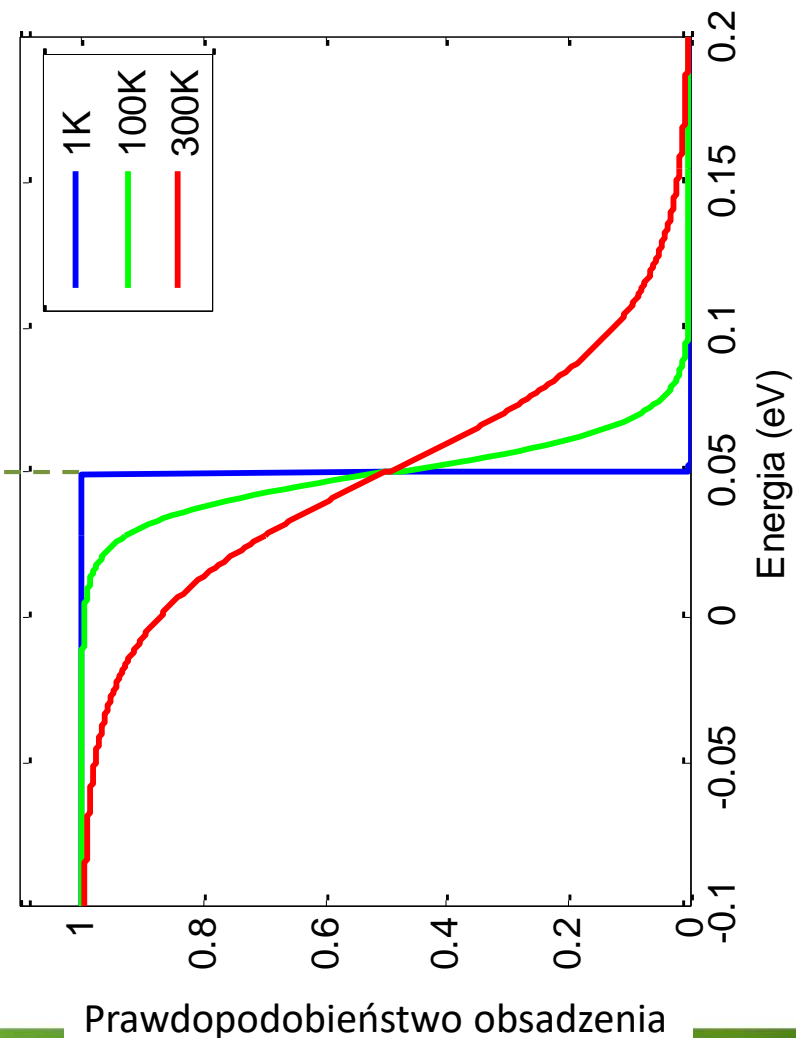
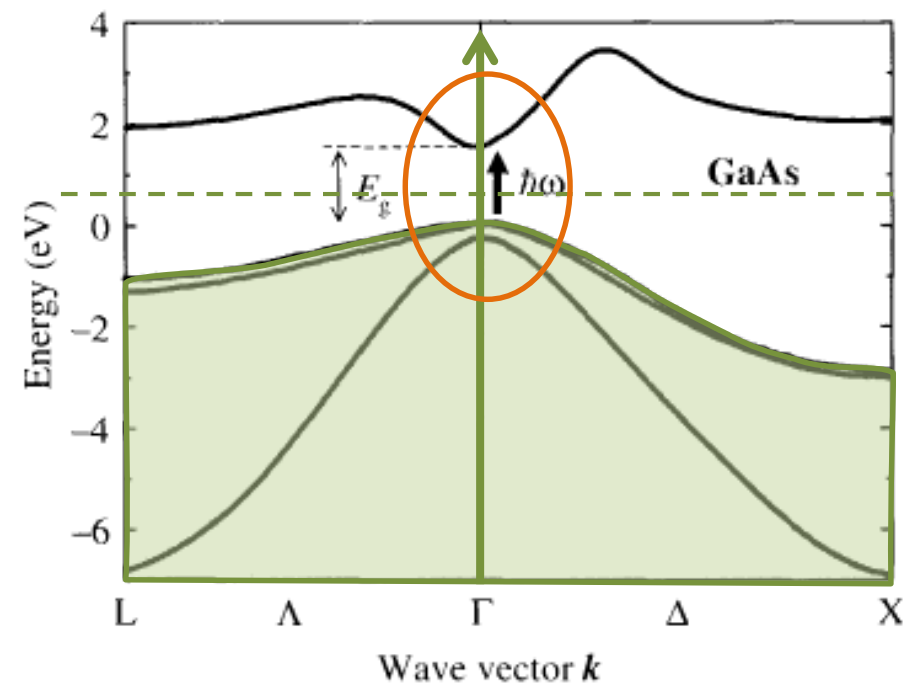
Rozkład Fermiego-Diraca

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu kwantowego

o energii E

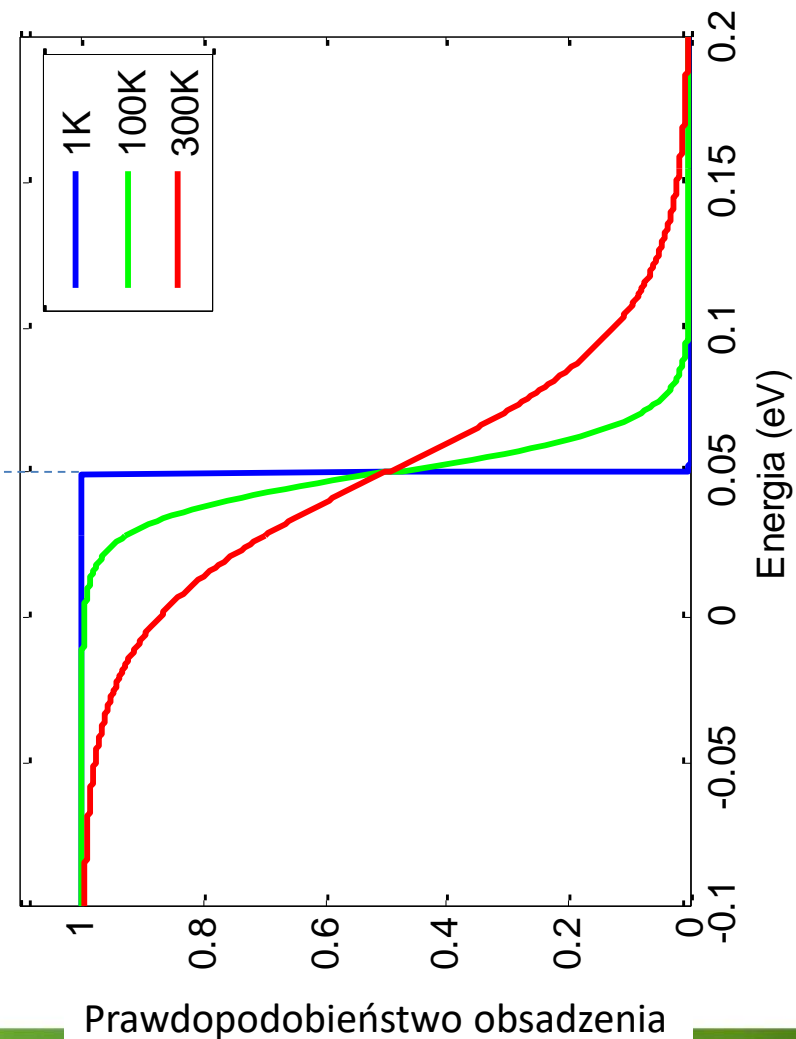
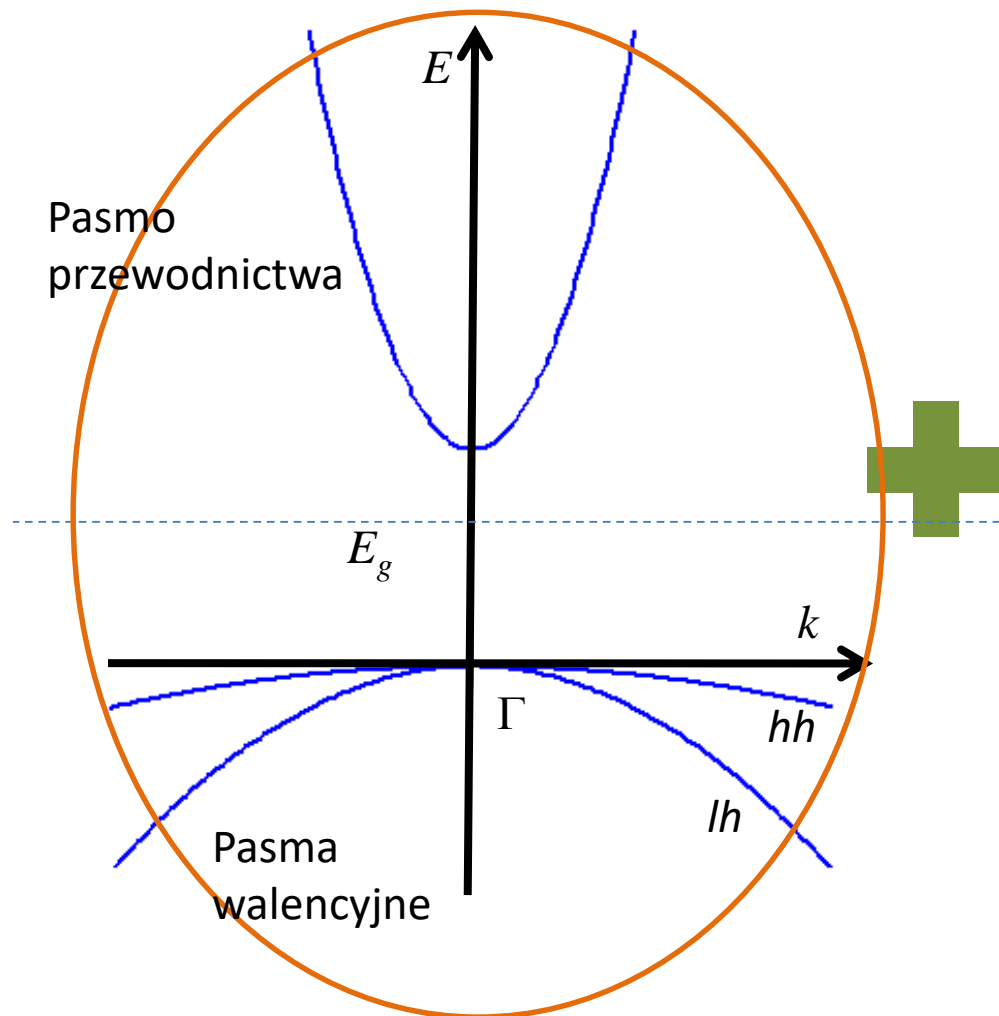
E_F – potencjał chemiczny

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$



Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca



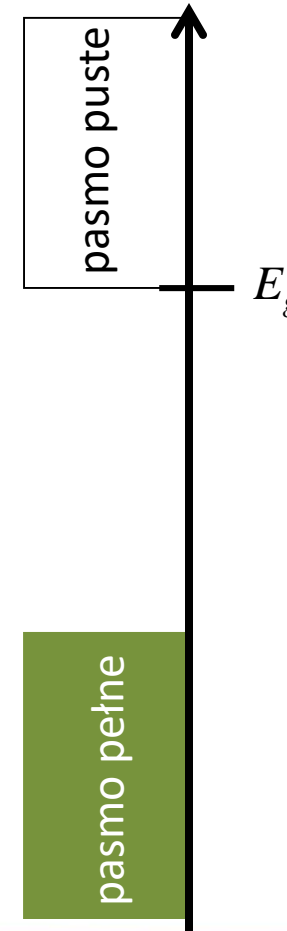
Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

W półprzewodnikach samoistnych w warunkach równowagi termodynamicznej, elektrony w paśmie przewodnictwa pojawiają się wyłącznie wskutek wzbudzenia z pasma walencyjnego.

$$n = p = n_i \text{ (koncentracja samoistna)}$$

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right) \quad p = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_B T}\right)$$



Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

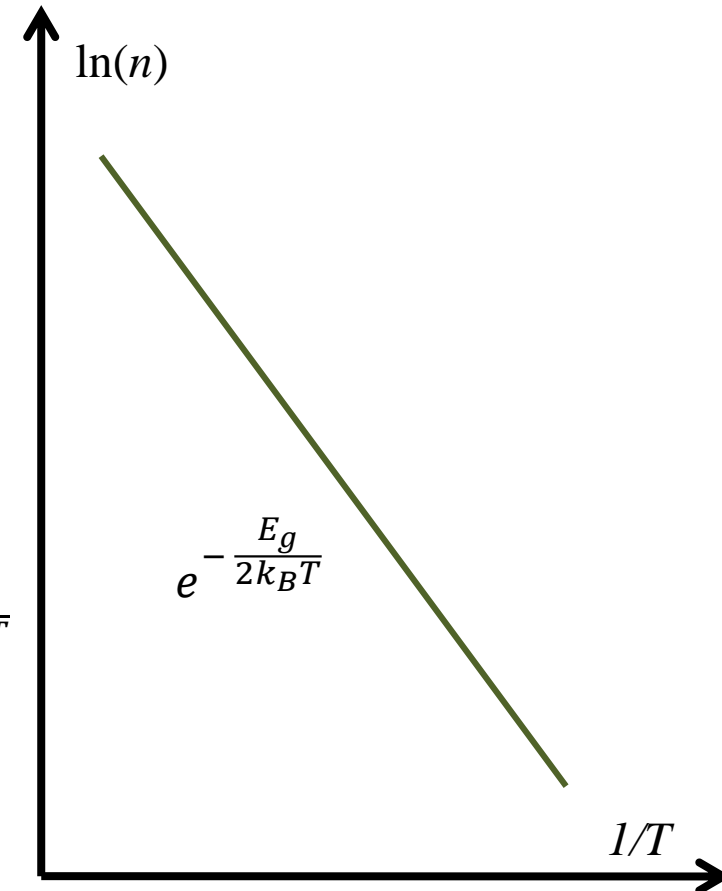
W półprzewodnikach samoistnych w warunkach równowagi termodynamicznej, elektrony w paśmie przewodnictwa pojawiają się wyłącznie wskutek wzbudzenia z pasma walencyjnego.

$$n = p = n_i \text{ (koncentracja samoistna)}$$

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right) \quad p = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_B T}\right)$$

$$n \cdot p = n_i^2 = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^3 (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{k_B T}} = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

$$n = p = n_i = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$



Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

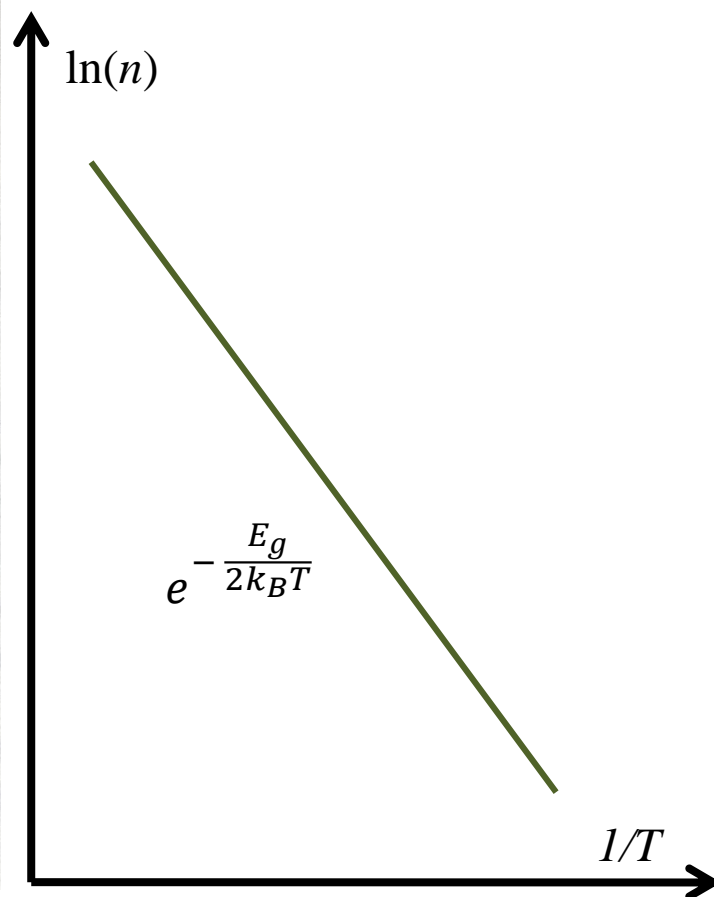
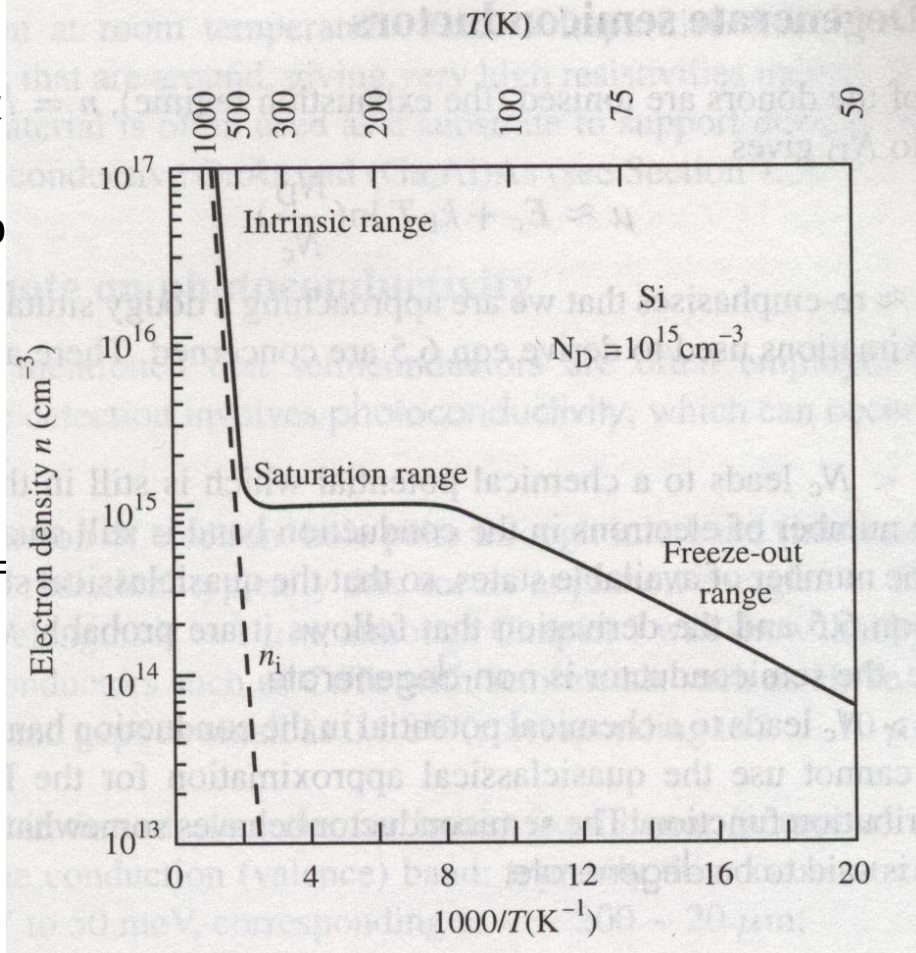
W półprzewodnikach samoistnych w warunkach równowagi termodynamicznej, elektrony w paśmie przewodzenia z pasma walencyjnego.

$$n = p = n_i$$

$$n = N_c \exp$$

$$n \cdot p = n_i^2 =$$

$$n = p = n_i$$



Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

W półprzewodnikach samoistnych w warunkach równowagi termodynamicznej, elektrony w paśmie przewodnictwa pojawiają się wyłącznie wskutek wzbudzenia z pasma walencyjnego.

Ogólnie:

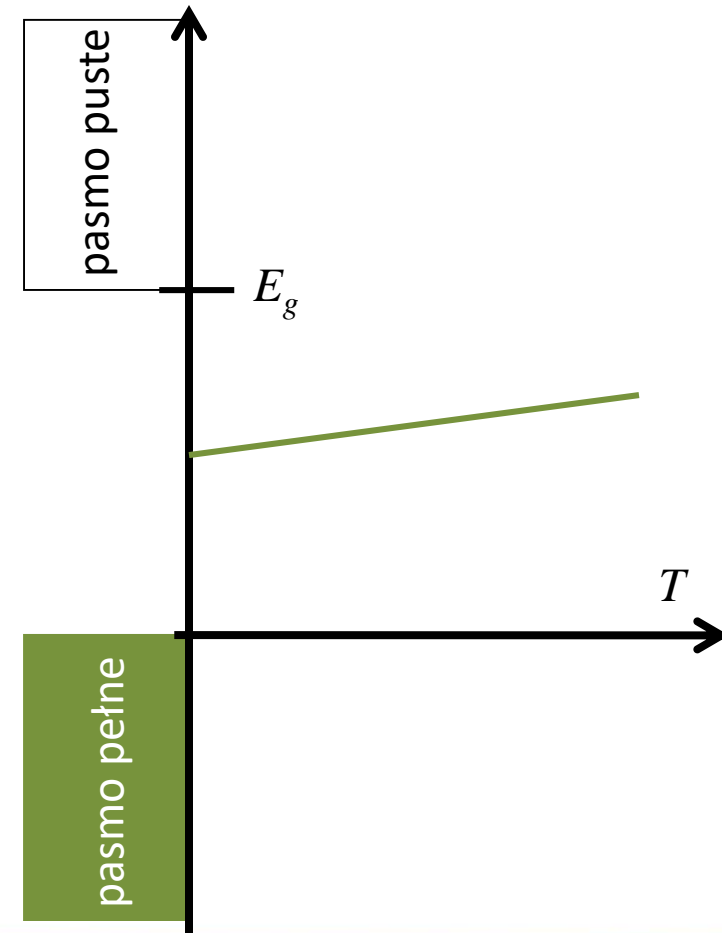
$$n \cdot p = n_i^2 = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{k_B T}} = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

$$n = p = n_i \text{ (koncentracja samoistna)}$$

$$n = p = n_i = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

$$\frac{N_c}{N_v} = e^{\frac{2\xi - E_g}{k_B T}} \Rightarrow \xi = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}k_B T \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right)$$

in our notation the middle of the band is 0



Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

W półprzewodnikach samoistnych w warunkach równowagi termodynamicznej, elektrony w paśmie przewodnictwa pojawiają się wyłącznie wskutek wzbudzenia z pasma walencyjnego.

Koncentracja samoistna typowych półprzewodników

$E_g \setminus T$	77K	300K	1200K	materiał
0,25eV	10^9 cm^{-3}	10^{16} cm^{-3}	10^{18} cm^{-3}	InSb PbSe
1eV	-	10^{10} cm^{-3}	10^{17} cm^{-3}	Ge, Si, GaAs
4eV	-	-	10^{11} cm^{-3}	ZnS, SiC, GaN, ZnO, C (diament)

R. Stępniewski

W powyższej tabelce wartości poniżej 10^{10} cm^{-3} nie mają sensu gdyż koncentracja zanieczyszczeń, a co za tym idzie koncentracja wynikająca z nieintencjonalnego domieszkowania jest większa

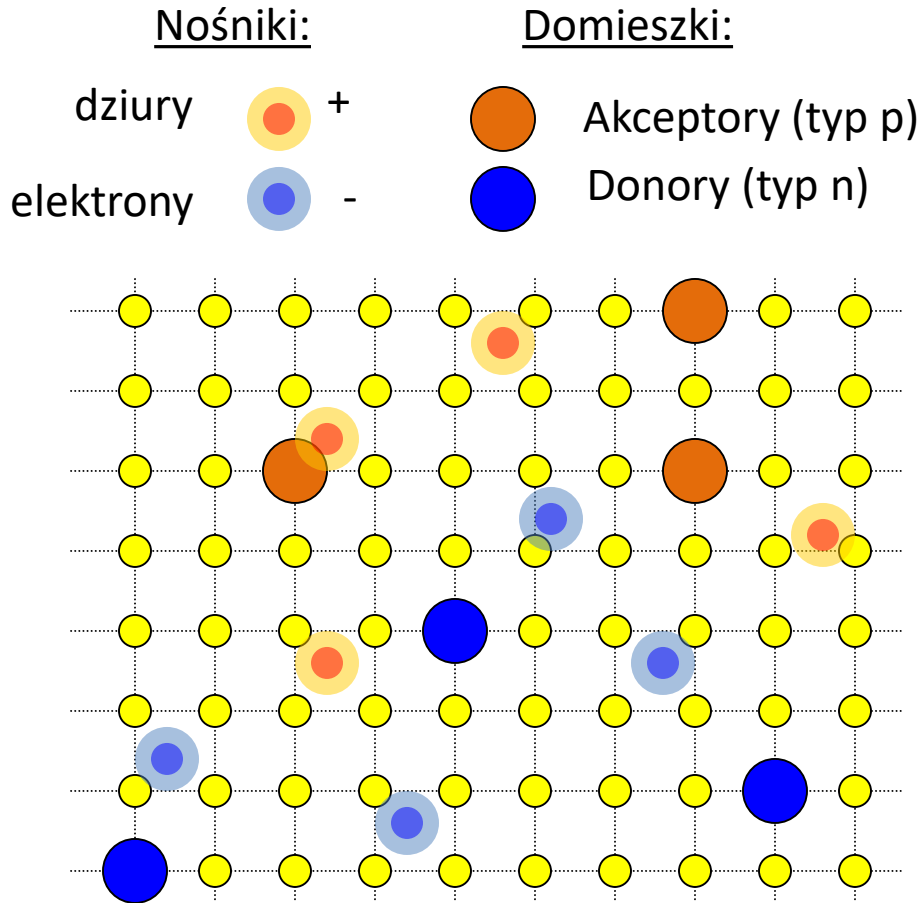
$$n = p = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

$$n = N_c e^{\frac{E_F - E_c}{k_B T}}$$

$$p = N_v e^{-\frac{E_F - E_v}{k_B T}}$$

Domieszkowanie półprzewodników

Półprzewodniki



	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

W jaki sposób kontrolować koncentrację nośników?

W półprzewodnikach spotykamy szereg odstępstw od idealnej struktury kryształu:

- defekty struktury kryształu, luki, atomy w położeniu międzywęzłowym, dyslokacje powstałe np. w procesie wzrostu.
- obce atomy (**domieszki**) wprowadzane intencjonalnie lub wskutek zanieczyszczeń (poziom czystości)

Wskutek ich występowania pojawiają się między innymi:

- stany dozwolone w przerwie wzbronionej na skutek odstępstw od potencjału idealnej sieci
- ładunki przestrzenne w izolatorach
- ekranowanie przez swobodne nośniki

Stany domieszkowe dzielimy na:

- głębokie – potencjał krótkozasięgowy, zlokalizowany głównie w obszarze jednej komórki elementarnej – np. luka, domieszka izoelektronowa (o tej samej wartościowości co macierzysty atom np. N w InP).
- płytkie - głównie potencjał długozasięgowy – kulombowski

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

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

Dla GaAs

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

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

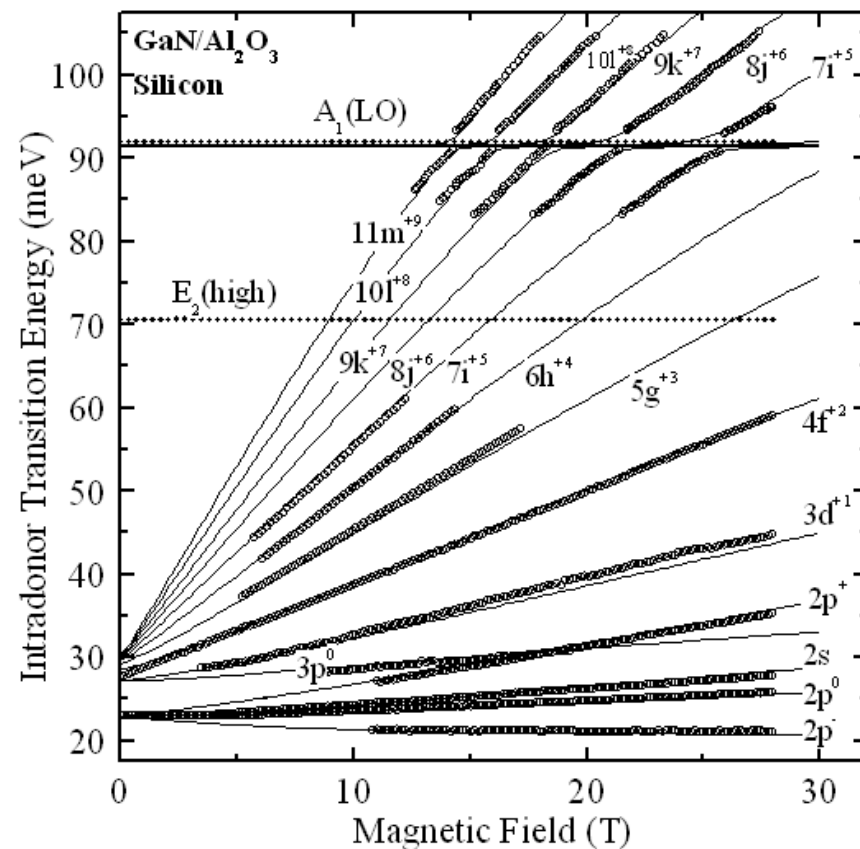
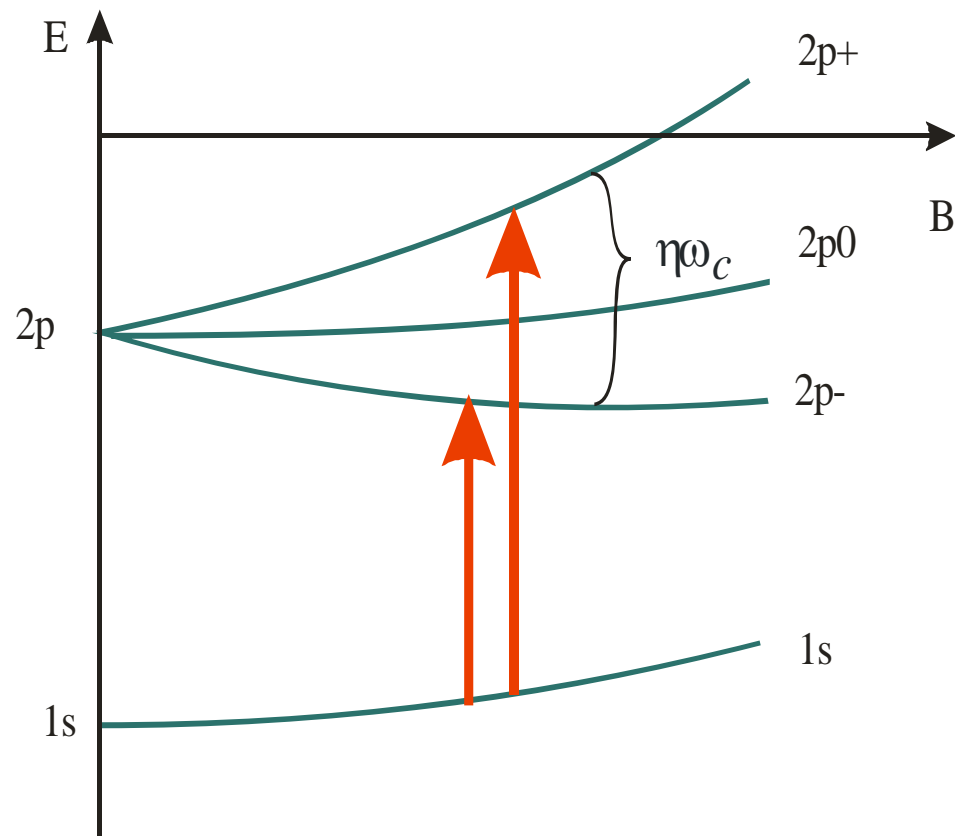
Grupa IV: diament, Si, Ge

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

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

Spektroskopia w dalekiej podczerwieni

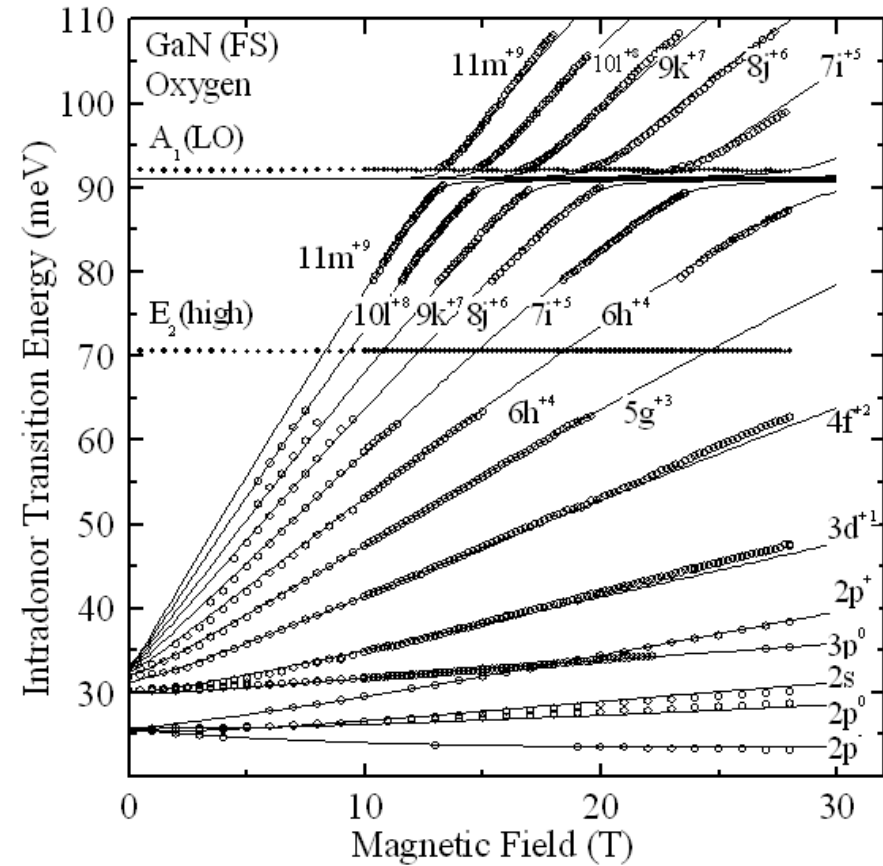
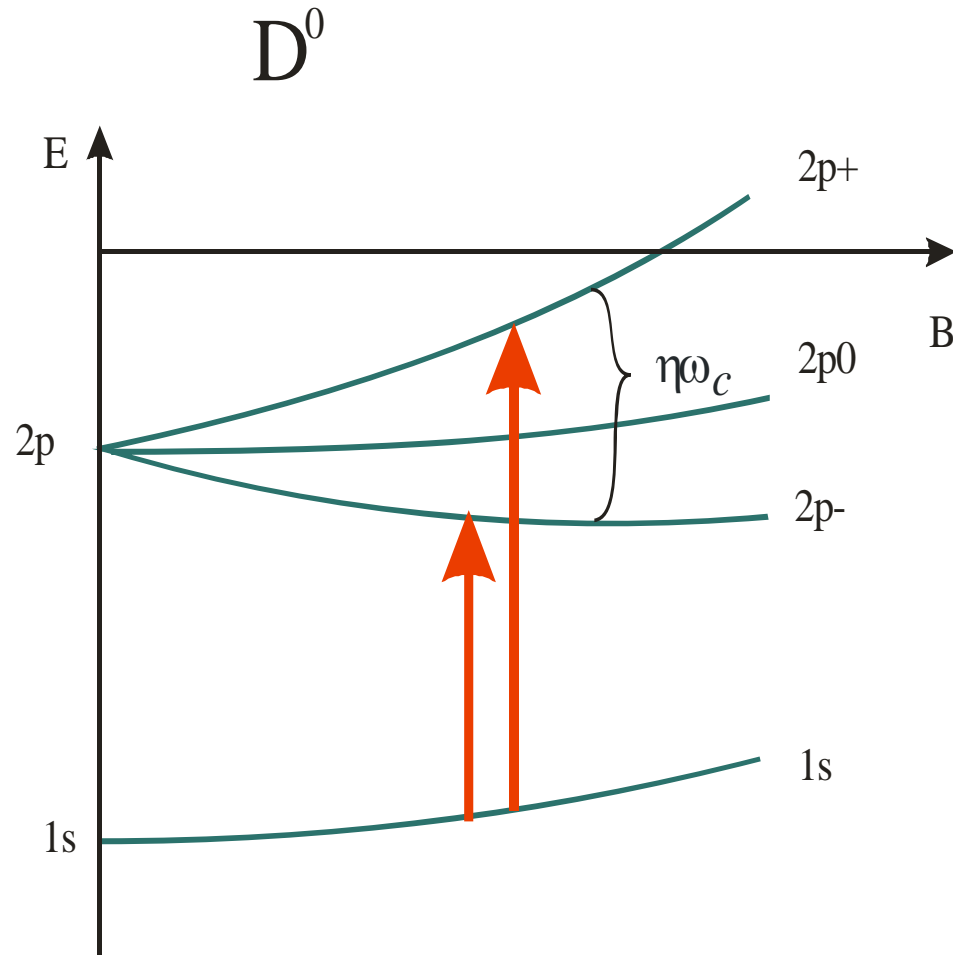
D^0



Silicon

$R_y = 30.28(5) \text{ meV}$

Spektroskopia w dalekiej podczerwieni

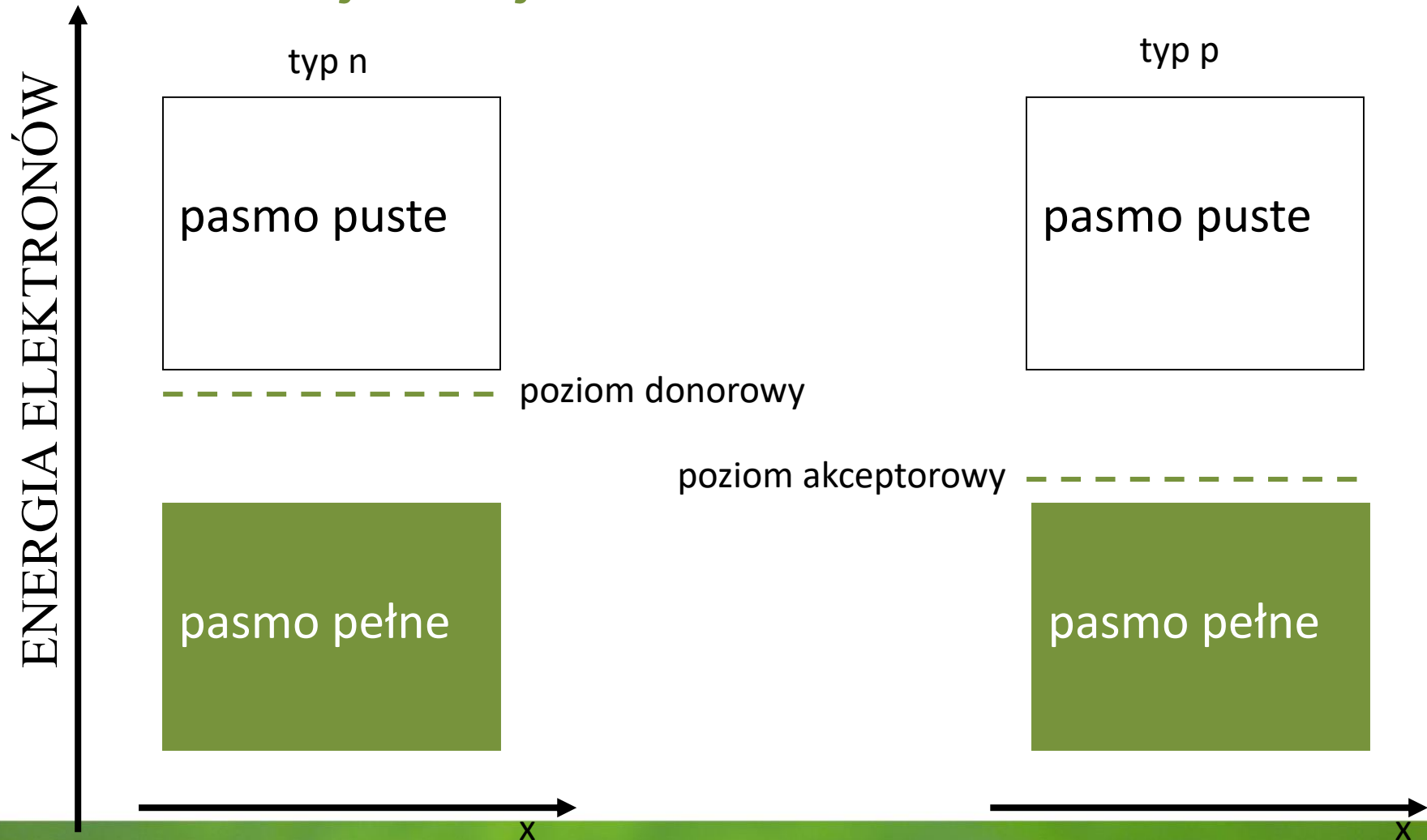


Oxygen

$R_V = 30.28(5)$ meV

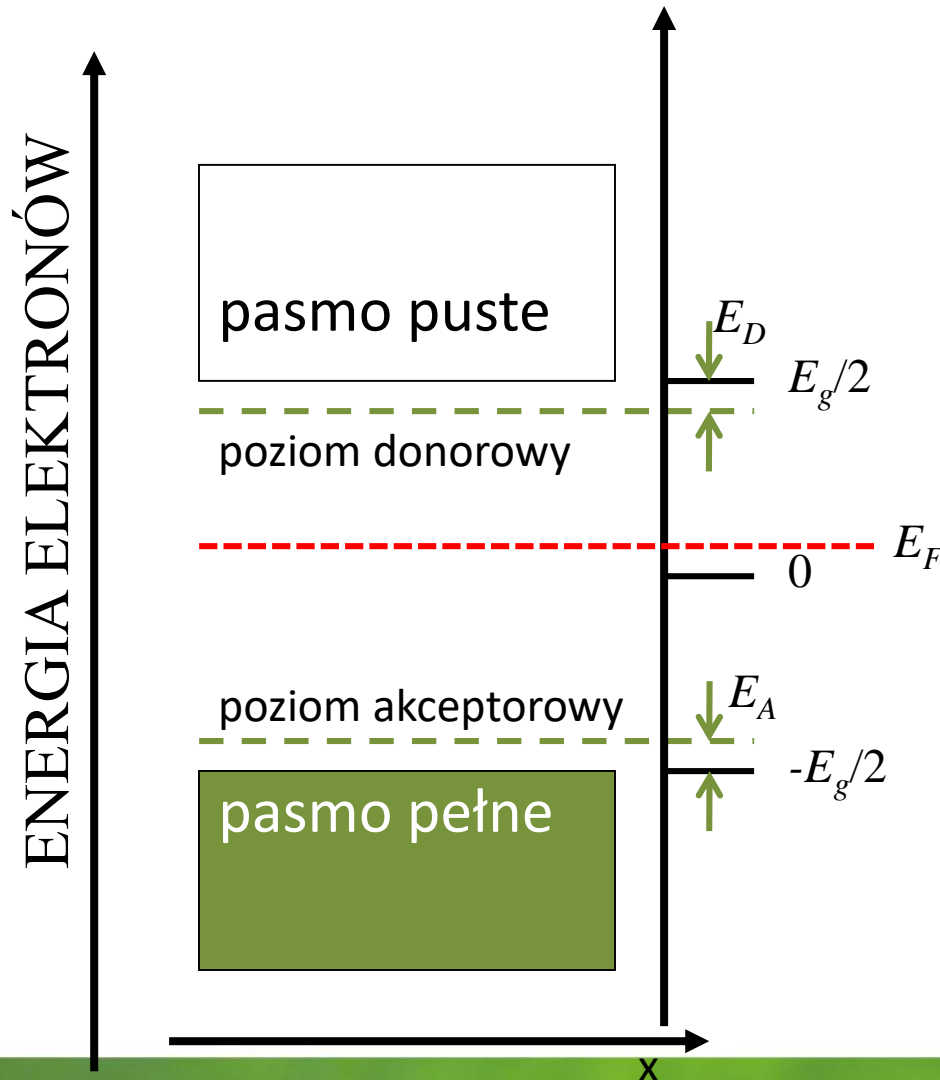
Domieszki i defekty

Model wodoropodobny – jonizacja domieszki



Domieszki i defekty

Domieszkowanie



Koncentracja nośników w półprzewodniku niesamoistnym

Rozważmy półprzewodnik, w którym:

N_A – koncentracja akceptorów

N_D – koncentracja donorów

p_A – koncentracja neutralnych akceptorów

n_D – koncentracja neutralnych donorów

n_c – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa

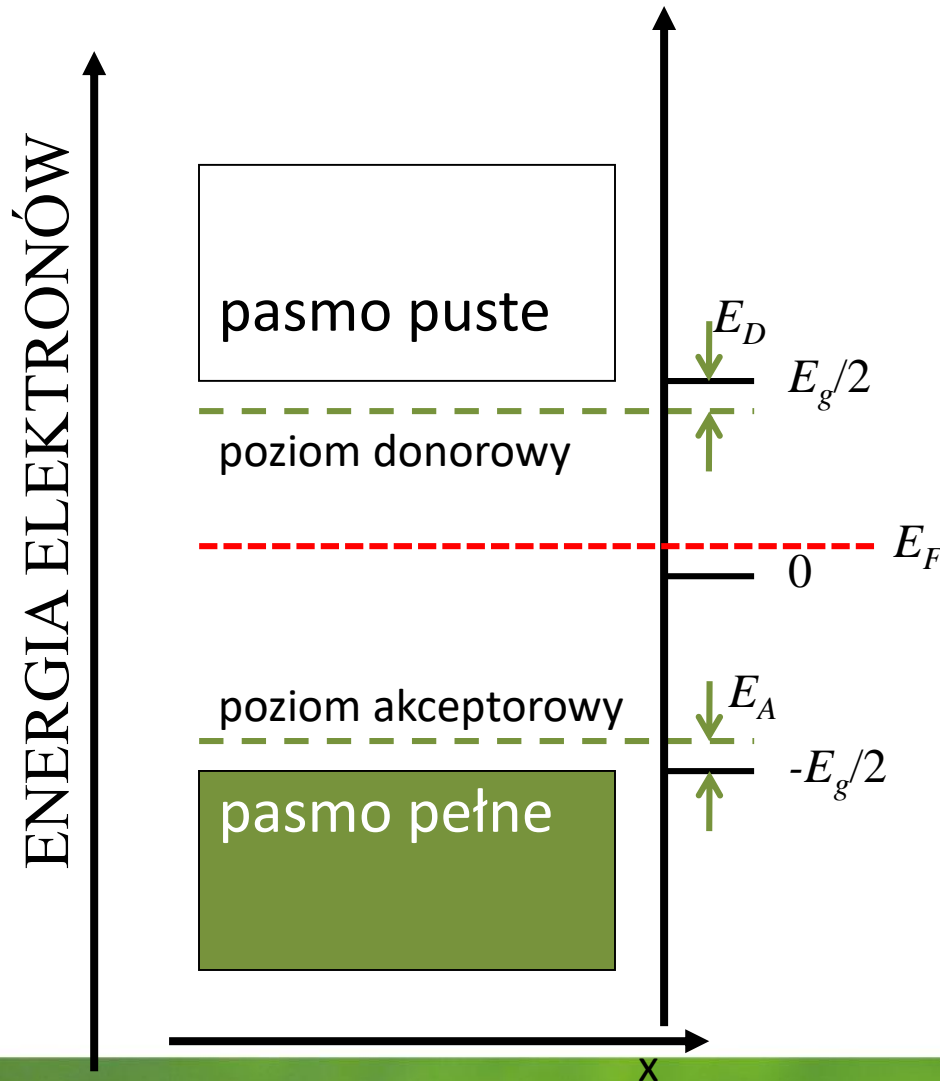
p_v – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

Z warunku neutralności kryształu:

Przy tablicy!

Domieszki i defekty

Domieszkowanie



Koncentracja nośników w półprzewodniku niesamoistnym

Rozważmy półprzewodnik, w którym:

N_A – koncentracja akceptorów

N_D – koncentracja donorów

p_A – koncentracja neutralnych akceptorów

n_D – koncentracja neutralnych donorów

n_c – koncentracja elektronów w paśmie przewodnictwa

p_v – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

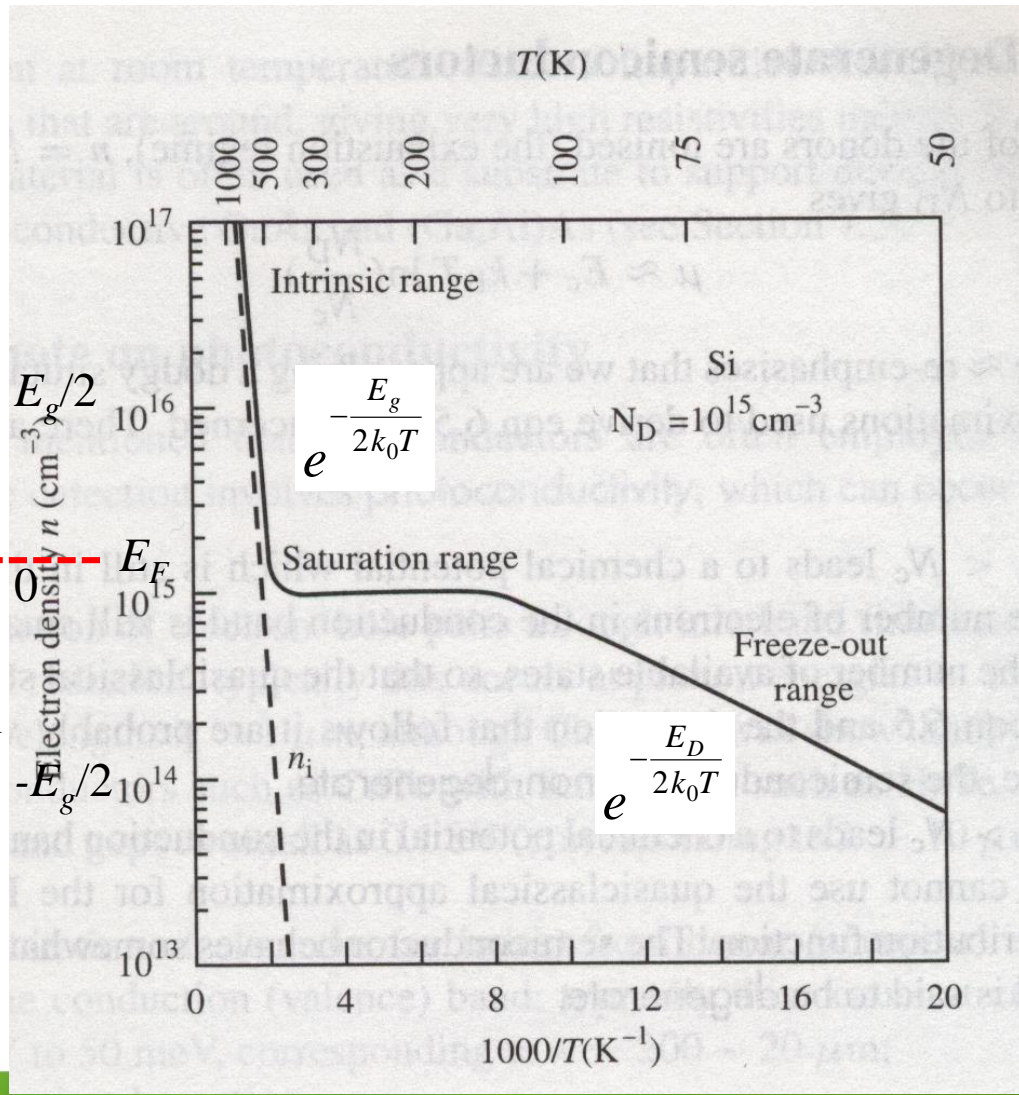
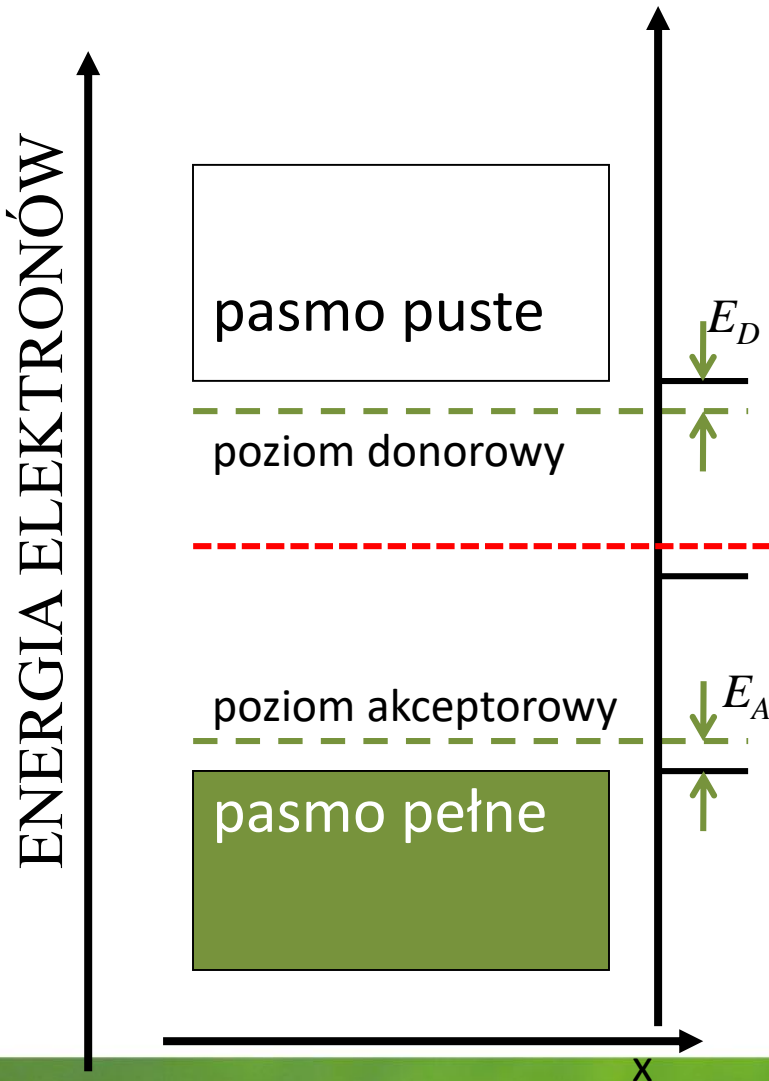
Z warunku neutralności kryształu:

$$n_c + (N_A - p_A) = p_v + (N_D - n_D)$$

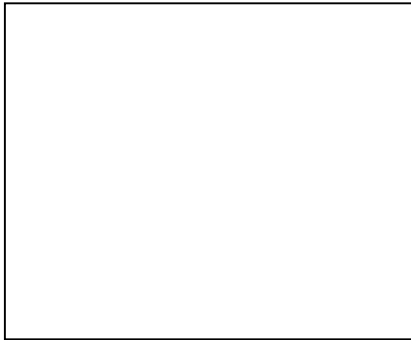
$$n_c + n_D = (N_D - N_A) + p_v + p_A$$

Domieszki i defekty

Domieszkowanie



Teoria pasmowa ciał stałych.



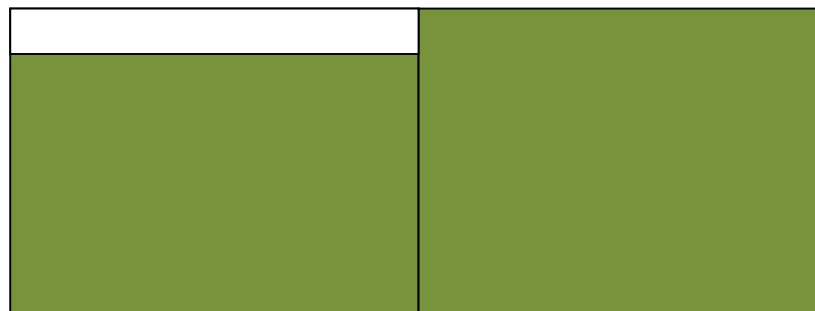
półprzewodnik typu p



półprzewodnik typu n

Teoria pasmowa ciał stałych.

Dioda – czyli złącze p - n



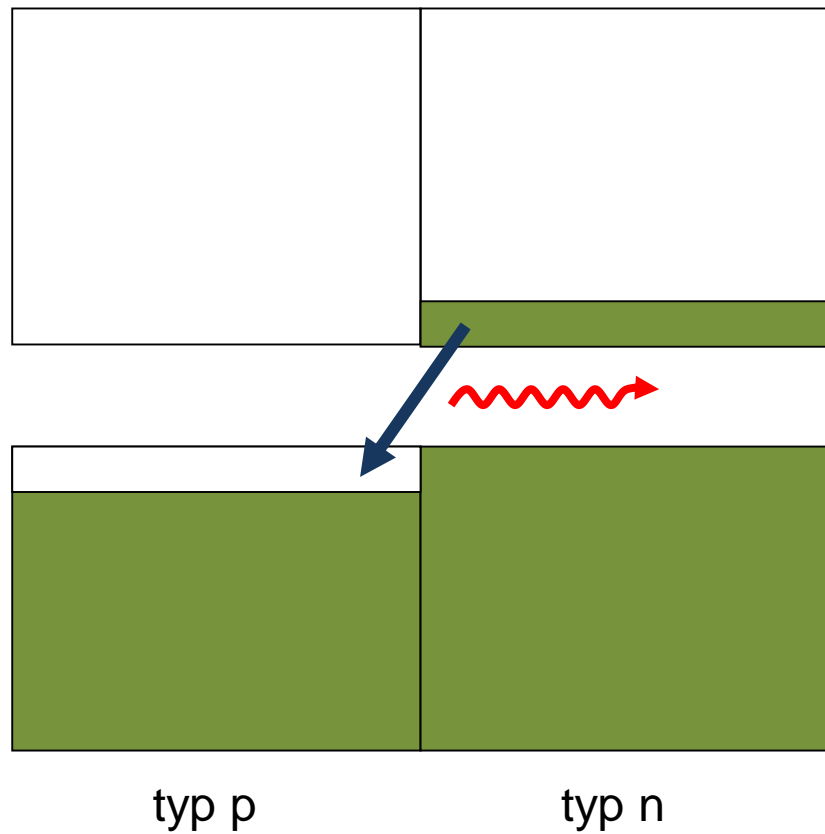
typ p

typ n

Flat band

Teoria pasmowa ciał stałych.

Dioda – czyli złącze p - n



Flat band

Teoria pasmowa ciał stałych.

Dioda – czyli złącze p-n

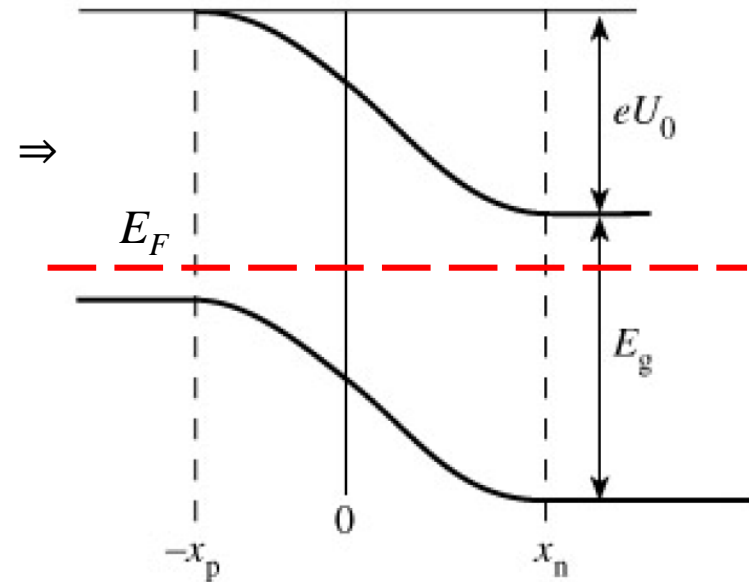
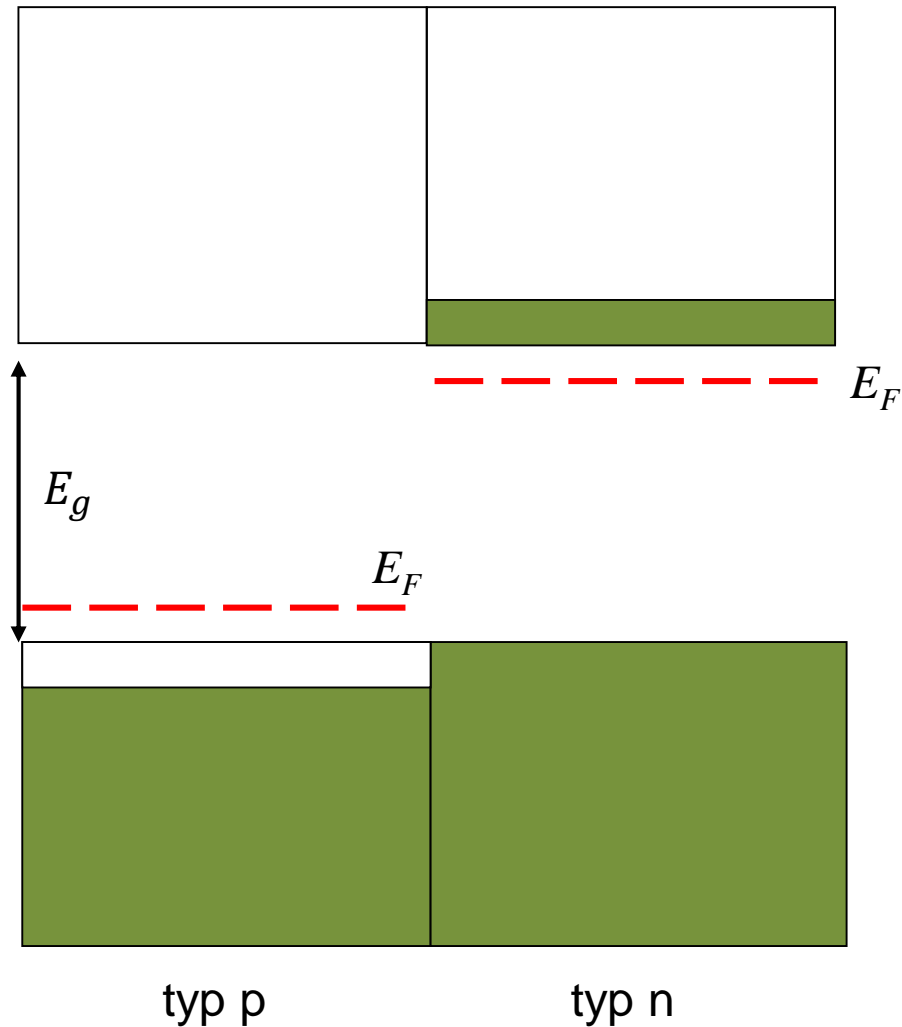


Figure 9.3: The energy diagram for the transition region of a p-n junction.

Flat band

Domieszkowanie półprzewodników

Heterozłącze (heterojunction)

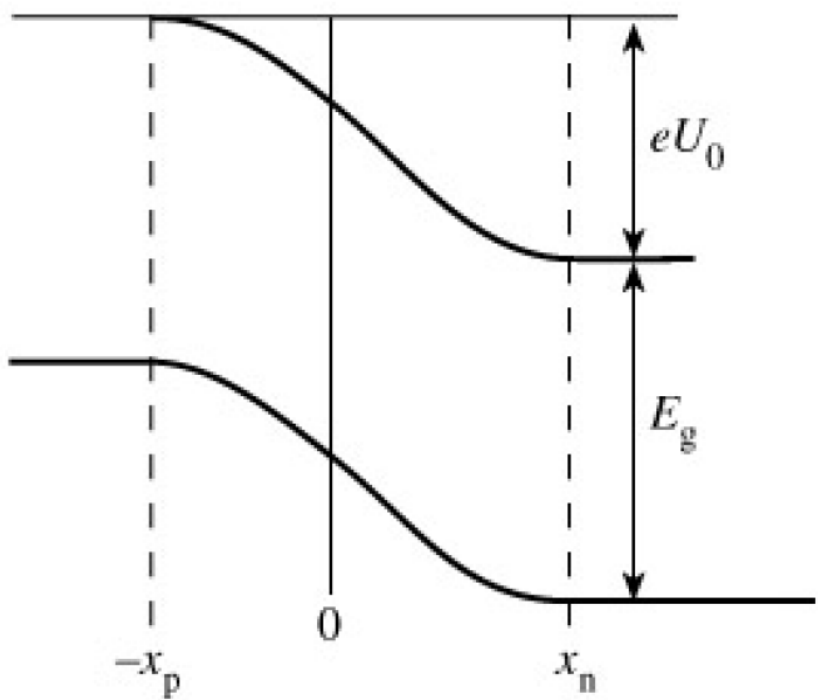
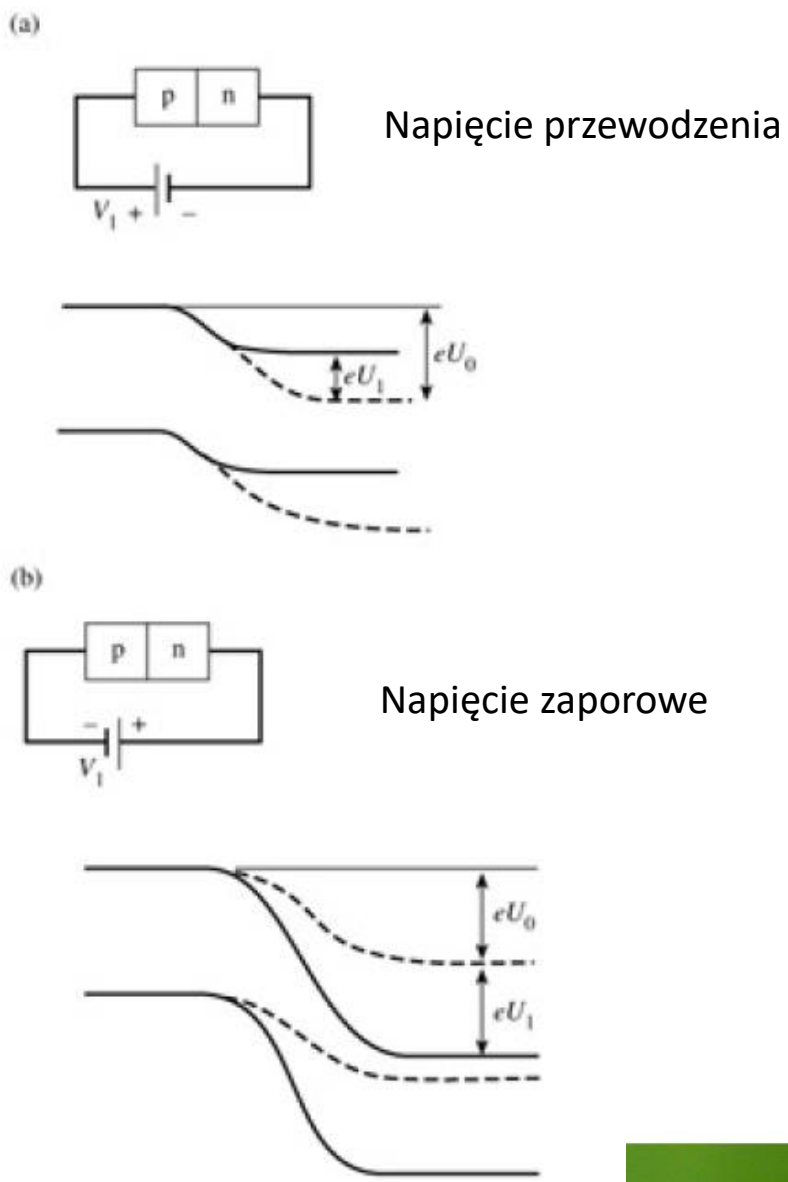
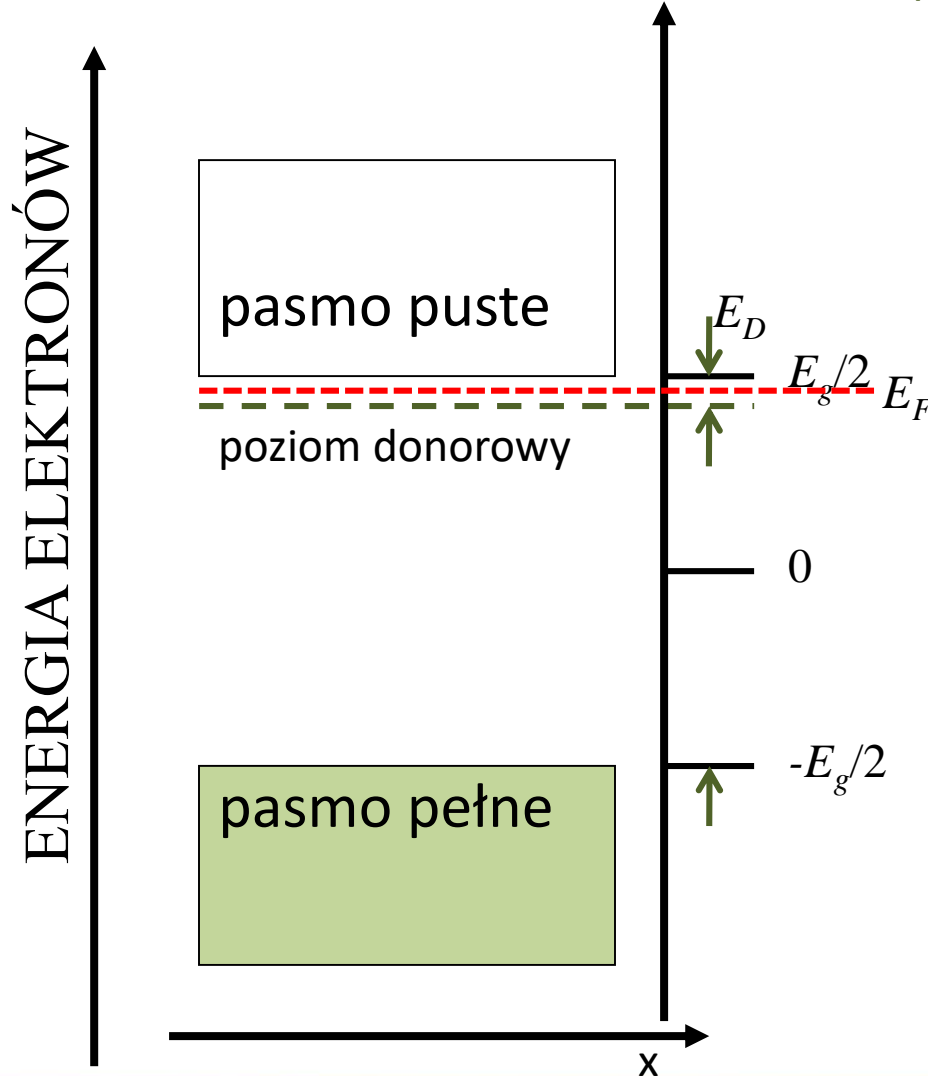


Figure 9.3: The energy diagram for the transition region of a p-n junction.



Obsadzenie poziomów domieszkowych

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

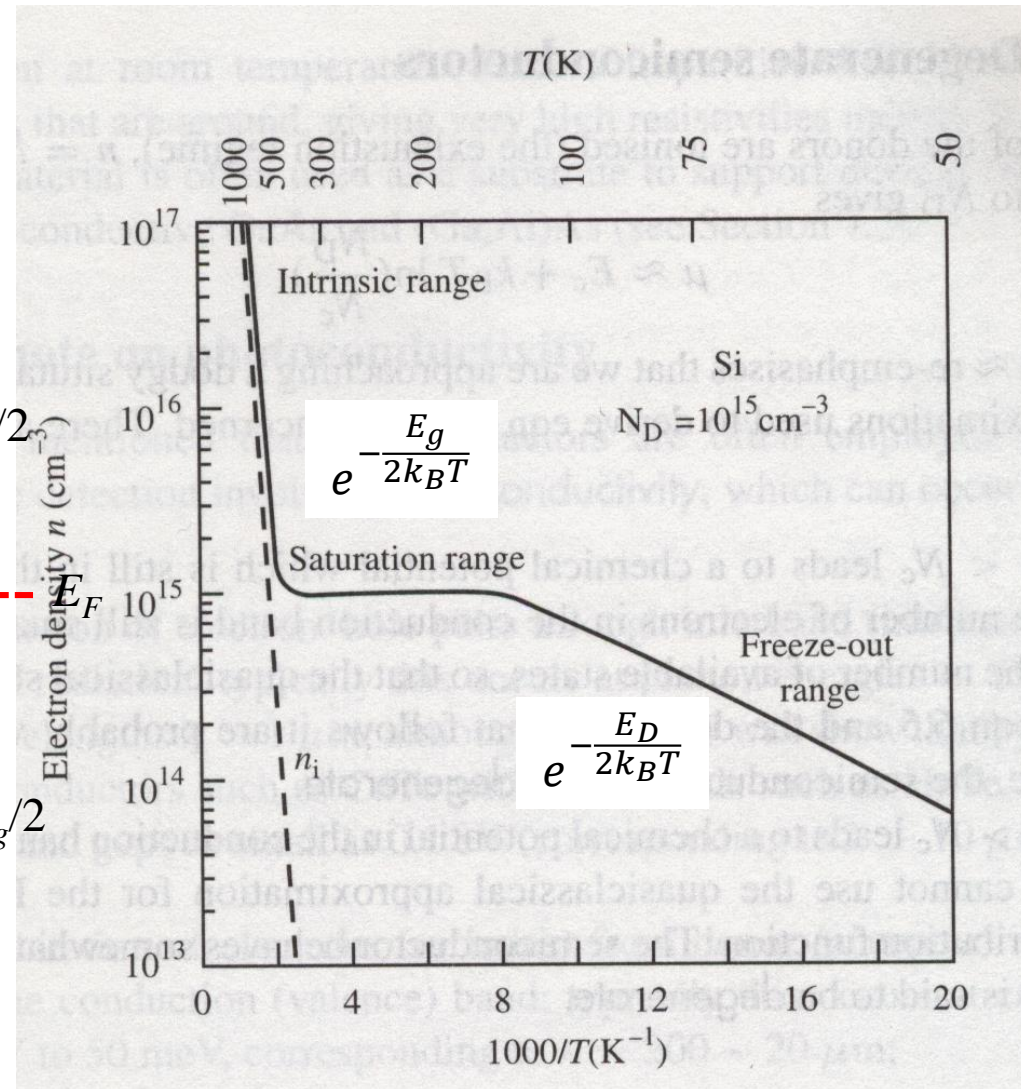
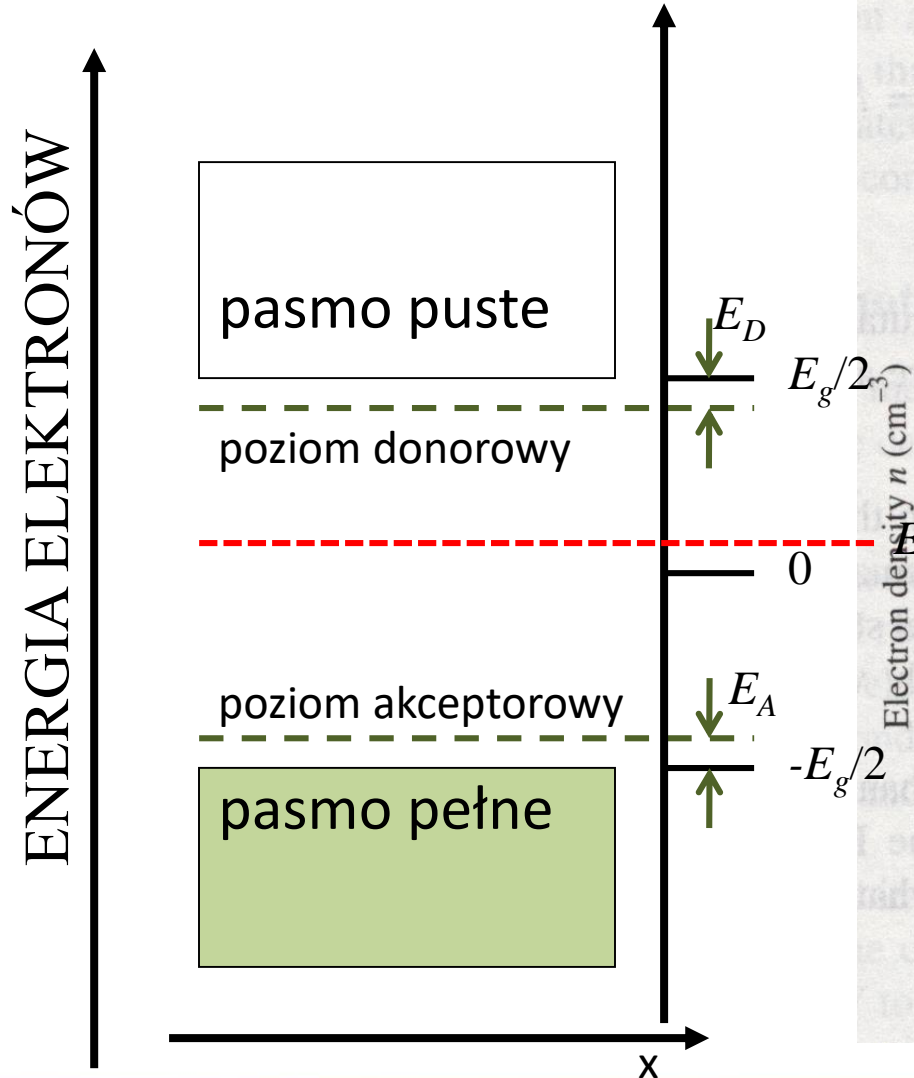
$p \approx 0$ – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

Z warunku neutralności kryształu:

$$n = N_D - N_D^0$$

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności



Obsadzenie poziomów domieszkowych

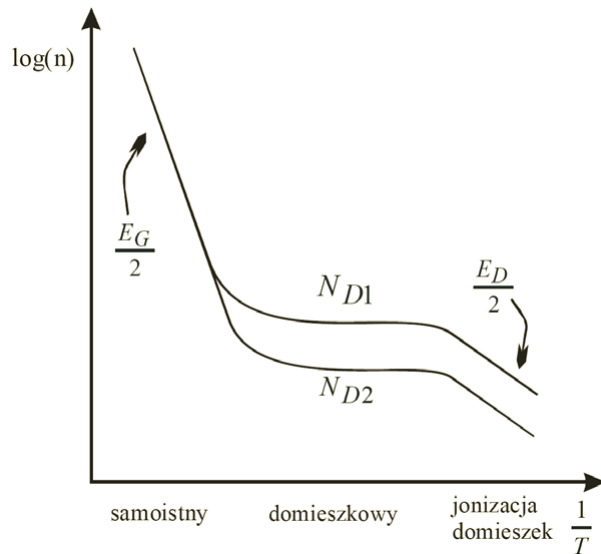
dla półprzewodników skompensowanych w niskich temperaturach energia aktywacji termicznej wynosi E_D , a nie $\frac{E_D}{2}$

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

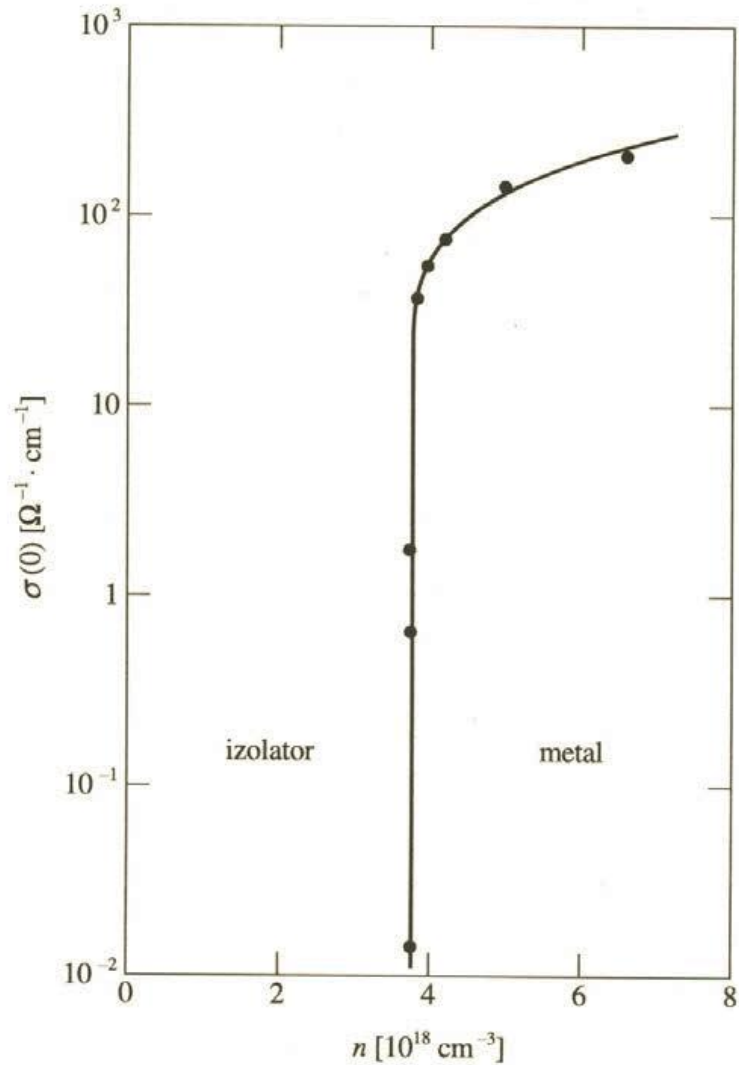
przy koncentracjach domieszek rzędu:

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

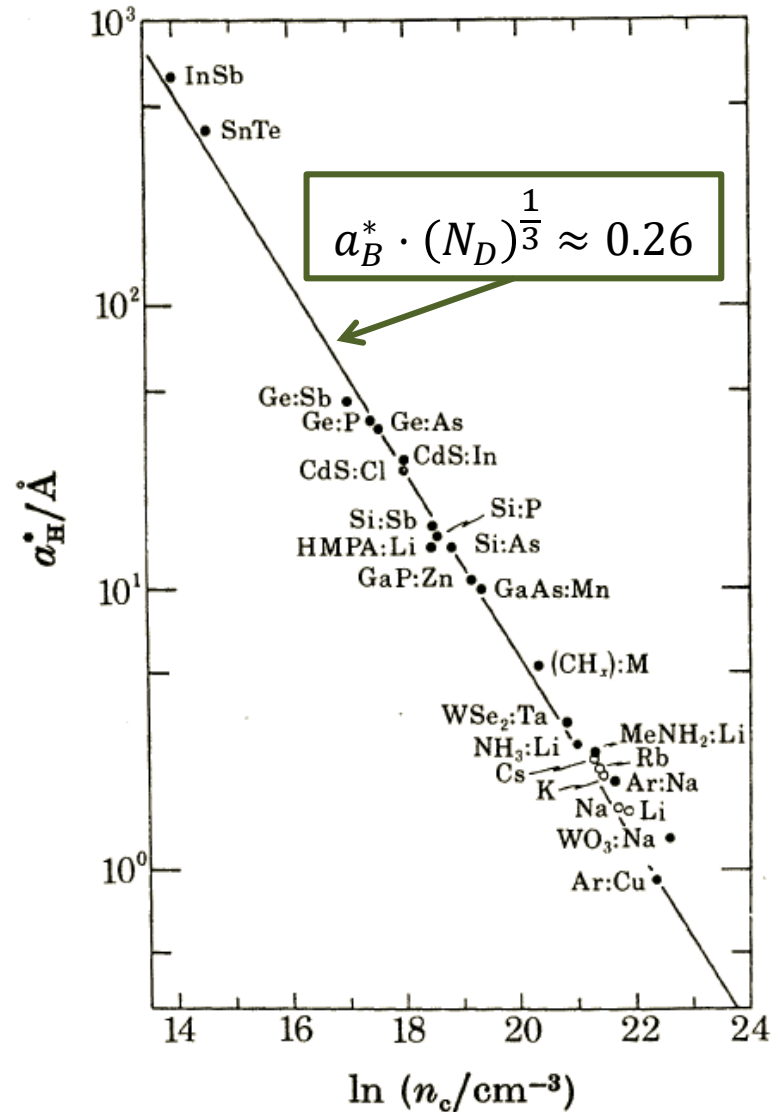
zachodzi przejście fazowe niemetal-metal (tzw. przejście Motta)



Obsadzenie poziomów domieszkowych



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



Tensor przewodnictwa

Przewodnictwo $\sigma = n e \mu$

Gęstość prądu: $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ - w ogólności σ może być tensorem:

$$\vec{j}_x = q n \vec{v}_x \text{ oraz } \vec{v}_x = \frac{q\tau}{m} \vec{E}_x = \mu \vec{E}_x$$

W ogólności np. $j_x = \sigma_{xx} E_x$ oraz $j_y = \sigma_{yx} E_x$ itp.

Model Drudego z polem magnetycznym:
$$m^* \left\{ \frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{\vec{v}}{\tau} \right\} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}$$

τ – czas relaksacji pędowej (*scattering time*)

$$m^* \left\{ \frac{dv_x}{dt} + \frac{v_x}{\tau} \right\} = qE_x + qv_y B$$

$$m^* \left\{ \frac{dv_y}{dt} + \frac{v_y}{\tau} \right\} = qE_y - qv_x B$$

Efekt Halla

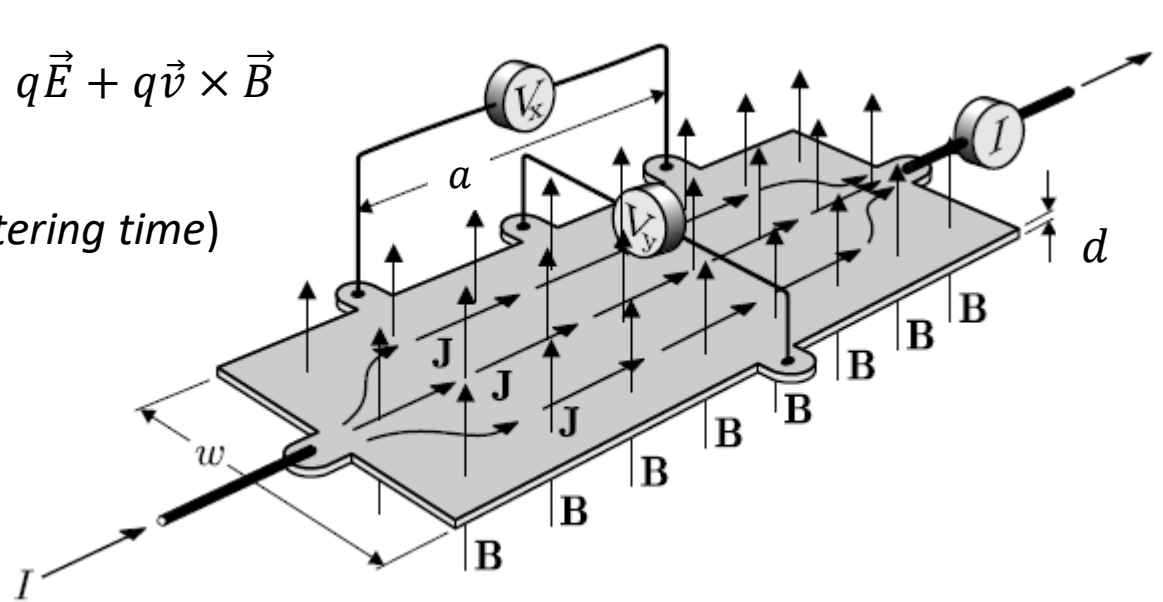
Siła Lorentza: $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$

Model Drudego: $m^* \left\{ \frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{\vec{v}}{\tau} \right\} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}$

τ – czas relaksacji pędowej (*scattering time*)

$$m^* \left\{ \frac{dv_x}{dt} + \frac{v_x}{\tau} \right\} = qE_x + qv_y B$$

$$m^* \left\{ \frac{dv_y}{dt} + \frac{v_y}{\tau} \right\} = qE_y - qv_x B$$



Dostajemy:

$$v_y \{1 + \omega_c^2 \tau^2\} = \frac{q\tau}{m^*} (E_y - \omega_c \tau E_x)$$

$$\omega_c = \frac{qB}{m^*} \quad \mu = \frac{q\tau}{m^*} \quad j_y = 0 = \sum_i q_i n v_y^i$$

Efekt Halla

Zaniedbując $\omega_c^2 \tau^2 \ll 1$ i biorąc pod uwagę przewodnictwo elektronów n i dziur p :

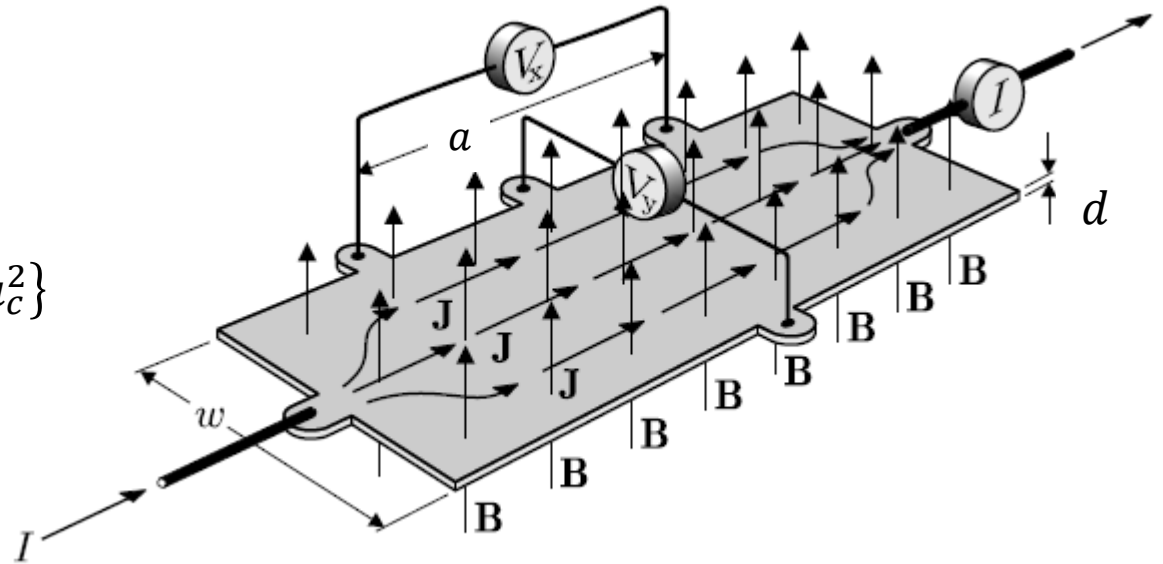
$$j_y = 0 = \sum_i q_i n v_y^i$$

$$E_y \{n\mu_c + p\mu_h\} = E_x B \{p\mu_h^2 - n\mu_c^2\}$$

Dostajemy tzw. stałą Halla:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} = \frac{1}{|e|} \frac{p\mu_h^2 - n\mu_c^2}{(n\mu_c + p\mu_h)^2}$$

Np. dla $p = 0$ mamy $R_H = -\frac{1}{en}$ **stała Halla**



Efekt Halla

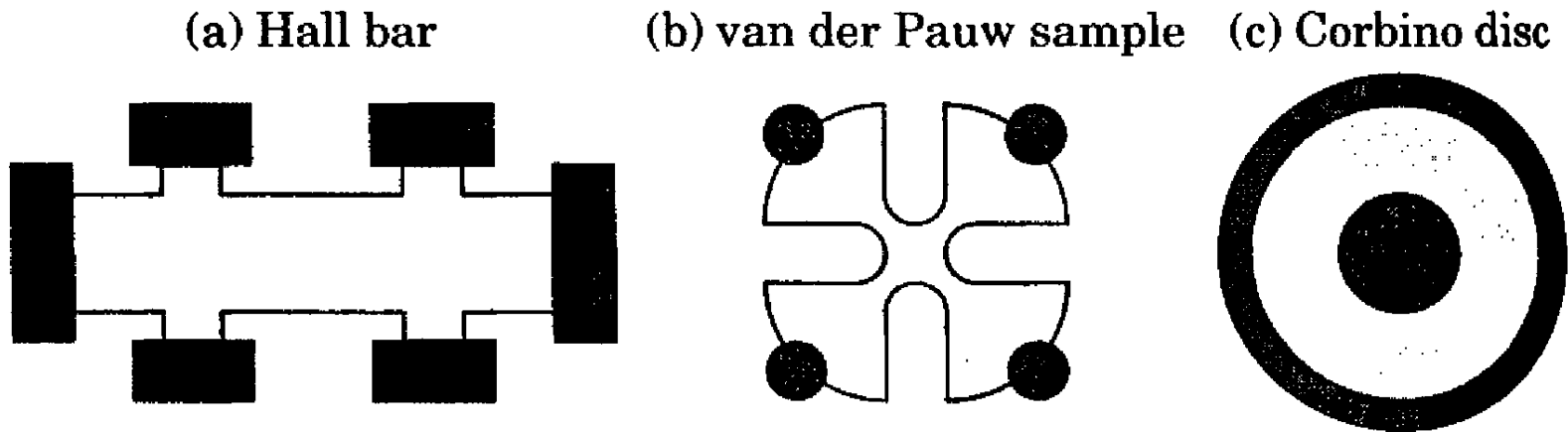


FIGURE 6.5. Samples commonly used for measuring the conductivity of semiconductors: (a) Hall bar, (b) van der Pauw sample, and (c) Corbino disc. The dark areas are the contacts for measuring voltage or current, and the light areas are the active regions of the sample.

$$\sigma = ne\mu \begin{pmatrix} \frac{1}{1+s^2} & \frac{-s}{1+s^2} & 0 \\ s & 1 & 0 \\ \frac{1}{1+s^2} & \frac{-s}{1+s^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$s = \frac{eB\tau}{m^*} = \omega_c\tau$$

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

Efekt Halla - kwantowy



The Nobel Prize in Physics 1985
Klaus von Klitzing

The Nobel Prize in Physics 1985

Nobel Prize Award Ceremony

Klaus von Klitzing



Klaus von Klitzing

The Nobel Prize in Physics 1985 was awarded to Klaus von Klitzing *"for the discovery of the quantized Hall effect"*.

Efekt Halla - kwantowy



The Nobel Prize in Physics 1998

Robert B. Laughlin, Horst L. Störmer, Daniel C. Tsui

The Nobel Prize in Physics 1998

Nobel Prize Award Ceremony

Robert B. Laughlin

Horst L. Störmer

Daniel C. Tsui



Robert B. Laughlin



Horst L. Störmer



Daniel C. Tsui

The Nobel Prize in Physics 1998 was awarded jointly to Robert B. Laughlin, Horst L. Störmer and Daniel C. Tsui *"for their discovery of a new form of quantum fluid with fractionally charged excitations"*.

Efekt Halla - kwantowy

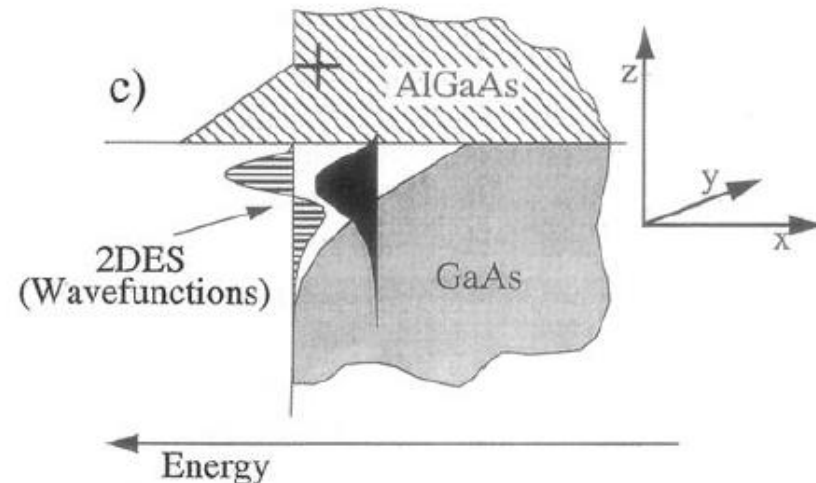
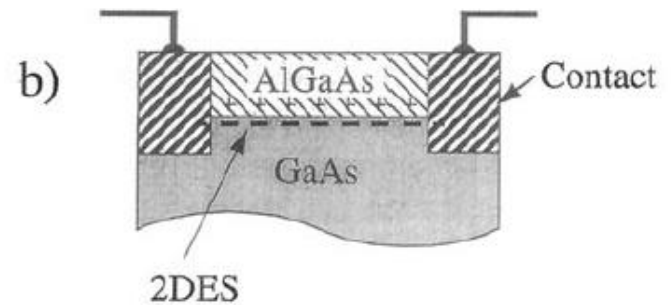
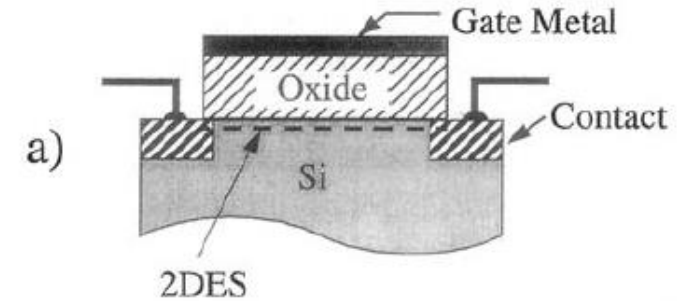
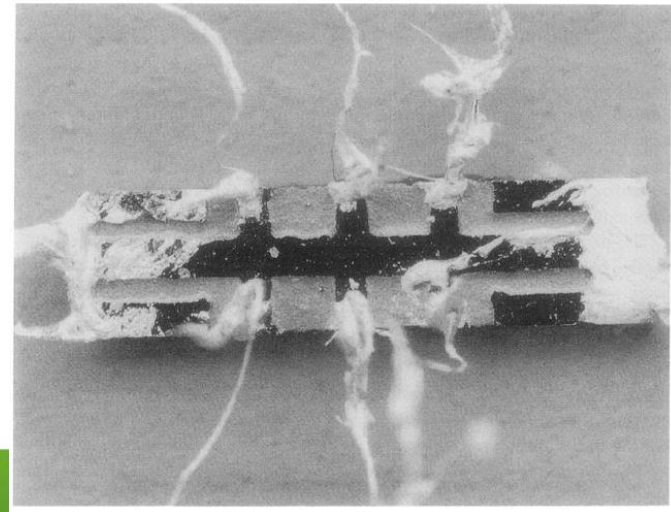
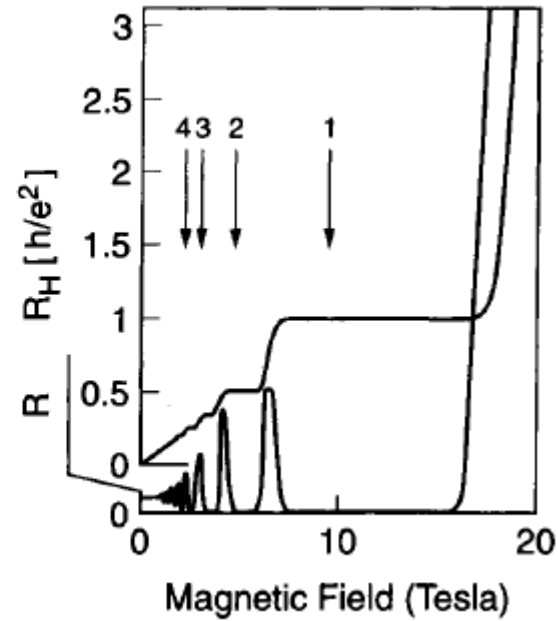
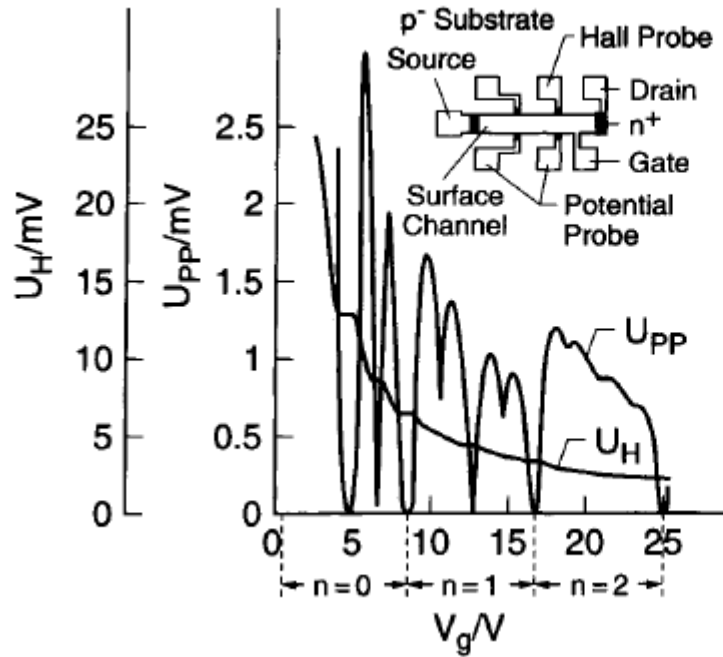


Figure 1 a). Schematic drawings of a silicon Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor (MOSFET). The two-dimensional electron system (2DES) resides at the interface between silicon and silicon oxide. Electrons are held against the oxide by the electric field from the gate metal. b) Schematic drawings of a modulation-doped gallium arsenide/aluminum gallium arsenide (GaAs/AlGaAs) heterojunction. The 2DES resides at the interface between GaAs and AlGaAs. Electrons are held against the AlGaAs by the electric field from the charged silicon dopants (+) in the AlGaAs. c). Energetic condition in the modulation-doped structure (very similar to the condition in the MOSFET). Energy increases to the left. Electrons are trapped in the triangular-shaped quantum-well at the interface. They assume discrete energy states in the z-direction (black and horizontally striped). At low temperatures and low electron concentration only the lowest (black) electron state is occupied. The electrons are totally confined in the z-direction but can move freely in the x-y-plane.

Horst Stormer, *Nobel Lecture*

Efekt Halla - kwantowy



Horst Stormer, *Nobel Lecture*

Efekt Halla - kwantowy

New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance

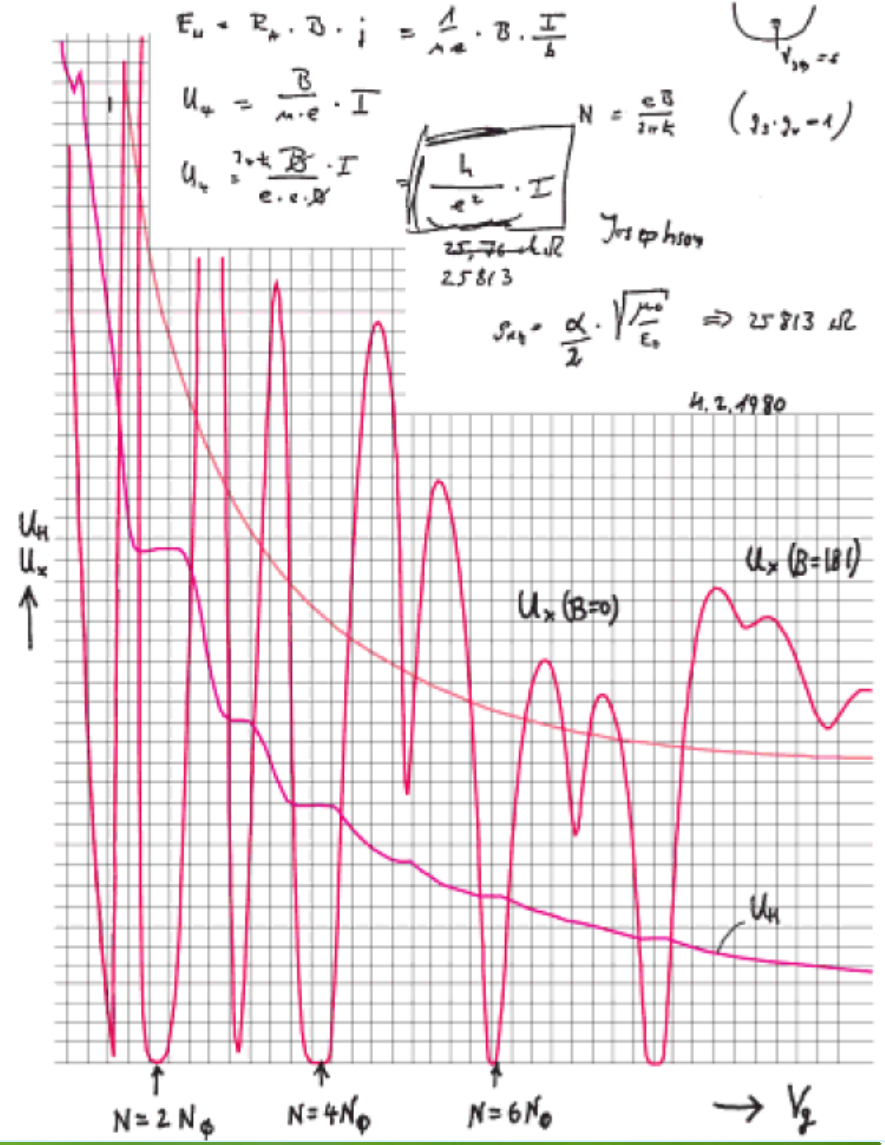
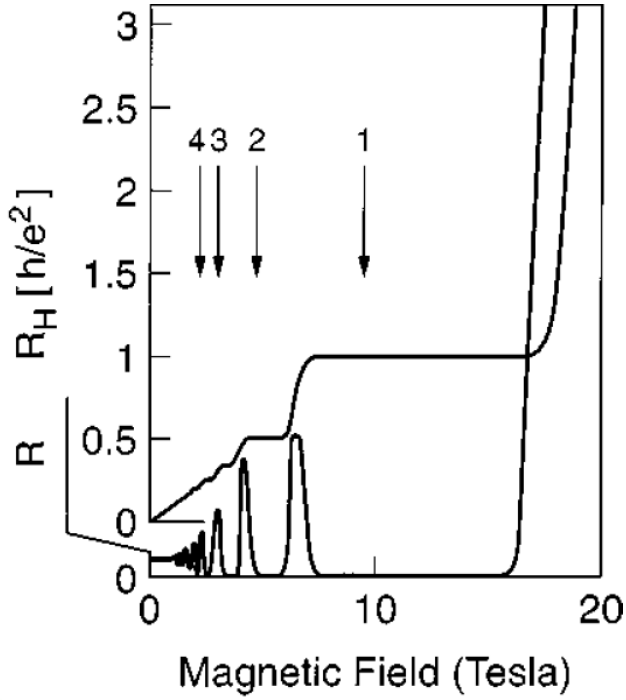
K. v. Klitzing
*Physikalisches Institut der Universität Würzburg, D-8700 Würzburg, Federal Republic of Germany, and
 Hochfeld-Magnetlabor des Max-Planck-Instituts für Festkörperforschung, F-38042 Grenoble, France*

and

G. Dorda
Forschungslaboratorien der Siemens AG, D-8000 München, Federal Republic of Germany

and

M. Pepper
Cavendish Laboratory, Cambridge CB3 0HE, United Kingdom
 (Received 30 May 1980)



Fonony

Przypomnienie – ruch jednowymiarowego łańcucha złożonego na przemian z różnych mas $M_1 > M_2$:

