

Elektrony i dziury.

Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl
http://www.fuw.edu.pl/~szczytko/NT




2010

Podstawy modelu jednoelektronowego

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

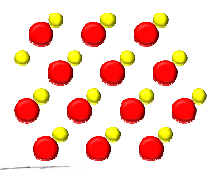
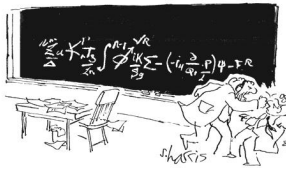
$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

mają postać: $\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$

gdzie tzw. f. Blocha: $u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$

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

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

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



Podstawy modelu jednoelektronowego

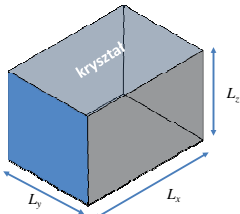
Twierdzenie Blocha
Przykład:
Ruch elektronu w potencjale periodycznym.
 $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$

$$\vec{G} = \hbar g_1 + k g_2 + l g_3$$

Rozwiązaniem jest oczywiście:
 $\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$

Łatwo można pokazać (np. Kittel, Ibach), że:
 $u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C(\vec{k} - \vec{G}) e^{-i\vec{G}\vec{r}}$

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

$$\vec{k}_i = 0, \pm \frac{2\pi}{L_i}, \pm \frac{4\pi}{L_i}, \dots, \pm \frac{2m_i}{L_i}$$


Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha
Przykład:
Ruch elektronu w potencjale periodycznym.

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

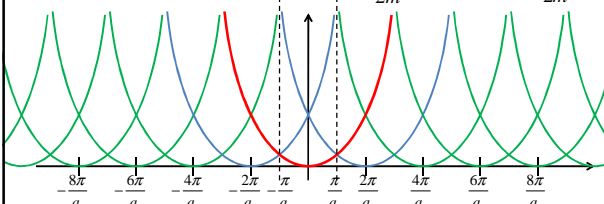
$$\Psi_{n,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej \vec{k} . $\vec{G} = \hbar g_1 + k g_2 + l g_3$
 $E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

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

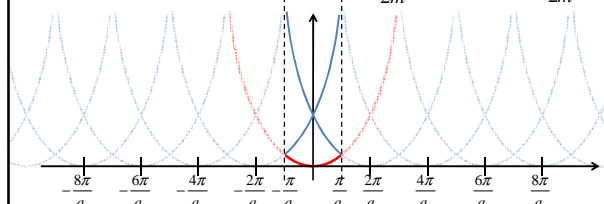
$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$


Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej \vec{k} . $\vec{G} = \hbar g_1 + k g_2 + l g_3$
 $E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

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

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


Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha
 Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k . $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$
 $E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

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

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

Jest tzw. zredukowana strefa Brillouina.
 Na granicy strefy $+/- G/2 = \pi/a$ wartości energii są zdegenerowane.
W pustej przestrzeni?

Podstawy modelu jednoelektronowego

Strefa Brillouina
 Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k . $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$
 $E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$

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).

http://oen.dydaktyka.agh.edu.pl/dydaktyka/fizyka/c_teoria_pasmowa/2.php

Podstawy modelu jednoelektronowego

Strefa Brillouina
 Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k . $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$
 $E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$

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).

Na ćwiczeniach!

http://oen.dydaktyka.agh.edu.pl/dydaktyka/fizyka/c_teoria_pasmowa/2.php

Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha
 Liczymy energię dla wektorów k przesuniętych do pierwszej strefy Brillouine'a

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

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

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

$\vec{k} = \vec{G} + \vec{k}'$; $\vec{k}' \in$ I strefa Brillouine'a

$G_0 = \frac{2\pi}{a} \cdot 0$ G_0 : $E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2$
 $G_1 = \frac{2\pi}{a} \cdot 1$ G_1 : $E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} (k' \pm 1)^2$
 $G_2 = \frac{2\pi}{a} \cdot 2$ G_2 : $E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} (k' \pm 2)^2$

W pustej przestrzeni?

1 wymiar: $[hkl] =$
 000,
 100, 100, 200, 200,

Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha
 $E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$ $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

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

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

Struktura pasmowa dla gazu elektronów swobodnych w sieci regularnej prostej (stała sieci a), wierzchołki parabol mają wskaźniki $[hkl] =$
 000,
 100, 100, 200, 200,

Pusta sieć - fcc

Struktura diamentu

Pusta sieć - fcc

Sieć odwrotna do fcc to bcc
 Na ćwiczeniach rozwiązaliśmy problem sieci odwrotnej do sieci fcc.

Sieć prosta **Sieć odwrotna**

$\mathbf{a}_1 = \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right); \mathbf{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right); \mathbf{a}_3 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right);$ $\mathbf{R}_1^* = \frac{1}{a}(-1,1,1); \mathbf{R}_2^* = \frac{1}{a}(1,-1,1); \mathbf{R}_3^* = \frac{1}{a}(1,1,-1);$

Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Sieć odwrotna do fcc to bcc
 Komórka Wignera-Seitza

Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Sieć odwrotna do fcc to bcc
 Komórka Wignera-Seitza

R. Stepniowski

R. Stepniowski

R. Stepniowski

Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha
 Liczymy energię dla wektorów \mathbf{k} przesuniętych do pierwszej strefy Brillouine'a

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m} \quad \vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$

$\vec{k} = \vec{G} + \vec{k}'; \quad \vec{k}' \in \text{Istrefa Brillouine'a}$

$G_0 = \frac{2\pi}{a} \cdot [0,0,0]$	$G_0: E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2$
$G_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 1, \pm 1, \pm 1]$	$G_3: E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} [(k_x \pm 1)^2 + (\pm 1)^2 + (\pm 1)^2]$
$G_4 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, 0, 0]$	$= \frac{\hbar^2}{2m} [(k_x \pm 1)^2 + 2]$
$G_8 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, \pm 2, 0]$	$G_4 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, 0, 0], [0, \pm 2, 0], [0, 0, \pm 2]$
.....	
	$G_4: E(k') = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} [(k_x)^2 + 4] \\ \frac{\hbar^2}{2m} [(k_x \pm 2)^2] \end{cases}$

Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha
 Liczymy energię dla wektorów k przesuniętych do pierwszej strefy Brillouine'a

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

$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$
 $g_i = \frac{2\pi}{a_i}$

$\vec{k} = \vec{G} + \vec{k}'$; $\vec{k}' \in$ I strefa Brillouine'a

$G_0 = \frac{2\pi}{a} \cdot [0,0,0]$ $G_3: E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2$
 $G_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 1, \pm 1, \pm 1]$ $G_3: E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} [(k_x \pm 1)^2 + (\pm 1)^2 + (\pm 1)^2]$
 $G_4 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, 0, 0]$ $= \frac{\hbar^2}{2m} [(k_x \pm 1)^2 + 2]$
 $G_8 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, \pm 2, 0]$ 3 wymiary: $[hkl] =$
 000,
 100, 100, 200, 200,
 010, 010, 001, 001,
 110, 101, 110, 101, 101, 110, 101, 110

Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha
 $E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$ $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

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

$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$

Struktura pasmowa dla gazu elektronów swobodnych w sieci regularnej prostej (stała sieci a), wierzchołki parabol mają wskaźniki $[hkl] =$
 000,
 100, 100, 200, 200,
 010, 010, 001, 001,

Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha
 $E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$ $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

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

$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$

Struktura pasmowa dla gazu elektronów swobodnych w sieci regularnej prostej (stała sieci a), wierzchołki parabol mają wskaźniki $[hkl] =$
 000,
 100, 100, 200, 200,
 010, 010, 001, 001,
 110, 101, 110, 101, 101, 110, 101, 110

W pustej przestrzeni?

Model pustej sieci

Kierunek [001] X

R. Stepniński

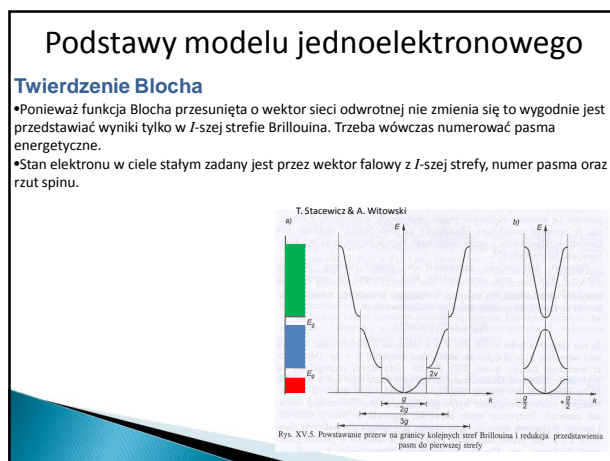
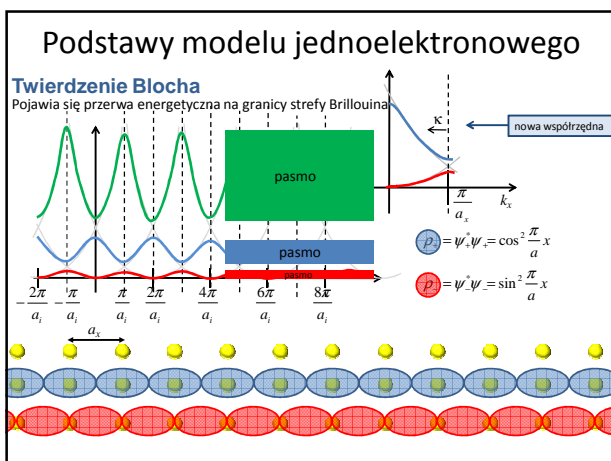
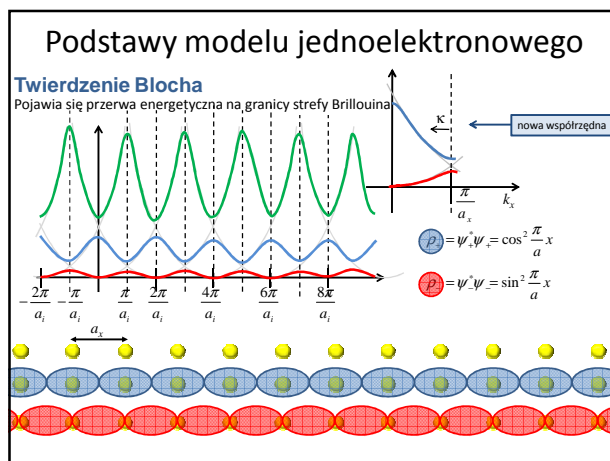
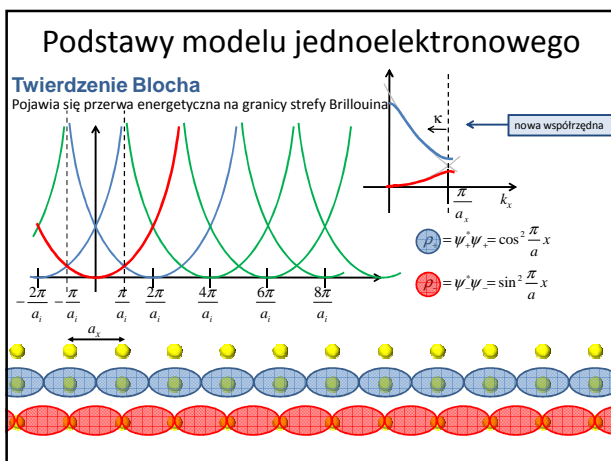
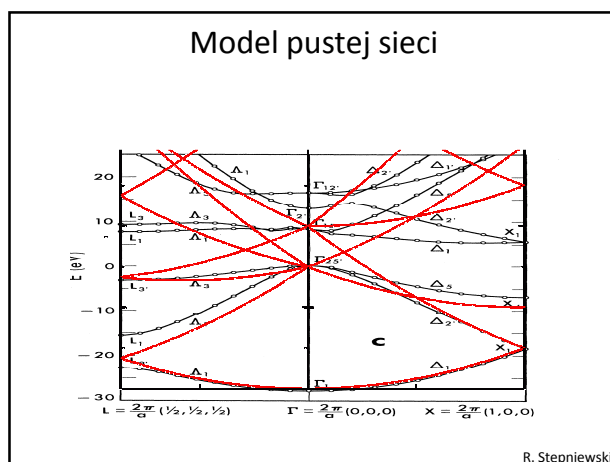
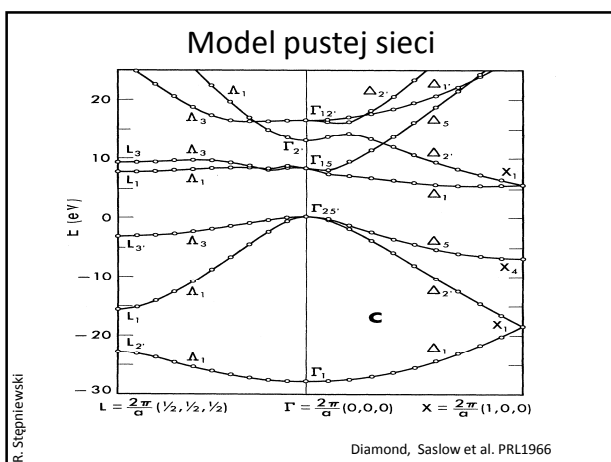
Model pustej sieci

Kierunek [111] L

R. Stepniński

Model pustej sieci

R. Stepniński



Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

Przybliżenie kp

Wektor k nie jest pędem (mówimy, że jest quasi-pędem).

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

Funkcja Blocha w równaniu Schrodingera:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r}, t) = E\Psi(\vec{r}, t)$$

$$\Delta u_{n,k} e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} \Delta u_{n,k} + i\vec{k}e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla u_{n,k} + i\vec{k}e^{i\vec{k}\vec{r}} \nabla u_{n,k} - k^2 u_{n,k} e^{i\vec{k}\vec{r}} =$$

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

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

Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

Po uproszczeniu $\exp(i\vec{k}\vec{r})$:

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

Energia $E_n(\mathbf{k})$ wokół $k=0$:

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

gdzie $H'_{nl} = \int u_{n,0}^*(\vec{r}) \mathbf{H}' u_{l,0}(\vec{r}) d_3r = -\frac{i\hbar^2}{m} \mathbf{k} \int u_{n,0}^*(\vec{r}) \nabla u_{l,0}(\vec{r}) d_3r$

Jeśli rozwijamy wokół ekstremum $a_i=0$ liniowo w k

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

Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \sum_y m^{-1}_y \frac{\hbar^2 k_y k_j}{2}$$

Przez analogię do klasycznej zależności energii kinetycznej od pędu wprowadzamy tensor odwrotności masy efektywnej m^{-1}_y :

$$m^{-1}_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{l \neq n} \frac{\hbar^2 \int u_{n,0}^* \frac{\partial u_{l,0}}{\partial x_i} d_3r \int u_{l,0} \frac{\partial u_{n,0}}{\partial x_j} d_3r}{E_n - E_l} \stackrel{def}{=} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$$

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

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

Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

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

Dla krystalu kubicznego:

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

W pobliżu ekstremum (np. punkt $\Gamma(k=0)$) 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).

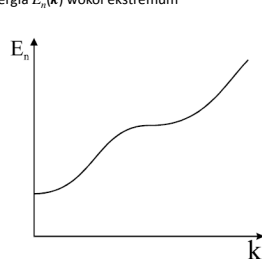
W ogólności energia elektronu jest funkcją składowych wektora falowego $\mathbf{k}=(k_1, k_2, k_3)$.

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.

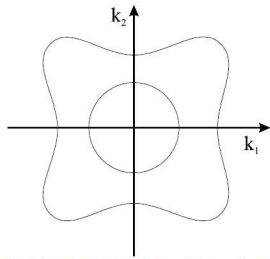
Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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



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



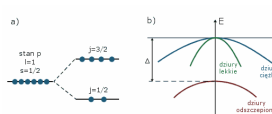
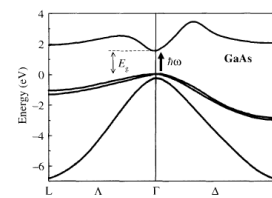
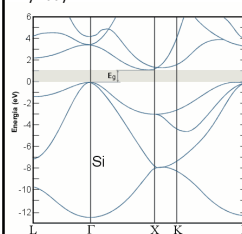
Przykładowe powierzchnie stałej energii w dwuwymiarowej przestrzeni \mathbf{k} .

R. Stępniewski

Podstawy modelu jednoelektronowego

Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:



D. Wasik.

Podstawy modelu jednoelektronowego

Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:

Crystal	E_g (eV) (0 K)	E_g (eV) (300 K)	Δ (eV)	m_c^*	m_{lh}^*	m_{lh}^*	m_{lh}^*
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

Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Sieć odwrotna do fcc to bcc

Komórka Vignera-Seitzza

Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Krzem i german – przerwa skośna

Krzem Si

German Ge

$$E(k) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{0z})^2$$

<http://www.koffe.ru/SVA/NSW/NSW/Semicond/SGer/bandstr.html>

Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Krzem i german – przerwa skośna

Krzem Si

German Ge

$$E(k) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{0z})^2$$

<http://www.koffe.ru/SVA/NSW/NSW/Semicond/SGer/bandstr.html>

Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Krzem i german – przerwa skośna

Krzem Si

German Ge

$$E(k) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{0z})^2$$

Elektrony i dziury

Twierdzenie Blocha

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

$$E(p) = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \quad E(p) = c\sqrt{m^2c^2 + p^2} \quad E(p)$$

Elektron w ciele stałym jest quasi-cząstką. Dlaczego?

T. Świączek & A. Włowski

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

Elektrony i dziury

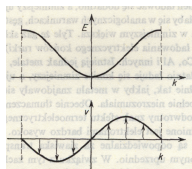
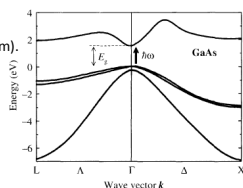
Co to jest k?

Wektor k nie jest pędem (mówimy, że jest quasi-pędem).

$$\hat{p}\psi(\vec{r}) = -i\hbar(\vec{k} + \nabla_{u_{n,\vec{k}}})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \neq \hbar\vec{k}\psi(\vec{r})$$

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.



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

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

Elektrony i dziury

Co to jest k?

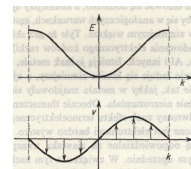
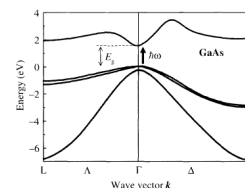
W okolicach ekstremum

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

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}$$

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

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



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

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

Elektrony i dziury

Siła zewnętrzna

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

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

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

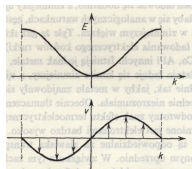
$$\Delta E = \frac{dE}{dk} \Delta k$$

$$\Delta E = \hbar V \Delta k = FV\Delta t$$

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

Masa efektywna zachowuje się jak „zwykła” masa

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



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

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

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów k jest skończony (choć olbrzymi), np. możemy przyjąć periodyczne warunki brzegowe i wtedy:

Warunki Borna-Karmana

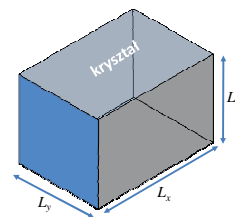
Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

Ψ – postać funkcji Blocha

$$\Psi(x + L_x, y, z) = \Psi(x, y + L_y, z) = \Psi(x, y, z + L_z)$$

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

$$\vec{k}_i = 0, \pm \frac{2\pi}{L_x}, \pm \frac{4\pi}{L_x}, \dots, \pm \frac{2m\pi}{L_x}$$



Stany te wyznaczają w przestrzeni odwrotnej siatki o gęstości $(V/2\pi)^3$
Gęstość stanów na jednostkę trójwymiarowej przestrzeni k

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

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów k jest skończony (choć olbrzymi), np. możemy przyjąć periodyczne warunki brzegowe i wtedy:

Warunki Borna-Karmana

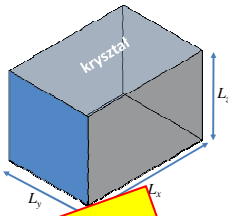
Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

Ψ – postać funkcji Blocha

$$\Psi(x + L_x, y, z) = \Psi(x, y + L_y, z) = \Psi(x, y, z + L_z)$$

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

$$\vec{k}_i = 0, \pm \frac{2\pi}{L_x}, \pm \frac{4\pi}{L_x}, \dots, \pm \frac{2m\pi}{L_x}$$



Stany te wyznaczają w przestrzeni odwrotnej siatki o gęstości $(V/2\pi)^3$
Gęstość stanów na jednostkę trójwymiarowej przestrzeni k

Na ćwiczeniach!
+ Gęstość stanów ($E, E+dE$)

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

Elektrony i dziury

Zjawisko termoelektryczne Seebecka (1821)

Na, K, Co, Al – elektrony

Zn, Cu, Au - ???

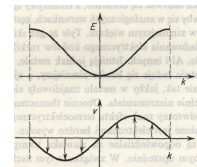
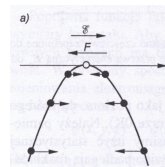
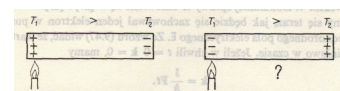
Pasma prawie całkowicie wypełnione elektronami.

Masa efektywna ujemna.

Jeden stan pusty.

Całkowity pęd

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



Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury
 Sumaryczny pseudopoęd zapełnionego pasma:

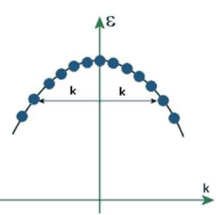
$$\langle \hbar \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar \mathbf{k}' = 0$$

Dla funkcji okresowej $f(\mathbf{r})$:

$$I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = const$$

← komórka elementarna

$$0 = \nabla' I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla' f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$

$$0 = \nabla'^2 I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla'^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$


Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury
 Sumaryczny pseudopoęd zapełnionego pasma:

$$\langle \hbar \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar \mathbf{k}' = 0$$

Dla funkcji okresowej $f(\mathbf{r})$:

$$I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = const$$

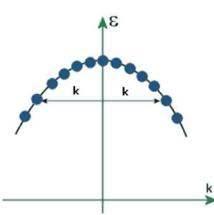
← komórka elementarna

$$0 = \nabla' I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla' f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$

$$0 = \nabla'^2 I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla'^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$

Dla $f(\mathbf{r} = 0)$:

$$\int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) = 0$$

$$\int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r}) = 0$$


Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury
 Sumaryczny pseudopoęd zapełnionego pasma:

$$\langle \hbar \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar \mathbf{k}' = 0$$

Zatem:

$\langle \mathbf{v} \rangle = \text{Do domu} = 0$

$\langle \mathbf{m}^{-1} \rangle = \text{Do domu} = 0$

Całkowity prąd:

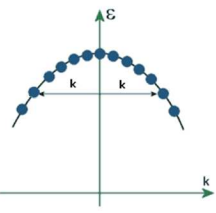
$\langle \mathbf{j} \rangle = \text{Do domu} = 0$

Przyspieszenie:

$\langle \dot{\mathbf{v}} \rangle = \text{Do domu} = 0$

Dla $f(\mathbf{r} = 0)$:

$$\int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) = 0$$

$$\int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r}) = 0$$


Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury
 Sumaryczny pseudopoęd zapełnionego pasma:

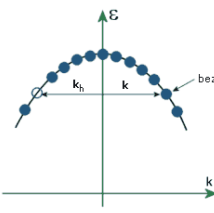
$$\langle \hbar \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar \mathbf{k}' = 0$$

Pseudopoęd dziury:

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

$$\hbar \vec{k}_h = \hbar \vec{k}_e$$

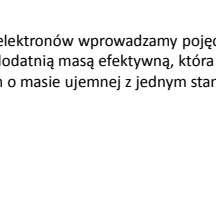
Masa efektywna elektronu w paśmie walencyjnym jest ujemna.

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


Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury
 Dla opisu sumarycznych właściwości tych 2N-1 elektronów wprowadzamy pojęcie nowej kwazicząstki -dziury. Dziura quasi cząstka z dodatnią masą efektywną, która opisuje własności zbioru elektronów w ciele stałym o masie ujemnej z jednym stanem pustym.

Sumaryczny pseudopoęd zapełnionego pasma:

$$\langle \hbar \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar \mathbf{k}' = 0$$


Elektrony i dziury

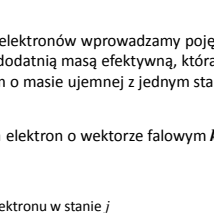
Kwazicząstki - dziury
 Dla opisu sumarycznych właściwości tych 2N-1 elektronów wprowadzamy pojęcie nowej kwazicząstki -dziury. Dziura quasi cząstka z dodatnią masą efektywną, która opisuje własności zbioru elektronów w ciele stałym o masie ujemnej z jednym stanem pustym.

Jeśli $f(\mathbf{k})$ pewna wielkość fizyczna charakteryzująca elektron o wektorze falowym \mathbf{k} to wartość tej wielkości dla dziury:

$$f_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} f(\mathbf{k}_i) \text{ dla pasma w którym brakuje elektronu w stanie } j$$

Np. wektor falowy dziury: $\mathbf{k}_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} \mathbf{k}_i = \sum_{i=1}^{2N} \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e$

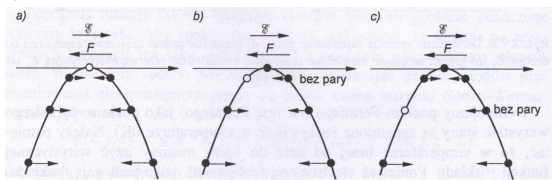
Np. prędkość dziury: $\mathbf{v}_d(\mathbf{k}_e) = -\mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$
 $\mathbf{v}_d(\mathbf{k}_d) = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$



Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Dla opisanía sumarycznych właściwości tych 2N-1 elektronów wprowadzamy pojęcie nowej kwazicząstki -dziury. Dziura quasi cząstka z dodatnią masą efektywną, która opisuje własności zbioru elektronów w ciele stałym o masie ujemnej z jednym stanem pustym.

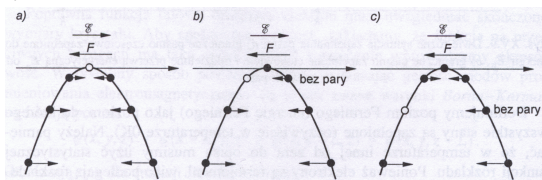


Np. prędkość dziury: $v_d(\mathbf{k}_e) = -v_e(\mathbf{k}_e)$
 $v_d(\mathbf{k}_d) = v_e(\mathbf{k}_e)$

Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Dla opisanía sumarycznych właściwości tych 2N-1 elektronów wprowadzamy pojęcie nowej kwazicząstki -dziury. Dziura quasi cząstka z dodatnią masą efektywną, która opisuje własności zbioru elektronów w ciele stałym o masie ujemnej z jednym stanem pustym.



Pole elektryczne E

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

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

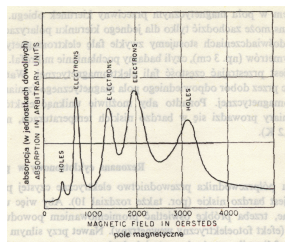
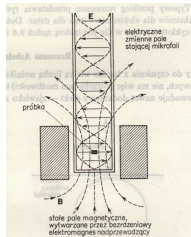
$$\vec{v}_h = \vec{v}_{e-w-\text{pustym-miejsu}}$$

Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Wyznaczanie masy efektywnej: $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$

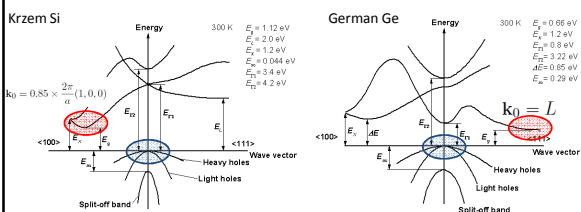
Rezonans cyklotronowy



Ge, J. Ginter

Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Krzem i german – przerwa skośna



$$E(\mathbf{k}) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{0z})^2$$

<http://www.kofe.ru/SVA/NSM/Semicond/SGe/bandstr.html>