

Fizyka Materii Skondensowanej

Transport, równanie Boltzmana



Inżynieria nanostruktur

Wydział Fizyki UW
Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGICZNA SPRAWOŚĆ





EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

Projekt: POKL 04.01.01-00-100/10-00 "Chemia, fizyka i biologia na potrzeby społeczeństwa XXI wieku: nowe makroierunki studiów I, II i III stopnia"


Domieszki i defekty


Nośniki:

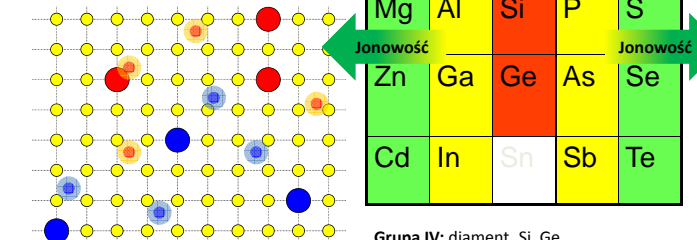
dziury + 

elektrony - 

Domieszki:

Akceptory (typ p) 

Donory (typ n) 



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	

Jonowość ← → Jonowość

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 (poziomy 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

2013-06-02 3

Domieszki i defekty

W jaki sposób kontrolować koncentrację nośników?

Defekty – odstępstwa od idealnej periodycznej struktury kryształu

Klasyfikacja defektów:

ze względu na zawartość obcych atomów:

- rodzime (niezawierające obcych atomów) i niesamoistne (np. domieszki)

ze względu na wymiar:

- punktowe – luki (np. V_{Ga} , V_{As} w GaAs), atomy międzywęzłowe (np. Ga), atomy antypodstawieniowe (np. As w miejscu Ga: As_{Ga}), obce atomy podstawieniowe, tzn. domieszki (np. Si_{Ga})
- kompleksy defektów punktowych, np. pary Frenkla $V_A - A_i$
- liniowe (np. dyslokacje),
- defekty powierzchniowe (np. granice ziaren)
- defekty objętościowe (np. wytrącenia)

M. Baj

2013-06-02 4

Domieszki i defekty

W jaki sposób kontrolować koncentrację nośników?

Defekty – odstępstwa od idealnej periodycznej struktury kryształu

Klasyfikacja defektów:

ze względu na ich aktywność elektryczną:

- donory (ewentualnie wielokrotne – np. As_{Ga} w GaAs jest podwójnym donorem), akceptory, domieszki izoelektronowe (np. N_p w GaP czy C_{Si} w krzemie)

ze względu na charakter (w szczególności lokalizację) funkcji falowej elektronu związanego przez defekt:

- **płytkie** (wodoropodobne, opisywane w przybliżeniu masy efektywnej, gdzie potencjał wiążący jest wolnozmienny – kulombowski), **długozasięgowy**
- **Głębokie** mające stany zlokalizowane leżące w przerwie energetycznej, i/lub stany rezonansowe, zdegenerowane z kontinuum stanów pasmowych, ale pomimo tego mające w dużym stopniu charakter zlokalizowany – np. luki, domieszki metali przejściowych, tzw. centra DX w związkach półprzewodnikowych $A_{VI}B_{VI}$ i $A_{III}B_{V}$ czy izoelektronowe domieszki N w GaAs lub GaP. Potencjał wiążący jest w dużym stopniu **krótkozasięgowy** .

M. Baj

2013-06-02

5

Domieszki i defekty

W jaki sposób kontrolować koncentrację nośników?

Defekty – odstępstwa od idealnej periodycznej struktury kryształu

Klasyfikacja defektów:

- wprowadzają stany zlokalizowane – zarówno w przerwie jak i stany rezonansowe
- determinują własności elektryczne półprzewodników
- mogą mieć bardzo poważny wpływ na niektóre własności optyczne (np. wydajność rekombinacji promienistej)
- prowadzą do powstawania obszarów ładunku przestrzennego (także w izolatorach)
- mogą mieć istotny, niepożądany wpływ na funkcjonowanie przyrządów półprzewodnikowych – np. dyslokacje

M. Baj

2013-06-02

6

Płytkie stany domieszkowe

Stan donorowy stowarzyszony ze sferycznym pasmem przewodnictwa z minimum w punkcie Γ :

Atom domieszki o wartościowości o jeden większej niż atom podstawiany – np. Si_{Ga} w GaAs 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** .

Potencjał domieszki – głównie kulombowski ekranowany statyczną stałą dielektryczną ϵ_s :

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r}$$

Część krótkozasięgową potencjału zaniedbujemy (przynajmniej na razie)

Równanie masy efektywnej na funkcję envelopes $\Phi(\vec{r})$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r} \right) \Phi(\vec{r}) = (E - E_c(0)) \Phi(\vec{r})$$

gdzie $E_c(0)$ jest energią minimum pasma przewodnictwa.

2013-06-02

7

Płytkie stany domieszkowe

Równanie masy efektywnej na funkcję envelopes $\Phi(\vec{r})$ (przypomnienie z wykładu 9):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) + U(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \Psi(\vec{r})$$

gdzie $V(\vec{r})$ – potencjał periodyczny sieci, $U(\vec{r})$ – potencjał wolnozmienny (dodany), $V(\vec{r})$ – potencjał periodyczny sieci, $E_n(\vec{k})$ – energie dla $U(\vec{r}) = 0$.

Rozwiązaniami dla n -tego pasma są funkcje $\Psi_n(\vec{r}) = \Phi_n(\vec{r}) \cdot u_{n,\vec{k}_0}(\vec{r})$, gdzie $u_{n,\vec{k}_0}(\vec{r})$ – rozwiązanie dla $U(\vec{r}) = 0$ i $\vec{k} = \vec{k}_0$.

Jest to tzw. równanie masy efektywnej:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\vec{r}) \right] \Phi_n(\vec{r}) = [E - E_n(0)] \Phi_n(\vec{r})$$

2013-06-02

8

Płytkie stany domieszkowe

Rozwiązanie jak dla „przeskalowanego” atomu wodoru. Energie stanów związanych:

$$E_n = -Ry^* \cdot \frac{1}{n^2}, \quad Ry^* = Ry \cdot \frac{1}{\epsilon_s^2} \left(\frac{m^*}{m_e} \right)$$

np. dla GaAs: $m^* = 0,067 m_e$, $\epsilon_s = 12,6 \Rightarrow Ry^* \approx 5,7 \text{ meV}$ – energia jonizacji donora względem dna pasma przewodnictwa

efektywny promień Bohra:

$$a_B^* = a_B \cdot \epsilon_s \left(\frac{m_e}{m^*} \right)$$

co dla GaAs daje $a_B^* \approx 100 \text{ \AA}$, co stanowi około 20 stałych sieci GaAs

2013-06-02

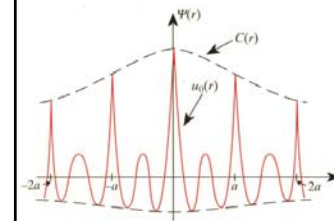
9

Płytkie stany domieszkowe

efektywny promień Bohra:

$$a_B^* = a_B \cdot \epsilon_s \left(\frac{m_e}{m^*} \right)$$

co dla GaAs daje $a_B^* \approx 100 \text{ \AA}$, co stanowi około 20 stałych sieci GaAs



Pełna funkcja falowa:

$$\Psi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r}) \cdot u_0(\vec{r})$$

$\Psi(\vec{r})$ – nieruchoma paczka falowa zbudowana ze stanów z okolicy $k = 0$

$\Phi(\vec{r})$ – wolnozmienna envelope

$u_0(\vec{r})$ – szybkozmienna funkcja Blocha

2013-06-02

10

Płytkie stany domieszkowe

Wolnozmienna envelope \Rightarrow paczka falowa zrobiona z funkcji Blocha z małego obszaru wokół (stan „zlokalizowany” w przestrzeni \vec{k})

Równanie masy efektywnej dopuszcza **rozwiązania stowarzyszone z innymi lokalnymi minimami pasma przewodnictwa** – pod każdym z bocznych minimów (np. w punkcie X czy L) mogą być stany wodoropodobne, które należy traktować jak stany wzbudzone.

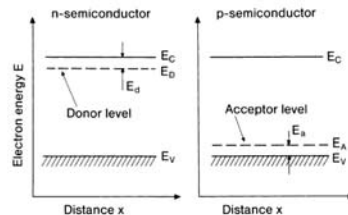


Fig. 12.7. Qualitative position of the ground state levels of donors and acceptors relative to the minimum of the conduction band E_C and the maximum of the valence band E_V . The quantities E_D and E_A are the ionization energies of the donor and acceptor, respectively

Ibach, Luth

2013-06-02

11

Płytkie stany domieszkowe

Wolnozmienna envelope \Rightarrow paczka falowa zrobiona z funkcji Blocha z małego obszaru wokół (stan „zlokalizowany” w przestrzeni \vec{k})

Równanie masy efektywnej dopuszcza **rozwiązania stowarzyszone z innymi lokalnymi minimami pasma przewodnictwa** – pod każdym z bocznych minimów (np. w punkcie X czy L) mogą być stany wodoropodobne, które należy traktować jak stany wzbudzone.

Część krótkozasięgową potencjału domieszki V_{cc} wprowadza poprawkę do energii stanów („central cell corrections”), zależną od atomu domieszki (tzw. przesunięcie chemiczne „chemical shift”), istotną tylko dla wodoropodobnych stanów typu s :

$$\Delta E \approx \langle \Psi^* | V_{cc} | \Psi \rangle$$

Potencjalnie możliwe związanie dodatkowego elektronu: D^- (powinowactwo elektronowe wodoru $E_{ea} = 0,75 \text{ eV} \approx 0,055 Ry$)

2013-06-02

12

Płytkie stany domieszkowe

Równanie masy efektywnej dopuszcza **rozwiązania stowarzyszone z innymi lokalnymi minimummi pasma przewodnictwa** – pod każdym z bocznych minimumów (np. w punkcie X czy L) mogą być stany wodoropodobne, które należy traktować jak stany wzbudzone.

Stan donorowy stowarzyszony z bocznym minimum pasma przewodnictwa – powierzchnie stałe energii – elipsoidy obrotowe z minimum w \vec{k}_0 : $\vec{k} = \vec{k}_0 + \vec{k}_\perp + \vec{k}_\parallel$

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_\perp^2}{m_\perp^*} + \frac{k_\parallel^2}{m_\parallel^*} \right)$$

Równanie masy efektywnej na Φ :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_\perp^*} \frac{\partial^2}{\partial x_\perp^2} + \frac{1}{m_\parallel^*} \frac{\partial^2}{\partial x_\parallel^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{r} \right] \Phi(\vec{r}) = [E - E_c(\vec{k}_0)] \Phi(\vec{r})$$

Symetria hamiltonianu – walcowa \Rightarrow będzie częściowo zniesiona degeneracja stanów wodoropodobnych.

Jeśli np. chcemy znaleźć stan podstawowy, możemy zastosować metodę wariacyjną z funkcją próbną postaci (W. Kohn, J.M. Luttinger, *Physical Review* **98**, 915 (1955)):

$$\Phi(x, y, z) = (\pi a^2 b)^{-1/2} \exp \left[-\left(\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} \right)^{1/2} \right]$$

2013-06-02

13

Płytkie stany domieszkowe

Minimum jest 6 (a więc można byłoby oczekiwać 6-krotnej degeneracji, ale to w kryształach niemożliwe !)

- potencjał krótkozasięgowy sprzęga stany pod różnymi dolinami
- rozszczepienie (tzw. valley-orbit coupling), 6-krotna degeneracja zniesiona (1+2+3) + przesunięcie chemiczne
- funkcje falowe są odpowiednimi (reprezentacje nieprzywiedlne grupy T_d : A_1, E, T_2) kombinacjami funkcji z różnych dolin
- podobna sytuacja w innych półprzewodnikach z minimum pasma przewodnictwa poza punktem Γ (np. Ge, GaP ...)

M. Baj.

2013-06-02

14

Płytkie stany domieszkowe

Akceptory w półprzewodnikach o strukturze diamentu i blendy cynkowej znacznie bardziej skomplikowana sytuacja:

- degeneracja pasm w punkcie Γ
- pofalowanie powierzchni izoenergetycznych („warping”) \Rightarrow nie da się wprowadzić prostego tensora masy efektywnej dla pasm walencyjnych, nie da się zastosować przybliżenia masy efektywnej w najprostszej postaci...

Literatura:

W. Kohn, D. Schechter, *Physical Review* **99**, 1903 (1955)

A. Baldereschi, N.O. Lipari, *Physical Review B* **8**, 2697 (1973)

A. Baldereschi, N.O. Lipari, *Physical Review B* **9**, 1527 (1974)

M. Baj.

2013-06-02

15

2013-06-02

16

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Obsadzenie poziomów domieszkowych/defektowych w stanie równowagi termodynamicznej

„Obsadzenie” stanów (nie tylko zlokalizowanych – domieszek czy defektów, ale także stanów pasmowych) elektronami oznacza **wymianę cząstek (elektronów) pomiędzy rezerwuarem i rozważanym podukładem**.

Wielki zespół kanoniczny (podukład wymienia cząstki i energię z otoczeniem)

Prawdopodobieństwo termodynamiczne (nieunormowane) znalezienia podukładu w stanie j , w którym znajduje się n_j cząstek (elektronów) i w którym energia podukładu wynosi E_j (jest to całkowita energia, obejmująca wszystkie n_j cząstek):

$$P_j = e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

ξ - potencjał chemiczny.

Suma statystyczna:

$$Z = \sum_j P_j = \sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}$$

2013-06-02

17

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Suma statystyczna:

$$Z = \sum_j P_j = \sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}$$

Średnie statystyczne:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_j A_j \cdot e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j - n_j \xi)}}$$

Przykład:

elektron swobodny obsadzający (lub nie) stan elektronowy o danym \vec{k} i danym spinie:

możliwe 2 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E$$

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle = \frac{0 \cdot e^0 + 1 \cdot e^{-\beta(E - \xi)}}{1 + e^{-\beta(E - \xi)}} = \frac{1}{e^{\beta(E - \xi)} + 1} = f(E, T)$$

(rozkład Fermiego-Diraca)

2013-06-02

18

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład:

elektron swobodny obsadzający (lub nie) stan elektronowy o danym \vec{k} i dowolnym spinie:

możliwe 4 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E \text{ (spin } \uparrow)$$

$$n_2 = 1; E_2 = E \text{ (spin } \downarrow)$$

$$n_3 = 2; E_3 = 2E \text{ (spin } \uparrow\downarrow)$$

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle = \frac{0 \cdot e^0 + 1 \cdot e^{-\beta(E - \xi)} + 1 \cdot e^{-\beta(E - \xi)} + 2 \cdot e^{-\beta(2E - 2\xi)}}{1 + e^{-\beta(E - \xi)} + e^{-\beta(E - \xi)} + e^{-\beta(2E - 2\xi)}} = 2 \frac{e^{-\beta(E - \xi)} (1 + e^{-\beta(E - \xi)})}{(e^{-\beta(E - \xi)} + 1)^2} = 2f(E, T)$$

(rozkład Fermiego-Diraca x2)

2013-06-02

19

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład – donor (pomijamy stany wzbudzone)

elektron swobodny obsadzający (lub nie) stan elektronowy o danym \vec{k} i dowolnym spinie:

możliwe 3 stany podukładu:

$$n_0 = 0; E_0 = 0$$

$$n_1 = 1; E_1 = E \text{ (spin } \uparrow)$$

$$n_2 = 1; E_2 = E \text{ (spin } \downarrow)$$

(podwójna degeneracja ze względu na spin)

$n_3 = 2; E_3 \gg 2E$ (spin $\uparrow\downarrow$) – NIE bierzemy pod uwagę (stan wzbudzony ze względu na oddziaływanie kulombowskie)

średnia liczba cząstek podukładu:

$$\langle n \rangle = \frac{0 \cdot e^0 + 1 \cdot e^{-\beta(E - \xi)} + 1 \cdot e^{-\beta(E - \xi)}}{1 + e^{-\beta(E - \xi)} + e^{-\beta(E - \xi)}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D - \xi]}}$$

W ogólności, dla stanu o degeneracji g , który może być obsadzony jednym elektronem

$$\langle n \rangle = \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \cdot e^{\beta[E_D - \xi]}}$$

2013-06-02

20

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład – donor (pomijamy stany wzbudzone)

stan ładunkowy (+) realizowany na 1 sposób: $g_+ = 1$
 stan ładunkowy (0) realizowany na 2 sposoby (spin ↑ lub ↓): $g_0 = 2$
 energia poziomu donorowego $E^{0/+} = E_D$
 koncentracja donorów N_D

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{p_0}{p_+} = \frac{g_0}{g_+} \cdot e^{-\beta[E_D-\xi]}, \quad p_+ + p_0 = 1$$

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu donorowego:

$$p_0 = \langle n \rangle = \frac{1}{1 + \frac{g_+}{g_0} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}}$$

koncentracja obsadzonych donorów (donorów neutralnych N_D^0)

$$N_D^0 = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}}$$

2013-06-02

21

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Stosunek prawdopodobieństw znalezienia domieszki/defektu z $n + 1$ i n elektronami:

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{N_{n+1}}{N_n} = \frac{\sum_{j:n_j=n+1} e^{-\beta[E_j-(n+1)\xi]}}{\sum_{k:n_k=n} e^{-\beta[E_k-n\xi]}} = \frac{g_{n+1}}{g_n} \cdot e^{-\beta[(E_{n+1}-E_n)-\xi]}$$

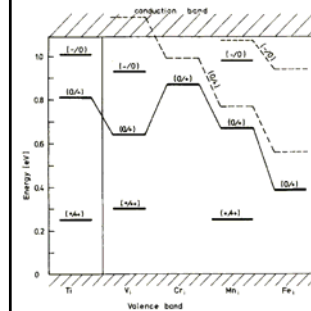


Fig. 15. Energy levels of interstitial 3d metals in silicon (full lines), see Table 3, compared with the results of X_α calculations of DeLeo et al. [15] (broken lines)

$\sum_n N_n = N$ – koncentracja domieszek, N_n – liczba cząstek w stanie n

E_{n+1} i E_n – najniższe spośród wszystkich energii E_j podkładu odpowiednio z $n + 1$ i n elektronami

Przy podnoszeniu poziomu Fermiego zapelniają się kolejne poziomy domieszkowe

$E^{n+1/n}$ – tzw. energia poziomu domieszkowego/defektowego „numerowana” stanami ładunkowymi $n + 1$ i n

g_{n+1}, g_n – tzw. degeneracje stanów podkładu z $n + 1$ i n elektronami

DYGRESJA

22

Obsadzenie poziomów domieszkowych

g_{n+1}, g_n – tzw. degeneracje stanów podkładu z $n + 1$ i n elektronami
 Degeneracje g_{n+1} i g_n uwzględniają możliwość występowania wielu różnych stanów podkładu odpowiadających tej samej liczbie cząstek (w tym stanów wzbudzonych):

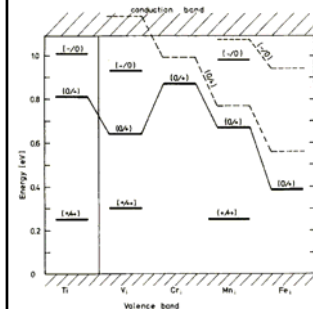


Fig. 15. Energy levels of interstitial 3d metals in silicon (full lines), see Table 3, compared with the results of X_α calculations of DeLeo et al. [15] (broken lines)

$$g_n = \alpha_{n,0} + \sum_{i=1,2,\dots} \alpha_{n,i} e^{-\beta \epsilon_{n,i}}$$

$\alpha_{n,0}$ i $\alpha_{n,i}$ są degeneracjami odpowiednio stanu podstawowego podkładu z n elektronami oraz stanów wzbudzonych z energiami wyższymi od stanu podstawowego o $\epsilon_{n,i}$ (energije wzbudzeń)

Tak definiowane degeneracje g_n na ogół zależą od temperatury

2013-06-02

DYGRESJA

23

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Przykład – donor (pomijamy stany wzbudzone)

stan ładunkowy (+) realizowany na 1 sposób: $g_+ = 1$
 stan ładunkowy (0) realizowany na 2 sposoby (spin ↑ lub ↓): $g_0 = 2$
 energia poziomu donorowego $E^{0/+} = E_D$
 koncentracja donorów N_D

$$\frac{p_{n+1}}{p_n} = \frac{p_0}{p_+} = \frac{g_0}{g_+} \cdot e^{-\beta[E_D-\xi]}, \quad p_+ + p_0 = 1$$

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu donorowego:

$$p_0 = \langle n \rangle = \frac{1}{1 + \frac{g_+}{g_0} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}}$$

koncentracja obsadzonych donorów (donorów neutralnych N_D^0)

$$N_D^0 = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D-\xi]}}$$

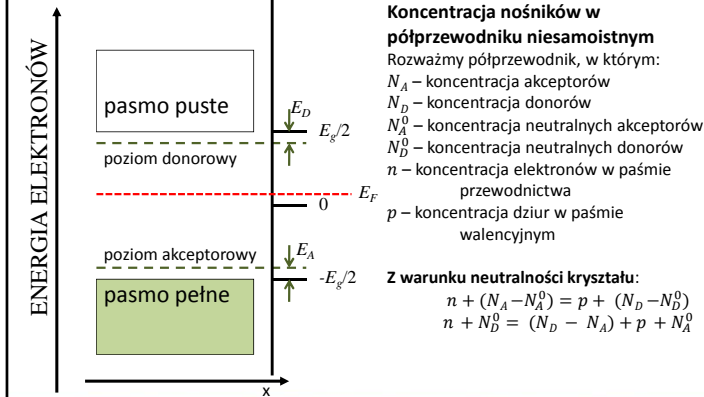
2013-06-02

DYGRESJA

24

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności



Koncentracja nośników w półprzewodniku niesamoistnym
 Rozważmy półprzewodnik, w którym:
 N_A – 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 – koncentracja dziur w paśmie walencyjnym

Z warunku neutralności kryształu:
 $n + (N_A - N_A^0) = p + (N_D - N_D^0)$
 $n + N_D^0 = (N_D - N_A) + p + N_A^0$

2013-06-02

25

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Jeśli zarówno donory jak i akceptory są płytkie, a gaz elektronowy i dziurowy nie jest zdegenerowany, to: $E_D - \xi \gg k_B T$, $\xi - E_A \gg k_B T$, $N_D^0 \ll N_D$, $N_A^0 \ll N_A$ (czyli praktycznie wszystkie domieszki są zjonizowane).

$$\begin{cases} \Delta n = n - p \approx N_D - N_A \\ n \cdot p = n_i^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} n = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_i^2} + \Delta n \right] \\ p = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(\Delta n)^2 + 4n_i^2} - \Delta n \right] \end{cases}$$

Jeżeli $\Delta n > 0$ (półprzewodnik typu n – dla typu p rozważanie są symetryczne) i $\Delta n \gg n_i$, (w $T=300K$: $n_i(\text{Ge}) < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $n_i(\text{Si}) < 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, $n_i(\text{GaAs}) < 10^{10} \text{ cm}^{-3}$):

$$n \approx N_D - N_A$$

$$p \approx \frac{n_i^2}{N_D - N_A} = \frac{N_C(T) \cdot N_V(T)}{N_D - N_A} \cdot e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

koncentracja nośników większościowych jest określona przez efektywną koncentrację domieszek, koncentracja nośników mniejszościowych może być bardzo mała (np. Si).

2013-06-02

26

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Kompensacja

półprzewodniki kompensowane – zawierające zarówno donory jak i akceptory

w odpowiednio wysokich temperaturach koncentracja nośników większościowych dana przez efektywną koncentrację domieszek $|N_D - N_A|$

koncentracja centrów rozpraszających (ładunków): $N_D + N_A$

współczynnik kompensacji – stosunek koncentracji domieszek mniejszościowych do większościowych:

$$k = \frac{N_A}{N_D} \text{ dla typu } n$$

$$k = \frac{N_D}{N_A} \text{ dla typu } p$$

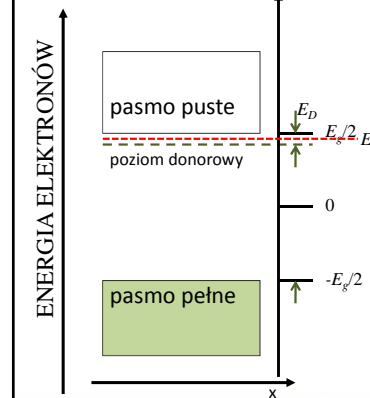
w półprzewodnikach silnie kompensowanych ($k \approx 1$) silne fluktuacje potencjału elektrostatycznego pochodzącego od domieszek, **lokalizacja związana z nieporządkiem, efekty perkolacyjne**, itp.

2013-06-02

27

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:
 $n = N_D - N_D^0$

2013-06-02

28

Obsadzenie poziomów domieszkowych

teraz znaczna część donorów będzie neutralnych (energie liczone od dna pasma przewodnictwa):

$$N_D - N_D^0 = N_D - \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \cdot e^{\beta[E_D - \xi]}} = \dots = \frac{N_D}{2} \cdot e^{\beta[E_D - \xi]}$$

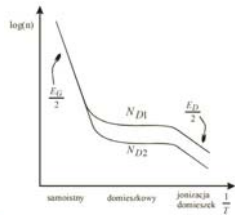
do policzenia obsadzenia pasma przewodnictwa możemy użyć rozkładu Boltzmana:

$$n = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\xi - E_c}{k_B T}} = N_C(T) \cdot e^{\frac{\xi}{k_B T}}$$

Co wobec $n = N_D - N_D^0$ daje:

$$\xi = \frac{E_D}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \left(\frac{N_D}{2 N_C(T)} \right)$$

$$n(T) = \sqrt{\frac{N_C(T) \cdot N_D}{2}} \cdot e^{\frac{E_D}{2k_B T}}$$

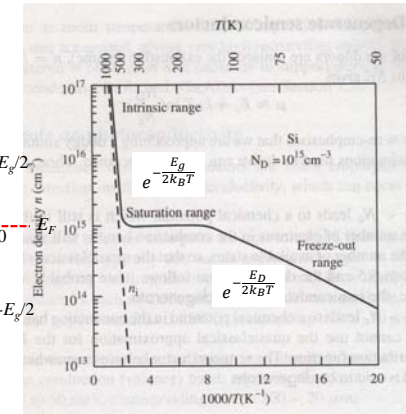
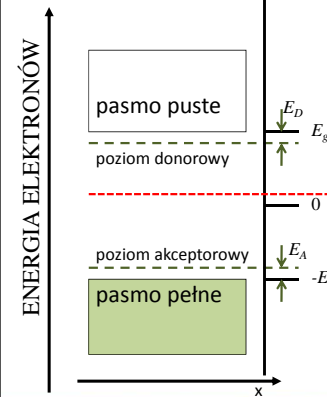


2013-06-02

29

Obsadzenie poziomów domieszkowych

Równanie neutralności



2013-06-02

30

Obsadzenie poziomów domieszkowych

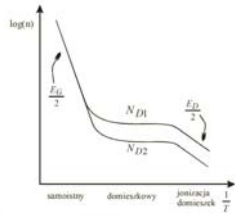
dla półprzewodników skompensowanych w niskich temperaturach energia aktywacji termicznej wynosi E_D , a nie $\frac{E_D}{2}$

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

przy koncentracjach domieszki rzędu:

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

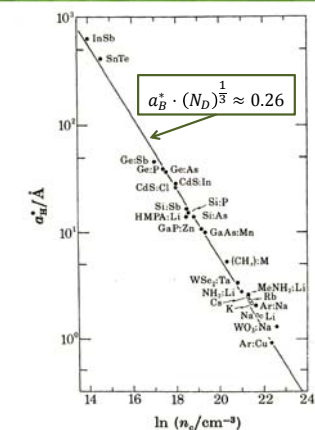
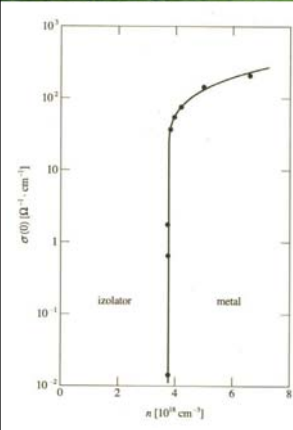
zachodzi przejście fazowe niemetal-metal (tzw. przejście Motta)



2013-06-02

31

Obsadzenie poziomów domieszkowych



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

2013-06-02

32

2013-06-02 33

Transport

Jednoelektronowe równanie Schrödingera:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

Jeśli potencjał jest periodyczny, to dobrymi rozwiązaniami są funkcje Blocha:

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{k}\vec{r})$$

Wektor falowy \vec{k} (a więc i kwazipęd $\hbar\vec{k}$) jest dobrą „liczbą” kwantową. Prędkość grupowa elektronu:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k})$$

Ze względu na symetrię pasm: $E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$ (ogólniej $E_n^+(\vec{k}) = E_n^+(-\vec{k})$), jeśli funkcja rozkładu zależy tylko od energii (w równowadze termodynamicznej), to nie ma żadnych przepływów (transportu).

M. Baj.

2013-06-02 34

Transport

Jeśli mamy dodatkowy potencjał (np. pole elektryczne), to **NIE MA** symetrii translacyjnej $\Rightarrow \vec{k}$ przestaje być dobrą liczbą kwantową, stany blochowskie nie są już funkcjami własnymi hamiltonianu (choć zawsze rozwiązań możemy poszukiwać w postaci ich kombinacji liniowej – w ogólności zależnej od czasu)

$$\vec{F} = \hbar \dot{\vec{k}}$$

zmiana \vec{k} – przejścia pomiędzy stanami blochowskimi, stany o określonym \vec{k} nie są już stanami własnymi hamiltonianu

M. Baj.

2013-06-02 35

Pola skalarne i wektorowe

Równania Schrodingera w polu \vec{E} i \vec{B} :

$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$

$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - q \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 + q\phi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \right\} \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{r}, t)$$

Pęd kanoniczny \hat{p}

Suma: pęd kinetyczny

Równanie ciągłości $J(\vec{r}, t) = \frac{\hbar q}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{q}{m} |\Psi|^2 \vec{A}(\vec{r}, t)$

albo:

$$J(\vec{r}, t) = \frac{q}{2} \left[\Psi^* \left(\frac{\hat{p} - q \vec{A}(\vec{r}, t)}{m} \Psi \right) + \left(\frac{\hat{p} - q \vec{A}(\vec{r}, t)}{m} \Psi \right)^* \Psi \right]$$

M. Baj.

2013-06-02 36

Pola skalare i wektorowe

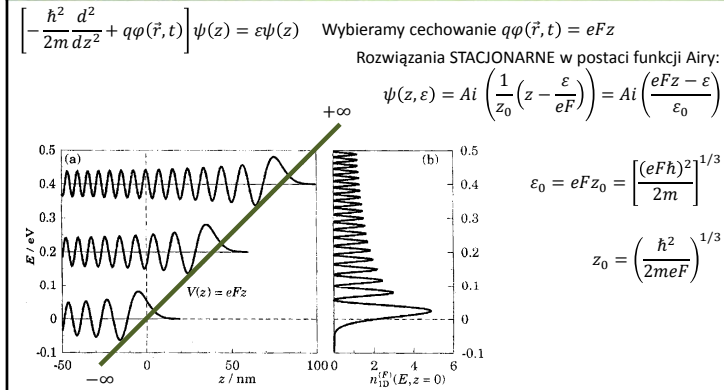


FIGURE 6.1. (a) Potential energy eFz , three wave functions, and energies for electrons in GaAs in a uniform electric field of 5 MV m^{-1} . (b) Local density of states at $z = 0$, showing how the features correspond to the wave functions.

2013-06-02

37

Pola skalare i wektorowe

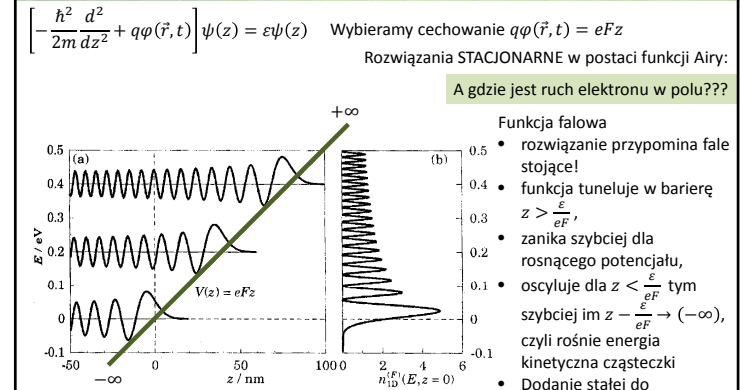


FIGURE 6.1. (a) Potential energy eFz , three wave functions, and energies for electrons in GaAs in a uniform electric field of 5 MV m^{-1} . (b) Local density of states at $z = 0$, showing how the features correspond to the wave functions.

2013-06-02

38

Lokalna gęstość stanów

Gęstość stanów (ogólnie) można zdefiniować jako:

$$N^{3D}(E, z) \sim \frac{m}{\pi \hbar^3} \sqrt{2m\varepsilon_0} \int_{-\infty}^E Ai^2\left(\frac{eFz - \varepsilon}{\varepsilon_0}\right) d\varepsilon = \frac{m}{\pi \hbar^3} \sqrt{2m\varepsilon_0} [Ai'(s)]^2 - s[Ai(s)]^2$$

Efekt Frantza-Keldysha – w polu elektrycznym przejścia optyczne zachodzą w niższych energiach – bo przerwa energetyczna się „rozmywa” przez tunelowanie do niej stanów:

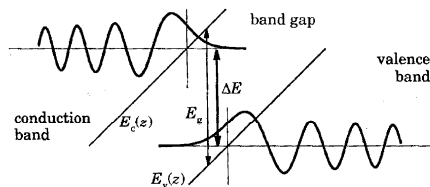


FIGURE 6.3. The Franz-Keldysh effect on interband absorption. The states shown in the valence and conduction bands are separated by $\Delta E < E_g$ but overlap because of the tail that tunnels into the band gap.

2013-06-02

39

Transport

Jeśli mamy dodatkowy potencjał (np. pole elektryczne), to **NIE MA** symetrii translacyjnej $\Rightarrow \vec{k}$ przestaje być dobrą liczbą kwantową, stany blochowskie nie są już funkcjami własnymi hamiltonianu (choć zawsze rozwiązań możemy poszukiwać w postaci ich kombinacji liniowej – w ogólności zależnej od czasu)

$$\vec{F} = \hbar \dot{\vec{k}}$$

zmiana \vec{k} – przejścia pomiędzy stanami blochowskimi, stany o określonym \vec{k} nie są już stanami własnymi hamiltonianu

$$\psi(z, \varepsilon) = Ai\left(\frac{1}{z_0}\left(z - \frac{\varepsilon}{eF}\right)\right) = Ai\left(\frac{eFz - \varepsilon}{\varepsilon_0}\right)$$

funkcje te dla $|x| \gg 1$ mogą być lokalnie przybliżane przez $\sin(kx)$ lub $\cos(kx)$ z $k \sim \sqrt{x}$

Podczas ruchu paczki falowej zrobionej z funkcji Airy takie „ \vec{k} ” będzie ulegało zmianie, co odpowiada przejściom pomiędzy funkcjami Blocha numerowanymi różnymi k , jeśli rozwiązania problemu poszukiwaliśmy w bazie funkcji Blocha

M. Baj.

2013-06-02

40

Rozpraszanie

Oprócz sił zewnętrznych, które powodują „uporządkowane” przejścia pomiędzy stanami blochowskimi $\vec{F} = \hbar \dot{\vec{k}}$ istnieją też przyczyny „nieuporządkowanych” przejść pomiędzy tymi stanami – **rozproszenia**

Co może rozpraszać elektrony? – wszelkie niedoskonałości sieci (potencjał rozpraszający V)

- domieszki, defekty (punktowe, liniowe – dyslokacje, ...) – „sztywne” rozpraszacze, potencjały niezależne od czasu
- nieporządek stopowy w kryształach mieszanych (rozpraszanie stopowe)
- międzypowierzchnie (interface roughness)
- fonony – „fluktuujące” rozpraszacze
- inne elektrony (rozpraszanie elektron-elektron) – „fluktuujące” rozpraszacze
- etc.

Prawdopodobieństwo rozproszenia elektronu ze stanu $|n, \vec{k}\rangle$ do stanu $|n', \vec{k}'\rangle$:

$$W(n, \vec{k}, n', \vec{k}') \sim |\langle n', \vec{k}' | V | n, \vec{k} \rangle|^2$$

gdzie V – potencjał rozpraszający

M. Baj.

2013-06-02

41

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Zachowanie kwazipędu $\vec{k} = \vec{k}' \pm \vec{q} + \vec{G}$

Zachowanie energii $E_{n, \vec{k}} = E_{n', \vec{k}'} \pm E_{\vec{q}}$

gdzie \vec{q} i $E_{\vec{q}}$ – kwazipęd i energia pochłoniętej/emittowanej kwazicząstki

Jeśli w rozproszeniu **nie uczestniczy żadna kwazicząstka** (np. fonon) lub jej energia jest w bilansie do zaniedbania (w porównaniu z kT i średnią energią układu elektronów), to rozproszenie jest elastyczne (lub w przybliżeniu elastyczne).

Przy rozproszeniach wewnątrzprzasmowych $n = n'$, jeśli pasmo jest sferyczne, to:

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'|$$

Rozproszenia elastyczne – np. na potencjałach domieszek i defektów

M. Baj.

2013-06-02

42

Rozpraszanie

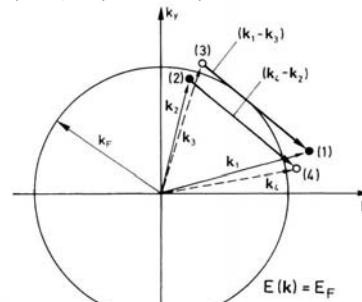
Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Rozproszenia nieelastyczne – np. na fononach (lub innych kwazicząstkach). W przybliżeniu często traktuje się rozpraszanie na fononach akustycznych jako elastyczne (bo energie fononów akustycznych są niewielkie). Nawet rozpraszanie na fononach optycznych często opisuje się przy założeniu, że rozproszenia są w przybliżeniu elastyczne (w odpowiednio wysokich temperaturach, w których $kT \gg \hbar\omega_0$).

Rozpraszanie elektron-elektron – też nieelastyczne, możliwe tylko dla elektronów z okolicy poziomu Fermiego, istotne z punktu widzenia procesów relaksacji fazy funkcji falowej

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4 + \vec{G}$$

$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4$$



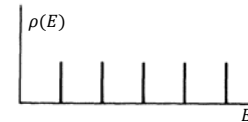
M. Baj., H. Ibach, H. Lüth, Solid-State Physics

2013-06-02

Rozpraszanie

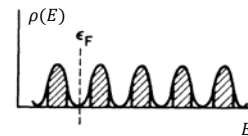
Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Punkt wyjścia – potencjał ściśle periodyczny. Rozwiązania blochowskie – stany własne hamiltonianu jednoelektronowego \Rightarrow stany odpowiadają ściśle określone energii $\Delta E = 0$ i „żyją” nieskończenie długo $\tau_q = \infty$, gdzie $\Delta E \cdot \tau_q \approx \hbar$ i droga swobodna jest nieskończona



Czas kwantowy τ_q , średnia droga swobodna l_q
Każde rozpraszanie prowadzi do tego, że czas życia w danym stanie kwantowym (tzw. „czas kwantowy”) jest skończony i poszerzenie $\Delta E \neq 0$. Średnia droga swobodna:

$$l_q = v_F \tau_q$$



Przykład: oscylacje Shubnikova-de Haasa w 2DEG

M. Baj., H. Ibach, H. Lüth, Solid-State Physics

2013-06-02

44

Rozpraszanie

Przykład: oscylacje Shubnikova-de Haasa w 2DEG

Gęstość stanów oscyluje w funkcji energii. Amplituda oscylacji zależy od pola B (bo separacja pików gęstości stanów $\hbar\omega_c$, jest proporcjonalna do B), ale i od τ_q . W funkcji pola magnetycznego oscyluje gęstość stanów na poziomie Fermiego, co przekłada się na oscylacje magnetooporu (efekt Shubnikova-de Haasa):

$$\Delta\rho_{SDH} = 4\rho_0\delta \cos(4\pi\nu) \frac{\xi(T)}{\sinh(\xi(T))} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c\tau_q}\right)$$

Dla $T \searrow 0$

$$\frac{\xi(T)}{\sinh(\xi(T))} \rightarrow 1$$

$$\xi(T) = 2\pi^2 kT / \hbar\omega_c$$

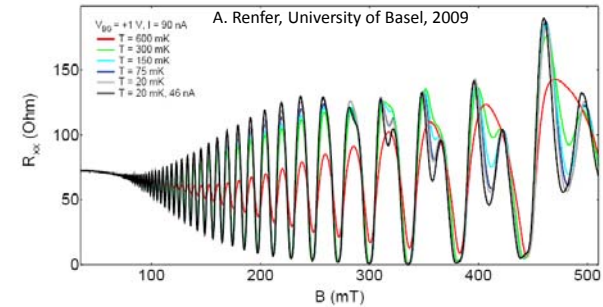
M. Baj, H. Ibach, H. Lüth, Solid-State Physics

2013-06-02

45

Rozpraszanie

Przykład: oscylacje Shubnikova-de Haasa w 2DEG



A. Renfer, University of Basel, 2009

M. Baj

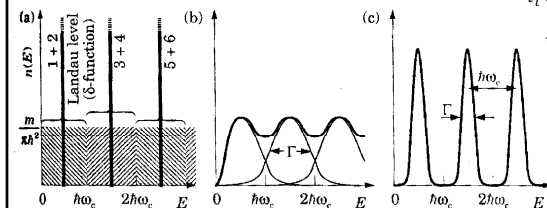
2013-06-02

46

Poziomy Landaua

$$N^{2D}(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2}$$

Poszerzenie poziomów na skutek rozprasz $\Gamma = \hbar/\tau_i$



τ_i to jednocząstkowy (albo kwantowy) czas życia – to NIE jest ten sam czas, który omawialiśmy w modelu Drudego (transportowy)

FIGURE 6.7. Density of states in a magnetic field, neglecting spin splitting. (a) The states in each range $\hbar\omega_c$ are squeezed into a δ -function Landau level. (b) Landau levels have a non-zero width Γ in a more realistic picture and overlap if $\hbar\omega_c < \Gamma$. (c) The levels become distinct when $\hbar\omega_c > \Gamma$.

Licząc 2 spiny: $2n_B = \frac{2eB}{h} = \frac{2m\omega_c}{2\pi\hbar} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \hbar\omega_c$

Każdy ze stanów na poziomie Landaua zajmuje powierzchnię $\frac{h}{eB} = 2\pi l_B^2$

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} = \sqrt{\frac{\hbar}{|eB|}}$$

2013-06-02

47

Poziomy Landaua

$n_B = \frac{eB}{h}$ degeneracja poziomów Landaua – ilość DOZWOLONYCH stanów na każdym z poziomów Landaua na jednostkę powierzchni – **rośnie z polem B**

Koncentracja nośników 2D: n_{2D} – na ilu poziomach Landaua zmieszczą się te nośniki?

Współczynnik wypełnienia *filling factor* ν (zwykle nie jest to liczba całkowita)

$$\nu = \frac{n_{2D}}{n_B} = \frac{\hbar n_{2D}}{eB} = \frac{\Phi_0 n_{2D}}{B} = 2\pi l_B^2 n_{2D} \quad (\text{z uwzględnieniem degeneracji spinów})$$

Zwiększając pole magnetyczne kolejno zapełniamy poziomy Landaua. Można całkowicie zapełnić n -ty poziom ($\nu = n$) i wtedy $B_n = \hbar n_{2D} / en$, aż osiągniemy $n = 1$, czyli wszystkie elektrony będą na tym samym poziomie Landaua (tzw. *limit kwantowy*).

Dla $\nu < 1$ zaczynają się dziać ciekawe rzeczy (do których zaraz wrócimy!)

2013-06-02

48

Poziomy Landaua

$n_B = \frac{eB}{h}$ degeneracja poziomów Landaua – ilość DOZWOLONYCH stanów na każdym z poziomów Landaua na jednostkę powierzchni – **rośnie z polem B**

Koncentracja nośników 2D: n_{2D} – na ilu poziomach Landaua zmieszczą się te nośniki?

Współczynnik wypełnienia *filling factor* ν (zwykle nie jest to liczba całkowita)

$$\nu = \frac{n_{2D}}{n_B} = \frac{\hbar n_{2D}}{eB} = \frac{\Phi_0 n_{2D}}{B} = 2\pi l_B^2 n_{2D} \quad (\text{z uwzględnieniem degeneracji spinów})$$

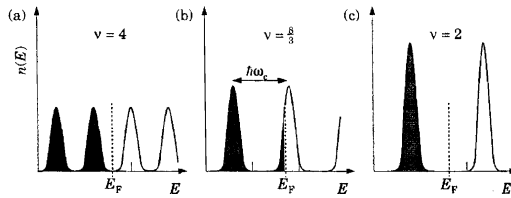


FIGURE 6.8. Occupation of Landau levels in a magnetic field neglecting the spin splitting, showing how the Fermi level moves to maintain a constant density of electrons. The fields are in the ratio 2 : 3 : 4 and give $\nu = 4, \frac{8}{3}$, and 2.

2013-06-02

49

Poziomy Landaua

Poziom Fermiego leży **po między** poziomami Landaua – nie ma tam DOS, zmiana E_F nie zmienia DOS – stany *nieściśliwe* (*incompressible*)

Poziom Fermiego leży **wewnątrz** poziomu Landaua – duża DOS, zmiana E_F mocno wpływan na DOS – stany *ściśliwe* (*compressible*)

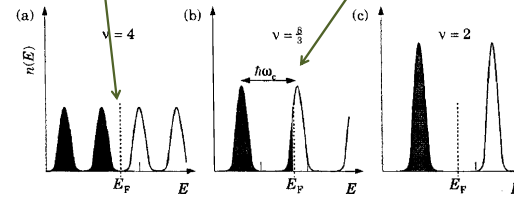


FIGURE 6.8. Occupation of Landau levels in a magnetic field neglecting the spin splitting, showing how the Fermi level moves to maintain a constant density of electrons. The fields are in the ratio 2 : 3 : 4 and give $\nu = 4, \frac{8}{3}$, and 2.

2013-06-02

50

Poziomy Landaua

Poziom Fermiego w polu magnetycznym:

$$\nu = \frac{n_{2D}}{n_B} = \frac{\hbar n_{2D}}{eB} = \frac{\Phi_0 n_{2D}}{B} = 2\pi l_B^2 n_{2D}$$

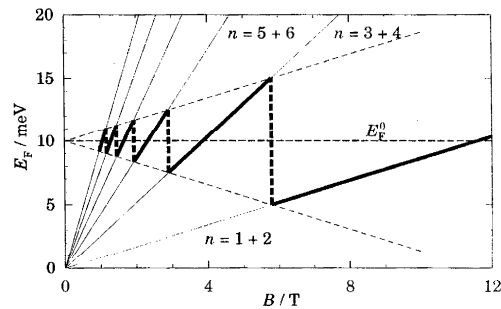


FIGURE 6.9. Variation of the Fermi level as a function of magnetic field for a two-dimensional electron gas in GaAs with $E_F^0 = 10$ meV before the field was applied. Spin splitting is neglected. The fan of thin lines shows the Landau levels, while the discontinuous thick line is E_F .

2013-06-02

51

Efekt Shubnikova-de Haasa

Shubnikov-de Haas effect

9.4.1 Types of quantum oscillation

As the electronic density of states at E_F determines most of a metal's properties, virtually all properties will exhibit quantum oscillations in a magnetic field. Examples include⁷

- oscillations of the magnetisation (the de Haas-van Alphen effect);
- oscillations of the magnetoresistance (the Shubnikov-de Haas effect);
- oscillations of the sample length;
- oscillations of the sample temperature;
- oscillations in the ultrasonic attenuation;
- oscillations in the Peltier effect and thermoelectric voltage;
- oscillations in the thermal conductivity.

⁶However, open orbits do lead to a very interesting quantum phenomenon which has recently been observed in high-frequency experiments; see A. Ardavan *et al.*, *Phys. Rev. B* 60, 15500 (1999); *Phys. Rev. Lett.* 81, 713 (1998).

⁷Some pictures of typical data are shown in *Solid State Physics*, by N.W. Ashcroft and N.D. Mermin (Holt, Rinehart and Winston, New York 1976) pages 266-268.

http://www2.physics.ox.ac.uk/sites/default/files/BandMT_09.pdf

2013-06-02

52

Efekt Shubnikova-de Haasa

Shubnikov-de Haas effect

Gęstość stanów oscyluje - spada do 0 dla $\nu = n$ i jest największa dla $\nu \approx n + \frac{1}{2}$ - najprościej to zmierzyć w magnetooporze R_{xx} .

Oscylacje zależą od stodunku energii Fermiego E_F do częstości cyklotronowej $\hbar\omega_c = eB/m^*$. Oscylacje są periodyczne w funkcji $1/B$.

$$\nu = \frac{n_{2D}}{n_B} = \frac{\hbar n_{2D}}{eB} = \frac{\Phi_0 n_{2D}}{B} = 2\pi l_B^2 n_{2D}$$

Z SdH można także wyznaczyć masę efektywną m^* oraz czas kwantowy τ_q . Amplituda oscylacji jest dana przez

$$\Delta\rho_{SDH} = 4\rho_0\delta \cos(4\pi\nu) \frac{\xi(T)}{\sinh(\xi(T))} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c\tau_q}\right)$$

$$\xi(T) = 2\pi^2 kT / \hbar\omega_c$$

Zależność temperaturowa daje m^* , tłumienie τ_q .

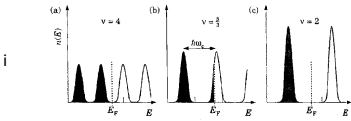
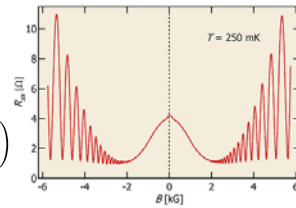


FIGURE 8.8 Occupation of Landau levels in a magnetic field neglecting the spin splitting, showing how the Fermi level moves to maintain a constant density of electrons. The fields are in the ratio 2 : 3 : 4 and give $\nu = 4, \frac{3}{2}$, and 2.



<http://groups.physics.umn.edu/zudovlab/content/sdho.htm>

2013-06-02

53

Efekt Shubnikova-de Haasa

Shubnikov-de Haas effect

Gęstość stanów oscyluje - spada do 0 dla $\nu = n$ i jest największa dla $\nu \approx n + \frac{1}{2}$ - najprościej to zmierzyć w magnetooporze R_{xx} .

Oscylacje zależą od stodunku energii Fermiego E_F do częstości cyklotronowej $\hbar\omega_c = eB/m^*$. Oscylacje są periodyczne w funkcji $1/B$.

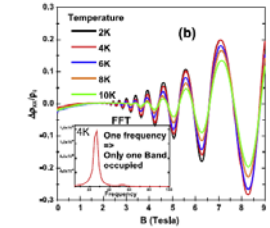
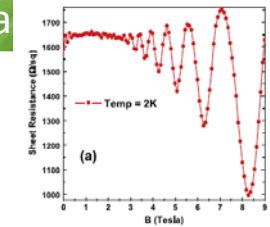
$$\nu = \frac{n_{2D}}{n_B} = \frac{\hbar n_{2D}}{eB} = \frac{\Phi_0 n_{2D}}{B} = 2\pi l_B^2 n_{2D}$$

Z SdH można także wyznaczyć masę efektywną m^* oraz czas kwantowy τ_q . Amplituda oscylacji jest dana przez

$$\Delta\rho_{SDH} = 4\rho_0\delta \cos(4\pi\nu) \frac{\xi(T)}{\sinh(\xi(T))} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c\tau_q}\right)$$

$$\xi(T) = 2\pi^2 kT / \hbar\omega_c$$

Zależność temperaturowa daje m^* , tłumienie τ_q .



A. Nainani et al. Solid-State Electronics 62 (2011) 138–141

2013-06-02

54

Rozpraszanie

Rozprzelenia elastyczne i nieelastyczne

Czas kwantowy τ_q , średnia droga swobodna l_q

Każde rozpraszanie prowadzi do tego, że czas życia w danym stanie kwantowym (tzw. „czas kwantowy”) jest skrócony i poszerzenie $\Delta E \neq 0$. Średnia droga swobodna:

$$l_q = v_F \tau_q$$

Czas transportowy (czas relaksacji pędowej) τ_{tr} , średnia droga swobodna l_{tr}

W makroskopowych przepływach elektronów (np. prąd elektryczny) liczy się nie sam fakt rozprzelenia, ale jak w rozprzeleniu zmienia się pęd (wektor falowy). Niskokątowe rozprzelenia mają mniejszy wpływ na relaksację pędu niż wysokokątowe (rozprzelenia elektron-elektron nie dają wkładu do τ_{tr}):

$$\frac{1}{\tau_q} = \int P(\theta) d\Omega$$

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = \int P(\theta) (1 - \cos\theta) d\Omega$$

gdzie θ – kąt (elastycznego) rozprzelenia. Przeważnie $\tau_{tr} > \tau_q$.

M. Baj.

2013-06-02

55

Rozpraszanie

Rozprzelenia elastyczne i nieelastyczne

Czas transportowy (czas relaksacji pędowej) τ_{tr} , średnia droga swobodna l_{tr}

W makroskopowych przepływach elektronów (np. prąd elektryczny) liczy się nie sam fakt rozprzelenia, ale jak w rozprzeleniu zmienia się pęd (wektor falowy). Niskokątowe rozprzelenia mają mniejszy wpływ na relaksację pędu niż wysokokątowe (rozprzelenia elektron-elektron nie dają wkładu do τ_{tr}):

$$\frac{1}{\tau_q} = \int P(\theta) d\Omega$$

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = \int P(\theta) (1 - \cos\theta) d\Omega$$

gdzie θ – kąt (elastycznego) rozprzelenia. Przeważnie $\tau_{tr} > \tau_q$

Ruchliwość - czas transportowy :

$$\mu = \frac{e\tau_{tr}}{m^*}$$

Przykład: GaAs, $m^* \approx 0,067 m_0$, $E_F = 10$ meV, $v_F \approx 2,3 \cdot 10^5$ m/s

- $T = 300$ K, materiał objętościowy: $\mu \approx 4000$ cm²/Vs, $\tau_{tr} \approx 0,15$ ps, $\tau_{tr}v_F = l_{tr} \approx 35$ nm
- $T = 1$ K, 2DEG: $\mu \approx 10^7$ cm²/Vs, $\tau_{tr} \approx 400$ ps, $\tau_{tr}v_F = l_{tr} \approx 90$ μ m

M. Baj.

2013-06-02

56

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_φ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_φ

Rozproszenia mogą prowadzić do przypadkowych zmian fazy funkcji falowej elektronu, a więc zaniku jej spójności fazowej, co z kolei uniemożliwia efektywną interferencję. Spójność fazową niszczą rozproszenia nieelastyczne. W relaksacji fazy nie biorą udziału „sztywne rozpraszacze”, a tylko „fluktuujące” (rozpraszanie na fononach, rozpraszanie elektron-elektron, rozpraszanie na domieszkach z „wewnętrznymi stopniami swobody”)

Przykład 1 – efekt Aharonova-Bohma

Elektron poruszający się z punktu 1 do punktu 2 po pewnej drodze P , na której nie znika potencjał wektorowy \vec{A} ($\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$) doznaje przesunięcia fazowego:

$$\varphi_1 = \frac{e}{\hbar} \int_{P \rightarrow Q}^{(1)} \vec{A} d\vec{r}$$

$$\varphi_2 = \frac{e}{\hbar} \int_{P \rightarrow Q}^{(2)} \vec{A} d\vec{r}$$

2013-06-02

57

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_φ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_φ

Przykład 1 – efekt Aharonova-Bohma

Elektron poruszający się z punktu 1 do punktu 2 po pewnej drodze P , na której nie znika potencjał wektorowy \vec{A} ($\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$) doznaje przesunięcia fazowego:

$$\varphi_1 = \frac{e}{\hbar} \int_{P \rightarrow Q}^{(1)} \vec{A} d\vec{r}$$

$$\varphi_2 = \frac{e}{\hbar} \int_{P \rightarrow Q}^{(2)} \vec{A} d\vec{r}$$

$$\Delta\varphi_{1,2} = \frac{e}{\hbar} \left(\int_{(1)} \vec{A} d\vec{r} - \int_{(2)} \vec{A} d\vec{r} \right) = \frac{e}{\hbar} \int_S \vec{B} d\vec{S} = \frac{e}{\hbar} \Phi_B$$

Różnica faz pomiędzy dwiema różnymi drogami jest proporcjonalna do strumienia pola \vec{B} przez powierzchnię S rozpiętą przez obie drogi

2013-06-02

58

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_φ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_φ

Przykład 1 – efekt Aharonova-Bohma

$$\Delta\varphi_{1,2} = \frac{e}{\hbar} \left(\int_{(1)} \vec{A} d\vec{r} - \int_{(2)} \vec{A} d\vec{r} \right) = \frac{e}{\hbar} \int_S \vec{B} d\vec{S} = \frac{e}{\hbar} \Phi_B$$

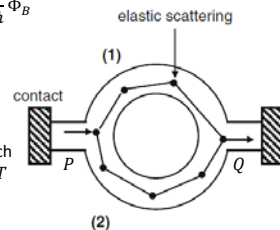
Różnica faz pomiędzy dwiema różnymi drogami jest proporcjonalna do strumienia pola \vec{B} przez powierzchnię S rozpiętą przez obie drogi.

Zachodzi interferencja fal elektronowych poruszających się po obu drogach. Prawdopodobieństwo transmisji T jest okresowe z polem \vec{B} z okresem:

$$\Phi_0 = \frac{e}{\hbar}$$

$$T = 2T_0 \left[1 + \cos \left(\frac{e}{\hbar} \Phi_B + \varphi_0 \right) \right]$$

Amplituda maleje jak $\sim \exp(-\tau/\tau_\varphi)$ (τ – czas przelotu przez interferometr)



2013-06-02

59

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_φ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_φ

Przykład 1 – efekt Aharonova-Bohma

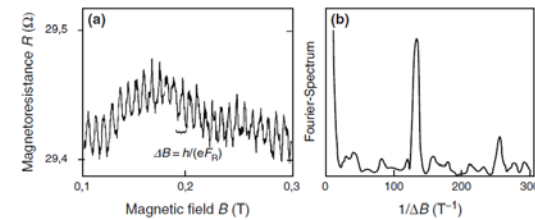


Fig. 9.16. Aharonov-Bohm-oscillations as measured on a nanoscale gold ring. (a) Original plot of the magnetoresistance vs. the magnetic field that traverses the ring. The oscillation period is $AB = \Phi_0/F_R$ with F_R the area of the ring. (b) Fourier-transform of the trace in (a). In addition to the main peak at 130 T^{-1} one notices a smaller peak at about 260 T^{-1} . The latter is due to Altshuler-Aronov-Spivak-oscillations that occur at twice the frequency of the Aharonov-Bohm-oscillations. (After Webb et al. [9.11])

H. Ibach, H. Lüth, Solid-State Physics

2013-06-02

60

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_ϕ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_ϕ

Przykład 1 – efekt Aharonova-Bohma

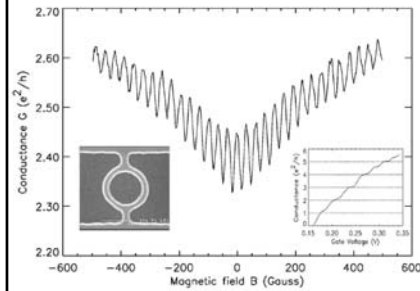


FIG. 1. Measured magnetoconductance of the device shown on the SEM picture in the left insert. The magnetoconductance show a very clear Aharonov-Bohm signal imposed on a slowly varying background. The right insert displays the zero-magnetic field conductance at $T=4.2$ K as a function of gate voltage. The conductance curve displays distinct steps which show that the device is in a single- or few-mode regime, see text.

S. Pedersen et al., *Physical Review B*, **61**, 5457 (2000)

Średnia droga swobodna $l_{tr} = v_F \tau_{tr} \approx 6 \mu\text{m}$ – transport bez rozproszeń (balistyczny)

2013-06-02

61

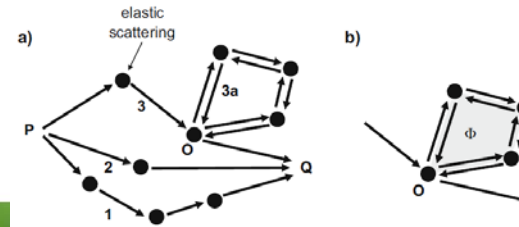
Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_ϕ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_ϕ

Przykład 2 – słaba lokalizacja

Przypadkowo rozłożone rozpraszacze (elastyczne) umożliwiają wystąpienie rozpraszania do tyłu, którego prawdopodobieństwo jest zwiększone ze względu na interferencję konstruktywną pomiędzy dwiema drogami odpowiadającymi ruchom w przeciwnie strony. Prowadzi to do zwiększenia całkowitego prawdopodobieństwa rozpraszania do tyłu, a więc zmniejszenia przewodności elektrycznej. Pole magnetyczne wprowadza przesunięcia fazowe pomiędzy obu drogami, co, ze względu na uśrednienie wkładów bardzo wielu możliwych tego typu par trajektorii, gasi efekt \Rightarrow ujemny magnetoopór.



H. Ibach, H. Lüth, *Solid-State Physics*

2013-06-02

62

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_ϕ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_ϕ

Przykład 2 – słaba lokalizacja 2DHG w Si/SiGe QW

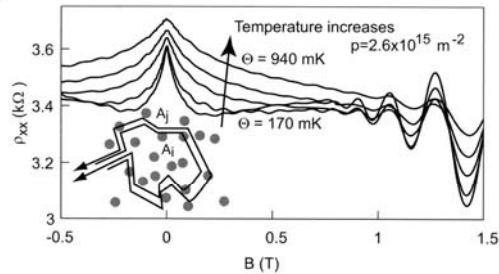


Fig. 8.5 Inset: A fraction of the electronic trajectories in a diffusive 2DEG form closed loops and lead to coherent backscattering. Main figure: WL peak as a function of B , and for various temperatures between 170 and 940 mK. The sample was a Si-SiGe quantum well containing a hole gas. Adapted from [271].

V. Senz et al., *Physical Review B*, **61**, R5082 (2000)

2013-06-02

63

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_ϕ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_ϕ

Przykład 2 – słaba lokalizacja 2DHG w Si/SiGe QW

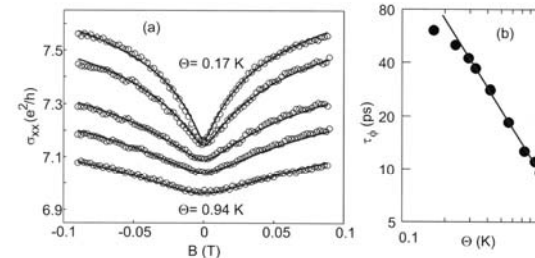


Fig. 8.6 (a) The data of Fig. 8.5 (circles), translated into longitudinal conductivity $\sigma_{xx}(B)$. The lines are least squares fits according to Eq. (8.4). (b) Temperature dependence of τ_ϕ , as determined from these fits. The line represents the theoretically expected $1/T$ dependence. Adapted from [271].

M. Baj.

2013-06-02

V. Senz et al., *Physical Review B*, **61**, R5082 (2000)

64

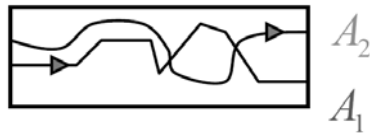
Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_ϕ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_ϕ

Przykład 3 – uniwersalne fluktuacje przewodności (UCF)

Przypadkowo rozłożone rozpraszacze (elastyczne) wyznaczają różne możliwe trajektorie elektronowej paczki falowej. Interferencje pomiędzy tymi trajektoriami prowadzą do **zależności całkowitej przewodności od parametru mogącego modyfikować tę interferencję** (np. pola magnetycznego). Zmiany te są w pełni powtarzalne. Szczegółowy obraz aperiodycznych zależności $G(B)$ zależy jednak od rozkładu domieszek: ogrzanie i ponowne schłodzenie próbki może zmieniać szczegóły zależności $G(B)$ – domieszki mogą trochę przedyfundować.



M. Baj.

2013-06-02

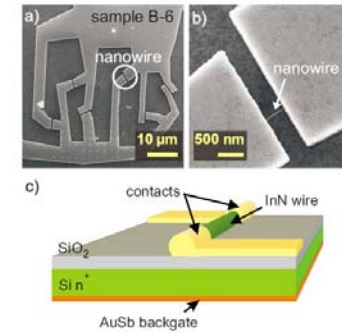
65

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) l_ϕ

Przykład 3 – uniwersalne fluktuacje pr.



S. Alagha et al., *Journal of Applied Physics*, **108**, 113704 (2010)

M. Baj.

2013-06-02

FIG. 1. (Color online) (a) Scanning electron beam micrograph of sample B-6 with six InN wires connected in parallel and (b) detail of a contacted InN nanowire. (c) Schematic illustration of a contacted nanowire. The Si substrate used as a back-gate electrode is isolated from the nanowire by a 100 nm thick SiO₂ layer.

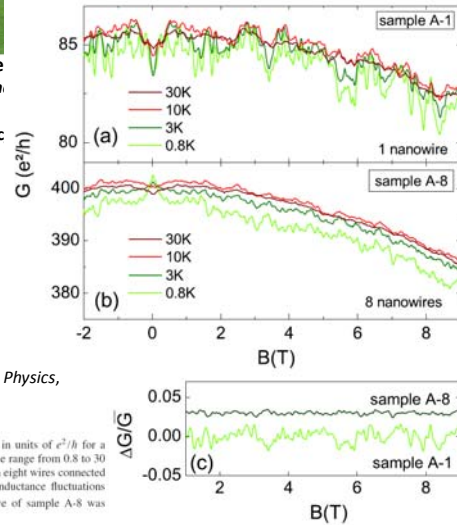
68

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) l_ϕ

Przykład 3 – uniwersalne fluktuacje



S. Alagha et al., *Journal of Applied Physics*, **108**, 113704 (2010)

FIG. 2. (Color online) (a) Conductance fluctuations in units of e^2/h for a single wire (sample A-1) at various temperatures in the range from 0.8 to 30 K. (b) Corresponding measurements for a sample with eight wires connected in parallel (sample A-8). (c) Comparison of the conductance fluctuations $\Delta G/G$ of samples A-1 and A-8 at 0.8 K. The curve of sample A-8 was shifted by 0.03.

Rozpraszanie

Rozproszenia elastyczne i nieelastyczne - podsumowanie

Czas kwantowy τ_q , średnia droga swobodna $l_q = v_F \tau_q$

Czas transportowy (czas relaksacji pędowej) τ_{tr} , średnia droga swobodna $l_{tr} = v_F \tau_{tr}$

Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_ϕ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_ϕ

Jeśli $\tau_\phi \gg \tau_q$ to:

$$l_\phi = \sqrt{D \tau_\phi}$$

Gdzie $D = \mu k_B T / q$ – stała dyfuzji

M. Baj.

2013-06-02

68

Transport

Skale długości:

Długość fali de Broglie'a elektronu (na poziomie Fermiego) λ_F :

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$$

Dla metalu $m^* \approx m_0$ i $E_F \approx 10\text{eV} \Rightarrow \lambda_F \approx 0,4\text{ nm}$

Dla półprzewodnika $m^* \approx 0,067m_0$ (GaAs) i $E_F \approx 10\text{meV} \Rightarrow \lambda_F \approx 47\text{ nm}$

łatwiej jest uzyskać efekty uwięzienia kwantowego w półprzewodnikach niż w metalach!

Długość magnetyczna l_B

Promień orbity cyklotronowej najniższego poziomu Landaua:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_c = \frac{1}{2}m^*v^2 = \frac{1}{2}m^*\omega_c^2 l_B^2 \Rightarrow l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$$

W polu $B = 1\text{ T}$ dostajemy $l_B \approx 26\text{ nm}$

Energia cyklotronowa $E_c = \hbar\omega_c$

Dla półprzewodnika $m^* \approx 0,067m_0$ (GaAs) w $B = 1\text{ T}$ $E_c \approx 1,7\text{ meV}$

M. Baj.

2013-06-02

69

Transport

Skale długości:

Rozmiary układu (kropki kwantowej), dla których efekty ładowania pojedynczymi elektronami mogą być widoczne

Energia ładowania pojedynczym elektronem:

$$E = \frac{e^2}{2C}$$

Pojemność „wyspy” (krążka) o promieniu R otoczonej materiałem o stałej dielektrycznej ϵ :

$$C = 8\epsilon\epsilon_0 R$$

Aby móc obserwować efekty związane z ładowaniem pojedynczym elektronem (np. tzw. blokadę kulombowską), energia ładowania nie może być dużo mniejsza od $k_B T$ ($E \approx k_B T$):

- dla $\epsilon = 10$, $T = 300\text{ K}$: $R \approx 4\text{ nm}$
- dla $\epsilon = 10$, $T = 4\text{ K}$: $R \approx 300\text{ nm}$

M. Baj.

2013-06-02

70

Transport

Skale długości:

Transport elektronów przez kropki kwantowe – układ, w którym efekty ładowania muszą być widoczne

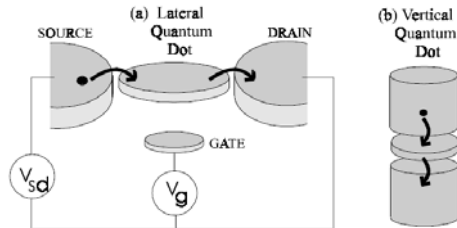


Figure 1.1. Schematic of a quantum dot, in the shape of a disk, connected to source and drain contacts by tunnel junctions and to a gate by a capacitor. (a) shows the lateral geometry and (b) the vertical geometry.

<http://marcuslab.harvard.edu/papers/KouwenhovenReview.pdf>

M. Baj.

2013-06-02

71

Transport

Układy makro- i mezoskopowe, reżimy transportu:

<p>conventional device:</p>	<p>mesoscopic device:</p>
$L \gg l_e$	$L \leq l_e$
dissipative	ballistic
$L \gg l_\phi$	$L \leq l_\phi$
incoherent	phase coherent
$L \gg \lambda_F$	$L \leq \lambda_F$
no size quantization	size quantization
$e^2/C < k_B \Theta$	$e^2/C \geq k_B \Theta$
no single electron charging	single electron charging effects

T. Hensel, „Mesoscopic Electronics in Solid State Nanostructures”, VILEY-VCH, 2007

M. Baj.

2013-06-02

72

Transport dyfuzyjny

Dyfuzyjny transport elektronowy – rozmiary układów (metale bądź półprzewodniki) dużo większe od średniej drogi swobodnej: $L \gg l_q, l_{tr}$

Problem wielu cząstek – metody fizyki statystycznej

Będziemy używać **funkcji rozkładu prawdopodobieństwa obsadzeń stanów elektronowych**. W równowadze była to funkcja rozkładu Fermiego-Diraca f_0 , teraz musi być to inna funkcja, w ogólności może explicitnie zależeć od wektora falowego \vec{k} (niekoniecznie tylko poprzez energię, jak to było w przypadku funkcji f_0), położenia \vec{r} (dopuszczamy zależność od położenia takich parametrów jak np. temperatura – gradient temperatury) i ewentualnie od czasu:

$$f = f(\vec{r}, \vec{k}, t)$$

2013-06-02

73

Transport dyfuzyjny

Dyfuzyjny transport elektronowy – rozmiary układów (metale bądź półprzewodniki) dużo większe od średniej drogi swobodnej: $L \gg l_q, l_{tr}$

Problem wielu cząstek – metody fizyki statystycznej

Będziemy używać **funkcji rozkładu prawdopodobieństwa obsadzeń stanów elektronowych**.

$$f = f(\vec{r}, \vec{k}, t)$$

Jeśli w jakiś sposób potrafilibyśmy znaleźć taką funkcję rozkładu, to byłoby w stanie policzyć rozmaite przepływy, np. (3D): gęstość prądu elektrycznego

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{SB} \vec{v}(\vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3\vec{k}$$

gęstość strumienia energii (elektronowy wkład do transportu ciepła):

$$\vec{w}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{SB} [E(\vec{k}) - \mu] \vec{v}(\vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}, t) d^3\vec{k}$$

Przepis na znalezienie funkcji rozkładu $f = f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ podał Boltzmann

R. Stępniewski.

2013-06-02

74

Równanie Boltzmana

Jeśli nie ma rozproszeń, to podczas ruchu w przestrzeni fazowej **wszystkie** te elektrony, które w czasie $t + \Delta t$ znalazły się elemencie przestrzeni fazowej opisanym współrzędnymi $\vec{r} + \Delta\vec{r}, \vec{k} + \Delta\vec{k}$, w czasie t były w elemencie przestrzeni fazowej o współrzędnych \vec{r}, \vec{k} . Stąd wniosek, że:

$$f(\vec{r} + \Delta\vec{r}, \vec{k} + \Delta\vec{k}, t + \Delta t) = f(\vec{r}, \vec{k}, t)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Delta t + \nabla_{\vec{r}} f \cdot \Delta\vec{r} + \nabla_{\vec{k}} f \cdot \Delta\vec{k} = 0$$

Ponieważ $\Delta\vec{r} = \vec{v}\Delta t$ i $\Delta\vec{k} = \vec{F}\Delta t/\hbar$ dostajemy

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = 0$$

Jeśli jednak są rozproszenia, to część elektronów opuszcza rozpatrywany element przestrzeni fazowej (ulegają rozproszeniom **ze** stanów zawartych w tym elemencie na zewnątrz niego), zaś część do niego wchodzi (rozproszenia **do** stanów zawartych w tym elemencie). Wtedy prawa strona powyższego równania nie równa się zeru (tzw. człon zderzeniowy)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd}$$

Co można zapisać w postaci:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{dryf} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd}$$

R. Stępniewski.

2013-06-02

75

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd}$$

Co można zapisać w postaci:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{dryf} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd}$$

gdzie człon dryfowy:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{dryf} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{dryf} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{pole} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f$$

człon zderzeniowy:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} = b - a$$

Dla rozproszeń w obrębie jednego pasma:

$$a = \int_{SB} W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - f(\vec{k}')] \rho(\vec{k}') f(\vec{k}) d^3\vec{k}' \quad a - \text{częstość zderzeń przewodzących elektron ze stanu } \vec{k} \text{ do jakiegokolwiek } \vec{k}'$$

$$b = \int_{SB} W(\vec{k}'', \vec{k}) [1 - f(\vec{k})] \rho(\vec{k}'') f(\vec{k}'') d^3\vec{k}'' \quad b - \text{częstość zderzeń przewodzących elektron do stanu } \vec{k} \text{ z jakiegokolwiek } \vec{k}''$$

2013-06-02

76

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + b - a$$

równanie różniczkowo-calkowe, nieliniowe, w ogólnym przypadku niemożliwe do rozwiązania. Opis za pomocą równania Boltzmana jest opisem kwaziklasycznym – ma zastosowanie, gdy paczkę falową elektronu można w przybliżeniu traktować jak cząstkę klasyczną (wymaga podania zmiennych \vec{k} i \vec{r} - 6 niezależnych wymiarów). W stanie stacjonarnym $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$

W szczególności długość fali de Broglie'a elektronu λ musi spełniać następujące warunki:

- $\lambda \ll L$, gdzie L – typowy rozmiar dla danego problemu
- $\lambda |\vec{F}| \ll \langle E \rangle$ – zmiana energii E wywołana działaniem siły zewnętrznej \vec{F} na drodze λ musi być mała w porównaniu ze średnią energią
- $\lambda \ll l$, gdzie l – średnia droga swobodna
- Pola (elektryczne, magnetyczne i tp). muszą być zapisane klasycznie, np. $\hbar\omega_c \ll \langle E \rangle \Rightarrow \hbar\omega_c \ll k_B T$ (przypadek niezdegenerowany) $\hbar\omega_c \ll E_F$ (dla degeneracji)

R. Stępniewski.

2013-06-02

77

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + b - a$$

równanie różniczkowo-calkowe, nieliniowe, w ogólnym przypadku niemożliwe do rozwiązania. Opis za pomocą równania Boltzmana jest opisem kwaziklasycznym – ma zastosowanie, gdy paczkę falową elektronu można w przybliżeniu traktować jak cząstkę klasyczną (wymaga podania zmiennych \vec{k} i \vec{r} - 6 niezależnych wymiarów). W stanie stacjonarnym $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$

W szczególności długość fali de Broglie'a elektronu λ musi spełniać następujące warunki:

- $\lambda \ll L$, gdzie L – typowy rozmiar dla danego problemu
- $\lambda |\vec{F}| \ll \langle E \rangle$ – zmiana energii E wywołana działaniem siły zewnętrznej \vec{F} na drodze λ musi być mała w porównaniu ze średnią energią
- $\lambda \ll l$, gdzie l – średnia droga swobodna
- Pola (elektryczne, magnetyczne i tp). muszą być zapisane klasycznie, np. $\hbar\omega_c \ll \langle E \rangle \Rightarrow \hbar\omega_c \ll k_B T$ (przypadek niezdegenerowany) $\hbar\omega_c \ll E_F$ (dla degeneracji)

Przykład: w polu elektrycznym o natężeniu $E : F = eE$, dla GaAs z $E_F \approx 10$ meV $\lambda \approx 50$ nm powyższy warunek daje: $E \ll 2 \cdot 10^3$ V/cm - silne pole jak na przewodzące próbki makroskopowe, ale niezbyt silne z punktu widzenia układów w skali mikro (np. przyrządów półprzewodnikowych)

2013-06-02

78

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + b - a$$

$$a = \int_{SB} W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - f(\vec{k}')] \rho(\vec{k}') f(\vec{k}) d^3 \vec{k}' \quad a - \text{częstość zderzeń przewodzących elektron ze stanu } \vec{k} \text{ do jakiegokolwiek } \vec{k}'$$

$$b = \int_{SB} W(\vec{k}', \vec{k}) [1 - f(\vec{k})] \rho(\vec{k}') f(\vec{k}') d^3 \vec{k}' \quad b - \text{częstość zderzeń przewodzących elektron do stanu } \vec{k} \text{ z jakiegokolwiek } \vec{k}'$$

Człon zderzeniowy równania Boltzmana (tutaj, dla uproszczenia, pomijamy ewentualną zależność od położenia \vec{r}), $W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k})$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} &= b - a = \int_{SB} [W(\vec{k}', \vec{k}) [1 - f(\vec{k})] f(\vec{k}') - W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - f(\vec{k}')] f(\vec{k})] \rho(\vec{k}') d^3 \vec{k}' \\ &= - \int_{SB} W(\vec{k}, \vec{k}') \rho(\vec{k}') [f(\vec{k}) - f(\vec{k}')] d^3 \vec{k}' \end{aligned}$$

2013-06-02

79

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + b - a$$

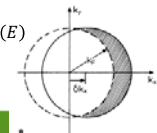
$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} &= b - a = \int_{SB} [W(\vec{k}', \vec{k}) [1 - f(\vec{k})] f(\vec{k}') - W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - f(\vec{k}')] f(\vec{k})] \rho(\vec{k}') d^3 \vec{k}' \\ &= - \int_{SB} W(\vec{k}, \vec{k}') \rho(\vec{k}') [f(\vec{k}) - f(\vec{k}')] d^3 \vec{k}' \end{aligned}$$

Równanie różniczkowo-calkowe, nieliniowe, w ogólnym przypadku niemożliwe do rozwiązania – w pewnych warunkach można je spróbować zlinearyzować:

Zakładamy, że funkcja rozkładu jest bliska stanowi równowagi $f = f_0 + f_1$ i zakładamy specjalną postać $f_1 = \vec{v} \cdot \vec{X}(E)$, gdzie $\vec{X}(E)$ jest funkcją wektorową zależną tylko od energii. Jest to równowazne przyjęciu, że $f(\vec{k}) = f_0(\vec{k} - \vec{\delta})$ (np. przykładamy pole \vec{E} i kula Fermiego przesuwa się o $\vec{\delta}$).

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k} - \vec{\delta}) = f_0(\vec{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_{\vec{k}} E \cdot \vec{\delta} = f_0(E) + \vec{v} \cdot \vec{X}(E)$$

$$(\nabla_{\vec{k}} E = \hbar \vec{v})$$



2013-06-02

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + b - a$$

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k} - \vec{\delta}) = f_0(\vec{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_{\vec{k}} E \cdot \vec{\delta} = f_0(E) + \vec{v} \cdot X(E)$$

Dostajemy

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} = - \int_{SB} W(\vec{k}, \vec{k}') \rho(\vec{k}') [f(\vec{k}) - f(\vec{k}')] d^3 \vec{k}'$$

$$= - \int_{SB} W(\vec{k}, \vec{k}') \rho(\vec{k}') \vec{X}(E) [\vec{v}(\vec{k}) - \vec{v}(\vec{k}')] d^3 \vec{k}'$$

Dla pasma parabolicznego i sferycznego $\rho(\vec{k}) = \frac{2}{(2\pi)^3} = \frac{1}{4\pi^3}$ oraz $\vec{v} = \frac{\hbar}{m^*} \vec{k}$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} = - \frac{1}{4\pi^3} \frac{\hbar}{m^*} \int_{SB} W(\vec{k}, \vec{k}') \vec{X}(E) [\vec{k} - \vec{k}'] d^3 \vec{k}'$$

2013-06-02

81

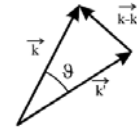
Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + b - a$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} = - \frac{1}{4\pi^3} \frac{\hbar}{m^*} \int_{SB} W(\vec{k}, \vec{k}') \vec{X}(E) [\vec{k} - \vec{k}'] d^3 \vec{k}'$$

Właściwości $W(\vec{k}, \vec{k}')$:

- Zakładamy, że proces rozpraszania jest izotropowy (nie zawsze!)
- Zderzenia są elastyczne $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$



$W(\vec{k}, \vec{k}') = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \Theta(k, \theta)$, gdzie θ – kąt między \vec{k} i \vec{k}' .

Całkujemy w zmiennych sferycznych (składowa $\perp \vec{k}$ po wycałkowaniu po φ daje 0)

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} = - \frac{1}{4\pi^3} \frac{\hbar}{m^*} \int_{BZ} W(\vec{k}, \vec{k}') \vec{X}(E) (\vec{k} - \vec{k}') d^3 \vec{k}' = - \frac{1}{4\pi^3} \frac{\hbar}{m^*} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \delta(k - k') \Theta(k, \vartheta) \vec{X}(E) (\vec{k} - \vec{k}') k^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi dk$$

$$= - \frac{\hbar}{2\pi^2 m^*} \int_0^\pi \Theta(k, \vartheta) \vec{X}(E) \vec{k} (\cos \vartheta - 1) k^2 \sin \vartheta d\vartheta = - \frac{\hbar \vec{X}(E) \vec{k}}{2\pi^2 m^*} \int_0^\pi \Theta(k, \vartheta) (\cos \vartheta - 1) k^2 \sin \vartheta d\vartheta$$

R. Stępniewski.

2013-06-02

82

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + b - a$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} = \frac{\vec{v} \cdot \vec{X}(E)}{2\pi^2} \int_0^\pi \Theta(k, \theta) (\cos \theta - 1) k^2 \sin \theta d\theta$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{zd} \equiv \frac{f_1}{\tau(E)} = f_1 \cdot \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \Theta(k, \theta) (\cos \theta - 1) k^2 \sin \theta d\theta$$

$\tau(E)$ - to czas relaksacji – po wyłączeniu przyczyny zaburzenia funkcji rozkładu:

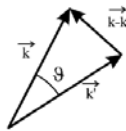
$$f_1(t) = f_1(0) e^{-\frac{t}{\tau(E)}}$$

zmaleje e-razy

W tym przybliżeniu równanie Boltzmana ma postać:

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + \frac{f_1}{\tau(E)} = 0$$

Gdzie $f_1 = f - f_0$.



2013-06-02

83

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + b - a$$

$$f_1(t) = f_1(0) e^{-\frac{t}{\tau(E)}}$$

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \Theta(k, \theta) (\cos \theta - 1) k^2 \sin \theta d\theta$$

Czas relaksacji:

- Zależy od energii. Nie zależy od rodzaju i wielkości zaburzenia, zależy tylko od energii nośnika (elektronu lub dziury) – jest więc dobrym parametrem charakteryzującym dany materiał
- Dla różnych mechanizmów ta zależność może być różna
- Jeśli istnieje szereg niezależnych mechanizmów rozpraszania, to:

$$\frac{1}{\tau(E)} = \sum_i \frac{1}{\tau_i(E)}$$

M. Baj

2013-06-02

84

Równanie Boltzmana

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\vec{v} \cdot \nabla_f f - \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_k f + b - a$$

$$f_1(t) = f_1(0) e^{-\frac{t}{\tau(E)}}$$

$$\frac{1}{\tau(E)} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \Theta(k, \theta) (\cos \theta - 1) k^2 \sin \theta d\theta$$

Podsumowanie:

Rozwiązanie otrzymaliśmy przy założeniach:

- $|f_1| \ll f_0$
- $f_1(\vec{k}) = \vec{v}\vec{X}(E)$
- rozproszenia można uważać za elastyczne i nie wyprowadzają poza pasmo
- Rozproszenia są izotropowe
- Pasma jest sferyczne

Złożony problem rozwiązania nieliniowego równania różniczkowo-całkowego (równania Boltzmana) został sprowadzony do 2 rozdzielnych problemów:

- znalezienia zależności czasu relaksacji od energii
- rozwiązania liniowego równania różniczkowego

M. Baj

2013-06-02

85

Równanie Boltzmana

W ogólności zależności $\tau(E)$ dla różnych mechanizmów rozpraszania mogą być skomplikowane (np.: B.M. Askerov, „*Electron transport phenomena in semiconductors*”, World Scientific 1994, D. K. Ferry, „*Semiconductor transport*”, Taylor & Francis 2000).

Dla **pasma parabolicznego** w wielu przypadkach czas relaksacji daje się opisać zależnością potęgową od energii:

$$\tau(E) = \tau_{0,r}(T) \left(\frac{E}{k_B T} \right)^{(r-\frac{1}{2})}$$

$$l_{tr}(E) = v\tau \sim E^{\frac{1}{2}} E^{(r-\frac{1}{2})} = E^r$$

Czynnik $\tau_{0,r}(T)$ zależy od temperatury z powodu:

- wyłączenia $k_B T$ we wzorze opisującym $\tau(E)$
- dodatkowej zależności – np. poprzez liczbę fononów

Jeśli półprzewodnik jest niezdegenerowany i można stosować rozkład Boltzmana, to $\langle E \rangle \sim k_B T$ i τ zależy od temperatury wyłącznie poprzez czynnik $\tau_{0,r}(T)$

M. Baj

2013-06-02

86

Równanie Boltzmana

fonony akustyczne	p=0	$\tau(E) = A E^{-1/2}$	E – rośnie $\Rightarrow \tau$ maleje
neutralne domieszki	p=1/2	$\tau(E) = A$	τ – stałe
fonony optyczne (dla $E \gg E_f$) (problem z wprowadzeniem pojęcia czasu relaksacji pędowej – istotna zmiana energii)	p=1	$\tau(E) = A E^{1/2}$	E – rośnie $\Rightarrow \tau$ rośnie
zjonizowane domieszki	p=2	$\tau(E) = A E^{3/2}$	E – rośnie $\Rightarrow \tau$ rośnie

R. Stępniewski.

2013-06-02

87

Równanie Boltzmana

Scattering mechanism	Scattering parameter r	$\tau_{0,r}(T)$	A_{0r}
Point defects (short-range potential)	0	$\frac{\pi \hbar^4}{m_e (2m_e k_B T)^{1/2} U_0^2 N_d}$	$\frac{\pi}{\hbar} U_0^2 N_d$
Acoustic phonons (deformation potential)	0	$\frac{2\pi \hbar^4 \rho v_0^2}{E_1^2 (2m_e k_B T)^{3/2}}$	$\frac{\pi E_1^2 k_B T}{\hbar \rho v_0^2}$
Nonpolar optical phonons at high temperatures ($k_B T \gg \hbar \omega_0$)*	0	$\frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar \omega_0}{E_0} \right)^2 \frac{\hbar^2 a^2 \rho}{(2m_e k_B T)^{3/2}}$	$\pi^3 \hbar \left(\frac{E_0}{\hbar \omega_0} \right)^2 \frac{k_B T}{\rho a^2}$
Polar optical phonons at high temperatures ($k_B T \gg \hbar \omega_0$)	1	$\frac{1}{2\pi} \left(\frac{\hbar}{\omega_0 k_B T} \right)^{1/2}$	$\frac{2\pi^2 e^2 k_B T}{\epsilon^* \hbar}$
Piezoeacoustic phonons	1	$\frac{2\pi \hbar^2 \epsilon}{e^2 \Pi_0^2} \left(\frac{2}{m_e k_B T} \right)^{1/2}$	$\frac{\pi e^2 k_B T \Pi_0^2}{2 \hbar \epsilon}$
Impurity ions	2	$\frac{\chi^2 (2m_e)^{1/2} (k_B T)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F_{imp}(e)}$	$\frac{2\pi^2 N_i F_{imp}(k)}{\hbar \chi^2}$

* At low temperatures ($k_B T \ll \hbar \omega_0$) in the case of scattering by polar or nonpolar optical phonons τ does not depend on energy ($r = 1/2$), and for a parabolic band it is given by the formulae (11.63) and (11.84) respectively.

$$\tau^{-1} = A_{0r} k^{-2r} (v) g(k(e)),$$

B.M. Askerov, „*Electron transport phenomena in semiconductors*”

2013-06-02

88