

Wybrane aspekty nanotechnologii



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

Plan wykładu

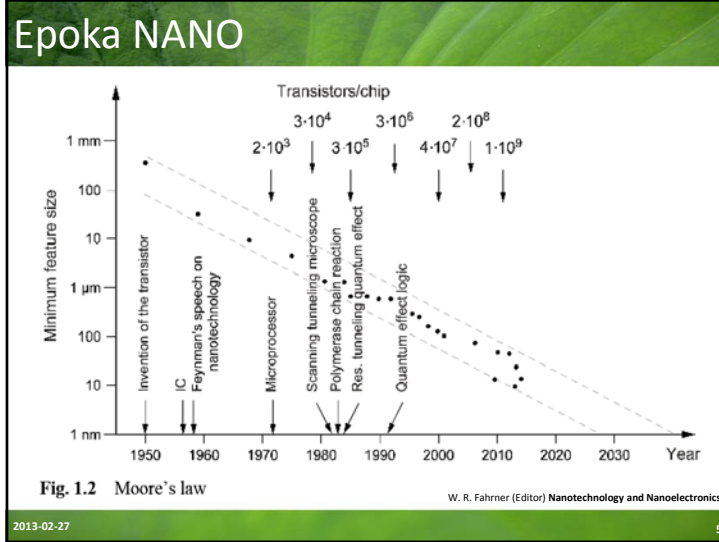
- Powtórzenie. Pasma w półprzewodnikach
- Heterostruktury półprzewodnikowe – studnie kwantowe
- Potencjał harmoniczny. Kropki kwantowe.
- Transport , tunelowanie, blokada kulombowska.
- Obsadzenia stanów, gęstości stanów, poziom Fermiego.
- Heterostruktury domieszkowane na tym p i n. Złącza półprzewodnik-metal. Efekt fotoelektryczny
- Heterostruktury w polach zewnętrznych E i B. Tensor przewodnictwa
- Efekt Halla, kwantowy efekt Halla, ułamkowy efekt Halla

Zasady zaliczenia

1. Kolokwia 2 × 30 % = 60%
2. Egzamin pisemny 40% lub prezentacja 30 min.
3. Egzamin ustny (poprawa ocen)

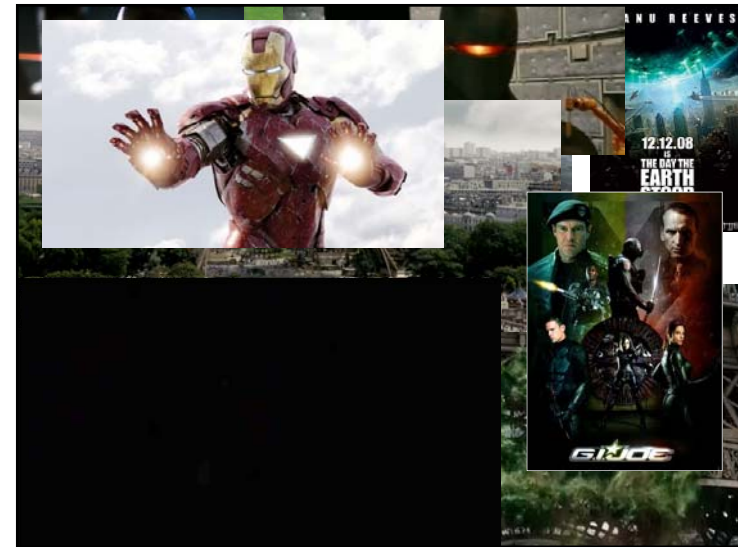
Epoka NANO

Microprocessor Transistor Counts 1971-2011 & Moore's Law



2013-02-27

5



Epoka NANO

Motoryzacja (Hummer H2 sport utility truck)

Budownictwo
Samoczyszczący się beton

Elektronika
Wyświetlacze OLED

Ubrania (Nano-Tex)

AGD
Samoczyszcząca się lodówka Samsung Nano SilverSeal

Kosmetyki

Sport

www.sts.utexas.edu/projects/nanomaterials/

2013-02-27

7

Epoka NANO

The \$585 suits that went on sale today (October 8, 2009) are treated with Titanium Dioxide, a chemical compound commonly used in cosmetics and toothpaste. According to company spokes-person Junko Hirohata, TiO₂ has photocatalytic properties, meaning that it when exposed to light it breaks down organic materials.

Antiviral Business Suits Fight H1N1 Swine Flu With Science & Style

http://www.haruyama.co.jp/

2013-02-27

8

Epoka NANO

Nanotechnologia

$nano = 10^{-9} = \frac{1}{1\,000\,000\,000}$

Chodzi o kontrolę materii w bardzo małej skali, jednej miliardowej części metra. Wytwarzanie i badania obiektów o tak małych rozmiarach wymagają wiedzy zarówno z fizyki jak i z chemii.

$a, b, c < 100\text{ nm}$
Nanocząstki są mniejsze niż 100 nm

Bakteriofag 200 nm

Średnica ludzkiego włosa 100 000 nm

Średnica krwinki czerwonej 6000 nm

Dł. fali światła widzialnego 400-700 nm

Tranzystor w procesorze 25 nm

Nanocząstki 5 nm

Średnica DNA, nanorurek Zn

Promień atomu 0.1 nm

2013-02-27 9

Epoka NANO

2013-02-27 10

Epoka NANO

Farmacja

Technologia chemiczna

Medycyna

Energetyka

Diagnostyka medyczna

Inżynieria materiałowa

Elektronika

Badania podstawowe

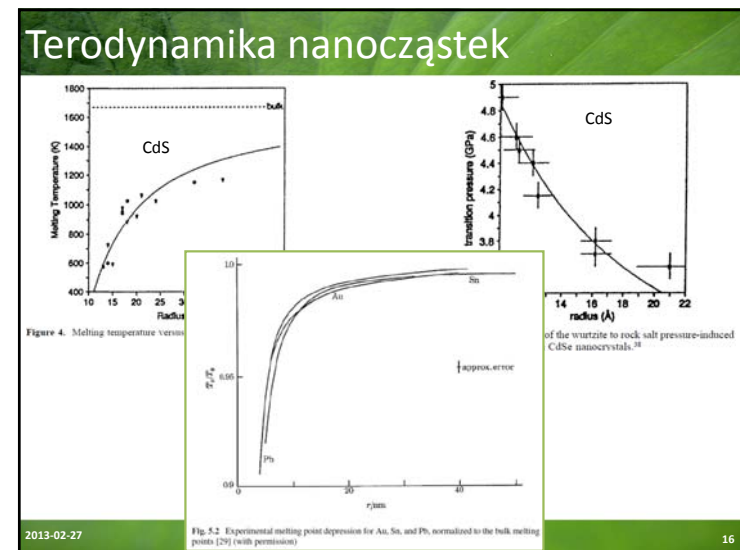
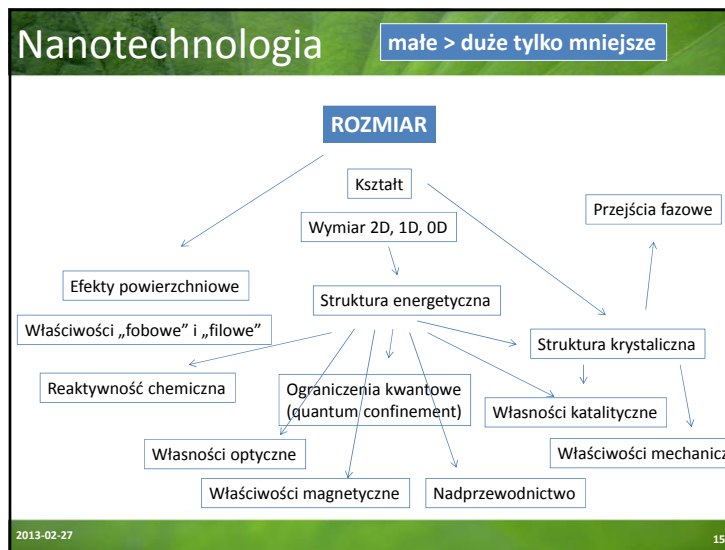
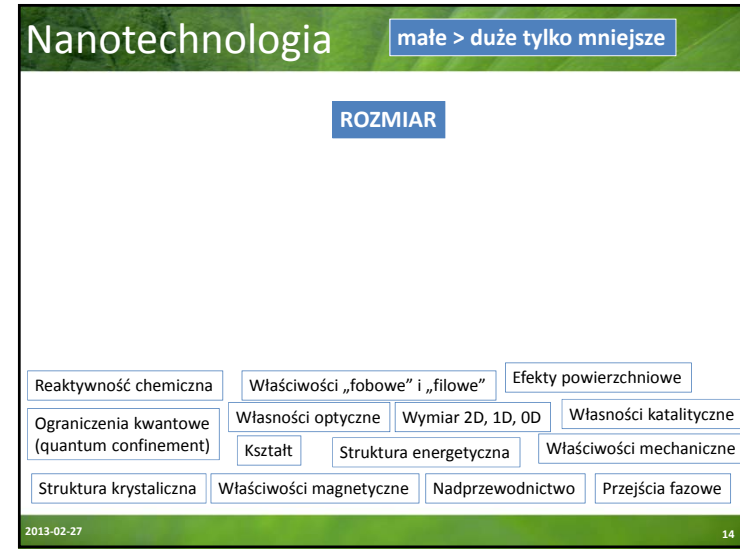
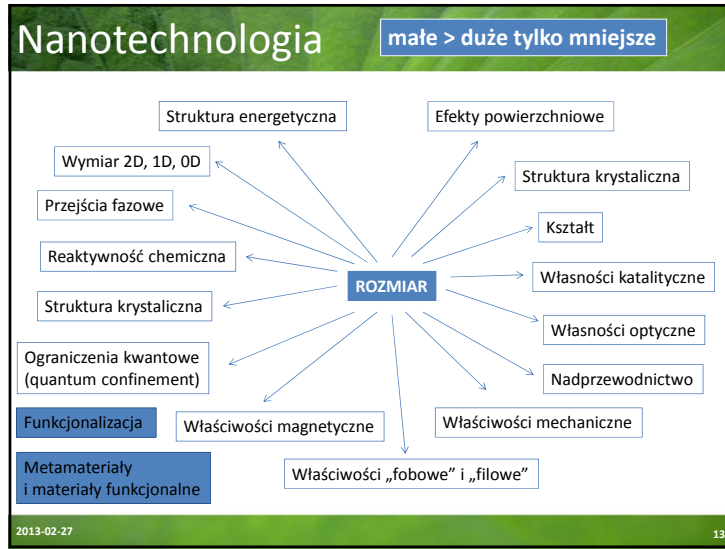
2013-02-27 11

Epoka NANO

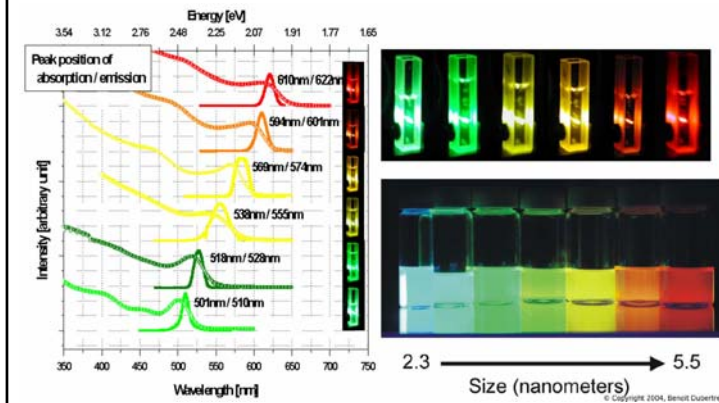
Przykład:

2013-02-27 12

<http://nextbigfuture.com/2011/01/advances-in-field-of-nanoncology.html>



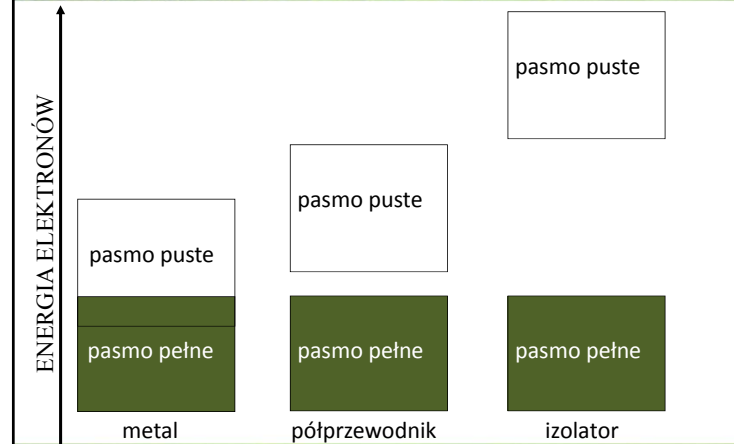
Zasada nieoznaczoności



2013-02-27

17

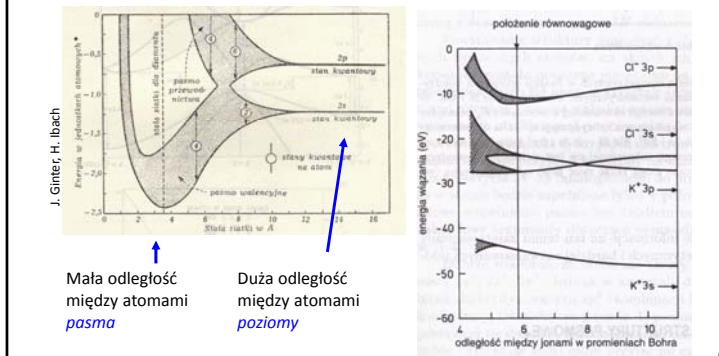
Teoria pasmowa ciał stałych.



2013-02-27

Jak zobaczyć przezi. 18

Pasma w kryształach



Mała odległość między atomami *pasma*
Duża odległość między atomami *poziomy*

H. Ibach

H. Ibach

2013-02-27

19

Pasma w kryształach

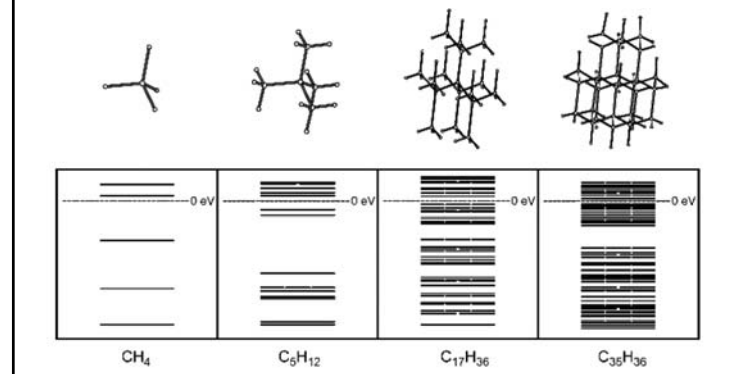


Fig. 2.3 Development of the diamond band gap

W. R. Fahrner (Editor) Nanotechnology and Nanoelectronics

2013-02-27

20

Pasma w kryształach

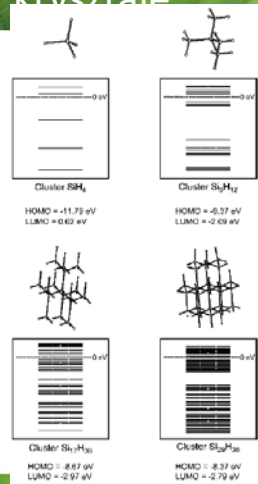


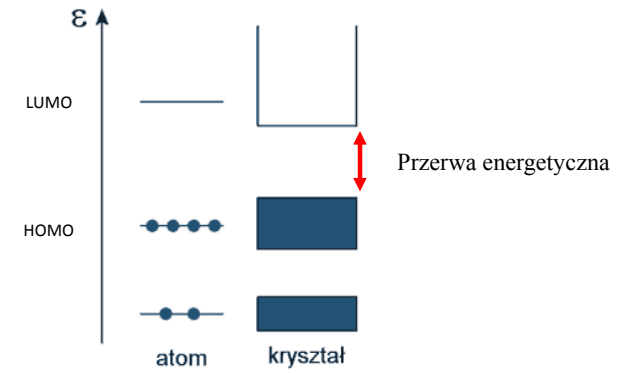
Fig. 2.4 Development of the Si band gap

W. R. Fahrner (Editor) Nanotechnology and Nanoelectronics

2013-02-27

21

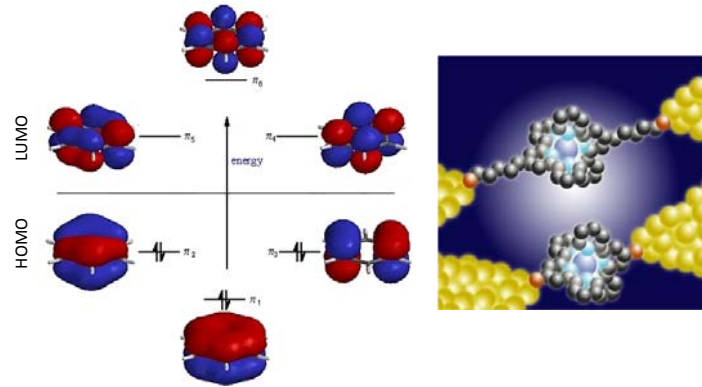
Teoria pasmowa ciał stałych.



2013-02-27

22

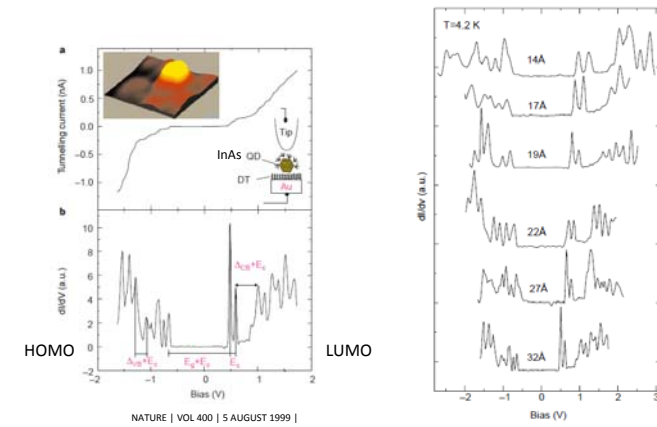
Teoria pasmowa ciał stałych.



2013-02-27

23

Teoria pasmowa ciał stałych.



2013-02-27

24

Teoria pasmowa ciał stałych.

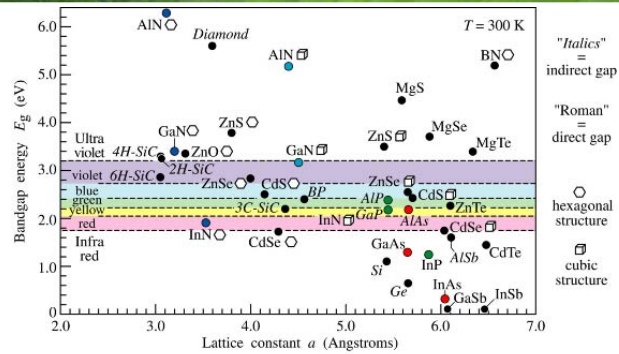


Fig. 11.4. Room-temperature bandgap energy versus lattice constant of common elemental and binary compound semiconductors.

2013-02-27

25

Pasma w kryształach

Twierdzenie Blocha

Przykład:

Ruch elektronu w potencjale periodycznym.

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

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

2013-02-27

26

Pasma w kryształach

Twierdzenie Blocha

Przykład:

Ruch elektronu w potencjale periodycznym.

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

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

Rozwiązaniem jest oczywiście:

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

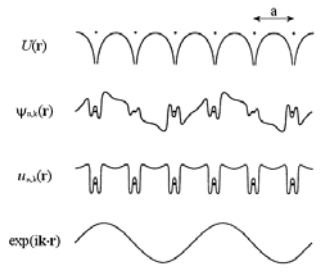
łatwo można pokazać (np. Kittel, Ibach), że:

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

Tym razem $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ dostajemy

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

Zaraz do tego wrócimy!



2013-02-27

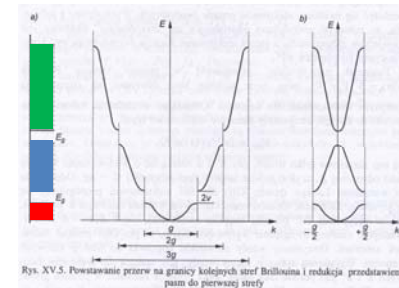
27

Pasma w kryształach

Twierdzenie Blocha

•Ponieważ funkcja Blocha przesunięta o wektor sieci odwrotnej nie zmienia się to wygodnie jest przedstawiać wyniki tylko w 1-szej strefie Brillouina. Trzeba wówczas numerować pasma energetyczne.

•Stan elektronu w ciele stałym zadany jest przez wektor falowy z 1-szej strefy, numer pasma oraz rzut spinu.



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

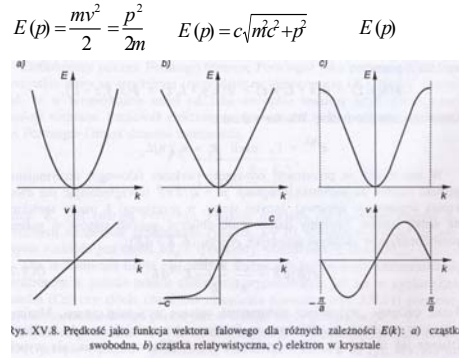
T. Stacewicz & A. Witowski

2013-02-27

28

Pasma w kryształach

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.



2013-02-27

29

Pasma w kryształach

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

Przybliżenie kp

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

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

Funkcja Blocha w równaniu Schrodingera:

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

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

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

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

2013-02-27

30

Pasma w kryształach

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

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

Właściwości równania kp :

- Nazwa równania ze względu na występowanie członu proporcjonalnego do kp .
- Jest to równanie na periodyczną część funkcji Blocha $u_{n,\mathbf{k}}$.
- Dla $k=0$ równanie jest analogiczne jak dla pełnej funkcji $\Psi(\mathbf{r})$, ale rozwiązania poszukujemy w postaci funkcji periodycznej.
- Znając rozwiązania dla $k=0$ znamy rozwiązanie dla dowolnego k stosując rachunek zaburzeń.
- Zależność $E_n(\mathbf{k})$ jest funkcją analityczną, zatem funkcją ciągłą – pasmo energetyczne.

2013-02-27

31

Pasma w kryształach

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

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

Założmy że:

- znamy energię dla $k=0$ - punkt Γ (w ogólności dla danego k_0)
- znając energię w punkcie Γ rachunkiem zaburzeń można wyznaczyć energie wokół punktu Γ .

Oznaczmy:

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \quad E' = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \quad \mathbf{H}' = \frac{\hbar}{m}\mathbf{k}\hat{p}$$

2013-02-27

32

Pasma w kryształach

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

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

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

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

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

Jeśli rozwijamy wokół ekstremum $a_i=0$

liniowe w \mathbf{k}

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

2013-02-27

33

Pasma w kryształach

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \sum_{ij} m^{-1}_{ij} \frac{\hbar^2 k_i k_j}{2}$$

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

$$m^{-1}_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{l \neq n} \frac{\hbar^2 \int u_{n,0}^* \frac{\partial u_{l,0}}{\partial x_i} d_3r \int u_{l,0}^* \frac{\partial u_{n,0}}{\partial x_j} d_3r}{E_n - E_l}$$

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

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

2013-02-27

34

Pasma w kryształach

Masa efektywna. Przybliżenie kp

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

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

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

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

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

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

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

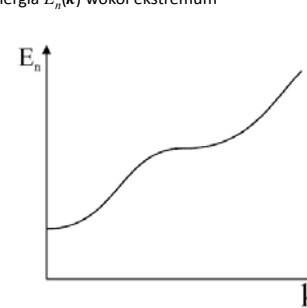
2013-02-27

35

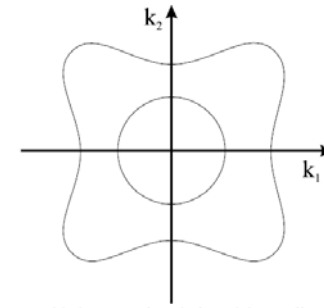
Pasma w kryształach

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. Stepniowski

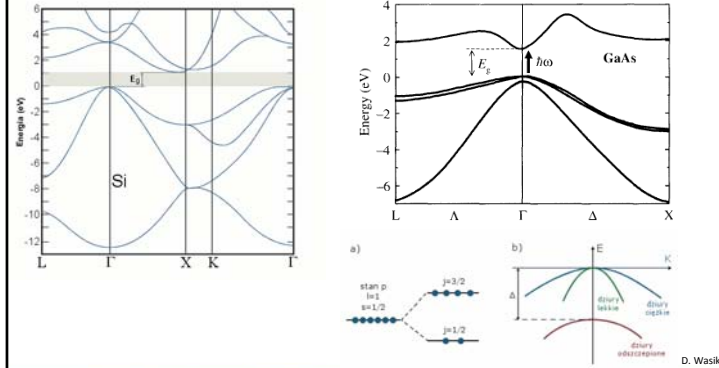
2013-02-27

36

Pasma w kryształach

Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:



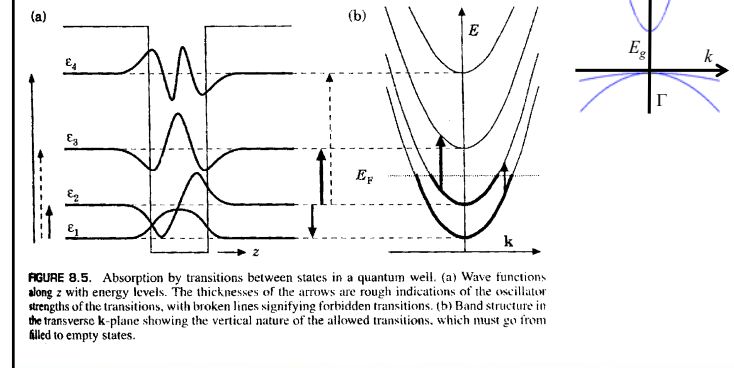
2013-02-27

37

Pasma w kryształach

Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:



2013-02-27

38

Pasma w kryształach

Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:

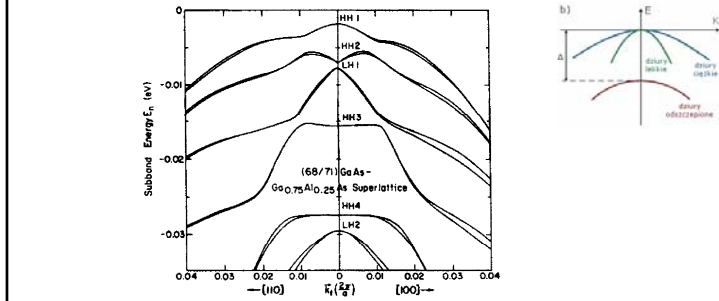
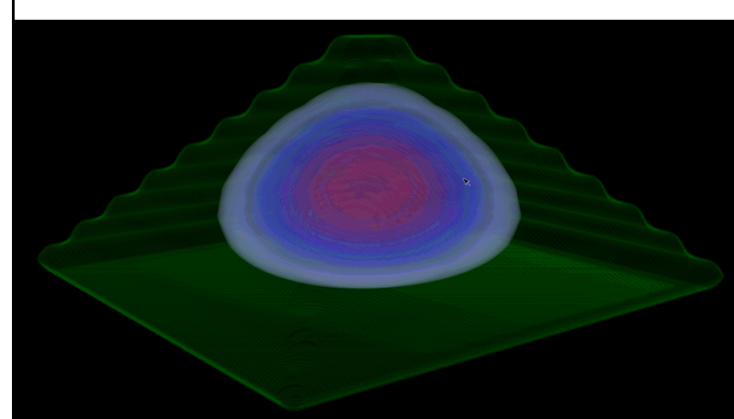


FIGURE 10.4. Valence-band structure in a multiquantum well as a function of k along two directions. The wells comprise 68 atomic layers of GaAs with barriers of 71 atomic layers of $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$. [From Chang and Schulman (1985).]

2013-02-27

39

Teoria pasmowa ciał stałych.



<https://nanohub.org/resources/10751>

2013-02-27

40

Pasma w kryształach

Siła zewnętrzna

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

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

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

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

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

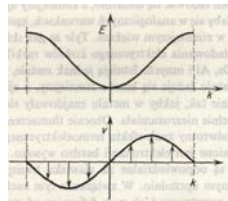
$$\hbar \Delta k = F\Delta t$$

Masa efektywna zachowuje się jak „zwykła” masa

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

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

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



2013-02-27

41

Pasma w kryształach

Kwazicząstki - dziury

Dla opisanego 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:

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

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

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

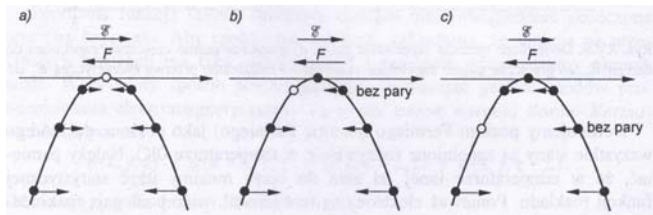
2013-02-27

42

Pasma w kryształach

Kwazicząstki - dziury

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

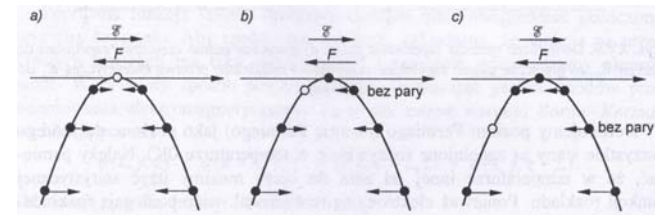
2013-02-27

43

Pasma w kryształach

Kwazicząstki - dziury

Dla opisanego 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

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

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

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

2013-02-27

44

Funkcja rozkładu

Własności pasm

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu kwantowego o energii E
 E_F – potencjał chemiczny

Fermiony:

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

Elektrony
 Dziury
 Triony (ekscytony naładowane)

Bozony:

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

Polaritony
 Fonony
 Magnony
 Ekscytony, bieksycytony
 Plazmony

Rozkład Boltzmana:

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

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

$$F = U - TS$$

Anyons – np. composite fermions $|\psi_1 \psi_2\rangle = e^{i\theta} |\psi_2 \psi_1\rangle$
 Slave fermions (chargon, holon, spinon) = fermion+bozon w separacji spin-tadunek

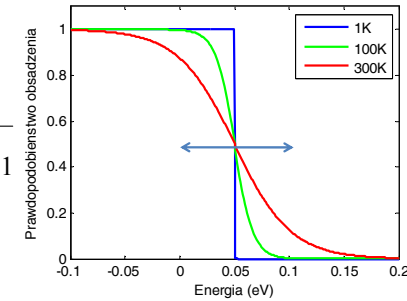
2013-02-27

45

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

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



Enrico Fermi
 1901 – 1954



Paul Adrian
 Maurice Dirac
 1902 – 1984

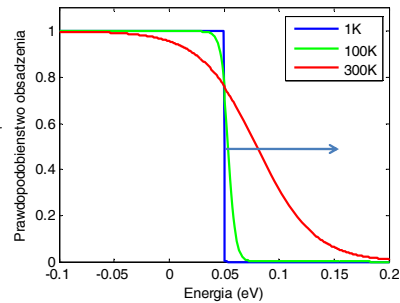
2013-02-27

46

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

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



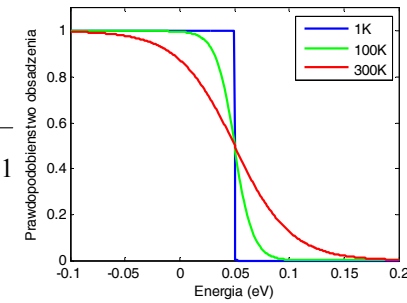
2013-02-27

47

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

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



2013-02-27

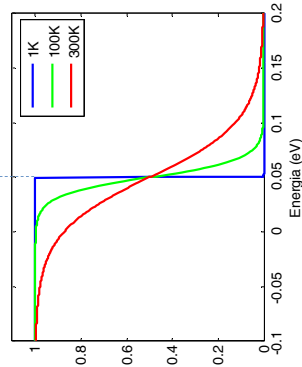
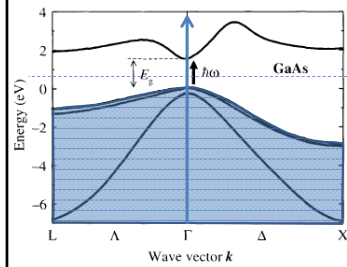
48

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu kwantowego o energii E
 E_F – potencjał chemiczny

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



2013-02-27

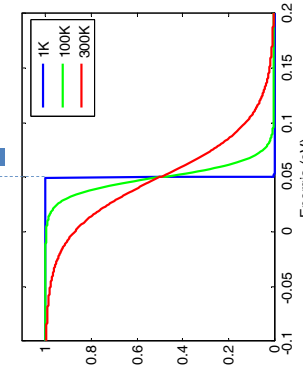
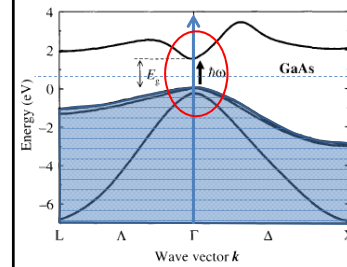
49

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu kwantowego o energii E
 E_F – potencjał chemiczny

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

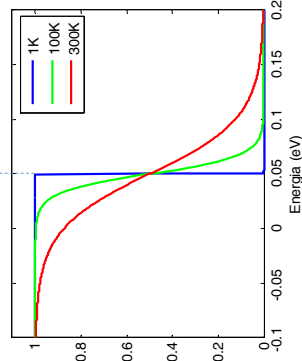
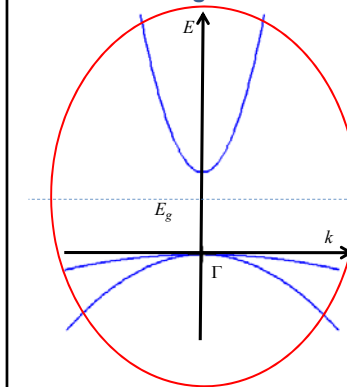


2013-02-27

50

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

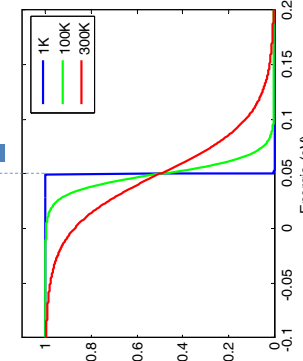
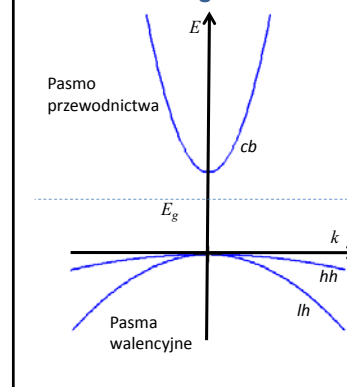


2013-02-27

51

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca

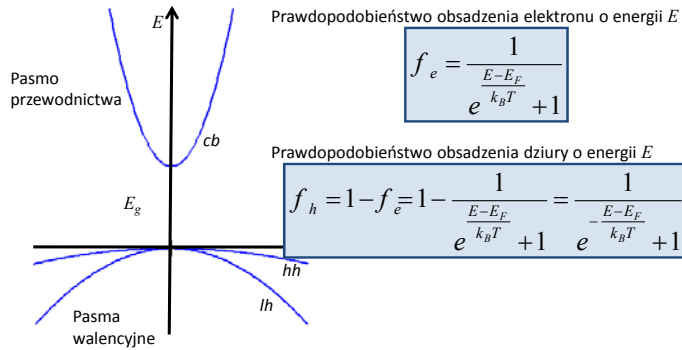


2013-02-27

52

Funkcja rozkładu

Rozkład Fermiego-Diraca



2013-02-27

53

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

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

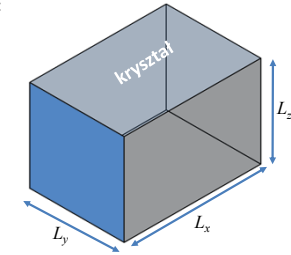
Warunki Borna-Karmana

Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

Ψ – postać funkcji Blocha

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

$$\begin{cases} e^{ik_x L_x} = 1 \\ e^{ik_y L_y} = 1 \\ e^{ik_z L_z} = 1 \end{cases} \quad \vec{k}_i = 0, \pm \frac{2\pi}{L_x}, \pm \frac{4\pi}{L_x}, \dots, \pm \frac{2\pi n_x}{L_x}$$



Stany te wyznaczają w przestrzeni odwrotnej siatkę o gęstości $(1/2\pi)^3$
Gęstość stanów na jednostkę trójwymiarowej przestrzeni k

2013-02-27

54

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

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

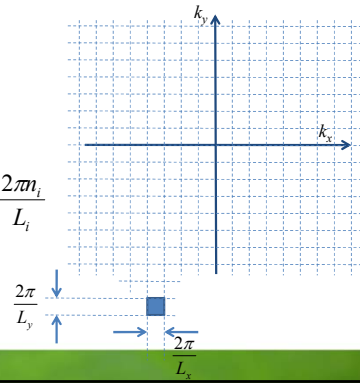
Warunki Borna-Karmana

Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

Ψ – postać funkcji Blocha

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

$$\begin{cases} e^{ik_x L_x} = 1 \\ e^{ik_y L_y} = 1 \\ e^{ik_z L_z} = 1 \end{cases} \quad \vec{k}_i = 0, \pm \frac{2\pi}{L_x}, \pm \frac{4\pi}{L_x}, \dots, \pm \frac{2\pi n_x}{L_x}$$



2013-02-27

55

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

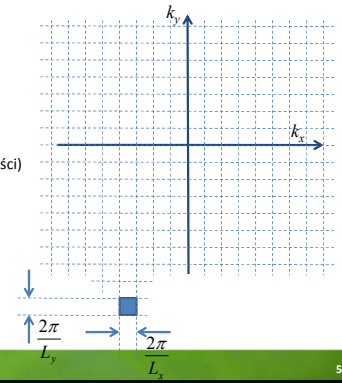
Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów k jest skończony (choć olbrzymi!), np. możemy przyjąć okresowe warunki brzegowe i wtedy:

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

$$\text{Ilość stanów w objętości} = \frac{1}{\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} \times \frac{2\pi}{L_z}} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

Gęstość stanów w przestrzeni k (w jednostkowej objętości)

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



2013-02-27

56

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

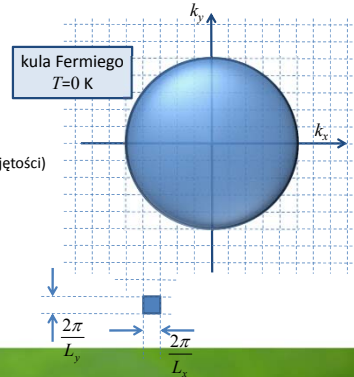
Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów k jest skórczony (choć olbrzymi!), np. możemy przyjąć periodyczne warunki brzegowe i wtedy:

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

$$\text{Ilość stanów w objętości} = \frac{1}{\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} \times \frac{2\pi}{L_z}} = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

Gęstość stanów w przestrzeni k (w jednostkowej objętości)

$$\rho_k = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \quad \leftarrow \text{przypadek 3D}$$



2013-02-27

57

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

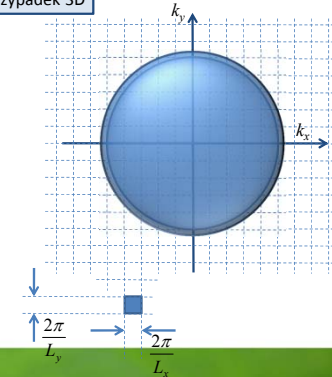
Często wygodniejsza jest znajomość gęstości stanów w przestrzeni energii E (a więc ilość stanów w przedziale $(E, E+dE)$). Dla pasma sferycznego i parabolicznego:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \rho_k = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \quad \leftarrow \text{przypadek 3D}$$

gęstość stanów liczymy jako:

$$N(E)dE = \rho_k d\vec{k} = \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

Przy tablicy



2013-02-27

58

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

Często wygodniejsza jest znajomość gęstości stanów w przestrzeni energii E (a więc ilość stanów w przedziale $(E, E+dE)$). Dla pasma sferycznego i parabolicznego:

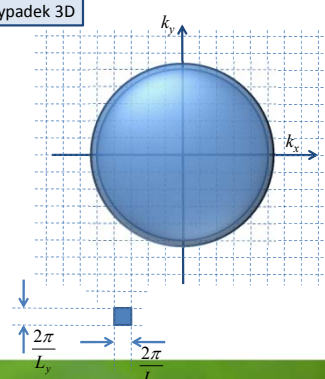
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \rho_k = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \quad \leftarrow \text{przypadek 3D}$$

gęstość stanów liczymy jako:

$$N(E)dE = \rho_k d\vec{k} = \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

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

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



2013-02-27

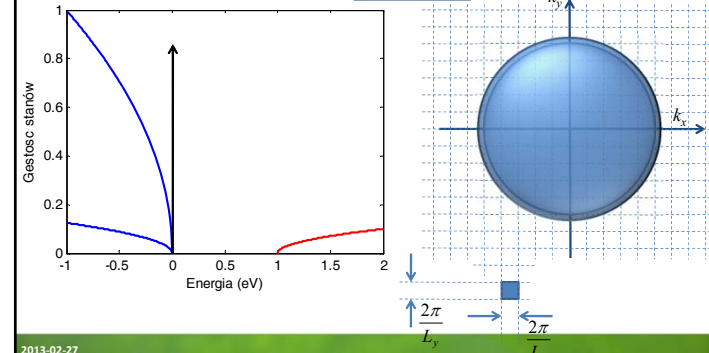
59

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

Często wygodniejsza jest znajomość gęstości stanów w przestrzeni energii E (a więc ilość stanów w przedziale $(E, E+dE)$). Dla pasma sferycznego i parabolicznego:

$$\rho_k = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \quad \leftarrow \text{przypadek 3D}$$



2013-02-27

60

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

Często wygodniejsza jest znajomość gęstości stanów w przestrzeni energii E (a więc ilość stanów w przedziale $(E, E+dE)$). Dla pasma sferycznego i parabolicznego:

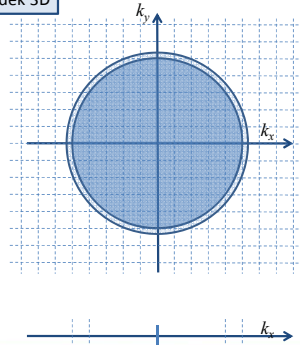
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \rho_k = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \quad \leftarrow \text{przypadek 3D}$$

gęstość stanów liczymy jako:

Do domu: znajdź $N(E)$

$$\rho_k = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \quad \leftarrow \text{przypadek 2D}$$

$$\rho_k = \frac{2}{2\pi} \quad \leftarrow \text{przypadek 1D}$$



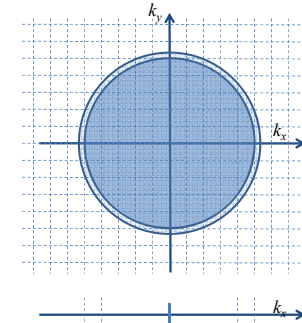
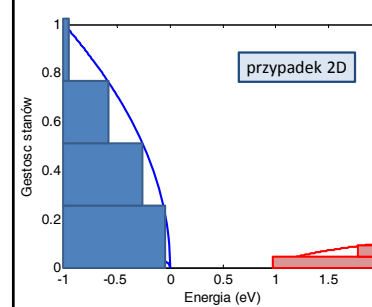
2013-02-27

61

Elektrony i dziury

Gęstość stanów

Często wygodniejsza jest znajomość gęstości stanów w przestrzeni energii E (a więc ilość stanów w przedziale $(E, E+dE)$). Dla pasma sferycznego i parabolicznego:



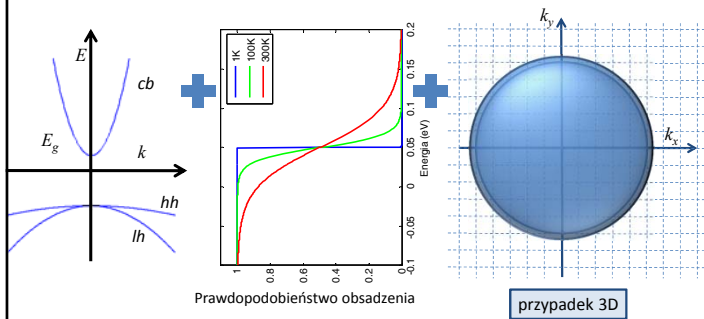
2013-02-27

62

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

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



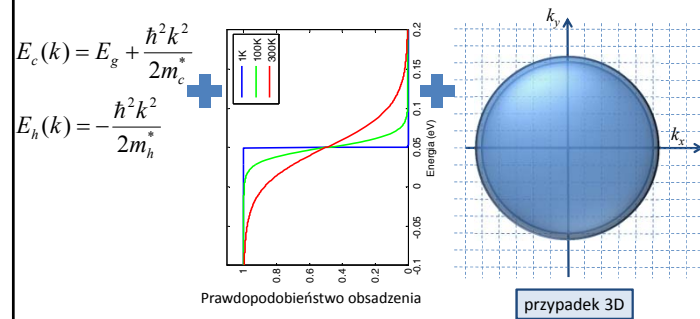
2013-02-27

63

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

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



2013-02-27

64

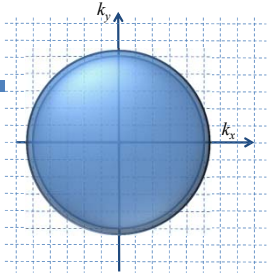
Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

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

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*}$$

$$E_v(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$$

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


przypadek 3D

2013-02-27

65

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

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

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*}$$

$$E_v(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*}$$

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

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

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

2013-02-27

66

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

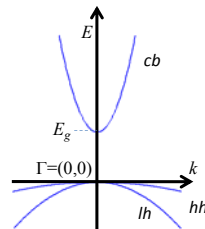
W półprzewodnikach samoistnych w warunkach równowagi termodynamicznej, elektrony w paśmie przewodnictwa pojawiają się wyłącznie wskutek wzbudzenia z pasma walencyjnego.

$$n = p = n_i$$

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

$$f_h = 1 - f_0 = \frac{1}{1 + e^{\frac{(E-E_F)}{k_0 T}}} \approx e^{\frac{(E-E_F)}{k_0 T}}$$

$$N_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_g}$$

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


2013-02-27

67

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

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

$$n = p = n_i$$

$$n(E_F) = \int_{E_g}^{\infty} f_e N(E) dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_g}^{\infty} e^{-\frac{(E-E_F)}{k_0 T}} \sqrt{E - E_g} dE$$

$$n = 2 \left(\frac{m_c^* k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_F - E_g}{k_B T}} = N_c e^{\frac{E_F - E_g}{k_B T}}$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} f_h g_h dE$$

$$p = 2 \left(\frac{m_h^* k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{(E_F - E_v)}{k_B T}} = N_v e^{-\frac{(E_F - E_v)}{k_B T}}$$

2013-02-27

68

Koncentracja samoistna

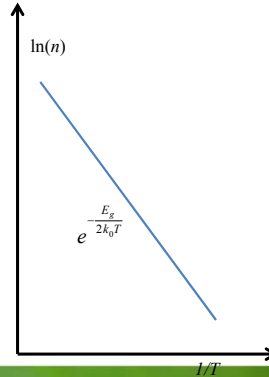
Jaka jest koncentracja nośników dla T>0?

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

$$n = p = n_i$$

$$n \cdot p = n^2 = 4 \left(\frac{k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{k_0 T}} = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{k_0 T}}$$

$$n = p = 2 \left(\frac{k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{E_g}{2k_0 T}} = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2k_0 T}}$$



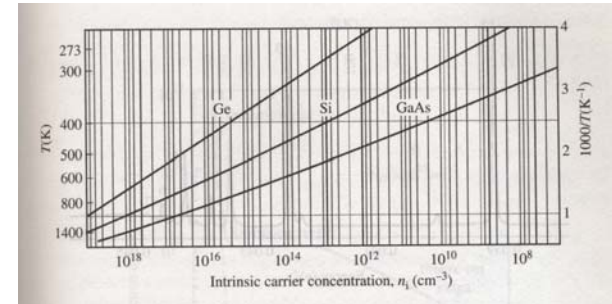
2013-02-27

69

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla T>0?

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



J. Singleton

2013-02-27

70

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla T>0?

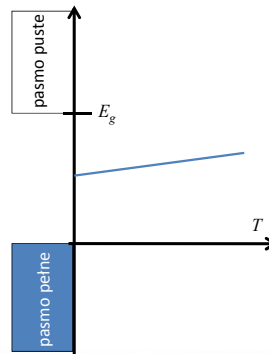
W półprzewodnikach samoistnych w warunkach równowagi termodynamicznej, elektrony w paśmie przewodnictwa pojawiają się wyłącznie wskutek wzbudzenia z pasma walencyjnego.

$$n = p = n_i$$

$$n \cdot p = n^2 = 4 \left(\frac{k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_g}{k_0 T}} = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{k_0 T}}$$

$$n = p = 2 \left(\frac{k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_e^* m_h^*)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{E_g}{2k_0 T}} = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2k_0 T}}$$

$$\frac{N_c}{N_v} = e^{\frac{(2E_F - E_g)}{k_0 T}} \Rightarrow E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4} k_0 T \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right)$$



2013-02-27

71

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla T>0?

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

Koncentracja samoistna typowych półprzewodników

E _g \ T	77K	300K	1200K	materiał
0,25eV	10 ⁹ cm ⁻³	10 ¹⁶ cm ⁻³	10 ¹⁸ cm ⁻³	InSb PbSe
1eV	-	10 ¹⁰ cm ⁻³	10 ¹⁷ cm ⁻³	Ge, Si, GaAs
4eV	-	-	10 ¹¹ cm ⁻³	ZnS, SiC, GaN, ZnO, C (diament)

Dr. Szepliewski

W powyższej tabelce wartości poniżej 10¹⁰ cm⁻³ nie mają sensu gdyż koncentracja zanieczyszczeń, a co za tym idzie koncentracja wynikająca z nieintencjonalnego domieszkania jest większa

$$n = p = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2k_0 T}} \quad n = N_c e^{-\frac{(E_F - E_c)}{k_B T}}$$

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

2013-02-27

72

Koncentracja samoistna

Jaka jest koncentracja nośników dla $T > 0$?

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

Widać że wartość przerwy energetycznej nie jest wystarczającym kryterium na rozróżnienie półprzewodników i izolatorów, np. czysty Ge, Si i GaAs mają w temperaturze pokojowej bardzo niską koncentrację nośników co czyni je materiałami o właściwościach izolatorów.

Lepsze kryterium – dla półprzewodników istnieje możliwość domieszkania powodującego znaczące zmiany koncentracji i typu przewodnictwa (elektrony lub dziury).

2013-02-27

73

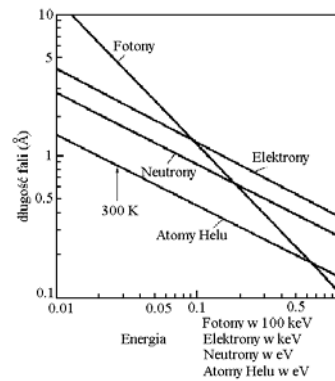
Równanie Schrodingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

2013-02-27

74

Równanie Schrodingera



2013-02-27

75

Równanie Schrodingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Gdy potencjał nie zależy od czasu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t).$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) g(t)$$

$$i\hbar \varphi(\vec{r}) \frac{dg(t)}{dt} = g(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r})$$

$$\frac{i\hbar}{g(t)} \frac{dg(t)}{dt} = \frac{1}{\varphi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) \quad \Rightarrow \quad \frac{dg(t)}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} g(t)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}).$$

2013-02-27

S. Kryszewski Gdańsk 2010

76

Równanie Schrodingera

$$\hat{H} \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$$

$$g(t) = C_0 \exp\left[-\frac{iE}{\hbar}(t - t_0)\right]$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \exp\left[-\frac{iE}{\hbar}(t - t_0)\right]$$

$$\frac{dg(t)}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} g(t)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})\right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$$

2013-02-27

S. Kryszewski Gdańsk 2010 77

Pakiet falowy

$$\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x\right)$$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$$

$$= |A|^2 a \sqrt{\pi} \implies A = \left(\frac{1}{a^2 \pi}\right)^{1/4}$$

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x\right) \quad \rho(x, 0) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$$

$$\Delta x = a$$

2013-02-27

S. Kryszewski Gdańsk 2010 78

Pakiet falowy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) e^{ikx - i\omega t} \quad \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 0$$

Zauważmy, że

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) e^{ikx} \text{ to transformata Fouriera } C(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx}$$

Pakiet Gaussowski:

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{a^2 \pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x\right]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha y^2 + \beta y} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right)$$

2013-02-27

S. Kryszewski Gdańsk 2010 79

Pakiet falowy

$$C(k) = \left(\frac{a^2}{4\pi^3}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2} a^2 (k_0 - k)^2\right]$$

$$\left(\frac{a^2}{4\pi^3}\right)^{1/4} = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}}$$

$$|C(k)|^2 = \left(\frac{a^2}{4\pi^3}\right)^{1/2} \exp\left[-a^2 (k_0 - k)^2\right]$$

Pakiet Gaussowski:

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{a^2 \pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x\right]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha y^2 + \beta y} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right)$$

2013-02-27

S. Kryszewski Gdańsk 2010 80

Pakiet falowy

$$\psi(x, t) = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left[-\frac{a^2}{2} (k - k_0)^2 + ikx - \frac{i\hbar k^2}{2m} t \right]$$

Wyprowadzenie:

$$\begin{aligned} w &= -\frac{a^2}{2} (k^2 - 2kk_0 + k_0^2) + ikx - \frac{i\hbar k^2}{2m} t \\ &= -k^2 \left(\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) + k (a^2 k_0 + ix) - \frac{k_0^2 a^2}{2} \\ &= -\alpha k^2 + \beta k - \frac{1}{2} k_0^2 a^2, \end{aligned}$$

$$\psi(x, t) = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} k_0^2 a^2 \right) \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\alpha k^2 + \beta k}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha y^2 + \beta y} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right)$$

2013-02-27

S. Kryszewski Gdańsk 2010 81

Pakiet falowy

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} k_0^2 a^2 \right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right) \\ &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\pi}{\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} k_0^2 a^2 + \frac{(a^2 k_0 + ix)^2}{4 \left(\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m} \right)} \right] \\ &= \frac{A}{\sqrt{1 + i\sigma t}} \exp \left[-\frac{1}{2} k_0^2 a^2 + \frac{(a^2 k_0 + ix)^2}{2a^2(1 + i\sigma t)} \right], \quad \sigma = \frac{\hbar}{ma^2} \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha y^2 + \beta y} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right)$$

2013-02-27

S. Kryszewski Gdańsk 2010 82

Pakiet falowy

Porządkujemy wyrażenie:

$$\begin{aligned} w' &= -\frac{1}{2} k_0^2 a^2 + \frac{k_0^2 a^4 + 2ik_0 x a^2 - x^2}{2a^2(1 + i\sigma t)} \\ &= \frac{-x^2 + 2ik_0 x a^2 - i\sigma k_0^2 a^4}{2a^2(1 + i\sigma t)}. \end{aligned}$$

$$w' = \frac{-x^2 + ik_0 x (2a^2 + 2a^2 i\sigma t) - ik_0 x \cdot 2a^2 i\sigma t - i\sigma k_0^2 a^4}{2a^2(1 + i\sigma t)}$$

$$= ik_0 x + \frac{-x^2 + 2k_0 x a^2 \sigma t - i\sigma k_0^2 a^4}{2a^2(1 + i\sigma t)}$$

$$w' = ik_0 x + \frac{-x^2 + 2k_0 x a^2 \sigma t - k_0^2 a^4 \sigma^2 t^2 + k_0^2 a^4 \sigma^2 t^2 - i\sigma k_0^2 a^4}{2a^2(1 + i\sigma t)}$$

$$= ik_0 x + \frac{-(x - k_0 a^2 \sigma t)^2 - i\sigma k_0^2 a^4 - k_0^2 a^4 (i\sigma t)^2}{2a^2(1 + i\sigma t)}$$

$$= ik_0 x - \frac{(x - k_0 a^2 \sigma t)^2}{2a^2(1 + i\sigma t)} - \frac{1}{2} i\sigma k_0^2 a^2.$$

2013-02-27

Pakiet falowy

Porządkujemy wyrażenie:

$$k_0 a^2 \sigma = k_0 a^2 \frac{\hbar}{ma^2} = \frac{\hbar k_0}{m} = v_0,$$

$$\frac{1}{2} \sigma k_0^2 a^2 = \frac{1}{2} v_0 k_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m} = \omega_0.$$

$$w' = ik_0 x - i\omega_0 t - \frac{(x - v_0 t)^2}{2a^2(1 + i\sigma t)}$$

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + i\sigma t}} e^{ik_0 x - i\omega_0 t} \exp \left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{2a^2(1 + i\sigma t)} \right]$$

2013-02-27

S. Kryszewski Gdańsk 2010 84

Pakiet falowy

$$\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x\right) \quad \sigma = \frac{\hbar}{ma^2}$$

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1+i\sigma t}} e^{ik_0x - i\omega_0 t} \exp\left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{2a^2(1+i\sigma t)}\right]$$

85

Pakiet falowy

$$\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x\right) \quad \sigma = \frac{\hbar}{ma^2}$$

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1+i\sigma t}} e^{ik_0x - i\omega_0 t} \exp\left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{2a^2(1+i\sigma t)}\right]$$

$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$
 $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
 $\hbar = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$
 $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 6.582 \cdot 10^{-16} \text{ eV s}$
 $e = -1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

86

Pakiet falowy

$$|\psi(x)|^2 = |a|^2 \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma_x}\right)^2\right]$$

$$a = (2\pi\sigma_x^2)^{-1/4}$$

$$\sigma^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

$$\sigma^2 = \int x^2 |\psi(x)|^2 dx = \sigma_x^2$$

$$A(k) = (8\pi\sigma_x^2)^{1/4} \exp[-\sigma_x^2 k^2]$$

$$|A(k)|^2 = (8\pi\sigma_x^2)^{1/2} \exp[-2\sigma_x^2 k^2]$$

$$\frac{1}{2\sigma_k^2} = 2\sigma_x^2 \quad |\sigma_x \sigma_k| = \frac{1}{2} \quad |\sigma_x \sigma_k| \geq |\sigma_x \sigma_k| \quad |\sigma_x \sigma_k| \geq \frac{1}{2}$$

87

Pakiet falowy

Cząstka masowa (elektron) i bezmasowa (foton)

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

$A(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2$$

foton $\omega = kc$
elektron $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$$\omega(k) = \omega_0 + v_g(k - k_0) + \beta(k - k_0)^2$$

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha + i\beta t} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} e^{-\frac{(x - v_g t)^2}{4(\alpha + i\beta t)}}$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\pi}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} e^{-\frac{\alpha(x - v_g t)^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 t^2)}}$$

88