

„Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych”

Wykład 14

Tomasz Kazimierczuk

Zakład Fizyki Ciała Stałego
Instytut Fizyki Doświadczalnej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

Na podstawie materiałów prof. M. Baja

POJEMNOŚĆ CIEPLNA SIECI KRYSTALICZNEJ

Pojemność cieplna sieci krystalicznej

- Doświadczalna obserwacja – w wysokich temperaturach molowe ciepło przy stałej objętości $C_V=3R$. Jest to zgodne z modelem klasycznym i zasadą ekwipartycji energii – prawo Dulonga-Petita ($\sim 3N_A$ jednowymiarowych oscylatorów na mol, na każdy wypada średnio kT energii $\Rightarrow$ molowa pojemność cieplna $3RT$). Jednak w niskich temperaturach $T \rightarrow 0$ w niemetalech $C_V \sim T^3$ (a prawo Dulonga-Petita przewiduje $C_V = \text{const}$)
- Wkład fononów do energii wewnętrznej (na jednostkę objętości, bo $\rho(\vec{q})$ jest liczone na jednostkę objętości):

$$U(T) = \sum_s \int_{1SB} \hbar \omega_s(\vec{q}) \langle n_{s\vec{q}}(T) \rangle \rho(\vec{q}) d_3q \quad \text{gdzie } s \text{ numeruje gałęzie fononów}$$

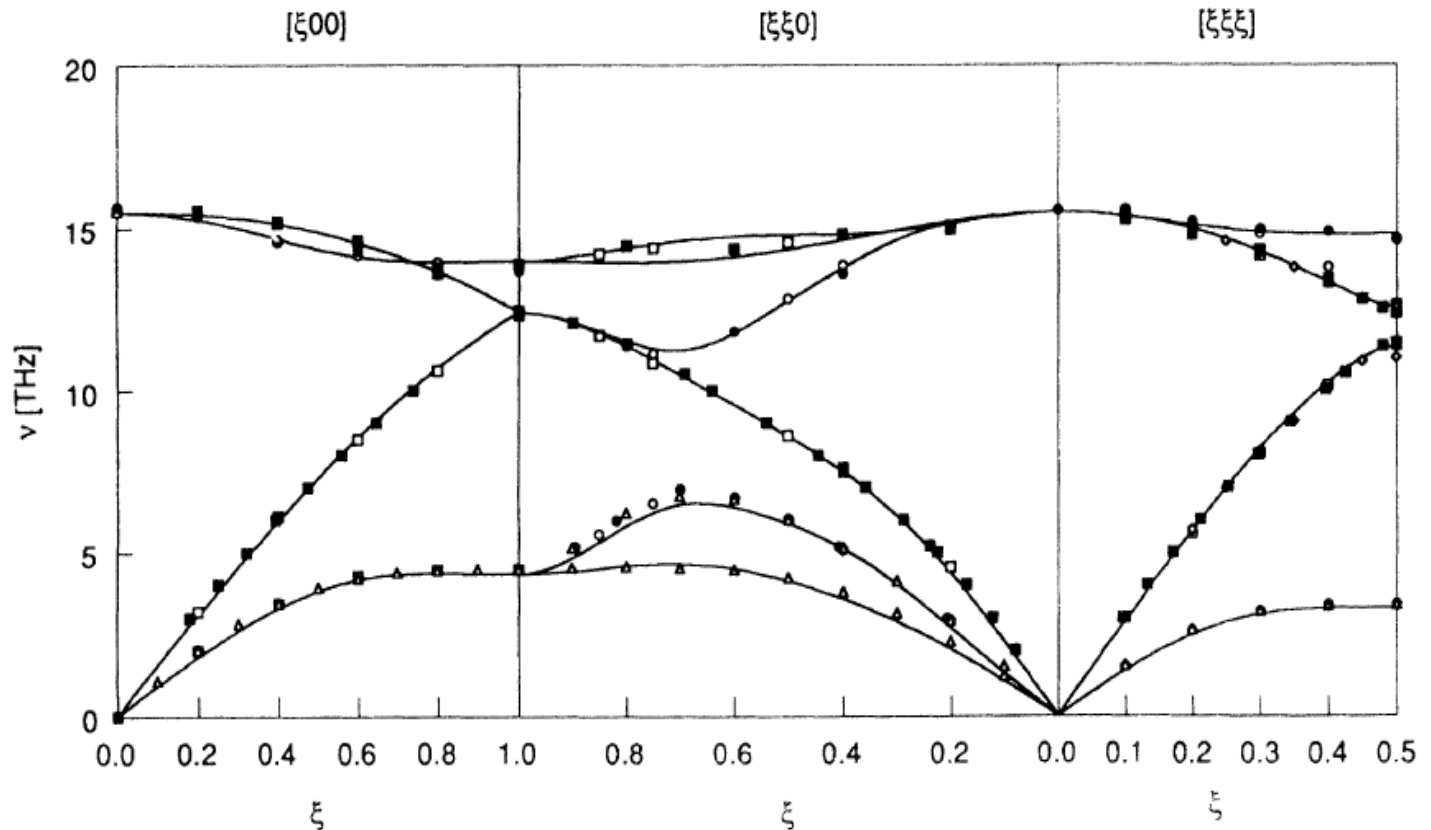
- Znajomość relacji dyspersyjnych dla wszystkich gałęzi fononowych pozwala znaleźć fononowy wkład do $U(T)$ i ciepło przy stałej objętości liczone na jednostkę objętości:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

Drgania sieci krystalicznej, fonony

Krzem Si, $r = 2$

1 THz $\approx$ 4 meV



J. Kulda et al., *Physical Review B* **50**, 13347 (1994)

Pojemność cieplna sieci krystalicznej

- Dwa proste analityczne modele fononowego wkładu do pojemności cieplnej sieci krystalicznej:

1. Model Einsteina: zbiór $3N$ oscylatorów kwantowych, wszystkie o jednakowej energii $\hbar\omega_0$ (model w przybliżeniu słuszny dla fononów optycznych dla których $\omega(\vec{q}) \approx \text{const}$)

$$U(T) = 3N \cdot \hbar\omega_0 \cdot \langle n(T) \rangle = 3N \cdot \hbar\omega_0 \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}} - 1}$$

jeśli wziąć $N=N_A$, to molowe ciepło:

$$C_V = 3R \cdot \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \xrightarrow[\substack{x \rightarrow 0 \\ (T \rightarrow \infty)}]{} 3R \quad \text{gdzie} \quad x = \frac{\hbar\omega_0}{kT}$$

w ten sposób odtwarzamy prawo Dulonga-Petita, ale w niskich temperaturach otrzymuje się zależność szybszą niż doświadczalna !

Pojemność cieplna sieci krystalicznej

2. **Model Debye'a**: fonony akustyczne z uproszczoną (liniową) dyspersją:

$$\omega_{TA} = u_T q \quad (2 \text{ gałęzie})$$

$$\omega_{LA} = u_L q \quad (1 \text{ gałąź})$$

- gęstość stanów** na jednostkę częstości, na jednostkę objętości, na jedną (i-tą) gałąź:

$$\rho(\omega_i) d\omega_i = \rho_q(\vec{q}_i) d_3 q_i = \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi q_i^2 dq_i = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega_i^2}{u_i^3} d\omega_i$$

- wszystkie 3 gałęzie (zakładając degenerację obu gałęzi poprzecznych):

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2}{u_T^3} + \frac{1}{u_L^3} \right) \equiv \frac{3\omega^2}{2\pi^2} \cdot \frac{1}{u^3}$$

u jest pewną średnią prędkością

Pojemność cieplna sieci krystalicznej

- Założenie sferycznej symetrii relacji dyspersyjnych zmusza do ograniczenia się do obszaru $\omega \leq \omega_{\max}$, tak aby całkowita liczba (koncentracja) stanów fononowych wyniosła $3N$:

$$3N = \int_0^{\omega_{\max}} \rho(\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega_{\max}^3}{u^3}$$

stąd: $\omega_{\max} = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot u$

oraz *definicja temperatury Debye'a*: $\Theta = \frac{\hbar \omega_{\max}}{k} = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot \frac{\hbar u}{k}$

- *Wkład fononów do energii wewnętrznej* (na jednostkę objętości):

$$U(T) = \int_0^{\omega_{\max}} \hbar \omega \cdot \rho(\omega) \cdot \langle n(\omega, T) \rangle d\omega = \frac{3}{2\pi^2} \cdot \frac{\hbar}{u^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} d\omega$$

Pojemność cieplna sieci krystalicznej

- Zamiana zmiennych: $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$

$$U(T) = \frac{3}{2\pi^2} \cdot \frac{\hbar}{u^3} \cdot \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{3}{2\pi^2} \cdot T^4 \cdot \left(\frac{k}{\hbar u}\right)^3 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

i wreszcie, wykorzystując związek: $\Theta = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot \frac{\hbar u}{k}$

otrzymujemy:

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) = 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

*wkład fononów
(akustycznych) do
energii wewnętrznej
wg. modelu Debye'a*

Pojemność cieplna sieci krystalicznej

a) *niskie temperatury $T \ll \Theta$:*

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) \approx 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \frac{\pi^4}{15} \propto T^4$$



$$C_V \propto T^3$$

zgodnie z doświadczeniem

b) *wysokie temperatury $T \gg \Theta$:*

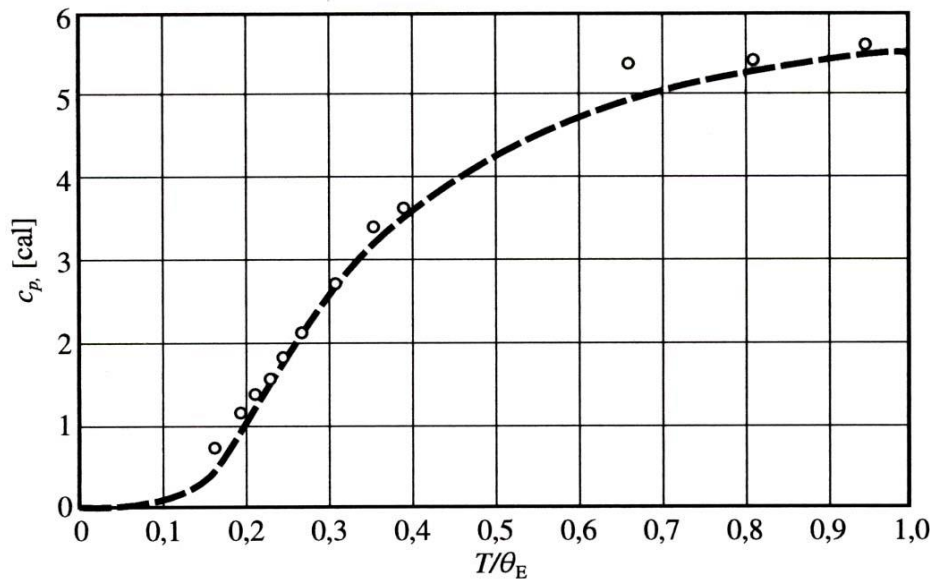
wtedy w całym obszarze całkowania $x \ll 1$ i:

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) \approx 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{1+x-1} dx = 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^3 = 3NkT$$

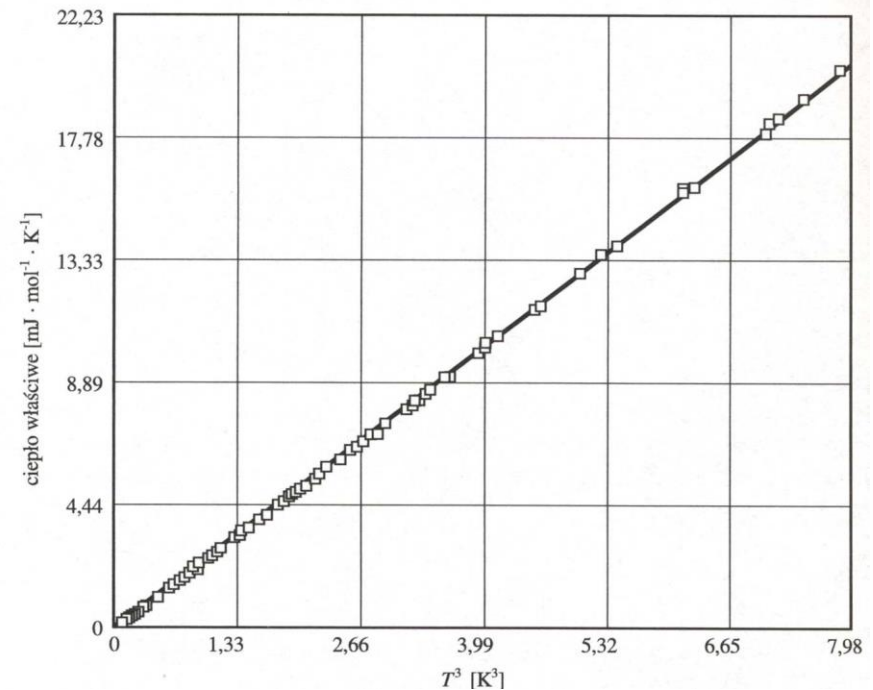
$$C_V = 3R$$

prawo Dulonga-Petita, jeśli
obliczymy U dla N_A oscylatorów

Pojemność cieplna sieci krystalicznej



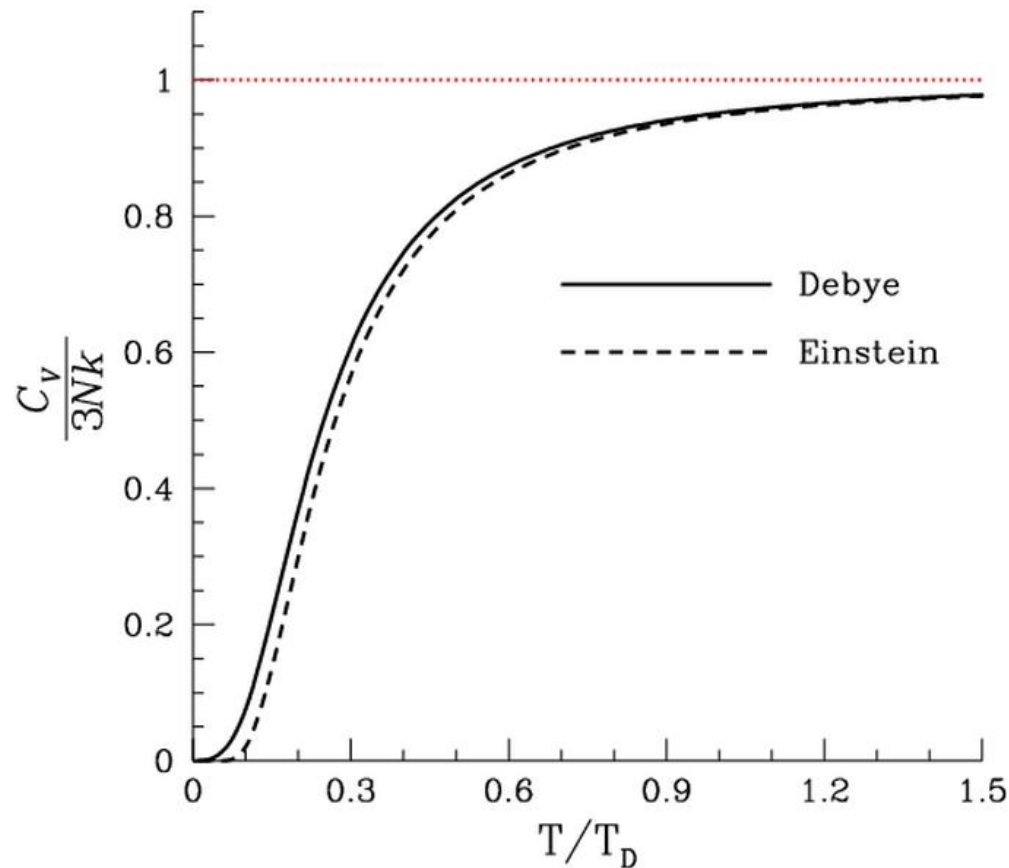
diament, linia – model Einsteina



stały argon, linia – model Debye'a

Ch. Kittel, „Wstęp do fizyki ciała stałego”

Pojemność cieplna sieci krystalicznej



Wikipedia

Uwaga na skale! Model Debye'a działa też w wysokich temperaturach

TRANSPORT - WSTĘP

Transport – siły zewnętrzne

- **Rozproszenia elastyczne** – np. na potencjałach domieszek i defektów
- **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 $kT \gg \hbar\omega_0$).

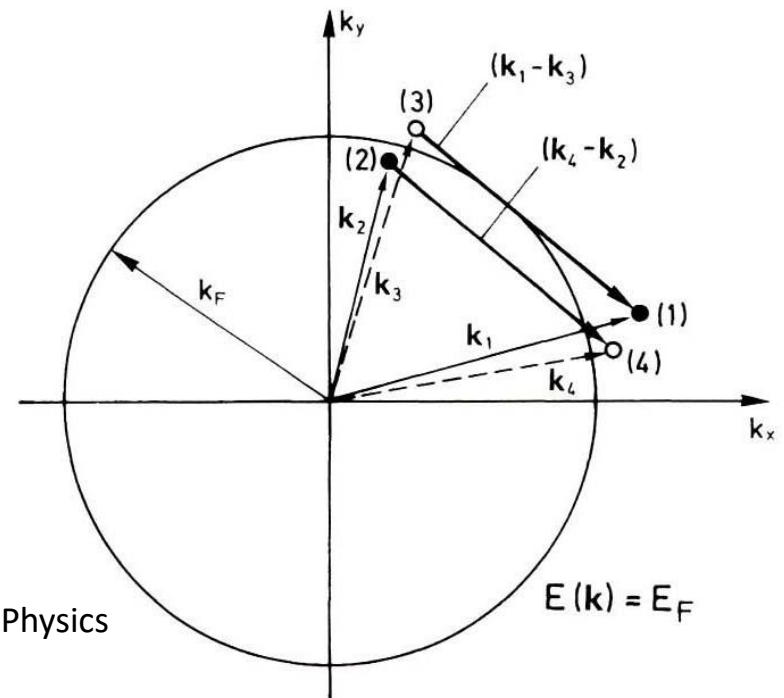
Rozpraszanie elektron-elektron

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

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

$$E_1 + E_2 = E_3 + E_4$$

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



Transport – skale długości i czasu

Skale długości i czasu w transporcie

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

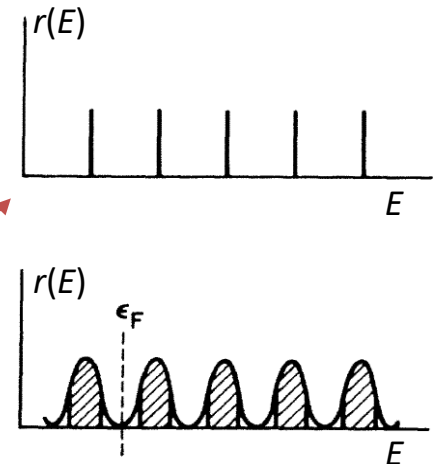
2. Czas kwantowy τ_q , średnia droga swobodna l_q
Każde rozpraszanie prowadzi do tego, że czas życia w danym stanie kwantowym τ_q (tzw. „czas kwantowy”) jest skończony i poszerzenie $\Delta E \neq 0$. Średnia droga swobodna: $l_q = v_F \tau_q$

Przykład: oscylacje Shubnikova-de Haasa w 2DEG

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c$$

gęstość stanów bez rozprośnień

z rozproszeniami



Transport – skale długości i czasu

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):

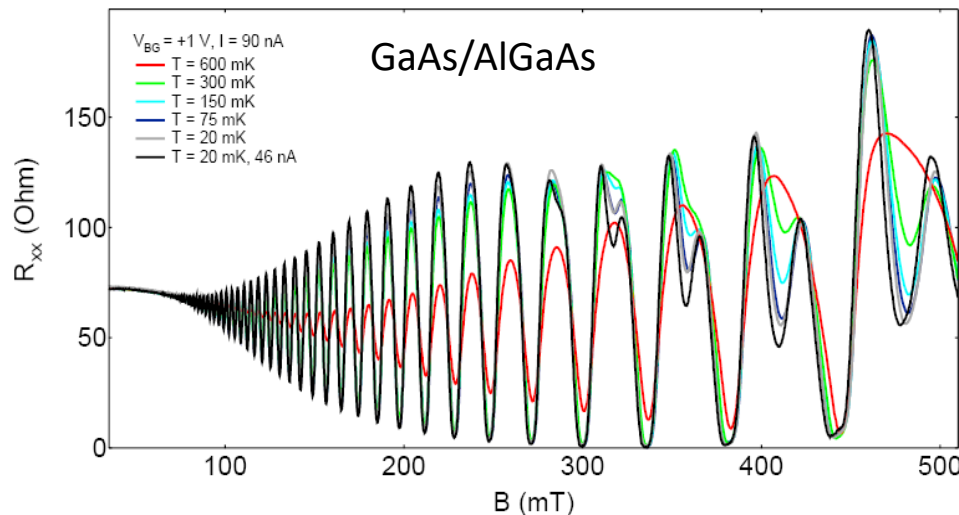
$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = 4 \frac{\chi}{\sinh \chi} \cdot \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau_q}\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi E_F}{\hbar\omega_c} + \varphi\right)$$

gdzie $\chi = \frac{2\pi^2 kT}{\hbar\omega_c}$

w niskiej temperaturze $T \rightarrow 0$

$$\frac{\chi}{\sinh \chi} \rightarrow 1$$

A. Renfer, University of Basel, 2009



Transport – skale długości i czasu

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

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

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

gdzie θ – kąt (elastycznego) rozproszenia

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

przeważnie $\tau_{tr} > \tau_q$

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

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

1. $T = 300$ K, materiał objętościowy: $\mu \approx 4000$ cm²/Vs, $\tau_{tr} \approx 0,15$ ps,

$$\tau_{tr} v_F \approx l_{tr} \approx 35$$
 nm

2. $T = 1$ K, 2DEG: $\mu \approx 10^7$ cm²/Vs, $\tau_{tr} \approx 400$ ps, $\tau_{tr} v_F \approx l_{tr} \approx 90$ nm

Transport – skale długości i czasu

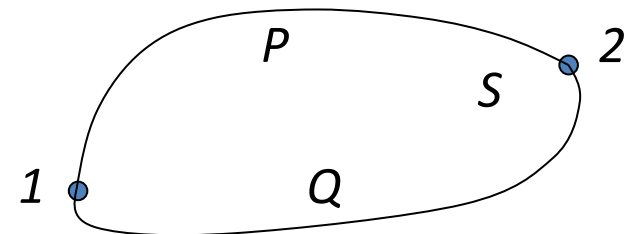
4. Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_φ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_φ

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 $\vec{A}$ ($\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$) doznaje przesunięcia fazowego:

$$\phi_P = \frac{e}{\hbar} \int_P \vec{A} \cdot d\vec{r}_{1 \rightarrow 2}$$



Transport – skale długości i czasu

- Różnica faz pomiędzy dwiema różnymi drogami:

$$\Delta\phi_{PQ} = \frac{e}{\hbar} \left(\int_P \vec{A} \cdot d\vec{r} - \int_Q \vec{A} \cdot d\vec{r} \right) = \frac{e}{\hbar} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \frac{e}{\hbar} \Phi_B$$

jest proporcjonalna do strumienia pola **B** przez powierzchnię *S* rozpiętą przez obie drogi



- Interferencja fal elektronowych poruszających się po obu drogach, prawdopodobieństwo transmisji:

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

T – okresowe w strumieniu Φ_B (a więc i w polu **B**), z okresem $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ (kwant strumienia magnetycznego)

Transport – skale długości i czasu

2DEG w GaAs/Ga_{0,7}Al_{0,3}As

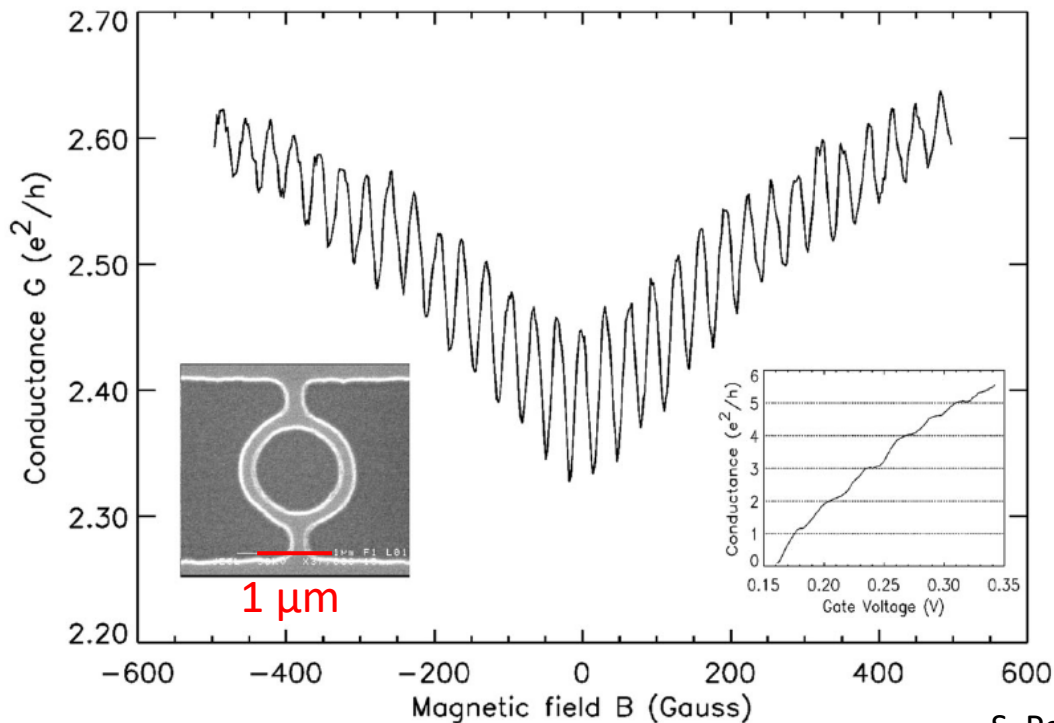


FIG. 1. Measured magnetoconductance of the device shown on the SEM picture in the left insert. The magnetoconductance show a very clear Aharonov-Bohm signal imposed on a slowly varying background. The right insert displays the zero-magnetic field conductance at $T=4.2$ K as a function of gate voltage. 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 $v_F \tau_{tr} \approx 6 \mu m$ – transport bez rozprożeń (balistyczny)

Transport – skale długości i czasu

Skale długości i czasu w transporcie

- Czas kwantowy τ_q , średnia droga swobodna $l_q = \tau_q v_F$
- Czas transportowy (czas relaksacji pędowej) τ_{tr} , średnia droga swobodna $l_{tr} \approx \tau_{tr} v_F$
- Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_ϕ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_ϕ
jeśli $\tau_\phi \gg \tau_{tr}$, to:

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

$$\text{a nie } l_\phi \approx \tau_\phi v_F$$

$$\text{gdzie } D = \frac{\mu k T}{q} - \text{stała dyfuzji}$$

Transport – skale długości i czasu

5. *Długość fali de Broglie'a elektronu (na poziomie Fermiego):*

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

– dla metalu z $m^* \approx m_0$ i $E_F \approx 10$ eV:

$$\lambda_F \approx 0,4 \text{ nm} \quad (!!!)$$

– dla GaAs z $m^* \approx 0,067 m_0$ i $E_F \approx 10$ meV:

$$\lambda_F \approx 47 \text{ nm}$$



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

Transport – skale długości i czasu

6. Długość magnetyczna l_B

Promień orbity cyklotronowej najniższego poziomu Landaua:

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

w polu $B = 1\text{T}$: $l_B \approx 26\text{ nm}$

Energia cyklotronowa: $E_c = \hbar\omega_c$

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

Równanie Boltzmannna



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

Innym razem ☹️

Transport dyfuzyjny

Czas relaksacji charakteryzuje szybkość dochodzenia układu do stanu równowagi

- **Po wprowadzeniu pojęcia czasu relaksacji** równanie Boltzmann'a przyjmuje prostą (tylko formalnie !!!) postać :

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = -\frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})}$$

$$\langle A(E) \rangle = \frac{\frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty A(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) k^3(E) dE}{\frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) k^3(E) dE} = \frac{1}{3\pi^2 n_0} \int_0^\infty A(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) k^3(E) dE$$

(do sprawdzenia samodzielnie)

W przypadku kilku równoczesnych mechanizmów relaksacji dodajemy ich szybkości:

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

Równanie Boltzmannna – czas relaksacji

Scattering mechanism	Scattering parameter	$\tau_{0r}(T)$	A_{0r}
Point defects (short-range potential)	0	$\frac{\pi \hbar^4}{m_n (2m_n k_0 T)^{1/2} U_0^2 N_g}$	$\frac{\pi}{\hbar} U_0^2 N_g$
Acoustic phonons (deformation potential)	0	$\frac{2\pi \hbar^4 \rho v_0^2}{E_1^2 (2m_n k_0 T)^{3/2}}$	$\frac{\pi E_1^2 k_0 T}{\hbar \rho v_0^2}$
Nonpolar optical phonons at high temperatures ($k_0 T \gg \hbar \omega_0$)*	0	$\frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar \omega_0}{E_0} \right)^2 \frac{\hbar^2 a^2 \rho}{(2m_n k_0 T)^{3/2}}$	$\pi^3 \hbar \left(\frac{E_0}{\hbar \omega_0} \right)^2 \frac{k_0 T}{\rho a^2}$
Polar optical phonons at high temperatures ($k_0 T \gg \hbar \omega_0$)	1	$\frac{1}{2\alpha} \left(\frac{\hbar}{\omega_0 k_0 T} \right)^{1/2}$	$\frac{2\pi^2 e^2 k_0 T}{\kappa^* \hbar}$
Piezoacoustic phonons	1	$\frac{2\pi \hbar^2 \kappa}{e^2 \Pi_0^2} \left(\frac{2}{m_n k_0 T} \right)^{1/2}$	$\frac{\pi e^2 k_0 T \Pi_0^2}{2 \hbar \kappa}$
Impurity ions	2	$\frac{\kappa^2 (2m_n)^{1/2} (k_0 T)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F_{\text{imp}}(\epsilon)}$	$\frac{2\pi^3 N_i F_{\text{imp}}(k)}{\hbar \kappa^2}$
* At low temperatures ($k_0 T \ll \hbar \omega_0$) 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.			

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

Równanie Boltzmannna – czas relaksacji

Zależność czasu relaksacji od energii

- 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:

$$\tau(E) = \tau_{0r}(T) \cdot \left(\frac{E}{kT} \right)^{(r-1/2)} \quad \Rightarrow \quad l_{tr}(E) \approx v\tau \sim E^{1/2} \cdot E^{(r-1/2)} = E^r$$

Równanie Boltzmannna – pole elektryczne



$$\vec{j} = \frac{e^2 n \langle \tau \rangle}{m^*} \vec{\varepsilon} = \sigma \vec{\varepsilon}$$

$$\sigma = en\mu$$

– *przewodnictwo elektryczne*

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

– *ruchliwość*

- w przypadku *niezdegenerowanym* w *niskich temperaturach* można się spodziewać $\mu(T) \sim T^{3/2}$ (rozpraszanie zdominowane przez zjonizowane domieszki)
- w przypadku *niezdegenerowanym* w *wysokich temperaturach* można się spodziewać $\mu(T) \sim T^{-3/2}$ (jeśli rozpraszanie zdominowane przez fonony akustyczne, potencjał deformacyjny)

Nośniki w polu elektrycznym - ruchliwość

GaAs - ruchliwość

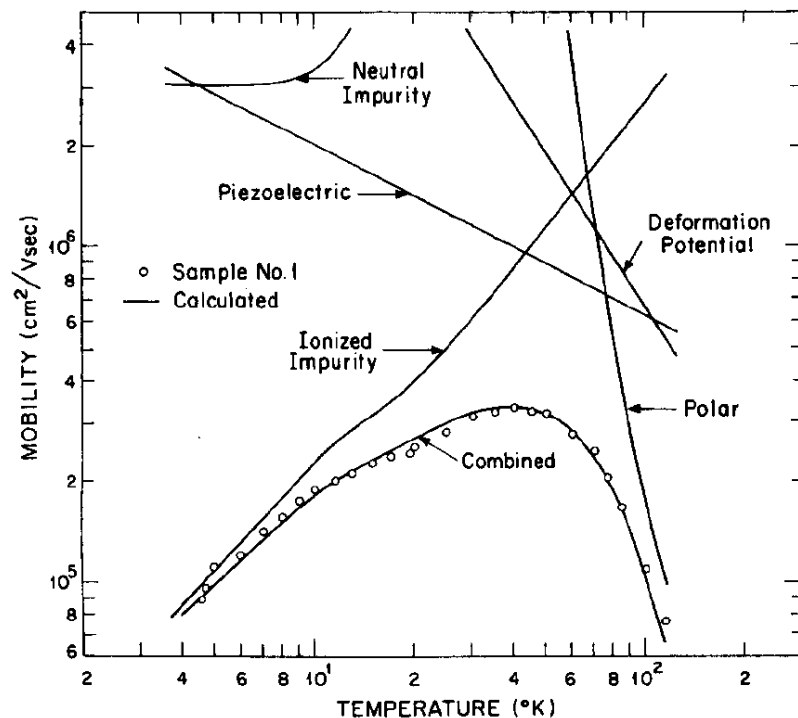
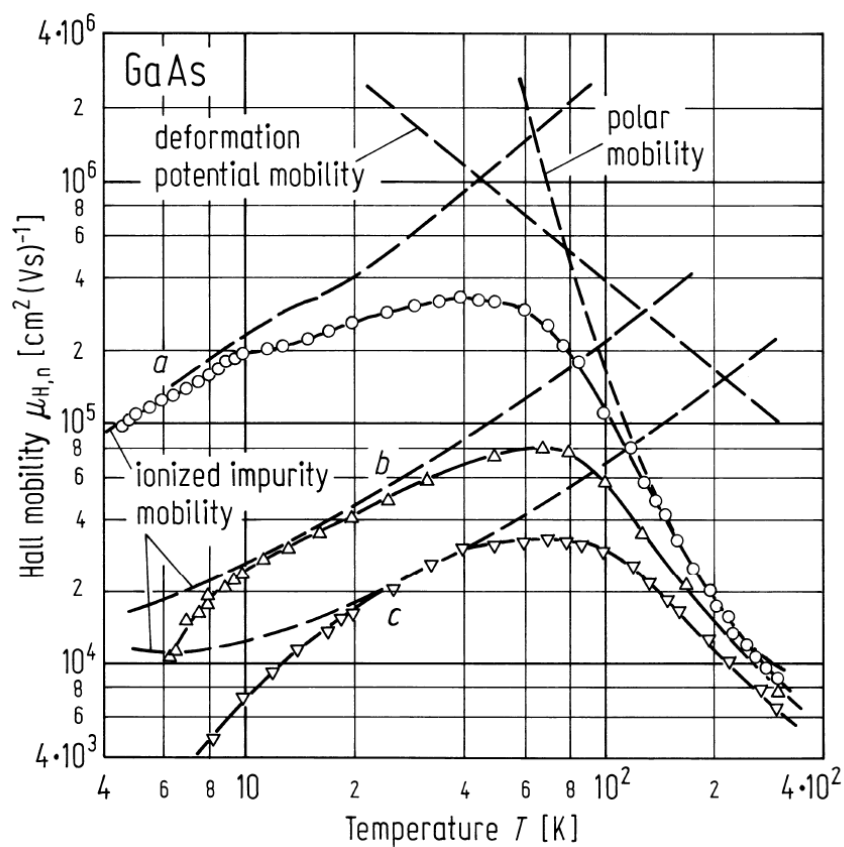


FIG. 1. Temperature dependence of the mobility for the highest purity sample showing the mobility curves calculated for each scattering process, the calculated combined mobility curve, and the experimental points.

C.M. Wolfe et al., *Journal of Applied Physics*, **41**, 3088 (1970)

Równanie Boltzmannna – czas relaksacji

Scattering mechanism	Scattering parameter	$\tau_{0r}(T)$	A_{0r}
Point defects (short-range potential)	0	$\frac{\pi \hbar^4}{m_n (2m_n k_0 T)^{1/2} U_0^2 N_g}$	$\frac{\pi}{\hbar} U_0^2 N_g$
Acoustic phonons (deformation potential)	0	$\frac{2\pi \hbar^4 \rho v_0^2}{E_1^2 (2m_n k_0 T)^{3/2}}$	$\frac{\pi E_1^2 k_0 T}{\hbar \rho v_0^2}$
Nonpolar optical phonons at high temperatures ($k_0 T \gg \hbar \omega_0$)*	0	$\frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar \omega_0}{E_0} \right)^2 \frac{\hbar^2 a^2 \rho}{(2m_n k_0 T)^{3/2}}$	$\pi^3 \hbar \left(\frac{E_0}{\hbar \omega_0} \right)^2 \frac{k_0 T}{\rho a^2}$
Polar optical phonons at high temperatures ($k_0 T \gg \hbar \omega_0$)	1	$\frac{1}{2\alpha} \left(\frac{\hbar}{\omega_0 k_0 T} \right)^{1/2}$	$\frac{2\pi^2 e^2 k_0 T}{\kappa^* \hbar}$
Piezoacoustic phonons	1	$\frac{2\pi \hbar^2 \kappa}{e^2 \Pi_0^2} \left(\frac{2}{m_n k_0 T} \right)^{1/2}$	$\frac{\pi e^2 k_0 T \Pi_0^2}{2 \hbar \kappa}$
Impurity ions	2	$\frac{\kappa^2 (2m_n)^{1/2} (k_0 T)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F_{\text{imp}}(\epsilon)}$	$\frac{2\pi^3 N_i F_{\text{imp}}(k)}{\hbar \kappa^2}$
* At low temperatures ($k_0 T \ll \hbar \omega_0$) 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.			

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

Zjawiska galwanomagnetyczne

Nośniki w polach elektrycznym i magnetycznym – zjawiska galwanomagnetyczne

- *w obecności pól elektrycznego i magnetycznego* w układzie jednorodnym z równania Boltzmann'a wynika następująca postać odchylenia od rozkładu równowagowego:

$$\vec{X} = \frac{\vec{X}_0 + s(\vec{X}_0 \times \vec{b}) + s^2 \vec{b}(\vec{b} \cdot \vec{X}_0)}{1 + s^2}$$

gdzie: $\vec{b} = \frac{\vec{B}}{B}$

– wersor w kierunku pola magnetycznego,

$$s = \frac{q\tau B}{m^*}$$

$$q = \pm e \quad |s| = \frac{|q|\tau B}{m^*} = \omega_c \tau$$

$$\vec{X}_0 = q\tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{\varepsilon}$$

– rozwiązanie bez pola magnetycznego

Zjawiska galwanomagnetyczne

⇓

gęstość prądu $\vec{j}$ i natężenie pola elektrycznego $\vec{\varepsilon}$ nie są równoległe

⇓

$$\vec{j} = \hat{\sigma} \vec{\varepsilon}$$

$\hat{\sigma}$ jest antysymetrycznym tensorem drugiego rzędu (tensorem przewodnictwa); jeśli ***pole magnetyczne jest skierowane wzdłuż osi z***, to:

$$\hat{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 n}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1+s^2} \right\rangle$$

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 n}{m^*} \left\langle \frac{s\tau}{1+s^2} \right\rangle$$

$$\sigma_{zz} = \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau \rangle$$

– może być dodatnie albo ujemne !

Zjawiska galwanomagnetyczne

- σ_{xx} i σ_{xy} zależą od pola magnetycznego (poprzez $s = \frac{q\tau B}{m^*}$), zaś σ_{zz} od B nie zależy

- **w obszarze słabych pól magnetycznych $|s| \ll 1$:**

$$\sigma_{xx} \cong \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau(1-s^2) \rangle = \frac{e^2 n}{m^*} \left(\langle \tau \rangle - \frac{e^2 B^2}{m^{*2}} \langle \tau^3 \rangle \right) \quad \begin{array}{l} \text{– główny człon niezależny od } B \\ \text{plus dodatek kwadratowy w } B \end{array}$$

$$\sigma_{xy} \cong \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau s \rangle = \frac{e^2 n q B}{m^{*2}} \langle \tau^2 \rangle \quad \text{– liniowe w } B$$

- **w obszarze silnych pól magnetycznych $|s| \gg 1$:**

$$\sigma_{xx} \cong \frac{e^2 n}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{s^2} \right\rangle = \frac{n m^*}{B^2} \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle$$

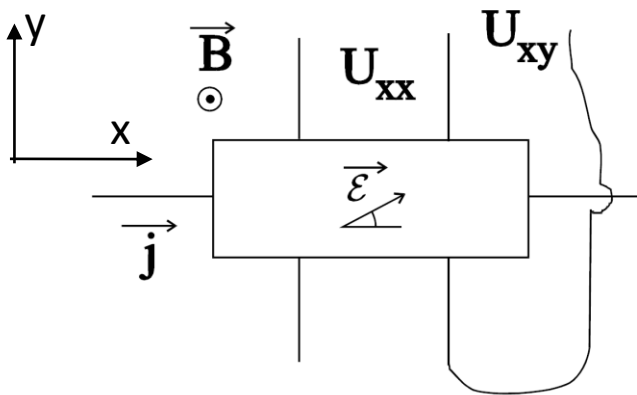
$$\sigma_{xy} \cong \frac{e^2 n}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{s} \right\rangle = \frac{q n}{B}$$

Zjawiska galwanomagnetyczne

- Znajomość postaci tensora przewodnictwa pozwala wyjaśnić zjawisko Halla czy magnetooporu poprzecznego i to zarówno w przypadku, kiedy w transporcie biorą udział nośniki z jednego pasma czy też z kilku (np. elektrony i dziury)

Efekt Halla

- Prostopadłościenna próbka, pole magnetyczne wzdłuż osi z, prąd przepływa wzdłuż osi x:



- napięcie wzdłuż kierunku przepływu prądu U_{xx}
- napięcie poprzeczne (hallowskie) U_{xy}

Zjawiska galwanomagnetyczne

- wektor gęstości prądu: $\vec{j} = \begin{bmatrix} j \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$
- wektor natężenia pola elektrycznego znajdziemy za pomocą relacji:
 $\vec{\varepsilon} = \hat{\rho} \vec{j} = (\hat{\sigma})^{-1} \vec{j}$ gdzie $\hat{\rho}$ – tensor oporności

$$\hat{\rho} = \begin{bmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} & 0 \\ -\rho_{xy} & \rho_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{zz} \end{bmatrix} = \hat{\sigma}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} & \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} & 0 \\ \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} & \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sigma_{zz}} \end{bmatrix}$$



Zjawiska galwanomagnetyczne

- oporność podłużna (zależna od pola magnetycznego B):

$$\rho_{xx} \equiv \rho(B) = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$$

- oporność hallowaska:

$$\rho_H \equiv R_H \cdot B = -\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$$

gdzie R_H *jest współczynnikiem Halla*

- *współczynnik Halla w obszarze słabych pól magnetycznych $B \rightarrow 0$:*

$$R_{H0} \cong \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2} \cong \frac{1}{qn} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = \frac{r}{\pm en}$$

r nazywa się hallowskim
czynnikiem rozproszeniowym

- w przypadku silnej degeneracji $\tau \rightarrow \tau(E_F)$ i $r = 1$
- w przypadku niezdegenerowanym, opisywalnym rozkładem Boltzmann'a, po zastosowaniu wprowadzonej wcześniej zależności czasu relaksacji od energii:

$$\tau(E) \propto E^{(p-1/2)}$$

otrzymujemy:

Zjawiska galwanomagnetyczne

$$r = \frac{\Gamma(2p + 3/2) \cdot \Gamma(5/2)}{\Gamma^2(p + 2)}$$

gdzie $\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$ jest funkcją gamma Eulera

- Jeśli:
 - $p = 0$ (rozpraszanie na fononach, potencjał deformacyjny) $r \approx 1,18$
 - $p = 1$ (rozpraszanie na fononach optycznych, mechanizm polarny, rozpraszanie na fononach akustycznych, mechanizm piezo) $r \approx 1,10$
 - $p = 2$ (rozpraszanie na zjonizowanych domieszkach) $r \approx 1,93$
- mierząc współczynnik Halla w obszarze słabych pól B i przewodnictwo elektryczne σ bez pola magnetycznego można z dokładnością do hallowskiego czynnika rozproszeniowego wyznaczyć koncentrację i ruchliwość nośników:

$$n = \frac{r}{e|R_H|}$$

$$\mu = \frac{|R_H|\sigma}{r}$$

Zjawiska galwanomagnetyczne

- współczynnik Halla w obszarze silnych pól magnetycznych $|s| \gg 1$:*

$$R_H = \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \xrightarrow{s \gg 1} \frac{1}{B} \frac{1}{\sigma_{xy}} \approx \frac{1}{qn} = R_{H\infty}$$

w ogóle nie zależy od mechanizmów rozpraszania nośników !

Magnetoopór poprzeczny – efekt Gaussa

- słowo „poprzeczny” odnosi się do sytuacji, kiedy przepływ prądu zachodzi w kierunku prostopadłym do kierunku pola magnetycznego
- zjawiskiem magnetooporu nazywamy względną zmianę oporności r_{xx} w funkcji pola magnetycznego:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho_{xx}(B)}{\rho(0)} - 1 = \frac{\sigma(0)\sigma_{xx} - \sigma_{xx}^2 - \sigma_{xy}^2}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$$

Zjawiska galwanomagnetyczne

- wystarczy teraz podstawić odpowiednie wyrażenia na składowe tensora przewodnictwa...
- magnetoopór w obszarze słabych pól magnetycznych $|s| \ll 1$:**
stosując standardowe przybliżenia i ograniczając się do wyrazów najniższego rzędu w B otrzymujemy:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{e^2 B^2}{m^{*2}} \left[\frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle} - \frac{\langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right] = \mu^2 B^2 \left[\frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle^3} - \frac{\langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau \rangle^4} \right] = \mu^2 B^2 \cdot A$$

(ćwiczenia !)

- magnetopór jest kwadratowy w B
- jest proporcjonalny do μ^2
- współczynnik proporcjonalności A zależy od mechanizmu rozpraszania:
np. w przypadku niezdegenerowanym (rozkład Boltzmanna) dla $p = 0$ (fonony akustyczne, potencjał deformacyjny) $A = 0,38$, dla $p = 2$ (zjonizowane domieszki) $A = 2,15$

Zjawiska galwanomagnetyczne

- *magnetoopór w obszarze silnych pól magnetycznych $|s| \gg 1$:*

$$\frac{\Delta\rho_{\infty}}{\rho} \approx \frac{\sigma(0)\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}^2} - 1 = \langle\tau\rangle\left\langle\frac{1}{\tau}\right\rangle - 1$$

nasyca się na wartości zależnej od mechanizmu rozpraszania

Dla rozkładu Boltzmanna:

0,13 dla $p = 0$

2,40 dla $p = 2$

- *dla pasma sferycznego magnetoopór podłużny nie pojawia się* (na ładunek poruszający się wzdłuż linii pola B nie działa siła). W przypadku pasma niesferycznego przewodnictwo jest tensorowe nawet bez pola B i w tym przypadku magnetoopór podłużny występuje
- efekt Halla – pierwszego rzędu w polu B
- efekt Gaussa – drugiego rzędu w polu B

Zjawiska galwanomagnetyczne

Przypadek udziału w przewodnictwie wielu rodzajów nośników

np.:

- półprzewodnik bliski samoistnemu – w transporcie biorą udział elektrony w paśmie przewodnictwa i dziury w paśmie walencyjnym
- degeneracja kilku dolin jednego pasma – nośniki obsadzające różne doliny mają różne koncentracje i ruchliwości
- heterostruktura w której występuje kilka warstw zawierających różne swobodne nośniki
- *Standardowym założeniem* jest to, że każda i-ta „grupa” nośników czuje ten sam rozkład pola elektrycznego oraz że nośniki w swoim ruchu sobie nawzajem „nie przeszkadzają”. W takim przypadku, całkowita gęstość prądu jest sumą gęstości prądu od poszczególnych grup nośników i:

$$\hat{\sigma}^{tot} = \sum_i \hat{\sigma}^i \quad \text{tzn. tensor przewodnictwa jest addytywny}$$

Zjawiska galwanomagnetyczne

Przykład 1 – elektrony i dziury współuczestniczące w transporcie

- elektrony: $\sigma_{xx}^e = \frac{e^2 n}{m_e^*} \left\langle \frac{\tau_e}{1 + s_e^2} \right\rangle$ $\sigma_{xy}^e = \frac{e^2 n}{m_e^*} \left\langle \frac{s_e \tau_e}{1 + s_e^2} \right\rangle$
- dziury: $\sigma_{xx}^h = \frac{e^2 p}{m_h^*} \left\langle \frac{\tau_h}{1 + s_h^2} \right\rangle$ $\sigma_{xy}^h = \frac{e^2 p}{m_h^*} \left\langle \frac{s_h \tau_h}{1 + s_h^2} \right\rangle$

- całkowity tensor przewodnictwa:

$$\sigma_{xx}^{tot} = \sigma_{xx}^e + \sigma_{xx}^h \qquad \sigma_{xy}^{tot} = \sigma_{xy}^e + \sigma_{xy}^h$$

- możemy teraz w standardowy sposób wyznaczyć współczynnik Halla

$$R_H^{tot} = \frac{\rho_H^{tot}}{B} = \frac{1}{B} \cdot \frac{\sigma_{xy}^{tot}}{(\sigma_{xx}^{tot})^2 + (\sigma_{xy}^{tot})^2}$$

Zjawiska galwanomagnetyczne

- *w obszarze słabych pól magnetycznych $|s_e|, |s_h| \ll 1$:*

$$R_0 = \frac{r_h p \mu_h^2 - r_e n \mu_e^2}{e(p \mu_h + n \mu_e)^2} \xrightarrow{r_h = r_e = r} \frac{r}{e} \frac{p - nb^2}{(p + nb)^2} \quad \text{gdzie} \quad b = \frac{\mu_e}{\mu_h}$$

- *w obszarze silnych pól magnetycznych $|s_e|, |s_h| \gg 1$:*

$$R_\infty = \frac{1}{e(p - n)} \quad \Downarrow$$

1. w słabych polach magnetycznych dominujący wkład do współczynnika Halla mogą mieć nośniki bardziej ruchliwe, nawet jeśli ich koncentracja jest istotnie mniejsza!
2. w silnych polach magnetycznych o znaku współczynnika Halla decydują nośniki o większej koncentracji
3. z powyższego wynika, że znak współczynnika Halla może w funkcji pola B się zmienić !!!

Zjawiska galwanomagnetyczne

Przykład 2 – widmo ruchliwości

- nie wiemy ile różnych rodzajów (grup) nośników bierze udział w transporcie
- staramy się opisać doświadczalną zależność składowych tensora przewodnictwa od pola magnetycznego $\sigma_{xx}(B)$ i $\sigma_{xy}(B)$ jako złożenie wielu różnych wkładów – kanałów przewodnictwa (w ogólności – dowolnie wielu) pochodzących od grup nośników (numerowanych wskaźnikiem i) charakteryzujących się daną masą efektywną m_i^* , ładunkiem $q_i (= \pm e)$ oraz czasem relaksacji τ_i
- dla każdej z takich grup możemy napisać:

$$s_i = \frac{q_i \tau_i}{m_i^*} B \equiv \mu_i B \quad \begin{array}{l} \text{– gdzie } m_i \text{ jest ujemne dla elektronów,} \\ \text{a dodatnie dla dziur} \end{array}$$

$$\sigma_{xx}^i(B) = \frac{e^2 n_i}{m_i^*} \frac{\tau_i}{1 + s_i^2} = \frac{\sigma_{0i}}{1 + s_i^2} = \frac{\sigma_{0i}}{1 + (\mu_i B)^2}$$

$$\sigma_{xy}^i(B) = \frac{\sigma_{0i}}{1 + (\mu_i B)^2} \cdot (\mu_i B)$$

Zjawiska galwanomagnetyczne

- sumaryczny wkład od wszystkich kanałów przewodnictwa (grup nośników):

$$\sigma_{xx}^{tot}(B) = \sum_i \frac{\sigma_{0i}}{1 + (\mu_i B)^2} = \int_{\mu} \left(\frac{d\sigma_0(\mu)}{d\mu} \right) \frac{1}{1 + (\mu B)^2} d\mu$$

$$\sigma_{xy}^{tot}(B) = \sum_i \frac{\sigma_{0i} \mu_i B}{1 + (\mu_i B)^2} = \int_{\mu} \left(\frac{d\sigma_0(\mu)}{d\mu} \right) \frac{\mu B}{1 + (\mu B)^2} d\mu$$

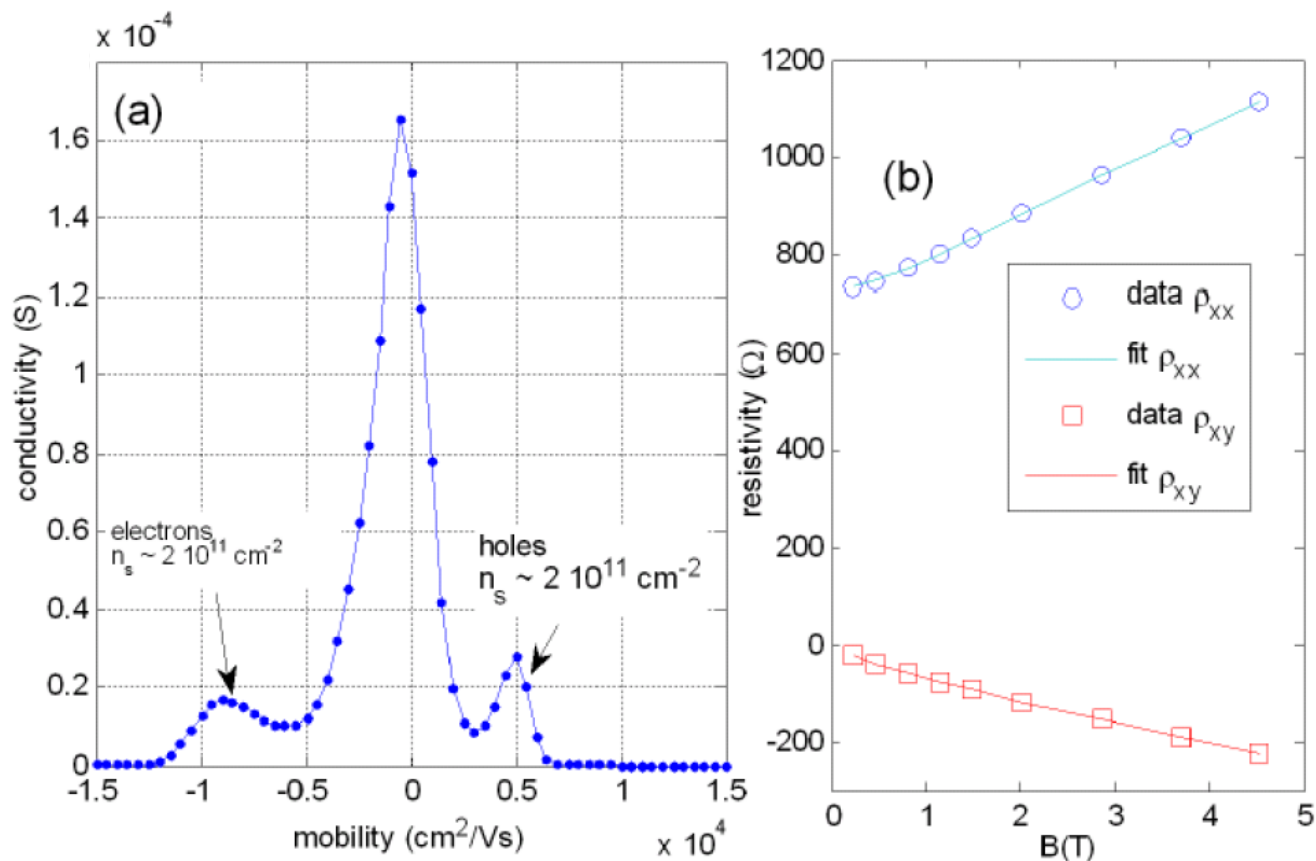
- rozwiązanie problemu polega na takim dobraniu wkładów poszczególnych kanałów przewodnictwa, aby zgodność pomiędzy wyliczonymi zależnościami $\sigma_{xx}^{tot}(B)$ i $\sigma_{xy}^{tot}(B)$ i doświadczeniem była jak najlepsza
- można albo próbować dopasować sumę wkładów od kilku kanałów $\mu_i - \sigma_{0i}$ przewodnictwa, albo stosować kwaziciągły rozkład $\frac{d\sigma_0(\mu)}{d\mu}$



widmo ruchliwości

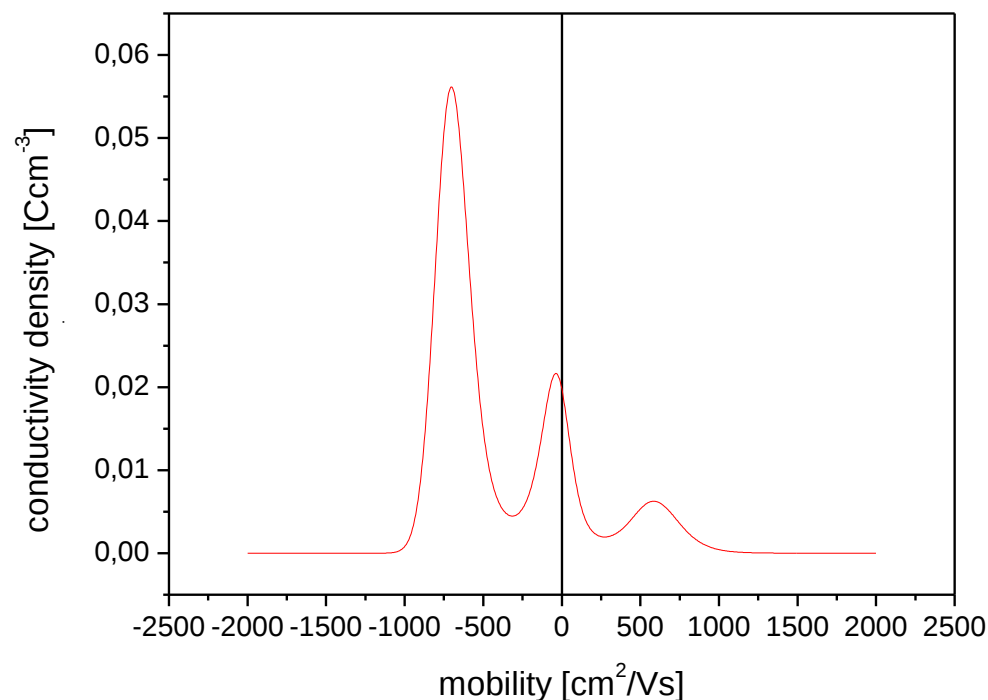
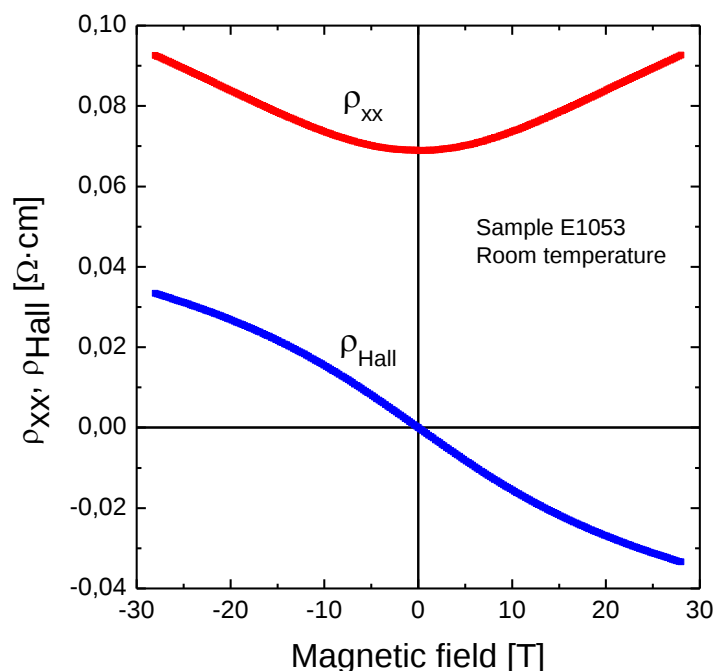
Zjawiska galwanomagnetyczne

Grafen (wyniki – dr Marta Gryglas-Borysiewicz)



Zjawiska galwanomagnetyczne

InN:Mg (wyniki – L. Dmowski, M. Baj)



Maximum Entropy Mobility Spectrum Analysis wg.:
S. Kiatgamolchai et al., *Physical Review E*, **66**, 036705 (2002)