

„Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych”

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):

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

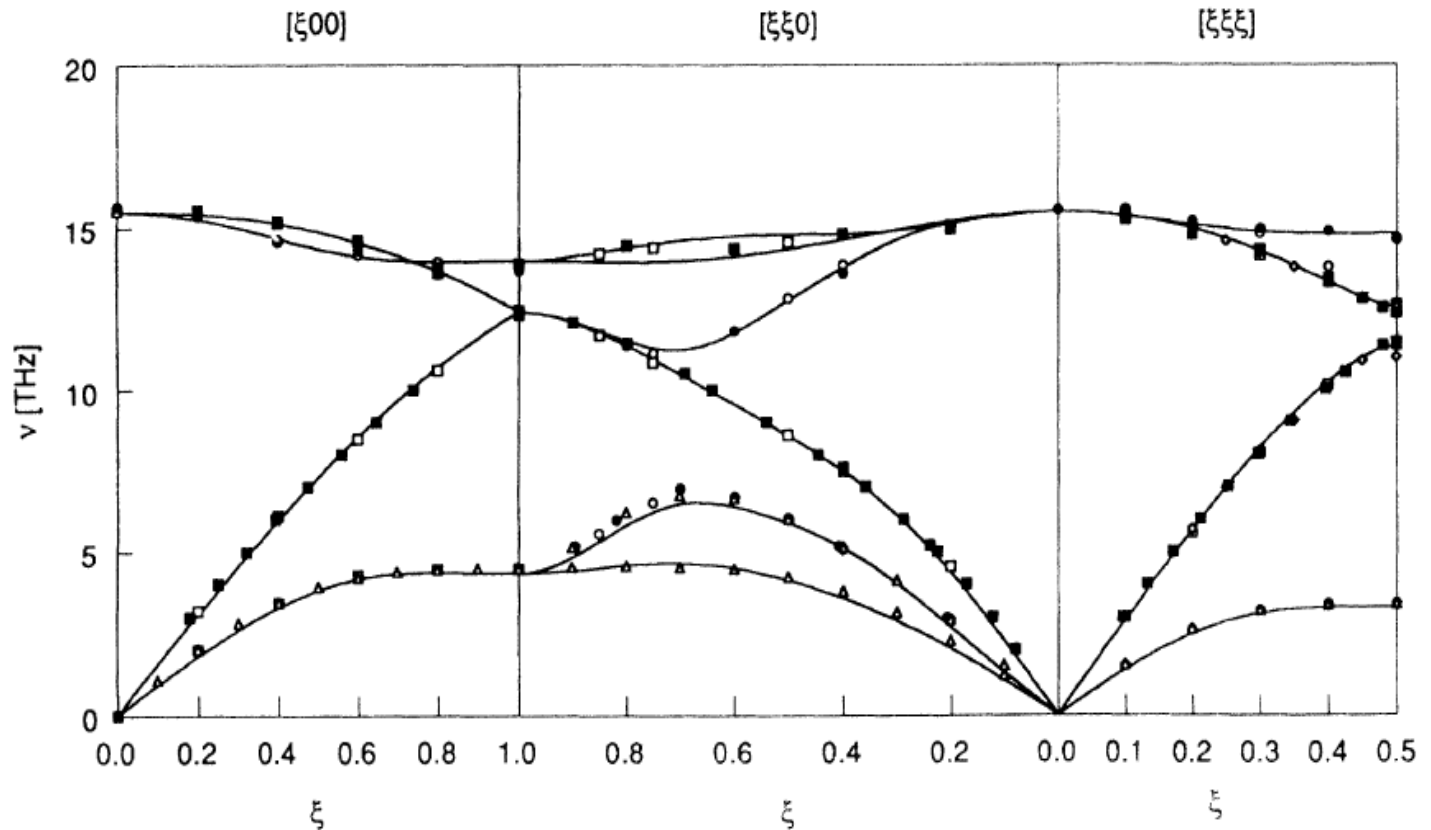
- Znajomość relacji dyspersyjnych dla wszystkich gałęzi fononowych pozwala znaleźć fononowy wkład do $U(T)$ i ciepło przy stałej objętości liczone na jednostkę objętości:

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

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 $T \gg \Theta$:*

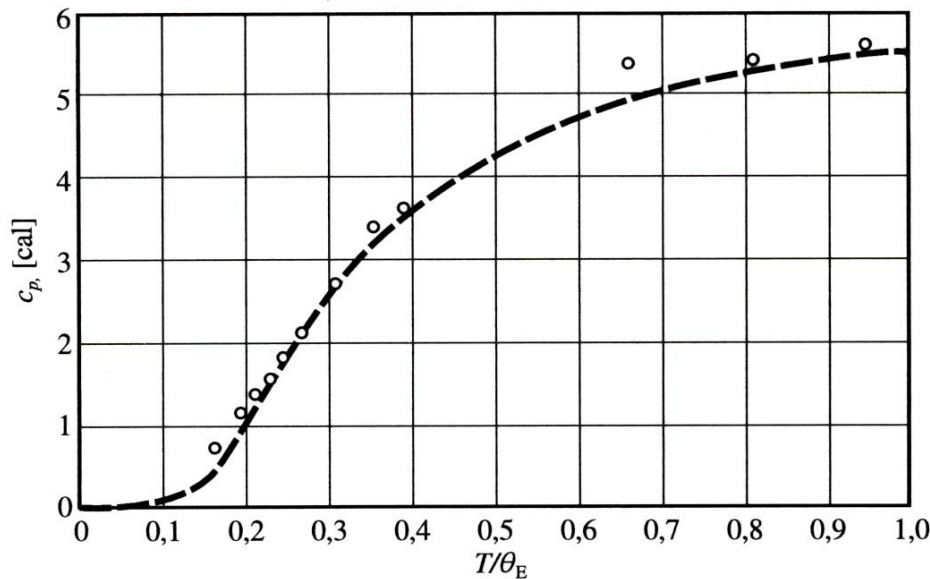
wtedy w całym obszarze całkowania $x \ll 1$ i:

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

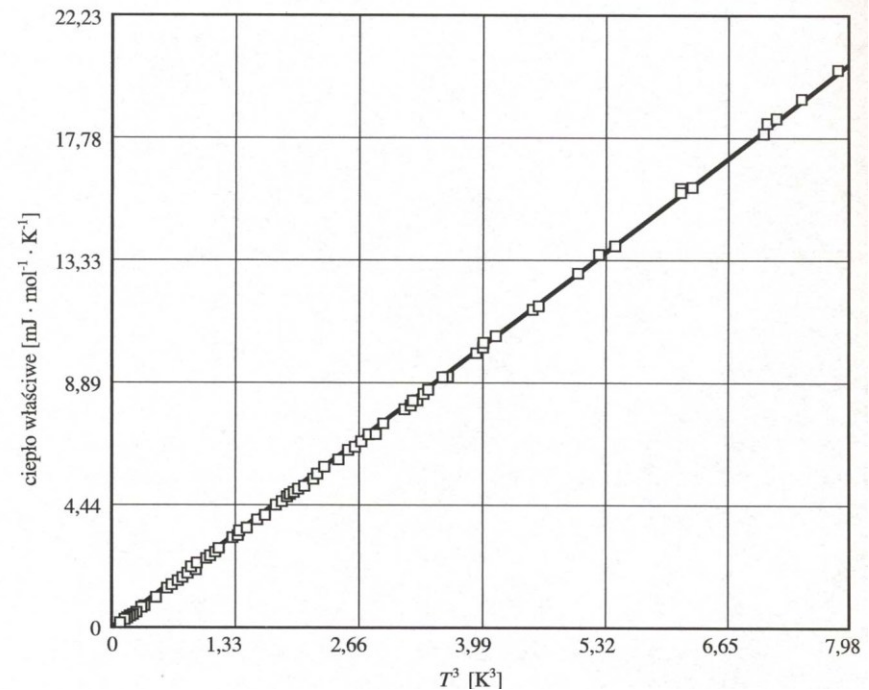
$$C_V = 3R$$

prawo Dulonga-Petita, jeśli
obliczymy U dla N_A oscylatorów

Pojemność cieplna sieci krystalicznej



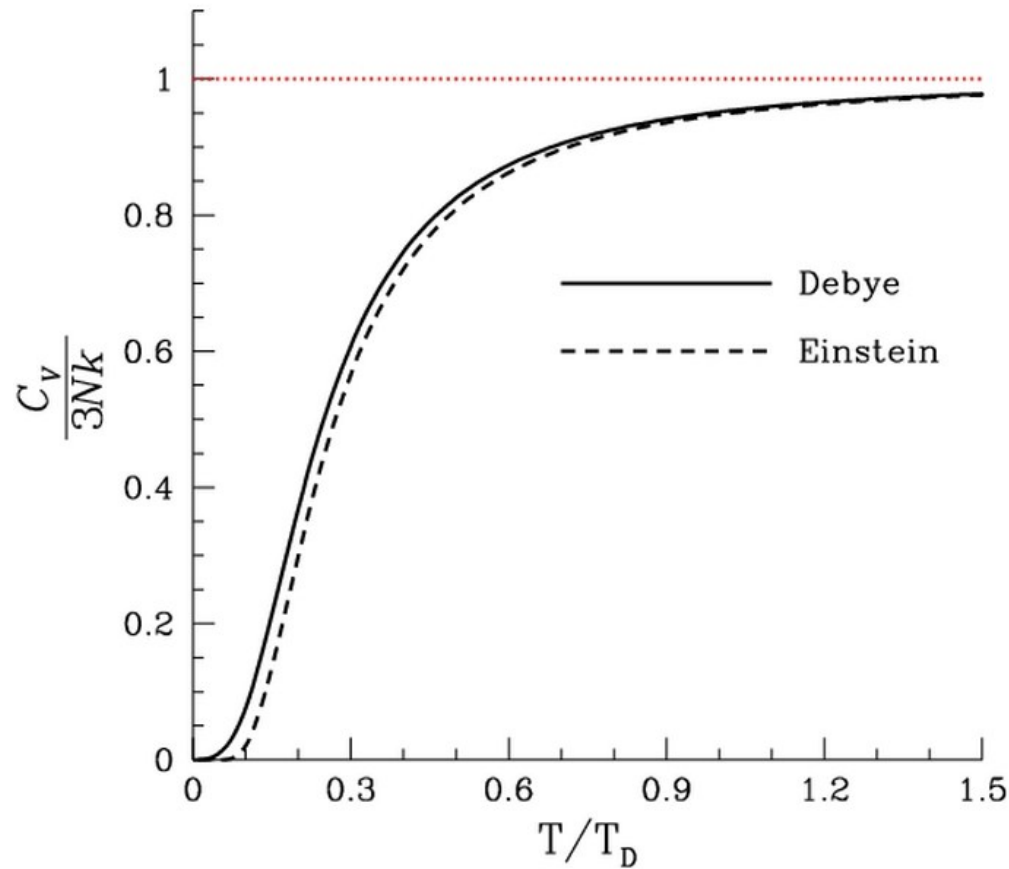
diament, linia – model Einsteina



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 - OGÓLNE

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 $kT \gg \hbar\omega_0$).

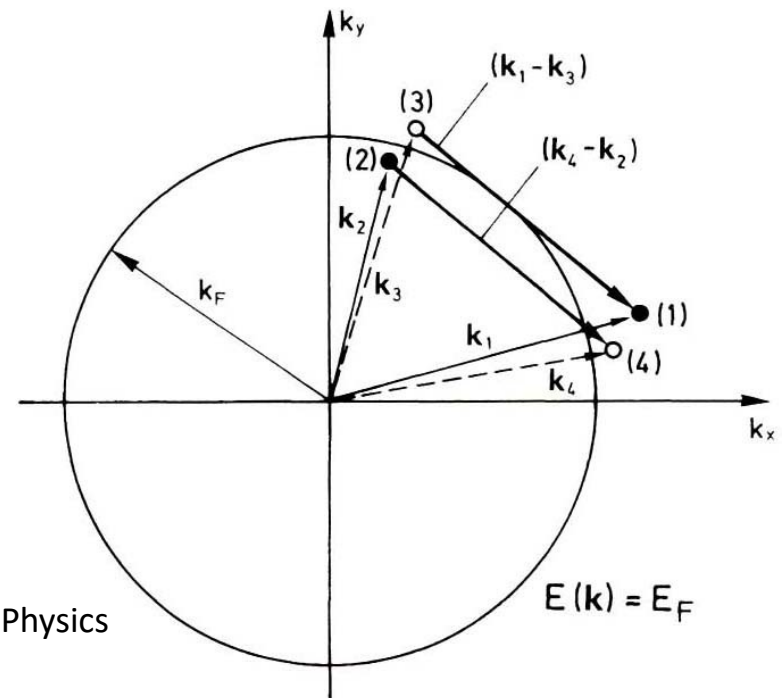
Rozpraszanie elektron-elektron

– 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

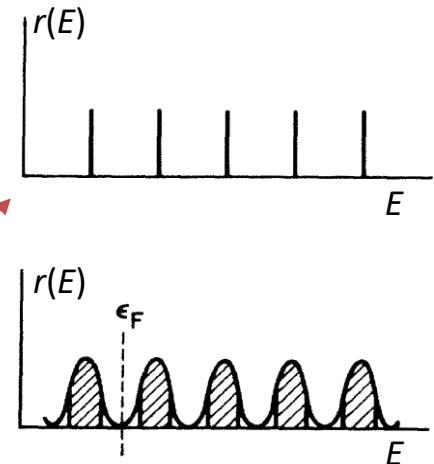
2. Czas kwantowy τ_q , średnia droga swobodna l_q
Każde rozpraszanie prowadzi do tego, że czas życia w danym stanie kwantowym τ_q (tzw. „czas kwantowy”) jest skończony i poszerzenie $\Delta E \neq 0$. Średnia droga swobodna: $l_q = v_F \tau_q$

Przykład: oscylacje Shubnikova-de Haasa w 2DEG

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

gęstość stanów bez rozproszeń

z rozproszczeniami



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,

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

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

Transport – skale długości i czasu

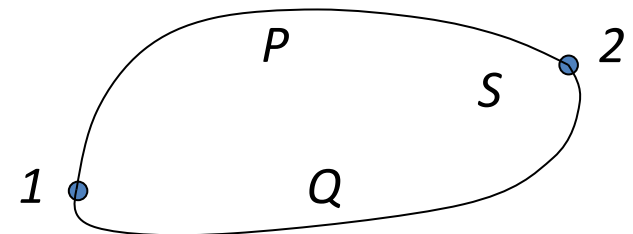
4. Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) τ_φ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) l_φ

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:

$$\phi_P = \frac{e}{\hbar} \int_P \vec{A} \cdot d\vec{r}$$



Transport – skale długości i czasu

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

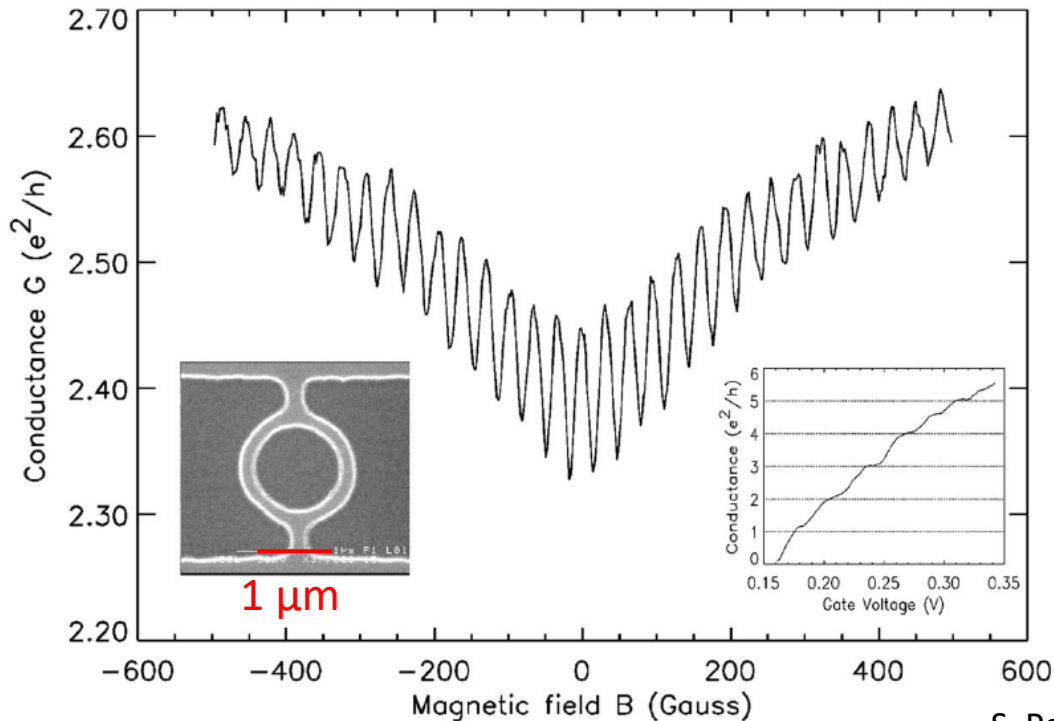


FIG. 1. Measured magnetoconductance of the device shown on the SEM picture in the left insert. The magnetoconductance show a very clear Aharonov-Bohm signal imposed on a slowly varying background. The right insert displays the zero-magnetic field conductance at $T=4.2$ K as a function of gate voltage. 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 $B = 1\text{T}$ $E_c \approx 1,7\text{ meV}$