

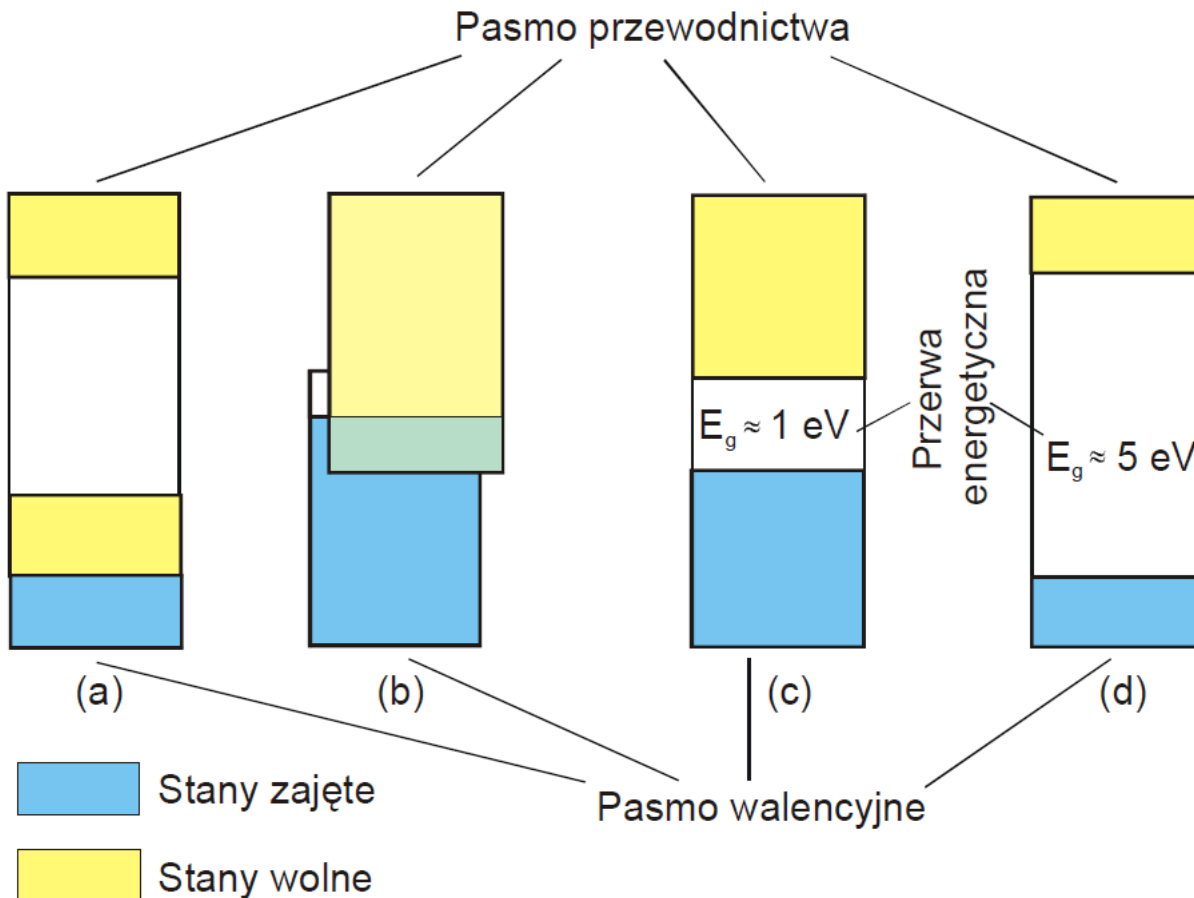
# **Wykład III**

## **Periodyczność sieci krystalicznej i relacja dyspersji**

---

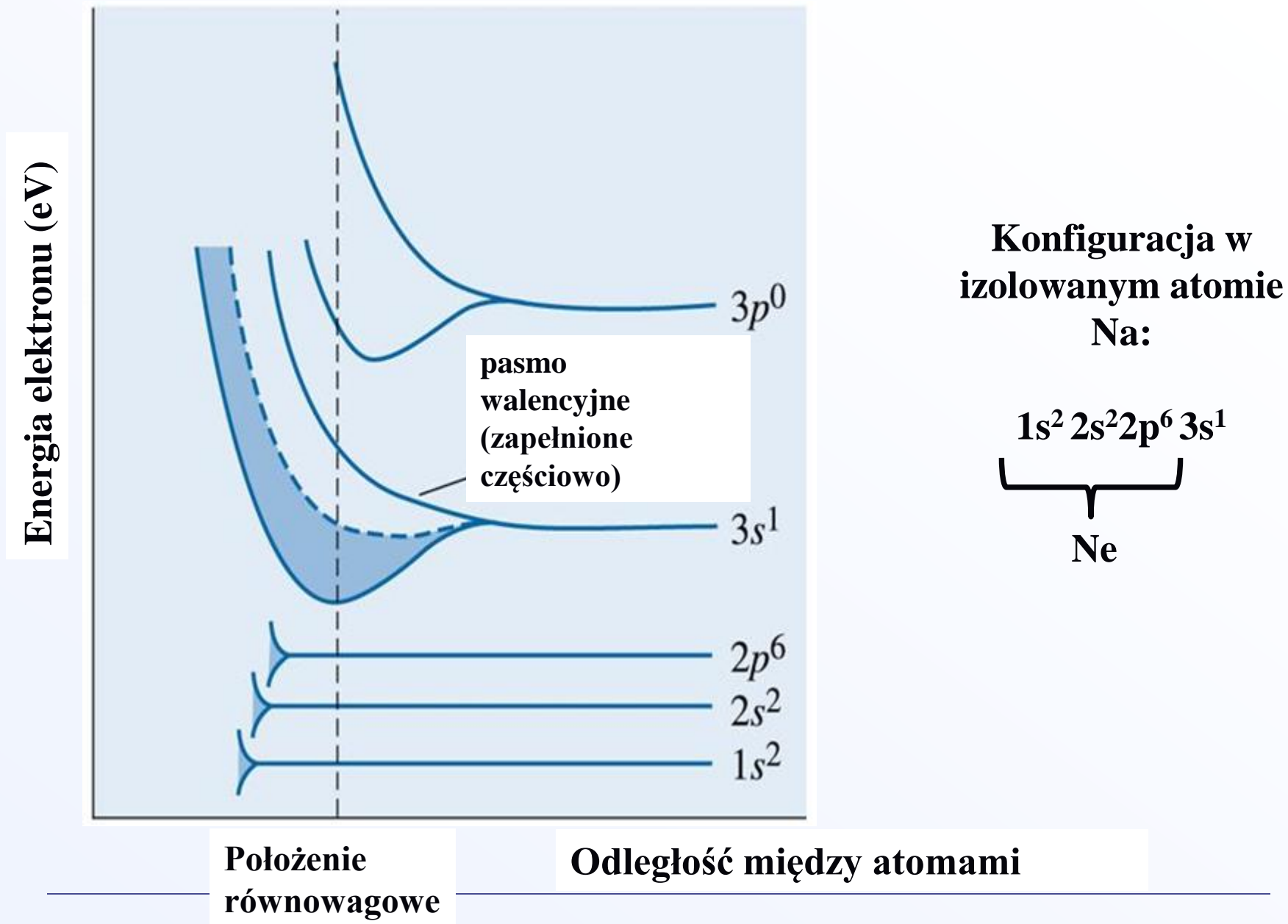
# Metale, izolatory, półprzewodniki

- Zbliżenie atomów w kryształach prowadzi do rozszczepienia poziomów energetycznych. Istotnemu rozszczepieniu ulegają poziomy elektronów walencyjnych.
- Rozszczepione poziomy grupują się w pasma

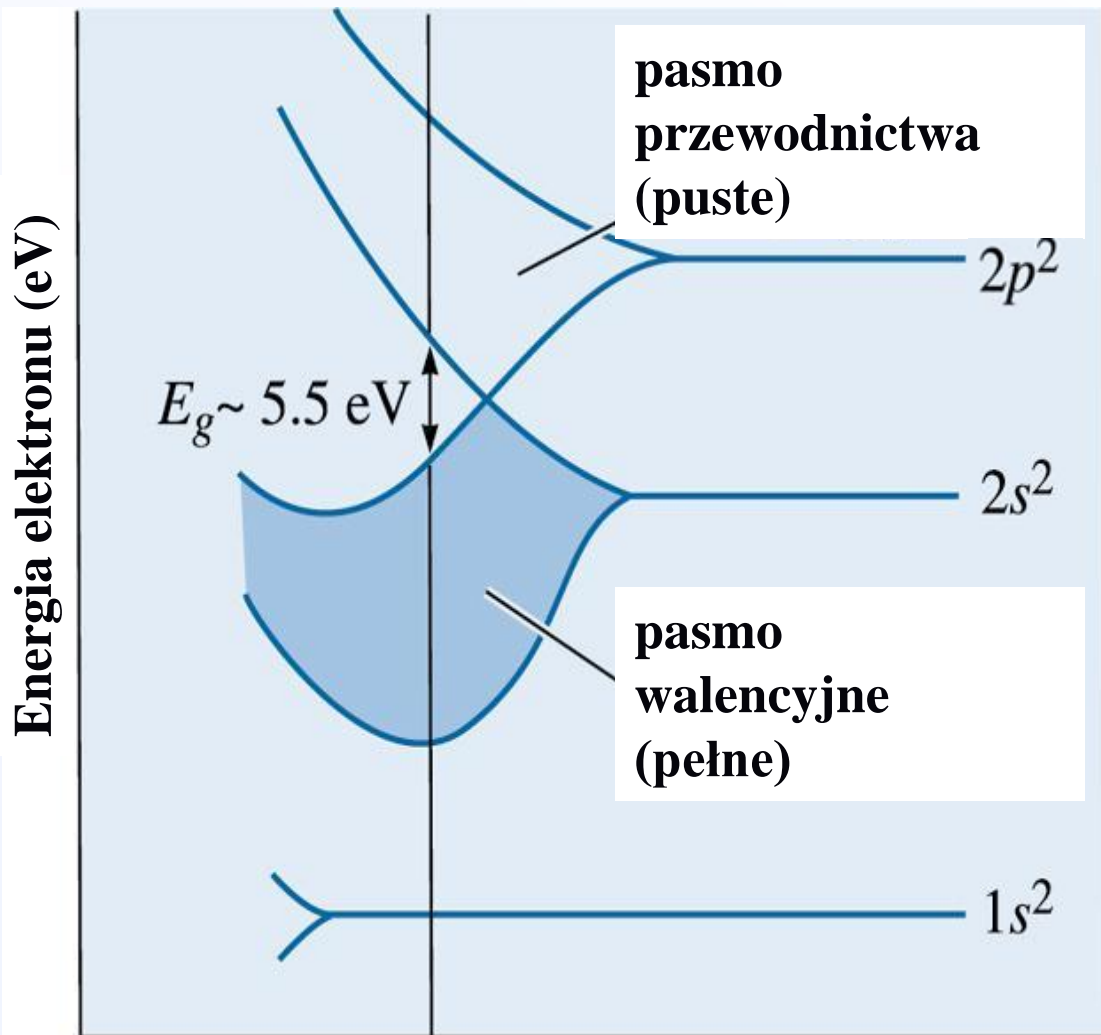


a) i b) - metale,  
c) Półprzewodnik (przerwa wzbr. 1eV-  
umownie)  
d) izolator

# Powstawanie pasm w kryształcie sodu



# Powstawanie pasm w kryształe diamentu

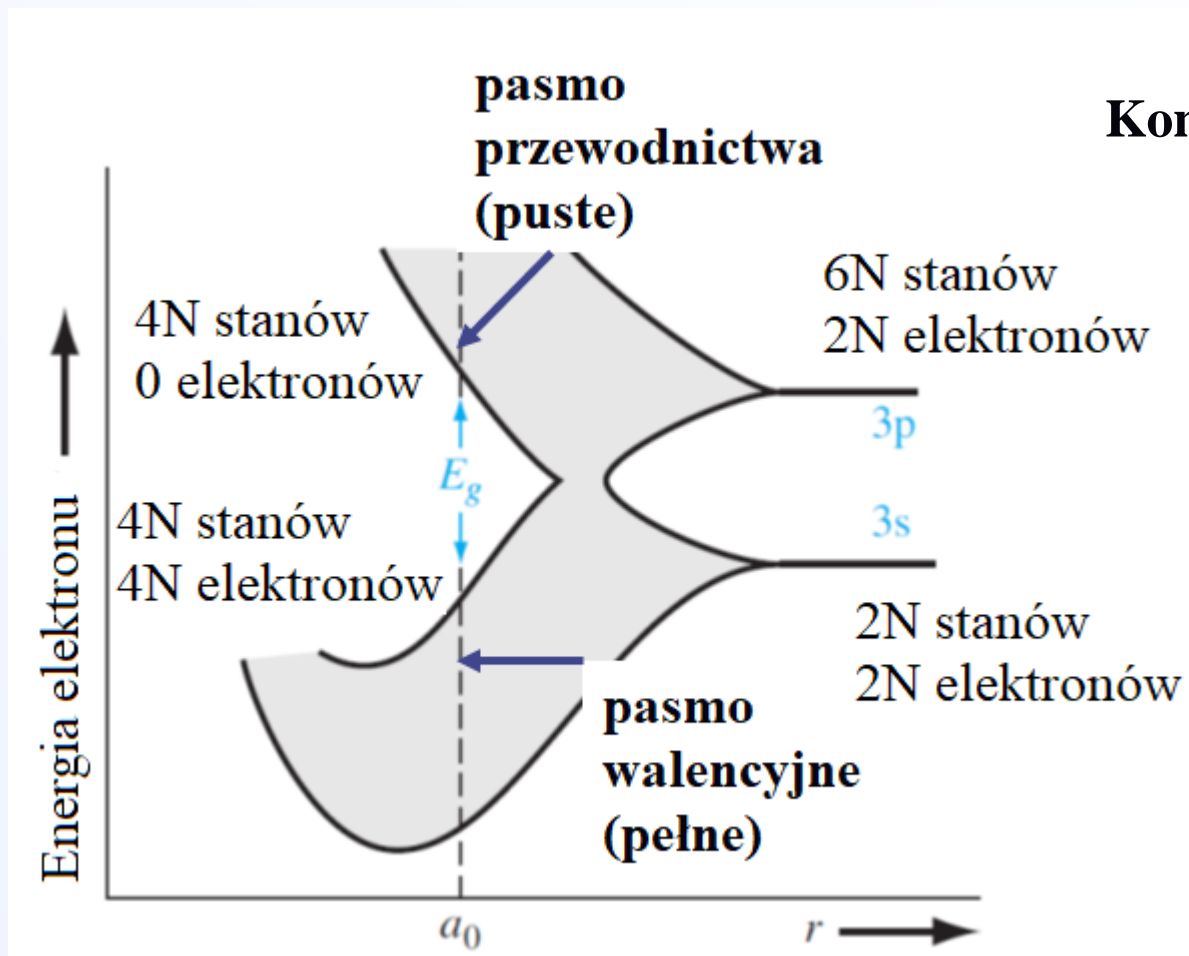


Konfiguracja w izolowanym atomie C:  
 $1s^2 2s^2 2p^2$

Położenie  
równowagowe

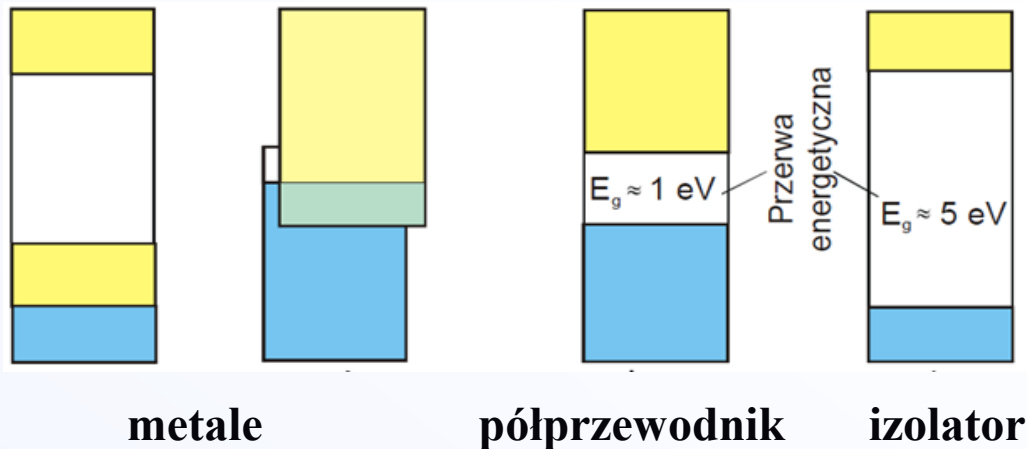
Odległość między atomami

# Powstawanie pasm w kryształie krzemu



**Konfiguracja w izolowanym atomie Si:**  
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

# Metale, izolatory, półprzewodniki



To podejście tłumaczy:

- małą oporność metali w niskiej  $T$  (brak przerwy wzbronionej: stany wolne znajdują się w sąsiedztwie stanów zajętych elektronami);
- większą oporność półprzewodników i największą - izolatorów (im większa  $E_g$ , tym mniejsze prawdopodobieństwo, że elektron znajdzie się w pasmie przewodnictwa);

$$p \sim e^{-\frac{E_g}{kT}}$$

$$k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

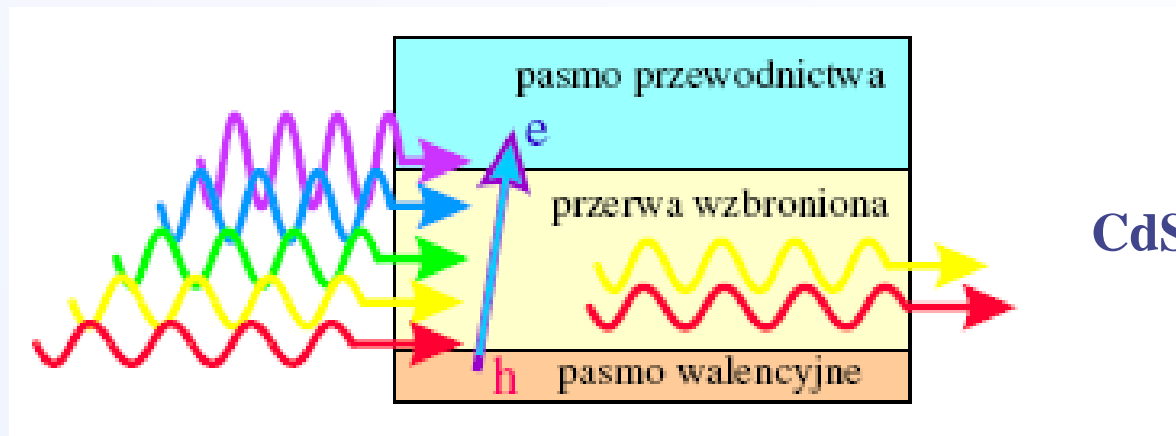
- wykładniczy spadek oporności półprzewodników ze wzrostem temperatury (im wyższa temperatura, tym większe prawdopodobieństwo, że elektron znajdzie się w pasmie przewodnictwa).

# Krawędź absorpcji

To podejście tłumaczy również występowanie krawędzi absorpcji w półprzewodnikach i izolatorach (tylko fotony o energii większej od  $E_g$  zostaną zaabsorbowane):

$$E_F = \frac{hc}{\lambda} = h\nu \geq E_g$$

$$h = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{Js}$$
$$c = 3 \cdot 10^8 \text{m/s}$$



$$\lambda(\text{nm}) = \frac{1240}{E(\text{eV})}$$

$$1\text{eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{C} \cdot \text{V} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{J}$$

# Kłopoty

**To podejście nie jest wystarczające aby wyjaśnić, dlaczego trudno jest wykonać diodę świecącą z krzemu....**

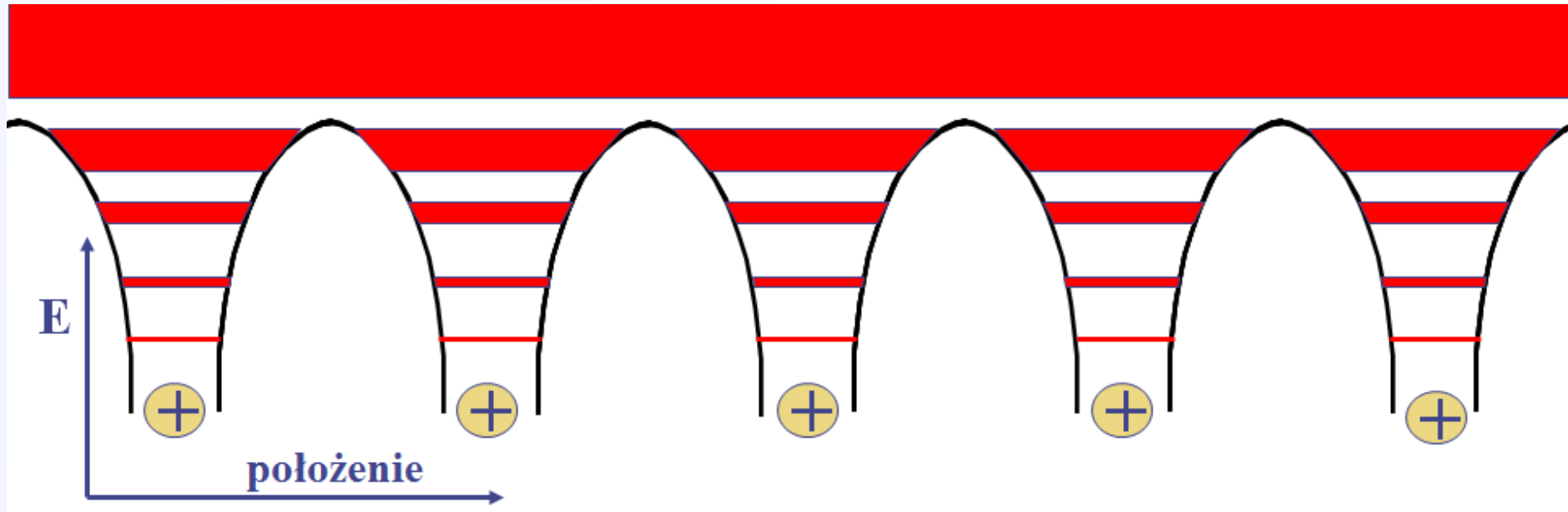
**Problem rozwiązuje uwzględnienie periodyczności sieci krystalicznej.**

---

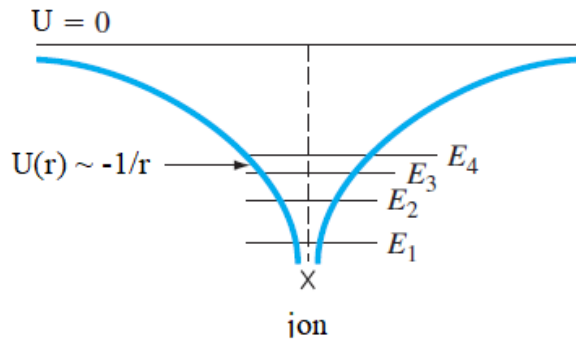


# Periodyczność sieci i dozwolone pasma energii

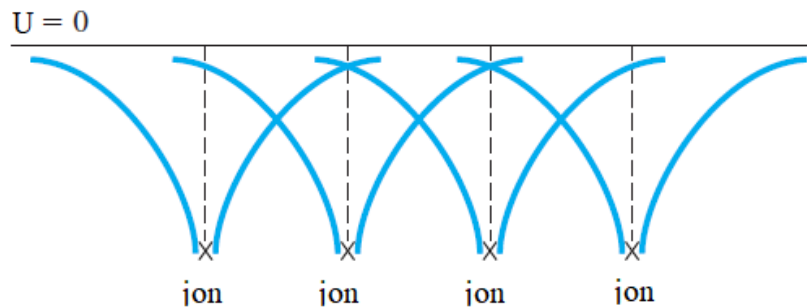
- Izolowane atomy mają dyskretne dozwolone poziomy energetyczne
- Periodyczność sieci w ciele stałym prowadzi również do pojawienia się pasm energetycznych oddzielonych obszarami wzbronionymi



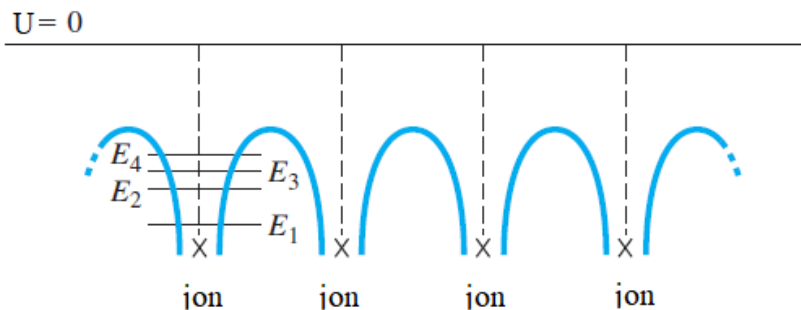
# Energia potencjalna łańcucha monoatomowego



**Energia potencjalna elektronu w izolowanym atomie**



**Przekrycie energii potencjalnej elektronu w kryształcie jednowymiarowym**



**Wypadkowa energia potencjalna elektronu w kryształcie jednowymiarowym**

# Twierdzenie Blocha

W kryształach funkcje falowe będące rozwiązaniem równania Schrödingera z potencjałem periodycznym  $U(\mathbf{r})$  są iloczynem zespolonej fali płaskiej

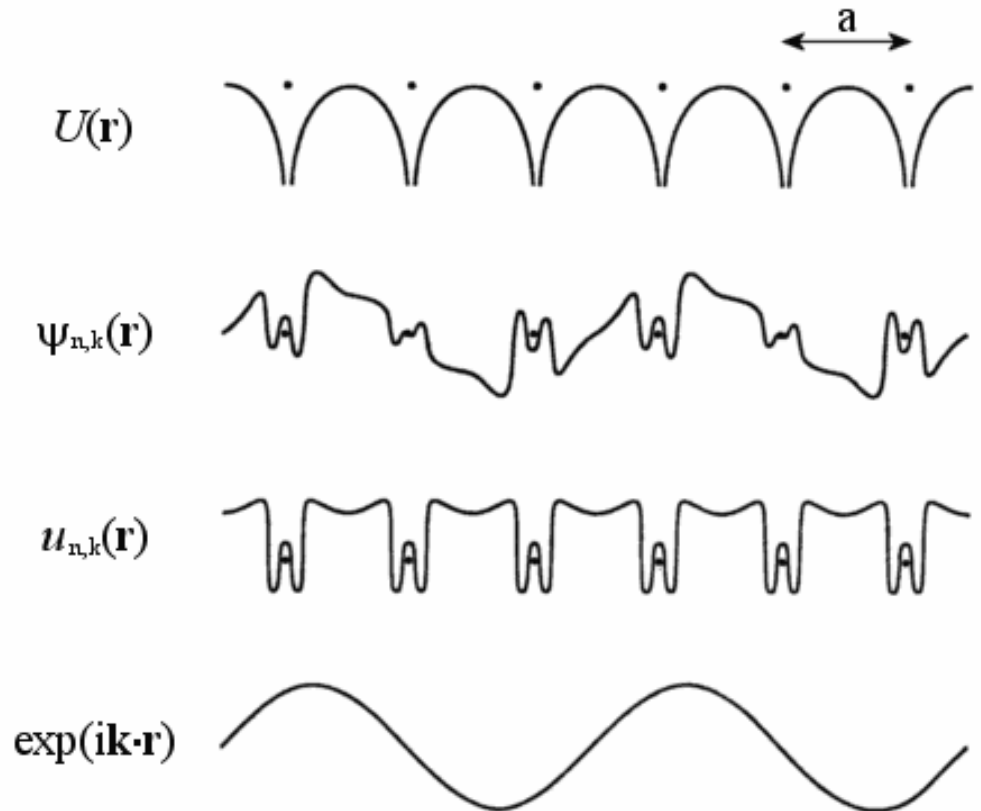
$e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}$  (odpowiadającej swobodnemu elektronowi) i funkcji periodycznej

$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  ( $n$  – liczba całkowita, numeruje pasma).

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Liczba falowa:  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

$\mathbf{k}$  - wektor falowy



# Niejednoznaczność wektora $\mathbf{k}$

Funkcje Blocha posiadają dziwną własność: zarówno same funkcje  $\Psi$  jak i odpowiadające im wartości własne energii  $E$  obliczone dla  $\mathbf{k}$  oraz  $\mathbf{k}+\mathbf{G}$  są identyczne:

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \Psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \quad E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})$$

gdzie  $\mathbf{G}$  jest wektorem sieci odwrotnej:

$$\mathbf{G} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3$$

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

$n_1, n_2$  i  $n_3$  – liczby całkowite,  $\mathbf{a}_i$  są wektorami podstawowymi sieci krystalicznej,  $\mathbf{b}_i$  są wektorami podstawowymi sieci odwrotnej.

Węzły sieci odwrotnej są wyznaczone przez zbiór wektorów  $\mathbf{G}$

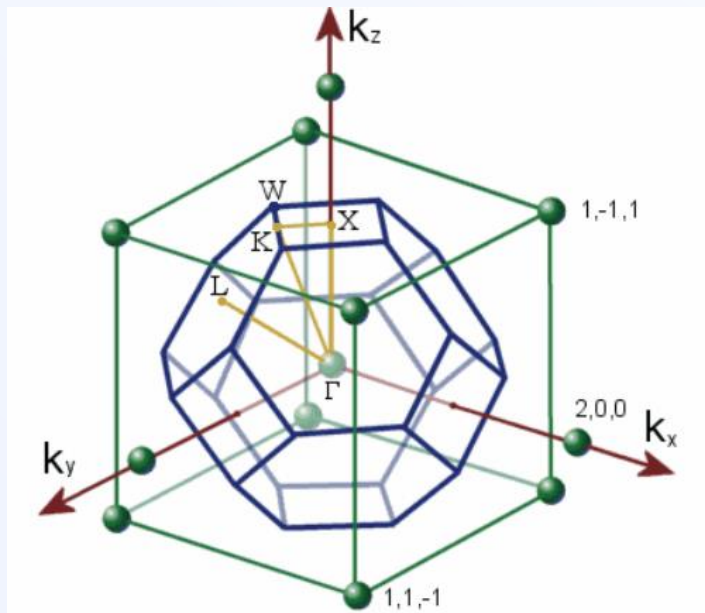
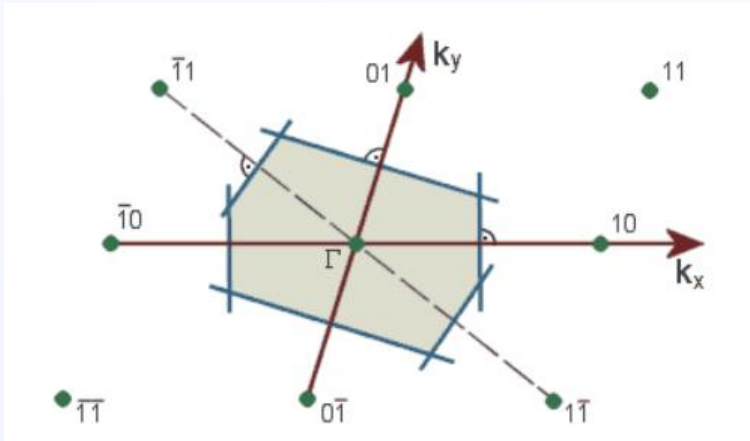
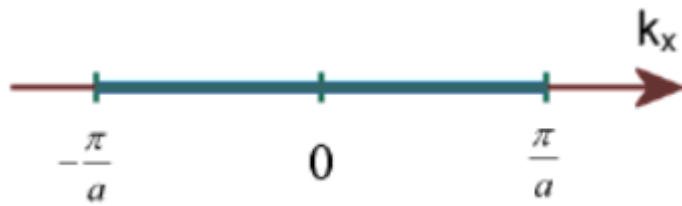
Dla łańcucha monoatomowego  $G = \frac{2\pi}{a}$ , gdzie  $a$  – odległość między atomami.

# I strefa Brillouina

W przestrzeni jednowymiarowej (łańcuch monoatomowy) jest to odcinek od  $-\frac{\pi}{a}$  do  $+\frac{\pi}{a}$

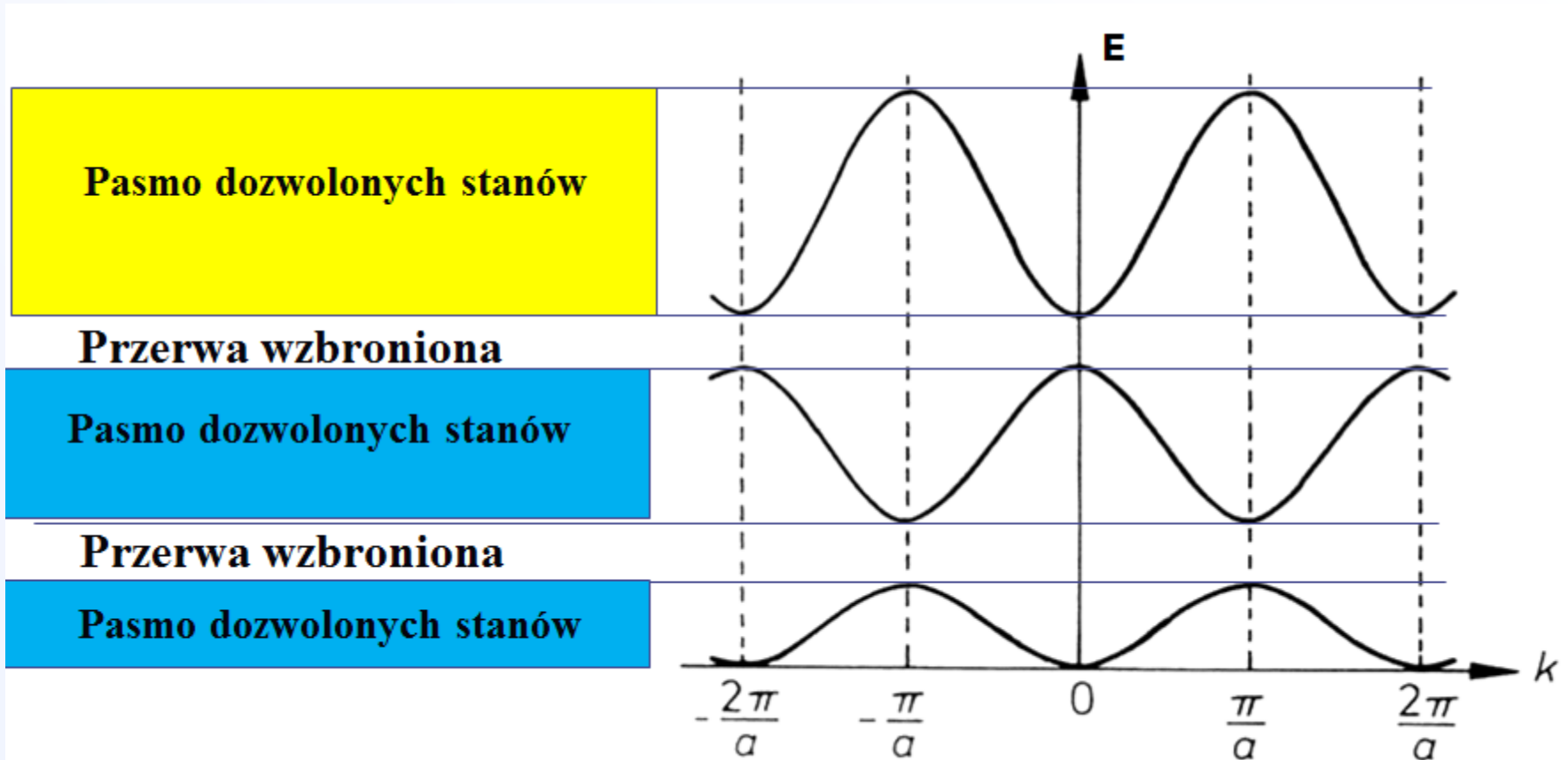
W przestrzeni dwuwymiarowej dla sieci ukośnokątnej jest to obszar ograniczony symetralnymi odcinków łączących sąsiednie węzły sieci odwrotnej.

W kryształ trójwymiarowym dla sieci regularnej powierzchniowo centrowanej (fcc) ograniczające strefę ściany kwadratowe i sześciokątne pochodzą, odpowiednio, od punktów sieci odwrotnej typu  $(2,0,0)$  i  $(1,1,1)$ .



# Periodyczność $E(\mathbf{k})$

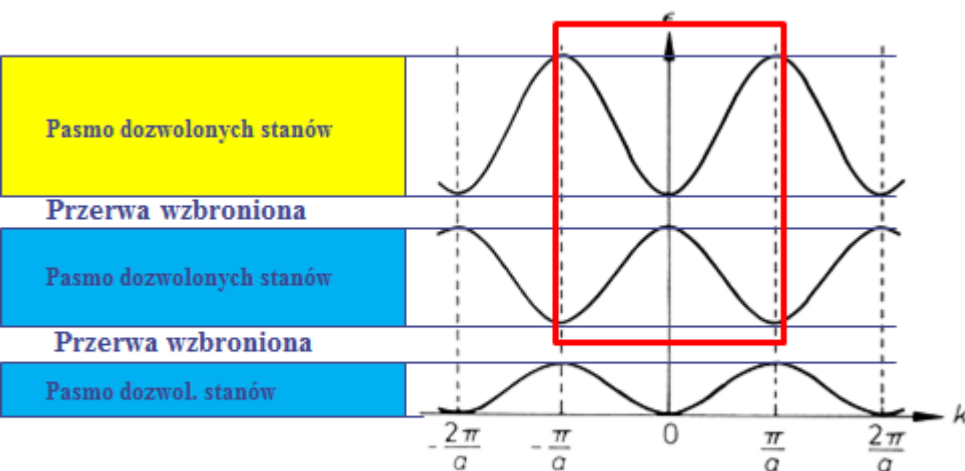
$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})$$



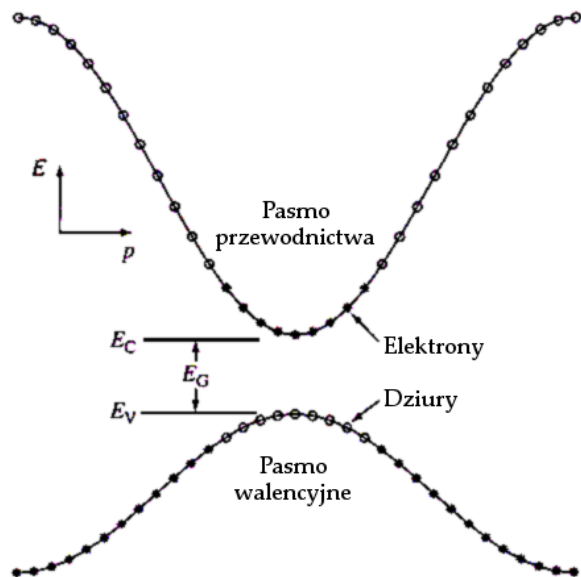
Ze względu na tę periodyczność, wystarczy ograniczyć się do obszaru

od  $-\frac{\pi}{a}$  do  $+\frac{\pi}{a}$ , czyli do tzw. I-szej strefy Brillouina

# $E(k)$ (relacja dyspersji)

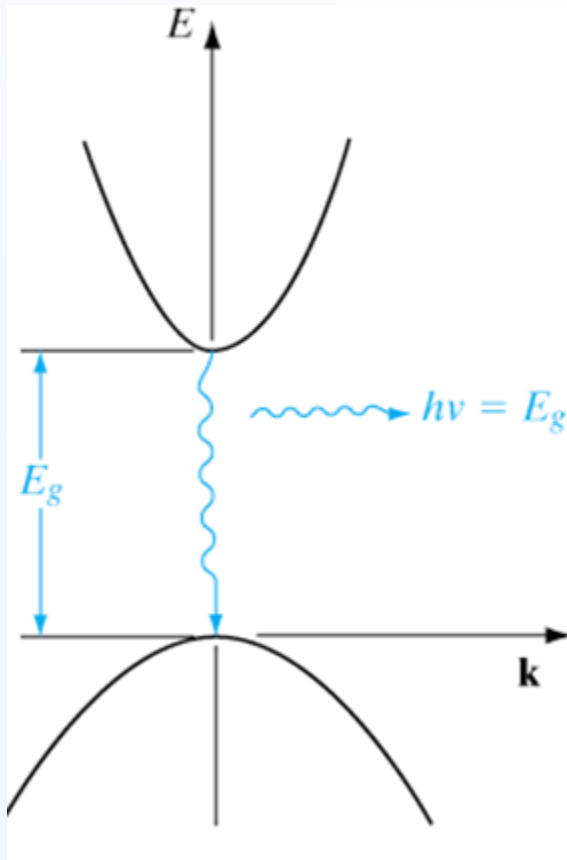


Jak wcześniej wspomniano, ze względu na periodyczność  $E(k)$ , wystarczy ograniczyć się do obszaru tzw. I-szej strefy Brillouina.

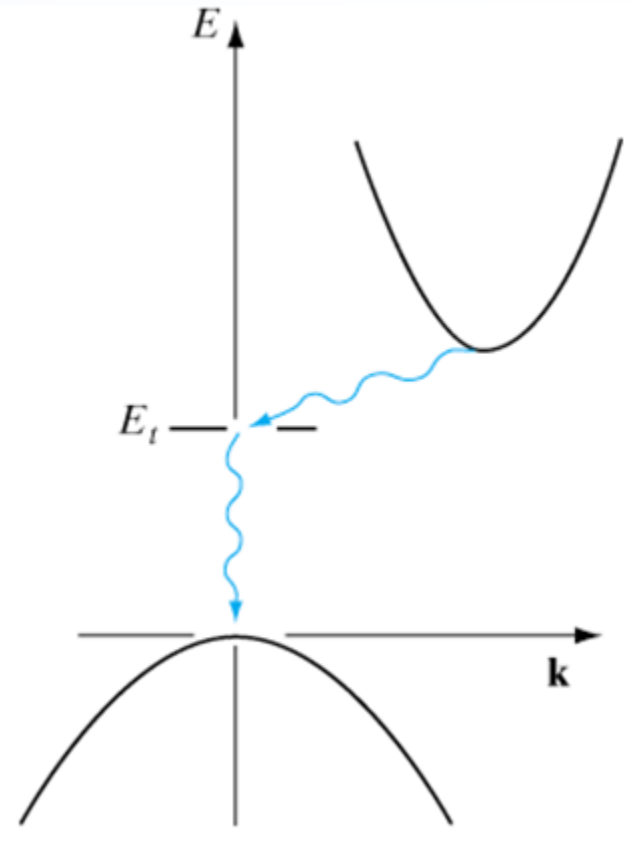


W większości półprzewodników pasmo przewodnictwa i pasmo walencyjne w pobliżu swoich krawędzi mają postać jak na rysunku obok. Z całej zależności  $E(k)$  „wycinamy” obszar zaznaczony na górnym rys. na czerwono

# Półprzewodniki z prostą i skośną przerwą wzbronioną



Przerwa prosta



Przerwa skośna

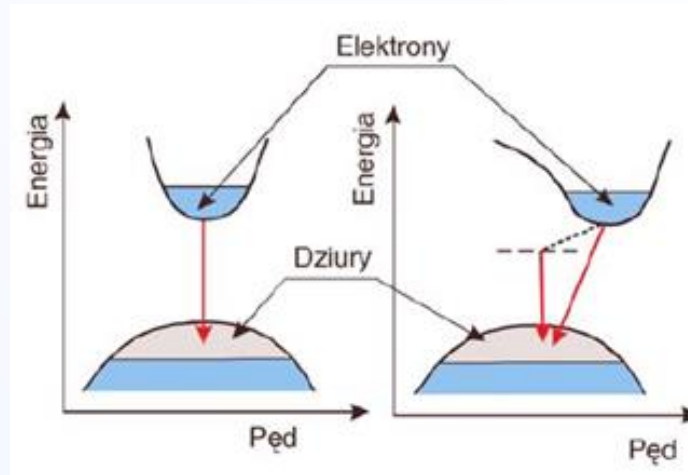


# Relacja dyspersji $E(k)$ i rekombinacja promienista

$$E_2 - E_1 = h\nu$$

$$p_{\text{fotonu}} \ll p_{\text{elektronu}}$$

$$p = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k$$



**Przerwa prosta:**

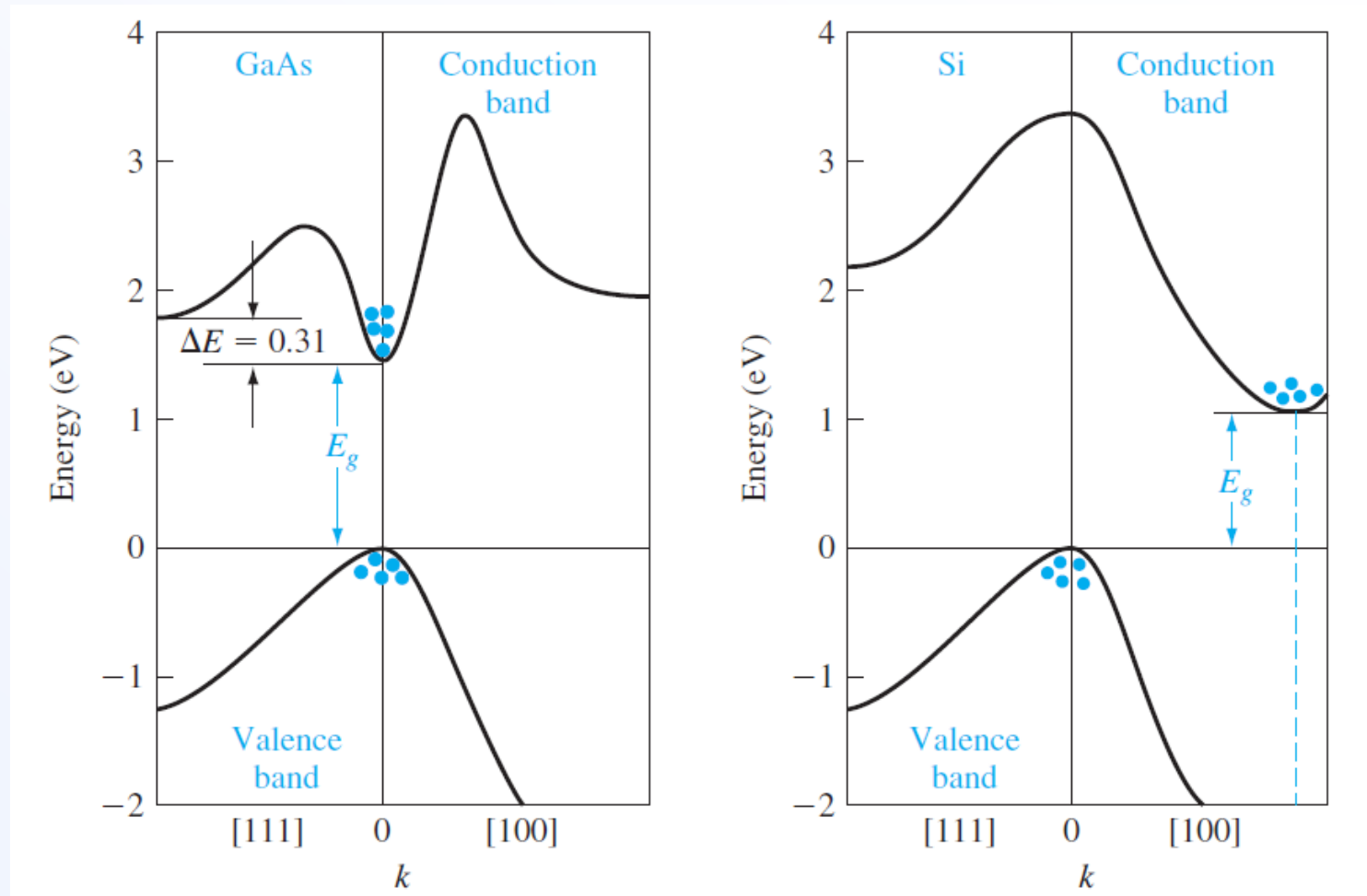
$$p_2 - p_1 \cong 0$$

**Przerwa skośna:**

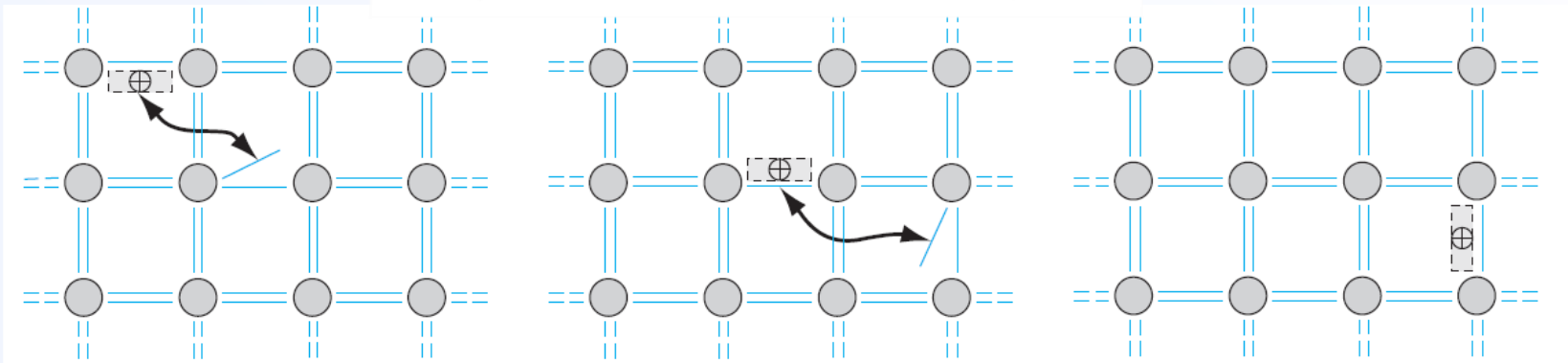
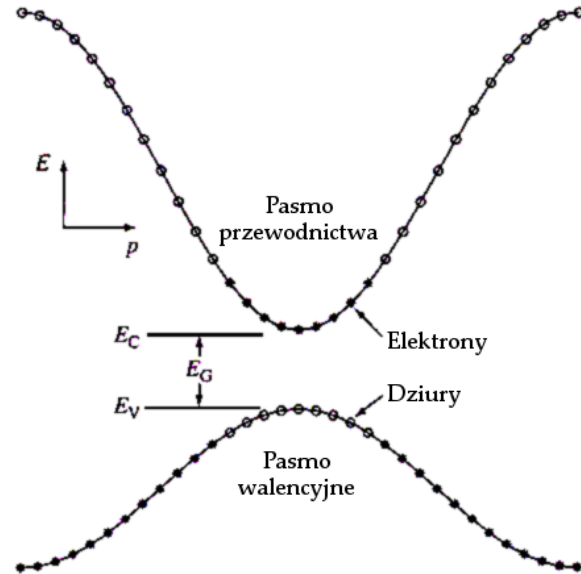
$$p_2 - p_1 \cong p_{\text{fononu}}$$

Aby mogła nastąpić emisja lub absorpcja światła, muszą zostać spełnione zasady zachowania energii i pędu (w kryształach tj. pseudopęd). Pęd fotonu jest do pominięcia w stosunku do pędu elektronu w ciele stałym. Dlatego emisja i absorpcja w półprzewodniku z prostą przerwą wzbronioną są dużo bardziej prawdopodobne niż w przypadku półprzewodnika ze skośną przerwą, gdzie w obydwu procesach musi wziąć udział trzecia cząstka – fonon. Inaczej nie zostanie spełniona zasada zachowania pędu.

# Półprzewodniki z prostą i skośną przerwą wzbronioną



# Koncepcja dziury



# Koncepcja dziury

Elektron opisany funkcją Blocha jest naładowaną cząstką biegnącą przez kryształ. W obrazie klasycznym reprezentuje prąd elektryczny. W paśmie całkowicie wypełnionym każdemu elektronowi o wektorze falowym  $k$  /prędkości  $V_i$ ) towarzyszy elektron z  $-k$ /prędkością  $-V$  i odpowiednie przyczynki do prądu znoszą się.

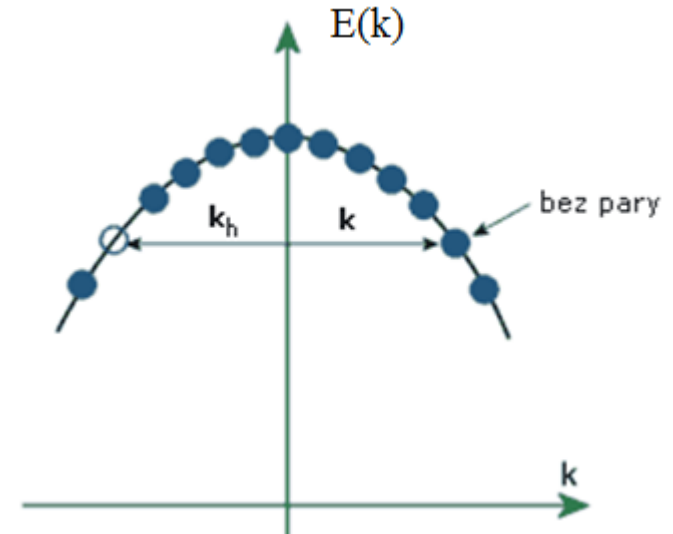
$$J = (-e) \sum_i^N \mathbf{V}_i = 0$$

Jeśli zabierzemy jeden elektron, to utworzymy dziurę, ale prąd będzie wówczas różny od zera:

$$J = (-e) \underbrace{\sum_i^N \mathbf{V}_i}_{=0} - (-e) \mathbf{V}_e = e \mathbf{V}_e$$

Taki sam prąd utworzymy jeśli do całkowicie wypełnionego pasma wprowadzimy dziurę o nieznanym ładunku  $q_h$  i nieznannej prędkości  $v_h$

$$J = (-e) \underbrace{\sum_i \mathbf{V}_i}_{=0} + q_h \mathbf{V}_h = q_h \mathbf{V}_h$$



# Pojęcie i właściwości dziury

$$J = \underbrace{(-e) \sum_i \mathbf{V}_i}_{=0} - (-e) \mathbf{V}_e = e \mathbf{V}_e$$

$$J = \underbrace{(-e) \sum_i \mathbf{V}_i}_{=0} + q_h \mathbf{V}_h = q_h \mathbf{V}_h$$



$$q_h = +e$$

$$\mathbf{V}_h = \mathbf{V}_e$$

**Przyspieszenie brakującego elektronu i dziury są takie same:**

$$a_e = -\frac{eE}{m_e^*} = \frac{eE}{m_h^*} = a_h$$



$$m_h^* = -m_e^*$$

---

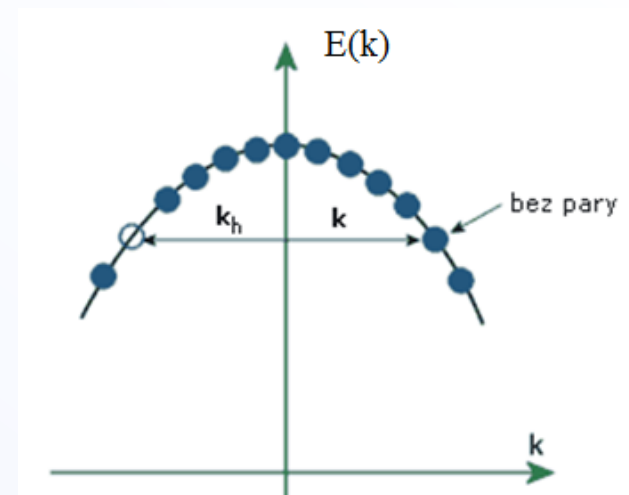
# Masa efektywna

**Dla elektronu swobodnego:**

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m} \quad \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m} \quad m = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

**Dla elektronu w sieci krystalicznej:**

$$m_e^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$



**Dla dziury w sieci krystalicznej  
(w pasmie walencyjnym):**

$$E_h = -E_e$$

$$m_h^* = -m_e^*$$

$$\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$$

# Relacja E(k) decyduje o masie efektywnej!

- Masa efektywna elektronów w punkcie  $\Gamma$  w GaAs w pasmie przewodnictwa jest mała (duża krzywizna, pochodna  $\frac{d^2 E}{dk^2}$  duża i  $m_e^*$  mała) w porównaniu do masy efektywnej dziur w punkcie  $\Gamma$  (mała krzywizna, pochodna  $\frac{d^2 E}{dk^2}$  mała i  $m_h^*$  duża)

$$m_e^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

- Elektrony przy wierzchołku pasma walencyjnego mają masę efektywną ujemną.  
Dziury – dodatnią.

