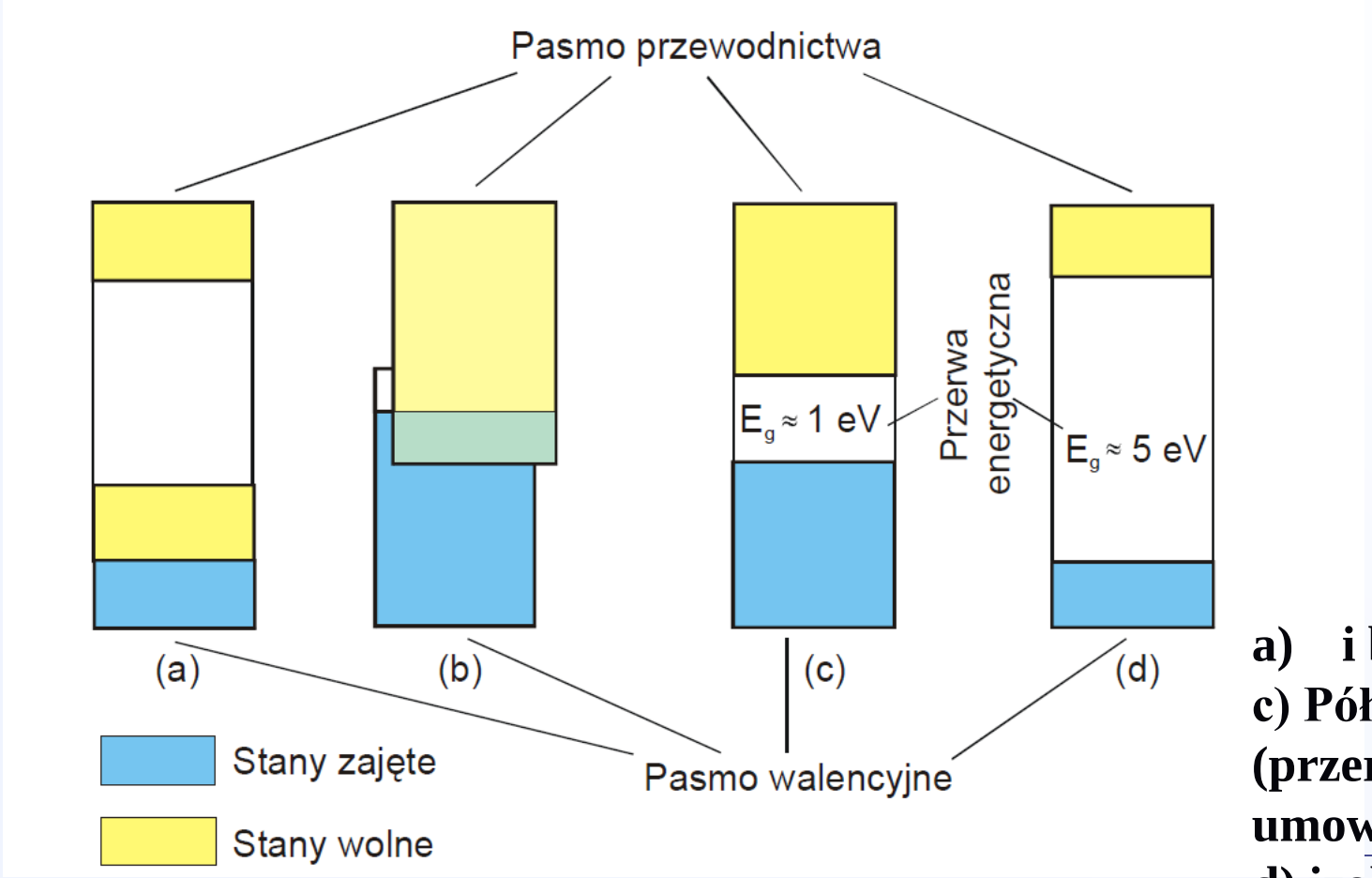
# Wykład III

# Periodyczność sieci krystalicznej i relacja dyspersji

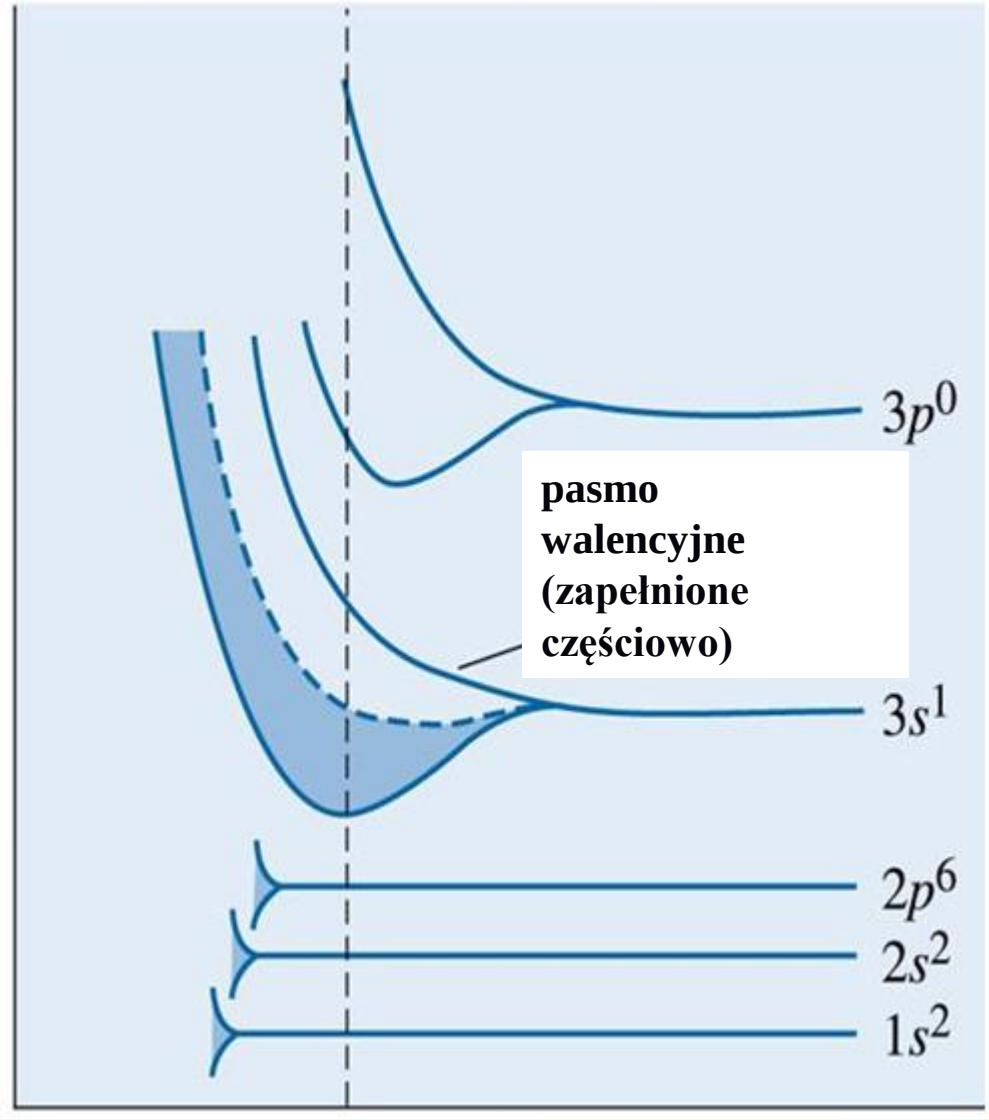
# Metale, izolatory, półprzewodniki

- **Zbliżenie atomów w krysztale 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 krysztale sodu

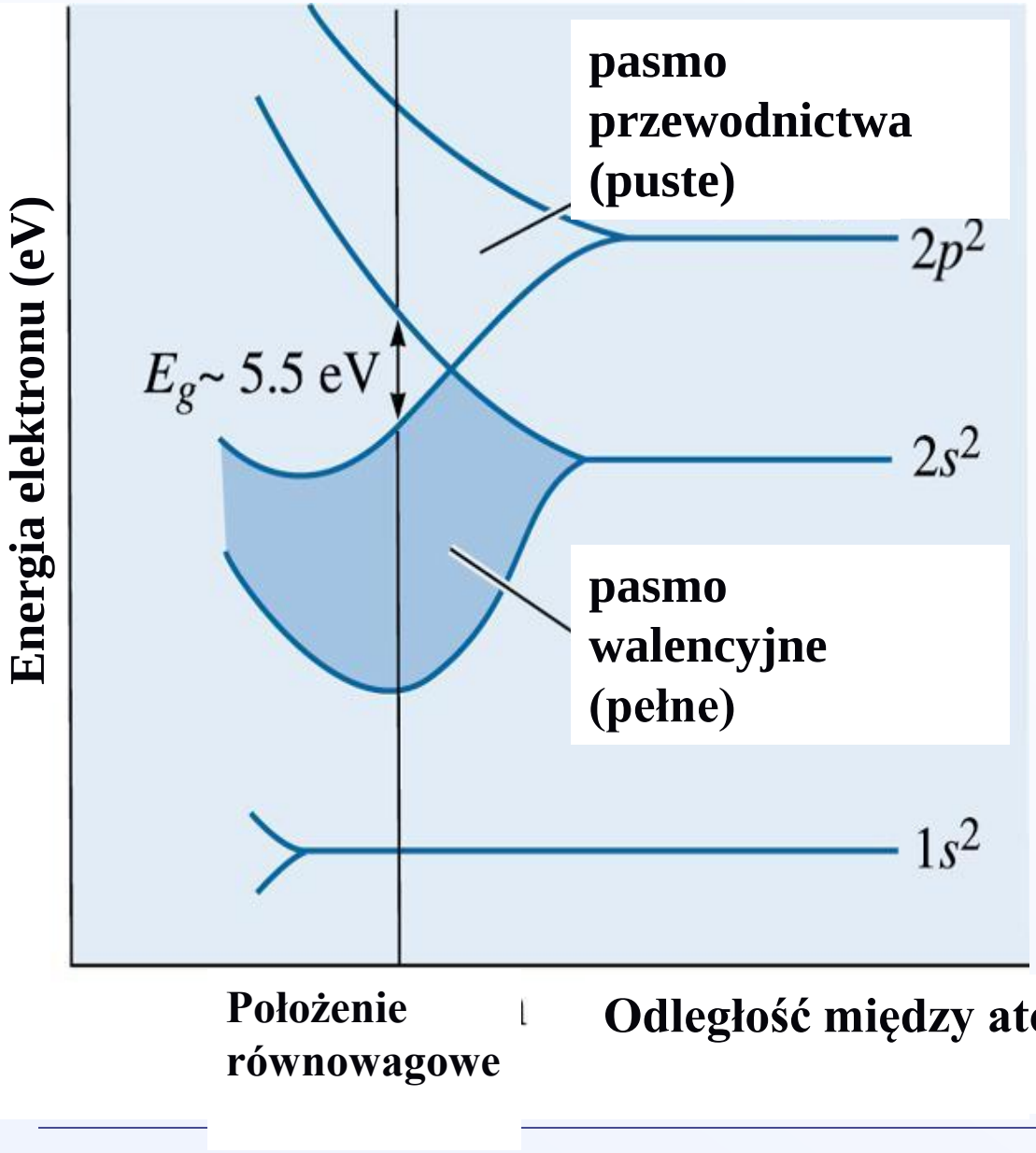



**Konfiguracja w izolowanym atomie Na:**

$1s^2\ 2s^2 2p^6\ 3s^1$

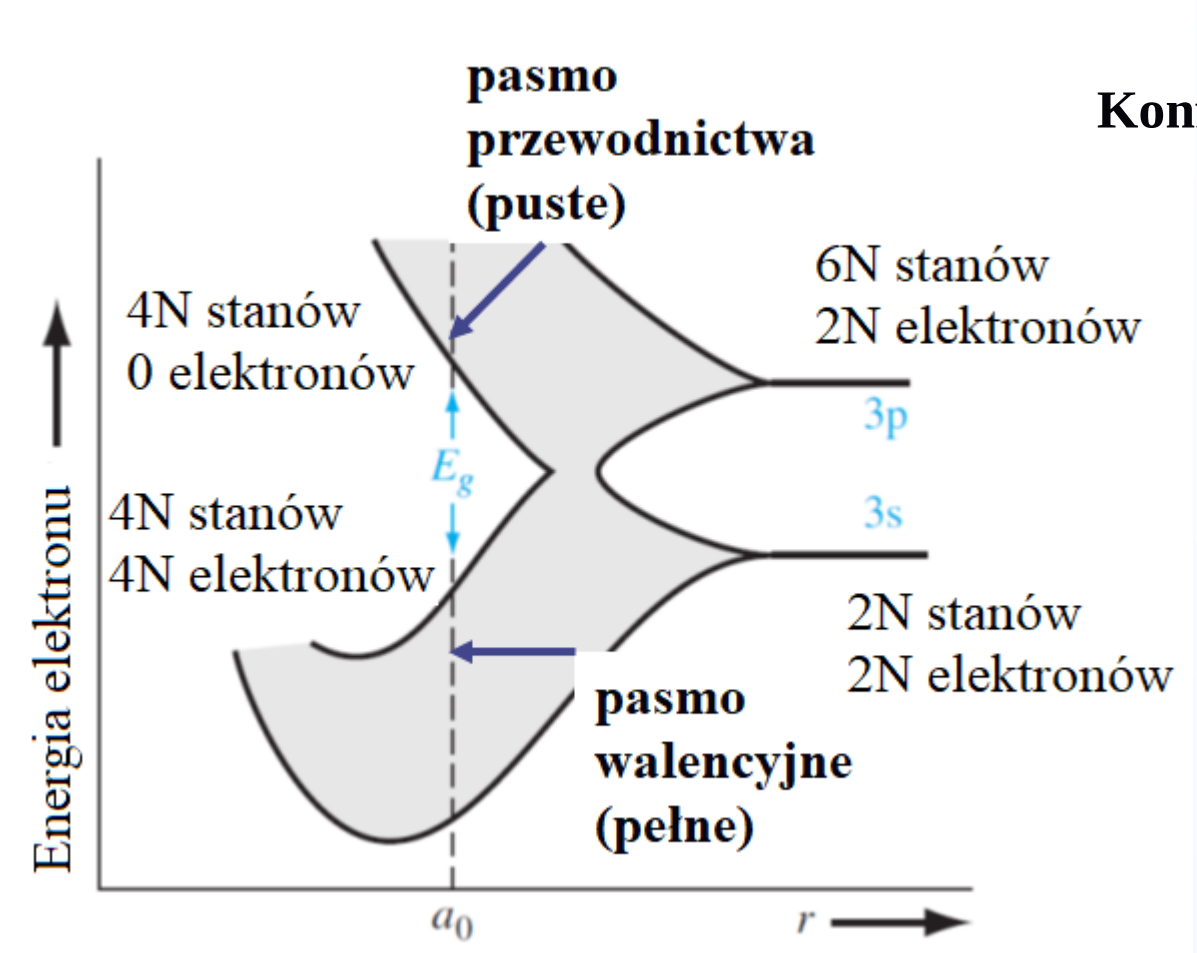
**Ne**

# Powstawanie pasm w krysztale diamentu




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

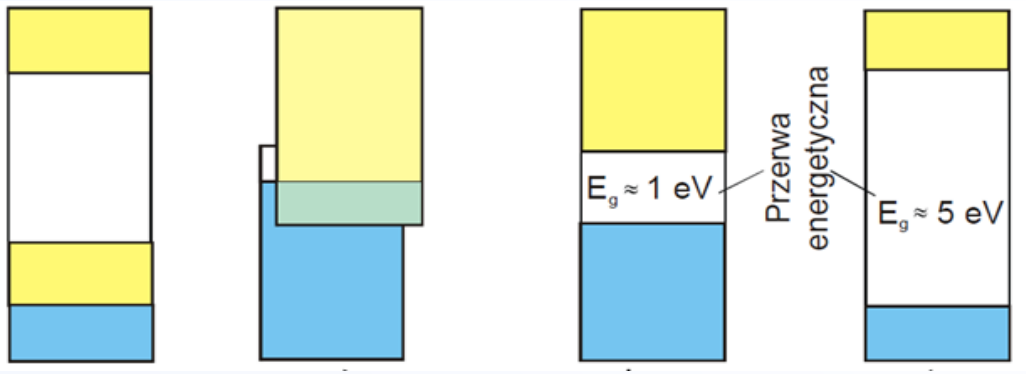
# Powstawanie pasm w krysztale krzemu




**Konfiguracja w izolowanym atomie Si:**

**$1s^2\ 2s^2 2p^6\ 3s^2 3p^2$**

# Metale, izolatory, półprzewodniki




**metale** **półprzewodnik** **izolator**

**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);**

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

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

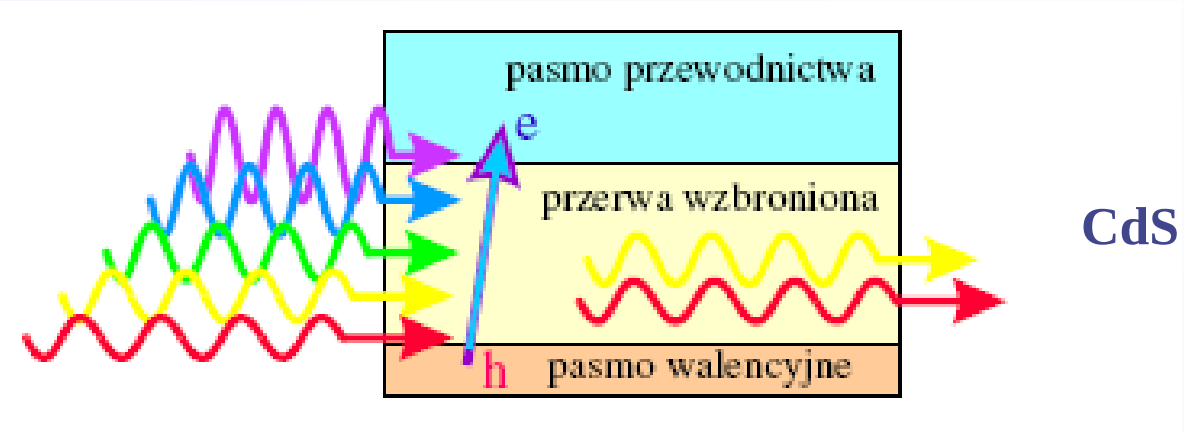
- **wykładniczy spadek oporności półprzewodników ze wzrostem temperatury (im wyższa temperatura, tym większe prawdopodobieństwo, że elektron znajdzie się w pasmie przewodnictwa).**

# Krawędź absorpcji

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

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

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




CdS

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

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

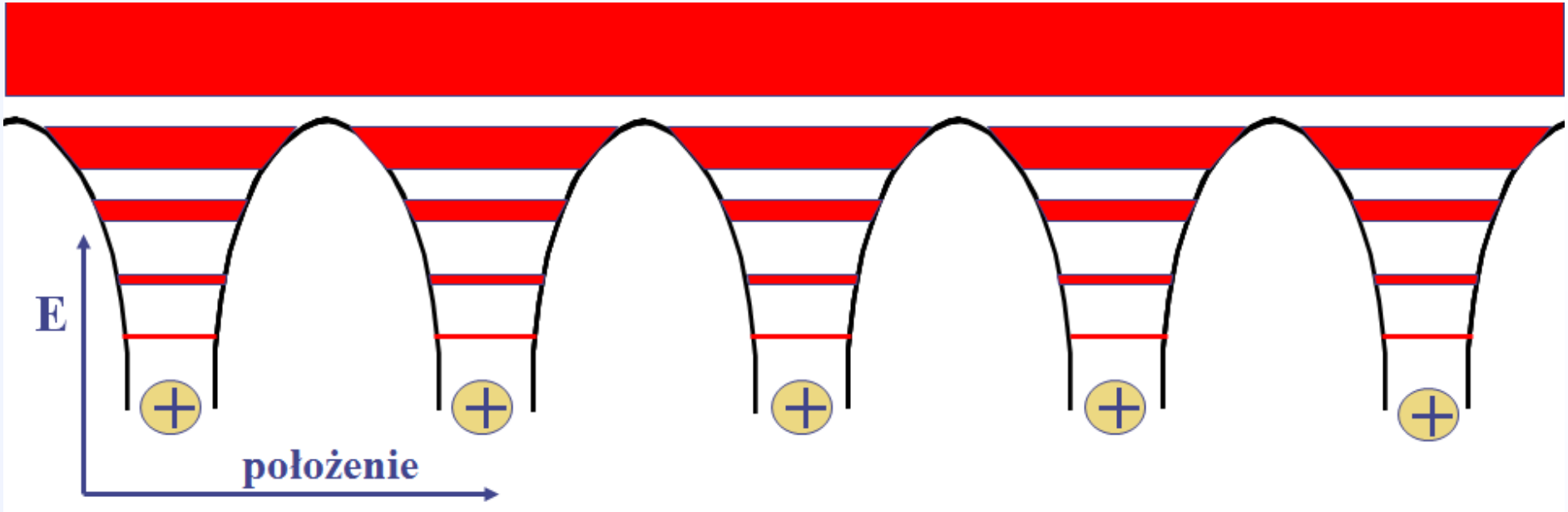
# Kłopoty

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

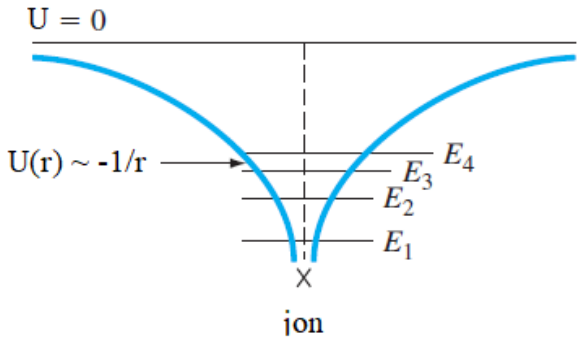
**Problem rozwiązuje uwzględnienie periodyczności sieci krystalicznej.**

# Periodyczność sieci i dozwolone pasma energii

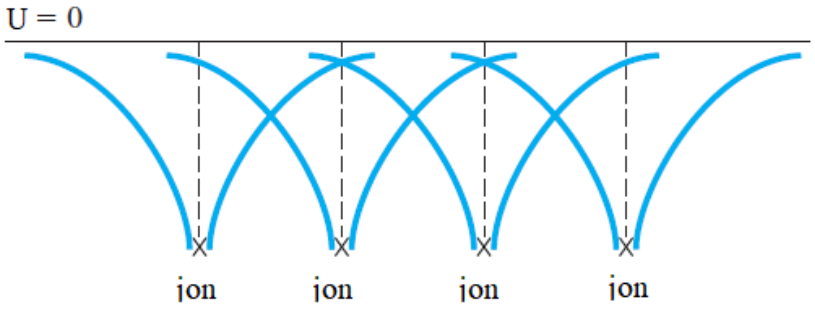
- Izolowane atomy mają dyskretne dozwolone poziomy energetyczne
- Periodyczność sieci w ciele stałym prowadzi również do pojawienia się pasm energetycznych oddzielonych obszarami wzbronionymi



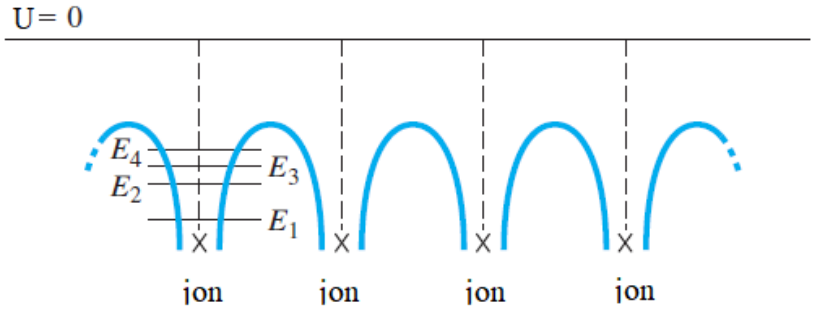
# Energia potencjalna łańcucha monoatomowego




**Energia potencjalna elektronu w izolowanym atomie**




**Przekrycie energii potencjalnej elektronu w krysztale jednowymiarowym**




**Wypadkowa energia potencjalna elektronu w krysztale jednowymiarowym**

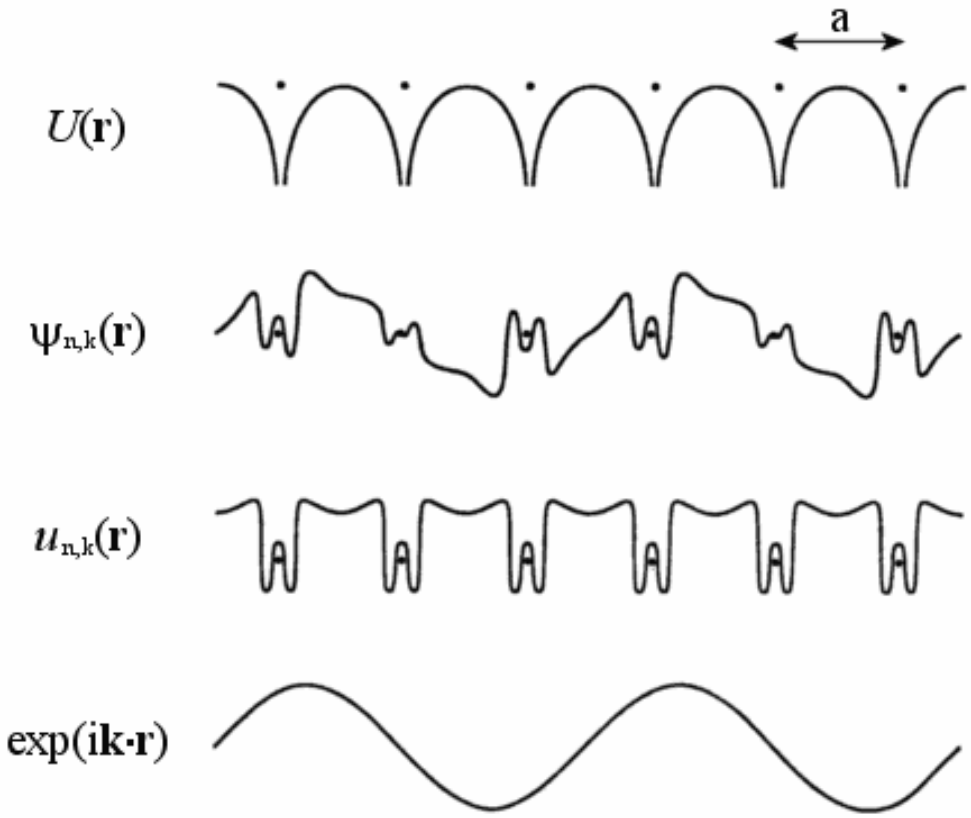
# Twierdzenie Blocha

**W krysztale funkcje falowe będące rozwiązaniem równania Schrödingera z potencjałem periodycznym U(r) są iloczynem zespolonej fali płaskiej $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}$ (odpowiadającej swobodnemu elektronowi) i funkcji periodycznej $u_{n,k}(\mathbf{r})$ (n – liczba całkowita, numeruje pasma).**

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}} u_{nk}(\mathbf{r})$$

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

***k* - wektor falowy**



# Niejednoznaczność wektora k

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

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

**gdzie G jest <u>wektorem sieci odwrotnej:</u>**

$$\mathbf{G} = n_1\mathbf{b_1} + n_2\mathbf{b_2} + n_3\mathbf{b_3}$$

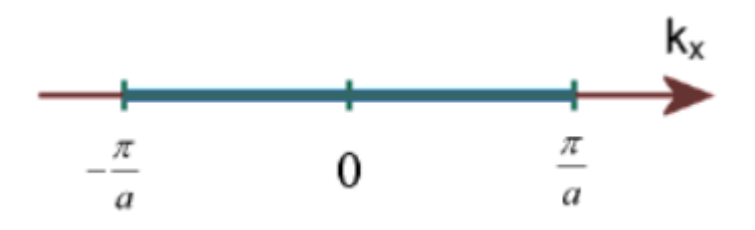
$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3} \qquad \mathbf{b}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3} \qquad \mathbf{b}_3 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}$$

**$n_1$,$n_2$ i $n_3$ – liczby całkowite, $a_i$ są wektorami podstawowymi sieci krystalicznej, $b_i$ są wektorami podstawowymi sieci odwrotnej.**

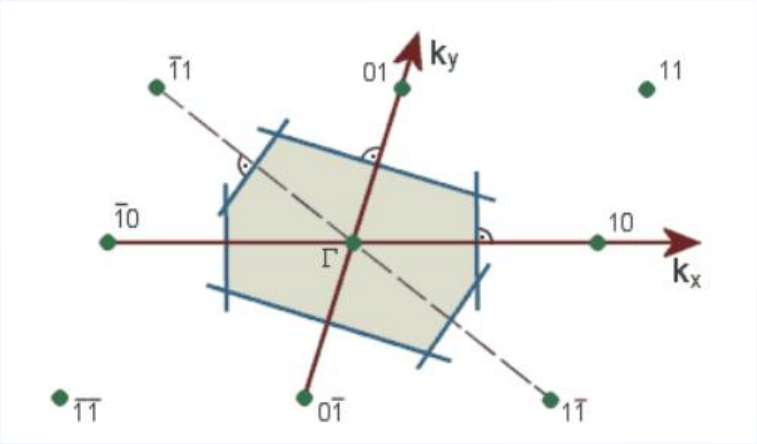
**Węzły sieci odwrotnej są wyznaczone przez zbiór wektorów G**

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

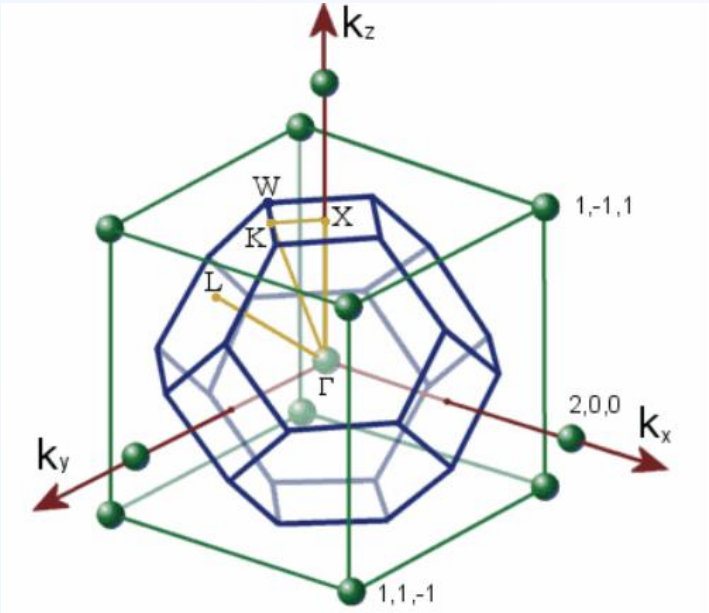
# I strefa Brillouina




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



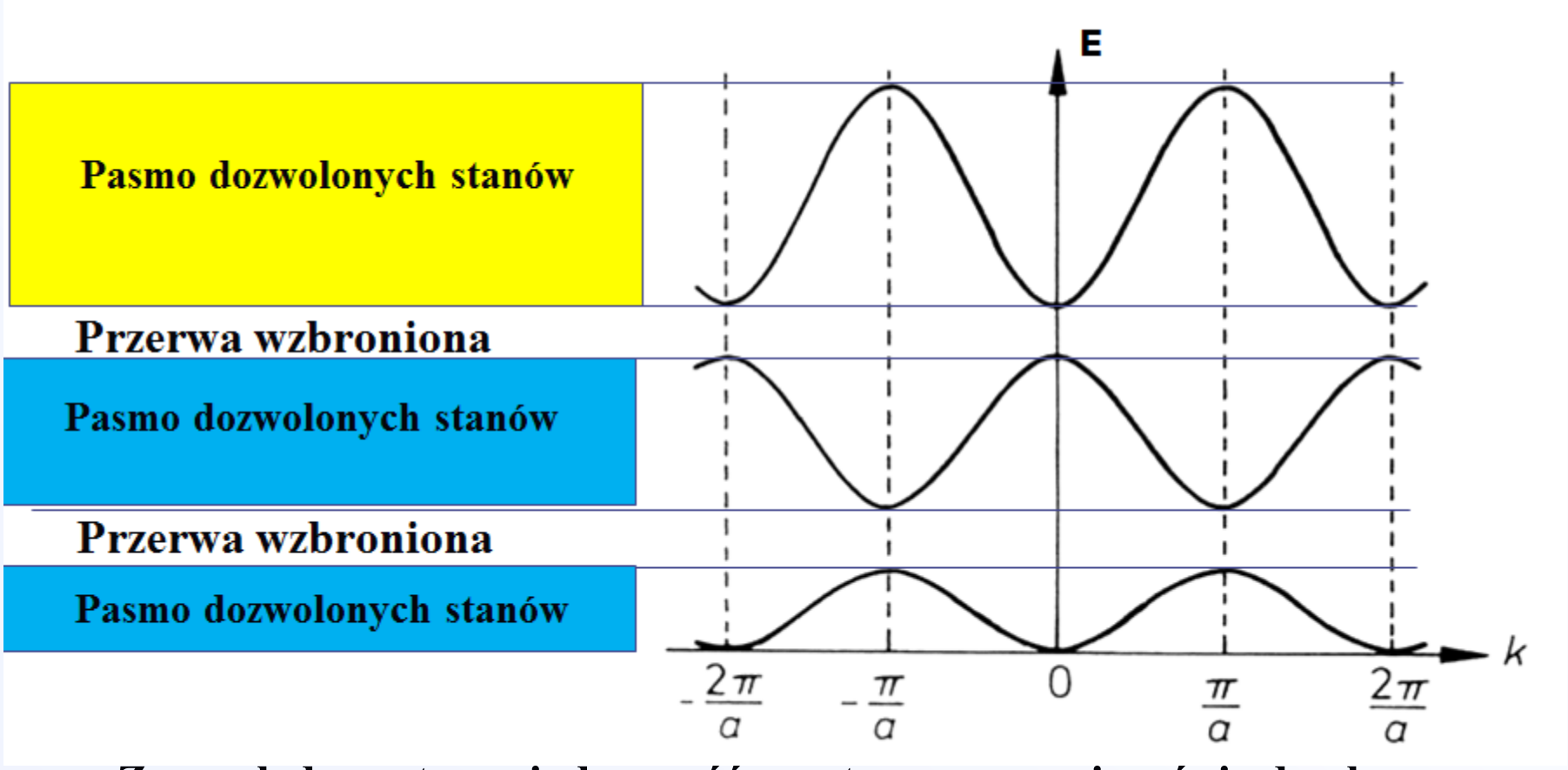

**W przestrzeni dwuwymiarowej dla sieci ukośnokątnej jest to obszar ograniczony symetralnymi odcinków łączących sąsiednie węzły sieci odwrotnej.**




**W krysztale 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(k)

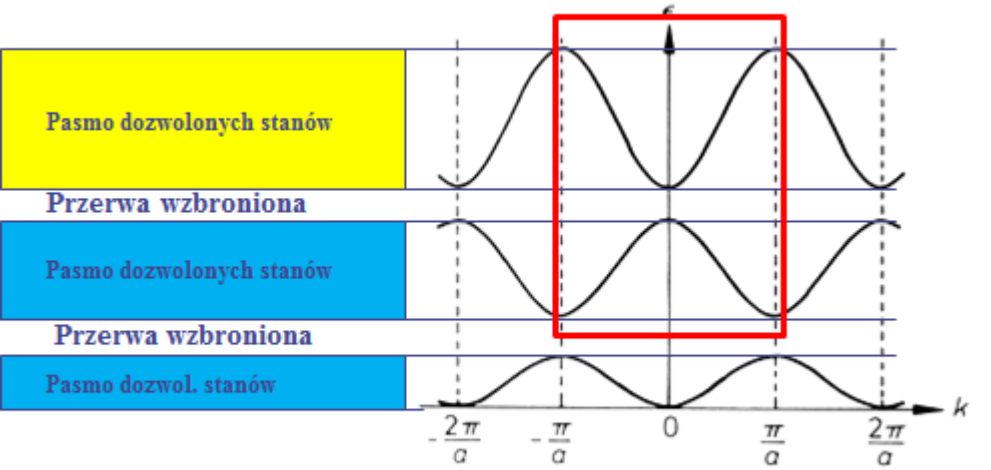
$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})$$



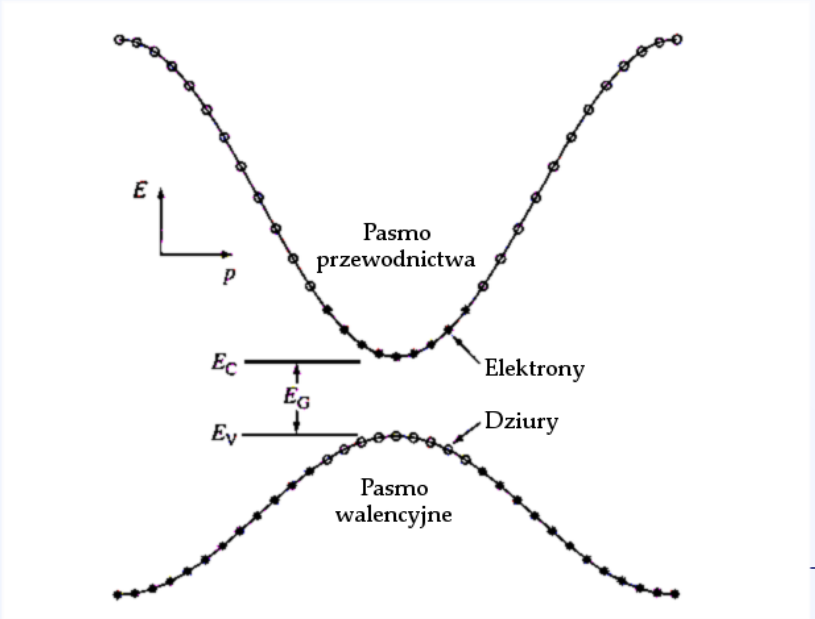

**Ze względu na tę periodyczność, wystarczy ograniczyć się do obszaru**

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

# E(k) (relacja dyspersji)

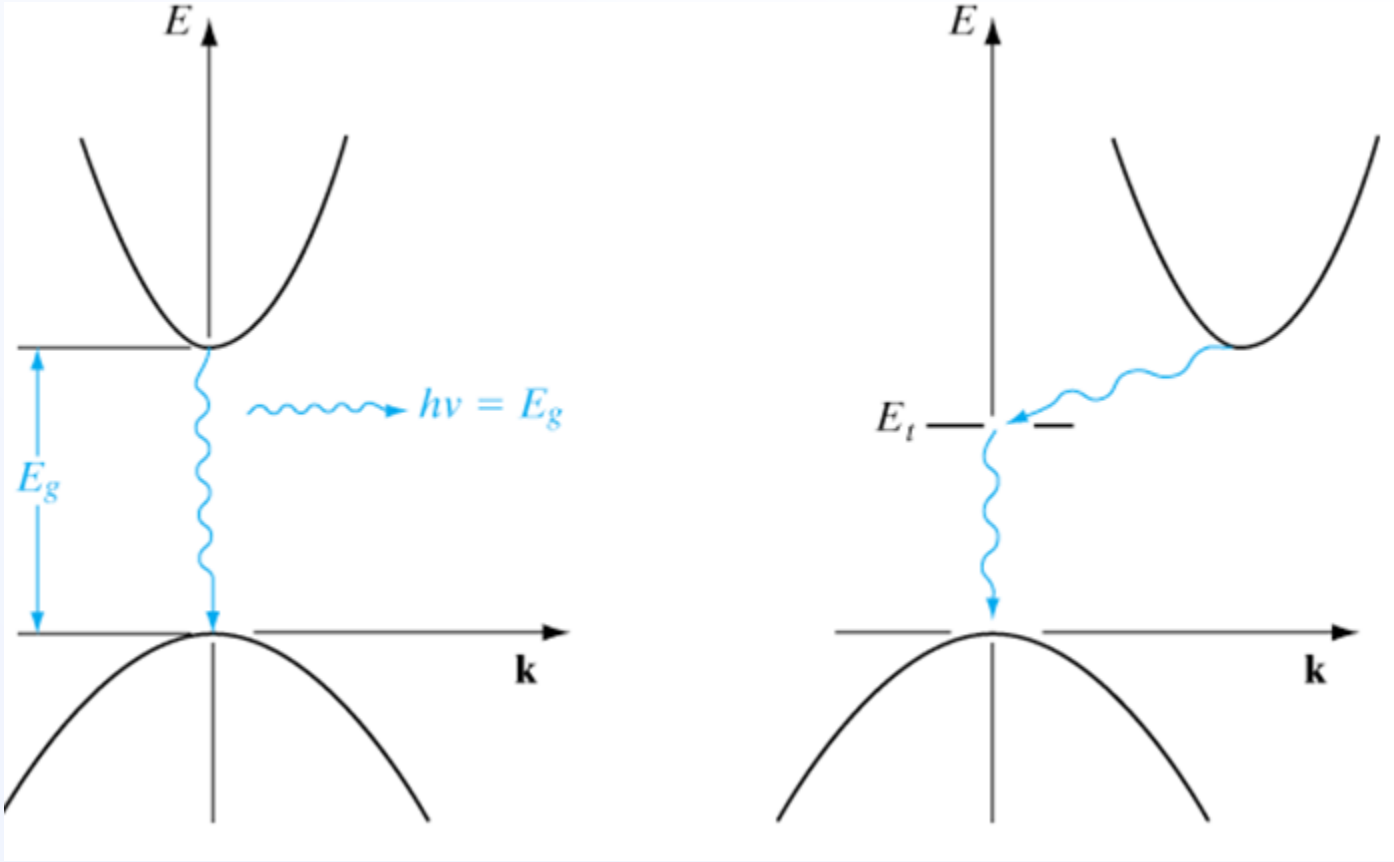



**Jak wcześniej wspomniano, ze względu na periodyczność E(k), wystarczy ograniczyć się do obszaru tzw. I-szej strefy Brillouina.**




**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



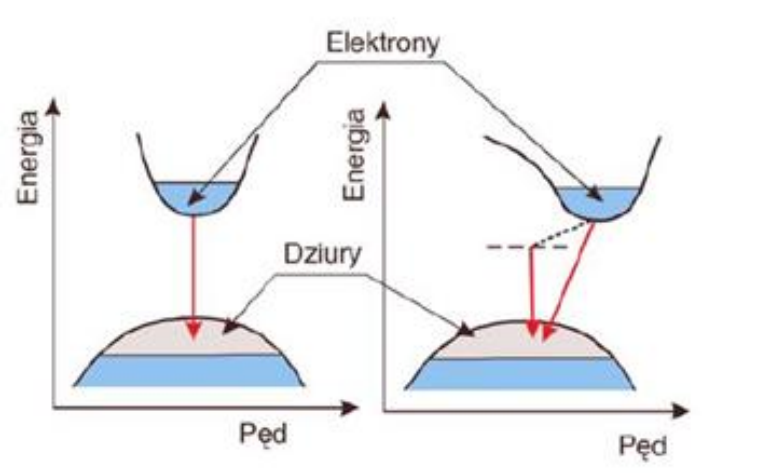

**Przerwa prosta** **Przerwa skośna**

# Relacja dyspersji E(k) i rekombinacja promienista

$$E2 - E1 = h\nu$$

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

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

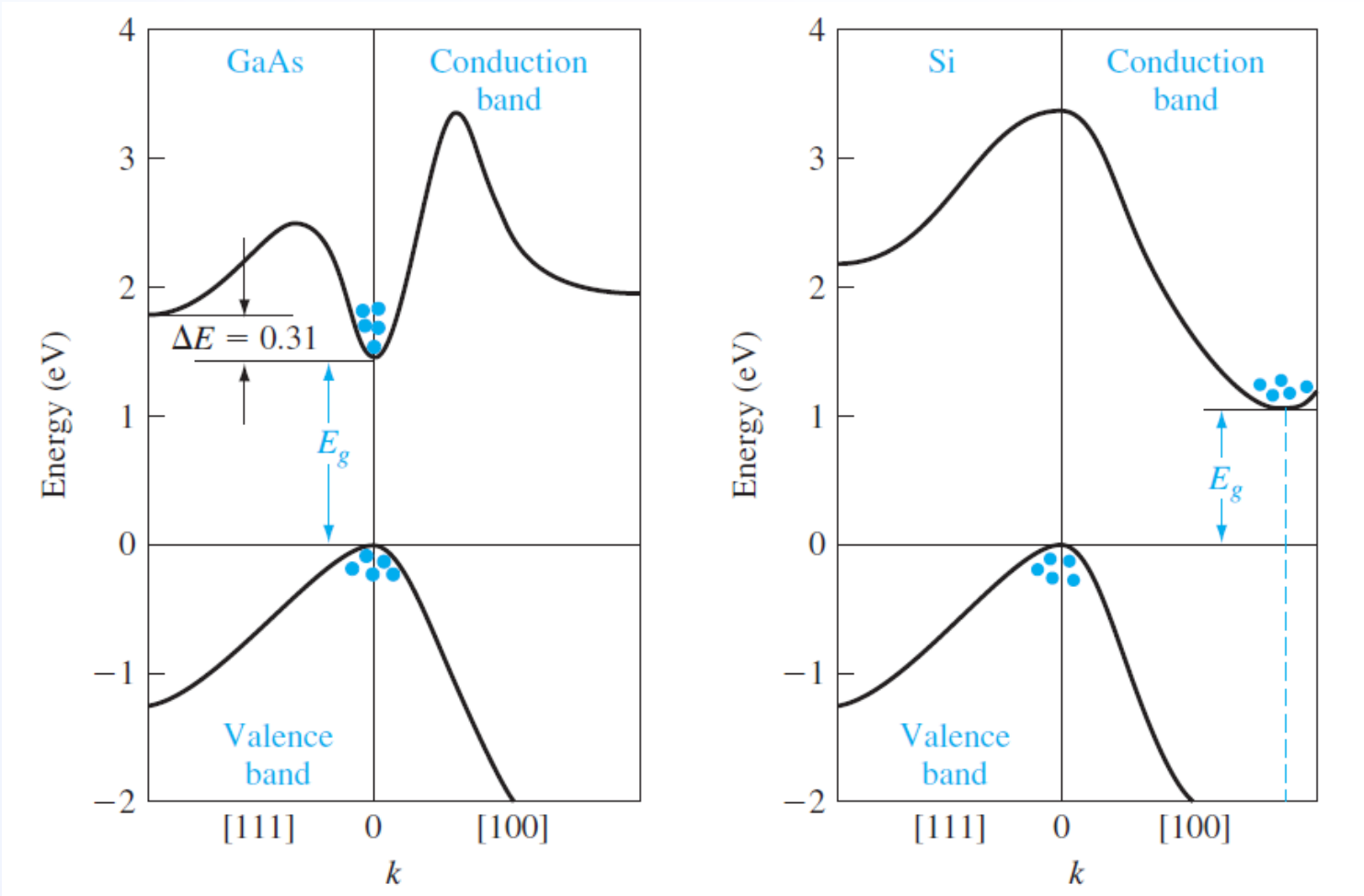



**Przerwa prosta:** $p_2 - p_1 \cong 0$

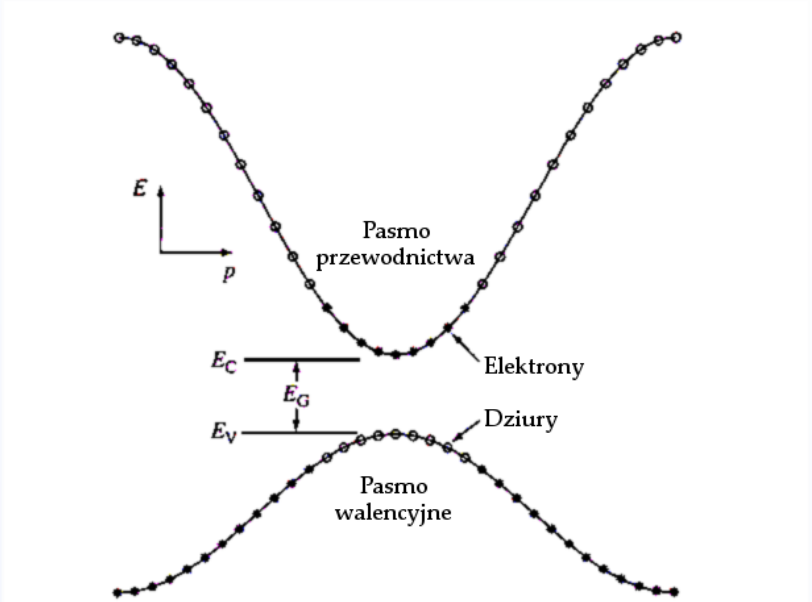
**Przerwa skośna:** $p_2 - p_1 \cong p_{fononu}$

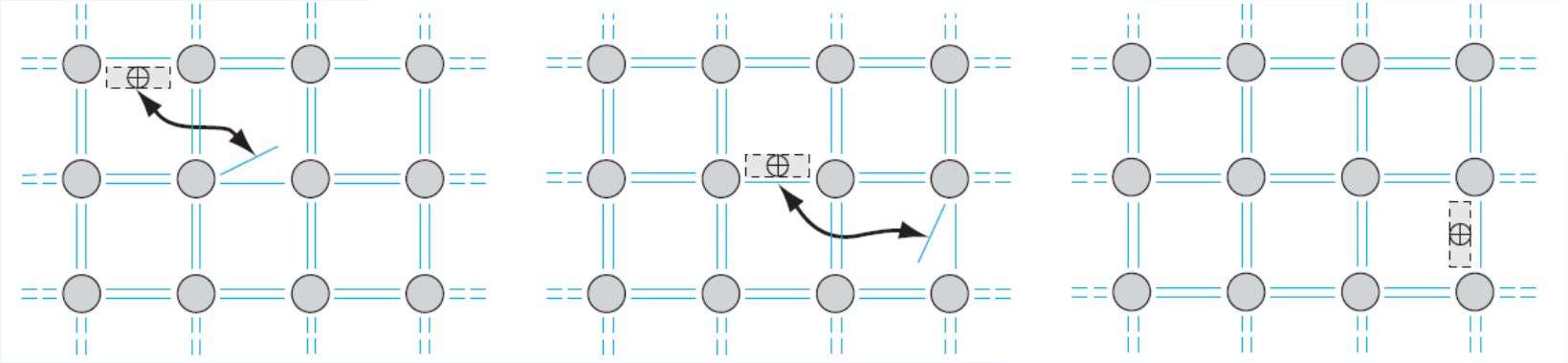
**Aby mogła nastąpić emisja lub absorpcja światła, muszą zostać spełnione zasady zachowania energii i pędu (w krysztale tj. pseudopęd). Pęd fotonu jest do pominięcia w stosunku do pędu elektronu w ciele stałym. Dlatego emisja i absorpcja w półprzewodniku z prostą przerwą wzbronioną są dużo bardziej prawdopodobne 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



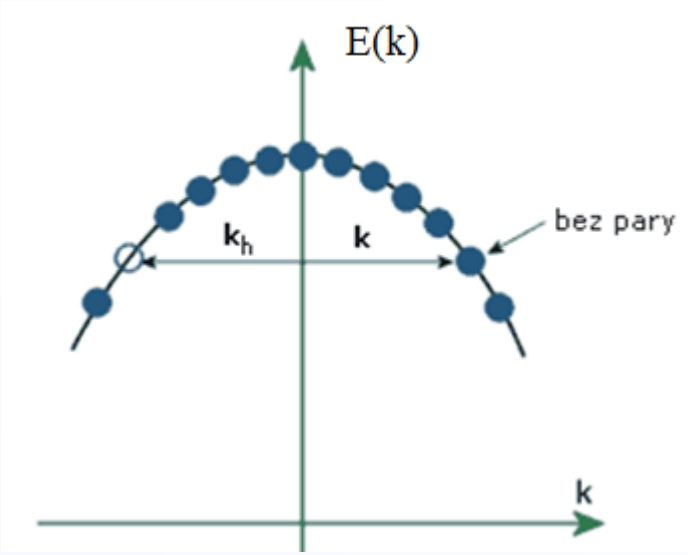



**Elektron porusza się w lewo a dziura w prawo**

# Koncepcja dziury

**Elektron opisany funkcją Blocha jest naładowaną cząstką biegnącą przez kryształ. W obrazie klasycznym reprezentuje prąd elektryczny. W paśmie całkowicie zapełnionym 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 wytworzymy dziurę, ale prąd będzie wówczas różny od zera:**

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

**Taki sam prąd wytworzymy jeśli do całkowicie zapełnionego pasma wprowadzimy dziurę o nieznanym ładunku $q_h$ i nieznanej prędkości $v_h$**

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

# Pojęcie i właściwości dziury

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

$$\downarrow$$

$$q_h = +e \qquad \mathbf{v_h = v_e}$$

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

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

$$\downarrow$$

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

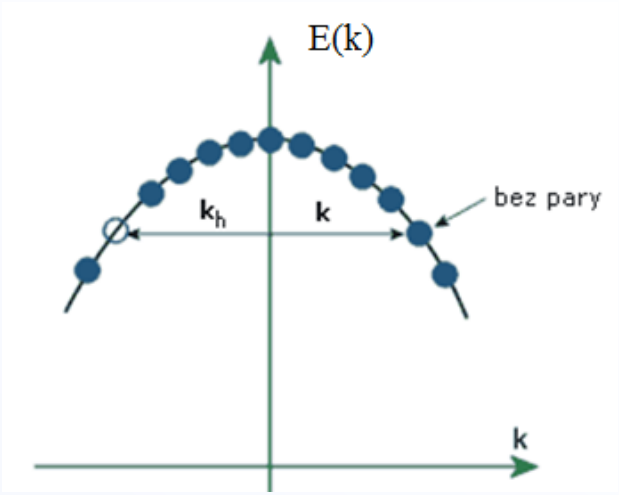
# Masa efektywna

**Dla elektronu swobodnego:**

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

**Dla elektronu w sieci krystalicznej:**

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



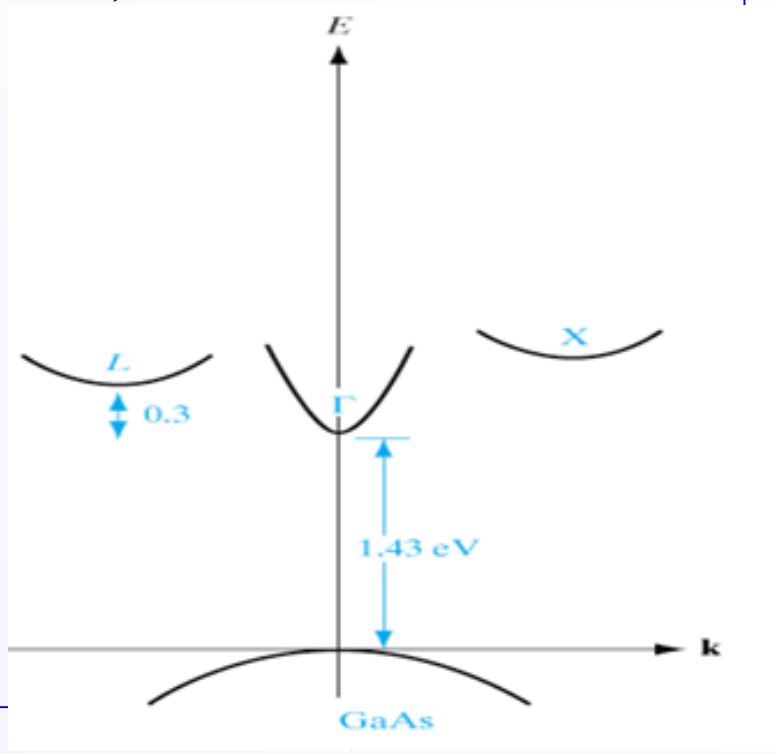

**Dla dziury w sieci krystalicznej (w pasmie walencyjnym):**

$$E_h = -E_e \qquad m_h^* = -m_e^* \qquad \mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$$

# Relacja E(k) decyduje o masie efektywnej!

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

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




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