F10 Halvledare

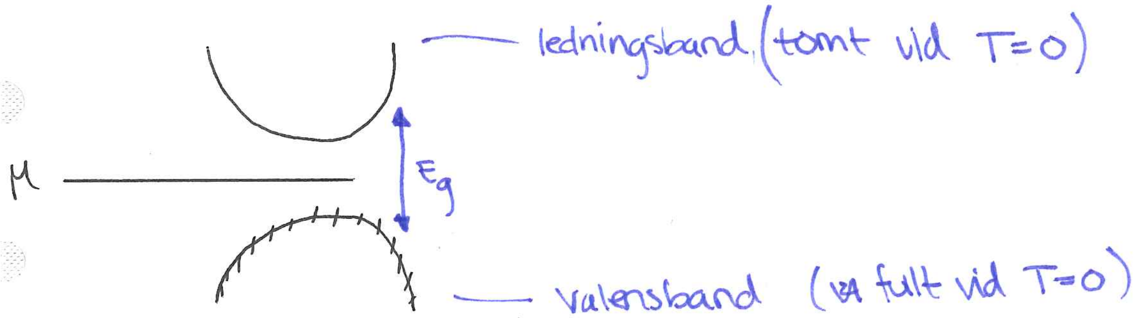
"Isolator med litet bandgap" – kan manipulera antalet laddningsbärare!

Ex. Ge, Si, GeAs

↓

dopa eller med ström (ändrar μ) ← kemiskt potential

Direkt gap:

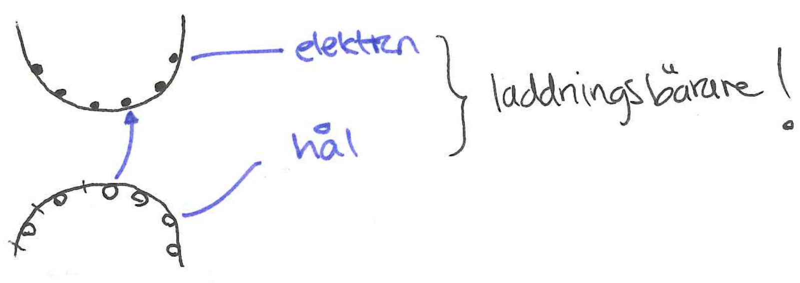


Obs! $\mu = \varepsilon_F$ vid $T=0$

↳ Direkt gap: min av ledningsband vid samma $\bar{k}$ som max. av valensband

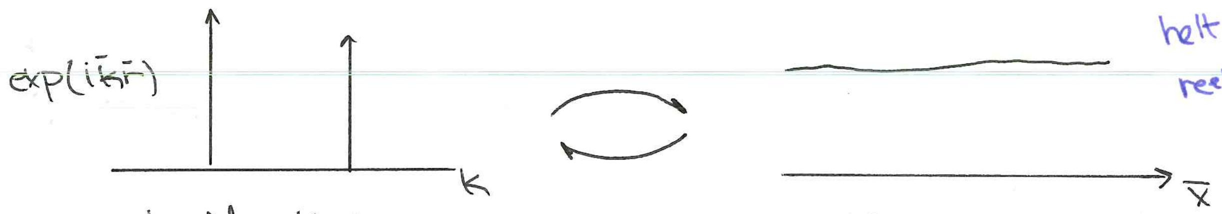
(vi kommer fokusera på direkt gap – finns även indirekt!)

Om $T \neq 0$? ⟶ Termiska energin lyfter elektroner från valens- till ledningsband



Bakgrund

Blochvågor (elektroner i periodisk potential) är superposition av planvågor som är helt delokaliserad!



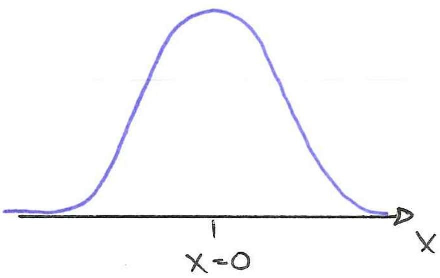
helt utspridd i reella rummet!

bredd $\Delta k = 0$ bredd $\Delta x = \infty$

Ex. Gaussiskt vågpaket i 1D

$$\psi \sim \exp(ik_0 x)\exp\left(\frac{-x^2}{2(\Delta x)^2}\right)$$

Antag att vid $t=0$ → centrerad vid $x=0$



$$\psi(x,t=0) = \{\text{Fourierutveckla!}\}$$

$$= \int dk \underbrace{A(k)}_{\text{Fourierkomponenterna}} \exp(ikx)$$

Tidsutveckling: varje komponent $\exp(ikx)$ är en lösning till schröd. ekv.: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi = \varepsilon_k \psi$

$$\rightarrow \exp[(ikx)-(i\omega t)] \;, \quad \omega(k) = \frac{\varepsilon_k}{\hbar}$$

vid ~~...~~ tid t:

$$\psi(x,t) = \int dk A(k)\exp(ikx - i\omega t)$$

Utveckla $\omega(k)$ runt k_0 givet att $A(k)$ har max vid k_0!

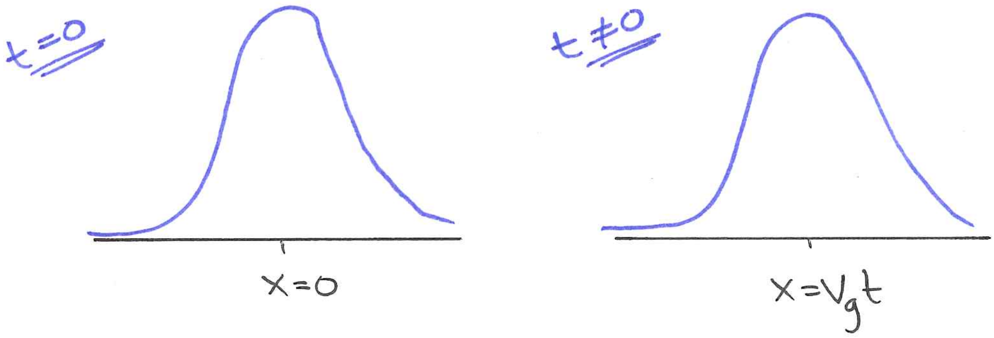
$$\rightarrow \omega(k) = \omega(k_0) + (k-k_0)\frac{\partial \omega}{\partial k}\Big|_{k_0} + \dots$$

Obs! Grupphastighet $\quad V_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$

$$\hookrightarrow \Psi(x,t) = \int dk\, A(k) \exp(ikx) \exp\left(-i\left[\omega(k_0) + (k-k_0)V_g\right]t\right)$$

$$= \underbrace{\exp\left(i\left[k_0 V_g - \underbrace{\omega_0}_{\omega(k_0)}\right]t\right)}_{\text{Bara en fas!}} \underbrace{\int dk\, A(k) \exp\left(ik\left[x - V_g t\right]\right)}_{\Psi(x - V_g t,\, t=0),\ \text{som}}$$

{ $\Psi(x, t=0)$ men centrerad vid $x = V_g t$! }



vågpaket som rör sig med V_g !

1D: $\quad V_g = \frac{d\omega}{dk}$

3D: $\quad \vec{V}_g = \vec{\nabla}_k \omega = \hat{x} \frac{d\omega}{dk_x} + \hat{y} \frac{d\omega}{dk_y} + \hat{z} \frac{d\omega}{dk_z}$

Grupphastighet

Alt. $\quad \omega = \frac{\varepsilon_k}{\hbar} \longrightarrow \vec{V}_g = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}$

Rörelseekv. för Blochelektron

Eftersom elektronen är i en kristall (dvs energier i band, $\varepsilon_{\vec{k},n}$) så kan de inte röra sig helt fritt!

Men, vill visa: $\hbar \frac{d\bar{k}}{dt} = \bar{F}$ är en korrekt rörelseekv.

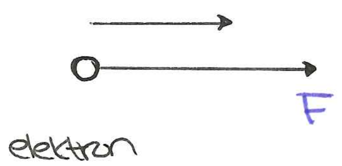
$\{$naturlig eftersom rörelsemängd normalt är $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ $\}$

(obs! Rörelsemängden är dock inte väldefinierad!)

i en kristall är $\hbar\vec{k}$ inte rörelsemängd, utan gitterrörelsemängd!

Visa: $\hbar \frac{d\bar{k}}{dt} = \bar{F}$

$$v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon_k}{dk}$$



- kraft verkar på Blochelektron över tid δt
- Arbetet: $W = \underbrace{F}_{\text{kraft}}\underbrace{v_g\,\delta t}_{\text{sträcka}}$

(Arbetet = ändring i energi, ε_k)

$$\frac{\delta\varepsilon_k}{\frac{\partial\varepsilon_k}{dk}dk} = F v_g \delta t \longrightarrow \hbar \cancel{v_g}\,\delta k = F\cancel{v_g}\,\delta t$$

$$\hbar\frac{dk}{dt} = \bar{F}$$

□

Rörelseekv. $\hbar \frac{d\bar{k}}{dt} = \bar{F} \xrightarrow{?} m \frac{d\bar{V}}{dt} = \bar{F}$

Effektiv massa

↳ en elektron i en kristall har en effektiv massa $m^* \neq m_e$

Betrakta $\frac{dV}{dt}$:

$$V = \frac{dw}{dk} \longrightarrow \frac{dV}{dt} = \frac{d}{dt}\frac{dw}{dk} = \left\{ \begin{array}{l} k \text{ ändrar sig i tiden} \\ \text{enl. } \hbar \frac{dk}{dt} = F \end{array} \right\} \equiv$$

$$\equiv \frac{d^2w}{dk^2}\frac{dk}{dt} = \frac{d^2w}{dk^2}\frac{1}{\hbar} F = \underbrace{\left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right)}_{\text{dimension } 1/\text{massa}} F$$

$$\longrightarrow \underbrace{\left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}\right)^{-1}}_{\equiv m^* \text{ effektiv massa}} \frac{dV}{dt} = F$$

Specialfall: $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \longrightarrow m^* = m_e$

3D: $\frac{dV_i}{dt} = \sum_j \underbrace{\left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial k \partial k_i}\right)}_{(m^*)^{-1}_{ij}} F_i \longrightarrow \sum m^*_{ij} \frac{dV_i}{dt} = F_i$

där m^* är en matris!

Ex. Antag $\varepsilon_{\bar{k}} = a(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$

$$\Rightarrow \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_i} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} 2a & 0 & 0 \\ 0 & 2a & 0 \\ 0 & 0 & 2a \end{pmatrix} = {m^*_{ij}}^{-1}$$

$$\Rightarrow m^* = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2a} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{2a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m^* & 0 & 0 \\ 0 & m^* & 0 \\ 0 & 0 & m^* \end{pmatrix}$$

" Effektiv massa $m^* = m_e$, gittret kan ta upp rörelsemängd "

Ex. En elektron i ett magnetfält $\vec{B} = B\hat{z}$ (B konst.)

givet $\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$

RE: $m^* \frac{d\bar{v}}{dt} = \bar{F} = -e\vec{v} \times \bar{B} = -e(-\hat{y} v_x B + \hat{x} v_y B)$

$$\begin{cases} m^* \frac{dv_x}{dt} = -e v_y B \\ m^* \frac{dv_y}{dt} = e v_x B \end{cases}$$

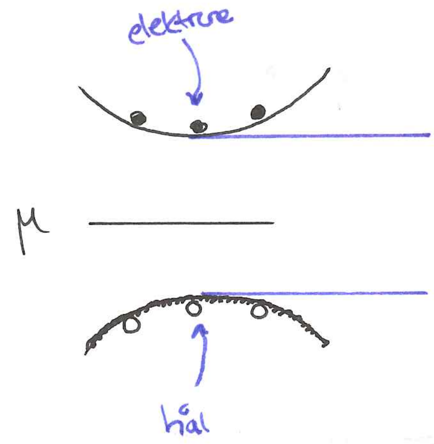
Lösning: $\vec{v} = v(\cos\theta, \sin\theta) \Rightarrow m^* \dot{\theta} = eB$

Cirkulär rörelse med vinkelfrekvens

$$\omega_c = \dot{\theta} = \frac{eB}{m_*}$$ Cyklotronfrekvens

↳ Här kan m^* mätas experimentellt!

Halvledare



E_c : botten av ledn.bandet

E_V : toppen av valensbandet

Energin för elektroner: $\begin{cases} \varepsilon_{\vec{k}} = E_c + a\vec{k}^2 , & a>0 \quad \text{i ledn.-bandet!} \\ \varepsilon_{\vec{k}} = E_V - b\vec{k}^2 , & b>0 \quad \text{i valens-bandet!} \end{cases}$

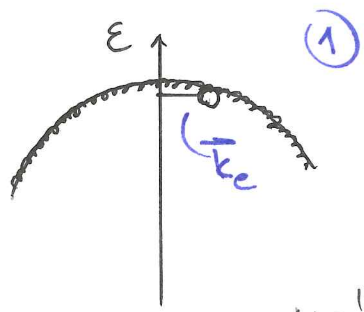
Effektiv massa:

Ledn. $\quad m^{*\,-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} a k^2 = \frac{2a}{\hbar^2} \Rightarrow m^* > 0$

Valens: $\quad m^{*\,-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} (-bk^2) = -\frac{2b}{\hbar^2} \Rightarrow m^* < 0$

Naturligare att beskriva laddningsbärare i valensbandet som hål!

Hål: saknas en elektron (i det annars fulla bandet!) med vågtal $\vec{k}_e$



Hål vågtal: $\vec{k}_h = -\vec{k}_e$

Fyllt band: $\vec{k}_{tot} = \sum_{1BZ} \vec{k} = 0$

Men! en elektron med $\vec{k}_e$ saknas $\Rightarrow \vec{k}_{tot} = -\vec{k}_e = \vec{k}_h$

(2) energin för hålet

↳ saknas det en partikel (elektron) med energi

$\varepsilon_{\vec{k},e} < 0 \Rightarrow$ systemet har högre energi $\Leftrightarrow \varepsilon_{\vec{k},h} = -\varepsilon_{\vec{k},e}$

(3) Hastighet: $V_g = \dfrac{1}{\hbar} \dfrac{d\varepsilon}{dk} \Rightarrow \vec{V}_{gh} = \vec{V}_{ge}$

(4) effektiv massa: $\dfrac{1}{m^*} = \dfrac{1}{\hbar^2} \dfrac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2} \Rightarrow m^*_h = -m^*_e$

{ effektiva massan för hål i valensbandet > 0 }

(5) Laddning: $q_h = e > 0$, hål: avsaknad av elektron!