

Przejścia kwantowe w półprzewodnikach (kryształach)

- Rozpraszanie na nieruchomej sieci krystalicznej (elektronów, neutronów, fotonów)

zwykle odbicie Bragga
(płaszczyzny krystaliczne odgrywają rolę „rys” siatki dyfrakcyjnej)

swobodne cząstki opisane falami płaskimi (z dokł. do czynnika norm.)

$$\Psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

potencjał sieci jest periodyczny $\mathbf{V}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \mathbf{V}(\mathbf{r})$

prawdopodobieństwo rozproszenia przez $V(\mathbf{r})$
ze stanu \mathbf{k} do stanu $\mathbf{k}' \sim$ do $|M|^2$

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int \Psi_{\mathbf{k}'}^* V \Psi_{\mathbf{k}} d^3r = \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} \int e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{g}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d^3r$$

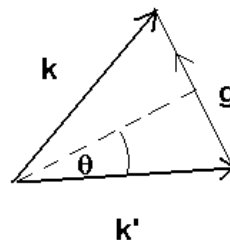
[skorzystałem z Fourierowskiego rozwinięcia $V(\mathbf{r})$;
formalnie też przed całką powinno być $1/\Omega =$]

ale $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \neq 0$ tylko dla

$$\mathbf{k} + \mathbf{g} - \mathbf{k}' = \mathbf{0}$$

(\mathbf{g} – wektor sieci odwrotnej)

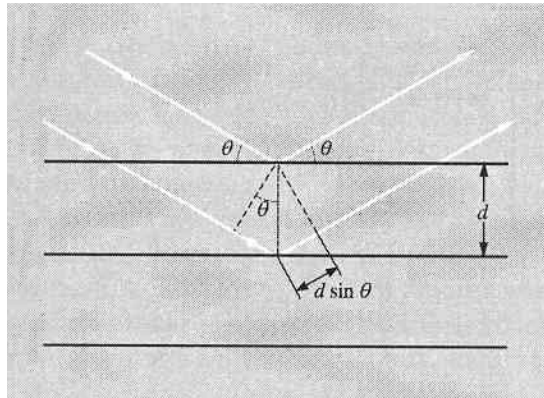
podnosząc ($\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{g}$) do kwadratu i korzystając z zasady zachowania energii ($|\mathbf{k}|=|\mathbf{k}'|$) mamy



$$|\mathbf{g}| = 2|\mathbf{k}| \sin(\theta)$$

gdzie 2θ to kąt pomiędzy \mathbf{k} i \mathbf{k}'

ale $|\mathbf{g}|$ jest odwrotnie proporcjonalne do d – odległość płaszczyzn krystalograficznych, prostopadłych do \mathbf{g}



C. Kittel, WFCS

$|\mathbf{g}| = 2\pi n / d$, zatem

$$n\lambda = 2d \sin(\theta)$$

gdyż $k = 2\pi / \lambda$

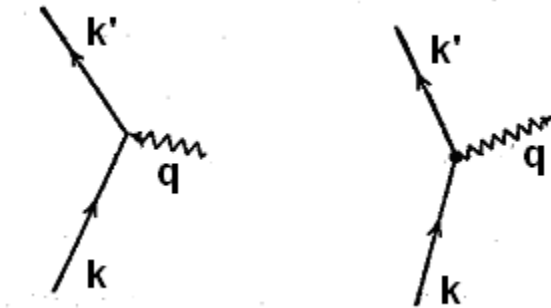
jest znanym prawem interferencji konstruktywnej w **odbiciu Bragga**

to rozpraszanie jest elastyczne

- Rozpraszanie na drgającej sieci krystalicznej
W opisie kwantowym – zderzenia z fononami

tu warunkiem zajścia procesu rozpraszania ($M \neq 0$) jest

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{q}$$



co odpowiada rozpraszaniu nieelastycznemu

z absorpcją lub emisją fononu – pęd fononu $p = \hbar q$

Dla fotonów rozpraszanych na kryształach ten proces nazywa się **rozpraszaniem (zjawiskiem) Ramana**

Może też nastąpić proces

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{g} = \mathbf{q}$$

co odpowiada dodatkowo pędowi przekazanemu

kryształowi jako całości $p = \hbar g$

Eksperyment został opisany po raz pierwszy w 1928 roku przez Chandrasekhara Ramana i zjawisko zostało nazwane na jego cześć. Za badanie rozpraszania światła Raman otrzymał w 1930 roku nagrodę Nobla



z oryginalnym spektrografem Ramana w Indian Association for Cultivation of Sciences (Kalkuta)

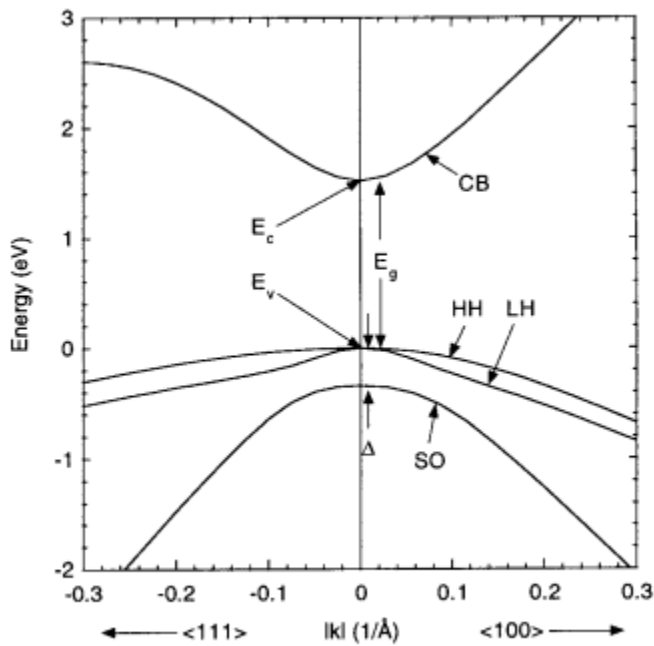
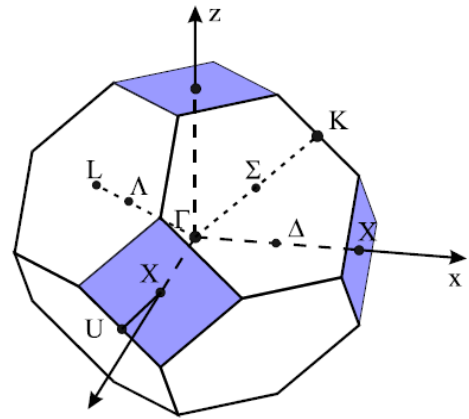
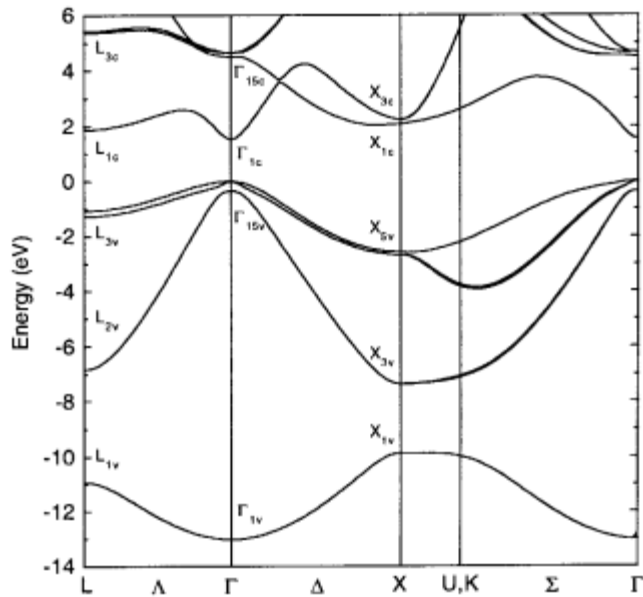
Przejścia optyczne

1. rodzaje półprzewodników ze względu na charakter przerwy energetycznej

półprzewodniki z prostą przerwą:

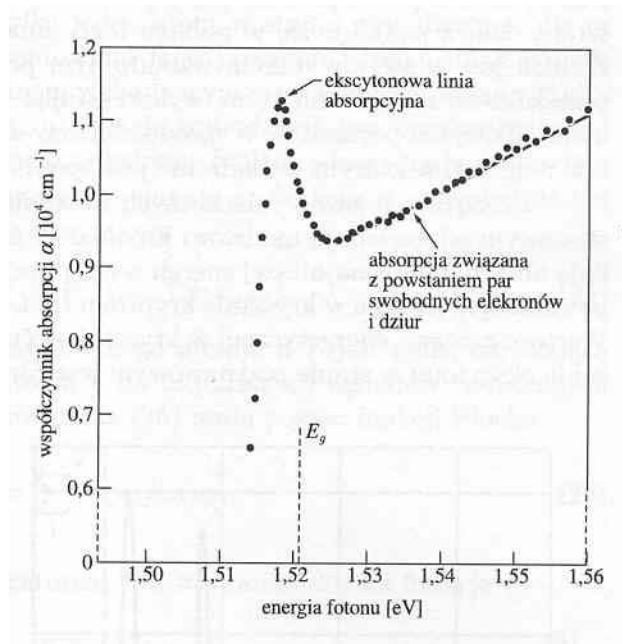
- dno pasma CB i szczyt pasma VB występują dla tego samego k na ogół $k=0$ (tzw. punkt Γ)

np. GaAs, InAs, AlAs, mieszane: GaAlAs....

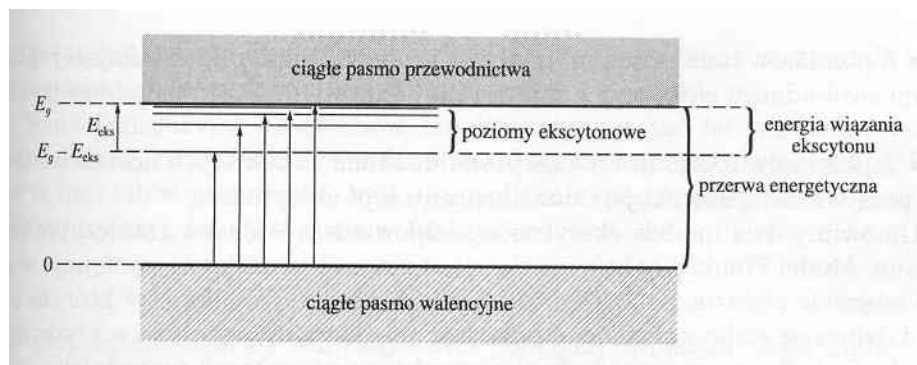


absorpcja zachodzi na ogół ze szczytu VB do \rightarrow CB (w głąb)

energia najniższego wzbudzenia jest $< E_g$ -
 - ze względu na powstawanie ekscytynu – związanej pary e-h

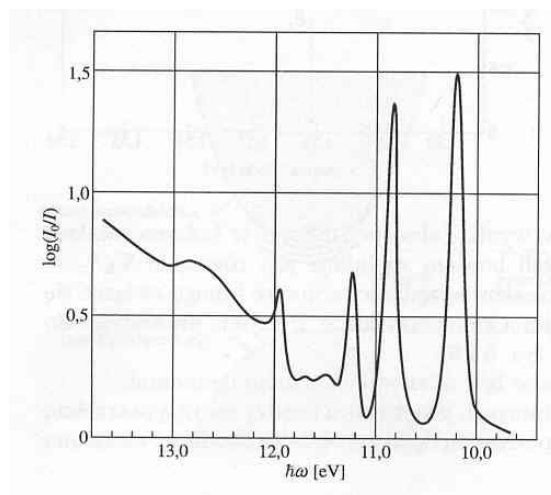


wyższe poziomy ekscytonowe

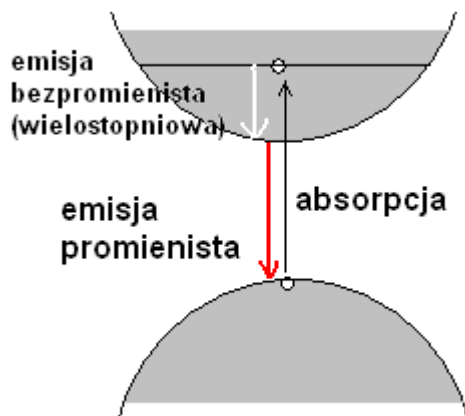


C. Kittel, WFCS

obserwuje się tylko tam gdzie tworzą się zlokalizowane ekscytony Frenkla –
 - np. w kryształach gazów szlachetnych
 (np. E_g w kryształe kryptonu – 11.7 eV)



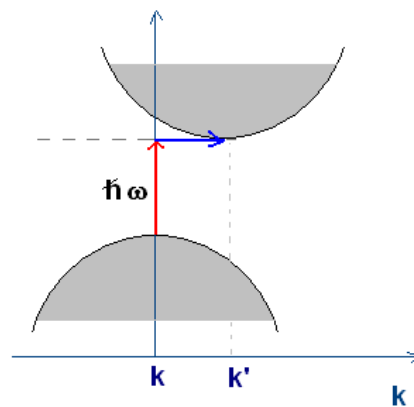
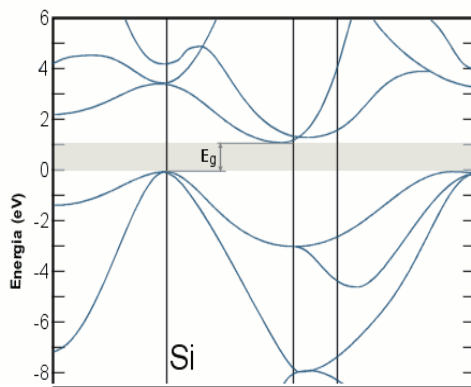
Widmo emisji (fotoluminescencji) ma silne maksimum dla E_g
 - emisja zachodzi z dna CB do szczytu VB



emisja bezpromienista = relaksacja bezpromienista:
 oddawanie energii do sieci (fonony, zderzenia)

półprzewodniki ze skośną przerwą

dno pasma CB i szczyt pasma VB występują dla różnych wartości k

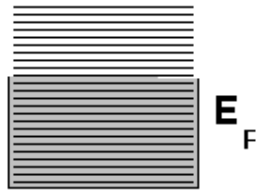


przejścia następują tu tylko z towarzyszeniem (absorpcja / emisja)
 fononów o energii $\hbar K = \hbar(k'-k)$

Metale

półkwantowy obraz przewodnictwa

metal, pasmo przewodnictwa:



tylko elektrony obsadzające poziomy z pobliża E_F biorą udział w przewodnictwie; $V=V_F$;

co to znaczy „brać udział w przewodnictwie” ...
 „móc” przyspieszać w zewnętrznym polu elektrycznym
 – tzn. zwiększać energię o dowolnie małą wartość

ruch elektronu z prędkością V pomiędzy zderzeniami
 (rozpraszanie na defektach, domieszkach, drganiach sieci):

$$\vec{V}_{sr} = 0$$

Średnia droga swobodna: $l_0 = V_F \tau$,

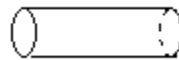
τ – czas między zderzeniami

W dodatkowym polu E , dodatkowa prędkość

Z równania Newtona $F=ma$, $F=m \times \Delta V/(\Delta t)$, $F=eE$
 (E –natężenie stałego pola elektrycznego)

$$\Delta V = -\frac{eE\tau}{m} \quad (1)$$

weźmy przewodnik o przekroju S ,



Jeśli n jest gęstością elektronów (ilość/obj.) to

ładunek jaki przepłynie przez S w czasie τ to: $Q = enSl_0$

zatem natężenie płynącego prądu to:

$$I = \frac{Q}{\tau} = \frac{-enSl_0}{\tau} = -enS\Delta V,$$

zaś gęstość prądu (I/S), zgodnie z (1)

$$j = -en\Delta V = \frac{ne^2\tau}{m} E$$

ale to jest prawo Ohma w postaci różniczkowej

$$\vec{j} = \sigma_0 \cdot \vec{E}$$

(na razie w jednym wymiarze X), zatem
(*)

$$\sigma_0 = \frac{1}{\rho_0} = \frac{ne^2\tau}{m}$$

przypomnijmy też, że $j=I/S$, $E=U/L$,
zatem $I=S/(L\rho_0)U \Rightarrow I=U/R$ - prawo Ohma w postaci całkowitej

ρ_0 - jest więc zdefiniowane tylko przez stałe materiałowe i fundamentalne

Gaz Fermiego elektronów swobodnych

Na ćwiczeniach pokażemy, że gęstość stanów dla swobodnych nieoddziałujących elektronów w trzech wymiarach (3D) w objętości V wynosi (definicja - liczba stanów na przedział energii dE)

$$\rho(E) = \frac{V 2^{1/2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} \quad (1a)$$

Uwaga: zależność $E^{1/2}$ oznacza, że rozpatrując np. studnię 3D potencjału o szerokości L i objętości V lub studnię sferyczną (jako najprostszy model metalu), liczba stanów na jednakowy przedział energii ΔE rośnie – ale słabiej niż liniowo

Ale np. dla oscylatora harmonicznego w 1D – odstęp między poziomami energetycznymi-stanami są jednakowe $\Delta E = \hbar\omega$ zatem na każdy przedział energii przypada taka sama liczba stanów.

Energie swobodnych elektronów to

$$\varepsilon_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}$$

a energia Fermiego

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (2)$$

jeśli przez N oznaczymy liczbę wszystkich stanów o energii $< E_F$

to N można obliczyć jako $N = \int_0^{E_F} \rho(E) dE$ - ćwiczenia

zatem gęstość gazu elektronów swobodnych $n = 2N/V$
(2 – ze wzgl. na spin)

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (3)$$

a związek między E_F i n

$$E_F = \frac{\hbar^2 3^{2/3} \pi^{4/3}}{2m} n^{2/3} \quad (4)$$

oraz prędkość na poziomie Fermiego:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar 3^{1/3} \pi^{2/3}}{m} n^{1/3}$$

a całkowita energia takiego gazu (=energia kinetyczna) jako

$$E_{kin} = \int_0^{E_F} \rho(E) E dE,$$

wyniesie - ćwiczenia -

$$E_{kin} = \frac{V \hbar^2}{\pi^2 10m} k_F^5$$

a energia kinetyczna przypadająca na jeden elektron:

$$\frac{E_{kin}}{2N} = \frac{3}{5} E_F$$

Wzór (4) można przekształcić do

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{3/2}, \text{ i logarytmując } \ln N = 3/2 \ln E_F + \text{stała}$$

$$\text{i dalej } \frac{dN}{N} = \frac{3}{2} \frac{dE}{E_F}, \text{ a zatem } \rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F}$$