

IV.
ELEKTRONOWA STRUKTURA
PASMOWA

Struktura krystaliczna: przypomnienie

Wektor sieci prostej

Wektor sieci prostej

$$\mathbf{R}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i, \quad n_i = \text{liczby całkowite} \quad (1)$$

Wektor sieci prostej

$$\mathbf{R}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i, \quad n_i = \text{liczby całkowite} \quad (1)$$

\mathbf{a}_i = wektory translacji podstawowych

Wektor sieci prostej

$$\mathbf{R}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i, \quad n_i = \text{liczby całkowite} \quad (1)$$

\mathbf{a}_i = wektory translacji podstawowych

Sieć prosta = zbiór punktów o wektorach wodzących \mathbf{R}_n

Wektor sieci prostej

$$\mathbf{R}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i, \quad n_i = \text{liczby całkowite} \quad (1)$$

\mathbf{a}_i = wektory translacji podstawowych

Sieć prosta = zbiór punktów o wektorach wodzących \mathbf{R}_n

Objętość komórki elementarnej

$$\Omega_0 = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \quad (2)$$

Wektor sieci prostej

$$\mathbf{R}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i, \quad n_i = \text{liczby całkowite} \quad (1)$$

\mathbf{a}_i = wektory translacji podstawowych

Sieć prosta = zbiór punktów o wektorach wodzących \mathbf{R}_n

Objętość komórki elementarnej

$$\Omega_0 = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \quad (2)$$

Komórka Wignera-Seitz = symetryczna komórka elementarna

Wektor sieci odwrotnej

$$\mathbf{G}_l = \sum_{j=1}^3 l_j \mathbf{b}_j, \quad l_j = \text{liczby całkowite} \quad (3)$$

Wektor sieci odwrotnej

$$\mathbf{G}_l = \sum_{j=1}^3 l_j \mathbf{b}_j, \quad l_j = \text{liczby całkowite} \quad (3)$$

\mathbf{b}_j = wektory translacji podstawowych sieci odwrotnej

Wektor sieci odwrotnej

$$\mathbf{G}_l = \sum_{j=1}^3 l_j \mathbf{b}_j, \quad l_j = \text{liczby całkowite} \quad (3)$$

\mathbf{b}_j = wektory translacji podstawowych sieci odwrotnej

$$\mathbf{b}_i = \frac{2\pi}{\Omega_0} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k \quad (4)$$

(i, j, k) = trójka wskaźników (1,2,3) przestawiana cyklicznie

Wektor sieci odwrotnej

$$\mathbf{G}_l = \sum_{j=1}^3 l_j \mathbf{b}_j, \quad l_j = \text{liczby całkowite} \quad (3)$$

\mathbf{b}_j = wektory translacji podstawowych sieci odwrotnej

$$\mathbf{b}_i = \frac{2\pi}{\Omega_0} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k \quad (4)$$

(i, j, k) = trójka wskaźników (1,2,3) przestawiana cyklicznie

Sieć odwrotna = zbiór punktów (w przestrzeni odwrotnej \mathbf{k}) o wektorach wodzących \mathbf{G}_l

Własności wektorów obu sieci:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (5)$$

Własności wektorów obu sieci:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (5)$$

$$\mathbf{G}_l \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi N, \quad N = \text{liczba całkowita} \quad (6)$$

Własności wektorów obu sieci:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (5)$$

$$\mathbf{G}_l \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi N, \quad N = \text{liczba całkowita} \quad (6)$$

Objętość komórki elementarnej sieci odwrotnej

$$\Omega_B = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0} \quad (7)$$

Własności wektorów obu sieci:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (5)$$

$$\mathbf{G}_l \cdot \mathbf{R}_n = 2\pi N, \quad N = \text{liczba całkowita} \quad (6)$$

Objętość komórki elementarnej sieci odwrotnej

$$\Omega_B = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0} \quad (7)$$

Strefa Brillouina = symetryczna komórka elementarna sieci odwrotnej (komórka Wignera-Seitza sieci odwrotnej)

Translacje ułamkowe

Translacje ułamkowe

W każdym kryształe półprzewodnikowym komórka Wignera-Seitza zawiera więcej niż jeden atom.

Translacje ułamkowe

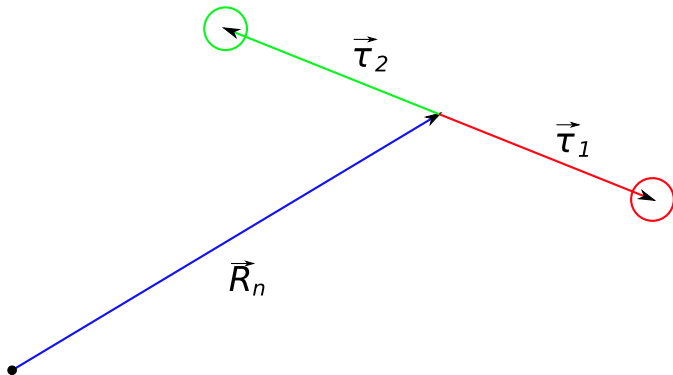
W każdym kryształcie półprzewodnikowym komórka Wignera-Seitza zawiera więcej niż jeden atom. Jest to tzw. **kryształ z bazą**, w którym położenie atomów w komórce elementarnej określane jest za pomocą **wektorów translacji ułamkowych** τ_s , gdzie $s = 1, \dots, S$, a $S =$ liczba atomów w komórce Wignera-Seitza.

Translacje ułamkowe

W każdym kryształcie półprzewodnikowym komórka Wignera-Seitza zawiera więcej niż jeden atom. Jest to tzw. **kryształ z bazą**, w którym położenie atomów w komórce elementarnej określane jest za pomocą **wektorów translacji ułamkowych** τ_s , gdzie $s = 1, \dots, S$, a $S =$ liczba atomów w komórce Wignera-Seitza.

Wektor położenia atomu w kryształcie

$$\mathbf{R}_{ns} = \mathbf{R}_n + \tau_s \quad (8)$$



Translacje ułamkowe: położenia atomów.

Struktury fcc

Większość półprzewodników tworzy kryształy o **sieci regularnej powierzchniowo centrowanej**.

Struktury fcc

Większość półprzewodników tworzy kryształy o **sieci regularnej powierzchniowo centrowanej**.
fcc = face centered cubic

Struktury fcc

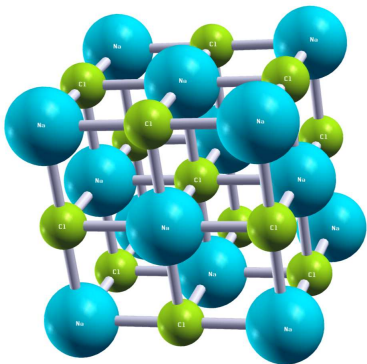
Większość półprzewodników tworzy kryształy o **sieci regularnej powierzchniowo centrowanej**.

fcc = face centered cubic

Występują różne typy struktur fcc.

(1) Struktura chlorku sodu (NaCl)

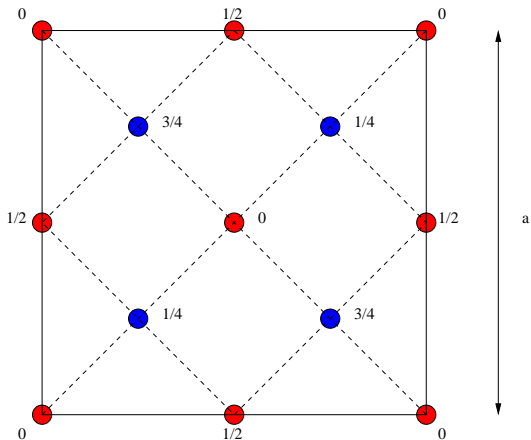
(1) Struktura chlorku sodu (NaCl)



Translacje ułamkowe: $\boldsymbol{\tau}_1 = \boldsymbol{\tau}_{Na} = (0, 0, 0)$, $\boldsymbol{\tau}_2 = \boldsymbol{\tau}_{Cl} = (a/2)(1, 1, 1)$.

(2) Struktura diamentu

(2) Struktura diamentu



Rzuty położenia atomów na płaszczyznę podstawy sześcianu (dla struktur diamentu i blendy cynkowej).

Położenia atomów w komórce elementarnej dla struktury diamentu:

Położenia atomów w komórce elementarnej dla struktury diamentu:

$$\boldsymbol{\tau}_1 = (0, 0, 0) , \boldsymbol{\tau}_2 = (a/4)(1, 1, 1)$$

Położenia atomów w komórce elementarnej dla struktury diamentu:

$$\boldsymbol{\tau}_1 = (0, 0, 0) , \boldsymbol{\tau}_2 = (a/4)(1, 1, 1)$$

Strukturę diamentu posiadają półprzewodniki pierwiastkowe:

Położenia atomów w komórce elementarnej dla struktury diamentu:

$$\boldsymbol{\tau}_1 = (0, 0, 0) , \boldsymbol{\tau}_2 = (a/4)(1, 1, 1)$$

Strukturę diamentu posiadają półprzewodniki pierwiastkowe:
Si, Ge.

(3) Struktura blendy cynkowej (ZnS)

(3) Struktura blendy cynkowej (ZnS)

Położenia atomów w strukturze blendy cynkowej:

(3) Struktura blendy cynkowej (ZnS)

Położenia atomów w strukturze blendy cynkowej:

$$\boldsymbol{\tau}_1 = \boldsymbol{\tau}_{Zn} = (0, 0, 0) , \boldsymbol{\tau}_2 = \boldsymbol{\tau}_S = (a/4)(1, 1, 1)$$

(3) Struktura blendy cynkowej (ZnS)

Położenia atomów w strukturze blendy cynkowej:

$$\tau_1 = \tau_{Zn} = (0, 0, 0) , \tau_2 = \tau_S = (a/4)(1, 1, 1)$$

Struktura blendy cynkowej utworzona jest przez **dwie podsieci o strukturze diamentu przesunięte względem siebie o 1/4 głównej przekątnej**.

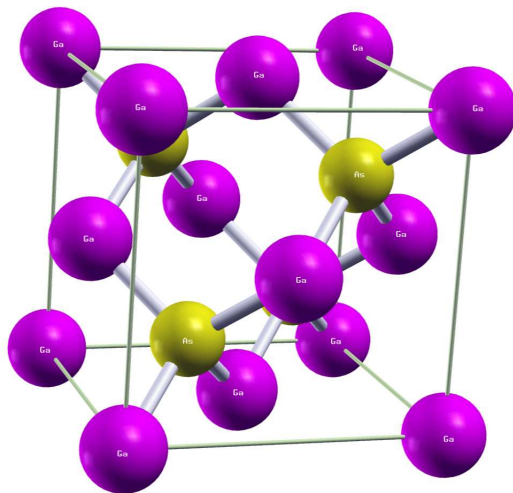
(3) Struktura blendy cynkowej (ZnS)

Położenia atomów w strukturze blendy cynkowej:

$$\tau_1 = \tau_{Zn} = (0, 0, 0) , \tau_2 = \tau_S = (a/4)(1, 1, 1)$$

Struktura blendy cynkowej utworzona jest przez **dwie podsieci o strukturze diamentu przesunięte względem siebie o 1/4 głównej przekątnej**.

Strukturę blendy cynkowej posiada większość związków półprzewodnikowych II-VI i III-V.



Struktura blendy cynkowej na przykładzie GaAs.

Kwantowy opis ciała stałego

Kwantowy opis ciała stałego

Wszystkie własności ciał stałych wynikają z ich struktury atomowej oraz z oddziaływań między atomami.

Kwantowy opis ciała stałego

Wszystkie własności ciał stałych wynikają z ich struktury atomowej oraz z oddziaływań między atomami. Atomy podlegają prawom mechaniki kwantowej, stąd konieczność stosowania teorii kwantowej do opisu ciał stałych.

Kwantowy opis ciała stałego

Wszystkie własności ciał stałych wynikają z ich struktury atomowej oraz z oddziaływań między atomami. Atomy podlegają prawom mechaniki kwantowej, stąd konieczność stosowania teorii kwantowej do opisu ciał stałych.

Typowy kryształ zawiera w jednym molu

Kwantowy opis ciała stałego

Wszystkie własności ciał stałych wynikają z ich struktury atomowej oraz z oddziaływań między atomami. Atomy podlegają prawom mechaniki kwantowej, stąd konieczność stosowania teorii kwantowej do opisu ciał stałych.

Typowy kryształ zawiera w jednym molu

$$\sim 10^{23} \text{ atomów.}$$

Kwantowy opis ciała stałego

Wszystkie własności ciał stałych wynikają z ich struktury atomowej oraz z oddziaływań między atomami. Atomy podlegają prawom mechaniki kwantowej, stąd konieczność stosowania teorii kwantowej do opisu ciał stałych.

Typowy kryształ zawiera w jednym molu

$$\sim 10^{23} \text{ atomów.}$$

Jest to więc **układ wielu cząstek**, którego opis dokładny jest poza zasięgiem mocy obliczeniowej komputerów (współczesnych i przyszłych).

Kwantowy opis ciała stałego

Wszystkie własności ciał stałych wynikają z ich struktury atomowej oraz z oddziaływań między atomami. Atomy podlegają prawom mechaniki kwantowej, stąd konieczność stosowania teorii kwantowej do opisu ciał stałych.

Typowy kryształ zawiera w jednym molu

$$\sim 10^{23} \text{ atomów.}$$

Jest to więc **układ wielu cząstek**, którego opis dokładny jest poza zasięgiem mocy obliczeniowej komputerów (współczesnych i przyszłych). Konieczne są zatem **metody przybliżone opisu ciał stałych**.

W **przybliżeniu statycznym** zakładamy, że jądra atomowe spoczywają w położeniach równowagi.

W **przybliżeniu statycznym** zakładamy, że jądra atomowe spoczywają w położeniach równowagi.
Wykluczamy zatem z opisu drgania sieci (fonony).

Elektrony walencyjne i elektrony rdzenia

Elektrony walencyjne i elektrony rdzenia

W kwantowym opisie ciała stałego bardzo użyteczny jest podział układu wielu elektronów i jąder, tworzących kryształ, na **elektrony walencyjne** i **rdzenie atomowe**, czyli jądra wraz z elektronami rdzenia.

Elektrony walencyjne i elektrony rdzenia

W kwantowym opisie ciała stałego bardzo użyteczny jest podział układu wielu elektronów i jąder, tworzących kryształ, na **elektrony walencyjne** i **rdzenie atomowe**, czyli jądra wraz z elektronami rdzenia.

Podział ten wynika z porównania wartości energii wiązania elektronów walencyjnych i elektronów rdzenia w atomach.

Elektrony walencyjne i elektrony rdzenia

W kwantowym opisie ciała stałego bardzo użyteczny jest podział układu wielu elektronów i jąder, tworzących kryształ, na **elektrony walencyjne** i **rdzenie atomowe**, czyli jądra wraz z elektronami rdzenia.

Podział ten wynika z porównania wartości energii wiązania elektronów walencyjnych i elektronów rdzenia w atomach. Typowe wartości energii wiązania (jonizacji) elektronów walencyjnych wynoszą

Elektrony walencyjne i elektrony rdzenia

W kwantowym opisie ciała stałego bardzo użyteczny jest podział układu wielu elektronów i jąder, tworzących kryształ, na **elektrony walencyjne** i **rdzenie atomowe**, czyli jądra wraz z elektronami rdzenia.

Podział ten wynika z porównania wartości energii wiązania elektronów walencyjnych i elektronów rdzenia w atomach. Typowe wartości energii wiązania (jonizacji) elektronów walencyjnych wynoszą

$$1 \div 10 \text{ eV/atom}$$

Elektrony walencyjne i elektrony rdzenia

W kwantowym opisie ciała stałego bardzo użyteczny jest podział układu wielu elektronów i jąder, tworzących kryształ, na **elektrony walencyjne** i **rdzenie atomowe**, czyli jądra wraz z elektronami rdzenia.

Podział ten wynika z porównania wartości energii wiązania elektronów walencyjnych i elektronów rdzenia w atomach. Typowe wartości energii wiązania (jonizacji) elektronów walencyjnych wynoszą

$$1 \div 10 \text{ eV/atom}$$

i są w przybliżeniu równe energii wiązania ciała stałego (liczonej na jeden atom).

Elektrony walencyjne i elektrony rdzenia

W kwantowym opisie ciała stałego bardzo użyteczny jest podział układu wielu elektronów i jąder, tworzących kryształ, na **elektrony walencyjne** i **rdzenie atomowe**, czyli jądra wraz z elektronami rdzenia.

Podział ten wynika z porównania wartości energii wiązania elektronów walencyjnych i elektronów rdzenia w atomach. Typowe wartości energii wiązania (jonizacji) elektronów walencyjnych wynoszą

$$1 \div 10 \text{ eV/atom}$$

i są w przybliżeniu równe energii wiązania ciała stałego (liczonej na jeden atom).

Natomiast energie wiązania elektronów rdzenia są rzędu

Elektrony walencyjne i elektrony rdzenia

W kwantowym opisie ciała stałego bardzo użyteczny jest podział układu wielu elektronów i jąder, tworzących kryształ, na **elektrony walencyjne** i **rdzenie atomowe**, czyli jądra wraz z elektronami rdzenia.

Podział ten wynika z porównania wartości energii wiązania elektronów walencyjnych i elektronów rdzenia w atomach. Typowe wartości energii wiązania (jonizacji) elektronów walencyjnych wynoszą

$$1 \div 10 \text{ eV/atom}$$

i są w przybliżeniu równe energii wiązania ciała stałego (liczonej na jeden atom).

Natomiast energie wiązania elektronów rdzenia są rzędu

$$1 \div 10 \text{ keV/atom .}$$

W dalszym ciągu będziemy przyjmować, że ciało stałe złożone jest z **elektronów walencyjnych i rdzeni atomowych (jonów)**.

W dalszym ciągu będziemy przyjmować, że ciało stałe złożone jest z **elektronów walencyjnych i rdzeni atomowych (jonów)**.

Stany kwantowe elektronów rdzenia są jedynie nieznacznie zmienione w porównaniu ze stanami rdzeniowymi atomów swobodnych, a zatem zakładamy, że rdzenie atomowe w atomach swobodnych i krysztalach są jednakowe.

Przybliżenie jednoelektronowe

Przybliżenie jednoelektronowe

Zakładamy, że każdy elektron w układzie wieloelektronowym (np. atomie, cząsteczce, ciele stałym) opisany jest **jednoelektronowym równaniem Schrödingera**, które ma postać

Przybliżenie jednoelektronowe

Zakładamy, że każdy elektron w układzie wieloelektronowym (np. atomie, cząsteczce, ciele stałym) opisany jest **jednoelektronowym równaniem Schrödingera**, które ma postać

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{U}(\mathbf{r}) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}) = \epsilon_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) , \quad (9)$$

Przybliżenie jednoelektronowe

Zakładamy, że każdy elektron w układzie wieloelektronowym (np. atomie, cząsteczce, ciele stałym) opisany jest **jednoelektronowym równaniem Schrödingera**, które ma postać

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{U}(\mathbf{r}) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}) = \epsilon_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) , \quad (9)$$

$\tilde{U}(\mathbf{r})$ = efektywna energia potencjalna pojedynczego elektronu w samouzgodnionym polu wszystkich pozostałych elektronów i jąder

Przybliżenie jednoelektronowe

Zakładamy, że każdy elektron w układzie wieloelektronowym (np. atomie, cząsteczce, ciele stałym) opisany jest **jednoelektronowym równaniem Schrödingera**, które ma postać

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{U}(\mathbf{r}) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}) = \epsilon_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) , \quad (9)$$

$\tilde{U}(\mathbf{r})$ = efektywna energia potencjalna pojedynczego elektronu w samouzgodnionym polu wszystkich pozostałych elektronów i jąder

$\psi_\nu(\mathbf{r})$ = funkcja falowa elektronu w stanie kwantowym ν

Przybliżenie jednoelektronowe

Zakładamy, że każdy elektron w układzie wieloelektronowym (np. atomie, cząsteczce, ciele stałym) opisany jest **jednoelektronowym równaniem Schrödingera**, które ma postać

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{U}(\mathbf{r}) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}) = \epsilon_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) , \quad (9)$$

$\tilde{U}(\mathbf{r})$ = efektywna energia potencjalna pojedynczego elektronu w samouzgodnionym polu wszystkich pozostałych elektronów i jąder

$\psi_\nu(\mathbf{r})$ = funkcja falowa elektronu w stanie kwantowym ν

ϵ_ν = energia elektronu w stanie kwantowym ν (energia jednoelektronowa)

Przybliżenie jednoelektronowe

Zakładamy, że każdy elektron w układzie wieloelektronowym (np. atomie, cząsteczce, ciele stałym) opisany jest **jednoelektronowym równaniem Schrödingera**, które ma postać

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \tilde{U}(\mathbf{r}) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}) = \epsilon_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) , \quad (9)$$

$\tilde{U}(\mathbf{r})$ = efektywna energia potencjalna pojedynczego elektronu w samouzgodnionym polu wszystkich pozostałych elektronów i jąder

$\psi_\nu(\mathbf{r})$ = funkcja falowa elektronu w stanie kwantowym ν

ϵ_ν = energia elektronu w stanie kwantowym ν (energia jednoelektronowa)

ν = zbiór liczb kwantowych

Przybliżenie pola periodycznego

Przybliżenie pola periodycznego

W kryształach na elektrony walencyjne działa **pole periodyczne**.

Przybliżenie pola periodycznego

W kryształach na elektrony walencyjne działa **pole periodyczne**.
Przybliżenie pola periodycznego polega na założeniu, że na każdy elektron walencyjny w kryształach działa samouzgodnione pole lokalne o symetrii translacyjnej sieci krystalicznej.

Przybliżenie pola periodycznego

W kryształach na elektrony walencyjne działa **pole periodyczne**.
Przybliżenie pola periodycznego polega na założeniu, że na każdy elektron walencyjny w kryształach działa samouzgodnione pole lokalne o symetrii translacyjnej sieci krystalicznej.
Oznacza to, że zachodzi związek

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = U(\mathbf{r}) , \quad (10)$$

Przybliżenie pola periodycznego

W kryształach na elektrony walencyjne działa **pole periodyczne**.
Przybliżenie pola periodycznego polega na założeniu, że na każdy elektron walencyjny w kryształach działa samouzgodnione pole lokalne o symetrii translacyjnej sieci krystalicznej.
Oznacza to, że zachodzi związek

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = U(\mathbf{r}) , \quad (10)$$

który jest słuszny dla translacji o dowolny wektor sieci \mathbf{R}_n .

Przybliżenie pola periodycznego

W kryształach na elektrony walencyjne działa **pole periodyczne**. Przybliżenie pola periodycznego polega na założeniu, że na każdy elektron walencyjny w kryształach działa samouzgodnione pole lokalne o symetrii translacyjnej sieci krystalicznej. Oznacza to, że zachodzi związek

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = U(\mathbf{r}) , \quad (10)$$

który jest słuszny dla translacji o dowolny wektor sieci \mathbf{R}_n . Wzór (10) definiuje **pole periodyczne** $U(\mathbf{r})$.

Dla pola periodycznego (10) definiujemy operator translacji o wektor \mathbf{R}_n

Dla pola periodycznego (10) definiujemy operator translacji o wektor \mathbf{R}_n

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)f(\mathbf{r}) \stackrel{def}{=} f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n). \quad (11)$$

Dla pola periodycznego (10) definiujemy operator translacji o wektor \mathbf{R}_n

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)f(\mathbf{r}) \stackrel{def}{=} f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) . \quad (11)$$

Jawna postać operatora translacji

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n) = e^{\mathbf{R}_n \cdot \nabla} . \quad (12)$$

Jest to operator unitarny, czyli $\mathcal{T}^\dagger = \mathcal{T}^{-1}$.

Operator energii kinetycznej elektronu

$$T_{\mathbf{r}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2, \quad (13)$$

Operator energii kinetycznej elektronu

$$T_{\mathbf{r}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2, \quad (13)$$

gdzie

$$\nabla_{\mathbf{r}} \equiv \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

jest niezmienniczy względem translacji o wektor sieci, ponieważ

Operator energii kinetycznej elektronu

$$T_{\mathbf{r}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2, \quad (13)$$

gdzie

$$\nabla_{\mathbf{r}} \equiv \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right),$$

jest niezmienniczy względem translacji o wektor sieci, ponieważ

$$\nabla_{\mathbf{r}+\mathbf{R}_n} = \nabla_{\mathbf{r}}. \quad (14)$$

Wynika stąd, że hamiltonian jednoelektronowy

$$H = T_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}) \quad (15)$$

Wynika stąd, że hamiltonian jednoelektronowy

$$H = T_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}) \quad (15)$$

jest również niezmienniczy względem translacji o wektor sieci prostej

$$\mathcal{T}^\dagger(\mathbf{R}_n)H\mathcal{T}(\mathbf{R}_n) = H . \quad (16)$$

A zatem zachodzi komutowanie operatorów

$$[H, \mathcal{T}] = 0 \quad (17)$$

A zatem zachodzi komutowanie operatorów

$$[H, \mathcal{T}] = 0 \quad (17)$$

\implies Hamiltonian jednoelektronowy H i operator translacji \mathcal{T} posiadają **wspólny zbiór funkcji własnych**.

Twierdzenie Blocha

Twierdzenie Blocha

Rozwiązujemy równanie własne dla operatora translacji

Twierdzenie Blocha

Rozwiązujemy równanie własne dla operatora translacji

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) , \quad (18)$$

Twierdzenie Blocha

Rozwiązujemy równanie własne dla operatora translacji

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) , \quad (18)$$

pamiętając, że $\psi(\mathbf{r})$ są równocześnie funkcjami własnymi operatora Hamiltona, czyli

Twierdzenie Blocha

Rozwiązujemy równanie własne dla operatora translacji

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) , \quad (18)$$

pamiętając, że $\psi(\mathbf{r})$ są równocześnie funkcjami własnymi operatora Hamiltona, czyli

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) . \quad (19)$$

Działamy operatorem translacji \mathcal{T} na obie strony równania (18)

$$\mathcal{T}^2(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t^2(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) \quad (20)$$

Działamy operatorem translacji \mathcal{T} na obie strony równania (18)

$$\mathcal{T}^2(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t^2(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) \quad (20)$$

i powtarzamy tę operację l razy ($l = 1, 2, \dots$)

$$\mathcal{T}^l(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t^l(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) . \quad (21)$$

Działamy operatorem translacji \mathcal{T} na obie strony równania (18)

$$\mathcal{T}^2(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t^2(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) \quad (20)$$

i powtarzamy tę operację l razy ($l = 1, 2, \dots$)

$$\mathcal{T}^l(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t^l(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) . \quad (21)$$

Zgodnie z zasadą superpozycji translacji

$$\mathcal{T}^l(\mathbf{R}_n) = \mathcal{T}(l\mathbf{R}_n) . \quad (22)$$

Działamy operatorem translacji \mathcal{T} na obie strony równania (18)

$$\mathcal{T}^2(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t^2(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) \quad (20)$$

i powtarzamy tę operację l razy ($l = 1, 2, \dots$)

$$\mathcal{T}^l(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = t^l(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) . \quad (21)$$

Zgodnie z zasadą superpozycji translacji

$$\mathcal{T}^l(\mathbf{R}_n) = \mathcal{T}(l\mathbf{R}_n) . \quad (22)$$

Porównując równania (21) i (22) otrzymujemy

$$t^l(\mathbf{R}_n) = t(l\mathbf{R}_n) . \quad (23)$$

Własność (23) dla wartości własnych operatora translacji jest spełniona jedynie przez funkcję wykładniczą, która zależy liniowo od \mathbf{R}_n , czyli

Własność (23) dla wartości własnych operatora translacji jest spełniona jedynie przez funkcję wykładniczą, która zależy liniowo od \mathbf{R}_n , czyli

$$t(\mathbf{R}_n) = e^{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_n} , \quad (24)$$

gdzie $\boldsymbol{\kappa}$ jest wektorem zespolonym.

Własność (23) dla wartości własnych operatora translacji jest spełniona jedynie przez funkcję wykładniczą, która zależy liniowo od \mathbf{R}_n , czyli

$$t(\mathbf{R}_n) = e^{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_n} , \quad (24)$$

gdzie $\boldsymbol{\kappa}$ jest wektorem zespolonym.

Korzystamy teraz z niezmienniczości unormowania funkcji falowej względem operacji translacji

Własność (23) dla wartości własnych operatora translacji jest spełniona jedynie przez funkcję wykładniczą, która zależy liniowo od \mathbf{R}_n , czyli

$$t(\mathbf{R}_n) = e^{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_n} , \quad (24)$$

gdzie $\boldsymbol{\kappa}$ jest wektorem zespolonym.

Korzystamy teraz z niezmienniczości unormowania funkcji falowej względem operacji translacji

$$\begin{aligned} 1 &= \int d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2 = \int d^3r |\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r})|^2 \\ &= \int d^3r |t(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r})|^2 = |e^{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_n}|^2 \int d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2 . \end{aligned}$$

Wynika stąd, że $|e^{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_n}|^2 = 1$,

Wynika stąd, że $|e^{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_n}|^2 = 1$, a zatem $\boldsymbol{\kappa} = \pm i\mathbf{k}$, gdzie \mathbf{k} jest wektorem rzeczywistym.

Wynika stąd, że $|e^{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_n}|^2 = 1$, a zatem $\boldsymbol{\kappa} = \pm i\mathbf{k}$, gdzie \mathbf{k} jest wektorem rzeczywistym.

W oparciu o dowolność fazy funkcji falowej wybieramy znak $+$ i otrzymujemy końcowy wzór na wartości własne operatora translacji

Wynika stąd, że $|e^{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_n}|^2 = 1$, a zatem $\boldsymbol{\kappa} = \pm i\mathbf{k}$, gdzie \mathbf{k} jest wektorem rzeczywistym.

W oparciu o dowolność fazy funkcji falowej wybieramy znak $+$ i otrzymujemy końcowy wzór na wartości własne operatora translacji

$$t(\mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} . \quad (25)$$

Rozważmy działanie operatora translacji na funkcję falową

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) . \quad (26)$$

Rozważmy działanie operatora translacji na funkcję falową

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) . \quad (26)$$

Z równań (18), (25) i (26) wynika, że

Rozważmy działanie operatora translacji na funkcję falową

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) . \quad (26)$$

Z równań (18), (25) i (26) wynika, że

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \cdot \psi(\mathbf{r}) \quad (27)$$

Rozważmy działanie operatora translacji na funkcję falową

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) . \quad (26)$$

Z równań (18), (25) i (26) wynika, że

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \cdot \psi(\mathbf{r}) \quad (27)$$

Jest to **twierdzenie Blocha**,

Rozważmy działanie operatora translacji na funkcję falową

$$\mathcal{T}(\mathbf{R}_n)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) . \quad (26)$$

Z równań (18), (25) i (26) wynika, że

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \cdot \psi(\mathbf{r}) \quad (27)$$

Jest to **twierdzenie Blocha**,
zwane inaczej **własnością translacyjną** jednoelektronowej
funkcji falowej.

Łatwo sprawdzić, że funkcja falowa cząstki swobodnej (fala płaska)

Łatwo sprawdzić, że funkcja falowa cząstki swobodnej (fala płaska)

$$\pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = Ce^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (28)$$

Łatwo sprawdzić, że funkcja falowa cząstki swobodnej (fala płaska)

$$\pi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = Ce^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (28)$$

spełnia twierdzenie Blocha.

Funkcja Blocha

Funkcja Blocha

Definicja funkcji Blocha

Funkcja Blocha

Definicja funkcji Blocha

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \stackrel{def}{=} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (29)$$

Funkcja Blocha

Definicja funkcji Blocha

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \stackrel{def}{=} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (29)$$

gdzie funkcja $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, zwana **czynnikiem Blocha**, posiada periodyczność sieci prostej, czyli

Funkcja Blocha

Definicja funkcji Blocha

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \stackrel{def}{=} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (29)$$

gdzie funkcja $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, zwana **czynnikiem Blocha**, posiada periodyczność sieci prostej, czyli

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) . \quad (30)$$

Wnioski

Wnioski

(1) Funkcja Blocha spełnia twierdzenie Blocha.

Wnioski

(1) Funkcja Blocha spełnia twierdzenie Blocha.

Równoważne sformułowanie:

Wnioski

(1) Funkcja Blocha spełnia twierdzenie Blocha.

Równoważne sformułowanie:

Jednoelektronowa funkcja falowa elektronu w kryształach ma postać funkcji Blocha.

Wnioski

(1) Funkcja Blocha spełnia twierdzenie Blocha.

Równoważne sformułowanie:

Jednoelektronowa funkcja falowa elektronu w kryształach ma postać funkcji Blocha.

Uwaga: Wniosek (1) nie jest tautologią.

(2) Periodyczność w przestrzeni odwrotnej

(2) Periodyczność w przestrzeni odwrotnej

Można pokazać, że

$$t_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_l}(\mathbf{R}_n) = t_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}_n) \quad (31)$$

(2) Periodyczność w przestrzeni odwrotnej

Można pokazać, że

$$t_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_l}(\mathbf{R}_n) = t_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}_n) \quad (31)$$

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_l) = E(\mathbf{k}) \quad (32)$$

(2) Periodyczność w przestrzeni odwrotnej

Można pokazać, że

$$t_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_l}(\mathbf{R}_n) = t_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}_n) \quad (31)$$

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_l) = E(\mathbf{k}) \quad (32)$$

Wartości własne operatora translacji i hamiltonianu jednoelektronowego przyjmują takie same wartości w stanach numerowanych przez \mathbf{k} i $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_l$, co oznacza degenerację odpowiednich wartości własnych.

(2) Periodyczność w przestrzeni odwrotnej

Można pokazać, że

$$t_{\mathbf{k}+\mathbf{G}_l}(\mathbf{R}_n) = t_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}_n) \quad (31)$$

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{G}_l) = E(\mathbf{k}) \quad (32)$$

Wartości własne operatora translacji i hamiltonianu jednoelektronowego przyjmują takie same wartości w stanach numerowanych przez \mathbf{k} i $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}_l$, co oznacza degenerację odpowiednich wartości własnych.

Degeneracja ta zachodzi przy translacji o dowolny wektor sieci odwrotnej.

(3) Redukcja stanów do pierwszej strefy Brillouina

(3) Redukcja stanów do pierwszej strefy Brillouina

Zastosowanie do numeracji funkcji Blocha wektorów falowych \mathbf{k} należących do 1. strefy Brillouina (BZ) pozwala na ujednoznacznienie stanów w przestrzeni odwrotnej.

(3) Redukcja stanów do pierwszej strefy Brillouina

Zastosowanie do numeracji funkcji Blocha wektorów falowych \mathbf{k} należących do 1. strefy Brillouina (BZ) pozwala na ujednoznacznienie stanów w przestrzeni odwrotnej. Zgodnie z umową do oznaczania funkcji Blocha będziemy używać wektorów falowych $\mathbf{k} \in \text{BZ}$, tzn. wektorów spełniających warunki

(3) Redukcja stanów do pierwszej strefy Brillouina

Zastosowanie do numeracji funkcji Blocha wektorów falowych \mathbf{k} należących do 1. strefy Brillouina (BZ) pozwala na ujednoznacznienie stanów w przestrzeni odwrotnej. Zgodnie z umową do oznaczania funkcji Blocha będziemy używać wektorów falowych $\mathbf{k} \in \text{BZ}$, tzn. wektorów spełniających warunki

$$-\pi < \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_j \leq \pi, \quad (33)$$

przy czym $j = 1, 2, 3$ (x, y, z).

(4) Rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie

(4) Rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie

Korzystamy z tego, że transformata Fouriera funkcji okresowej o okresie \mathbf{R}_n zawiera niezerowe składowe wyłącznie dla $\mathbf{k} = \mathbf{G}_l$.

(4) Rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie

Korzystamy z tego, że transformata Fouriera funkcji okresowej o okresie \mathbf{R}_n zawiera niezerowe składowe wyłącznie dla $\mathbf{k} = \mathbf{G}_l$. W oparciu o tę własność konstruujemy transformatę Fouriera czynnika Blocha $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

(4) Rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie

Korzystamy z tego, że transformata Fouriera funkcji okresowej o okresie \mathbf{R}_n zawiera niezerowe składowe wyłącznie dla $\mathbf{k} = \mathbf{G}_l$. W oparciu o tę własność konstruujemy transformatę Fouriera czynnika Blocha $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Otrzymujemy następujące rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie

(4) Rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie

Korzystamy z tego, że transformata Fouriera funkcji okresowej o okresie \mathbf{R}_n zawiera niezerowe składowe wyłącznie dla $\mathbf{k} = \mathbf{G}_l$. W oparciu o tę własność konstruujemy transformatę Fouriera czynnika Blocha $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Otrzymujemy następujące rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie (transformatę Fouriera funkcji Blocha)

(4) Rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie

Korzystamy z tego, że transformata Fouriera funkcji okresowej o okresie \mathbf{R}_n zawiera niezerowe składowe wyłącznie dla $\mathbf{k} = \mathbf{G}_l$. W oparciu o tę własność konstruujemy transformatę Fouriera czynnika Blocha $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Otrzymujemy następujące rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie (transformatę Fouriera funkcji Blocha)

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_l c_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}_l) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_l) \cdot \mathbf{r}}, \quad (34)$$

gdzie $\mathbf{k} \in \text{BZ}$.

(4) Rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie

Korzystamy z tego, że transformata Fouriera funkcji okresowej o okresie \mathbf{R}_n zawiera niezerowe składowe wyłącznie dla $\mathbf{k} = \mathbf{G}_l$. W oparciu o tę własność konstruujemy transformatę Fouriera czynnika Blocha $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Otrzymujemy następujące rozwinięcie funkcji Blocha na fale płaskie (transformatę Fouriera funkcji Blocha)

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_l c_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}_l) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}_l) \cdot \mathbf{r}}, \quad (34)$$

gdzie $\mathbf{k} \in \text{BZ}$.

Uwaga: Rozwinięcie (34) stosowane jest w niektórych metodach obliczania struktury pasmowej.

(5) Równanie na czynnik Blocha

(5) Równanie na czynnik Blocha

Podstawiając jawną postać hamiltonianu (15) i funkcji Blocha do równania własnego (19) otrzymujemy następujące równanie na czynnik blochowski:

(5) Równanie na czynnik Blocha

Podstawiając jawną postać hamiltonianu (15) i funkcji Blocha do równania własnego (19) otrzymujemy następujące równanie na czynnik blochowski:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (35)$$

(5) Równanie na czynnik Blocha

Podstawiając jawną postać hamiltonianu (15) i funkcji Blocha do równania własnego (19) otrzymujemy następujące równanie na czynnik blochowski:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (35)$$

gdzie operator pędu $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$.

(5) Równanie na czynnik Blocha

Podstawiając jawną postać hamiltonianu (15) i funkcji Blocha do równania własnego (19) otrzymujemy następujące równanie na czynnik blochowski:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (35)$$

gdzie operator pędu $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$.

Równanie (35) zwane jest **równaniem $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$** .

W równaniu (35) wektor \mathbf{k} jest parametrem.

W równaniu (35) wektor \mathbf{k} jest parametrem. Z równania (35) otrzymujemy zatem zależność

W równaniu (35) wektor \mathbf{k} jest parametrem. Z równania (35) otrzymujemy zatem zależność

$$E = E_{\mathbf{k}} .$$

W równaniu (35) wektor \mathbf{k} jest parametrem. Z równania (35) otrzymujemy zatem zależność

$$E = E_{\mathbf{k}} .$$

Rozwiązując równanie własne (35) dla każdego \mathbf{k} otrzymujemy na ogół różne wartości i funkcje własne, które numerujemy liczbą kwantową n zwaną **numerem pasma energetycznego**.

W równaniu (35) wektor \mathbf{k} jest parametrem. Z równania (35) otrzymujemy zatem zależność

$$E = E_{\mathbf{k}} .$$

Rozwiązując równanie własne (35) dla każdego \mathbf{k} otrzymujemy na ogół różne wartości i funkcje własne, które numerujemy liczbą kwantową n zwaną **numerem pasma energetycznego**.

W ten sposób dostajemy **elektronową strukturę pasmową**, którą rozumiemy jako zbiór relacji dyspersji

W równaniu (35) wektor \mathbf{k} jest parametrem. Z równania (35) otrzymujemy zatem zależność

$$E = E_{\mathbf{k}} .$$

Rozwiązując równanie własne (35) dla każdego \mathbf{k} otrzymujemy na ogół różne wartości i funkcje własne, które numerujemy liczbą kwantową n zwaną **numerem pasma energetycznego**.

W ten sposób dostajemy **elektronową strukturę pasmową**, którą rozumiemy jako zbiór relacji dyspersji

$$E = E_{\mathbf{k},n} . \tag{36}$$

W równaniu (35) wektor \mathbf{k} jest parametrem. Z równania (35) otrzymujemy zatem zależność

$$E = E_{\mathbf{k}} .$$

Rozwiązując równanie własne (35) dla każdego \mathbf{k} otrzymujemy na ogół różne wartości i funkcje własne, które numerujemy liczbą kwantową n zwaną **numerem pasma energetycznego**.

W ten sposób dostajemy **elektronową strukturę pasmową**, którą rozumiemy jako zbiór relacji dyspersji

$$E = E_{\mathbf{k},n} . \tag{36}$$

Dla danego pasma n wektor falowy $\mathbf{k} \in \text{BZ}$ określa różne stany kwantowe.

(6) Quasi-ciągłe widmo wartości własnych

(6) Quasi-ciągłe widmo wartości własnych

Z okresowymi warunkami brzegowymi

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{a}_1 + N_2 \mathbf{a}_2 + N_3 \mathbf{a}_3) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (37)$$

(6) Quasi-ciągłe widmo wartości własnych

Z periodycznych warunków brzegowych

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{a}_1 + N_2 \mathbf{a}_2 + N_3 \mathbf{a}_3) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (37)$$

wynika[†] quasi-ciągłość wektora falowego

$$\mathbf{k} = \frac{l_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \mathbf{b}_3, \quad (38)$$

(6) Quasi-ciągłe widmo wartości własnych

Z periodycznych warunków brzegowych

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{a}_1 + N_2 \mathbf{a}_2 + N_3 \mathbf{a}_3) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (37)$$

wynika[†] quasi-ciągłość wektora falowego

$$\mathbf{k} = \frac{l_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \mathbf{b}_3, \quad (38)$$

gdzie N_j, l_j ($j = 1, 2, 3$) = liczby całkowite.

(6) Quasi-ciągłe widmo wartości własnych

Z periodycznych warunków brzegowych

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{a}_1 + N_2 \mathbf{a}_2 + N_3 \mathbf{a}_3) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (37)$$

wynika[†] quasi-ciągłość wektora falowego

$$\mathbf{k} = \frac{l_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \mathbf{b}_3, \quad (38)$$

gdzie N_j, l_j ($j = 1, 2, 3$) = liczby całkowite.

⇒ Widmo energetyczne jest też quasi-ciągłe

$$E_{\mathbf{k}, \nu} = E_{\nu}(\mathbf{k}). \quad (39)$$

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

Korzystamy z periodycznych warunków brzegowych dla funkcji Blocha i rozważamy translację w kierunku x

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

Korzystamy z okresowych warunków brzegowych dla funkcji Blocha i rozważamy translację w kierunku x

$$\psi_{k_x}(x + N_1 a_1) = \psi_{k_x}(x) .$$

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

Korzystamy z okresowych warunków brzegowych dla funkcji Blocha i rozważamy translację w kierunku x

$$\psi_{k_x}(x + N_1 a_1) = \psi_{k_x}(x) .$$

$$\implies e^{ik_x N_1 a_1} = 1$$

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

Korzystamy z periodycznych warunków brzegowych dla funkcji Blocha i rozważamy translację w kierunku x

$$\psi_{k_x}(x + N_1 a_1) = \psi_{k_x}(x) .$$

$$\implies e^{ik_x N_1 a_1} = 1$$

$$\implies k_x N_1 a_1 = 2\pi l_1 ,$$

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

Korzystamy z periodycznych warunków brzegowych dla funkcji Blocha i rozważamy translację w kierunku x

$$\psi_{k_x}(x + N_1 a_1) = \psi_{k_x}(x) .$$

$$\implies e^{ik_x N_1 a_1} = 1$$

$$\implies k_x N_1 a_1 = 2\pi l_1 ,$$

gdzie $l_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

Korzystamy z periodycznych warunków brzegowych dla funkcji Blocha i rozważamy translację w kierunku x

$$\psi_{k_x}(x + N_1 a_1) = \psi_{k_x}(x) .$$

$$\implies e^{ik_x N_1 a_1} = 1$$

$$\implies k_x N_1 a_1 = 2\pi l_1 ,$$

gdzie $l_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$$\implies k_x = \frac{l_1}{N_1} \frac{2\pi}{a_1}$$

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

Korzystamy z periodycznych warunków brzegowych dla funkcji Blocha i rozważamy translację w kierunku x

$$\psi_{k_x}(x + N_1 a_1) = \psi_{k_x}(x) .$$

$$\implies e^{ik_x N_1 a_1} = 1$$

$$\implies k_x N_1 a_1 = 2\pi l_1 ,$$

gdzie $l_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$$\implies k_x = \frac{l_1}{N_1} \frac{2\pi}{a_1}$$

$$\implies k_x = \frac{l_1}{N_1} b_1 ,$$

† Wykazanie quasi-ciągłości wartości składowej x -owej wektora falowego

Korzystamy z periodycznych warunków brzegowych dla funkcji Blocha i rozważamy translację w kierunku x

$$\psi_{k_x}(x + N_1 a_1) = \psi_{k_x}(x) .$$

$$\implies e^{ik_x N_1 a_1} = 1$$

$$\implies k_x N_1 a_1 = 2\pi l_1 ,$$

gdzie $l_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$$\implies k_x = \frac{l_1}{N_1} \frac{2\pi}{a_1}$$

$$\implies k_x = \frac{l_1}{N_1} b_1 ,$$

gdzie b_1 jest odpowiednią składową wektora bazowego sieci odwrotnej.

Zmiana wartości składowej k_x dla $\Delta l_1 = 1$ wynosi

Zmiana wartości składowej k_x dla $\Delta l_1 = 1$ wynosi

$$\Delta k_x = \frac{b_1}{N_1} .$$

Zmiana wartości składowej k_x dla $\Delta l_1 = 1$ wynosi

$$\Delta k_x = \frac{b_1}{N_1} .$$

Jeżeli N_1 jest odpowiednio duże ($N_1 \longrightarrow \infty$), to

$$\Delta k_x \longrightarrow 0 .$$

Zmiana wartości składowej k_x dla $\Delta l_1 = 1$ wynosi

$$\Delta k_x = \frac{b_1}{N_1} .$$

Jeżeli N_1 jest odpowiednio duże ($N_1 \longrightarrow \infty$), to

$$\Delta k_x \longrightarrow 0 .$$

W tym przypadku widmo quasi-ciągłe przechodzi w widmo ciągłe.

(7) Liczba stanów elektronowych w pasmie

(7) Liczba stanów elektronowych w pasmie

$N_s \stackrel{def}{=} \text{liczba stanów jednoelektronowych w pasmie}$
= liczba wartości własnych składowej z-owej spinu (= 2)
 \times liczba ($N_{\mathbf{k}}$) dozwolonych wartości $\mathbf{k} \in \text{BZ}$

(7) Liczba stanów elektronowych w pasmie

$N_s \stackrel{def}{=} \text{liczba stanów jednoelektronowych w pasmie}$
= liczba wartości własnych składowej z -owej spinu ($= 2$)
 \times liczba ($N_{\mathbf{k}}$) dozwolonych wartości $\mathbf{k} \in \text{BZ}$

$$N_{\mathbf{k}} = N_1 N_2 N_3 ,$$

ponieważ $l_j = 1, \dots, N_j$ ($j = 1, 2, 3$).

(7) Liczba stanów elektronowych w pasmie

$N_s \stackrel{def}{=} \text{liczba stanów jednoelektronowych w pasmie}$
= liczba wartości własnych składowej z-owej spinu (= 2)
 \times liczba ($N_{\mathbf{k}}$) dozwolonych wartości $\mathbf{k} \in \text{BZ}$

$$N_{\mathbf{k}} = N_1 N_2 N_3 ,$$

ponieważ $l_j = 1, \dots, N_j$ ($j = 1, 2, 3$).

Z drugiej strony

$$N_1 N_2 N_3 = \mathcal{N} ,$$

(7) Liczba stanów elektronowych w pasmie

$N_s \stackrel{def}{=} \text{liczba stanów jednoelektronowych w pasmie}$
= liczba wartości własnych składowej z-owej spinu (= 2)
 \times liczba ($N_{\mathbf{k}}$) dozwolonych wartości $\mathbf{k} \in \text{BZ}$

$$N_{\mathbf{k}} = N_1 N_2 N_3 ,$$

ponieważ $l_j = 1, \dots, N_j$ ($j = 1, 2, 3$).

Z drugiej strony

$$N_1 N_2 N_3 = \mathcal{N} ,$$

gdzie \mathcal{N} jest liczbą komórek elementarnych w kryształach.

(7) Liczba stanów elektronowych w pasmie

$N_s \stackrel{def}{=} \text{liczba stanów jednoelektronowych w pasmie}$
= liczba wartości własnych składowej z-owej spinu (= 2)
× liczba ($N_{\mathbf{k}}$) dozwolonych wartości $\mathbf{k} \in \text{BZ}$

$$N_{\mathbf{k}} = N_1 N_2 N_3 ,$$

ponieważ $l_j = 1, \dots, N_j$ ($j = 1, 2, 3$).

Z drugiej strony

$$N_1 N_2 N_3 = \mathcal{N} ,$$

gdzie \mathcal{N} jest liczbą komórek elementarnych w kryształach.

A zatem liczba $N_{\mathbf{k}}$ dozwolonych wartości wektora falowego \mathbf{k} jest równa liczbie \mathcal{N} komórek elementarnych w kryształach.

Otrzymujemy stąd wzór na liczbę stanów jednoelektronowych w pasmie

Otrzymujemy stąd wzór na liczbę stanów jednoelektronowych w pasmie

$$N_s = 2\mathcal{N} . \quad (40)$$

Sposoby przedstawiania struktury pasmowej

Sposoby przedstawiania struktury pasmowej

(1) Relacja dyspersji

Sposoby przedstawiania struktury pasmowej

(1) Relacja dyspersji

$$E = E_n(\mathbf{k}) \quad (41)$$

Sposoby przedstawiania struktury pasmowej

(1) Relacja dyspersji

$$E = E_n(\mathbf{k}) \quad (41)$$

Ustalamy np. k_y i k_z i rysujemy wykres $E = E_n(k_x)$ dla pasma n .

Sposoby przedstawiania struktury pasmowej

(1) Relacja dyspersji

$$E = E_n(\mathbf{k}) \quad (41)$$

Ustalamy np. k_y i k_z i rysujemy wykres $E = E_n(k_x)$ dla pasma n . Najczęściej \mathbf{k} jest ustalane dla kierunków o wysokiej symetrii w 1. strefie Brillouina, np. X, Σ, Λ .

(2) Powierzchnia izoenergetyczna

(2) Powierzchnia izoenergetyczna

Jest to powierzchnia

$$E_n(\mathbf{k}) = \text{const} \quad (42)$$

w przestrzeni odwrotnej.

(2) Powierzchnia izoenergetyczna

Jest to powierzchnia

$$E_n(\mathbf{k}) = \text{const} \quad (42)$$

w przestrzeni odwrotnej.

Spośród wielu powierzchni izoenergetycznych wyróżniona jest (szczególnie w metalach) **powierzchnia Fermiego**, która odpowiada **energii Fermiego** E_F .

(2) Powierzchnia izoenergetyczna

Jest to powierzchnia

$$E_n(\mathbf{k}) = \text{const} \quad (42)$$

w przestrzeni odwrotnej.

Spośród wielu powierzchni izoenergetycznych wyróżniona jest (szczególnie w metalach) **powierzchnia Fermiego**, która odpowiada **energii Fermiego** E_F .

Powierzchnię tę definiuje równanie

$$E(\mathbf{k}) = E_F, \quad (43)$$

gdzie E_F jest energią stanu jednoelektronowego, który w temperaturze $T = 0$ oddziela stany obsadzone elektronami od stanów pustych (nieobsadzonych).

Uwagi

Uwagi

- ▶ W półprzewodniku samoistnym (niedomieszkowanym) dla $T = 0$

Uwagi

- ▶ W półprzewodniku samoistnym (nie domieszkowanym) dla $T = 0$

$$E_F = E_g/2 ,$$

Uwagi

- ▶ W półprzewodniku samoistnym (nie domieszkowanym) dla $T = 0$

$$E_F = E_g/2 ,$$

a dla $T > 0$ E_F nadal leży w przerwie energetycznej.

Uwagi

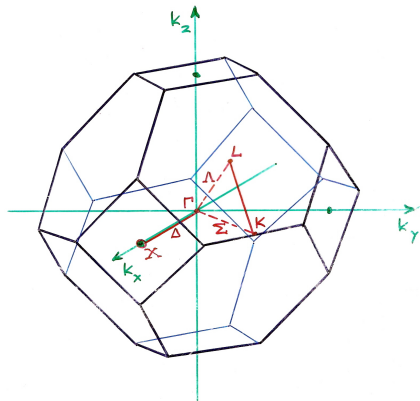
- ▶ W półprzewodniku samoistnym (nie domieszkowanym) dla $T = 0$

$$E_F = E_g/2 ,$$

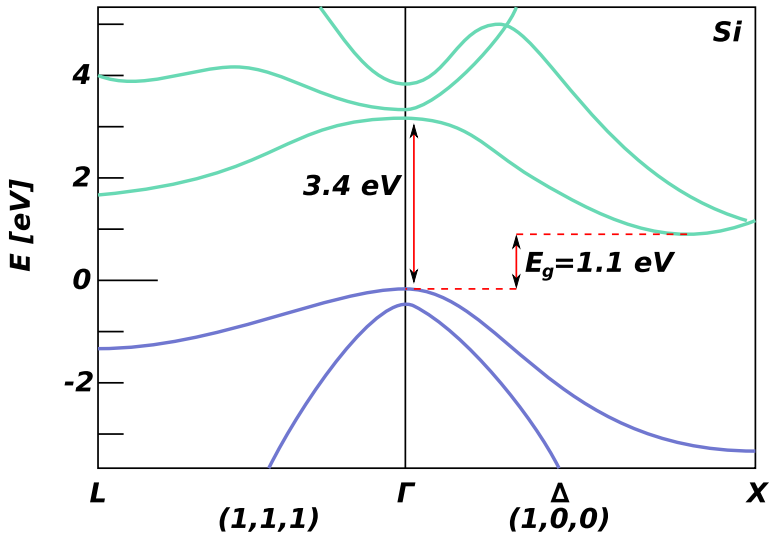
a dla $T > 0$ E_F nadal leży w przerwie energetycznej.

- ▶ W metalu E_F leży w pasmie przewodnictwa.

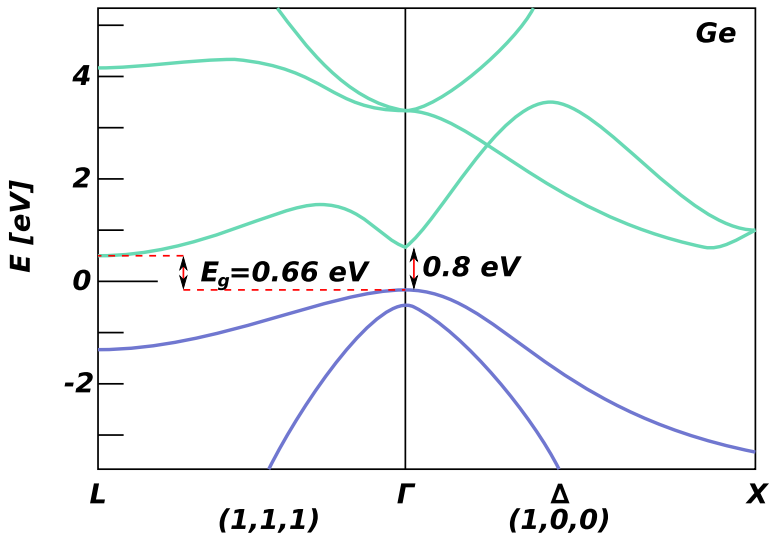
Przykłady struktury pasmowej półprzewodników



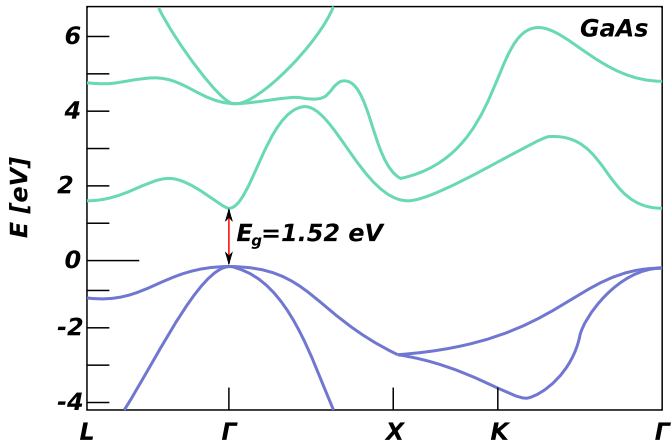
Pierwsza strefa Brillouina dla struktury fcc.



Struktura pasmowa krzemu.



Struktura pasmowa germanu.



Struktura pasmowa arsenku galu.

Pasmowa masa efektywna

Pasmowa masa efektywna

Rozważamy relację dyspersji pasma n w otoczeniu ekstremum dla $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$.

Pasmowa masa efektywna

Rozważamy relację dyspersji pasma n w otoczeniu ekstremum dla $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$.

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \right|_{\mathbf{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) + \dots, \quad (44)$$

Pasmowa masa efektywna

Rozważamy relację dyspersji pasma n w otoczeniu ekstremum dla $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$.

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \right|_{\mathbf{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) + \dots, \quad (44)$$

gdzie $i, j = (1, 2, 3) = (x, y, z)$.

Pasmowa masa efektywna

Rozważamy relację dyspersji pasma n w otoczeniu ekstremum dla $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$.

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) + \dots, \quad (44)$$

gdzie $i, j = (1, 2, 3) = (x, y, z)$.

W rozwinięciu tym $E_n^0 = E_n(\mathbf{k}_0)$ oraz

Pasmowa masa efektywna

Rozważamy relację dyspersji pasma n w otoczeniu ekstremum dla $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$.

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \left. \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \right|_{\mathbf{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) + \dots, \quad (44)$$

gdzie $i, j = (1, 2, 3) = (x, y, z)$.

W rozwinięciu tym $E_n^0 = E_n(\mathbf{k}_0)$ oraz

$$\left. \frac{\partial E_n}{\partial k_i} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = 0.$$

Pasmowa masa efektywna

Rozważamy relację dyspersji pasma n w otoczeniu ekstremum dla $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$.

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) + \dots, \quad (44)$$

gdzie $i, j = (1, 2, 3) = (x, y, z)$.

W rozwinięciu tym $E_n^0 = E_n(\mathbf{k}_0)$ oraz

$$\frac{\partial E_n}{\partial k_i} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = 0.$$

W dalszym ciągu uwzględniamy tylko wyrazy 2. rzędu.

Definiujemy elementy **tensora odwrotności masy efektywnej**

Definiujemy elementy **tensora odwrotności masy efektywnej**

$$(\mathbf{m}^{-1}_n)_{ij} \stackrel{def}{=} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} . \quad (45)$$

Definiujemy elementy **tensora odwrotności masy efektywnej**

$$(\mathbf{m}^{-1}_n)_{ij} \stackrel{def}{=} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} . \quad (45)$$

Tensor \mathbf{m}^{-1}_n jest tensorem 2. rzędu reprezentowanym przez macierz 3×3 .

Definiujemy elementy **tensora odwrotności masy efektywnej**

$$(\mathbf{m}^{-1}_n)_{ij} \stackrel{def}{=} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} . \quad (45)$$

Tensor \mathbf{m}^{-1}_n jest tensorem 2. rzędu reprezentowanym przez macierz 3×3 .

Wartości elementów (45) tensora odwrotności masy efektywnej zależą od wyboru układu współrzędnych w przestrzeni \mathbf{k} .

Definiujemy elementy **tensora odwrotności masy efektywnej**

$$(\mathbf{m}^{-1}_n)_{ij} \stackrel{def}{=} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} . \quad (45)$$

Tensor \mathbf{m}^{-1}_n jest tensorem 2. rzędu reprezentowanym przez macierz 3×3 .

Wartości elementów (45) tensora odwrotności masy efektywnej zależą od wyboru układu współrzędnych w przestrzeni \mathbf{k} . W szczególności można tak wybrać układ współrzędnych, aby tensor ten miał postać diagonalną, czyli

Definiujemy elementy **tensora odwrotności masy efektywnej**

$$(\mathbf{m}^{-1}_n)_{ij} \stackrel{def}{=} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} . \quad (45)$$

Tensor \mathbf{m}^{-1}_n jest tensorem 2. rzędu reprezentowanym przez macierz 3×3 .

Wartości elementów (45) tensora odwrotności masy efektywnej zależą od wyboru układu współrzędnych w przestrzeni \mathbf{k} . W szczególności można tak wybrać układ współrzędnych, aby tensor ten miał postać diagonalną, czyli

$$(\mathbf{m}^{-1}_n)_{ij} = m_{n,i}^{-1} \delta_{ij} . \quad (46)$$

Tensor masy efektywnej definiujemy jako tensor odwrotny do tensora odwrotności masy efektywnej.

Tensor masy efektywnej definiujemy jako tensor odwrotny do tensora odwrotności masy efektywnej.

W postaci diagonalnej

$$\begin{pmatrix} m_{n,1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{n,1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{n,3} \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Tensor masy efektywnej definiujemy jako tensor odwrotny do tensora odwrotności masy efektywnej.

W postaci diagonalnej

$$\begin{pmatrix} m_{n,1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{n,1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{n,3} \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Elementy tensora masy efektywnej w jawnej postaci

Tensor masy efektywnej definiujemy jako tensor odwrotny do tensora odwrotności masy efektywnej.

W postaci diagonalnej

$$\begin{pmatrix} m_{n,1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{n,1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{n,3} \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Elementy tensora masy efektywnej w jawnej postaci

$$m_{n,i} \stackrel{def}{=} (m_{n,i}^{-1})^{-1} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i^2} \Big|_{\mathbf{k}_0} \right)^{-1}. \quad (48)$$

Tensor masy efektywnej definiujemy jako tensor odwrotny do tensora odwrotności masy efektywnej.

W postaci diagonalnej

$$\begin{pmatrix} m_{n,1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{n,1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{n,3} \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Elementy tensora masy efektywnej w jawnej postaci

$$m_{n,i} \stackrel{def}{=} (m_{n,i}^{-1})^{-1} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i^2} \Big|_{\mathbf{k}_0} \right)^{-1}. \quad (48)$$

Relację dyspersji w otoczeniu ekstremum można zapisać jako

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2 (k_i - k_{0i})^2}{2m_{n,i}}. \quad (49)$$

Interpretacja matematyczna masy efektywnej

Interpretacja matematyczna masy efektywnej

Pasmowa masa efektywna jest odwrotnie proporcjonalna do krzywizny pasma w otoczeniu ekstremum.

Rozważamy teraz jedno określone pasmo n , a więc możemy opuścić wskaźnik pasma n .

Rozważamy teraz jedno określone pasmo n , a więc możemy opuścić wskaźnik pasma n .

Ekstremum w punkcie $\mathbf{k}_0 \neq 0$

Rozważamy teraz jedno określone pasmo n , a więc możemy opuścić wskaźnik pasma n .

Ekstremum w punkcie $\mathbf{k}_0 \neq 0$

Jest to np. przypadek minimum pasma przewodnictwa (c) w Si i Ge.

Rozważamy teraz jedno określone pasmo n , a więc możemy opuścić wskaźnik pasma n .

Ekstremum w punkcie $\mathbf{k}_0 \neq 0$

Jest to np. przypadek minimum pasma przewodnictwa (c) w Si i Ge. W tym przypadku $m_1 = m_2 = m_{\perp}$, $m_3 = m_{\parallel} \neq m_{\perp}$ i relacja dyspersji przyjmuje postać

Rozważamy teraz jedno określone pasmo n , a więc możemy opuścić wskaźnik pasma n .

Ekstremum w punkcie $\mathbf{k}_0 \neq 0$

Jest to np. przypadek minimum pasma przewodnictwa (c) w Si i Ge. W tym przypadku $m_1 = m_2 = m_{\perp}$, $m_3 = m_{\parallel} \neq m_{\perp}$ i relacja dyspersji przyjmuje postać

$$E(\mathbf{k}) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{0z})^2 . \quad (50)$$

Rozważamy teraz jedno określone pasmo n , a więc możemy opuścić wskaźnik pasma n .

Ekstremum w punkcie $\mathbf{k}_0 \neq 0$

Jest to np. przypadek minimum pasma przewodnictwa (c) w Si i Ge. W tym przypadku $m_1 = m_2 = m_{\perp}$, $m_3 = m_{\parallel} \neq m_{\perp}$ i relacja dyspersji przyjmuje postać

$$E(\mathbf{k}) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{0z})^2 . \quad (50)$$

Powierzchnia izoenergetyczna jest elipsoidą obrotową wokół punktu \mathbf{k}_0 i punktów równoważnych wewnątrz 1. strefy Brillouina.

Powierzchnie izoenergetyczne dla Si i Ge
(wokół minimum pasma przewodnictwa)

W kryształe Si:

W kryształe Si:

$$\mathbf{k}_0 = 0.85 \times \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0) ,$$

W kryształe Si:

$$\mathbf{k}_0 = 0.85 \times \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 \in \text{BZ}$, czyli wektor \mathbf{k}_0 jest współliniowy z kierunkiem Δ wewnątrz strefy Brillouina.

W kryształe Si:

$$\mathbf{k}_0 = 0.85 \times \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 \in \text{BZ}$, czyli wektor \mathbf{k}_0 jest współliniowy z kierunkiem Δ wewnątrz strefy Brillouina.

W kryształe Ge:

W kryształe Si:

$$\mathbf{k}_0 = 0.85 \times \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 \in \text{BZ}$, czyli wektor \mathbf{k}_0 jest współliniowy z kierunkiem Δ wewnątrz strefy Brillouina.

W kryształe Ge:

$$\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) ,$$

W kryształe Si:

$$\mathbf{k}_0 = 0.85 \times \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 \in \text{BZ}$, czyli wektor \mathbf{k}_0 jest współliniowy z kierunkiem Δ wewnątrz strefy Brillouina.

W kryształe Ge:

$$\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 = L$, czyli wektor \mathbf{k}_0 wyznacza punkt L na granicy strefy Brillouina.

W kryształe Si:

$$\mathbf{k}_0 = 0.85 \times \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 \in \text{BZ}$, czyli wektor \mathbf{k}_0 jest współliniowy z kierunkiem Δ wewnątrz strefy Brillouina.

W kryształe Ge:

$$\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 = L$, czyli wektor \mathbf{k}_0 wyznacza punkt L na granicy strefy Brillouina.

Z symetrii 1. strefy Brillouina względem obrotów w przestrzeni \mathbf{k} wynika, że w kryształe Si istnieje 6 równoważnych punktów \mathbf{k}_0 , a w kryształe Ge – 8.

W kryształe Si:

$$\mathbf{k}_0 = 0.85 \times \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 \in \text{BZ}$, czyli wektor \mathbf{k}_0 jest współliniowy z kierunkiem Δ wewnątrz strefy Brillouina.

W kryształe Ge:

$$\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 = L$, czyli wektor \mathbf{k}_0 wyznacza punkt L na granicy strefy Brillouina.

Z symetrii 1. strefy Brillouina względem obrotów w przestrzeni \mathbf{k} wynika, że w kryształe Si istnieje 6 równoważnych punktów \mathbf{k}_0 , a w kryształe Ge – 8.

Punktom tym odpowiadają minima energii (doliny) pasma przewodnictwa, stąd o krzemie i germanie mówimy, że są to **półprzewodniki wielodolinowe**.

W kryształe Si:

$$\mathbf{k}_0 = 0.85 \times \frac{2\pi}{a} (1, 0, 0) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 \in \text{BZ}$, czyli wektor \mathbf{k}_0 jest współliniowy z kierunkiem Δ wewnątrz strefy Brillouina.

W kryształe Ge:

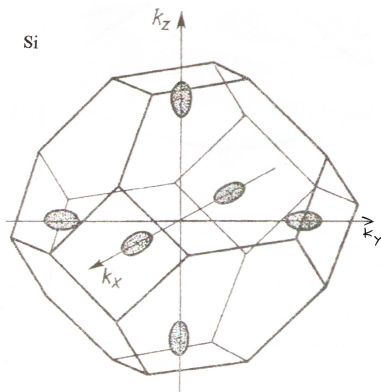
$$\mathbf{k}_0 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) ,$$

$\implies \mathbf{k}_0 = L$, czyli wektor \mathbf{k}_0 wyznacza punkt L na granicy strefy Brillouina.

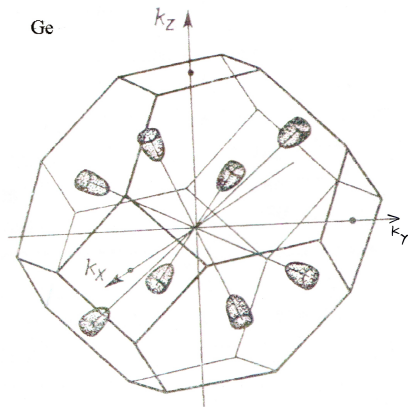
Z symetrii 1. strefy Brillouina względem obrotów w przestrzeni \mathbf{k} wynika, że w kryształe Si istnieje 6 równoważnych punktów \mathbf{k}_0 , a w kryształe Ge – 8.

Punktom tym odpowiadają minima energii (doliny) pasma przewodnictwa, stąd o krzemie i germanie mówimy, że są to **półprzewodniki wielodolinowe**.

Odpowiednia przerwa energetyczna jest **skośna**.



6-dolinowa struktura pasmowa krzemu.



8-dolinowa struktura pasmowa germanu.

Ekstremum w punkcie $k = 0$

Ekstremum w punkcie $\mathbf{k} = 0$

W wielu, ważnych z punktu widzenia zastosowań, kryształach półprzewodnikowych o strukturze fcc, ekstremum pasm występuje w środku 1. strefy Brillouina,

Ekstremum w punkcie $\mathbf{k} = 0$

W wielu, ważnych z punktu widzenia zastosowań, kryształach półprzewodnikowych o strukturze fcc, ekstremum pasm występuje w środku 1. strefy Brillouina, czyli dla $\mathbf{k}_0 = (0, 0, 0)$.

Ekstremum w punkcie $\mathbf{k} = 0$

W wielu, ważnych z punktu widzenia zastosowań, kryształach półprzewodnikowych o strukturze fcc, ekstremum pasm występuje w środku 1. strefy Brillouina, czyli dla $\mathbf{k}_0 = (0, 0, 0)$. Jest to tzw. punkt Γ .

(1) Przypadek anizotropowy

(1) Przypadek anizotropowy

W tym przypadku relacje dyspersji w pobliżu minimum pasma przewodnictwa (c) i maksimum pasma walencyjnego (v) mają postać

(1) Przypadek anizotropowy

W tym przypadku relacje dyspersji w pobliżu minimum pasma przewodnictwa (c) i maksimum pasma walencyjnego (v) mają postać

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2}{2m_{n\perp}}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_{n\parallel}}k_z^2, \quad (51)$$

gdzie $n = c, v$.

(1) Przypadek anizotropowy

W tym przypadku relacje dyspersji w pobliżu minimum pasma przewodnictwa (c) i maksimum pasma walencyjnego (v) mają postać

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2}{2m_{n\perp}}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_{n\parallel}}k_z^2, \quad (51)$$

gdzie $n = c, v$. Powierzchnia izoenergetyczna jest **elipsoidą obrotową** o środku w punkcie Γ . Przerwa energetyczna jest prosta.

(1) Przypadek anizotropowy

W tym przypadku relacje dyspersji w pobliżu minimum pasma przewodnictwa (c) i maksimum pasma walencyjnego (v) mają postać

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2}{2m_{n\perp}}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_{n\parallel}}k_z^2, \quad (51)$$

gdzie $n = c, v$. Powierzchnia izoenergetyczna jest **elipsoidą obrotową** o środku w punkcie Γ . Przerwa energetyczna jest prosta.

Przykłady: CdS, ZnS.

(2) Przypadek izotropowy

(2) Przypadek izotropowy

Relacje dyspersji w otoczeniu minimum pasma przewodnictwa i maksimum pasma walencyjnego

(2) Przypadek izotropowy

Relacje dyspersji w otoczeniu minimum pasma przewodnictwa i maksimum pasma walencyjnego

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}, \quad (52)$$

(2) Przypadek izotropowy

Relacje dyspersji w otoczeniu minimum pasma przewodnictwa i maksimum pasma walencyjnego

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}, \quad (52)$$

gdzie $m_{\perp} = m_{\parallel} = m_n$.

(2) Przypadek izotropowy

Relacje dyspersji w otoczeniu minimum pasma przewodnictwa i maksimum pasma walencyjnego

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}, \quad (52)$$

gdzie $m_{\perp} = m_{\parallel} = m_n$.

W tym przypadku relacja dyspersji jest **paraboliczna**, a powierzchnie izoenergetyczne są **powierzchniami kulistymi**. Przerwa energetyczna jest prosta.

(2) Przypadek izotropowy

Relacje dyspersji w otoczeniu minimum pasma przewodnictwa i maksimum pasma walencyjnego

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n}, \quad (52)$$

gdzie $m_{\perp} = m_{\parallel} = m_n$.

W tym przypadku relacja dyspersji jest **paraboliczna**, a powierzchnie izoenergetyczne są **powierzchniami kulistymi**.

Przerwa energetyczna jest prosta.

Przykłady: GaAs, InSb.

Interpretacja fizyczna masy efektywnej

Interpretacja fizyczna masy efektywnej

Rozważmy energia cząstki swobodnej o masie m_{sw}

Interpretacja fizyczna masy efektywnej

Rozważmy energię cząstki swobodnej o masie m_{sw}

$$E_{sw}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{sw}} . \quad (53)$$

Interpretacja fizyczna masy efektywnej

Rozważmy energia cząstki swobodnej o masie m_{sw}

$$E_{sw}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{sw}} . \quad (53)$$

Dla porównania relacja dyspersji w pobliżu ekstremum w przypadku izotropowym ma postać

Interpretacja fizyczna masy efektywnej

Rozważmy energia cząstki swobodnej o masie m_{sw}

$$E_{sw}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{sw}} . \quad (53)$$

Dla porównania relacja dyspersji w pobliżu ekstremum w przypadku izotropowym ma postać

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} , \quad (54)$$

Interpretacja fizyczna masy efektywnej

Rozważmy energia cząstki swobodnej o masie m_{sw}

$$E_{sw}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{sw}} . \quad (53)$$

Dla porównania relacja dyspersji w pobliżu ekstremum w przypadku izotropowym ma postać

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} , \quad (54)$$

przy czym zakładamy, że $E_n^0 = 0$.

Z porównania równań (53) i (54) wynika, że

Z porównania równań (53) i (54) wynika, że
**elektron o energii bliskiej $E_n^0 = E_n^{extremum}$ zachowuje się
jak cząstka swobodna o masie m_n .**

Z porównania równań (53) i (54) wynika, że
**elektron o energii bliskiej $E_n^0 = E_n^{extremum}$ zachowuje się
jak cząstka swobodna o masie m_n .**

Masa m_n jest na ogół różna od masy spoczynkowej elektronu w próżni m_{e0} .

Quasi-cząstki

Quasi-cząstki

Rozważamy półprzewodnik o izotropowej relacji dyspersji i prostej przerwie energetycznej.

Quasi-cząstki

Rozważamy półprzewodnik o izotropowej relacji dyspersji i prostej przerwie energetycznej.

Jeżeli w pasmie walencyjnym (v) powstanie pojedynczy stan nieobsadzony (luka po elektronie), np. wskutek absorpcji fotonu o energii $h\nu \geq E_g$, to ruch pozostałych elektronów obsadzających tę lukę jest równoważny ruchowi luki o przeciwnym zwrocie prędkości.

Quasi-cząstki

Rozważamy półprzewodnik o izotropowej relacji dyspersji i prostej przerwie energetycznej.

Jeżeli w pasmie walencyjnym (v) powstanie pojedynczy stan nieobsadzony (luka po elektronie), np. wskutek absorpcji fotonu o energii $h\nu \geq E_g$, to ruch pozostałych elektronów obsadzających tę lukę jest równoważny ruchowi luki o przeciwnym zwrocie prędkości.

$$\mathbf{v}_l = -\mathbf{v}_e \quad (55)$$

Luka po elektronie w pasmie walencyjnym może być traktowana jako pewna **quasi-cząstka**, którą nazywamy **dziurą**.

Luka po elektronie w pasmie walencyjnym może być traktowana jako pewna **quasi-cząstka**, którą nazywamy **dziurą**.

Przyjmujemy, że ładunek dziury $q_h = -q_e = e$, gdzie $e > 0$ jest ładunkiem elementarnym, a efektywna masa pasmowa dziury

$$m_h = -m_v.$$

Luka po elektronie w pasmie walencyjnym może być traktowana jako pewna **quasi-cząstka**, którą nazywamy **dziurą**.

Przyjmujemy, że ładunek dziury $q_h = -q_e = e$, gdzie $e > 0$ jest ładunkiem elementarnym, a efektywna masa pasmowa dziury $m_h = -m_v$. Dla maksimum pasma walencyjnego

Luka po elektronie w pasmie walencyjnym może być traktowana jako pewna **quasi-cząstka**, którą nazywamy **dziurą**.

Przyjmujemy, że ładunek dziury $q_h = -q_e = e$, gdzie $e > 0$ jest ładunkiem elementarnym, a efektywna masa pasmowa dziury $m_h = -m_v$. Dla maksimum pasma walencyjnego

$$m_v = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{\mathbf{k}=0} \right)^{-1} < 0. \quad (56)$$

Luka po elektronie w pasmie walencyjnym może być traktowana jako pewna **quasi-cząstka**, którą nazywamy **dziurą**.

Przyjmujemy, że ładunek dziury $q_h = -q_e = e$, gdzie $e > 0$ jest ładunkiem elementarnym, a efektywna masa pasmowa dziury $m_h = -m_v$. Dla maksimum pasma walencyjnego

$$m_v = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{\mathbf{k}=0} \right)^{-1} < 0. \quad (56)$$

Wynika stąd, że $m_h > 0$.

Luka po elektronie w pasmie walencyjnym może być traktowana jako pewna **quasi-cząstka**, którą nazywamy **dziurą**.

Przyjmujemy, że ładunek dziury $q_h = -q_e = e$, gdzie $e > 0$ jest ładunkiem elementarnym, a efektywna masa pasmowa dziury $m_h = -m_v$. Dla maksimum pasma walencyjnego

$$m_v = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{\mathbf{k}=0} \right)^{-1} < 0. \quad (56)$$

Wynika stąd, że $m_h > 0$.

Energię dziury E_h liczymy względem maksimum pasma walencyjnego, czyli zakładamy, że $E_v^{max} = 0$.

Luka po elektronie w pasmie walencyjnym może być traktowana jako pewna **quasi-cząstka**, którą nazywamy **dziurą**.

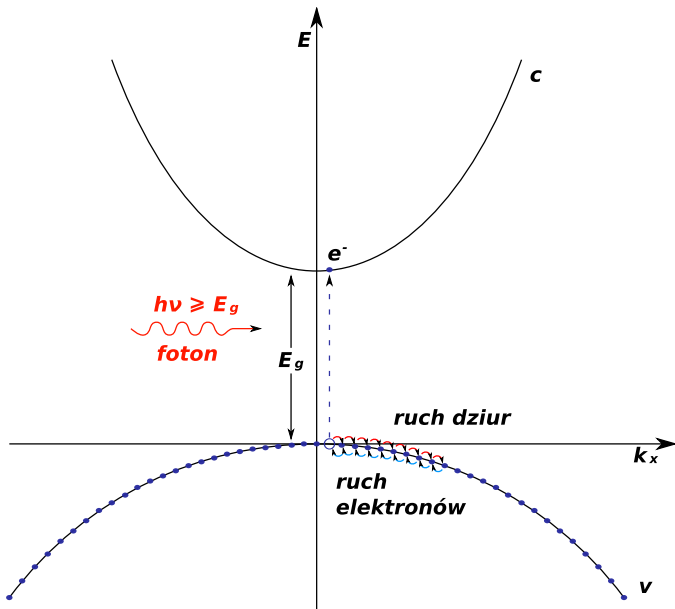
Przyjmujemy, że ładunek dziury $q_h = -q_e = e$, gdzie $e > 0$ jest ładunkiem elementarnym, a efektywna masa pasmowa dziury $m_h = -m_v$. Dla maksimum pasma walencyjnego

$$m_v = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{\mathbf{k}=0} \right)^{-1} < 0. \quad (56)$$

Wynika stąd, że $m_h > 0$.

Energię dziury E_h liczymy względem maksimum pasma walencyjnego, czyli zakładamy, że $E_v^{max} = 0$.

$$E_h(\mathbf{k}) = -E_v(\mathbf{k}) \quad (57)$$



Elektron w stanie Blocha o wektorze falowym z otoczenia minimum pasma przewodnictwa (c) również jest quasi-cząstką.

Elektron w stanie Blocha o wektorze falowym z otoczenia minimum pasma przewodnictwa (c) również jest quasi-cząstką. Zgodnie z tym opisem jest on czasem nazywany **quasi-elektronem, elektronem blochowskim, elektronem pasmowym**.

Elektron w stanie Blocha o wektorze falowym z otoczenia minimum pasma przewodnictwa (c) również jest quasi-cząstką. Zgodnie z tym opisem jest on czasem nazywany **quasi-elektronem, elektronem blochowskim, elektronem pasmowym**.

Quasi-elektron posiada ładunek $q_e = -e$ i efektywną masę pasmową $m_e = m_c$, określoną dla minimum pasma przewodnictwa, przy czym $m_e \neq m_{e0}$.

Elektron w stanie Blocha o wektorze falowym z otoczenia minimum pasma przewodnictwa (c) również jest quasi-cząstką. Zgodnie z tym opisem jest on czasem nazywany **quasi-elektronem, elektronem blochowskim, elektronem pasmowym**.

Quasi-elektron posiada ładunek $q_e = -e$ i efektywną masę pasmową $m_e = m_c$, określoną dla minimum pasma przewodnictwa, przy czym $m_e \neq m_{e0}$.

Na ogół $m_e \ll m_{e0}$.

W półprzewodnikach o anizotropowej relacji dyspersji elektron i dziura posiadają masy efektywne zależne od kierunku (anizotropowe).

W półprzewodnikach o anizotropowej relacji dyspersji elektron i dziura posiadają masy efektywne zależne od kierunku (anizotropowe).

Wprowadzenie pojęcia quasi-cząstki pozwala na prosty (jednocząstkowy) opis dynamiki nośników ładunku w półprzewodnikach.

W półprzewodnikach o anizotropowej relacji dyspersji elektron i dziura posiadają masy efektywne zależne od kierunku (anizotropowe).

Wprowadzenie pojęcia quasi-cząstki pozwala na prosty (jednocząstkowy) opis dynamiki nośników ładunku w półprzewodnikach. W szczególności ruch pojedynczej dziury jest równoważny ruchowi wielu elektronów w pasmie walencyjnym.

Przykładowe wartości masy efektywnej i przerwy energetycznej

Przykładowe wartości masy efektywnej i przerwy energetycznej

E_g [eV] ($T = 300$ K)

Przykładowe wartości masy efektywnej i przerwy energetycznej

E_g [eV] ($T = 300$ K)

	E_g	przerwa	$m_{e\perp}/m_{e0}$	$m_{e\parallel}/m_{e0}$	$m_{h\perp}/m_{e0}$	$m_{h\parallel}/m_{e0}$
Si	1.12	skośna	0.19	0.43	0.17	0.46
Ge	0.665	skośna	0.08	0.21	0.04	0.38
GaAs	1.428	prosta	0.0665	0.0665	0.085	0.085
InSb	0.18	prosta	0.0139	0.0139	0.016	0.016
CdSe	1.825	prosta	0.13	0.13	0.45	1.0