

F6122 Základy fyziky pevných látek – seminář

elektrony v pevné látce

verze 1. prosince 2016

1	Drudeho model volných elektronů	1
1.1	Mathiessenovo pravidlo	1
1.2	Frekvenční závislost vodivosti volných elektronů v kovu v Drudeho modelu	1
1.3	Optická odezva zlata v IR a VIS	1
2	Sommerfeldův model volných elektronů	2
2.1	Betheho–Sommerfeldův rozvoj	2
2.2	Tepelná kapacita v Sommerfeldově modelu za nízkých teplot	2
2.3	Tepelná vodivost elektronového plynu	2
3	Elektron v periodickém potenciálu	3
3.1	Důkaz Blochova teorému	3
3.2	Jednorozměrný kosinový potenciál	3
3.3	Fermiho plochy v prázdné čtvercové a kubické mřížce	3
3.4	Jednorozměrný potenciál	3
3.5	Metoda těsné vazby pro p -pásky ve čtvercové mřížce	4
4	Kvaziklasická aproximace	5
4.1	Efektivní hmotnost v prosté kubické mřížce	5
5	Polovodiče	6
5.1	Statistika nositelů náboje v polovodiči typu N	6
5.2	PN přechod	6

1 Drudeho model volných elektronů

1.1 Mathiessenovo pravidlo

Mějme kovový materiál, kde elektrony se mohou rozptylovat na příměsích s teplotně nezávislou relaxační dobou τ_p a také na tepelných kmitech mříže s relaxační dobou $\tau_t(T)$. Předpokládejme, že oba druhy rozptylu jsou vzájemně nezávislé. Jaká bude celková relaxační doba, teplotní závislost měrného elektrického odporu a měrné vodivosti?

1.2 Frekvenční závislost vodivosti volných elektronů v kovu v Drudeho modelu

V Drudeho modelu je pohyb elektronů popsán rovnicí

$$\frac{dv}{dt} + \frac{v}{\tau} = \frac{F}{m} = \frac{1}{m} \Re [-eEe^{-i\omega t}].$$

Najděte frekvenční závislost vodivosti.

1.3 Optická odezva zlata v IR a VIS

Optická odezva zlata v IR a VIS oblasti se dá popsat Drudeho formulí

$$\varepsilon(E) = \varepsilon_\infty - \frac{E_P^2}{E(E + i\Gamma)} \quad [\text{eV}],$$

kde $\varepsilon_\infty = 3$, $E_P^2 = 57.2 \text{ eV}^2$ a $\Gamma = 0.0602 \text{ eV}$. Spočtěte reálnou část vodivosti, index lomu a hloubku průniku pro energie fotonu $\hbar\omega = 0.001, 0.01, 0.1, 1, 2$ a 3 eV .

2 Sommerfeldův model volných elektronů

2.1 Betheho–Sommerfeldův rozvoj

Ukažte, že integrál $\int_0^\infty H(E)f_{FD}(E) dE$ je možné aproximovat rozvojem

$$\int_0^\infty H(E)f_{FD}(E) dE = \int_0^\mu H(E) dE + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 H'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360}(k_B T)^4 H'''(\mu) + \mathcal{O}\left[\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^6\right].$$

Pomůcka:

$$\int_0^\infty dx \frac{x}{e^x + 1} = \frac{\pi^2}{12}$$

2.2 Tepelná kapacita v Sommerfeldově modelu za nízkých teplot

Experimentálně zjištěná tepelná kapacita kovů pro nízké teploty splňuje vztah

$$\frac{C_v}{V_{\text{mol}}} = \gamma T.$$

Vypočítejte koeficient γ následujících kovů a srovnajte s tabulkovou hodnotou.

	a [Å]	γ [mJ/mol.K]
Cu	3,61	0,695
Ag	4,09	0,646
Au	4,08	0,729

Předpokládejte jeden vodivostní elektron na atom. Všechny tyto kovy mají strukturu kubickou plošně centrovanou (fcc). Pomůcka: $\left(\frac{\pi}{12}\right)^{2/3} \frac{k^2 m N}{\hbar^2} = 3.848 \times 10^{15} \text{ Jmol}^{-1} \text{ K}^{-1} \text{ m}^{-2}$.

2.3 Tepelná vodivost elektronového plynu

Tok tepelné energie v materiálu, kde předpokládáme tepelný gradient ve směru osy z , je dán vztahem

$$j_E = \frac{1}{3} l \langle v \rangle \frac{du}{dz},$$

kde l je střední volná dráha, $\langle v \rangle$ střední driftová rychlost a u je hustota vnitřní energie. Gradient $\frac{du}{dz}$ můžeme napsat ve tvaru

$$\frac{du}{dz} = \frac{du}{dT} \frac{dT}{dz} = c_V \frac{dT}{dz},$$

kde c_V je tepelná kapacita elektronového plynu. Dosad'te do předchozích vztahů vztahy získané pro elektronový plyn a odvoďte Wiedemannův-Franzův zákon

$$\frac{\lambda}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e}\right)^2 = 2,45 \times 10^{-8} \text{ W}\Omega\text{K}^{-2}.$$

Výsledek porovnejte s tabulkovými hodnotami pro reálné kovy.

kov	L ($10^{-8} \text{ W}\Omega \cdot \text{deg}^{-2}$)		kov	L ($10^{-8} \text{ W}\Omega \cdot \text{deg}^{-2}$)	
	při 0°C	při 100°C		při 0°C	při 100°C
Ag	2.31	2.37	Pb	2.47	2.56
Au	2.35	2.40	Pt	2.51	2.60
Cd	2.42	2.43	Sn	2.52	2.49
Cu	2.23	2.33	W	3.04	3.20
Mo	2.61	2.79	Zn	2.31	2.33

3 Elektron v periodickém potenciálu

3.1 Důkaz Blochova teorému

Podle Ascroft, Mermin: Solid state physics

3.2 Jednorozměrný kosinový potenciál

Metodou rozvoje do rovinných vln najděte vlastní energie elektronu v jednodimenzionálním potenciálu s periodou a zadaném funkcí

$$U(x) = -V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right).$$

Z vlastních energií pro dostatečný počet Blochových vektorů v 1. Brillouinově zóně sestavte pásové schéma. Při numerickém řešení použijte následující hodnoty parametrů: $a = 0.4$ nm. Srovnajte výsledky pro $V_0 = 1$ eV a $V_0 = 4$ eV s disperzními relacemi volných elektronů.

Poznámky: vysvětlit vlastní stavy komutujících operátorů – ne každý vlastní stav jednoho je i vlastním stavem druhého. Téměř volné elektrony pro kosinový potenciál.

3.3 Fermiho plochy v prázdné čtvercové a kubické mřížce

Najděte Fermiho plochy ve čtvercové mříži pro volné elektrony. Podobně také v kubické prosté, plošně cetrované a prostorově centrované pro 1, 2, 3 elektrony na primitivní buňku.

Porovnejte s Fermiho plochami kovů: http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/periodic_table.html

3.4 Jednorozměrný potenciál

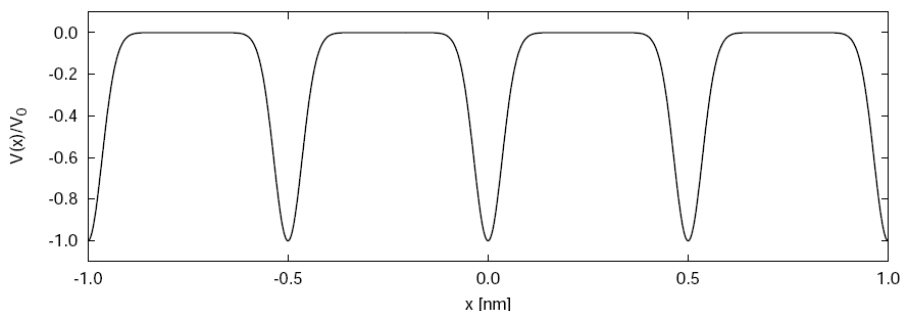
Metodou rozvoje do rovinných vln najděte vlastní energie elektronu v jednodimenzionálním potenciálu s periodou a zadaném funkcí

$$U(x) = -V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(x-na)^2}{\sigma^2}\right],$$

jehož Fourierovy složky jsou

$$U_G = -V_0 \sqrt{\pi} \frac{\sigma}{a} \exp\left(-\frac{\sigma^2 G^2}{4}\right), \quad G = \frac{2\pi n}{a}.$$

Z vlastních energií pro dostatečný počet Blochových vektorů v 1. Brillouinově zóně sestavte pásové schéma. Při numerickém řešení použijte následující hodnoty parametrů: $a = 0.5$ nm, $\sigma = 0.1a$. Srovnajte výsledky pro $V_0 = 2$ eV a $V_0 = 10$ eV s disperzními relacemi volných elektronů.



Pozn.: Při srovnávání je výhodné použít energii vztáženou na střední hodnotu potenciálu, tj. $E - U_{G=0}$.

3.5 Metoda těsné vazby pro p -pásky ve čtvercové mřížce

Uvažujme o dvourozměrné čtvercové mřížce s jednoatomovou bází. Najděte disperzní relace pásů odvozených z dvakrát degenerovaných p -orbitalů p_x a p_y . Vlnové funkce těchto orbitalů mají tvar $\psi_{p_x}(x, y) = x f(\sqrt{x^2 + y^2})$ a $\psi_{p_y}(x, y) = y f(\sqrt{x^2 + y^2})$. Při výpočtu se omezte pouze na maticové elementy mezi nejbližšími sousedy a matici překryvových integrálů aproximujte jednotkovou maticí. Pásové schéma zobrazte podél lomené čáry $M - \Gamma - X$.

4 Kvaziklasická aproximace

4.1 Efektivní hmotnost v prosté kubické mřížce

Spočtete tenzor efektivní hmotnosti (M_{ij}) pro elektrony v prosté kubické mřížce v jednoduchém těsnovazebním pásu ve středu Brillouinovy zóny Γ ($\mathbf{k} = (0, 0, 0)$), ve středu stěny X ($\mathbf{k} = (1, 0, 0)$), ve středu hrany M ($\mathbf{k} = (1, 1, 0)$) a ve vrcholu Brillouinovy zóny L ($\mathbf{k} = (1, 1, 1)$). Diskutujte užitečnost aproximace efektivní hmotnosti v bodě M. (Pozn. Jednoduchý těsnovazební pás vznikne z s-orbitalů).

5 Polovodiče

5.1 Statistika nositelů náboje v polovodiči typu N

V polovodiči je 10^{13} donorů v cm^3 , které mají ionizační energii $E_D = 1 \text{ meV}$ a efektivní hmotnost $m_{ef} = 0.01 m_e$. Žádné akceptorové atomy nejsou přítomny a polovodič je nedegenerovaný, tj. $E_g \gg k_B T$. Odhadněte koncentraci vodivostních elektronů při $T = 4 \text{ K}$ a hodnotu Hallovy konstanty.

5.2 PN přechod

Odvození statistiky nositelů náboje v PN přechodu. Šířka ochuzené vrstvy, difuzní potenciál, ideální voltampérová charakteristika. Literatura: Kittel Introduction to solid state physics

Aschcroft, Mermin: Solid state physics

Sze, Ng: Physics of semiconductor devices

Frank, Šnejdar: Principy a vlastnosti polovodičových součástek

Radomír Lenhard: Fyzika polovodičů, přechod PN, Brno 2013.

Simulace rozložení na PN přechodu: <http://pages.physics.cornell.edu/sss/program/poisson>.