spring2018A

דורון שפיגל

02.04.24

שאלה: 1

שאלה 1.
בחומר מסוים נתונה הדיספרסיה של פס ההולכה:

$$\epsilon_c(k) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2}\left[\left(\frac{k_x^4}{\alpha} - k_x^2\right)\frac{1}{m_1} + \left(\frac{k_y^4}{\alpha} - k_y^2\right)\frac{1}{m_1} + \frac{k_z^2}{m_e}\right]$$

נתון: $m_1 = 3m_e$, $\frac{\hbar^2\alpha}{2m_1} = 1eV$ ו- $\epsilon_0 = 1eV$ והוא נמדד מהמקסימום של פס הערכיות הנמצא במרכז אזור ברילואין הראשון באנרגיה $\epsilon_V = 0$.

פתרון: 1

פתרון 1.
תחילה אציב את הנתון $m_1 = 3m_e$ בנוסחה ואקבל:

$$\epsilon_c(k) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2}\left[\left(\frac{k_x^4}{\alpha} - k_x^2\right)\frac{1}{3m_e} + \left(\frac{k_y^4}{\alpha} - k_y^2\right)\frac{1}{3m_e} + \frac{k_z^2}{m_e}\right]$$

$$\epsilon_c(k) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{k_x^4}{\alpha} - k_x^2\right)\frac{1}{3} + \left(\frac{k_y^4}{\alpha} - k_y^2\right)\frac{1}{3} + k_z^2\right]$$

נחשב את הגרדיאנט של הפונקציה ונמצא את הנקודות בהן היא מתאפסת:

$$\nabla\epsilon_c(k) = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{4k_x^3}{\alpha} - 2k_x\right)\frac{1}{3} + \left(\frac{4k_y^3}{\alpha} - 2k_y\right)\frac{1}{3} + 2k_z\right] = 0$$

פתרון טריוויאלי הוא $k_x = k_y = k_z = 0$. נבדוק את הנקודה הזו:

$$\epsilon_c(0) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2m_e}[0 + 0 + 0] = \epsilon_0$$

נחפש נקודות התאפסות על ידי השוואת מקדמים:

$$\frac{4k_x^3}{\alpha} - 2k_x = 0 \Rightarrow k_x^2 = \frac{\alpha}{2} \Rightarrow k_x = \pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}}$$

$$\frac{4k_y^3}{\alpha} - 2k_y = 0 \Rightarrow k_y^2 = \frac{\alpha}{2} \Rightarrow k_y = \pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}}$$

$$2k_z = 0 \Rightarrow k_z = 0$$

ולכן נקודות ההתאפסות של הגרדיאנט הן: $\left\{\vec{k}=(x,y,0)\,|x,y=0,\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\right\}$.
עבור וקטורים מהצורות הבאות יש שיוויו מסימטריות משוואת הנפיצה בציר ה x,y. כך ש-

$$\begin{aligned}\epsilon(\vec{k})=\epsilon((0,y,0))=\epsilon((x,0,0))&=\epsilon_0+\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{x^4}{\alpha}-x^2\right)\frac{1}{3}\right]\\&=\epsilon_0+\frac{\hbar^2}{6m_e}\left[\frac{\alpha}{2}^2\cdot\frac{1}{\alpha}-\frac{\alpha}{2}\right]\\&=-\frac{\hbar^2\alpha}{24m_e}+\epsilon_0\underbrace{<}_{\frac{\hbar^2\alpha}{2m_1}=1>0}\epsilon_0\\\epsilon(\vec{k})=\epsilon((x,x,0))&=\epsilon_0+\frac{\hbar^2}{6m_e}\left[\frac{\alpha}{2}^2\cdot\frac{1}{\alpha}-\frac{\alpha}{2}+\frac{\alpha}{2}^2\cdot\frac{1}{\alpha}-\frac{\alpha}{2}\right]\\&=-\frac{\hbar^2\alpha}{12m_e}+\epsilon_0\underbrace{<}_{\frac{\hbar^2\alpha}{2m_1}=1>0}\epsilon_0\end{aligned}$$

כלומר:

$$\underbrace{\epsilon((x,x,0))}_{=-\frac{\hbar^2\alpha}{12m_e}+\epsilon_0}<\underbrace{\epsilon((x,0,0))}_{=-\frac{\hbar^2\alpha}{24m_e}+\epsilon_0}<\underbrace{\epsilon((0,0,0))}_{=\epsilon_0}$$

ולכן נקודות המינימום של פס ההולכה הן: $\vec{k}=\left(\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0\right)$.
נתון כי $\epsilon_V=0eV,\quad\epsilon_0=1eV$.

$$\begin{aligned}E_{gap}&=E_{Cmin}-E_{Vmax}=E_{Cmin}-0=E_{Cmin}\\&=\frac{-\hbar^2\alpha}{12m_e}+\epsilon_0=\frac{1}{2}\cdot\frac{-\hbar^2\alpha}{2m_1}+\epsilon_0=\frac{-1}{2}eV+1eV=0.5eV\end{aligned}$$

נתון כי המקסימום של פס הערכיות נמצא במרכז אזור ברילואין הראשון באנרגיה $\epsilon_V=0$.כלומר: $E_{Vmax}(\vec{k})=0\leftrightarrow\vec{k}=0$. לעומת זאת, ראינו ש $E_{Cmin}(\vec{k})\leftrightarrow\vec{k}\neq 0$, לכן פער האנרגיה אינו ישר.
החומר אינו יכול לשמש עבור רכיבים פולטי אור מהסיבה שפוטונים מהווים מעברים כמעט אנכיים, ומכיוון שרק קצוות הפסים מאוכלסים, לא תוכל להתקיים פליטת פוטונים.
כעת נמצא את צפיפות המצבים בתחתית פס ההולכה: כיוון שמדובר בתחתית הפס, נרצה לבצע קירוב פרבולי לפס האנרגיה בנקודות המינימום $\vec{k}=\left(\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0\right)$. לפי משוואת הנפיצה הנתונה,

טור טיילור מסדר 2

ציר $\hat{z}$ פרבולי לחלוטין: $\hat{z}$ $\left(\frac{\hbar^2}{2m_e}k_z^2\right)$, ואילו על צירי $\hat{x},\hat{y}$ נצטרך לבצע קירוב טיילור (מסדר שני).

$$f(x)\bigg|_{x=a} \approx f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2}(x-a)^2$$

(2nd order taylor for single variable)

$$\begin{aligned} f(x,y)\bigg|_{x=a,y=b} &\approx f(a,b) \\ &+ \frac{\mathrm{d}f(x,y)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=a,y=b}(x-a) + \frac{\mathrm{d}f(x,y)}{\mathrm{d}y}\bigg|_{x=a,y=b}(y-b) \\ &+ \frac{\mathrm{d}^2f(x,y)}{\mathrm{d}x^2}\bigg|_{x=a,y=b}\frac{(x-a)^2}{2} + \frac{\mathrm{d}^2f(x,y)}{\mathrm{d}y^2}\bigg|_{x=a,y=b}\frac{(y-b)^2}{2} \\ &+ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\frac{\mathrm{d}f(x,y)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x=a,y=b}(x-a)(y-b) \end{aligned}$$

(2nd order taylor for two variables)

אחשב כל גורם של הסכום עבור $f(x,y)=\epsilon_c(k_{min})$:

$$\begin{aligned} \epsilon_c(k_{min}) &= \epsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{k_x^4}{\alpha}-k_x^2\right)\frac{1}{3} + \left(\frac{k_y^4}{\alpha}-k_y^2\right)\frac{1}{3} + k_z^2\right] \\ &= \epsilon_0 - \frac{\hbar^2\alpha}{12m_e} = 0.5eV = E_{gap} \end{aligned}$$

$$\frac{\mathrm{d}\epsilon_c(k_{min})}{\mathrm{d}k_x}\bigg|_{\substack{a=k_{xmin}\\ b=k_{ymin}}}(x-k_{xmin}) = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{4k_{xmin}^3}{\alpha}-2k_{xmin}\right)\frac{1}{3}\right](x-k_{xmin}) = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}\epsilon_c(k_{min})}{\mathrm{d}k_y}\bigg|_{\substack{a=k_{xmin}\\ b=k_{ymin}}}(y-k_{ymin}) = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2\epsilon_c(k_{min})}{\mathrm{d}k_x^2}\bigg|_{\substack{a=k_{xmin}\\ b=k_{ymin}}}\frac{(x-k_{xmin})^2}{2} &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{12k_{xmin}^2}{\alpha}-2\right)\frac{1}{3}\right]\frac{(x-k_{xmin})^2}{2} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{12k_{xmin}^2}{\alpha}-2\right)\frac{1}{3}\right]\frac{(x-k_{xmin})^2}{2} \end{aligned}$$

■