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:

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

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 שיויו 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 <u>בתחתית</u> 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 $f(x,y)=\epsilon_c(k_{min})$:

$$\epsilon_c\left(k(x,y,0)\right)=\epsilon_0+\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{k_x^4}{\alpha}-k_x^2\right)\frac{1}{3}+\left(\frac{k_y^4}{\alpha}-k_y^2\right)\frac{1}{3}+k_z^2\right]$$

$$=\epsilon_0-\frac{\hbar^2\alpha}{12m_e}=0.5eV=E_{gap}$$

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

$$\left.\frac{\mathrm{d}\epsilon_c\left(k(x,y,0)\right)}{\mathrm{d}k_y}\right|_{\substack{a=k_{xmin}\\ b=k_{ymin}}}\left(k_y-k_{ymin}\right)=0$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2\epsilon_c\left(k(x,y,0)\right)}{\mathrm{d}k_x^2}\right|_{\substack{a=k_{xmin}\\ b=k_{ymin}}}\frac{(k_x-k_{xmin})^2}{2}=\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{12k_{xmin}^2}{\alpha}-2\right)\frac{1}{3}\right]\frac{(k_x-k_{xmin})^2}{2}$$

$$=\frac{\hbar^2}{12m_e}\left(\frac{12k_{xmin}^2}{\alpha}-2\right)(k_x-k_{xmin})^2$$

$$\left[k_{xmin}=\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\right]\Rightarrow=\frac{\hbar^2}{12m_e}\left(\frac{12\cdot\frac{\alpha}{2}}{\alpha}-2\right)\left(k_x-\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\right)^2$$

$$=\frac{\hbar^2}{3m_e}\left(k_x-\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\right)^2$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2\epsilon_c\left(k(x,y,0)\right)}{\mathrm{d}k_y^2}\right|_{\substack{a=k_{xmin}\\ b=k_{ymin}}}\frac{(k_y-k_{ymin})^2}{2}=\frac{\hbar^2}{3m_e}\left(k_y-\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\right)^2$$

עבור כל הצירים נקבל בסך הכל:

$$\epsilon_c\left(k(x,y,z)\right)\Big|_{kmin}=E_{gap}+\frac{\hbar^2}{3m_e}\left(\left(k_x-\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\right)^2+\left(k_y-\sqrt{\frac{\alpha}{2}}\right)^2\right)+\frac{\hbar^2}{2m_e}k_z^2$$

יחס הנפיצה הוא פרבולי (עד כדי הזזה הזזות בצירים $\hat{x},\hat{y}$), אולם, המסות האפקטיביות בצירים $\hat{x},\hat{y}$ שונות מהמסה האפקטיבית בציר $\hat{z}$, כדי לקבל צפיפות מצבים, נשתמש בקירוב של צפיפות המצבים להולכה:

<u>שלב 1:</u> חישוב המסה האפקטיבית לכל ציר:

$$m^* = \boxed{\left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\right)^{-1}}$$

$$m_x^* = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k_x^2}\right)^{-1} = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{2\hbar^2}{3m_e}\right)^{-1} = \frac{3m_e}{2} = 1.5m_e$$

$$m_y^* = 1.5m_e$$

$$m_z^* = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k_z^2}\right)^{-1} = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{2\hbar^2}{2m_e}\right)^{-1} = m_e$$

<u>שלב 2:</u> הצגת טנזור המסה האפקטיבית:

$$\frac{1}{m^*} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_x^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_y^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_z^*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{1.5m_e} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{1.5m_e} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_e} \end{pmatrix}$$

<u>שלב 3:</u> חישוב הסקלר m^*:

$$\det\frac{1}{m^*} = \begin{vmatrix} \frac{1}{1.5m_e} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{1.5m_e} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_e} \end{vmatrix} = \frac{4}{9m_e^3}$$

$$m^* = \frac{9m_e^3}{4} = 2.25m_e^3$$

<u>שלב 4:</u> המסה האפקטיבית של צפיפות המצבים:

לפי התרגול, המסה האפקטיבית של צפיפות המצבים היא:

$$g(E) = \frac{m_{DOS}^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E-E_C}, \quad m_{DOS} = g_V^{\frac{2}{3}}\left(m_1m_2m_3\right)^{\frac{1}{3}} \qquad \textbf{(1)}$$

פקטיבית של צפיפות מצבים

כאשר m_1, m_2, m_3 המסות האפקטיביות לאורך 3 הצירים הראשיים של הבעיה.

g_V - פרמטר הניוון המעיד על מספר המשטחים שווי האנרגיה בתוך אזור ברילואן הראשון.

במקרה של תרגיל זה, ראינו כי יש 4 מינימות $\vec{k} = \left(\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}}, \pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}}, 0\right)$, ולכן פרמטר הניוון הוא $g_V = 4$, ונקבל:

$$m_{DOS} = 4^{\frac{2}{3}}\left(m_1m_2m_3\right)^{\frac{1}{3}} = 4^{\frac{2}{3}}\left(m^*\right)^{\frac{1}{3}} \approx 3.301m_e$$

<u>שלב 5:</u> צפיפות נושאי מטען:

מקורס מל"מ, ידוע כי צפיפות נושאי המטען נתונה על ידי:

$$\underbrace{n}_{\text{צפיפות נושאי מטען}} = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{g(E)}_{\text{צפיפות מצבים}} \cdot \underbrace{f_{FD}(E)}_{\text{אכלוס פרמי דיראק}} \, dE \qquad \textbf{(2)}$$

צפיפות נושאי מטען

נניח שהחומר נמצא בטמפרטורה של $T = 0[K]$, לכן התפלגות הפרמי דיראק תתנהג כמדרגה: $f_{FD}(E) = \begin{cases} 1 & E \le \mu_c = E_f \\ 0 & E > \mu_c = E_f \end{cases}$. נבחר את אנרגיית הייחוס $E_c = 0$ ומתקיים:

$$\begin{aligned} n &= \int_{-\infty}^{\infty} g(E) \cdot f_{FD} dE = \int_{E_c}^{E_f} \frac{m_{DOS}^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E-E_C} f_{FD}(E) dE \\ &= \int_0^{E_f} \frac{m_{DOS}^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE = \frac{m_{DOS}^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^{E_f} \sqrt{E} dE \\ &= \frac{m_{DOS}^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3} \left[\frac{2}{3} E^{\frac{3}{2}}\right]_0^{E_f} = \frac{2}{3} \frac{m_{DOS}^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3} E_f^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

בשאלה זאת נתון לנו ש $n = 10^{18} cm^{-3} = 10^{24} m^{-3}$, ושואלים מהו ערכו של רמת הפרמי. נציב את n ונפתור את המשוואה:

$$\begin{aligned} E_f &= \left(\frac{3\pi^2\hbar^3 n}{2m_{DOS}^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}}\right)^{\frac{2}{3}} \\ &= \left(\frac{3 \cdot \pi^2}{2\sqrt{2}}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m_{DOS}} n^{\frac{2}{3}} \\ &= 4.78 \cdot 10^{16} \cdot \frac{\hbar^2}{m_{DOS}} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} Js \\ m_{DOS} = 3.301 m_e = 3.301 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} kg \end{cases} \quad \rightarrow = 4.78 \cdot 10^{16} \cdot 0.037 \cdot 10^{-37}$$

$$\boxed{E_f = 1.7686 \cdot 10^{-22} [J]}$$

■