תרגיל בית מספר 9: פסי אנרגיה, מסות אפקטיביות

שאלה 1: פוטנציאל מחזורי

נתון גביש חד מימדי המתואר על ידי פוטנציאל מחזורי מהצורה

$$V(x) = Vcos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

1) מהו התנאי על מספר הגל של אלקטרונים בגביש עבורו יתקיים פיזור בראג? (תזכורת – בחד מימד הזווית בין קרן האלקטרונים למישורים המפזרים היא 90°). התחשבו בפיזור בראג מסדר ראשון.
2) מהן שתי פונקציות הגל של האלקטרונים בעלי מספר גל זה?
3) - ציירו מערכת צירים כאשר הציר האופקי הוא מספר הגל k והציר האנכי הוא האנרגיה.
   - על גבי מערכת הצירים הזו ציירו את יחס הנפיצה של אלקטרונים חופשיים.
   - כעת ציירו מערכת צירים נוספת וסמנו בה את איזור ברילואן הראשון. שימו לב שלמספר גל k ולמספר גל $k \pm \frac{2\pi}{a}$ יש את אותה אנרגיה. לכן, ציירו את שני פסי האנרגיה הראשונים בתוך איזור ברילואן הראשון בלבד. (עליכם להעתיק את הענפים המתאימים מחוץ לאיזור ברילואן הראשון לתוך איזור ברילואן הראשון בהתאם למחזוריות).
   - חשבו את פער האנרגיה וציירו אותם במקומות המתאימים באיזור ברילואן הראשון.

פתרון:

1) נרשום את הפוטנציאל באופן הבא:

$$V(x) = Vcos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \frac{V}{2}\left(1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right)$$

ניתן לראות כי הפוטנציאל מחזורי עם מחזור a. כלומר המרחק בין שני אטומים סמוכים בשריג הוא a.

לפי תנאי בראג

$$n\lambda = 2asin\theta$$

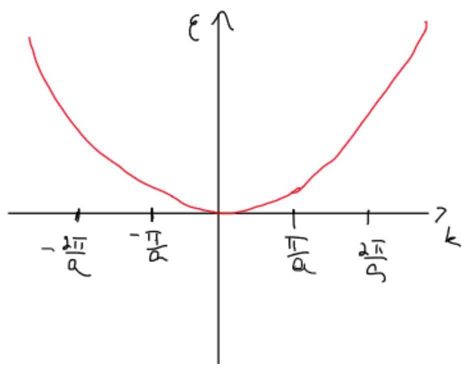
עבור $n = 1, \theta = 90^\circ$ נקבל כי אורך הגל של אלקטרונים המתפזרים בפיזור בראג הוא $2a$. מספר הגל הקשור לאורך גל זה הוא $\frac{\pi}{a}$.

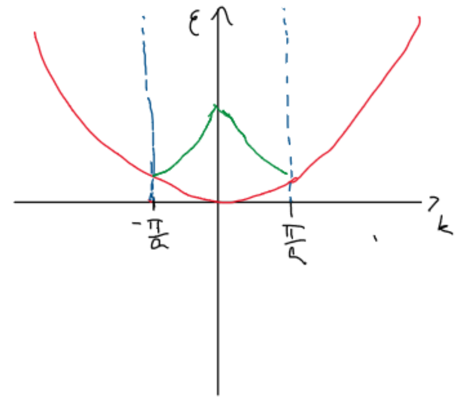
2) כפי שראיתם בהרצאה – פונקציות הגל המתאימות למספר גל זה הן:

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{2}{\sqrt{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$\psi_- = \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{2}{\sqrt{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

3)



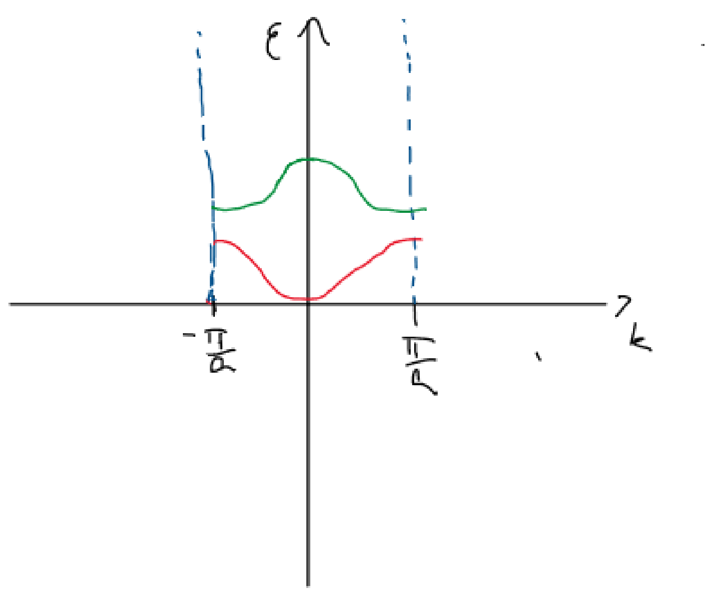


פער האנרגיה יינתן על ידי

$$E_g = E_- - E_+ = \int V(x)\left(|\psi_-|^2 - |\psi_+|^2\right)$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a \frac{V}{2}\left(1+\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right)\left(\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right) dx =$$

$$= -\int_0^a \frac{V}{a}\left(1+\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = -\int_0^a \frac{V}{a}\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = -\frac{V}{2}$$



שאלה 2: מסות אפקטיביות

נתון סריג חד מימדי באורך L שיחס הדיספרסיה של האלקטרונים בו הוא

$$\epsilon(k) = \epsilon_0 - \gamma\cos\,(ka)$$

א) מהו קבוע הסריג? מהו מספר המצבים בפס? (הניחו תנאי שפה מחזוריים)

ב) בהנחה שרק המצבים בתחתית הפס מאוכלסים, השתמשו בקירוב מתאים וקרבו את יחס הדיספרסיה לקירוב ריבועי. מהי המסה האפקטיבית?

ג) בהנחה שהפס כמעט מלא, קרבו את יחס הדיספרסיה בקירוב מתאים. סביב איזו נקודה עליכם לבצע את הקירוב? מה המסה האפקטיבית?

ד) בהינתן שצפיפות נושאי המטען היא n , מהו התנע הסריגי של המצבים המאוכלסים בעלי האנרגיה הגבוהה ביותר? הניחו טמפרטורה אפס.

ה) בגביש יש פגמים, וכתוצאה מכך האלקטרונים מתפזרים בזמן פיזור אופייני $t_{scatter}$. בבעיה קיימת סקאלת זמן נוספת, מהי סקאלת זמן זו והאם הזמן האופייני לפיזור צריך להיות הרבה יותר קטן או הרבה יותר גדול מסקאלת זמן זו כדי שיתקבל זרם ישר?

א) האנרגיה מחזורית עם מחזור $\frac{2\pi}{a}$. ראינו בתרגול ובהרצאה שלתנע הסריגי מחזוריות של $\frac{2\pi}{a}$ כאשר a קבוע הסריג.

אם אורך הסריג הוא L, אז המרחק בין ערכי k סמוכים הוא $\Delta k = \frac{2\pi}{L}$

ומכאן שבפס יש

$$2 \times \frac{\left(\frac{2\pi}{a}\right)}{\Delta k} = 2 * \frac{L}{a}$$

כאשר הכפלנו ב 2 עבור הספין.

ב) אם רק המצבים בתחתית הפס מאוכלסים, רק מצבי k_x שקרובים לאפס רלוונטיים, קירוב סביב $k = 0$ ייתן

$$\epsilon(k) \approx \epsilon_0 - \gamma + \frac{1}{2}\gamma a^2 k^2$$

מההגדרה של המסה האפקטיבית נקבל

$$\frac{1}{m_{eff}}=\frac{\frac{1}{\hbar^2}\partial^2\epsilon}{\partial k^2}=\frac{\gamma a^2}{\hbar^2}$$

$$m_{eff}=\frac{\hbar^2}{a^2\gamma}$$

ג) אם הפס כמעט מלא, רק ערכי k סביב $\frac{\pi}{a}$ רלוונטיים.

נקרב סביב $\frac{\pi}{a}$ ונקבל

$$\epsilon(k)\approx\epsilon_0+\gamma-\frac{1}{2}\gamma a^2\left(k-\frac{\pi}{a}\right)^2$$

כעת נקבל כי המסה האפקטיבית היא שלילית

$$m_{eff}=-\frac{\hbar^2}{a^2\gamma}$$

ד) בטמפרטורה אפס האלקטרונים יאכלסו את המצבים הזמינים הנמוכים ביותר.

אם יש nL אלקטרונים, אז צריך לאכלס את nL המצבים בעלי האנרגיות הנמוכות ביותר.

נשים לב כי k ו $-k$ אותה אנרגיה, לכן מספר המצבים המאוכלסים הוא

$$2\times 2\times\frac{k_{max}}{\frac{2\pi}{L}}=nL$$

כאשר המכפלה הראשונה ב2 היא עבור הספין והשניה היא עבור זה שלמצבים$\pm k$ אותה האנרגיה.

מכאן שהתנע הסריגי של המצב הגבוה ביותר המאוכלס הוא

$$k_{max}=\frac{\pi n}{2}$$

ה) סקאלת הזמן המדוברת היא זמן המחזור של אוסילציות בלוך.

תחת שדה חשמלי אחיד, הכוח הפועל על האלקטרון הוא

$$f=-eE=\frac{\hbar dk}{dt}$$

מכאן שהתנע הסריגי משתנה בזמן לפי

$$k = k_0 - \frac{eE}{\hbar}t$$

זמן שייקח לתנע הסריגי לחזור לעצמו הוא (זהו זמן המחזור של אוסילציות בלוך)

$$\frac{\left(\frac{2\pi}{a}\right)}{\left(\frac{dk}{dt}\right)} = \frac{2\pi\hbar}{aeE}$$

כאשר $\frac{2\pi}{a}$ הוא רוחב איזור ברילואן.

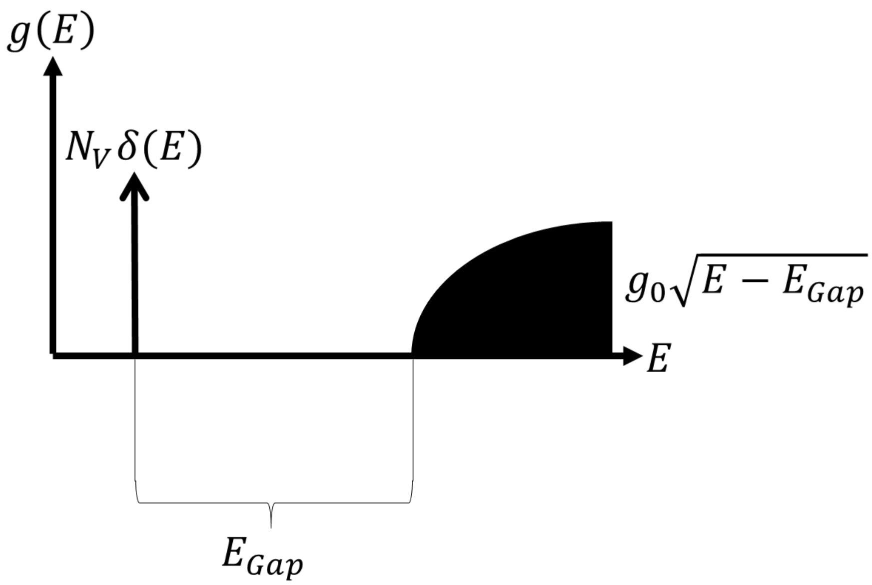
נרצה שהזמן האופייני של אירועי פיזור יהיה קטן בהרבה מזמן המחזור של אוסילציות בלוך כדי לקבל זרם ישר

ולכן צריך להתקיים

$$t_{scatter} \ll \frac{2\pi\hbar}{aeE}$$

שאלה 3: מוליכים למחצה ורמת פרמי

נתונה צפיפות המצבים (בתלת מימד) של מל״מ בעל פער אנרגיה $E_{Gap} \gg k_B T$ כלשהוא (הנתון מתייחס לכל טווח הטמפרטורות המעניין אותנו בשאלה זו):



לצורך פשטות, פס הערכיות נתון בתור צפיפות מצבים מהצורה $g(E)=N_V\delta(E)$. פס ההולכה נתון ע״י הביטוי $g(E)=g_0\sqrt{E-E_{Gap}}, g_0=\frac{m\sqrt{2m}}{\pi^2\hbar^3}$ עוד נתון כי מיקומה של רמת פרמי הוא בקרבת מרכז הפס האסור.

1. מהי צפיפות האלקטרונים הכוללת בחומר?

ניתן לחשב את צפיפות האלקטרונים הכוללת בחומר ב- $T=0[K]$:

$$n=\int_{-\infty}^{\infty} g(E)f(E)dE=\int_{-\infty}^{E_F} g(E)dE=\int_{-\infty}^{E_F} N_V\delta(E)dE=N_V$$

2. נתון כי $T>0$. כתבו ביטוי לצפיפות האלקטרונים n_C בפס ההולכה.

הדרכה: איזה קירוב ניתן לעשות על מנת לפשט את התוצאה?

נתון שפער האנרגיה גדול הרבה יותר מהאנרגיה התרמית, כאשר ניתן להניח שנתון זה נכון עבור טווח הטמפרטורות הרלוונטיות לתרגיל זה. משמעות הדבר שהיות ורמת פרמי רחוקה הרבה יותר מפס ההולכה, ניתן להשתמש בהתפלגות מקסוול-בולצמן במקום בהתפלגות פרמי-דיראק. ההצדקה היא שצפיפות נושאי המטען בפס ההולכה תהיה קטנה מספיק כך שהאופי הפרמיוני של נושאי המטען לא יבוא לידי ביטוי (מעט נושאי מטען על המון מצבים אפשריים). יתקיים:

$$n_C=\int_{-\infty}^{\infty} g_C(E)f(E)dE=\int_{E_{Gap}}^{\infty}\frac{m\sqrt{2m}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E-E_{Gap}}\frac{1}{e^{(E-E_f)/k_BT}+1}dE\approx\int_{E_{Gap}}^{\infty}\frac{m\sqrt{2m}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E-E_{Gap}}e^{-(E-E_f)/k_BT}dE=$$

$$=N_Ce^{(E_f-E_{Gap})/k_BT}, N_C=2\left(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\right)^{3/2}$$

כאשר השתמשנו בתוצאה מהתרגול.

3. רובם המוחלט של אלקטרוני פס ההולכה מצויים בתחתית הפס. הצדיקו את האמירה הנ״ל בהתבסס על הביטוי מהסעיף הקודם.

בסעיף הקודם ראינו שמכיוון שרמת פרמי מצויה רחוק מפס ההולכה, ההתפלגות הרלוונטית לפס ההולכה היא התפלגות מקסוול-בולצמן שצורה אקספוננט דועך. משמעות הדבר היא שעיקר נושאי המטען חייבים להימצא בתחתית הפס שכן ככל שעולים באנרגיה, מספרם דועך אקספוננציאלית.

4. מצאו את צפיפות החורים בפס הערכיות ואת מיקומה של רמת פרמי כתלות בפרמטרי הבעיה.

מכיוון שיש שימור מטען, כל אלקטרון שעזב את פס הערכיות הותיר אחריו חור, כלומר שיתקיים בהגדרה ש- $p_V \equiv n_C$. בתרגול ראינו שעבור החורים נצפה לתלות הפוכה מבחינת התפלגות מקסוול-בולצמן, כלומר שיתקיים:

$$p_V = N_V e^{-E_f/k_BT}$$

השוואה בין הביטויים תיתן:

$$p_V \equiv n_C \Rightarrow N_V e^{-E_f/k_BT} = N_C e^{(E_f - E_{Gap})/k_BT} \Rightarrow \frac{N_V}{N_C} = e^{(2E_f - E_{Gap})/k_BT} \Rightarrow \ln\frac{N_V}{N_C} = \frac{2E_f - E_{Gap}}{k_BT} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_f = \frac{E_{Gap}}{2} + \frac{k_BT}{2}\ln\frac{N_V}{N_C}$$