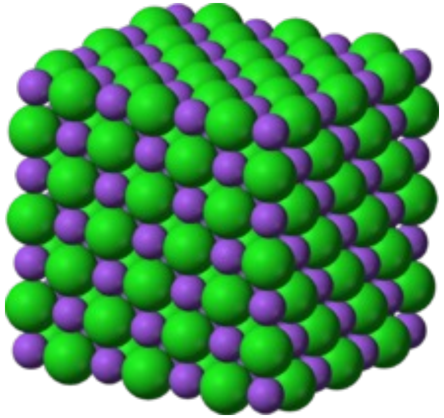
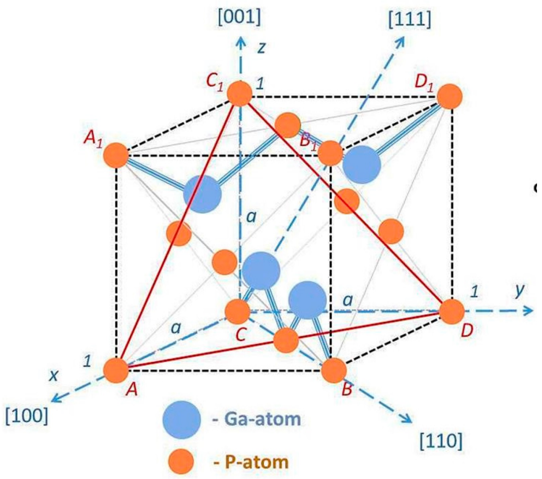
אופטיקה של חומרים דו-מימדיים - שיעור מס. 2

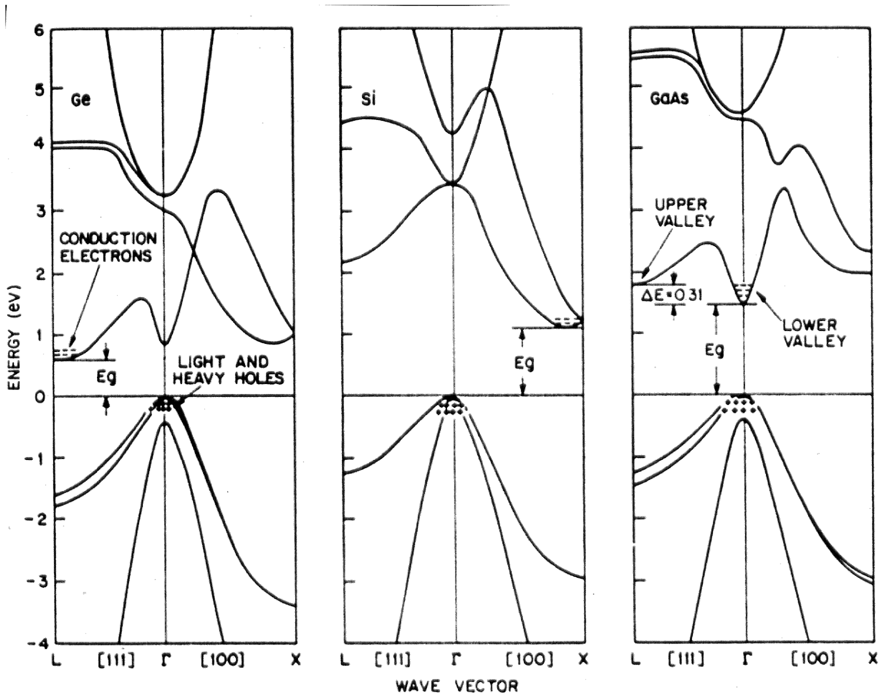
- חזרה על עקרונות בסיסיים במצב מוצק - עם קצת קוונטים:
  - יחס דיספרסיה.
  - מבנה פסים.
  - אכלוס אלקטרוני.

פסי אנרגיה



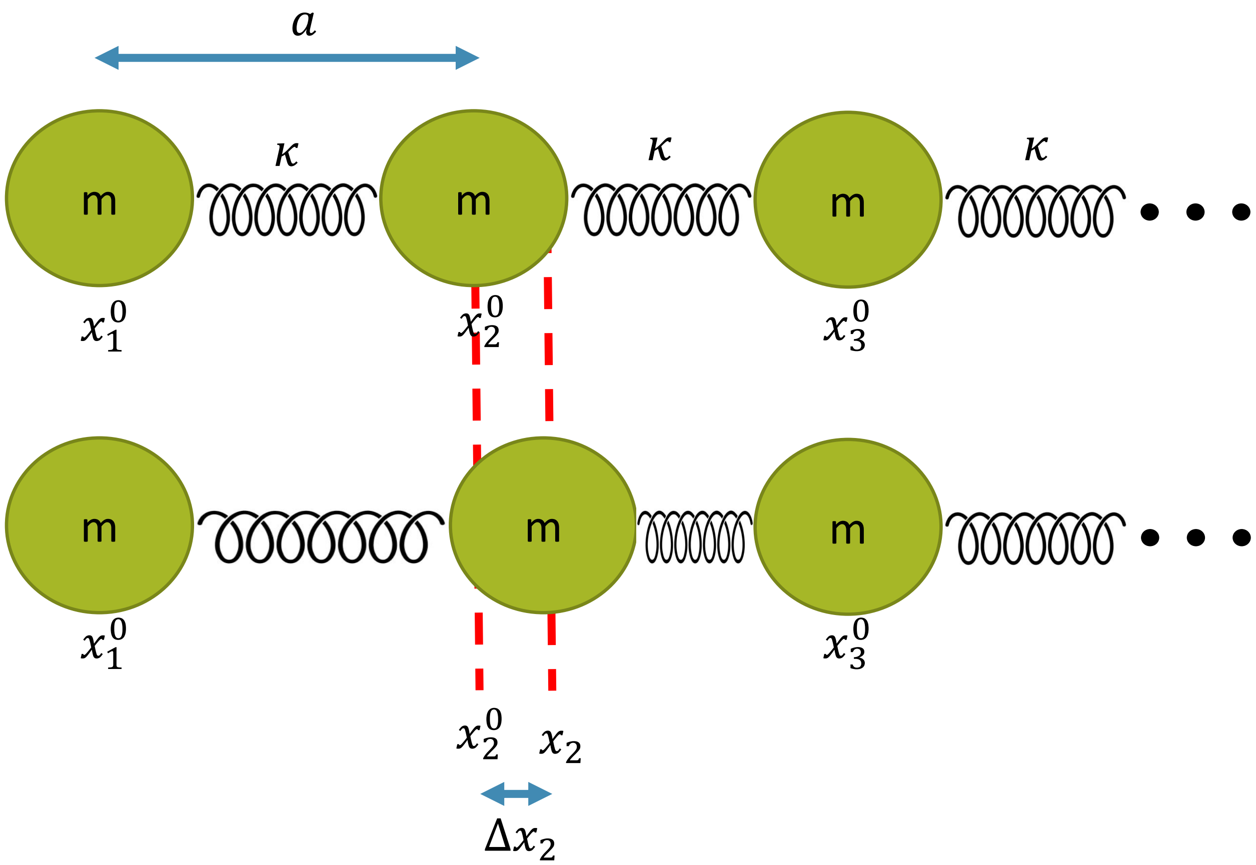


[001]
[111]
z
C_1
D_1
A_1
B_1
a
1
y
x
A
B
C
D
[100]
[110]
- Ga-atom
- P-atom



Ge
Si
GaAs
CONDUCTION ELECTRONS
LIGHT AND HEAVY HOLES
UPPER VALLEY
LOWER VALLEY
ΔE=0.31
Eg
ENERGY (eV)
6
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
L [111] Γ [100] X
WAVE VECTOR

שריג מחזורי חד-מימדי (real space)



$$\Delta x_n = x_n - x_n^0$$

$$x_n^0 = na$$

$$F_n = \kappa(\Delta x_{n+1} - \Delta x_n) - \kappa(\Delta x_n - \Delta x_{n-1})$$
$$= \kappa(\Delta x_{n+1} - 2\Delta x_n + \Delta x_{n-1})$$

$$F_n = ma = m\frac{d(\Delta x_n)}{dt^2} = \kappa(\Delta x_{n+1} - \Delta 2x_n + \Delta x_{n-1})$$

שריג מחזורי חד-מימדי (real space)

משוואת התנועה: $m\frac{d(\Delta x_n)}{dt^2} = F_n = \kappa(\Delta x_{n+1} - \Delta 2x_n + \Delta x_{n-1})$

ננחש פתרון: $\Delta x_n = Ae^{-i(kx_n^0+\omega t)} = Ae^{-i(kna+\omega t)}$

$$m\frac{d(Ae^{-ikna+\omega t})}{dt^2} = F_n = \kappa(Ae^{-ik(n+1)a+\omega t} - 2Ae^{-ikna+\omega t} + Ae^{-ik(n-1)a+\omega t})$$

$$m(i\omega)^2 Ae^{-ikna+\omega t} = \kappa Ae^{-ikna+\omega t}(Ae^{-ika} - 2 + Ae^{+ika})$$

$$-m\omega^2 = 2\kappa(\cos(ka) - 1)$$

$$\omega^2 = \frac{4\kappa}{m}\sin^2(\frac{ka}{2})$$

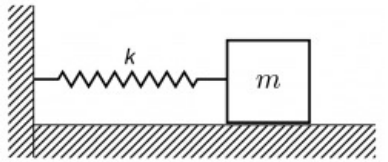
יחס הדיספרסיה: $\omega = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}\left|\sin(\frac{ka}{2})\right|$

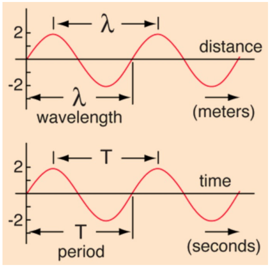
נוסחת אוילר:

$$e^{ix} = cosx + isinx$$

תנועה הרמונית:

$$\Delta x = Asin(\omega t + \varphi)$$





wikipedia

$$\Delta x = Asin(kx + \omega t + \varphi)$$

$\omega = \frac{2\pi}{T}$ תדר זמני

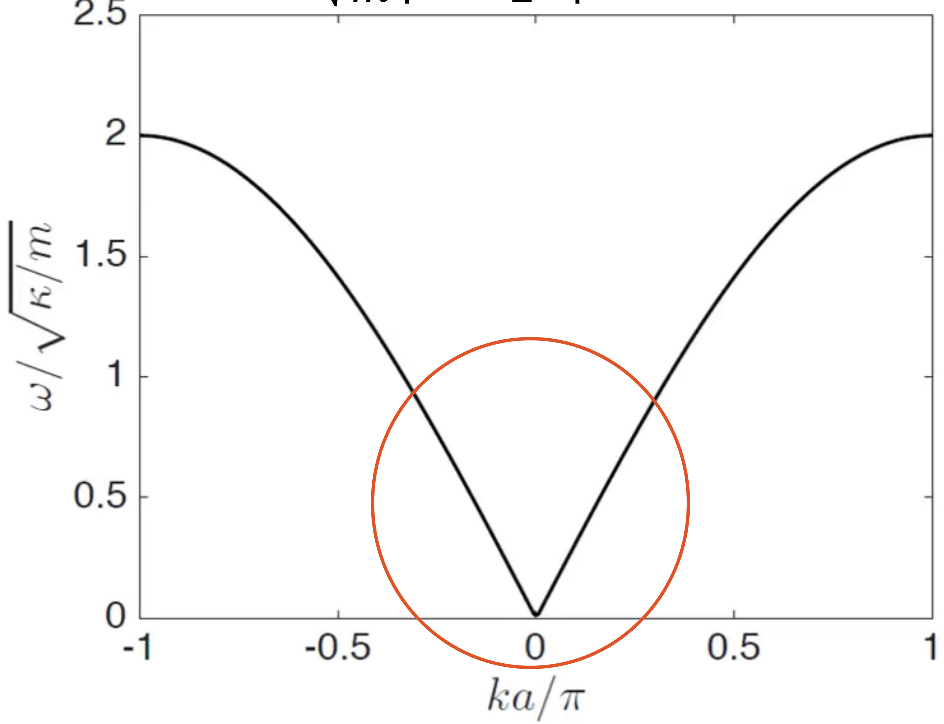
$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ תדר מרחבי

$$\Delta x_n = Ae^{-ikx+\omega t}$$

שריג מחזורי חד-מימדי (real space vs K-space)

K-space

יחס הדיספרסיה: $\omega = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}\left|\sin(\frac{ka}{2})\right|$



$$\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$$

$$\sin(\frac{ka}{2}) \approx \frac{ka}{2}$$

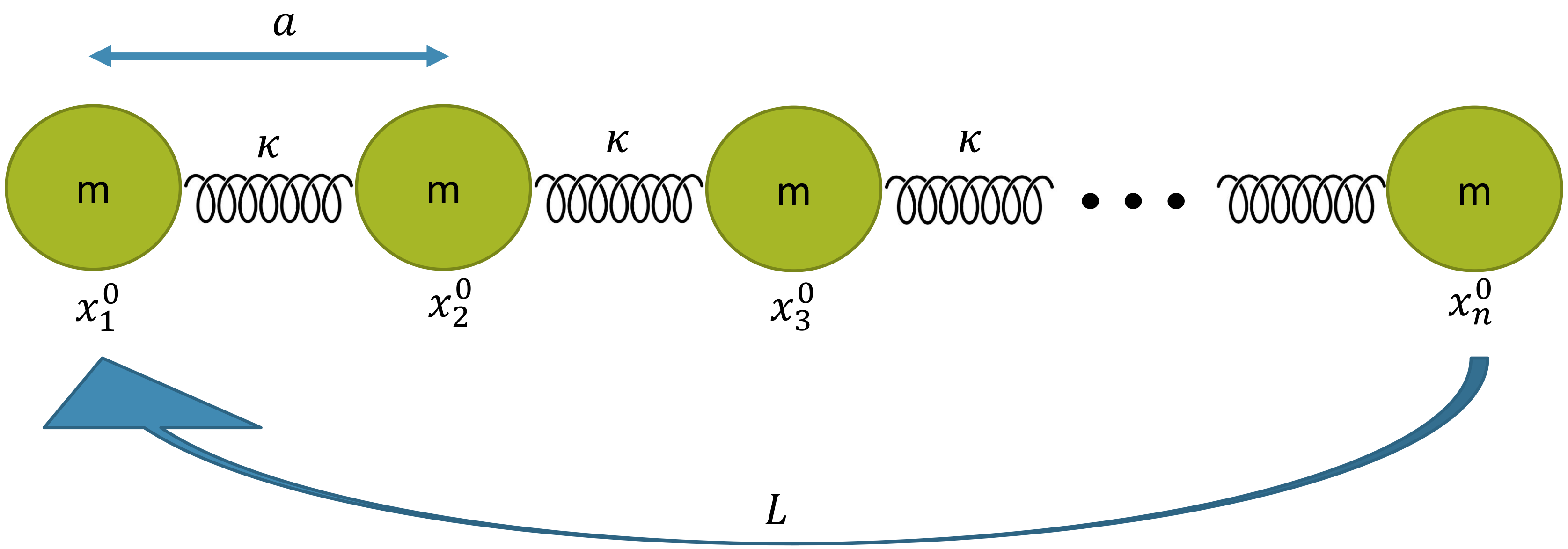
Acoustic branch – linear dispersion relation

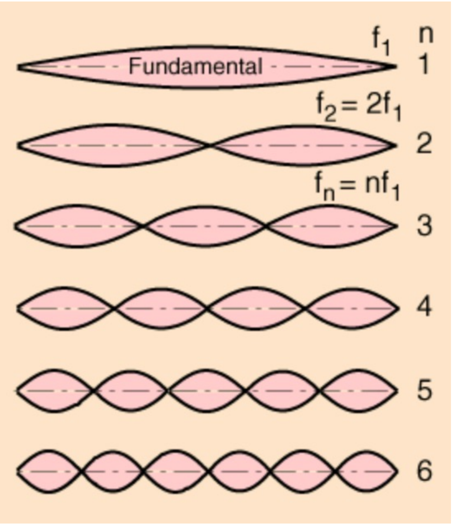
real space

יחס הדיספרסיה נותן לנו את כל אופני התנודה ה"טבעיים" שנתמכים במערכת!

שריג מחזורי חד-מימדי (real space)-תיקון

הנחנו בעיה מחזורית אבל יש לנו מספר סופי בשרשרת! N





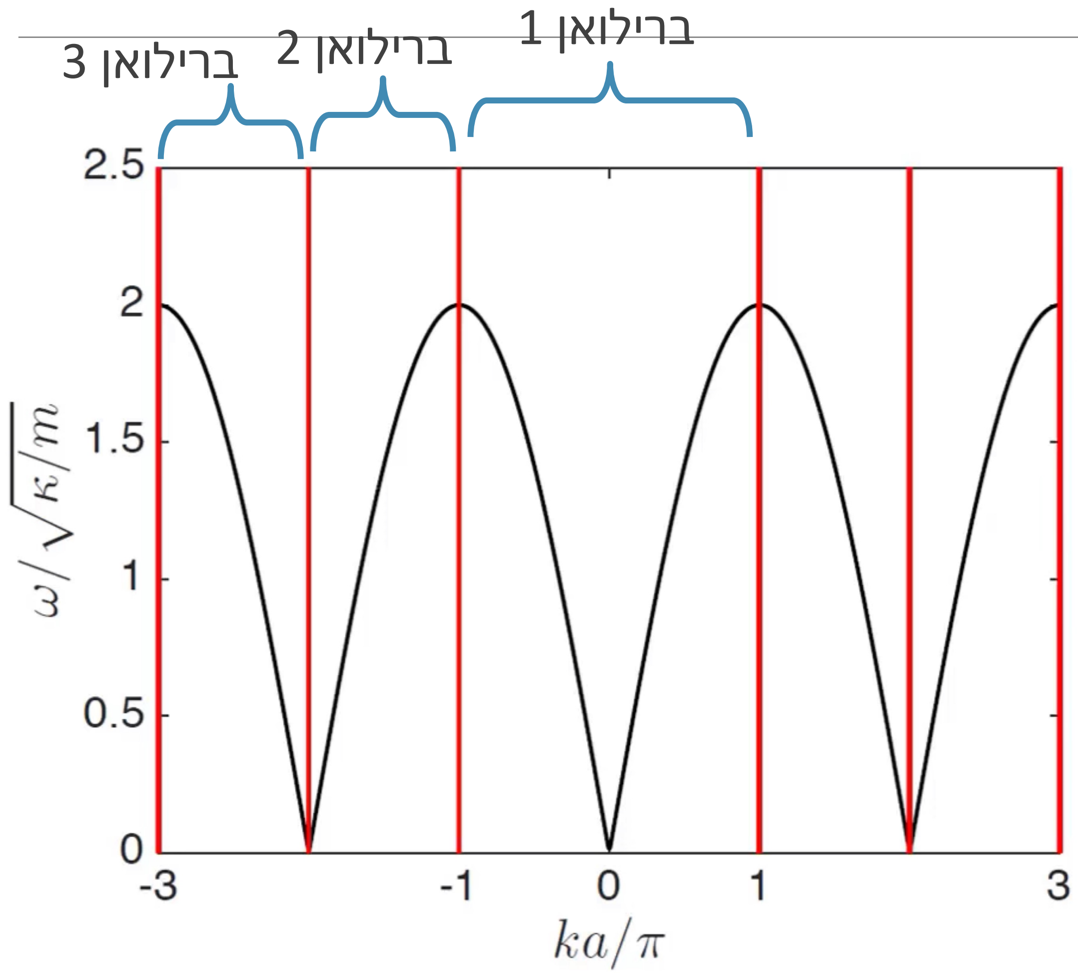
$$Ae^{-ikna+i\omega t} = Ae^{-ik(N+n)a+i\omega t}$$

$$e^{ikNa} = 1$$

$$k = \frac{2\pi n}{Na} = \frac{2\pi n}{L}$$

Not all K's are allowed!
But practically, N>>1

תדר מרחבי (K-space)



$$\omega = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}}\left|\sin(\frac{ka}{2})\right|$$

$$\Delta x_n = Ae^{-i(kna+\omega t)}$$

$$k \to k + 2\pi/a$$

$$\Delta x_n = Ae^{-i(kna+\omega t})$$

$$= Ae^{-i(k+2\pi/a)na+i\omega t}$$

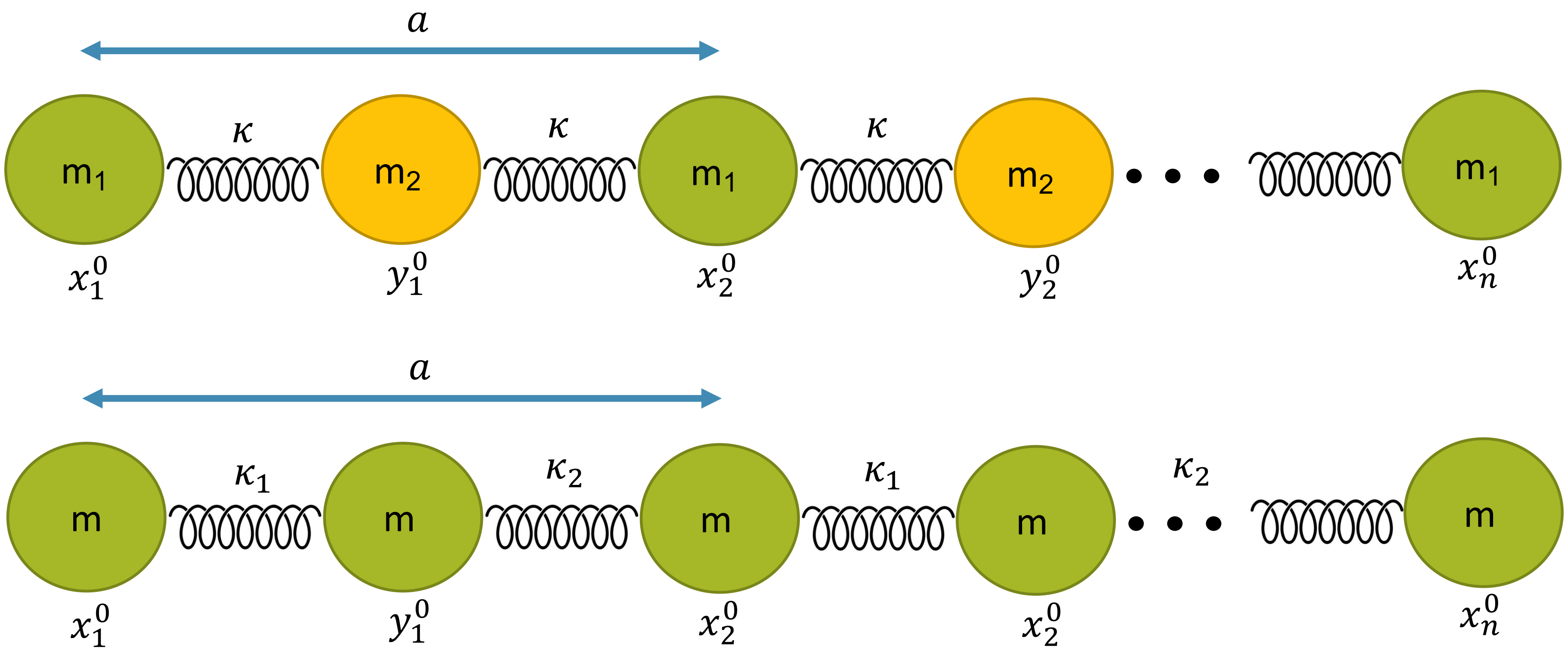
$$= Ae^{-ikna-i2\pi n+i\omega t} \qquad (e^{-i2\pi n} = 1)$$

$$= Ae^{-i(kna+\omega t)}$$

$$x_n^0 = na \qquad G_n^0 = \frac{2\pi n}{a}$$

e^{ikx} Fourier Transform

שריג מחזורי חד-מימדי דו-אטומי (real space)



שריג מחזורי חד-מימדי דו-אטומי (real space)

משוואת התנועה:

$$m\frac{d(\Delta x_n)}{dt^2} = \kappa_2(\Delta y_n - \Delta x_n) + \kappa_1(\Delta y_{n-1} - \Delta x_n)$$

$$m\frac{d(\Delta y_n)}{dt^2} = \kappa_2(\Delta x_n - \Delta y_n) + \kappa_1(\Delta x_{n+1} - \Delta y_n)$$

ננחש פתרון:

$$\Delta x_n = A_x e^{-i(kna+\omega t)}$$

$$\Delta y_n = A_y e^{-i(kna+\omega t)}$$

$$m\omega^2 \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa_2 + \kappa_1 & -\kappa_2 - \kappa_1 e^{ika} \\ -\kappa_2 - \kappa_1 e^{-ika} & \kappa_2 + \kappa_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \end{pmatrix}$$

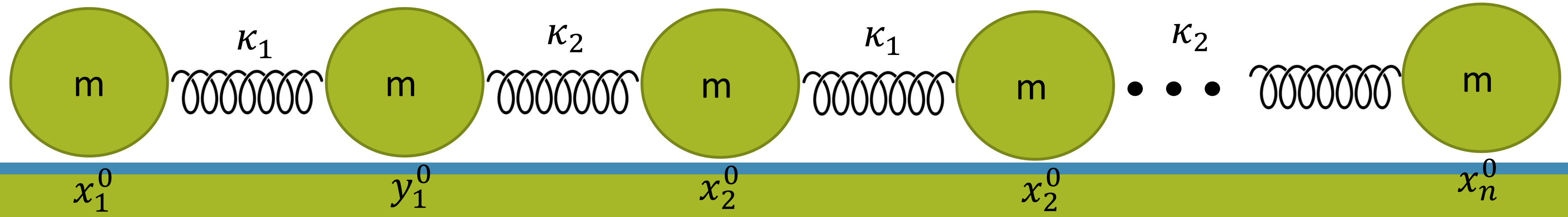
$$0 = \begin{vmatrix} \kappa_2 + \kappa_1 - m\omega^2 & -\kappa_2 - \kappa_1 e^{ika} \\ -\kappa_2 - \kappa_1 e^{-ika} & \kappa_2 + \kappa_1 - m\omega^2 \end{vmatrix}$$

$$0 = (\kappa_2 + \kappa_1 - m\omega^2)^2 - (\kappa_2 + \kappa_1 e^{-ika})(\kappa_2 + \kappa_1 e^{ika})$$

$$m\omega^2 = \kappa_1 + \kappa_2 \pm \sqrt{\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + 2\kappa_1\kappa_2\cos(ka)}$$

יחס הדיספרסיה:

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{\kappa_1+\kappa_2}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + 2\kappa_1\kappa_2\cos(ka)}}}$$



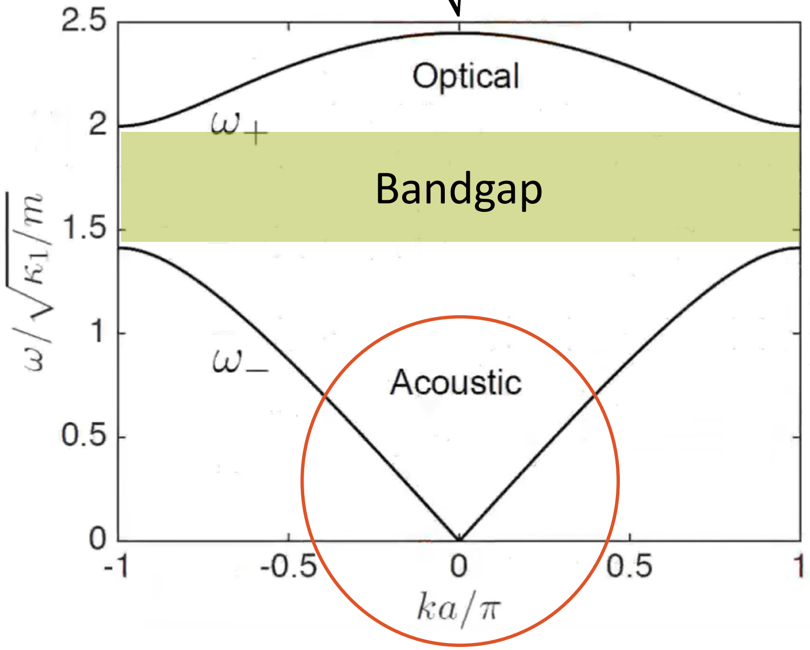
שריג מחזורי חד-מימדי דו-אטומי (k-space)

יחס הדיספרסיה:

$$\omega = \sqrt{\frac{\kappa_1+\kappa_2}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{\kappa_1^2+\kappa_2^2+2\kappa_1\kappa_2\cos(ka)}}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2(\kappa_1+\kappa_2)}{m}}$$

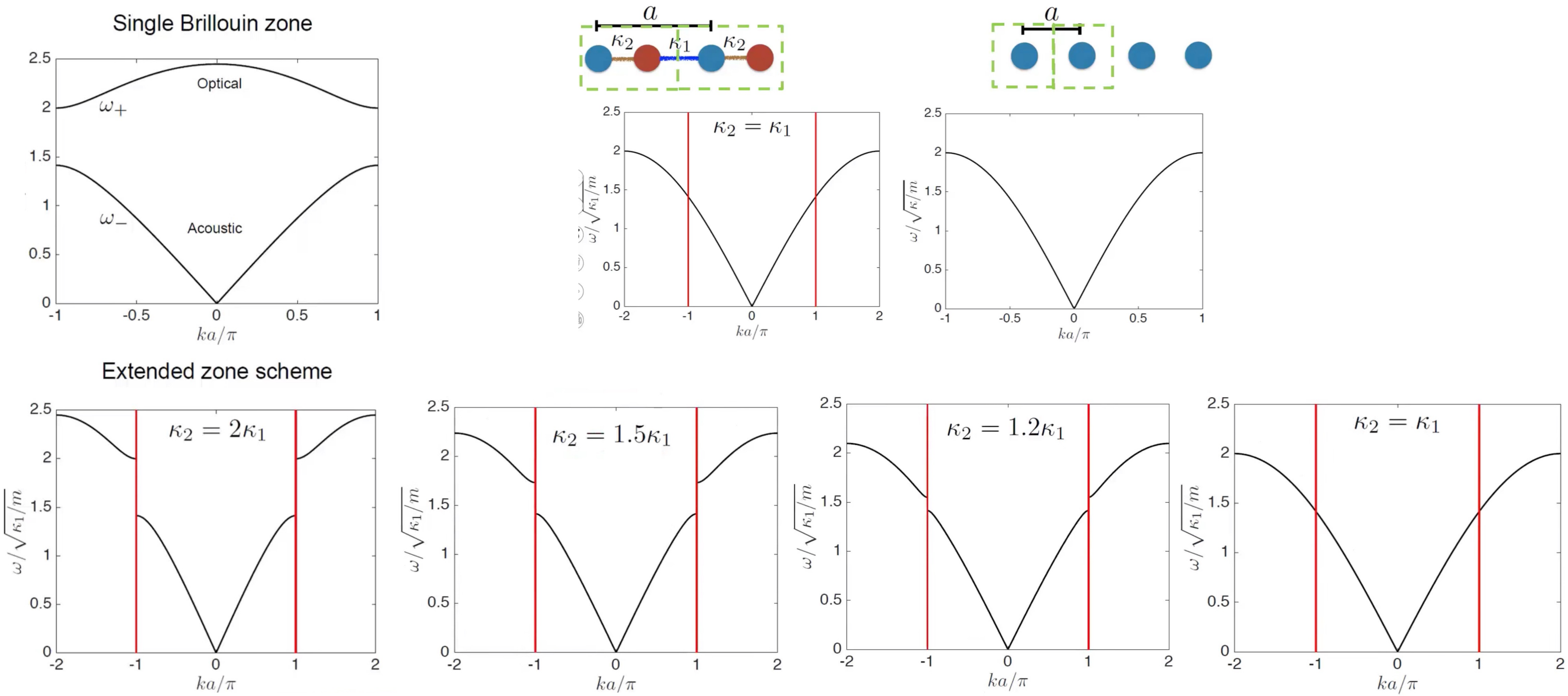
$$\kappa_1 = 2\kappa_2$$



$$\omega = \sqrt{\frac{2\kappa_1}{m}}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2\kappa_2}{m}}$$

שריג מחזורי חד-מימדי דו-אטומי (k-space)



Electrons 1D tight binding model

אלקטרונים נושאים את המטען החשמלי ומייצרים הולכה בהתקנים

תנודות השריג האטומי (מסות עם קפיצים)

משוואת תנועה:

$$m\frac{d(x_n)}{dt^2} = F_n$$

אלקטרונים

משוואת שרדינגר: $H|\psi> = E\,|\psi>$

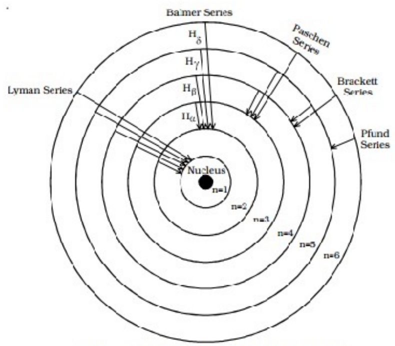


Fig Spectral series of hydrogen atom

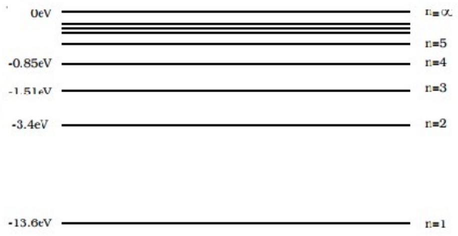
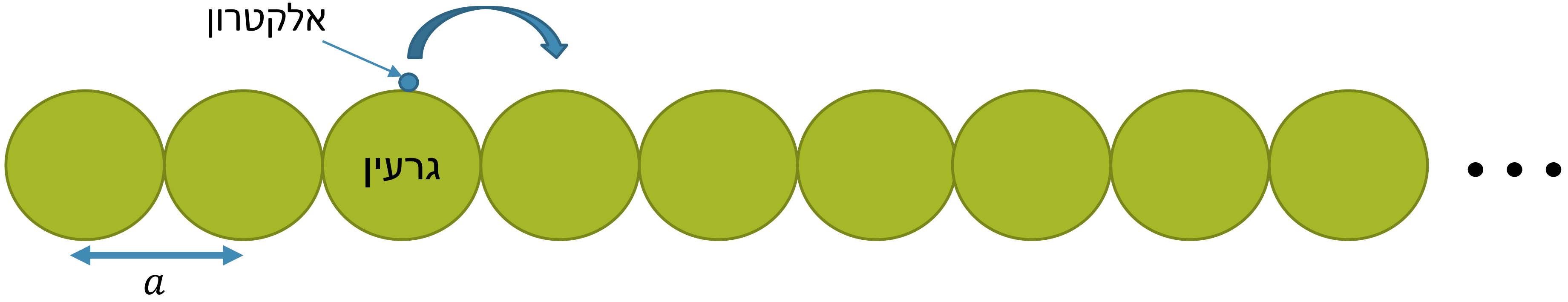


Fig Energy level diagram for hydrogen atom



Electrons 1D tight binding model

הגדרות:

- אורביטל אחד באטום, מסומן ב $|n>$
- לכל אורביטל אלקטרון אחד
- נפשט אורביטלים אורתוגונליים $<n|m> = \delta_{n,m}$
- פונקציית הגל הכללית $|\psi> = \sum_n c_n \, |n>$

$$H|\psi> = E\,|\psi>$$

$$2X2: \quad \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1> \\ |2> \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |1> \\ |2> \end{pmatrix}$$

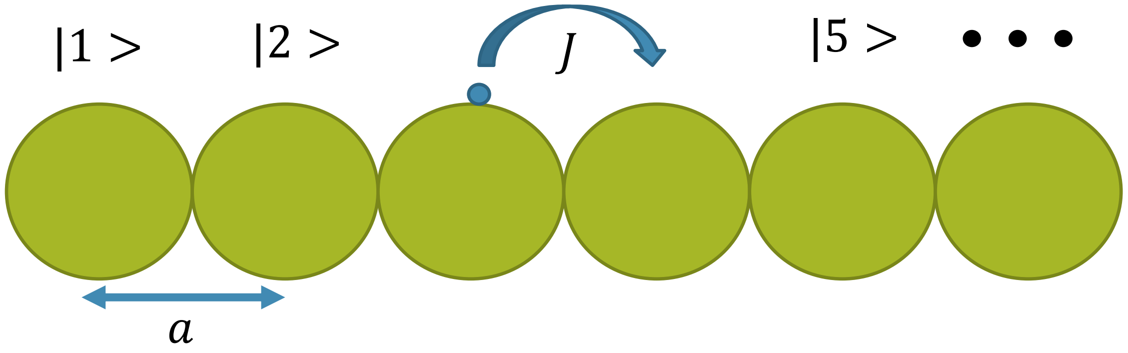
בכתיבה מטריציונית $\quad \sum_m H_{nm} c_m = E c_n$

Transition from n to m: $\quad H_{nm}$

הנחת שכן קרוב:

$$H_{nm} = \begin{cases} \varepsilon_0, & n = m \\ -J, & n = m \pm 1 \\ 0, & else \end{cases}$$

$$= \varepsilon_0 \delta_{n,m} - J(\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1})$$



Electrons 1D tight binding model

$$H_{nm} = \varepsilon_0 \delta_{n,m} - J(\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1})$$

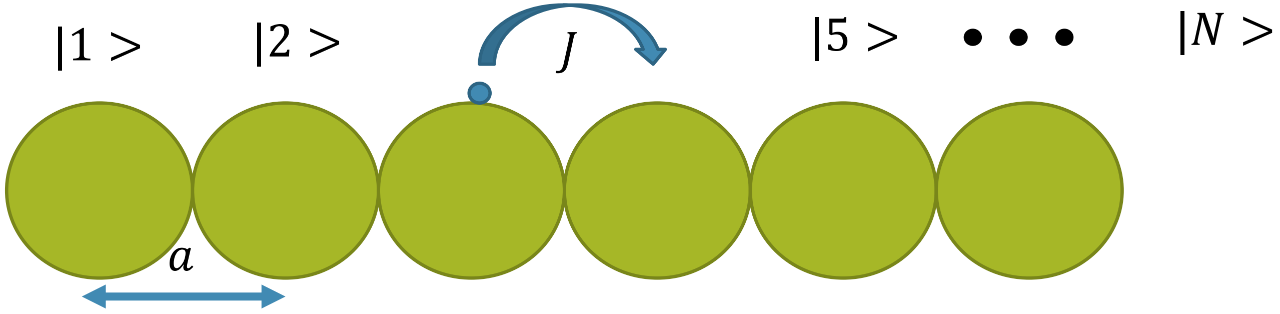
$$\sum_m \varepsilon_0 \delta_{n,m} c_m - J \sum_m (\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1}) = E c_n$$

$$\sum_m H_{nm} c_m = E c_n$$

$$\boxed{\varepsilon_0 c_n - J(c_{n+1} + c_{n-1}) = E c_n}$$

ננחש פתרון:

$$c_n = \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}}$$

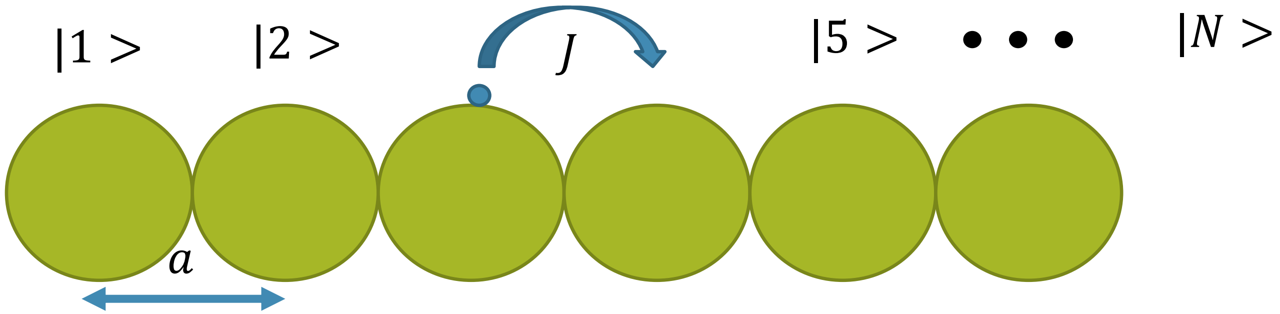


Electrons 1D tight binding model

$$\varepsilon_0 \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} - J\left(\frac{e^{-ik(n+1)a}}{\sqrt{N}} + \frac{e^{-ik(n-1)a}}{\sqrt{N}}\right) = E\frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}}$$

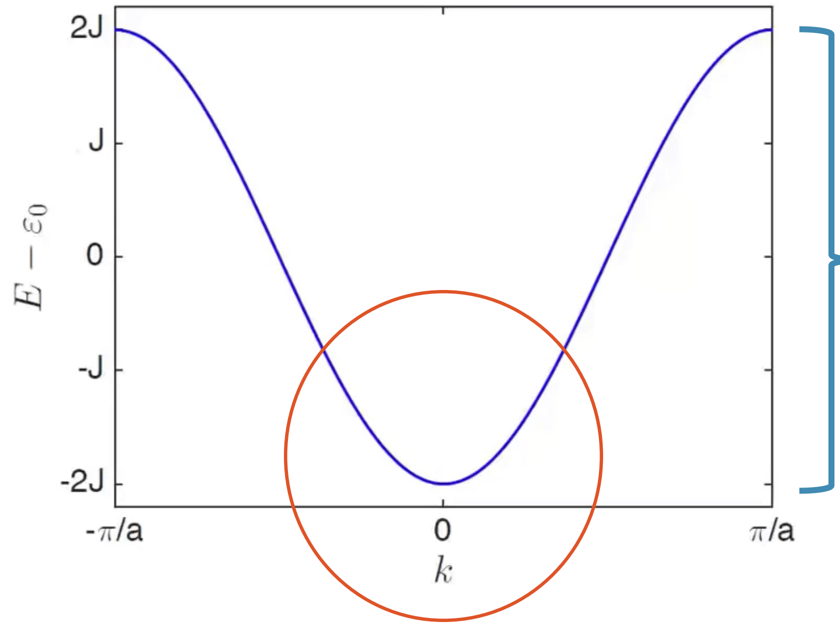
$$\varepsilon_0 - J\left(e^{ika} + e^{-ika}\right) = E$$

$\boxed{E = \varepsilon_0 - 2J\cos(ka)}$ יחס הדיספרסיה: $E(k), E = \hbar\omega$



Electrons 1D tight binding model

$$\boxed{E = \varepsilon_0 - 2J\cos(ka)}$$



$Bandwidth = 4J$

צימוד חלש: J<<

$$ka \approx 0 \rightarrow \cos(ka) \approx 1 - (ka)^2/2$$

$$E = \varepsilon_0 - 2J(1 - (ka)^2/2)$$

$$E = \varepsilon_0 - 2J + Jk^2a^2$$

יחס דיספרסיה של אלקטרון חופשי:

$$E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2k^2}{2m_e}$$

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m_e^*} = Jk^2a^2$$

מסה אפקטיבית:

$$\boxed{m_{eff}^* = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}}$$

Effective mass

בחרנו פתרון גלי מהצורה: $e^{ikx+\omega t}$

מהירות ההתקדמות: $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

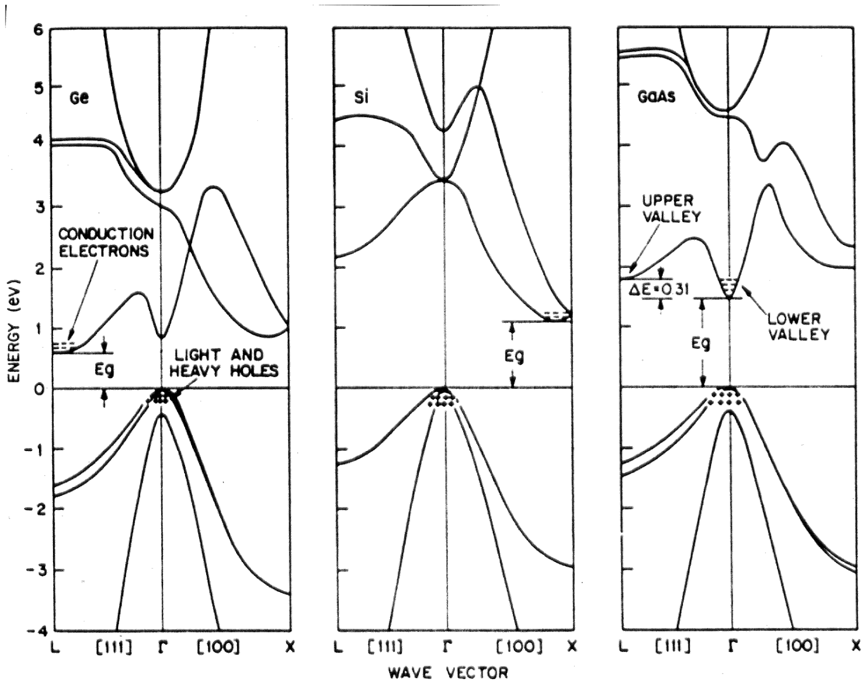
$$E = \hbar\omega, \quad v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

תאוצת האלקטרון: $a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\left(\frac{dE}{dk}\right)$

$$a = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dk}\left(\frac{dE}{dk}\right)\frac{dk}{dt}$$

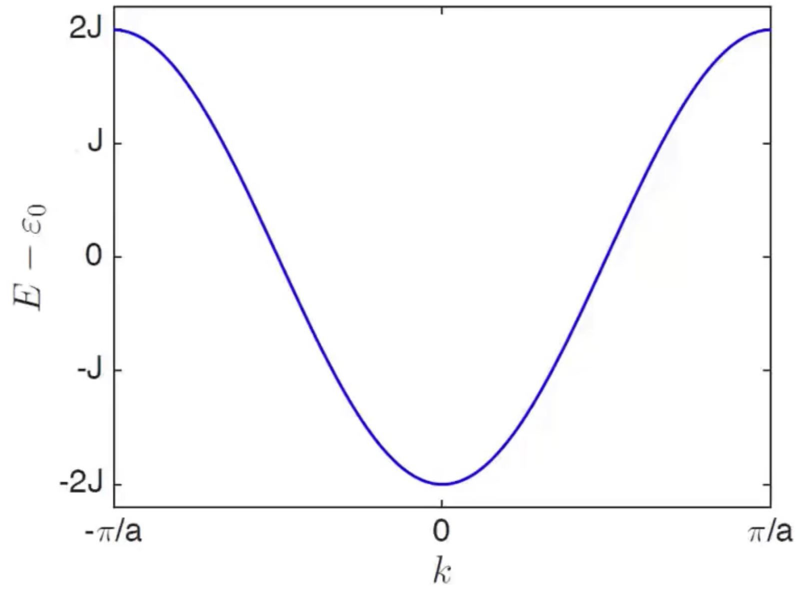
$$p = \hbar k, \qquad a = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dp}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}F \quad \rightarrow \qquad F = ma$$

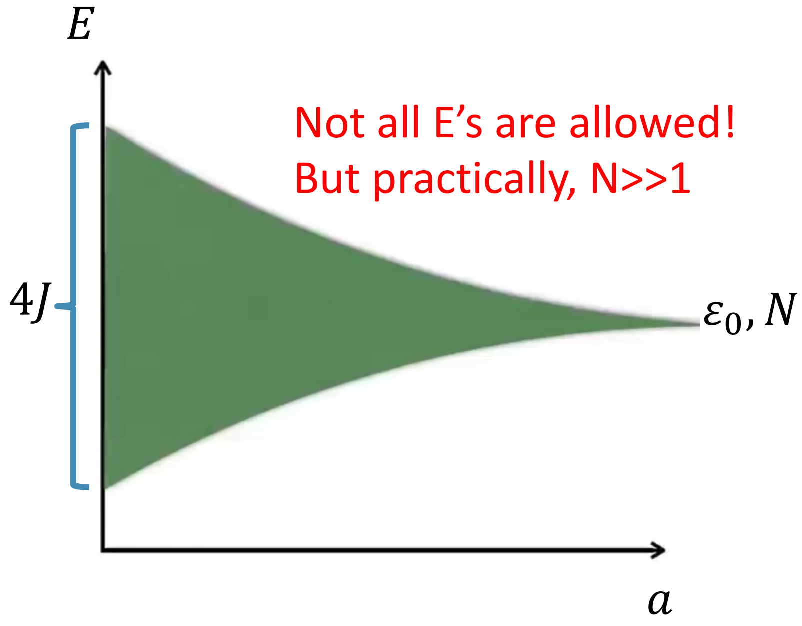
מסה אפקטיבית: $m^* = \hbar^2\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}$

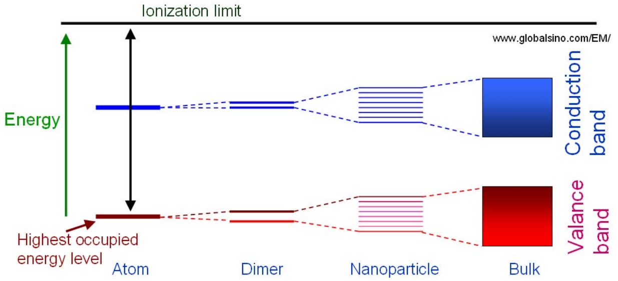


Electrons 1D tight binding model

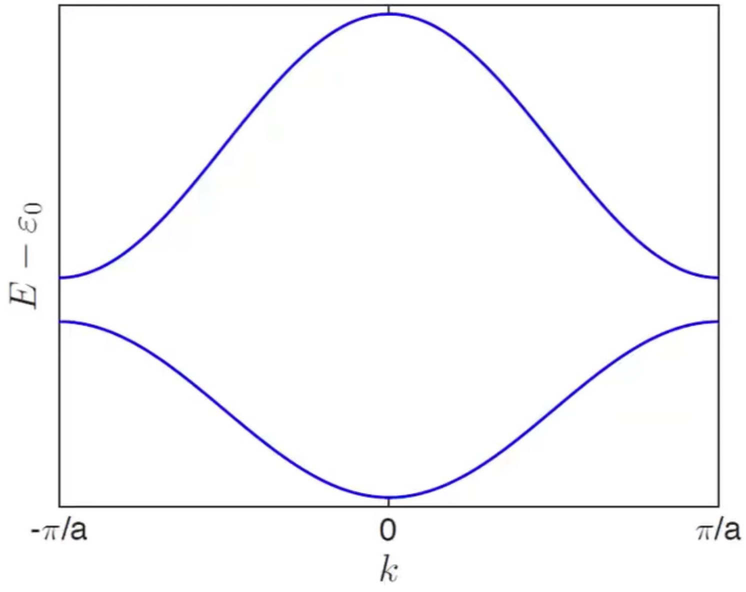
אורביטל אחד

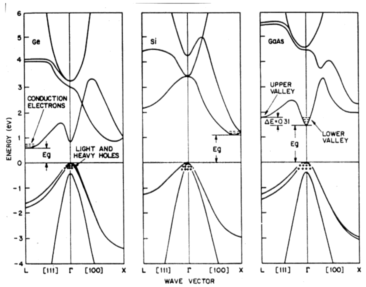




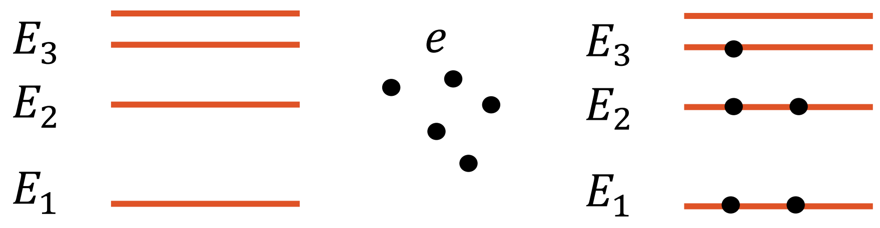


שני אורביטלים

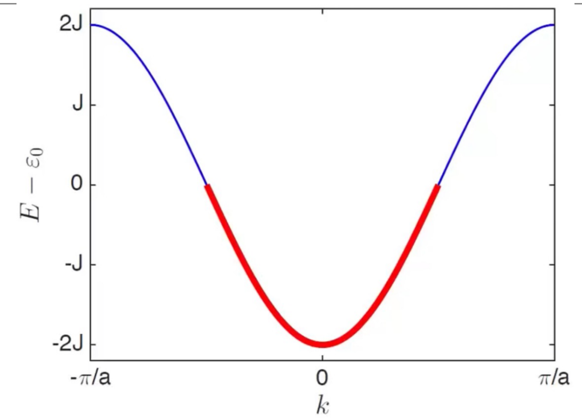


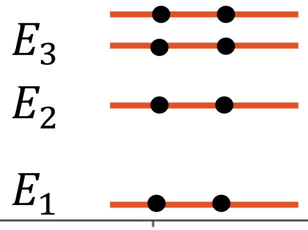


Band filling, conduction and matter type

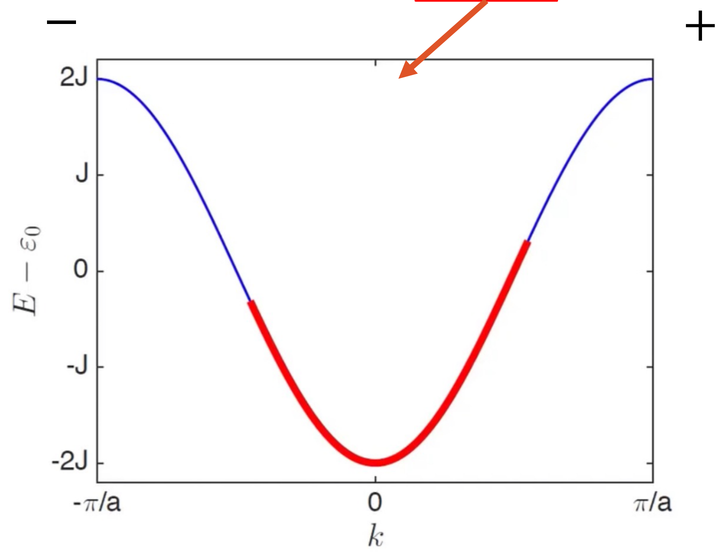


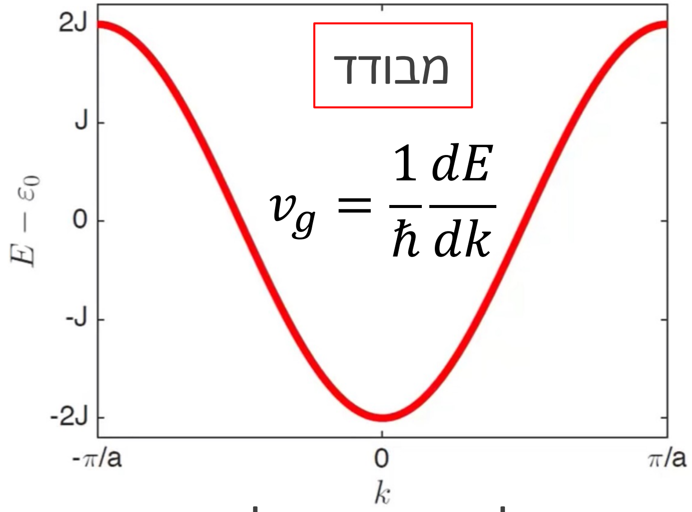
Pauli - N orbitals, 2N electronic states





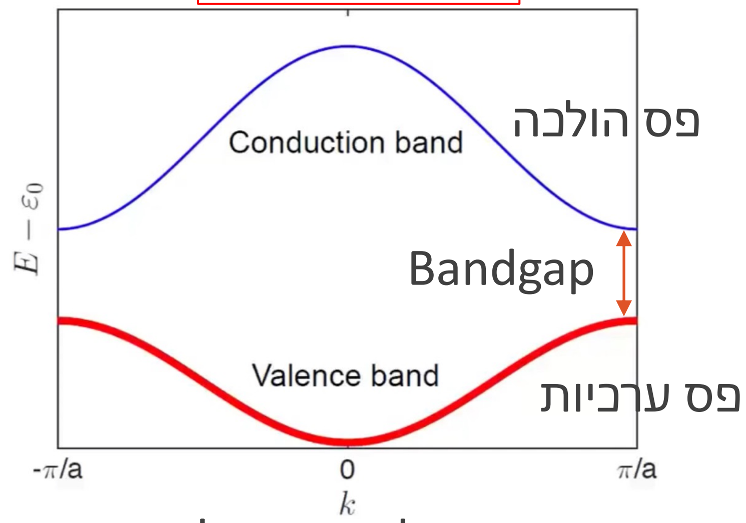
מוליך





אורביטל אחד, שני אלקטרונים

מוליך למחצה*



שני אורביטלים, שני אלקטרונים

התמונה האלקטרונית מול התמונה האטומית

אטומים (מסות עם קפיצים)

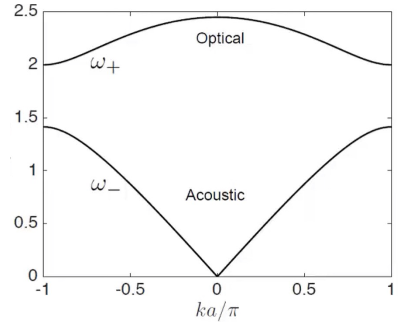
משוואת תנועה: $m\frac{d(x_n)}{dt^2} = F_n$

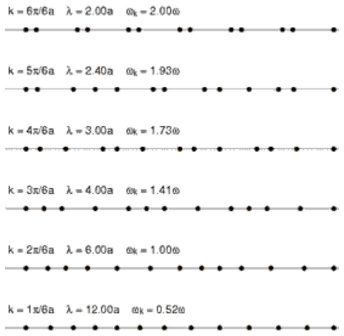
$$m\omega^2\begin{pmatrix}A_x\\A_y\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\kappa_2+\kappa_1 & -\kappa_2-\kappa_1 e^{ika}\\ -\kappa_2-\kappa_1 e^{-ika} & \kappa_2+\kappa_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_x\\A_y\end{pmatrix}$$

ננחש פתרון: $\Delta x_n = Ae^{-ikna+\omega t}$

יחס הדיספרסיה:

$$\omega = \sqrt{\frac{\kappa_1+\kappa_2}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{\kappa_1^2+\kappa_2^2+2\kappa_1\kappa_2\cos(ka)}}$$





אלקטרונים

משוואת שרדינגר: $H|\psi> = E\,|\psi>$

$$\begin{pmatrix}H_{11} & H_{12}\\ H_{21} & H_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}|1>\\|2>\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}|1>\\|2>\end{pmatrix}$$

ננחש פתרון: $c_n = \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}}$

יחס הדיספרסיה:

$$\boxed{E = \varepsilon_0 - 2J\cos(ka)}$$