بخش ۶ الکترون ها در بلور

Electrons in a crystal

در بخش های قبلی رفتار یک الکترون در پتانسیل یک اتم یا بلور را بررسی کردیم. این الکترون در بیشتر موارد یک الکترون والانسی است.

در $1\,cm^3$ از یک جامد ← 10^{22} الکترون والانس وجود دارد.

- چگونگی توزیع این الکترون ها در ترازهای انرژی؟
- غیرممکن بودن محاسبه ی مکان و انرژی جنبشی دقیق هر الکترون منفرد

↓

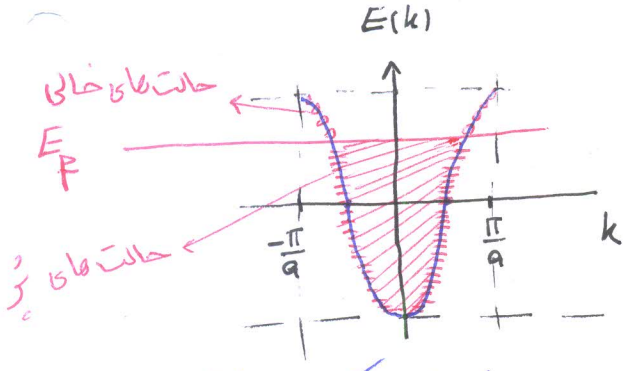
بیان مفهوم احتمال، نتایج با معنی ای در بر دارد.

6-1 انرژی فرمی و سطح فرمی

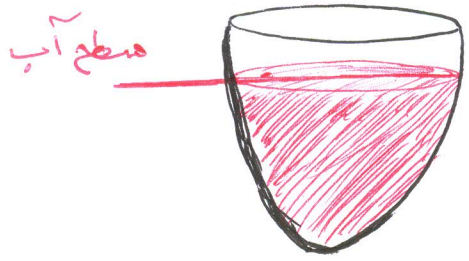
6.1 Fermi Energy and Fermi surface

موقعیت انرژی فرمی E_F در ساختار نواری ← نقش مهمی در خواص اپتیکی، الکتریکی و مغناطیسی مواد دارد.

E_F ← بالاترین انرژی که الکترون ها در $T=0K$ دارند.



ساختار نواری یک زنجیر اتمی



پیاله ی آب

E_F ← انرژی ای است که همه ی حالت های کمتر از آن انرژی، پر هستند. (در دمای صفر کلوین)

انرژی فرمی

مقادیر انرژی فرمی برخی مواد در پیوست چهار کتاب لیست شده است.

مقادیر نوعی E_F ← ۲ تا ۱۲ الکترون ولت.

سیستم های 1D ← انرژی فرمی

سیستم های 2D ← سطح فرمی (دایره ی فرمی)

سیستم های 3D ← رویه ی فرمی (کره ی فرمی)

6.2 Fermi Distribution Function

توزیع انرژی تعداد زیادی ذره و تغییرات آن با دما را با استفاده از ملاحظات آماری می‌توان محاسبه کرد.

انرژی جنبشی گاز الکترونی از آمار فرمی - دیراک پیروی می‌کند.

احتمال اشغال یک تراز انرژی توسط الکترون‌ها با تابع فرمی به‌دست می‌آید.

Fermi function — تابع فرمی

$$F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \qquad (6.1)$$

k_B ثابت بولتزمن

T دمای مطلق

اگر $E = E_F$ ⟵ $F(E) = \frac{1}{2}$

$F(E) = 1$ ⟵ تراز انرژی E کاملاً با الکترون‌ها اشغال شده است.

$F(E) = 0$ ⟵ تراز انرژی E خالی است.

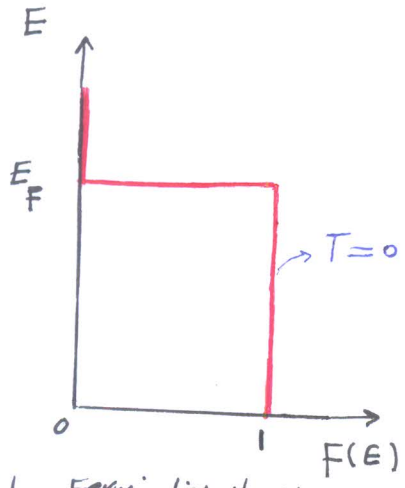


Figure 6.1. Fermi distribution function, $F(E)$, versus energy, E, for $T=0$.

(for $E > E_F$ and $T \to 0 \Rightarrow F(E) \to 0$)

$T \to 0$, $E > E_F$ $\rightarrow F(E) = \frac{1}{1 + e^{+\infty}} = 0$

$T \to 0$, $E < E_F$ $\rightarrow F(E) = \frac{1}{1 + e^{-\infty}} = 1$

در دمای $T=0$ ترازهای با انرژی کمتر از انرژی فرمی کاملاً پر و ترازهای با انرژی بیشتر از انرژی فرمی کاملاً خالی هستند.

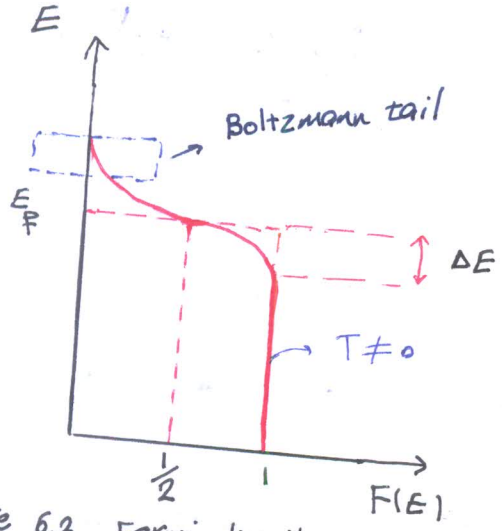


Figure 6.2. Fermi distribution function for $T \neq 0$

تابع توزیع فرمی در دماهای $T \neq 0$ در شکل 6.2 نشان داده شده است.

$F(E)$ در دمای $T=0$ در E_F ناگهان به صورت پله‌ای صفر می‌شود.

اما $F(E)$ در دمای $T \neq 0$ در E_F به آرامی صفر می‌شود.

در واقع تابع توزیع فرمی $F(E)$ حول E_F به اندازه‌ی $2\Delta E$ پهن می‌شود. (smeared out)

ΔE نشان داده شده در شکل اغراق‌آمیز است.

ΔE در دمای اتاق حدود ۱ درصد E_F است.

- تابع توزیع فرمی در انرژی‌های بالا ($E \gg E_F$) (در شکل نشان داده شده است)

تابع توزیع فرمی در انرژی‌های بالا $E \gg E_F$ $\xrightarrow{\text{تقریب}}$ تابع توزیع کلاسیکی بولتزمن

$$F(E) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{k_BT}\right)} \xrightarrow{E \gg E_F} \exp\left(\frac{E-E_F}{k_BT}\right)$$

از یک (۱) در مقابل $\exp\left(\frac{E-E_F}{k_BT}\right)$ می‌توان صرف نظر کرد.

$$F(E) \approx \exp\left[-\left(\frac{E-E_F}{k_BT}\right)\right] \rightarrow \text{تابع توزیع بولتزمن}$$

در منطقه نشان داده شده در شکل که به Boltzmann tail مشهور است.

تابع توزیع فرمی را می‌توان با تابع توزیع بولتزمن تقریب زد.

6.3. Density of States

6.3 چگالی حالات

■ چگونگی توزیع ترازهای انرژی ؟

برای توضیح این مفهوم از مثال ذره در جعبه استفاده می‌کنیم :

از حل معادله‌ی شرودینگر رابطه‌ی انرژی به صورت زیر به دست می‌آید

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right) \qquad (6.2)$$

a : طول اضلاع

$n_x, n_y \,\&\, n_z$: اعداد کوانتوم اصلی principal quantum numbers

به ازای اعداد کوانتومی مختلف، حالت‌های انرژی کوانتیده E_n به دست می‌آید.

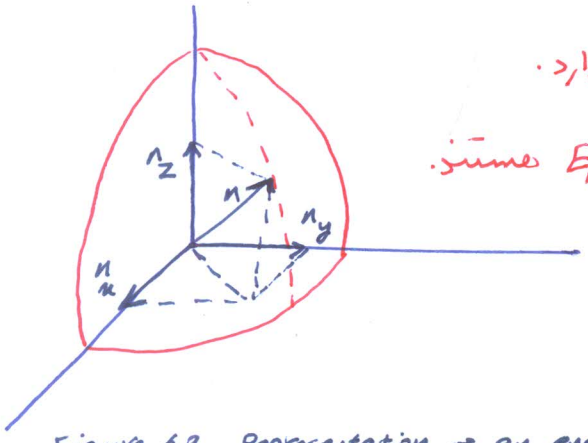
هر حالت انرژی را می‌توان به صورت نقطه‌ای در فضای اعداد کوانتومی نشان داد.

(شکل 6.3 quantum number space)

در این فضا (چارچوب مرجع) n شعاع نسبت به مبدا است. داریم

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \qquad (6.3)$$

رابطه‌ی کره‌ای به شعاع n



مقادیر یکسان E_n روی کره‌ای به شعاع n قرار دارد.

همه‌ی نقاط داخل کره دارای انرژی‌ای کمتر از E_n هستند.

$$\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \longrightarrow n = \sqrt{6}$$

Figure 6.3. Representation of an energy state in quantum number space.

تعداد حالت های کوانتومی، η ، با انرژی کمتر از E_n متناسب است با حجم کره.

مثبت بودن اعداد کوانتومی n_x, n_y, n_z ← امکان تعیین مقادیر n فقط در $\frac{1}{8}$ مثبت کره.

$$\eta = \frac{1}{8} \times \text{حجم کره} = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi n^3$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \longrightarrow n = \left(\frac{2ma^2 E_n}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\eta = \frac{\pi}{6} \left(\frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E_n^{3/2} \qquad (6.4)$$

مشتق η نسبت به انرژی، تعداد حالات انرژی بر واحد انرژی (dE) را نشان می دهد. در واقع چگالی حالات تعیین می شود.

$$\text{Density of states} \quad Z(E) = \frac{d\eta}{dE}$$

$$\frac{d\eta}{dE} = Z(E) = \frac{\pi}{4} \left(\frac{2ma^2}{\pi^2 \hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} = \underbrace{A}_{\text{ثابت}} E^{\frac{1}{2}} \qquad (6.5)$$

$$= \frac{V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}$$

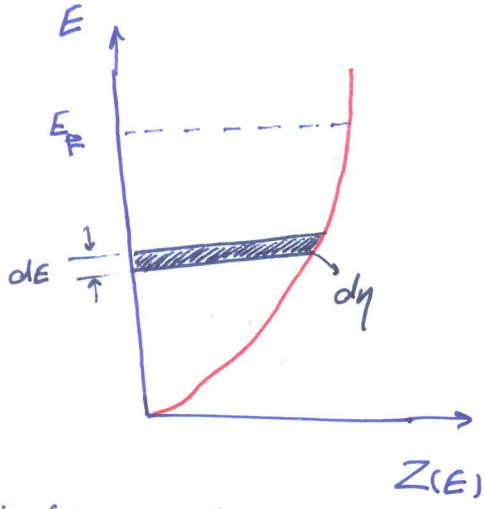
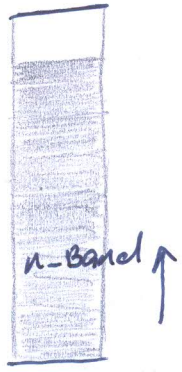


Fig. 6.4. Density of states Z(E) within a band



هرچه به سمت بالا ↑ حرکت کنیم تراکم ترازهای انرژی بیشتر می شود.

این چگالی حالات برای سیستم های 3D معتبر است برای سیستم های 1D، 2D و 0D شکل آن فرق می کند.

$$d\eta = Z(E) \cdot dE \qquad (6.6)$$

6.4. چگالی حالات کامل یک نوار انرژی

6.4. Complete Density of States Function within a Band

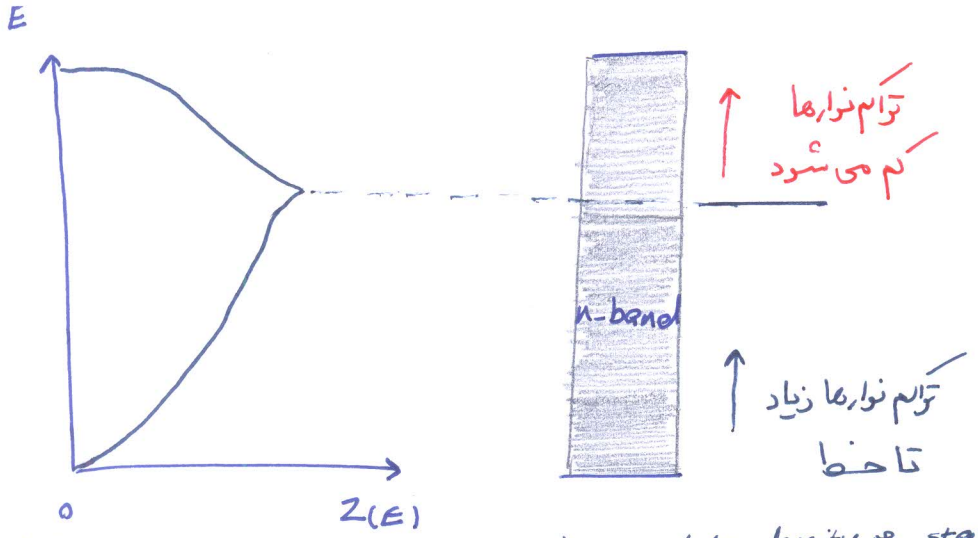


Fig. 6.5. schematic representation of the compelete density of states function within band.

در مبحث قبلی دیدیم که الکترون آزاد در جعبه E برحسب Z(E) بصورت سهمی بود. ولی در یک بلور شکل E برحسب Z(E) می تواند شکل های پیچیده تری داشته باشد و شکل یا ساختار نواری در منطقه اول بریلوئن تعیین کننده است.

6.5. Population Density

$$N(E) = 2 \cdot Z(E) \cdot F(E) \qquad (6.7)$$

تعداد الکترون‌ها بر واحد انرژی

به خاطر اصل طرد پائولی و امکان اشغال هر تراز یا حالت انرژی توسط دو الکترون با اسپین بالا و اسپین پائین

تعداد حالت‌های انرژی در دسترس بر واحد انرژی → DOS

احتمال اشغال ترازهای انرژی

(6.1) & (6.5) $\longrightarrow$

$$N(E) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right)} \qquad (6.8)$$

$N(E)$: (electron) population density چگالی جمعیت الکترون

a) $T \longrightarrow 0$ & $E < E_F$ $\xrightarrow{F(E)=1}$ $N(E) = 2 \cdot Z(E)$

b) $T \neq 0$ & $E \simeq E_F$ $\longrightarrow$ $N(E)$ پهن شدگی (شکل 6.6)

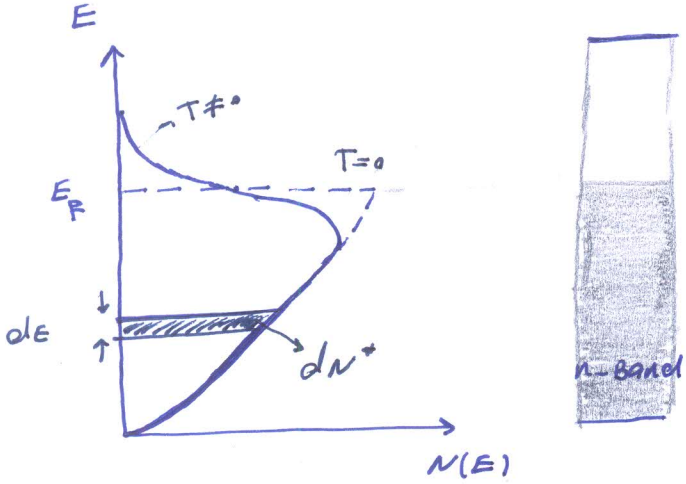


Figure 6.6. Population density $N(E)$ within a band for free electrons. dN^* is the number of electrons in the energy interval dE.

مساحت زیر سطح منحنی $N(E)$ برحسب E ، تعداد الکترونهای N^* با انرژی کمتر یا مساوی E_n را نشان می‌دهد.

برای بازه‌ی انرژی E و $E+dE$ داریم

$$dN^* = N(E)\,dE. \qquad (6.9)$$

الان در موقعیتی هستیم که با استفاده از (6.8) و (6.9) می‌توانیم انرژی فرمی را حساب کنیم.

برای سادگی حالت $T \to 0$ و $E < E_F$ را که پیامد آن $F(E)=1$ است را در نظر می‌گیریم. داریم:

$$N^* = \int_0^{E_F} N(E)\,dE = \int_0^{E_F} \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}\,dE$$

$$N^* = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) E_F^{\frac{3}{2}} \qquad (6.10)$$

$$\downarrow$$

$$E_F = \left(3\pi^2 \frac{N^*}{V}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} . \qquad (6.11)$$

$\frac{N^*}{V} = N'$ number of electrons per unit volume

$$E_F = \left(3\pi^2 N'\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} \qquad 6.11a$$

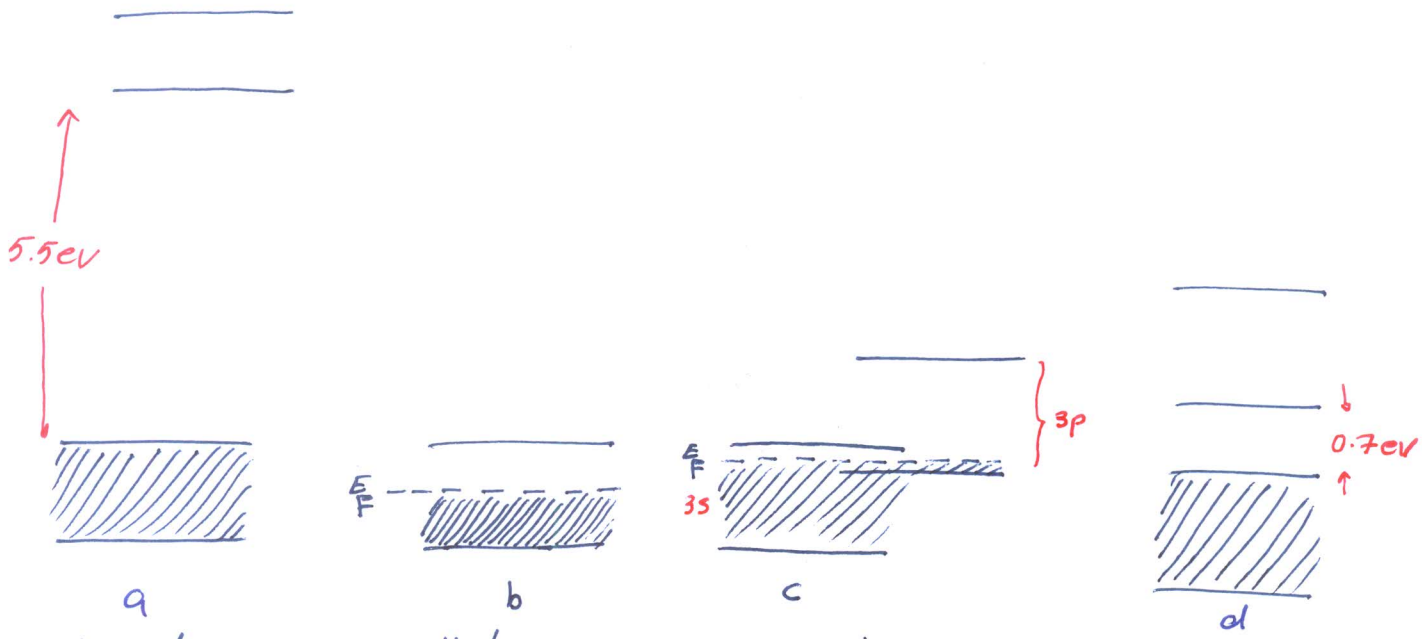
در نظر گرفتن $T \neq 0$ منجر به نتیجه‌ی بالا می‌شود چرا که تعداد الکترون‌ها با اعمال دما تغییر نمی‌کند.

6.6 Consequences of the Band Model

6.6 پیامدهای مدل نواری

زنجیر خطی N اتمی ← اصل طرد پائولی ← 2N الکترون برای N حالت

هر حالت 2 الکترون



a	b	c	d
Diamond	Alkali metal	Magnesium	Germanium
insulators	alkali metals	bivalent metals	intrinsic semiconductors
دو الکترون والانس برای اتم	یک الکترون والانس برای اتم	همپوشانی نوار ظرفیت و رسانش	$E_g = 0.7\,ev$
عدم حرکت الکترون با اعمال میدان الکتریکی	امکان حرکت الکترون با اعمال میدان الکتریکی	رسانا	امکان انتقال الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش با اعمال انرژی به الکترون‌ها
رفتار عایق	رفتار فلزی	semi-metal شبه فلز	
	half-filled		

Fig 6.7. Simplified representation for energy bands for a) insulators b) alkali metals c) bivalent metals, and d) intrinsic semiconductors.

6.7. Effective Mass

در قسمت های قبلی جرم الکترون در بلور و در حالت آزاد یک مقدار یکسان در نظر گرفته شد، در حالی که چنین نیست. آزمایشات تجربی نشان می دهد که جرم الکترون در بلور که به آن جرم موثر می گویند مقداری بیشتر یا کمتر از جرم الکترون آزاد است.

m^* جرم موثر

m_0 جرم الکترون آزاد

نسبت $\frac{m^*}{m_0}$ (پیوست 4)

چرا جرم الکترون در بلور و حالت آزاد فرق می کند؟

به علت برهم کنش الکترون با اتم های بلور

در واقع ما اثر این برهم کنش ها را بصورت جرم موثر تعبیر می کنیم.

(به این معنا که به الکترون جرم اضافه یا کم نمی شود)

تلاش خواهیم کرد تا عبارتی برای جرم موثر بیابیم. جدیا منظور شتاب الکترون در یک میدان الکتریکی از دو طریق کلاسیکی و کوانتومی را به دست می آوریم. ابتدا عبارتی برای سرعت الکترونی در نوار انرژی می نویسیم.

فرکانس زاویه ای

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi\nu)}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} . \qquad (6.12)$$

سرعت گروه ← v_g

سرعت بسته ی موج

عدد موج

$|k| = \frac{2\pi}{\lambda}$

$v_g \propto$ مشتق E نسبت به k در حالت مورد نظر $\propto$ شیب نمودار $E(k)$

محاسبه‌ی شتاب :

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dk}{dt} \qquad (6.13)$$

از $E(k)$ می‌دانیم

$$\frac{dp}{dt} = \hbar\frac{dk}{dt}. \qquad (6.14)$$

$$a = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dp}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\cdot\frac{d^2E}{dk^2}\cdot\frac{d(mv)}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}F, \qquad (6.15)$$

$$a = \frac{F}{m} = \frac{1}{m}\cdot F \qquad (6.16)$$

$$\boxed{m^* = \hbar^2\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}} \qquad (6.17)$$

جرم موثر متناسب با عکس انحنای نوار الکترون است.

نقاط با انحنای بالا در نوار انرژی مثل مرکز یا مرز منطقه اول بریلوئن

کاهش جرم موثر

۱ درصد جرم m_0

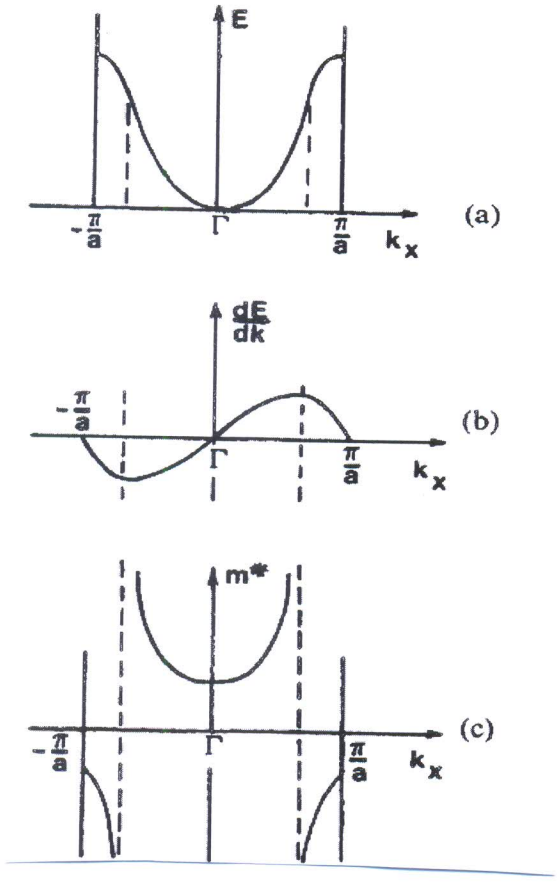


Figure 6.8. (a) simple band structure, as shown in Fig 5.4. (b) First derivative and c) inverse function of the second derivative of the curve shown in (a).

شکل 6.8c ← ■ جرم موثر الکترون ها در مرکز منطقه ی اول بریلوئن کوچک و مثبت است و با دور شدن از مرکز منطقه اول بریلوئن افزایش می یابد.

■ در قسمت بالای نوار تقعر فرق می کند و جرم موثر الکترون منفی است.

جرم موثر منفی به معنی حرکت ذرات در جهت عکس است.

■ الکترون با جرم موثر منفی electron defect یا electron hole نامیده می شود.

- hole یا حفره را به جای ذره‌ای با بار منفی و جرم موثر منفی شبه ذره‌ای با جرم موثر مثبت و بار مثبت معرفی می‌کنیم.

hole : positive effective mass and positive charge

- حفره‌ها در بلورهایی که نوار ظرفیت تقریباً پُر دارند، نقش مهمی بازی می‌کنند. (مثل نیمرساناها)

- جامدات دارای خواص مختلف در جهت‌های مختلف (ناهمسانگردی) anisotropy
جرم‌های m^* متفاوتی در هر جهت دارند.

در این حالت‌ها جرم موثر m^* به صورت تانسور نمایش داده می‌شود.

- زوج الکترون - حفره، اکسیتون "exciton" نامیده می‌شود.

- حفره معادل پوزیترون (positron) نیست.

- پوزیترون یک ذره‌ای زیراتمی است که بار مثبت دارد.

پوزیترون در β-decay گسیل می‌یابند و در تابش‌های کیهانی می‌توان آن را یافت.
cosmic radiation

وقتی الکترون‌ها و پوزیترون‌ها برهم کنش می‌کنند هر دو نابود می‌شوند و انرژی گسیل می‌شود.