#### "Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych" Wykład 14

Tomasz Kazimierczuk

Zakład Fizyki Ciała Stałego Instytut Fizyki Doświadczalnej Wydział Fizyki Uniwersytet Warszawski

Na podstawie materiałów prof. M. Baja

Dla różnych kryształów otrzymane wzory będą się różniły; dla kryształu kubicznego otrzymuje się:

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \left( C_{12} + C_{44} \right) \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + C_{44} \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \left( C_{12} + C_{44} \right) \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + C_{44} \left( \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + \left( C_{12} + C_{44} \right) \left( \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right)$$

#### są to klasyczne równania falowe

• Fale rozchodzące się w kierunku [100]:  $\vec{u}(\vec{r},t) = \vec{u}_0 e^{i(kx-\omega t)}$ 

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2}$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{44} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2}$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{44} \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2}$$

П

– fala podłużna poruszająca się z prędkością  $v_{\parallel} = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}$ 

– 2 zdegenerowane fale poprzeczne poruszające się z prędkością

$$v_{\perp} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} < v_{\parallel}$$

prędkość fal poprzecznych jest mniejsza



**Rys. 20.** Efektywne moduły sprężystości dla trzech rodzajów fal sprężystych, rozchodzących się wzdłuż trzech głównych kierunków w krysztale o strukturze regularnej. Dwie fale poprzeczne, które rozchodzą się w kierunkach [100] i [111], są zdegenerowane

Ch. Kittel, "Wstęp do fizyki ciała stałego"

25.06.2024

- Dla każdego kierunku rozchodzenia się fali (wersora propagacji) istnieją 3 rodzaje fal – 1 "podłużna" i 2 "poprzeczne" z klasycznymi (liniowymi) relacjami dyspersyjnymi
- W ogólności wszystkie te fale mają różne prędkości
- Czasami fale poprzeczne są zdegenerowane (tzn. mają te same prędkości, a więc i takie same relacje dyspersyjne)
- Dla dowolnego kierunku propagacji fale nie są ani ściśle podłużne, ani ściśle poprzeczne

### FONONY

25.06.2024

#### Fonony

- 1. **3rN** drgań normalnych  $\Rightarrow$  **3rN** jednowymiarowych oscylatorów harmonicznych
- 2. kwantowanie oscylatorów  $\Rightarrow$  oscylatory "numerowane" numerem gałęzi s (jest ich **3**r) oraz wektorem falowym  $\vec{q}$ :

$$E_{osc} = \left(n_{s\vec{q}} + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar \omega_s(\vec{q})$$

3. kwant wzbudzenia danego oscylatora nazywamy *fononem* (kwazicząstka). Stan kwantowy fononu opisują liczby kwantowe *s* i  $\vec{q}$ . Dowolnie dużo fononów może obsadzać ten sam stan kwantowy (bo dany oscylator może być w dowolnie wysokim stanie kwantowym)  $\Rightarrow$  *fonon jest bozonem*:

$$E_{s\vec{q}} = \hbar \omega_s(\vec{q}) - \text{energia fononu}$$

$$\hbar \vec{q} - \text{kwazipęd fononu}$$

4. w równowadze z termostatem o temperaturze T obsadzenie stanu fononowego (średnia liczba fononów w danym stanie fononowym):

$$\left\langle n_{s\vec{q}}(T) \right\rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_s(\vec{q})}{kT}} - 1} \xrightarrow{T \to \infty} \left( \frac{kT}{\hbar\omega_s(\vec{q})} \right) \propto T$$

w wysokich temperaturach liczba fononów jest proporcjonalna do temperatury

5. gęstość stanów fononowych w przestrzeni wektora  $\vec{q}$  (patrz gęstość stanów elektronowych!) jest stała i wynosi (3D):

$$\rho(\vec{q}) = \frac{1}{\left(2\pi\right)^3}$$

6. w krysztale z bazą składającą się z *r* atomów mamy *3* gałęzie fononów akustycznych, dla których  $\omega(q=0) = 0$  (*1 "podłużnych" LA i 2 "poprzecznych" TA*) oraz *3r-3* gałęzi fononów optycznych, dla których  $\omega(q=0) \neq 0$  (*r-1 "podłużnych" LO i 2r-2 "poprzecznych" TO*)

- 7. fonony akustyczne w  $\vec{q} = 0$  odpowiadają drganiom wszystkich *r* atomów bazy w zgodnych fazach (brak momentu dipolowego związanego z drganiami); w przypadku fononów optycznych, jeśli atomy bazy nie są jednakowe, takie momenty dipolowe się pojawiają – możliwe sprzężenie z falą elektromagnetyczną: dla kryształów jonowych silna absorpcja dla częstości odpowiadających fononom optycznym (Reststrahlen)
- 8. w ogólności (dla dowolnego  $\vec{q}$ ) ani gałęzie "poprzeczne" ani "podłużne" nie odpowiadają ściśle drganiom poprzecznym i podłużnym (patrz **fale sprężyste w ośrodkach ciągłych!**)
- 9. w przybliżeniu harmonicznym fonony są kwazicząstkami całkowicie ze sobą nieoddziałującymi
- 10. *wyjście poza przybliżenie harmoniczne* pozwala np. zrozumieć :
  - skąd się bierze rozszerzalność termiczna
  - dlaczego (fononowe) przewodnictwo cieplne jest skończone...

Aluminium, **r** = 1 (tylko fonony akustyczne)



R. Stedman, G. Nilsson, Physical Review 145, 492 (1966)



J. Kulda et al., Physical Review B 50, 13347 (1994)

25.06.2024

GaAs, **r** = 2



P. Giannozzi et al., Physical Review B 43, 7231 (1991)

NaCl*, r* = 2



G. Raunio et al., Physical Review 178, 1496 (1969)

25.06.2024

GaN (wurcyt), **r** = 4



25.06.2024

Relacja Lyddane'a–Sachsa–Tellera



gdzie  $\varepsilon(0)$  i  $\varepsilon(\infty)$  są niskoczęstościową i wysokoczęstościową stałą dielektryczną

Jedna z "dynamicznych" definicji ładunku efektywnego – efektywny, poprzeczny ładunek Borna:

$$e^* = \omega_{TO} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \mu}{N} [\varepsilon(0) - \varepsilon(\infty)]}$$

gdzie  $\mu$  jest masą zredukowaną, a N – koncentracją drgających par atomów

Czym bardziej spolaryzowane wiązanie pomiędzy atomami, tym większa różnica pomiędzy  $\omega_{LO}$  i  $\omega_{TO}$ 

# POJEMNOŚĆ CIEPLNA SIECI KRYSTALICZNEJ

- Doświadczalna obserwacja w wysokich temperaturach molowe ciepło przy stałej objętości  $C_V=3R$ . Jest to zgodne z modelem klasycznym i zasadą ekwipartycji energii – prawo Dulonga-Petita (~ $3N_A$  jednowymiarowych oscylatorów na mol, na każdy wypada średnio kT energii  $\Rightarrow$  molowa pojemność cieplna 3*RT*). Jednak w niskich temperaturach  $T \rightarrow 0$  w niemetalach  $C_V \sim T^3$  (a prawo Dulonga-Petita przewiduje  $C_V$ =const)
- Wkład fononów do energii wewnętrznej (na jednostkę objętości, bo  $ho(ec{q})$  jest liczone na jednostkę objętości):

$$U(T) = \sum_{s} \int_{1SB} \hbar \omega_{s}(\vec{q}) \left\langle n_{s\vec{q}}(T) \right\rangle \rho(\vec{q}) d_{3}q \qquad \text{gdzie } s \text{ numeruje gałęzie fononów}$$

 Znajomość relacji dyspersyjnych dla wszystkich gałęzi fononowych pozwala znaleźć fononowy wkład do U(T) i ciepło przy stałej objętości liczone na jednostkę objętości:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

Krzem Si, **r** = 2



J. Kulda et al., Physical Review B 50, 13347 (1994)

25.06.2024

- Dwa proste analityczne modele fononowego wkładu do pojemności cieplnej sieci krystalicznej:
- **1.** Model Einsteina: zbiór 3N oscylatorów kwantowych, wszystkie o jednakowej energii  $\hbar \omega_0$  (model w przybliżeniu słuszny dla fononów optycznych dla których  $\omega(\vec{q}) \approx const$ )

$$U(T) = 3N \cdot \hbar \omega_0 \cdot \left\langle n(T) \right\rangle = 3N \cdot \hbar \omega_0 \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_0}{kT}} - 1}$$

jeśli wziąć  $N=N_A$ , to molowe ciepło:

$$C_V = 3R \cdot \frac{x^2 e^x}{\left(e^x - 1\right)^2} \xrightarrow[(T \to \infty)]{x \to 0} 3R \qquad \text{gdzie} \quad x = \frac{\hbar \omega_0}{kT}$$

w ten sposób odtwarzamy prawo Dulonga-Petita, ale w niskich temperaturach otrzymuje się zależność szybszą niż doświadczalna !

Model Debye'a: fonony akustyczne z uproszczoną (liniową) dyspersją:

$\omega_{TA} = u_T q$	(2 gałęzie)	
$\omega_{LA} = u_L q$	(1 gałąź)	

*gęstość stanów* na jednostkę częstości, na jednostkę objętości, na jedną (i-tą) gałąź:

$$\rho(\omega_i)d\omega_i = \rho_q(\vec{q}_i)d_3q_i = \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi q_i^2 dq_i = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega_i^2}{u_i^3} d\omega_i$$

• wszystkie 3 gałęzie (zakładając degenerację obu gałęzi poprzecznych):

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2}{u_T^3} + \frac{1}{u_L^3}\right) \equiv \frac{3\omega^2}{2\pi^2} \cdot \frac{1}{u^3}$$

u jest pewną średnią prędkością

2.

• Założenie sferycznej symetrii relacji dyspersyjnych zmusza do ograniczenia się do obszaru  $\omega \le \omega_{max}$ , tak aby całkowita liczba (koncentracja) stanów fononowych wyniosła 3*N*:

$$3N = \int_{0}^{\omega_{\max}} \rho(\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega_{\max}^3}{u^3}$$

stąd:  $\omega_{\text{max}} = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot u$ 

oraz definicja temperatury Debye'a:

$$\Theta = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k} = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot \frac{\hbar u}{k}$$

Wkład fononów do energii wewnętrznej (na jednostkę objętości):

$$U(T) = \int_{0}^{\omega_{\max}} \hbar \omega \cdot \rho(\omega) \cdot \langle n(\omega,T) \rangle d\omega = \frac{3}{2\pi^2} \cdot \frac{\hbar}{u^3} \int_{0}^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} d\omega$$

• Zamiana zmiennych:  $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$ 

$$U(T) = \frac{3}{2\pi^2} \cdot \frac{\hbar}{u^3} \cdot \left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{3}{2\pi^2} \cdot T^4 \cdot \left(\frac{k}{\hbar u}\right)^3 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

i wreszcie, wykorzystując związek:

$$\Theta = \sqrt[3]{6\pi^2 N} \cdot \frac{\hbar u}{k}$$

otrzymujemy:

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) = 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_{0}^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

wkład fononów (akustycznych) do energii wewnętrznej wg. modelu Debye'a

a) niskie temperatury T <<  $\Theta$ :

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) \approx 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \cdot \frac{\pi^4}{15} \propto T^4$$

$$\bigcup$$

$$C_V \propto T^3$$
zgodnie z doświadczeniem

#### b) wysokie temperatury T >> Θ:

wtedy w całym obszarze całkowania x << 1 i:

$$U\left(\frac{T}{\Theta}\right) \approx 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^{4} \cdot \int_{0}^{\Theta/T} \frac{x^{3}}{1+x-1} dx = 9Nk\Theta \cdot \left(\frac{T}{\Theta}\right)^{4} \cdot \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^{3} = 3NkT$$

$$C_{V} = 3R$$
prawo Dulonga-Petita, jeśli
obliczymy U dla N<sub>A</sub> oscylatorów



stały argon, linia – model Debye'a

Ch. Kittel, "Wstęp do fizyki ciała stałego"



Wikipedia

#### Uwaga na skale! Model Debye'a działa też w wysokich temperaturach

# **TRANSPORT - OGÓLNIE**

25.06.2024

Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych - wykład 12

## Transport – siły zewnętrzne

- Rozproszenia elastyczne np. na potencjałach domieszek i defektów
- **Rozproszenia nieelastyczne** np. na fononach (lub innych kwazicząstkach). W przybliżeniu często traktuje się rozpraszanie na fononach akustycznych jako elastyczne (bo energie fononów akustycznych są niewielkie). Nawet rozpraszanie na fononach optycznych często opisuje się przy założeniu, że rozproszenia są w przybliżeniu elastyczne (w odpowiednio wysokich temperaturach, w których  $kT >> \hbar \omega_0$ ).

#### Rozpraszanie elektron-elektron

– też nieelastyczne, możliwe tylko dla elektronów z okolicy poziomu Fermiego, istotne z punktu widzenia procesów relaksacji fazy funkcji falowej  $\vec{k_1} + \vec{k_2} = \vec{k_3} + \vec{k_4} + \vec{G}$  $E_1 + E_2 = E_3 + E_4$ 



#### Skale długości i czasu w transporcie

- **Punkt wyjścia** potencjał ściśle periodyczny. Rozwiązania blochowskie stany własne hamiltonianu jednoelektronowego  $\Rightarrow$  stany odpowiadają ściśle określonej energii  $\Delta E = 0$  i "żyją" nieskończenie długo  $\tau_q = \infty$ , gdzie  $\Delta E \cdot \tau_q \approx \hbar$  i droga swobodna jest nieskończona
  - ) Czas kwantowy  $\tau_{q'}$  średnia droga swobodna  $l_q$ Każde rozpraszanie prowadzi do tego, że czas życia w danym stanie kwantowym  $\tau_q$  (tzw. "czas kwantowy") jest skończony  $|^{r(E)}$ i poszerzenie  $\Delta E \neq 0$ . Średnia droga swobodna:  $l_q = v_F \tau_q$

Przykład: oscylacje Shubnikova-de Haasa w 2DEG

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c$$

gęstość stanów bez rozproszeń

z rozproszeniami

r(E)

3.

#### Czas transportowy (czas relaksacji pędowej) $\tau_{tr}$ , średnia droga swobodna $I_{tr}$

W makroskopowych przepływach elektronów (np. prąd elektryczny) liczy się nie sam fakt rozproszenia, ale jak w rozproszeniu zmienia się pęd (wektor falowy). Niskokątowe rozproszenia mają mniejszy wpływ na relaksację pędu niż wysokokątowe (rozproszenia elektron-elektron nie dają wkładu do  $\tau_{tr}$ !):

gdzie O – kąt (elastycznego) rozproszenia

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = \int P(\theta)(1 - \cos\theta) d\Omega$$

 $\frac{1}{\tau} = \int P(\theta) d\Omega$ 

przeważnie 
$$\tau_{tr} > \tau_q$$

**Ruchliwość:**  $\mu = \frac{e \tau_{tr}}{m^*}$  **Przykład**: GaAs, m\*  $\approx$  0,067 m<sub>0</sub>,  $E_F$  = 10 meV,  $v_F \approx 2,3.10^5$  m/s

1. T = 300 K, materiał objętościowy:  $\mu \approx 4000$  cm<sup>2</sup>/Vs,  $\tau_{tr} \approx 0,15$  ps,  $\tau_{tr} v_F \approx I_{tr} \approx 35$  nm

2. T = 1 K, 2DEG:  $\mu \approx 10^7$  cm<sup>2</sup>/Vs,  $\tau_{tr} \approx 400$  ps,  $\tau_{tr} v_F \approx I_{tr} \approx 90$  mm

# ) Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) $\tau_{\varphi}$ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej) $I_{\omega}$

Rozproszenia mogą prowadzić do przypadkowych zmian fazy funkcji falowej elektronu, a więc zaniku jej spójności fazowej, co z kolei uniemożliwia efektywną interferencję. Spójność fazową niszczą rozproszenia nieelastyczne. W relaksacji fazy nie biorą udziału "sztywne rozpraszacze", a tylko "fluktuujące" (rozpraszanie na fononach, rozpraszanie elektron-elektron, rozpraszanie na domieszkach z "wewnętrznymi stopniami swobody")

#### Przykład 1 – efekt Aharonova-Bohma

Elektron poruszający się z punktu 1 do punktu 2 po pewnej drodze P, na której nie znika potencjał wektorowy  $\vec{A}$  ( $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$ ) doznaje przesunięcia fazowego:

2DEG w GaAs/Ga<sub>0,7</sub>Al<sub>0,3</sub>As



FIG. 1. Measured magnetoconductance of the device shown on the SEM picture in the left insert. The magnetoconductance show a very clear Aharonov-Bohm signal imposed on a slowly varying background. The right insert displays the zero-magnetic field conductance at T=4.2 K as a function of gate voltage. The conductance curve displays distinct steps which show that the device is in a single- or few-mode regime, see text.

S. Pedersen et al., Physical Review B, 61, 5457 (2000)

Średnia droga swobodna  $v_F \tau_{tr} \approx 6 \ \mu m - transport bez rozproszeń (balistyczny)$ 

Skale długości i czasu w transporcie

- Czas kwantowy  $\tau_{q'}$  średnia droga swobodna  $I_q = \tau_q v_F$
- Czas transportowy (czas relaksacji pędowej)  $\tau_{tr}$ , średnia droga swobodna  $I_{tr} \approx \tau_{tr} v_F$
- Czas relaksacji fazy (czas koherencji fazowej) <br/>  $\tau_{\varphi}$ , długość relaksacji fazy (długość koherencji fazowej)<br/>  $I_{\varphi}$

jeśli 
$$\tau_{\varphi} >> \tau_{tr}$$
, to:  
 $l_{\phi} = \sqrt{D \tau_{\phi}}$  a nie  $l_{\varphi} \approx \tau_{\varphi} v_{F}$   
gdzie  $D = \frac{\mu kT}{q}$ - stała dyfuzji

Długość fali de Broglie'a elektronu (na poziomie Fermiego):

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$$

– dla metalu z  $m^* \approx m_0$  i  $E_F \approx 10$  eV:

– dla GaAs z  $m^* \approx 0,067 m_0$  i  $E_F \approx 10$  meV:

$$\lambda_F \approx 0,4 \text{ nm}$$
 (!!!)  
 $\lambda_F \approx 47 \text{ nm}$ 

Nieporównanie łatwiej jest uzyskać efekty uwięzienia kwantowego w półprzewodnikach niż w metalach !!!

5.

#### Długość magnetyczna l<sub>B</sub>

Promień orbity cyklotronowej najniższego poziomu Landaua:

$$\frac{\hbar\omega_c}{2} = \frac{m^* v^2}{2} = \frac{m^* \omega_c^2 l_B^2}{2} \implies l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$$
  
w polu B = 1T:  $l_B \approx 26 \text{ nm}$ 

Energia cyklotronowa:  $E_c = \hbar \omega_c$ Dla GaAs ( $m^* = 0,067 m_o$ ) w B = 1T  $E_c \approx 1,7$  meV

**6**.

### Równanie Boltzmanna ↓

 $\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + \frac{f_1}{\tau(E)} = 0$ 

### $\rightarrow$ wykład Marty Borysiewicz

## Transport dyfuzyjny

Czas relaksacji charakteryzuje szybkość dochodzenia układu do stanu równowagi

 Po wprowadzeniu pojęcia czasu relaksacji równanie Boltzmanna przyjmuje prostą (tylko formalnie !!!) postać :

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = -\frac{f - f_0}{\tau(\vec{k})}$$

$$\left\langle A(E)\right\rangle = \frac{\frac{1}{3\pi^2}\int_0^\infty A(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)k^3(E)\,dE}{\frac{1}{3\pi^2}\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)k^3(E)\,dE} = \frac{1}{3\pi^2 n}\int_0^\infty A(E)\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)k^3(E)\,dE$$

W przypadku kilku równoczesnych mechanizmów relaksacji dodajemy ich szybkości:

$$\frac{1}{\tau_{tot}(E)} = \sum_{i} \frac{1}{\tau_i(E)}$$

### Równanie Boltzmanna – czas relaksacji

Scattering mechanism	Scattering parameter	$ au_{0r}(T)$	A <sub>0r</sub>	
Point defects (short-range potential)	0	$\frac{\pi\hbar^4}{m_n(2m_nk_0T)^{1/2}U_0^2N_g}$	$rac{\pi}{\hbar}U_0^2N_g$	
Acoustic phonons (deformation potential)	0	$\frac{2\pi\hbar^4\rho v_0^2}{E_1^2(2m_nk_0T)^{3/2}}$	$\frac{\pi E_1^2 k_0 T}{\hbar \rho v_0^2}$	
Nonpolar optical phonons at high temperatures $(k_0 T \gg \hbar \omega_0)^*$	0	$\frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar\omega_0}{E_0}\right)^2 \frac{\hbar^2 a^2 \rho}{(2m_n k_0 T)^{3/2}}$	$\pi^{3}\hbar\left(\frac{E_{0}}{\hbar\omega_{0}}\right)^{2}\frac{k_{0}T}{\rho a^{2}}$	
Polar optical phonons at high temperatures $(k_0 T \gg \hbar \omega_0)$	1	$\frac{1}{2\alpha} \left( \frac{\hbar}{\omega_0 k_0 T} \right)^{1/2}$	$\frac{2\pi^2 e^2 k_0 T}{\varkappa^* \hbar}$	
Piezoacoustic phonons	1	$\frac{2\pi\hbar^2\varkappa}{e^2\Pi_0^2} \left(\frac{2}{m_nk_0T}\right)^{1/2}$	$\frac{\pi e^2 k_0 T \Pi_0^2}{2\hbar \varkappa}$	
Impurity ions	2	$\frac{\varkappa^2 (2m_n)^{1/2} (k_0 T)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F_{\rm imp}(\varepsilon)}$	$\frac{2\pi^3 N_i F_{\rm imp}(k)}{\hbar \varkappa^2}$	
* At low temperatures $(k_0 T \ll \hbar \omega_0)$ in the case of scattering by polar or nonpolar optical phonons $\tau$ does not depend on energy $(r = 1/2)$ , and for a parabolic band it is given by the				

formulae (11.63) and (11.84) respectively.

#### B.M. Askerov, "Electron transport phenomena in semiconductors"

### Równanie Boltzmanna – czas relaksacji

#### Zależność czasu relaksacji od energii

- W ogólności zależności τ(E) dla różnych mechanizmów rozpraszania mogą być skomplikowane (np.: B.M. Askerov, "Electron transport phenomena in semiconductors", World Scientific 1994, D. K. Ferry, "Semiconductor transport", Taylor & Francis 2000)
- Dla *pasma parabolicznego* w wielu przypadkach czas relaksacji daje się opisać zależnością potęgową od energii:

$$\tau(E) = \tau_{0r}(T) \cdot \left(\frac{E}{kT}\right)^{(r-\frac{1}{2})} \implies \qquad l_{tr}(E) \approx v\tau \sim E^{\frac{1}{2}} \cdot E^{(r-\frac{1}{2})} = E^{r}$$

#### Równanie Boltzmanna – pole elektryczne



- w przypadku niezdegenerowanym w *niskich temperaturach* można się spodziewać  $\mu(T) \sim T^{3/2}$  (rozpraszanie zdominowane przez zjonizowane domieszki)
- w przypadku niezdegenerowanym w *wysokich temperaturach* można się spodziewać  $\mu(T) \sim T^{-3/2}$  (jeśli rozpraszanie zdominowane przez fonony akustyczne, potencjał deformacyjny)

#### Nośniki w polu elektrycznym - ruchliwość

GaAs - ruchliwość





FIG. 1. Temperature dependence of the mobility for the highest purity sample showing the mobility curves calculated for each scattering process, the calculated combined mobility curve, and the experimental points.

C.M. Wolfe et al., Journal of Applied Physics, 41, 3088 (1970)

### Równanie Boltzmanna – czas relaksacji

Scattering mechanism	Scattering parameter	$ au_{0r}(T)$	A <sub>0r</sub>	
Point defects (short-range potential)	0	$\frac{\pi\hbar^4}{m_n(2m_nk_0T)^{1/2}U_0^2N_g}$	$rac{\pi}{\hbar}U_0^2N_g$	
Acoustic phonons (deformation potential)	0	$\frac{2\pi\hbar^4\rho v_0^2}{E_1^2(2m_nk_0T)^{3/2}}$	$\frac{\pi E_1^2 k_0 T}{\hbar \rho v_0^2}$	
Nonpolar optical phonons at high temperatures $(k_0 T \gg \hbar \omega_0)^*$	0	$\frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar\omega_0}{E_0}\right)^2 \frac{\hbar^2 a^2 \rho}{(2m_n k_0 T)^{3/2}}$	$\pi^{3}\hbar\left(\frac{E_{0}}{\hbar\omega_{0}}\right)^{2}\frac{k_{0}T}{\rho a^{2}}$	
Polar optical phonons at high temperatures $(k_0 T \gg \hbar \omega_0)$	1	$\frac{1}{2\alpha} \left( \frac{\hbar}{\omega_0 k_0 T} \right)^{1/2}$	$\frac{2\pi^2 e^2 k_0 T}{\varkappa^* \hbar}$	
Piezoacoustic phonons	1	$\frac{2\pi\hbar^2\varkappa}{e^2\Pi_0^2} \left(\frac{2}{m_nk_0T}\right)^{1/2}$	$\frac{\pi e^2 k_0 T \Pi_0^2}{2\hbar \varkappa}$	
Impurity ions	2	$\frac{\varkappa^2 (2m_n)^{1/2} (k_0 T)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F_{\rm imp}(\varepsilon)}$	$\frac{2\pi^3 N_i F_{\rm imp}(k)}{\hbar \varkappa^2}$	
* At low temperatures $(k_0 T \ll \hbar \omega_0)$ in the case of scattering by polar or nonpolar optical phonons $\tau$ does not depend on energy $(r = 1/2)$ , and for a parabolic band it is given by the				

formulae (11.63) and (11.84) respectively.

#### B.M. Askerov, "Electron transport phenomena in semiconductors"

Nośniki w polach elektrycznym i magnetycznym – zjawiska galwanomagnetyczne

 w obecności pól elektrycznego i magnetycznego w układzie jednorodnym z równania Boltzmanna wynika następująca postać odchylenia od rozkładu równowagowego:

$$\vec{X} = \frac{\vec{X}_0 + s(\vec{X}_0 \times \vec{b}) + s^2 \vec{b}(\vec{b} \cdot \vec{X}_0)}{1 + s^2}$$

gdzie: 
$$\vec{b} = \frac{B}{B}$$
  
 $s = \frac{q \tau B}{m^*}$   
 $\vec{X}_0 = q \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) \vec{\varepsilon}$ 

- wersor w kierunku pola magnetycznego,

$$q = \pm e$$
  $|s| = \frac{|q|\tau B}{m^*} = \omega_c \tau$ 

– rozwiązanie bez pola magnetycznego

 $|s| = \frac{|q|\tau B}{m^*} = \omega_c \tau$ 

 $= \bigcup_{j=1}^{n} \mathbb{I}_{j}$  gęstość prądu $\vec{j}$  i natężenie pola elektrycznego  $\vec{\varepsilon}$  nie są równoległe

$$\vec{j} = \hat{\sigma}\vec{\varepsilon}$$

11

 $\hat{\sigma}$  jest antysymetrycznym tensorem drugiego rzędu (tensorem przewodnictwa); jeśli **pole magnetyczne jest skierowane wzdłuż osi z**, to:

$$\hat{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \qquad \sigma_{xx} = \frac{e^2 n}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1+s^2} \right\rangle \qquad -\text{może być dodatnie albo} \\ \sigma_{xy} = \frac{e^2 n}{m^*} \left\langle \frac{s \tau}{1+s^2} \right\rangle \qquad \text{ujemne !}$$

- $\sigma_{xx}$  i  $\sigma_{xy}$  zależą od pola magnetycznego (poprzez  $s = \frac{q \tau B}{m^*}$ ), zaś  $\sigma_{zz}$  od B nie zależy
- w obszarze słabych pól magnetycznych |s| << 1:

$$\sigma_{xx} \cong \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau(1-s^2) \rangle = \frac{e^2 n}{m^*} \left( \langle \tau \rangle - \frac{e^2 B^2}{m^{*2}} \langle \tau^3 \rangle \right) \quad -\text{główny człon niezależny od } B$$
plus dodatek kwadratowy w B
$$\sigma_{xy} \cong \frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau s \rangle = \frac{e^2 n q B}{m^{*2}} \langle \tau^2 \rangle \quad -\text{liniowe w } B$$

• w obszarze silnych pól magnetycznych |s| >> 1:

$$\sigma_{xx} \cong \frac{e^2 n}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{s^2} \right\rangle = \frac{n m^*}{B^2} \left\langle \frac{1}{\tau} \right\rangle$$

$$\sigma_{xy} \cong \frac{e^2 n}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{s} \right\rangle = \frac{qn}{B}$$

 Znajomość postaci tensora przewodnictwa pozwala wyjaśnić zjawisko Halla czy magnetooporu poprzecznego i to zarówno w przypadku, kiedy w transporcie biorą udział nośniki z jednego pasma czy też z kilku (np. elektrony i dziury)

#### Efekt Halla

Prostopadłościenna próbka, pole magnetyczne wzdłuż osi z, prąd przepływa wzdłuż osi x:



- napięcie wzdłuż kierunku przepływu prądu *U<sub>xx</sub>*
- napięcie poprzeczne (hallowskie) *U<sub>xy</sub>*

- wektor gęstości prądu:
- wektor natężenia pola elektrycznego znajdziemy za pomocą relacji:

 $\vec{j} = \begin{vmatrix} j \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}$ 

 $\vec{\varepsilon} = \hat{\rho} \, \vec{j} = (\hat{\sigma})^{-1} \, \vec{j}$  gdzie  $\hat{\rho}$  – tensor oporności

$$\hat{\rho} = \begin{bmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} & 0 \\ -\rho_{xy} & \rho_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{zz} \end{bmatrix} = \hat{\sigma}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^{2} + \sigma_{xy}^{2}} & \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^{2} + \sigma_{xy}^{2}} & 0 \\ \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^{2} + \sigma_{xy}^{2}} & \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^{2} + \sigma_{xy}^{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sigma_{zz}} \end{bmatrix}$$

• oporność podłużna (zależna od pola magnetycznego *B*):

$$\rho_{xx} \equiv \rho(B) = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$$

oporność hallowska:

$$\rho_H \equiv R_H \cdot B = -\rho_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$$

gdzie R<sub>H</sub> jest współczynnikiem Halla

• współczynnik Halla w obszarze słabych pól magnetycznych B ightarrow 0:

$$R_{H0} \cong \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2} \cong \frac{1}{qn} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = \frac{r}{\pm en}$$

r nazywa się hallowskim czynnikiem rozproszeniowym

- w przypadku silnej degeneracji  $\tau \rightarrow \tau(E_F)$  i r = 1
- w przypadku niezdegenerowanym, opisywalnym rozkładem Boltzmanna, po zastosowaniu wprowadzonej wcześniej zależności czasu relaksacji od energii:  $au(E) \propto E^{(p-1/2)}$

otrzymujemy:

25.06.2024

Zjawiska galwanomagnetyczne  $r = \frac{\Gamma(2p+3/2) \cdot \Gamma(5/2)}{\Gamma^2(p+2)}$ gdzie  $\Gamma(x) = \int_{0}^{\infty} t^{x-1}e^{-t}dt$  jest funkcją gamma Eulera

- Jeśli:
  - p = 0 (rozpraszanie na fononach, potencjał deformacyjny)  $r \approx 1,18$
  - -p = 1(rozpraszanie na fononach optycznych, mechanizm polarny, rozpraszaniena fononach akustycznych, mechanizm piezo) $r \approx 1,10$
  - p = 2 (rozpraszanie na zjonizowanych domieszkach)  $r \approx 1,93$
- mierząc współczynnik Halla w obszarze słabych pól B i przewodnictwo elektryczne σ bez pola magnetycznego można z dokładnością do hallowskiego czynnika rozproszeniowego wyznaczyć koncentrację i ruchliwość nośników:

$$n = \frac{r}{e|R_H|} \qquad \qquad \mu = \frac{|R_H|\sigma}{r}$$

współczynnik Halla w obszarze silnych pól magnetycznych |s| >> 1:

$$R_{H} = \frac{1}{B} \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^{2} + \sigma_{xy}^{2}} \xrightarrow{s > 1} \frac{1}{B} \frac{1}{\sigma_{xy}} \approx \frac{1}{qn} = R_{H\infty}$$

w ogóle nie zależy od mechanizmów rozpraszania nośników !

#### Magnetoopór poprzeczny – efekt Gaussa

- słowo "poprzeczny" odnosi się do sytuacji, kiedy przepływ prądu zachodzi w kierunku prostopadłym do kierunku pola magnetycznego
- zjawiskiem magnetooporu nazywamy względną zmianę oporności r<sub>xx</sub> w funkcji pola magnetycznego:

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \frac{\rho_{xx}(B)}{\rho(0)} - 1 = \frac{\sigma(0)\sigma_{xx} - \sigma_{xx}^2 - \sigma_{xy}^2}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}$$

- wystarczy teraz podstawić odpowiednie wyrażenia na składowe tensora przewodnictwa...
- magnetoopór w obszarze słabych pól magnetycznych |s| << 1: stosując standardowe przybliżenia i ograniczając się do wyrazów najniższego rzędu w B otrzymujemy:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{e^2 B^2}{m^{*2}} \left[ \frac{\left\langle \tau^3 \right\rangle}{\left\langle \tau \right\rangle} - \frac{\left\langle \tau^2 \right\rangle^2}{\left\langle \tau \right\rangle^2} \right] = \mu^2 B^2 \left[ \frac{\left\langle \tau^3 \right\rangle}{\left\langle \tau \right\rangle^3} - \frac{\left\langle \tau^2 \right\rangle^2}{\left\langle \tau \right\rangle^4} \right] = \mu^2 B^2 \cdot A$$
(*ćwiczenia !*)

- magnetopór jest kwadratowy w B
- jest proporcjonalny do  $\mu^2$
- współczynnik proporcjonalności A zależy od mechanizmu rozpraszania:
   np. w przypadku niezdegenerowanym (rozkład Boltzmanna) dla p = 0 (fonony akustyczne, potencjał deformacyjny) A = 0,38, dla p = 2 (zjonizowane domieszki) A = 2,15

magnetoopór w obszarze silnych pól magnetycznych |s| >> 1:

$$\frac{\Delta \rho_{\infty}}{\rho} \approx \frac{\sigma(0)\sigma_{xx}}{\sigma_{xy}^2} - 1 = \langle \tau \rangle \langle \frac{1}{\tau} \rangle - 1$$

nasyca się na wartości zależnej od mechanizmu rozpraszania

Dla rozkładu Boltzmanna: 0,13 dla p = 02,40 dla p = 2

- dla pasma sferycznego magnetoopór podłużny nie pojawia się (na ładunek poruszający się wzdłuż linii pola B nie działa siła). W przypadku pasma niesferycznego przewodnictwo jest tensorowe nawet bez pola B i w tym przypadku magnetoopór podłużny występuje
- efekt Halla pierwszego rzędu w polu **B**
- efekt Gaussa drugiego rzędu w polu **B**

#### Przypadek udziału w przewodnictwie wielu rodzajów nośników

np.:

- półprzewodnik bliski samoistnemu w transporcie biorą udział elektrony w paśmie przewodnictwa i dziury w paśmie walencyjnym
- degeneracja kilku dolin jednego pasma nośniki obsadzające różne doliny mają różne koncentracje i ruchliwości
- heterostruktura w której występuje kilka warstw zawierających różne swobodne nośniki
- Standardowym założeniem jest to, że każda i-ta "grupa" nośników czuje ten sam rozkład pola elektrycznego oraz że nośniki w swoim ruchu sobie nawzajem "nie przeszkadzają". W takim przypadku, całkowita gęstość prądu jest sumą gęstości prądu od poszczególnych grup nośników i:

$$\hat{\sigma}^{tot} = \sum_{i} \hat{\sigma}^{i}$$
 tzn. tensor przewodnictwa jest addytywny

Przykład 1 – elektrony i dziury współuczestniczące w transporcie

• elektrony: 
$$\sigma_{xx}^{e} = \frac{e^{2}n}{m_{e}^{*}} \left\langle \frac{\tau_{e}}{1+s_{e}^{2}} \right\rangle$$
  $\sigma_{xy}^{e} = \frac{e^{2}n}{m_{e}^{*}} \left\langle \frac{s_{e}\tau_{e}}{1+s_{e}^{2}} \right\rangle$   
• dziury:  $\sigma_{xx}^{h} = \frac{e^{2}p}{m_{h}^{*}} \left\langle \frac{\tau_{h}}{1+s_{h}^{2}} \right\rangle$   $\sigma_{xy}^{h} = \frac{e^{2}p}{m_{h}^{*}} \left\langle \frac{s_{h}\tau_{h}}{1+s_{h}^{2}} \right\rangle$ 

• całkowity tensor przewodnictwa:

$$\sigma_{xx}^{tot} = \sigma_{xx}^{e} + \sigma_{xx}^{h} \qquad \qquad \sigma_{xy}^{tot} = \sigma_{xy}^{e} + \sigma_{xy}^{h}$$

możemy teraz w standardowy sposób wyznaczyć współczynnik Halla

$$R_{H}^{tot} = \frac{\rho_{H}^{tot}}{B} = \frac{1}{B} \cdot \frac{\sigma_{xy}^{tot}}{(\sigma_{xx}^{tot})^{2} + (\sigma_{xy}^{tot})^{2}}$$

w obszarze słabych pól magnetycznych |s<sub>e</sub>|, |s<sub>h</sub>| << 1:</li>

$$R_0 = \frac{r_h p \mu_h^2 - r_e n \mu_e^2}{e \left( p \mu_h + n \mu_e \right)^2} \xrightarrow{r_h = r_e = r} \frac{r}{e} \frac{p - nb^2}{\left( p + nb \right)^2} \qquad \text{gdzie} \qquad b = \frac{\mu_e}{\mu_h}$$

w obszarze silnych pól magnetycznych |s<sub>e</sub>|, |s<sub>h</sub>| >> 1:

$$R_{\infty} = \frac{1}{e(p-n)} \qquad \qquad \downarrow$$

- 1. w słabych polach magnetycznych dominujący wkład do współczynnika Halla mogą mieć nośniki bardziej ruchliwe, nawet jeśli ich koncentracja jest istotnie mniejsza!
- 2. w silnych polach magnetycznych o znaku współczynnika Halla decydują nośniki o większej koncentracji
- 3. z powyższego wynika, że znak współczynnika Halla może w funkcji pola *B* się zmienić !!!

#### Przykład 2 – widmo ruchliwości

- nie wiemy ile różnych rodzajów (grup) nośników bierze udział w transporcie
- staramy się opisać doświadczalną zależność składowych tensora przewodnictwa od pola magnetycznego  $\sigma_{xx}(B)$  i  $\sigma_{xy}(B)$  jako złożenie wielu różnych wkładów – kanałów przewodnictwa (w ogólności – dowolnie wielu) pochodzących od grup nośników (numerowanych wskaźnikiem *i*) charakteryzujących się daną masą efektywną  $m_i^*$ , ładunkiem  $q_i$  (= ±e) oraz czasem relaksacji  $\tau_i$
- dla każdej z takich grup możemy napisać:

$$s_{i} = \frac{q_{i}\tau_{i}}{m_{i}^{*}}B \equiv \mu_{i}B$$

$$-\operatorname{gdzie} m_{i} \text{ jest ujemne dla elektronów,}$$

$$a \operatorname{dodatnie dla dziur}$$

$$\sigma_{xx}^{i}(B) = \frac{e^{2}n_{i}}{m_{i}^{*}}\frac{\tau_{i}}{1+s_{i}^{2}} = \frac{\sigma_{0i}}{1+s_{i}^{2}} = \frac{\sigma_{0i}}{1+(\mu_{i}B)^{2}}$$

$$\sigma_{xy}^{i}(B) = \frac{\sigma_{0i}}{1+(\mu_{i}B)^{2}} \cdot (\mu_{i}B)$$

• sumaryczny wkład od wszystkich kanałów przewodnictwa (grup nośników):

$$\sigma_{xx}^{tot}(B) = \sum_{i} \frac{\sigma_{0i}}{1 + (\mu_{i}B)^{2}} = \int_{\mu} \left(\frac{d\sigma_{0}(\mu)}{d\mu}\right) \frac{1}{1 + (\mu B)^{2}} d\mu$$
$$\sigma_{xy}^{tot}(B) = \sum_{i} \frac{\sigma_{0i} \mu_{i}B}{1 + (\mu_{i}B)^{2}} = \int_{\mu} \left(\frac{d\sigma_{0}(\mu)}{d\mu}\right) \frac{\mu B}{1 + (\mu B)^{2}} d\mu$$

- rozwiązanie problemu polega na takim dobraniu wkładów poszczególnych kanałów przewodnictwa , aby zgodność pomiędzy wyliczonymi zależnościami  $\sigma_{xx}^{tot}(B)$  i  $\sigma_{xy}^{tot}(B)$  i doświadczeniem była jak najlepsza
- można albo próbować dopasować sumę wkładów od kilku kanałów  $\mu_i \sigma_{0i}$ przewodnictwa, albo stosować kwaziciągły rozkład  $\frac{d\sigma_0(\mu)}{d\mu}$

#### widmo ruchliwości

25.06.2024