Wykład 6 Przewodnictwo metali i stopów

Przypomnienie: porównanie 1-elekt. stanów stacjonarnych elektronów Sommerfelda i Blocha

W6.1

Wielkość	$\bar{e}$ swobodny Sommerfelda	$\bar{e}$ Blocha
Liczby kwantow.	$\vec{k}$ ($\hbar\vec{k}$ – pęd elektronu)	$\vec{k}$, n ($\hbar\vec{k}$ – kwazipęd; n – indeks pasma
zakres zmienności k	$\vec{k} \to$ cała przestrzeń k zgodnie z war. B-K	$\vec{k} \to$ przebiega po wszystkich k, ale w jednej kom. elem. n $\to$ nieliczalny zbiór indeks.
Energia	$\mathcal{E}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$	dla każdego pasma n funkcje $\mathcal{E}_n(\vec{k})$ nie mają prostej formy analit. ALE: $\mathcal{E}_n(\vec{k}+\vec{K}) = \mathcal{E}_n(\vec{k})$ $\vec{K}$ – okres sieci odwr.
Prędkość	średnia prędkość $\bar{e}$ na poziomie o wektorze $\vec{k}$ $\vec{v} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$	średnia prędkość $\bar{e}$ na poziomie z indeksem pasma n i wektorem $\vec{k}$ $\vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$
Funkcja falowa	F. falowa $\bar{e}$ z wektorem $\vec{k}$ $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}$	F. falowa $\bar{e}$ z indeksem pasma n i wektorem $\vec{k}$ $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ $u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ nie ma prostej formy ale $u_{n\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r})$

W 6.2 Dynamika e w przybliżeniu kwaziklasycznym (Newtonowski podejście do ruchu elektronu)

- próba pogodzenia dynamiki (zdarzeń w modelu Drudego) ze stacjonarnością (poziomy w m. Blocha)

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\hbar\vec{k}}{m}$$

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -e\left(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B}\right)$$

obecność zewnętrznych pól $\vec{E}$, $\vec{B}$, ∇T

Przy opisie ruchu paczki falowej

$$\psi(\vec{r},t) = \sum_{k'} g(\vec{k}') \exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \frac{\hbar^2 k'^2 t}{2m}\right)\right]$$

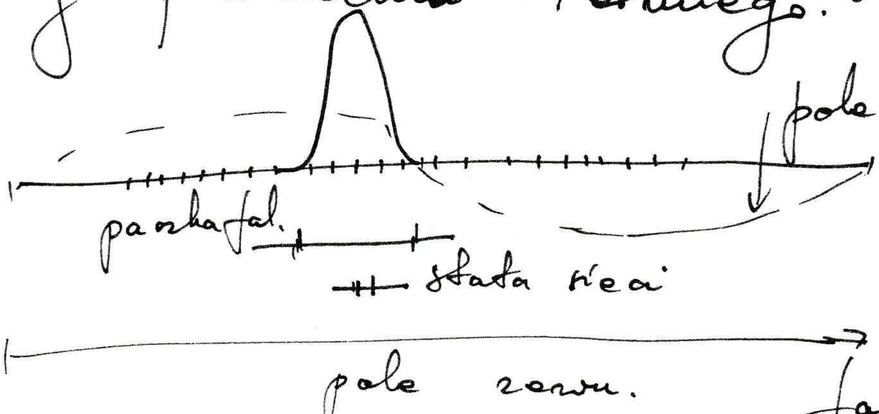
$\vec{k}$ i $\vec{r}$ — wartość średnie pędu i położenia (przy uwzględnieniu zasady nieoznaczoności $\boxed{\Delta x \Delta k_x > 1}$

UWAGA: przy idealnym ułożeniu atomów w sieć periodyczną (centra rozpraszania) fala może się rozchodzić bez tłumienia dzięki koherentnej, konstruktywnej interferencji fal rozproszonych!

Metale mają oporność bo żadne ciało nie jest idealnym kryształem! (defekty w postaci wakansji, pozycji międzywęzłowych, etc.) rozpraszają elektrony (nawet w niskich T)

- odchylenie jonów z położenia równowagi (drgania termiczne) są odchyleniami od okresowości $\longrightarrow$ rozpraszają elektrony!

W6.3 Należy poznać obraz rozpraszania na jonach i skupić się na procesach rozpraszania przy powierzchni Fermiego.



Problem skali i rozciągłości zjawisk

fala propagująca

$$v_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \longmapsto \psi_n(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}')\psi_{n\vec{k}'}(\vec{r})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_n(\vec{k}')t\right]$$

$$g(\vec{k}') \approx 0 \quad |\vec{k}'-\vec{k}| > \Delta k$$ (rozrzut wektorów k mały wobec BZ)

$\mathcal{E}_n(\vec{k})$ — zmienia się niewiele dla poziomów tworzących paczkę falową

prędkość grupowa $\frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}} = \frac{\partial}{\partial \vec{k}}\left(\frac{\mathcal{E}}{\hbar}\right)$

Rozmiar paczki falowej $\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{R}$

$$\psi_n(\vec{r}_0+\vec{R},t) = \sum_{\vec{k}'}\left[g(\vec{k}')\psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}_0)\right]\exp\left[i(\vec{k}'\cdot\vec{R}) - \frac{1}{\hbar}\mathcal{E}_n(\vec{k}')t\right]$$

- superpozycja fal płaskich z funkcją wagową $\left[g(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}_0)\right]$

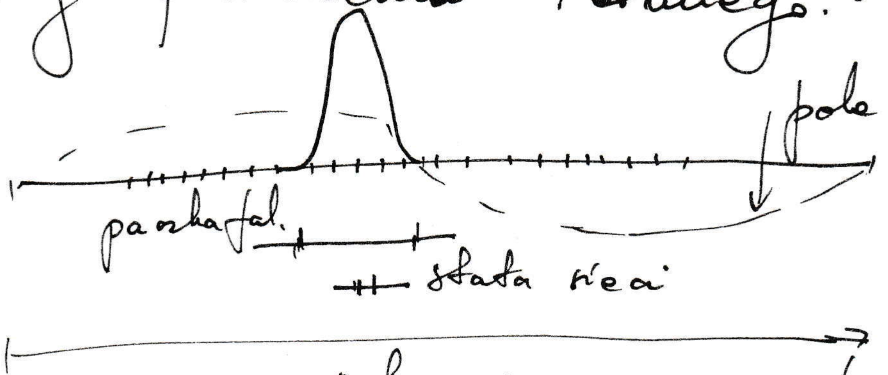
$\psi_n(\vec{r}_0+\vec{R})$ powinna być zlokalizowana w obszarze

$$\Delta R \sim \frac{1}{\Delta k}\ !$$

Δk — rozrzut wektorów $\vec{k}$ paczki

Δk mało wobec BZ $\Longrightarrow$ ΔR duże wobec stałej $\underline{\underline{a}}$

W6.3 Należy porzucić obraz rozpraszania na jonach i skupić się na procesach rozpraszania przy powierzchni Fermiego.



Problem skali i rozciągłości zjawisk

fala propagująca

$$v_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \longmapsto \psi_n(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k}'} g(\vec{k}')\psi_{n\vec{k}'}(\vec{r})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_n(\vec{k}')t\right]$$

$$g(\vec{k}') \approx 0 \qquad |\vec{k}'-\vec{k}| > \Delta k$$

(rozrzut wektorów k mały wobec BZ)

$\mathcal{E}_n(\vec{k})$ — zmienia się niewiele dla poziomów tworzących paczkę falową

prędkość grupowa $\frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}} = \frac{\partial}{\partial \vec{k}}\left(\frac{\mathcal{E}}{\hbar}\right)$

Rozmiar paczki falowej $\qquad \vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{R}$

$$\psi_n(\vec{r}_0+\vec{R},t) = \sum_{\vec{k}'}\left[g(\vec{k}')\psi_{n\vec{k}'}(\vec{r}_0)\right]\exp\left[i(\vec{k}'\cdot\vec{R}) - \frac{1}{\hbar}\mathcal{E}_n(\vec{k}')t\right]$$

- superpozycja fal płaskich z funkcją wagową $\left[g(\vec{k})\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}_0)\right]$

$\psi_n(\vec{r}_0+\vec{R})$ powinna być zlokalizowana w obszarze

$$\Delta R \sim \frac{1}{\Delta k}\ !$$

Δk — rozrzut wektorów $\vec{k}$ paczki

Δk mało wobec BZ $\Longrightarrow$ ΔR duże wobec stałej $\underline{\underline{a}}$

W 6.4

Konkluzja 1: paczka falowa poziomów Blocha z dobrze określonym wektorem $\vec{k}$ w strefie BZ rozciąga się na przestrzeni wielu komórek element.

Konkluzja 2: model kwaziklasyczny pozwala przewidzieć w jaki sposób pod nieobecność zderzeń ewoluuje w czasie elektron $(\vec{r}, \vec{k})$ pod wpływem pól zewnętrznych. $\longmapsto$ opierając się na znajomości struktury elektronowej $\mathcal{E}_n(\vec{k})$ i nie wymagając informacji o potencjale okresowym.

Model kwazi-klasyczny

(1) ignorujemy przejścia "międzypasmowe"

n — dobrze określone

(2)

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

$$\hbar\dot{\vec{k}} = -e\left[\vec{E}(\vec{r},t) + \mu_0 \vec{v}_n(\vec{k})\times \vec{H}(\vec{r},t)\right]$$

(3) w stanie równowagi cieplnej przyczynek do gęstości elektronów pochodzi z pasma "n" i wektorów zawartych w objętości $d\vec{k}$ i dany jest funkcją Fermi-Diraca

$$f(\mathcal{E}_n(\vec{k}))\frac{d\vec{k}}{4\pi^2} = \frac{d\vec{k}/4\pi^2}{\exp\left[(\mathcal{E}_n(\vec{k})-\mu)k_BT + 1\right]}$$

W 6.5 Wnioski z teorii kwazi klasycznej

(1) Nośniki prądu mogą pochodzić z różnych pasm o różnych $\vec{v}_n(\vec{k})$ z uwagi na różną topologię $\mathcal{E}_n(\vec{k})$. — tylko stany w obrębie $k_B T$ przy pow. Fermiego biorą udział w transporcie (wielonośnikowa teoria)

(2) Kwazipęd NIE jest pędem elektronu Blocha

zamiast $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ mamy $\mathcal{E}_n(\vec{k})$!

bo prędkość zmian pędu określa siłę $\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$

podczas gdy $\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$

gradient w przestrzeni "k"

(3) Granice stosowalności teorii

warunek $\boxed{eEa \ll \frac{[\mathcal{E}_g(\vec{k})]^2}{\mathcal{E}_F}}$ brak przejść międzypasm.

$\mathcal{E}_g(\vec{k}) = \mathcal{E}_{n'}(\vec{k}) - \mathcal{E}_n(\vec{k})$!

spełniony w metalach $E = \rho j \sim 10^{-2} \frac{V}{cm}$ $a \approx 10^{-8}$ cm

$\Downarrow$ $\underline{eEa \sim 10^{-10} eV}$

$\mathcal{E}_F \sim 1 eV \Rightarrow \mathcal{E}_g(\vec{k}) \sim 10^{-5} eV$

(nie ma takich przerw w metalach!)

przebicie elektryczne $\longrightarrow$ przejścia międzypasm.

$\boxed{\hbar\omega_c \ll \frac{[\mathcal{E}_g(\vec{k})]^2}{\mathcal{E}_F}}$ dla pól magnet. $B \sim 1T$

$\hbar\omega_c \sim 10^{-4} eV$

nie jest spełniona przy $\mathcal{E}_g(\vec{k}) \sim 10^{-2} eV$

takie przerwy się spotyka $\longrightarrow$ przebicie magnet.

np. pod wpływem silnego sprzężenia SO.

W 6.6.

Pojęcia prądu ładunku i ciepła

prąd ładunku $\vec{j} = (-e)\int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$

prąd ciepła $\vec{j}_\mathcal{E} = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\mathcal{E}(\vec{k})\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathcal{E}(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{2}\int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial \vec{k}}\left[\mathcal{E}(k)\right]^2$

- Ciało stałe (kryształ) ~~dla~~ w którym wszystkie pasma są puste lub zapełnione jest izolatorem elektrycznym i cieplnym!
- Do przewodnictwa wkład tylko ē z niezapełnionych pasm!

$$0 = \int_{\text{po BZ}} \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k}) = \int_{\text{obs}} \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k}) + \int_{\text{puste}} \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k})$$

$$\vec{j} = (+e)\int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\vec{v}(\vec{k}) \qquad \text{dziury}$$

Prąd wytwarzany przez elektrony zajmujące zbiór poziomów pasma = prąd, który by powstał gdyby ~~były~~ nieobsadzone a wszystkie inne poziomy zajęte przez cząstki o ładunku +e.

elektrony ⟶ brakujące dziury!

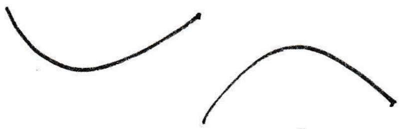
dziury ⟶ brakujące elektrony!

Masa efektywna (tensor)

$$\left[M^{-1}(\vec{k})\right]_{ij} = \pm\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2 \mathcal{E}(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} = \pm\frac{\partial v_i}{\partial k_j}$$

W 6.7

$$\overleftrightarrow{M}(\vec{k})\,\vec{a} = \pm e\left(\vec{E} + \mu_0 \vec{v}(\vec{k}) \times \vec{H}\right)$$

$m^* > 0$  $m^* < 0$

elektron dziura

$$\boxed{\rho_{Cu}(273\,K) \sim 1.56\,\mu\Omega\cdot cm}$$

$$g_n(\mathcal{E})\,d\mathcal{E} = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \times \begin{cases} 1 & \mathcal{E} \le \mathcal{E}_n(\vec{k}) \le \mathcal{E}+d\mathcal{E} \\ 0 & \text{poza} \end{cases}$$

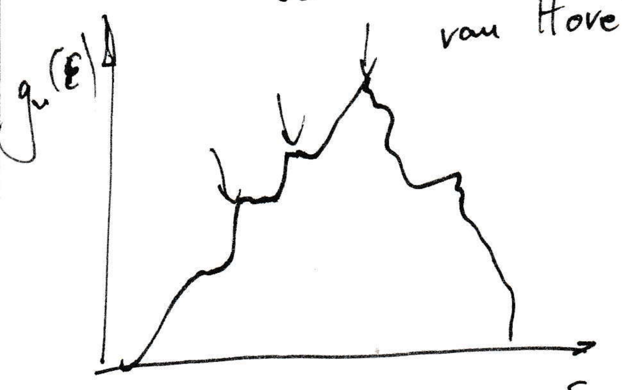
$$g_n(\mathcal{E}) = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3}\,\delta\left[\mathcal{E} - \mathcal{E}_n(\vec{k})\right]$$

$$g_n(\mathcal{E})\,d\mathcal{E} = \int_{S_n(\mathcal{E})} \frac{dS}{4\pi^3}\,\delta k(\vec{k})$$

$$\mathcal{E} + d\mathcal{E} = \mathcal{E} + |\nabla \mathcal{E}_n(\vec{k})|\,\delta k(\vec{k})$$

$$\Downarrow$$

$$\delta k(\vec{k}) = \frac{d\mathcal{E}}{|\nabla \mathcal{E}_n(\vec{k})|}$$



$$g_n(\mathcal{E}) = \int_{S_n(\mathcal{E})} \frac{dS}{4\pi^3}\,\frac{1}{|\nabla \mathcal{E}_n(\vec{k})|}$$