IN THE NAME OF GOD

Physic Electronics

Kronig-Penny Model & Density of States

Lecturers:

- **Dr. M. A. Mansouri Birjandi**
- **Hossein Teymoori**

Dept. of Electrical and Computer Engineering
University of Sistan and Baluchestan (USB)

h.teymoori@pgs.usb.ac.ir
hn.teymoori@gmail.com

February, 2017

1395

فیزیک الکترونیک

مرجع:

فیزیک الکترونیک

Jasprit Singh

ترجمه: دکتر مرتضی فتحی پور

و مهندس علیرضا احسانی اردکانی

فصل ۲ (ادامه)

مدل کرونیگ-پنی
و چگالی حالتهای انرژی

رئوس مطالب

۱- الکترونها در پتانسیل متناوب

۱-۱ قضیه بلاخ (Bloch’s Theorem)

۱-۲- مدل کرونیگ- پنی

۲- استخراج چگالی حالتهای انرژی در نوار هدایت

الکترونها در پتانسیل متناوب

برای درک افزاره های نیمه هادی لازم است بدانیم هنگامی که الکترونها وارد نیمه هادی می شوند، چه اتفاقی برای آنها رخ می دهد و چگونه به نیروهای خارجی پاسخ می دهند.

در برخورد کلاسیکی ساده با مسئله، به نظر می رسد همچنان که الکترونها از درون نیمه هادی عبور میکنند، تحت تاثیر پراکندگی ناشی از یونهای ثابت قرار گیرند، اما معلوم میگردد الکترونهایی که در ساختار تناوبی حرکت میکنند، هیچگاه پراکنده نمی شوند. این ایده بسیار قدرتمندی است. اگر اتمها به سبکی کاملاً متناوب مرتب شوند، پراکندگی وجود ندارد. تنها حضور نواقص، موجب پراکندگی می شود.

توصیف الکترون در نیمه هادی باید از طریق معادله شرودینگر صورت گیرد:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{E}\psi(\mathbf{r})$$

بعلت طبیعت بلورین مواد، پتانسیل U(r) دارای همان تناوب R است.

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}+\mathbf{R})$$

قضیه بلاخ (Bloch's Theorem)

از آنجا که در بلور متناوب تمام سلولها یکسانند، انتظار داریم احتمال وجود الکترون در تمام سلولهای واحد بلور، مساوی باشد. این مطلب توسط قضیه بلاخ به شکل ریاضی بیان می شود.

قضیه بلاخ بیان می دارد که توابع ویژه معادله شرودینگر برای پتانسیل متناوب بصورت زیر است:

$$\boxed{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}$$

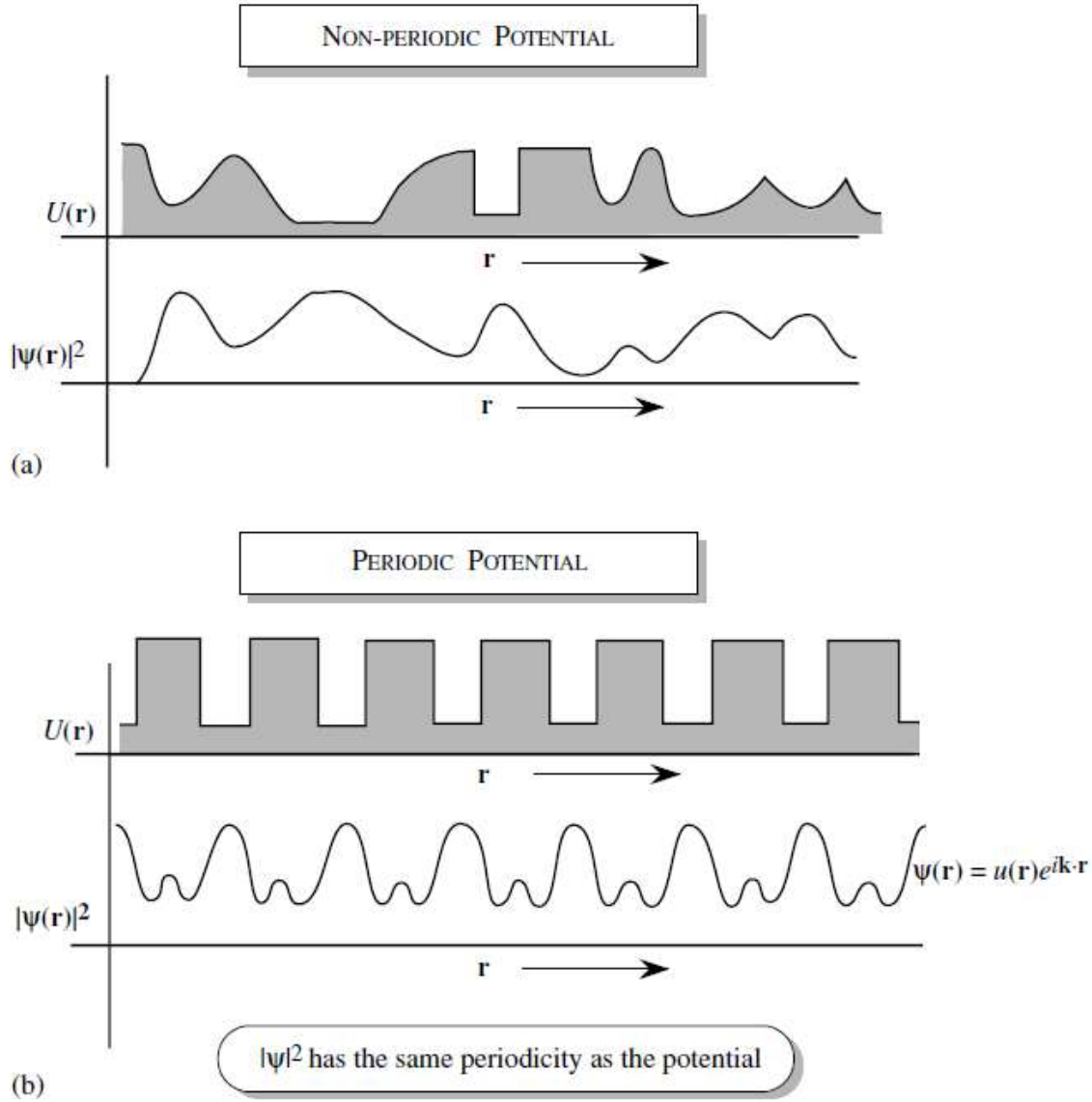
که در آن $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$، دارای همان تناوب پتانسیل متناوب است:

$$\boxed{u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})}$$

پس:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\end{aligned}$$

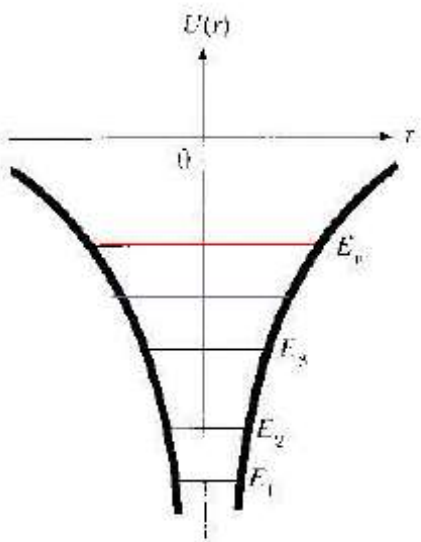
قضیه بلاخ (Bloch's Theorem)



مدل کرونیگ- پنی

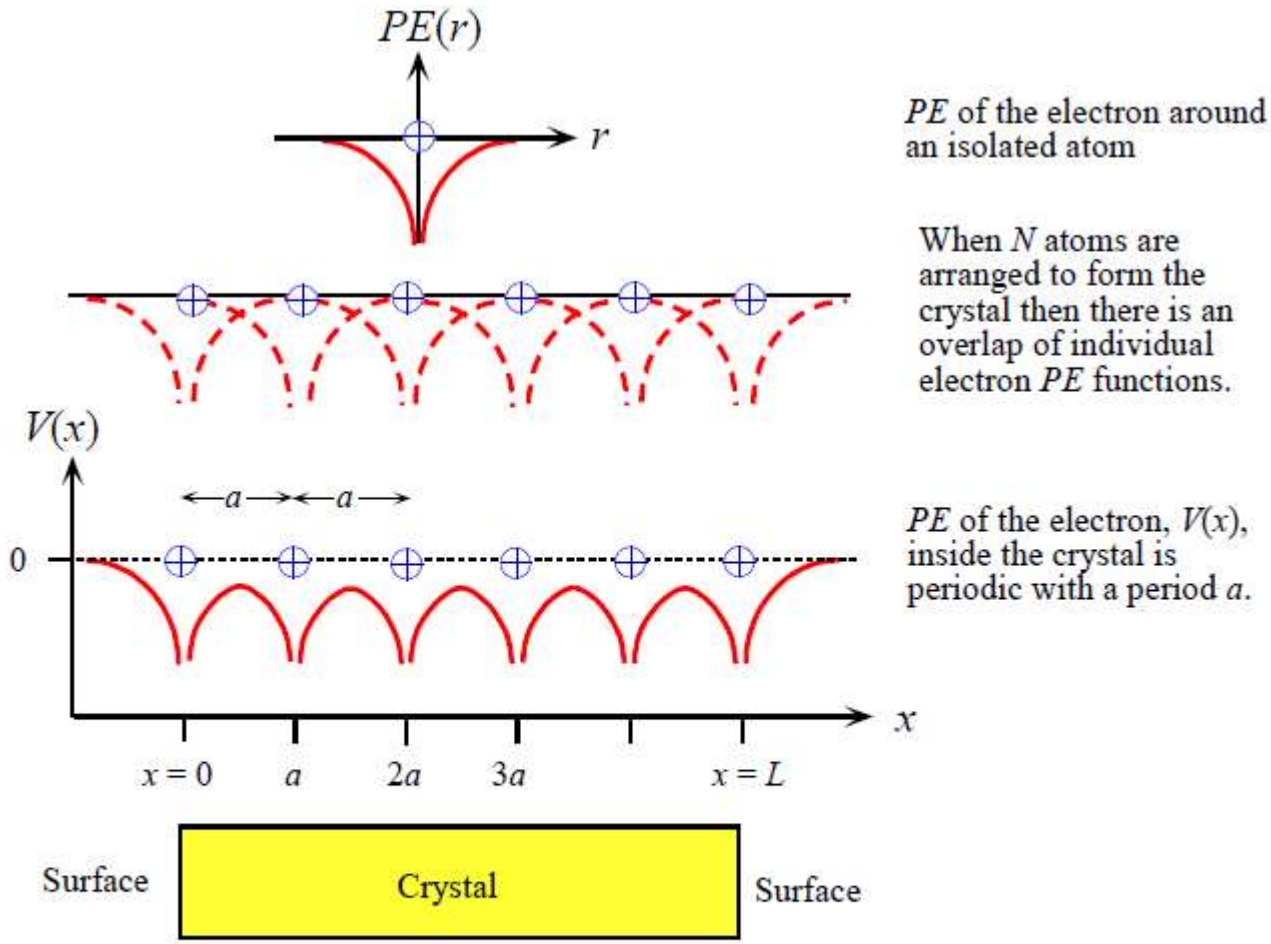
مدل کرونیگ- پنی، مدل بسیار مفیدی برای درک چگونگی رفتار الکترونها در داخل مواد بلورین است. این مدل به ما اجازه می دهد که انرژی الکترونها را بر حسب پارامتر K محاسبه کنیم.
رابطه E-K ساختار نواری شکل نامیده می شود و برای درک پدیده های الکترونیکی و الکترونیک نوری بسیار حائز اهمیت است.

Remember for the Hydrogen atom



$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$$

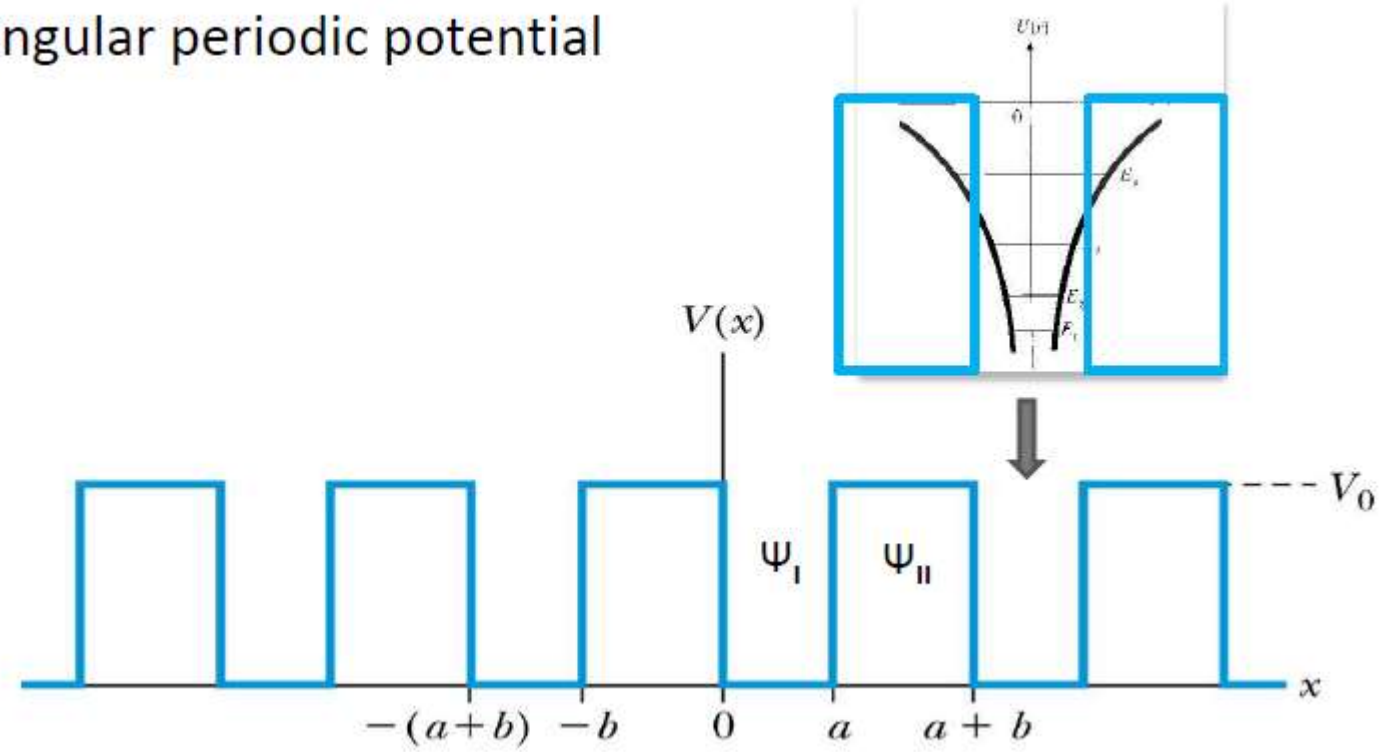
مدل کرونیگ- پنی



The electron PE, $V(x)$, inside the crsytal is periodic with the same periodicity as that of the crystal, a. Far away outside the crsytal, by choice, $V = 0$ (the electron is free and $PE = 0$).

مدل کرونیگ- پنی

- Approximate crystal periodic Coulomb potential by rectangular periodic potential



From *Principles of Electronic Materials and Devices, Third Edition*, S.O. Kasap (© McGraw-Hill, 2005)

مدل کرونیگ- پنی

با توجه به شکل اسلاید قبل:

$$U(x) = 0 \qquad 0 \le x \le a$$
$$= U_0 \qquad -b \le x \le 0$$

با توجه به قضیه بلاخ برای پتانسیلهای متناوب:

$$\psi(x+d) = e^{i\phi}\psi(x)$$

که در آن:

$$\phi = k_x d$$

تابع موج الکترون در فاصله a و b بصورت زیر است:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{i\beta x} + Be^{-i\beta x}, & \text{اگر} \quad -b < x < 0 \\ De^{i\alpha x} + Fe^{-i\alpha x}, & \text{اگر} \quad 0 < x < a \end{cases}$$

که در آن:

$$\beta = \sqrt{\frac{2m_0(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}$$

مدل کرونیگ- پنی

در دوره تناوب بعدی خواهیم داشت:

$$\psi(x+d) = e^{i\phi}\begin{cases} Ae^{i\beta(x-d)} + Be^{-i\beta(x-d)}, & \text{اگر} \quad a < x < d \\ De^{i\alpha(x-d)} + Fe^{-i\alpha(x-d)}, & \text{اگر} \quad d < x < a+d \end{cases}$$

از شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن در مرزها داریم:

$$A + B = D + F$$

$$\beta\,(A - B) = \alpha\,(D - F)$$

$$e^{i\phi}\,(Ae^{-i\beta b} + Be^{i\beta b}) = De^{i\alpha a} + Fe^{-i\alpha a}$$

$$\beta e^{i\phi}\,(Ae^{-i\beta b} - Be^{i\beta b}) = \alpha\,(De^{i\alpha a} - Fe^{-i\alpha a})$$

مدل کرونیگ- پنی

برای متغیرهای A,B,D,F تنها هنگامی پاسخهای غیر صفر بدست می آید که دترمینان ضرایب آنها صفر شود. بدین ترتیب، بعد از انجام محاسباتی طولانی، شرط زیر حاصل می شود:

$$\cos\phi = \cos a\alpha \cosh b\delta - \frac{\alpha^{۲} - \delta^{۲}}{۲\,\alpha\,\delta} \sin a\alpha \sinh b\delta \qquad \text{اگر} \quad ۰ < E < U_{۰}$$

$$= \cos a\alpha \cos b\beta - \frac{\alpha^{۲} + \beta^{۲}}{۲\,\alpha\delta} \sin a\alpha \sin b\beta\,, \qquad \text{اگر} \quad E > U_{۰}$$

که در آن:

$$\delta = \sqrt{\frac{۲m\,(U_{۰} - E)}{\hbar^{۲}}}$$

انرژی E که در معادلات فوق از طریق α, β, γ ظاهر می شود، از نظر فیزیکی تنها در صورتی مجاز است که:

$$-۱ \leq \cos\phi \leq +۱$$

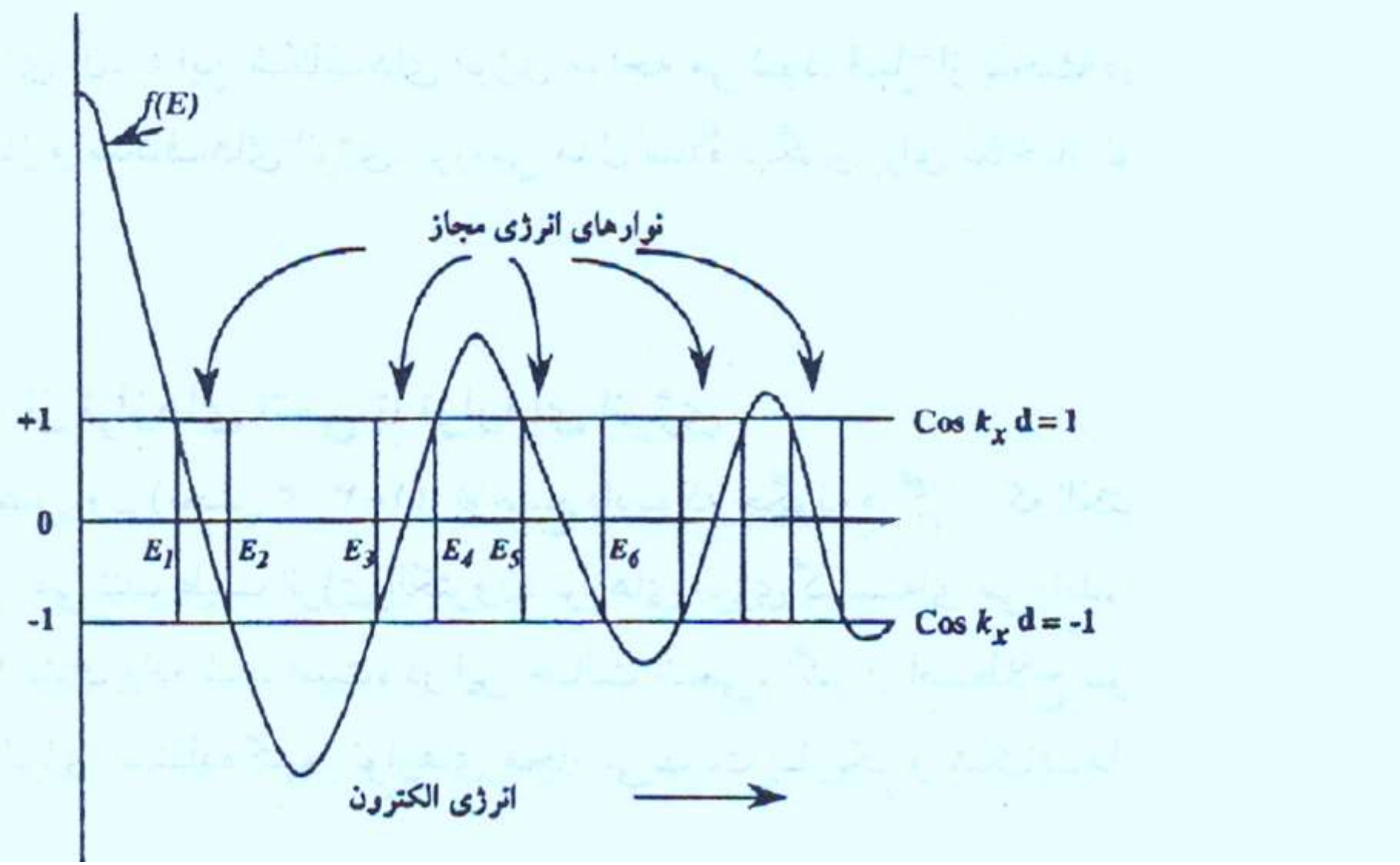
مدل کرونیگ- پنی

اینجا حالتی را در نظر میگیریم که $E < U_0$ باشد، سمت راست معادله فوق را با $f(E)$ نشان می دهیم:

$$f(E) = \cos\left(a\sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}\right)\cosh\left(b\sqrt{\frac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}}\right) + \frac{U_0}{\sqrt{E(U_0 - E)}}\sin\left(a\sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}\right)\sinh\left(b\sqrt{\frac{2m_0(U_0 - E)}{\hbar^2}}\right)$$

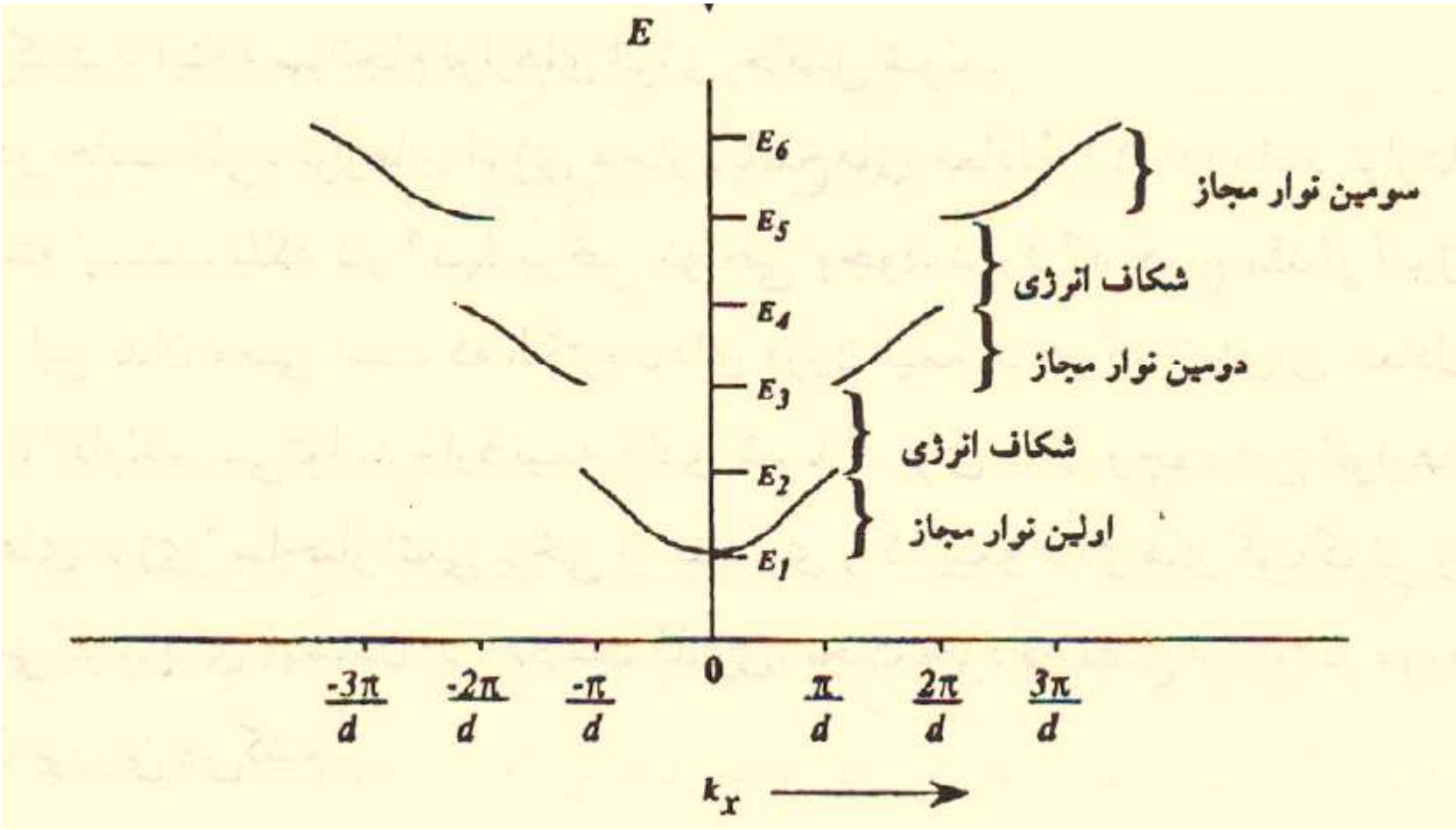
این تابع باید بین ۱ و ۱- قرار بگیرد. با رسم تابع فوق می توانیم مقادیر مجاز E راتعیین کنیم. و با رسم E بر حسب K_x به نوارهای مجاز و شکافهای انرژی برسیم.

مدل کرونیگ- پنی

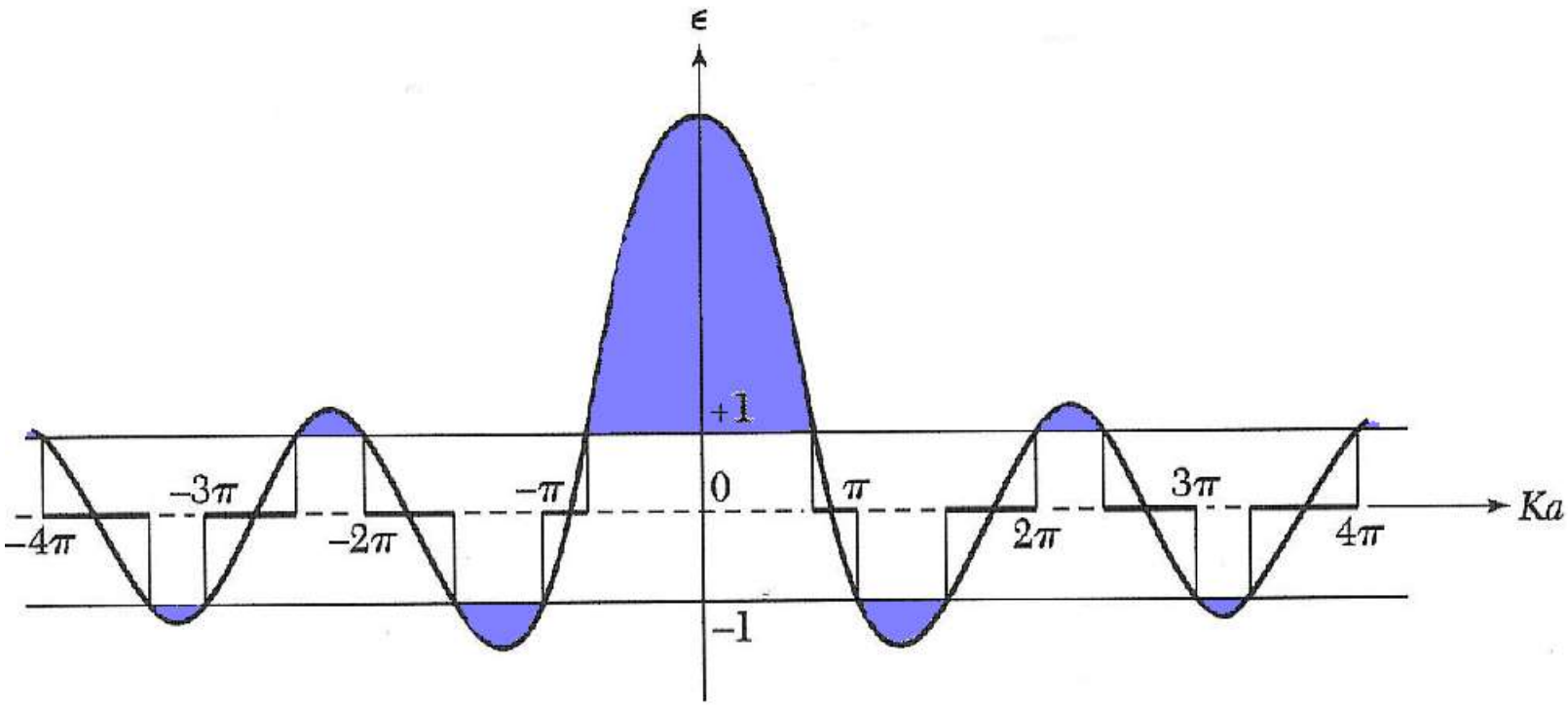


مدل کرونیگ- پنی

نوارهای مجاز و شکافهای انرژی:



مدل کرونیگ- پنی

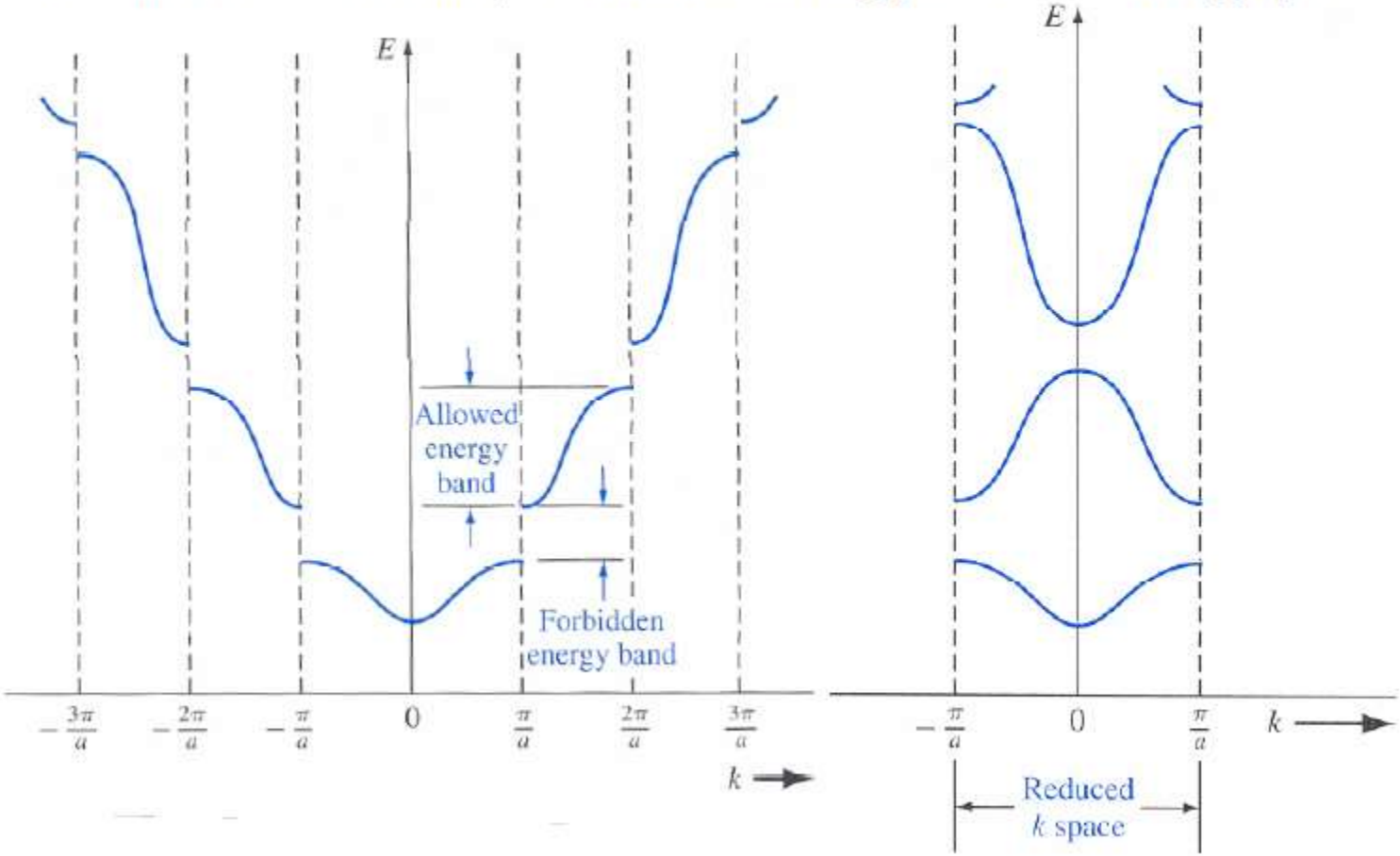


مدل کرونیگ- پنی

ECE331_Wi06

E-K Diagram in Kronig-Penney Model

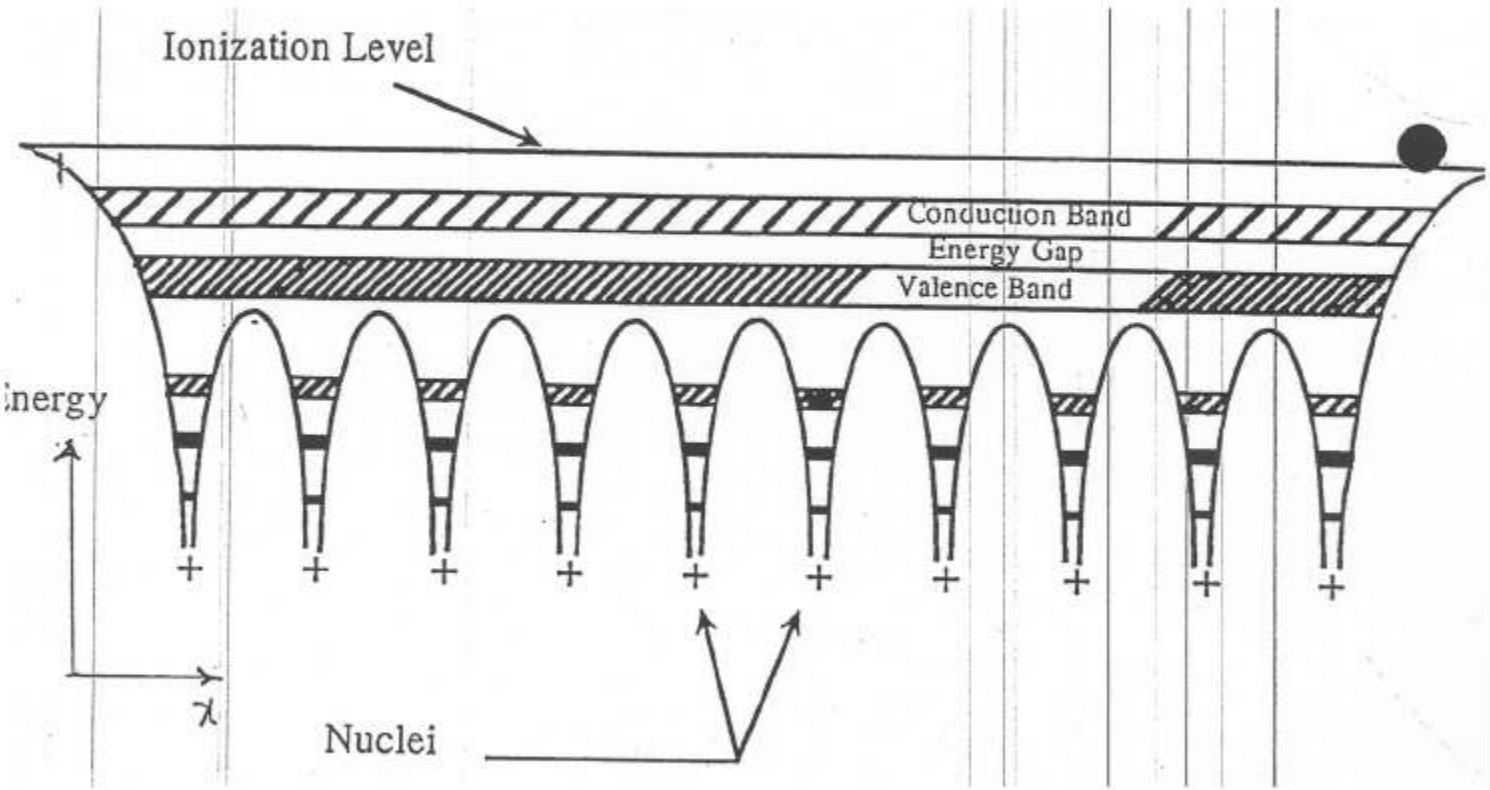
To have solutions, we have energy bands and gaps.



مدل کرونیگ- پنی

ECE331_Wi06

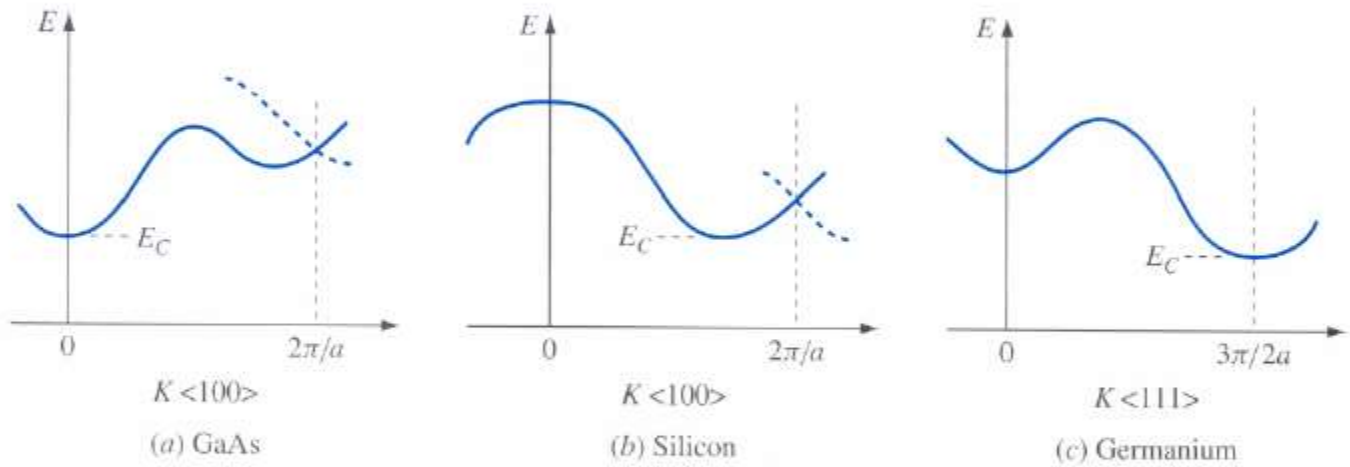
Formation of Energy Bands



Lu

ECE331_Wi06

Conduction Bands of Semiconductors

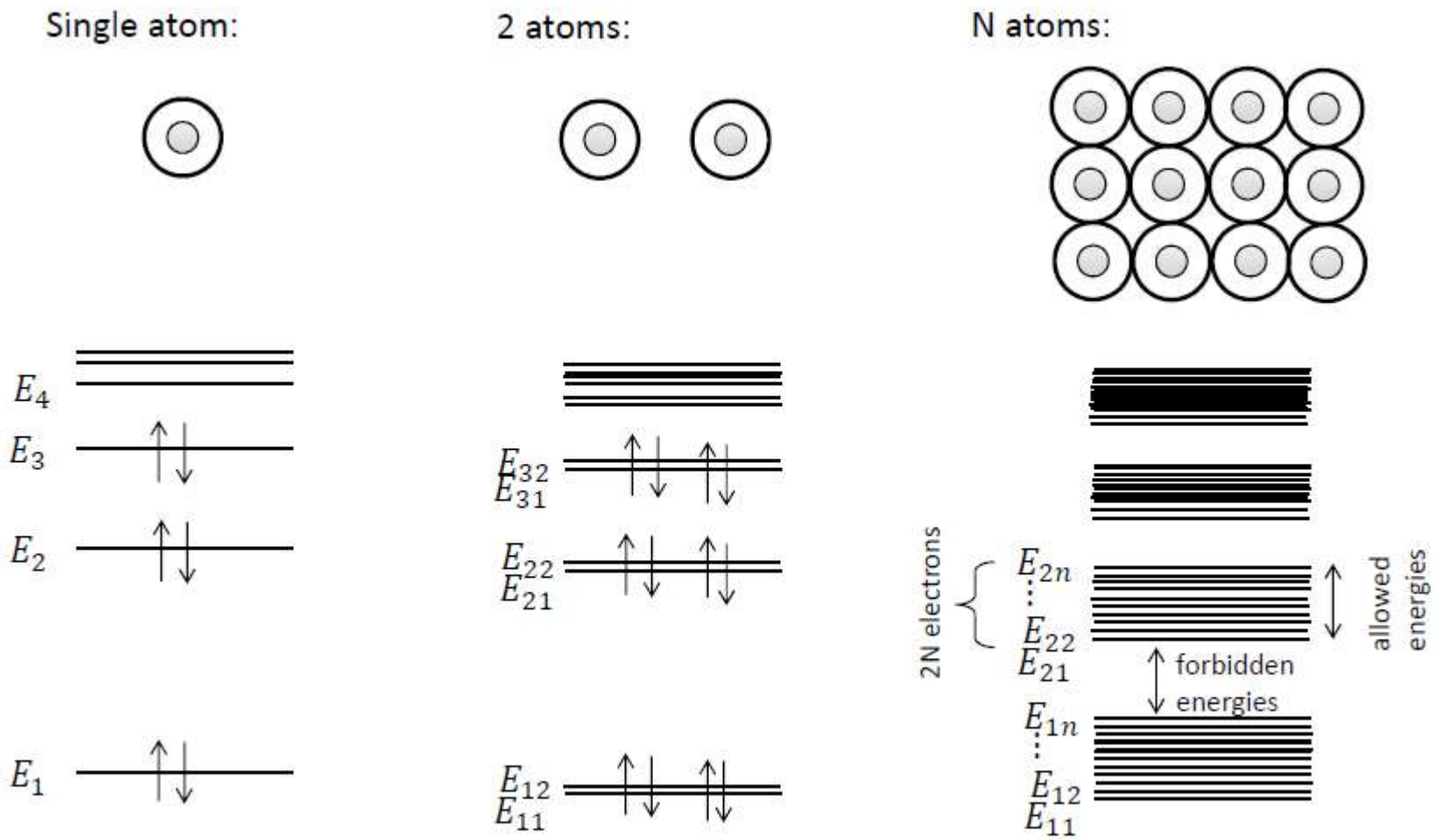


The slope of the E-K curve must be zero at the Brillouin zone edge, unless multiple bands coincide there.

Lu

چگالی حالتهای انرژی

مسئله الکترون آزاد



Pauli exclusion principle

مسئله الکترون آزاد

در شرایط مناسبی، الکترونهای درون نیمه هادی را می توان الکترونهای آزاد فرض کرد. بنابراین با اعمال تغییرات ناچیزی، می توان مفاهیم و ریاضیات این بحث را در مورد نیمه هادیها بکار برد.

معادله شرودینگر برای الکترونهای آزاد در فضای سه بعدی:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(r)=(E-V_0)\psi(r)$$

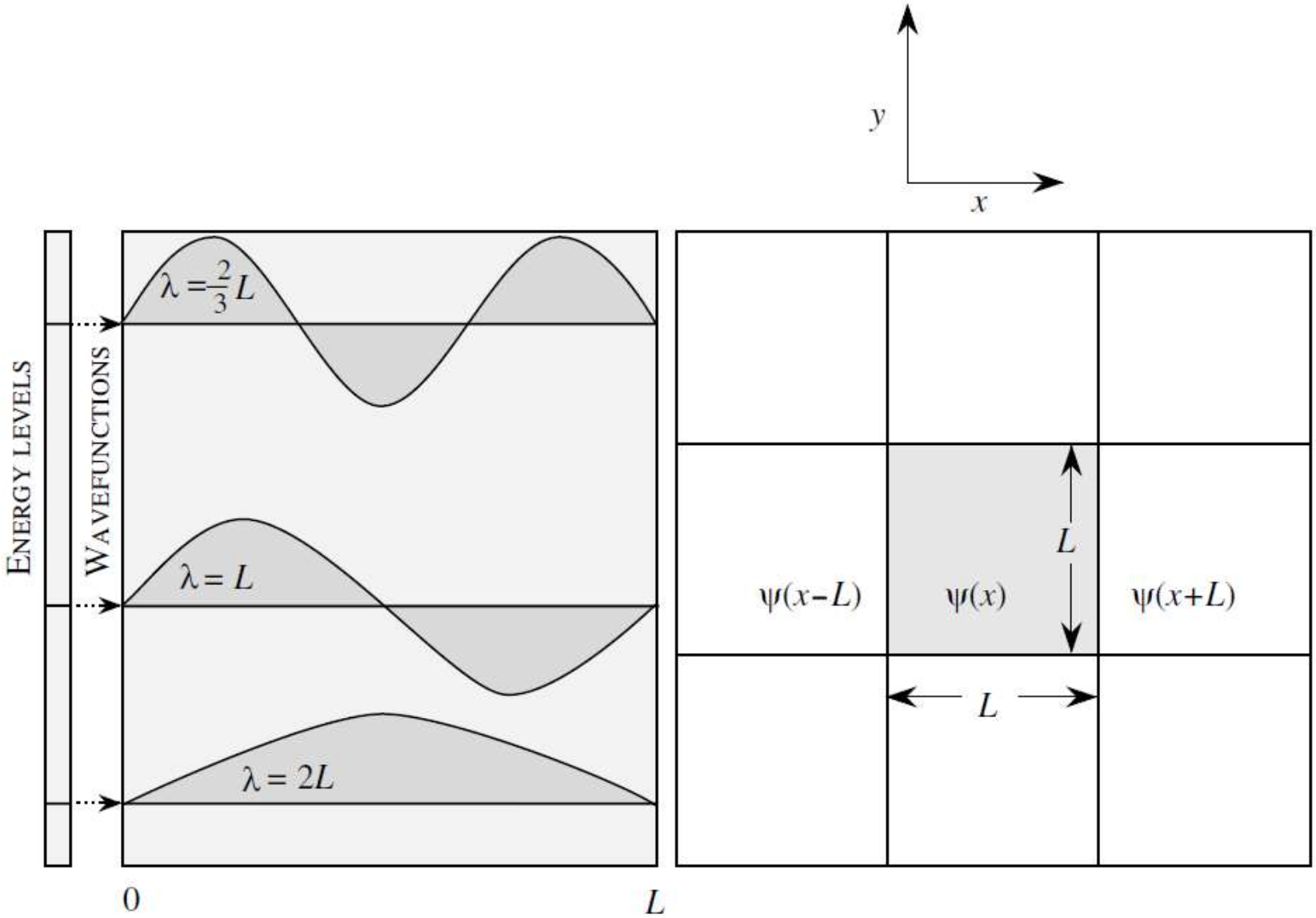
یکی از جوابهای عمومی معادله:

$$\psi(r)=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{\pm ik\cdot r}$$

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+V_0$$

بعلت طبیعت موجی الکترون، K کمیت پیوسته ای نیست، بلکه کمیت گسسته ای است.
شرایط مرزی بر تابع موج تحمیل می شوند. فرض می شود که تابع موج در مرزهای حجم مورد نظر به سمت صفر میل کند. در این حالت پاسخ موج به صورت $\sin(k_x x)$ یا $\cos(k_x x)$ است.

مسئله الکترون آزاد



مسئله الکترون آزاد

مقادیر K ، به مقادیر مثبت محدود می شود:

$$k_x = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \frac{3\pi}{L} \cdots$$

می توان تصورکرد که فضا از مکعبهای مشابهی به بعد L تشکیل یافته است:

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z + L) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y + L, z) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x + L, y, z) &= \psi(x, y, z) \end{aligned}$$

به لحاظ شرایط مرزی، مقادیر قابل قبول K عبارتند از:

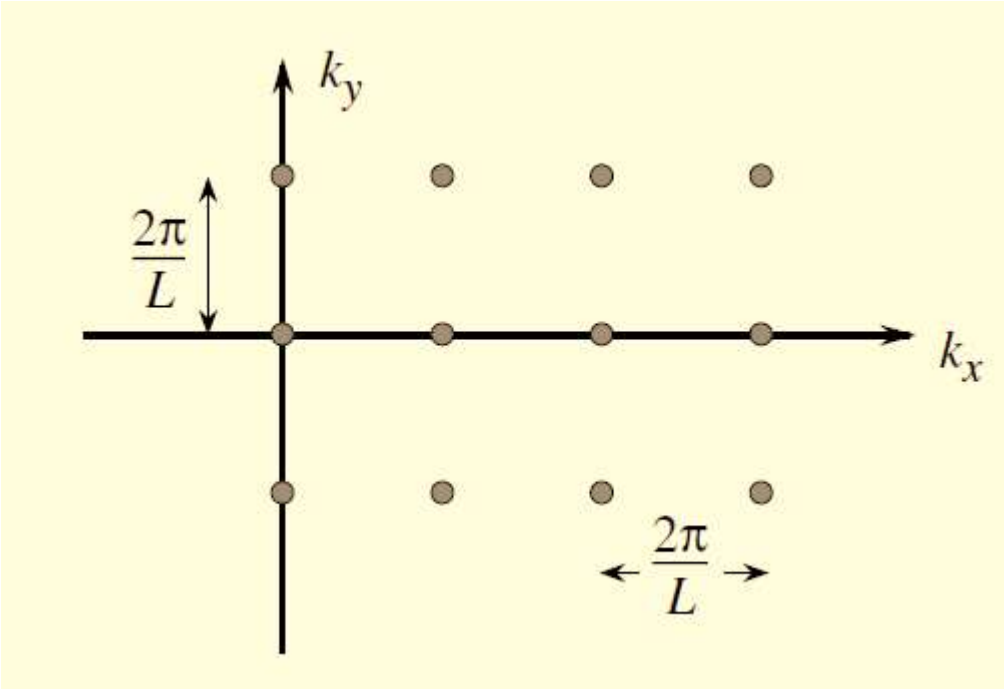
$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}; \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}; \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$$

مسئله الکترون آزاد

حجمی از فضای K که هر تراز الکترونی اشغال می کند برابر است با:

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{V}$$

تعداد ترازهای الکترونی در حجم Ω در فضای K برابر است با: $\frac{\Omega V}{8\pi^3}$



چگالی ترازها برای سیستمهای سه بعدی

چگالی ترازها، تعداد ترازهای انرژی قابل دسترس بر واحد حجم بر واحد انرژی، حول انرژی E است.

مفهوم چگالی ترازها، مفهوم بسیار قدرتمندی است و پدیده های فیزیکی مهمی مانند جذب نوری، انتقال و... وابستگی نزدیکی به این مفهوم دارند.

اگر چگالی ترازها را با $N(E)$ نشان دهیم، تعداد ترازها بر واحد حجم از بازهٔ انرژی dE حول انرژی E برابر $N(E)dE$ می شود. برای محاسبه چگالی ترازها، ابعاد سیستم و رابطه میان انرژی و K، که الکترونها از آنها تبعیت می کنند، لازم است.

چگالی ترازها برای سیستمهای سه بعدی

در مورد الکترون آزاد:

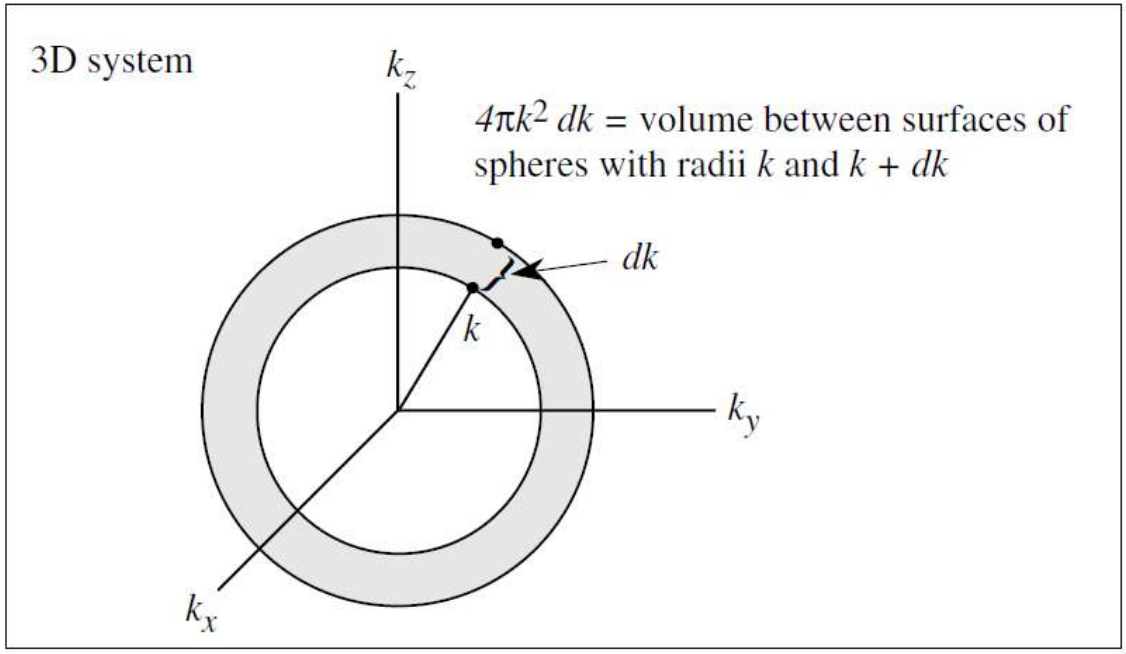
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + V_0$$

حجم محصور بین دو کره در فضای K:

$$4\pi k^2 dk$$

حجم اشغال شده از فضای K به ازای هر تراز الکترون:

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{V}$$



انرژی Eو $E + dE$ که بین سطوح کره هایی به شعاع K و $K + dK$ قرار دارند.

چگالی ترازها برای سیستمهای سه بعدی

بنابراین تعداد ترازهای الکترونی در ناحیهٔ بین K و $K + dK$ برابر است با:

$$\frac{4\pi k^2 dk}{8\pi^3} V = \frac{k^2 dk}{2\pi^2} V$$

تعداد تراز الکترونی بین E و $E + dE$:

$$N(E)\ dE = \frac{k^2 dk}{2\pi^2}$$

از آنجا که

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + V_0$$

داریم:

$$k^2 dk = \frac{\sqrt{2} m^{*3/2} (E - V_0)^{1/2} dE}{\hbar^3}$$

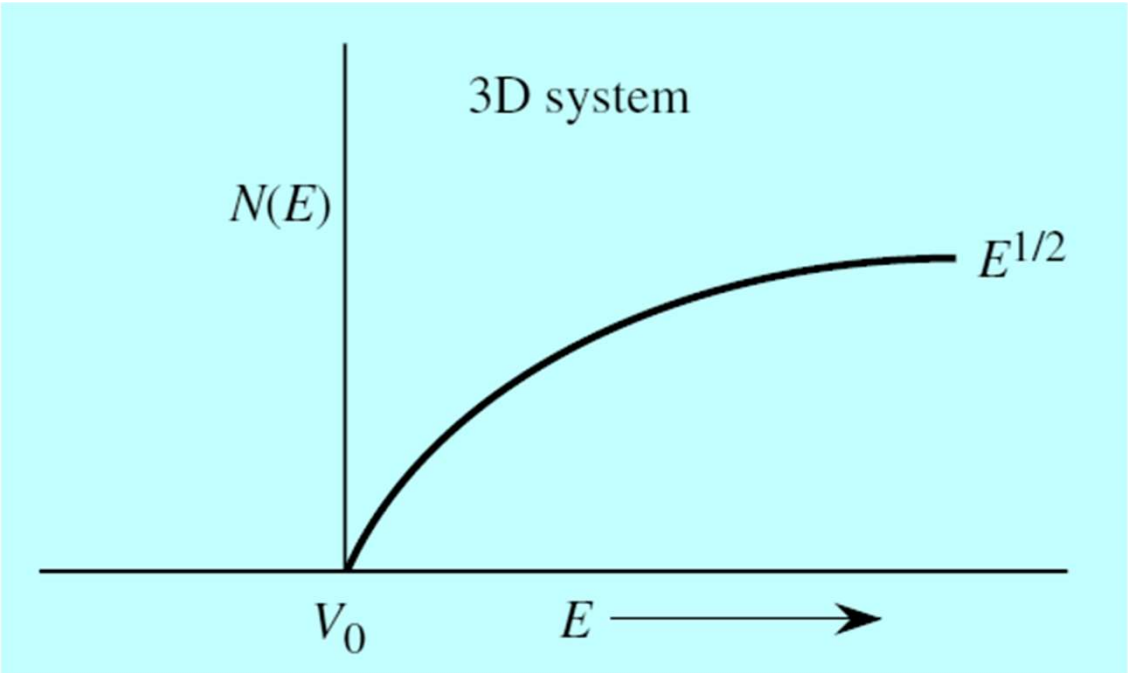
$$N(E)\ dE = \frac{m^{*3/2} (E - V_0)^{1/2} dE}{\sqrt{2} \pi^2 \hbar^3}$$

چگالی ترازها برای سیستمهای سه بعدی

و از آنجا که الکترون «فرمیون» است، یعنی می تواند دو تراز ممکن با یک انرژی داشته باشد (با اسپین های مثبت و منفی)، چگالی ترازها دو برابر مقدار فوق است، پس:

$$N(E) = \frac{\sqrt{2}m^{*3/2}(E - V_0)^{1/2}}{\pi^2\hbar^3}$$

توجه: رابطه فوق در حالت کلی نوشته شده و در بیشتر مسائل برای الکترون آزاد $V_0 = 0$ است.



سطح فرمی

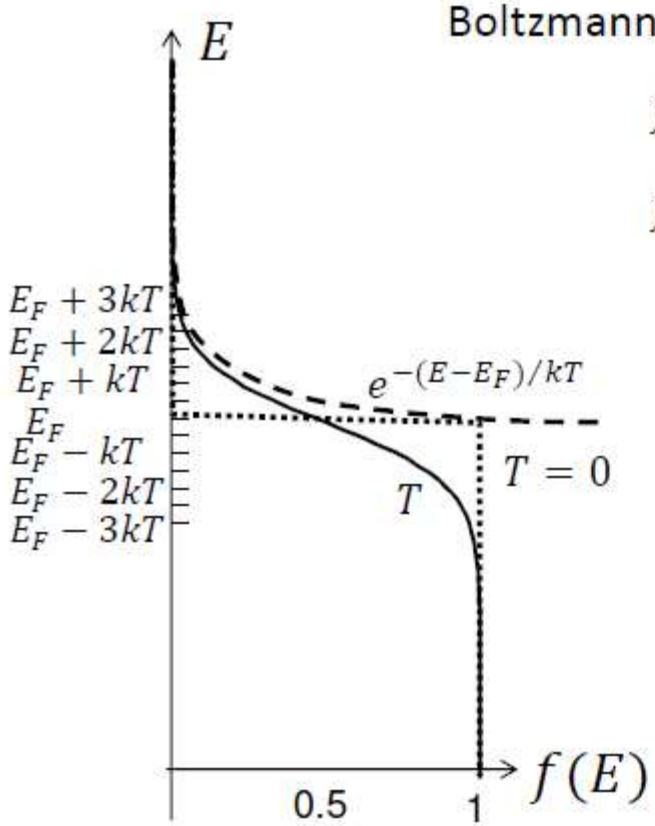
$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}}$$

E_f is called the Fermi energy or the Fermi level.

If we are 3kT away from the Fermi energy then we might use Boltzmann approximation:

$$f(E) \approx e^{-(E-E_F)/kT} \quad \text{if} \quad E - E_F \gg kT$$

$$f(E) \approx 1 - e^{-(E_f-E)/kT} \quad \text{if} \quad E - E_F \ll -kT$$



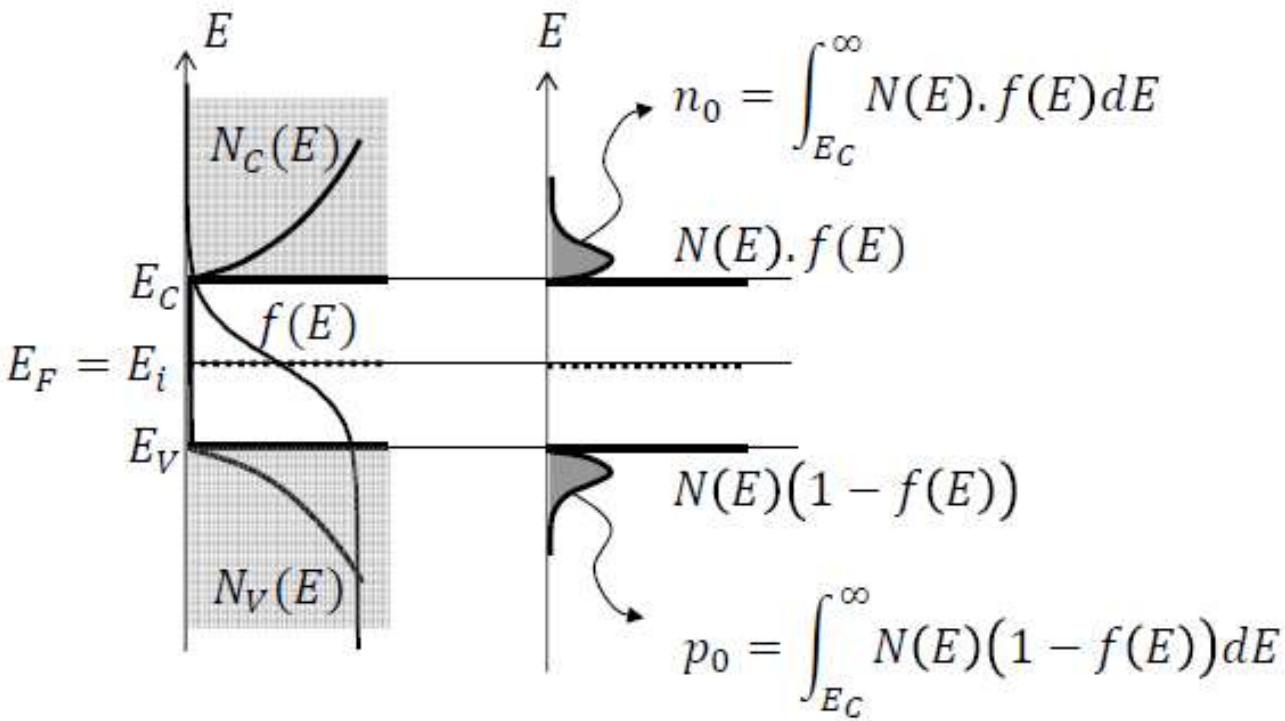
$N(E)\,f(E) =$ # of electrons at energy E

$N(E)\big(1 - f(E)\big) =$ # of holes at energy E

چگالی ترازها برای سیستمهای سه بعدی

تراکم الکترونها و حفره ها:

intrinsic

$N(E)\,f(E) =$ # of electrons at energy E

$N(E)\big(1 - f(E)\big) =$ # of holes at energy E