

Temat 19. Prędkość i masa efektywna elektronu

Ruch jednowymiarowy

Prędkość przesuwania się maksimum amplitudy w paczce falowej jest opisana przez prędkość grupową. Prędkość v elektronu powinna więc odpowiadać prędkości grupowej związanej z nim fali. Ponieważ $\omega = E/\hbar$, więc

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (19.1)$$

Rozważmy zmianę energii dE elektronu przemieszczającego się przez krótki czas dt pod wpływem zewnętrznej siły F

$$dE = Fv dt = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt \Rightarrow \frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar}. \quad (19.2)$$

Przyspieszenie elektronu a wyznaczmy różniczkując prędkość v daną wzorem (19.1) względem t i podstawiając wyrażenie (19.2)

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{dk}{dt} \frac{d}{dk} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{dk}{dt} \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{F}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}. \quad (19.3)$$

Porównując ostatnie równanie z II zasadą dynamiki Newtona otrzymujemy, że masa efektywna elektronu wynosi

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}. \quad (19.4)$$

Masa efektywna elektronu w sieci krystalicznej nie musi być równa masie elektronu swobodnego, może być nawet ujemna (rys. 19.1).

Ruch elektronu w trójwymiarowej sieci krystalicznej

W przypadku skomplikowanej trójwymiarowej sieci krystalicznej energia elektronu E może zależeć w różny sposób od poszczególnych składowych wektora falowego \mathbf{k} . W takiej sytuacji wektor prędkości elektronu można zapisać

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x}, \frac{\partial E}{\partial k_y}, \frac{\partial E}{\partial k_z} \right), \quad (19.5)$$

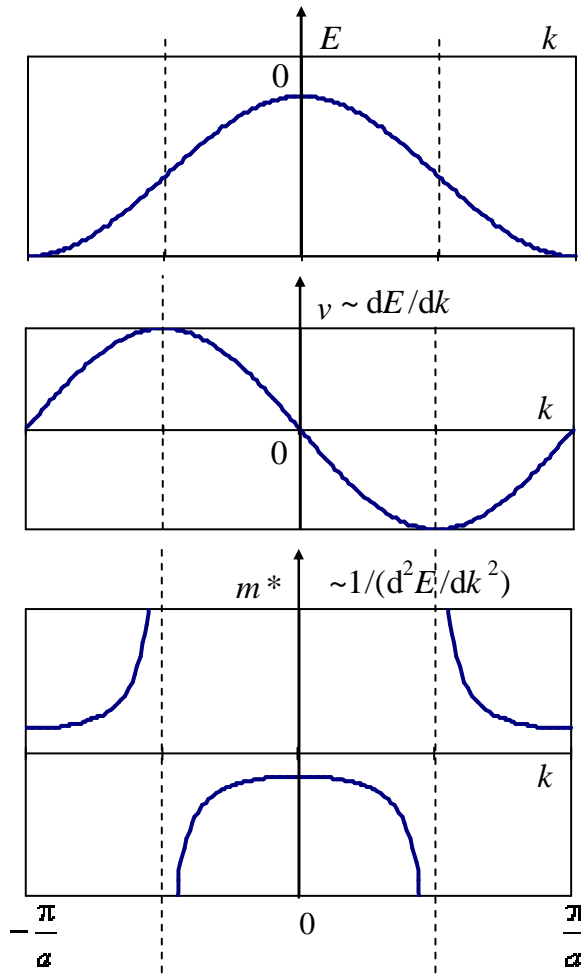
zaś i -tą składową wektora przyspieszenia \mathbf{a} pod wpływem siły \mathbf{F}

$$a_i = \sum_j \frac{F_j}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} = \sum_j [m^*]_{ij}^{-1} F_j. \quad (19.6)$$

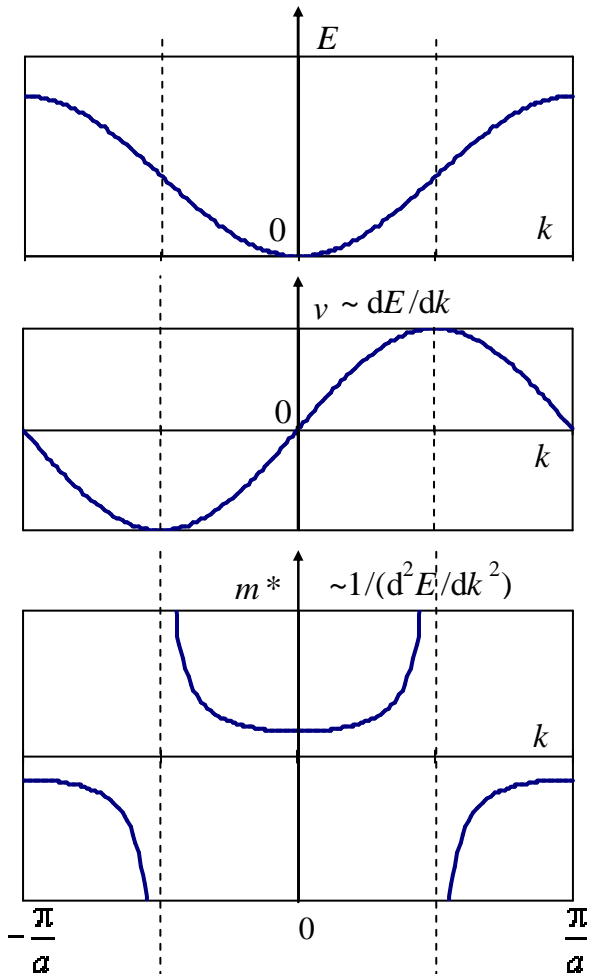
Skalarną masę efektywną m^* w przypadku trójwymiarowym powinniśmy więc zastąpić tensorem masy efektywnej $[m^*]$. Odwrotność tego tensora jest zdefiniowana wzorem

$$[m^*]_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (19.7)$$

typowe zależności dla pasma walencyjnego



typowe zależności dla pasma przewodnictwa



Rys. 19.1. Energia E , prędkość v , i masa efektywna m^* jako funkcje wektora falowego k zredukowanego do I strefy Brillouina. Wykresy dotyczą przypadku ruchu jednowymiarowego.

W paśmie przewodnictwa zależność $E(\mathbf{k})$ osiąga minimum, zwane dnem pasma przewodnictwa, dla pewnej wartości $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, przy czym w ogólnym przypadku \mathbf{k}_0 nie musi być wektorem zerowym. Analogicznie w paśmie walencyjnym istnieje wierzchołek pasma. Jeżeli zależność $E(\mathbf{k})$ rozwiniemy w szereg potęgowy w otoczeniu punktu ekstremalnego \mathbf{k}_0 , to wyrazy proporcjonalne do $\Delta k_i = (k_i - k_{0i})$ wyzerują się i z dokładnością do wyrazów kwadratowych otrzymamy:

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{\mathbf{k}_0} \Delta k_i \Delta k_j = E(\mathbf{k}_0) + \frac{1}{2} \hbar^2 \sum_i \sum_j [m^*]_{ij}^{-1} \Delta k_i \Delta k_j. \quad (19.8)$$

Tensor masy efektywnej jest symetryczny, tzn. $m^*_{ij} = m^*_{ji}$, zatem:

1. Można znaleźć taki układ współrzędnych w przestrzeni \mathbf{k} , w którym pozostaną tylko wyrazy diagonalne m^*_{11} , m^*_{22} i m^*_{33} zwane masami efektywnymi w kierunkach osi układu współrzędnych sieci odwrotnej.
2. Powierzchnie stałej energii E w przestrzeni \mathbf{k} opisane wzorem () będą więc elipsoidami trójosiowymi o środkach w punkcie \mathbf{k}_0 .

3. W niektórych materiałach elipsoida ma symetrię osiową, a w tensorze masy efektywnej pozostają jedynie dwa różne wyrazy:

$$[m^*] = \begin{bmatrix} m_t & 0 & 0 \\ 0 & m_t & 0 \\ 0 & 0 & m_l \end{bmatrix}, \quad (19.9)$$

gdzie m_t jest nazywane *masą poprzeczną* (ang. *transversal effective mass*), zaś m_l jest *masą podłużną* (ang. *longitudinal effective mass*). Taka sytuacja występuje w przypadku pasm przewodnictwa krzemu i germanu.

4. Możliwa jest sytuacja, w której wszystkie trzy masy efektywne są jednakowe i właściwości elektronów w danym paśmie kryształu są opisane przez jedną liczbę. Takie elektrony zachowują się w otoczeniu punktu ekstremalnego podobnie do elektronów swobodnych

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 \Delta k^2}{2m^*}, \quad (19.10)$$

z tą różnicą, że wszystkie oddziaływania w sieć są uwzględnione w ich masie efektywnej.

Masę efektywną elektronów można wyznaczyć w doświadczeniach nad rezonansem cyklotronowym. Nośniki prądu umieszczone w polu magnetycznym B w temperaturze ciekłego helu poruszają się po liniach stałej energii. Jeżeli dodatkowo do kryształu będzie przyłożone mikrofalowe pole elektryczne prostopadłe do pola magnetycznego, to można wyznaczyć częstotliwość pola ω_0 odpowiadającą maksimum absorpcji, która jest zgodna z częstotliwością ruchu elektronów po torach kołowych lub eliptycznych. Dla torów kołowych częstotliwość rezonansowa ω_0 jest związana z masą efektywną zależnością

$$\omega_0 = \frac{eB}{m^*}. \quad (19.11)$$