Temat 20. Dziury elektronowe.

Definicja 20.1.

Dziurą elektronową (ang. *electron hole*) nazywamy stan energetyczny nie zajęty przez elektron w prawie zapełnionym paśmie. Pojęcie dziury elektronowej nie ma zastosowania dla pasm w znacznym stopniu pustych.

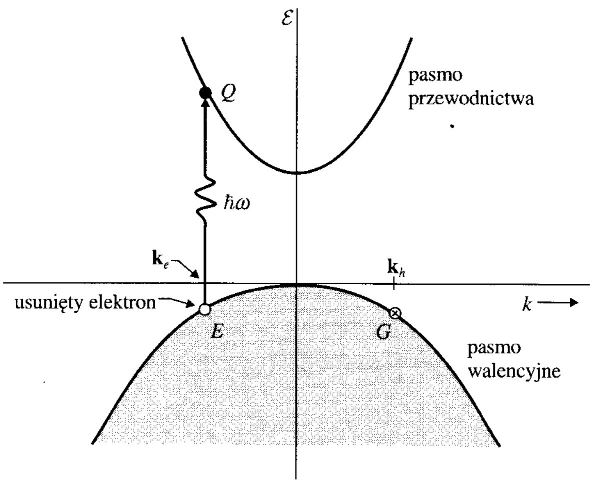
1). Wektor falowy dziury elektronowej.

Sumaryczny wektor falowy elektronów w paśmie całkowicie zapełnionym jest zerowy

$$\sum \mathbf{k} = 0 . \tag{20.1}$$

Zerowanie wynika stąd, że strefa Brillouina wykazuje symetrię względem węzła sieci. Stąd każdemu dozwolonemu wektorowi **k** odpowiada wektor –**k** w tej samej strefie. Jeżeli elektron o wektorze falowym $\mathbf{k}_e$ zostanie usunięty z całkowicie zapełnionego pasma walencyjnego, to całkowity wektor falowy elektronów w paśmie wynosi $-\mathbf{k}_e$ i jest przypisany do dziury

$$\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e . \tag{20.2}$$



Rys. 20.1. Generacja dziury w wyniku absorpcji fotonu o energii $\hbar\omega$. Elektron przechodzący z punktu *E* pasma walencyjnego do pasma przewodnictwa zachowuje swój wektor falowy $\mathbf{k}_e$ (z dokładnością do niewielkiego wektora falowego fotonu), natomiast w paśmie walencyjnym pojawia się dziura *G* o pędzie $\mathbf{k}_h = -\mathbf{k}_e$. Całkowity pęd układu obu pasm jest zachowany [2].

2). Ładunek dziury elektronowej.

Jeżeli pasmo jest całkowicie zapełnione, to gęstość prądu elektrycznego wynosi

$$j_0 = -e\sum_i v_i = 0, \tag{20.3}$$

gdzie v_i jest prędkością *i*-tego elektronu w danym paśmie.

Jeżeli *j*-ty elektron opuści górną część pasma, to popłynie prąd

$$j = -e\sum_{i\neq j} v_i = -e\sum_i v_i + ev_j = ev_j . \tag{20.4}$$

Tak więc dziura zachowuje się jak cząstka o dodatnim ładunku +*e*.

3). Masa efektywna dziury elektronowej.

Zabranie elektronu z górnej części pasma walencyjnego jest równoważne dodaniu dziury. Ponieważ elektron przy wierzchołku pasma walencyjnego ma ujemną masę efektywną m_e*, więc dziura ma dodatnią masę efektywną

$$m_h^* = -m_e^* > 0. \tag{20.5}$$

4). Energia dziury elektronowej.

Zabranie elektronu o energii $\mathcal{E}_e$ z górnej części pasma walencyjnego jest równoważne dodaniu dziury o przeciwnej energii

$$\mathcal{E}_h(\mathbf{k}_h) = \mathcal{E}_h(-\mathbf{k}_h) = \mathcal{E}_h(\mathbf{k}_e) = -\mathcal{E}_e(\mathbf{k}_e). \tag{20.6}$$

5). Prawdopodobieństwo zajęcia stanu.

Rozkład prawdopodobieństwa zajęcia stanów dla elektronów jest opisany funkcją Fermiego-Diraca

$$f(\mathcal{E}_e) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_F^e}{kT}\right] + 1}, \tag{20.7}$$

gdzie $\mathcal{E}_F^e$ oznacza energię Fermiego. Rozkład prawdopodobieństwa dla dziur jest dopełnieniem rozkładu dla elektronów:

$$f(\mathcal{E}_h) = 1 - f(\mathcal{E}_e) = \frac{\exp\left[\frac{\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_F^e}{kT}\right]}{\exp\left[\frac{\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_F^e}{kT}\right] + 1} = \frac{1}{\exp\left[\frac{-\mathcal{E}_e + \mathcal{E}_F^e}{kT}\right] + 1} = \frac{1}{\exp\left[\frac{\mathcal{E}_h - \mathcal{E}_F^h}{kT}\right] + 1}. \tag{20.8}$$

Rozkład prawdopodobieństwa dla dziur można więc opisać Rozkładem Fermiego, w którym energia Fermiego dla dziur jest przeciwna do analogicznej energii dla elektronów

$$\mathcal{E}_F^h = -\mathcal{E}_F^e. \tag{20.9}$$

Istnienie dziur jako nośników prądu o dodatnim ładunku zostało potwierdzone w doświadczeniu wykorzystującym efekt Halla.