Elettronica dello Stato Solido
Lezione 9: Moto di un elettrone in un cristallo

Daniele Ielmini

DEIB – Politecnico di Milano

daniele.ielmini@polimi.it

Outline

- Modello di moto semiclassico
- Massa efficace
- Approssimazione parabolica
- Concetto di lacuna
- Tempo di rilassamento del momento
- Mobilità
- Conclusioni

Introduzione

- Il teorema di Bloch descrive gli stati dell'elettrone, in termini di autofunzioni, energia e relazione di dispersione
- Disponibile una approssimazione parabolica della E (k) in base alla massa efficace m*
- Rimane da capire:
  - Come descrivere il moto degli elettroni
  - Come descrivere l'occupazione degli stati nelle bande

Modello semiclassico

- Velocità della particella: velocità di gruppo:

$$\boldsymbol{v_g} = \frac{1}{\hbar}\frac{\boldsymbol{dE}}{\boldsymbol{dk}}$$

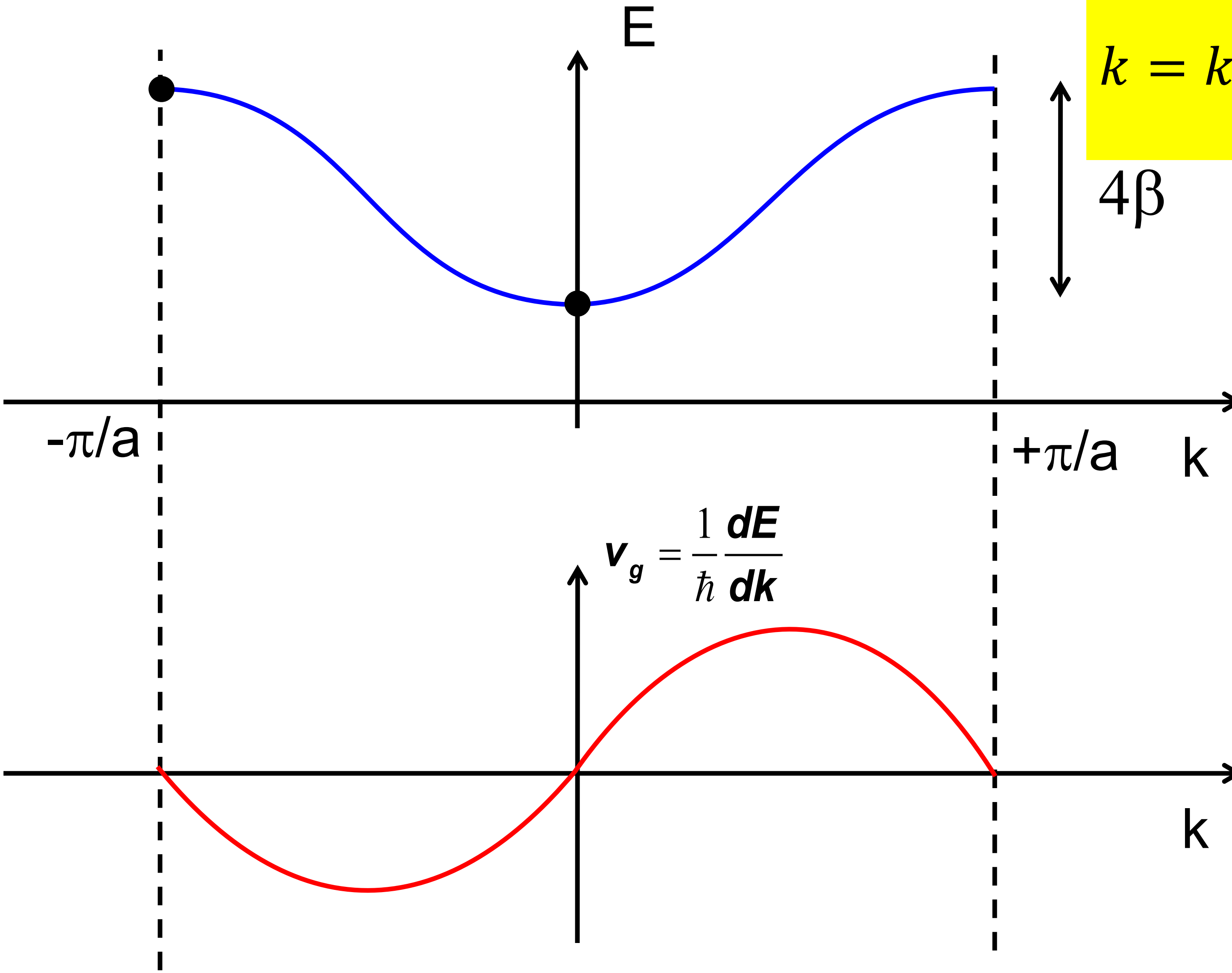
- Effetto di una forza $\mathcal{F}$: $dE = \mathcal{F}dx \rightarrow \frac{dE}{dt} = \mathcal{F}v_g$

$$\frac{dE}{dk}\frac{dk}{dt} = \frac{\mathcal{F}}{\hbar}\frac{dE}{dk} \rightarrow \boxed{\hbar\frac{dk}{dt} = \mathcal{F}}$$

- È l'analogo della legge di Newton classica dp/dt = $\mathcal{F}$, dove p (momento della particella) viene sostituito da ħk (momento del cristallo)

Descrizione del moto ($\mathcal{F}$ = cost)

$$k = k_0 + \frac{\mathcal{F}}{\hbar} t$$



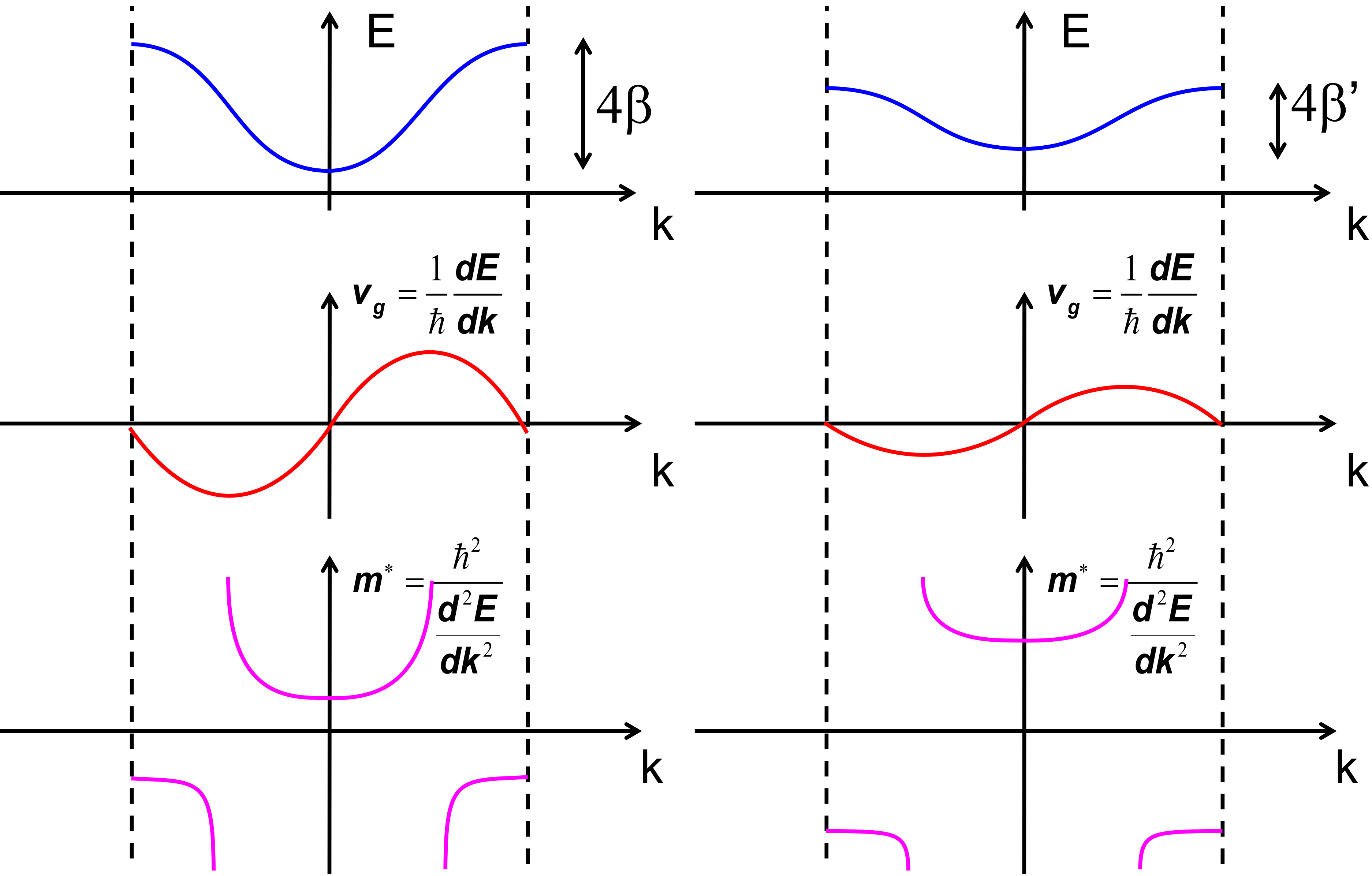
Massa efficace

- Posso esprimere classicamente la variazione del momento cristallino dk/dt in termini della velocità spaziale v_g?

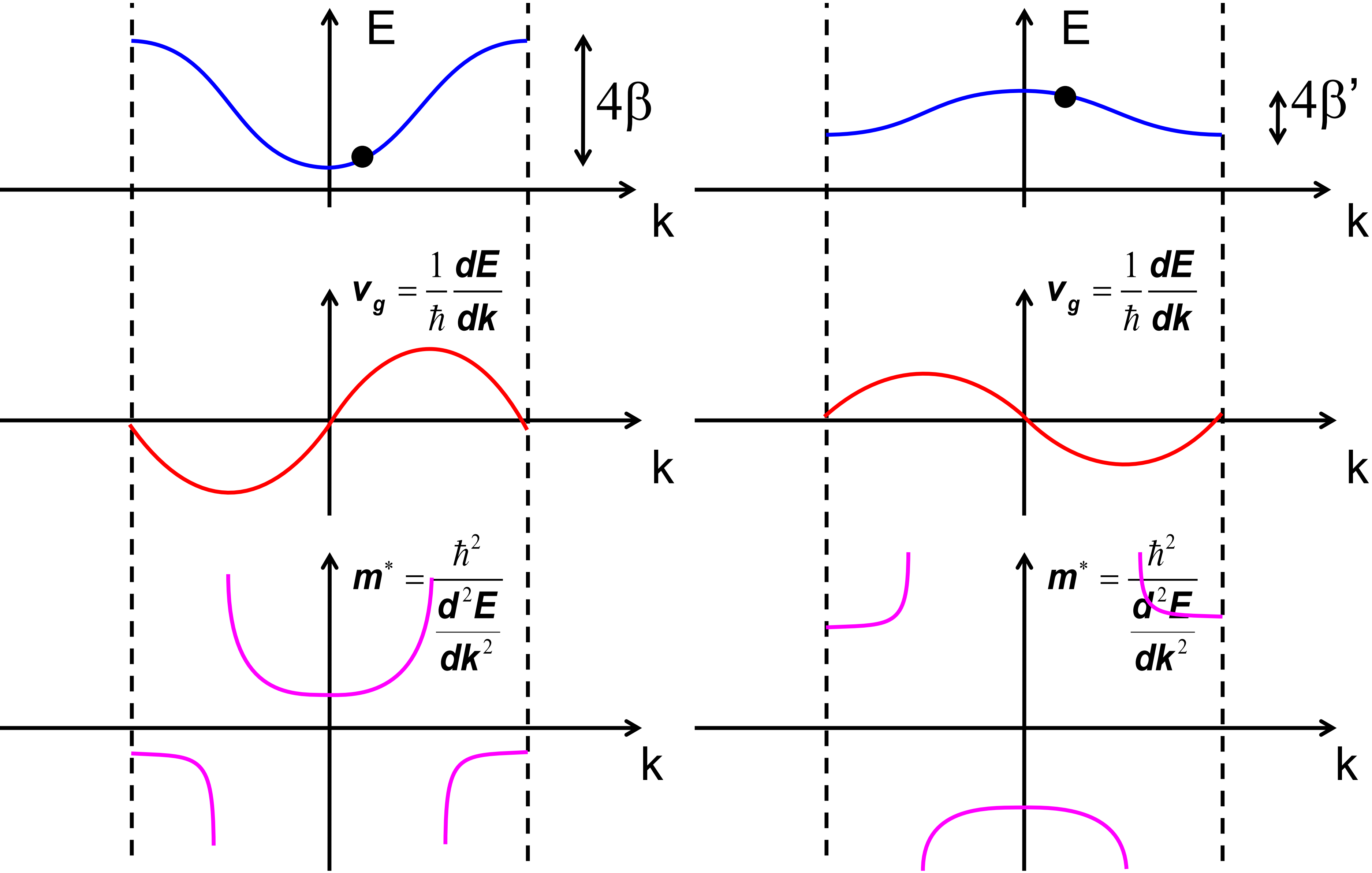
$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}\frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}\mathcal{F}$$

- E quindi: $\mathcal{F} = m^* \frac{dv_g}{dt}$ dove $m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}$
- Siamo autorizzati a trattare l'elettrone come una particella classica, dove tutta l'interazione con il potenziale cristallino risiede nella massa efficace $m^*=m_0$

Energia, velocità e massa efficace



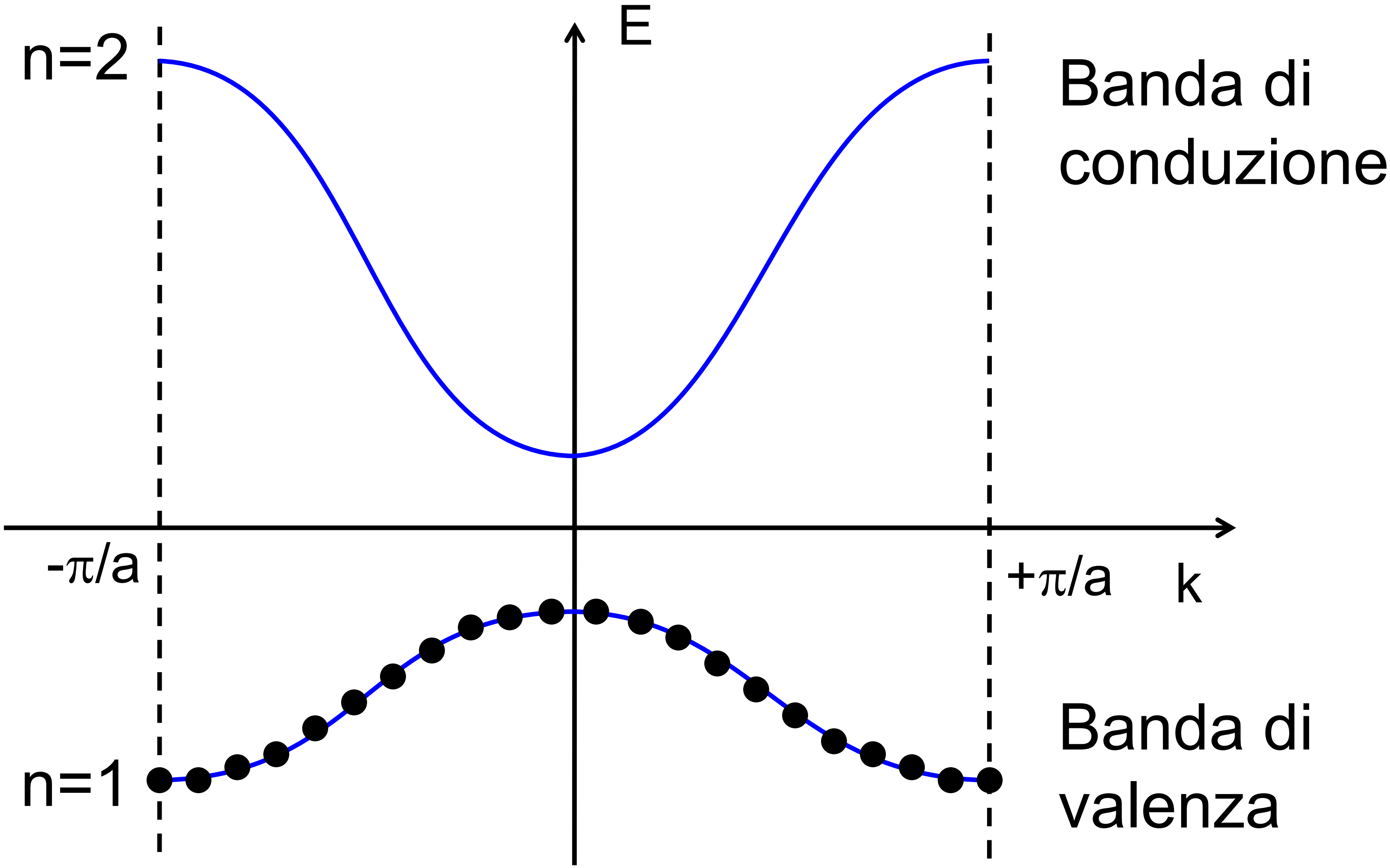
Massimi e minimi di energia



Approssimazione parabolica

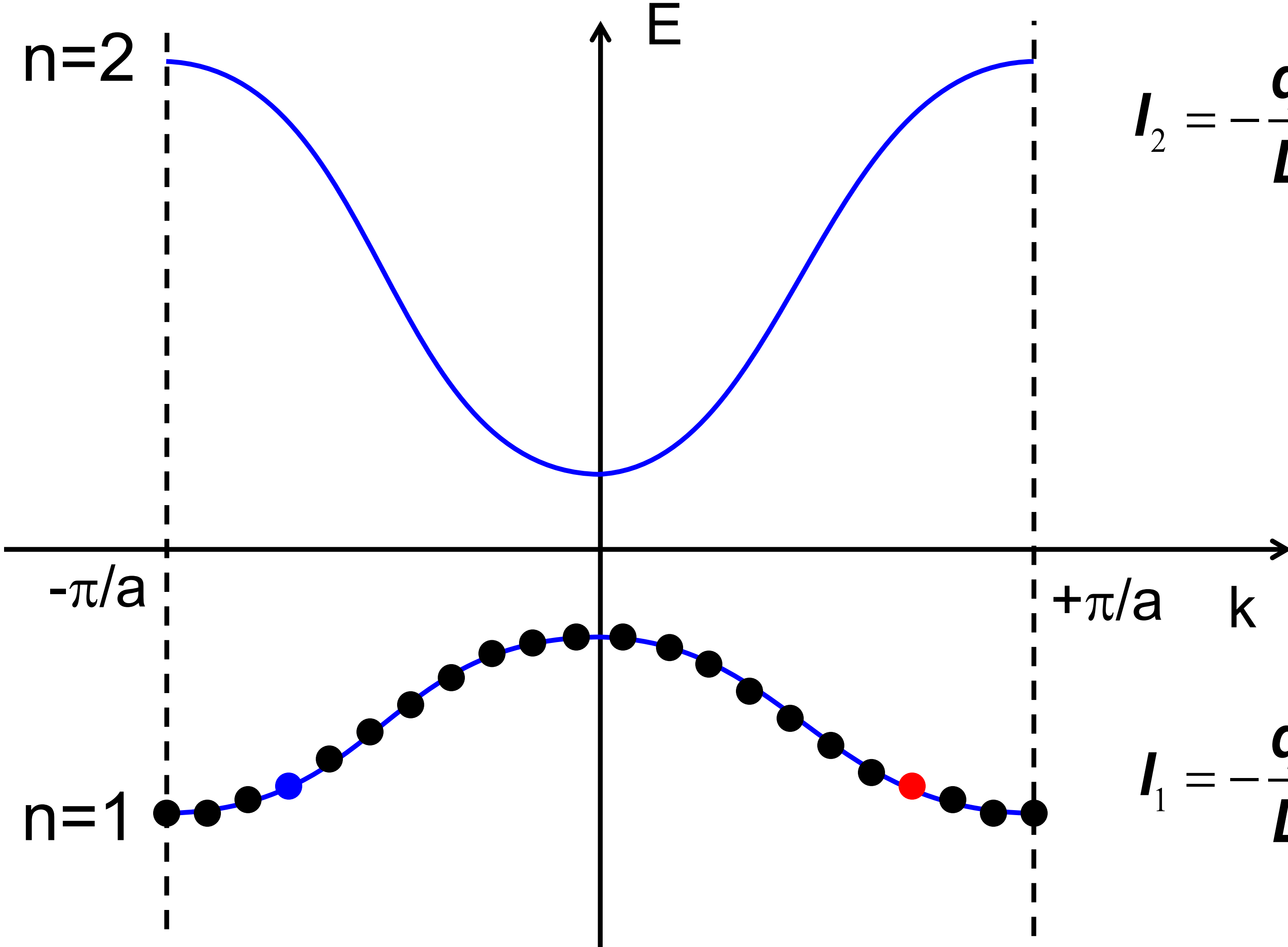
- La massa efficace è in generale funzione dell'energia
- Tuttavia, stando sufficientemente prossimi al minimo dell'energia (dove gli elettroni normalmente stanno), la banda si può ragionevolmente approssimare ad una parabola → massa efficace costante
- Analogamente, il massimo dell'energia (importante per il moto di elettroni di valenza o lacune) può essere approssimato parabolicamente con massa efficace (negativa) costante

Popolamento delle bande (T = 0 K)



- 2N elettroni nella banda n=1, 0 elettroni nella banda n=2 → tipico di semiconduttori

Calcolo della corrente: T = 0 K



$$I_2 = -\frac{q}{L}\sum_{i,pieni} v_i = 0$$

$$I_1 = -\frac{q}{L}\sum_{i,pieni} v_i = 0$$

- Banda piena: per ogni $+v_i$, esiste una $-v_i$ che ne compensa gli effetti sulla corrente

Corrente di banda piena

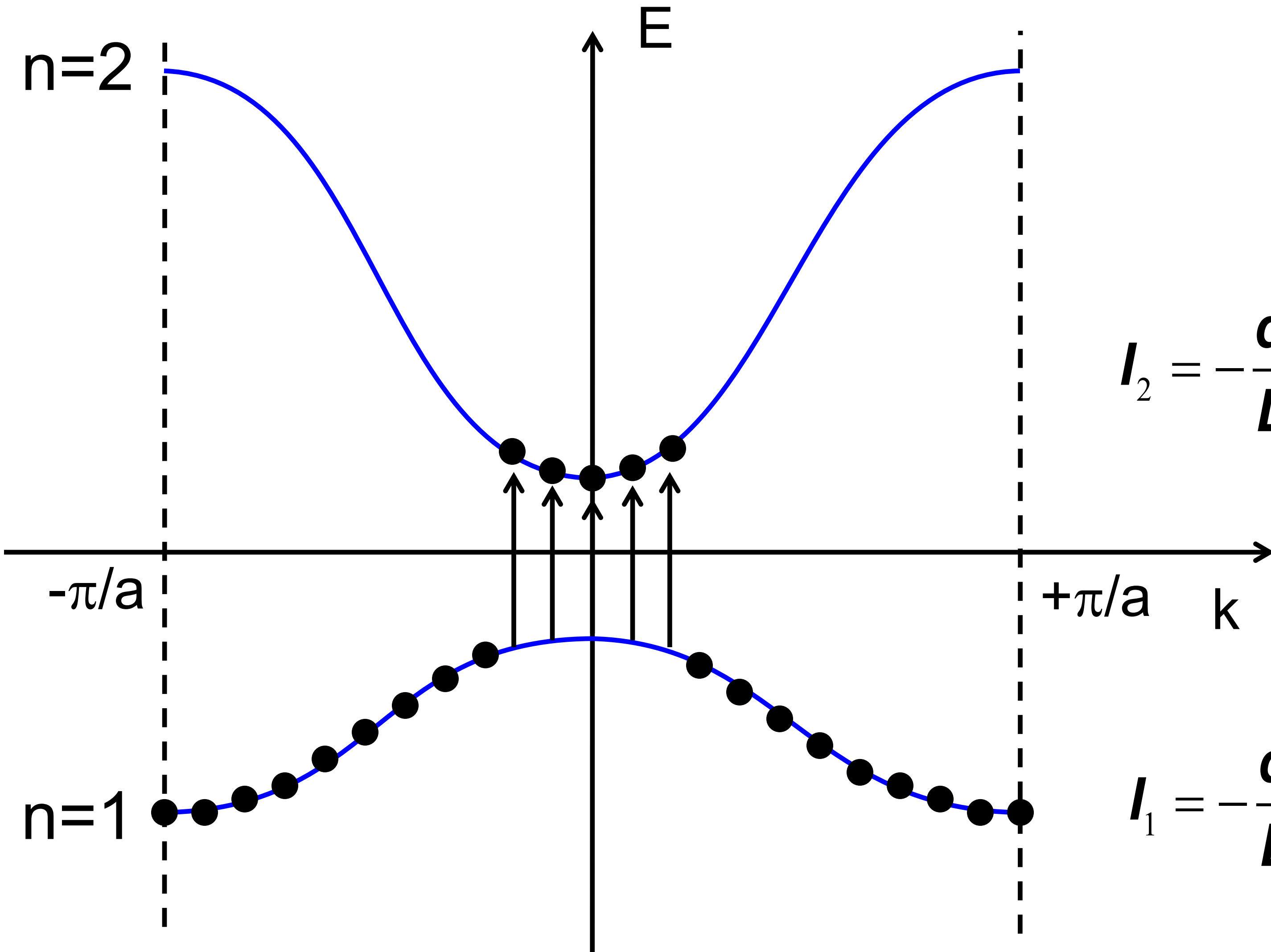
- Una banda completamente piena non può condurre corrente elettrica:

$$I_{el} \propto -q \sum_{i,tutti} v_i \approx -\frac{q}{\hbar} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \frac{dE}{dk} dk = -\frac{q}{\hbar} \left[E \right]_{-\pi/a}^{+\pi/a} = 0$$

- E neppure termica (corrente di calore):

$$I_{th} \propto \sum_{i,tutti} E_i v_i \approx \frac{1}{\hbar} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} E \frac{dE}{dk} dk = \frac{1}{2\hbar} \left[E^2 \right]_{-\pi/a}^{+\pi/a} = 0$$

Corrente a T > 0 K

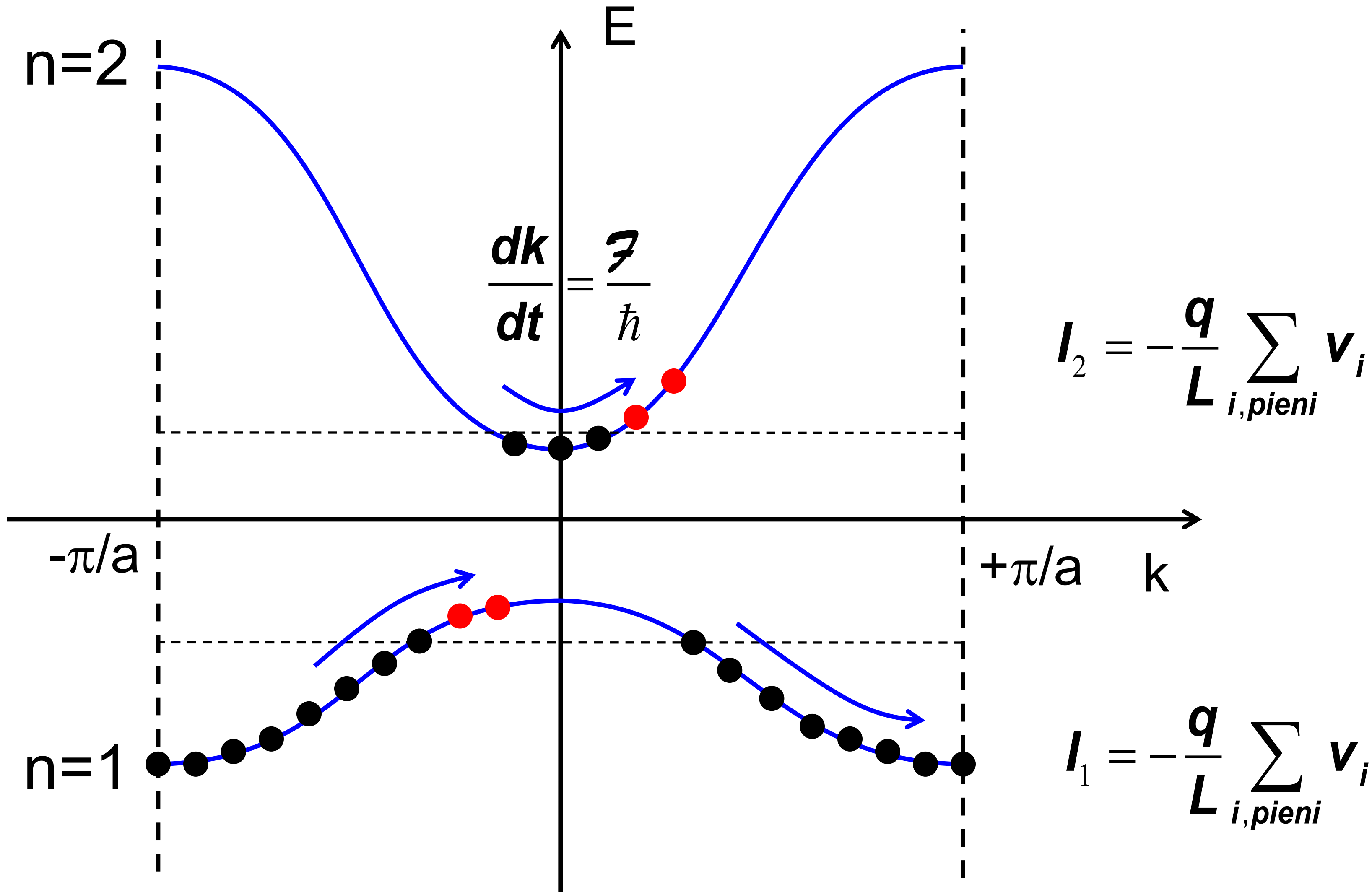


$$I_2 = -\frac{q}{L}\sum_{i,pieni} v_i$$

$$I_1 = -\frac{q}{L}\sum_{i,pieni} v_i$$

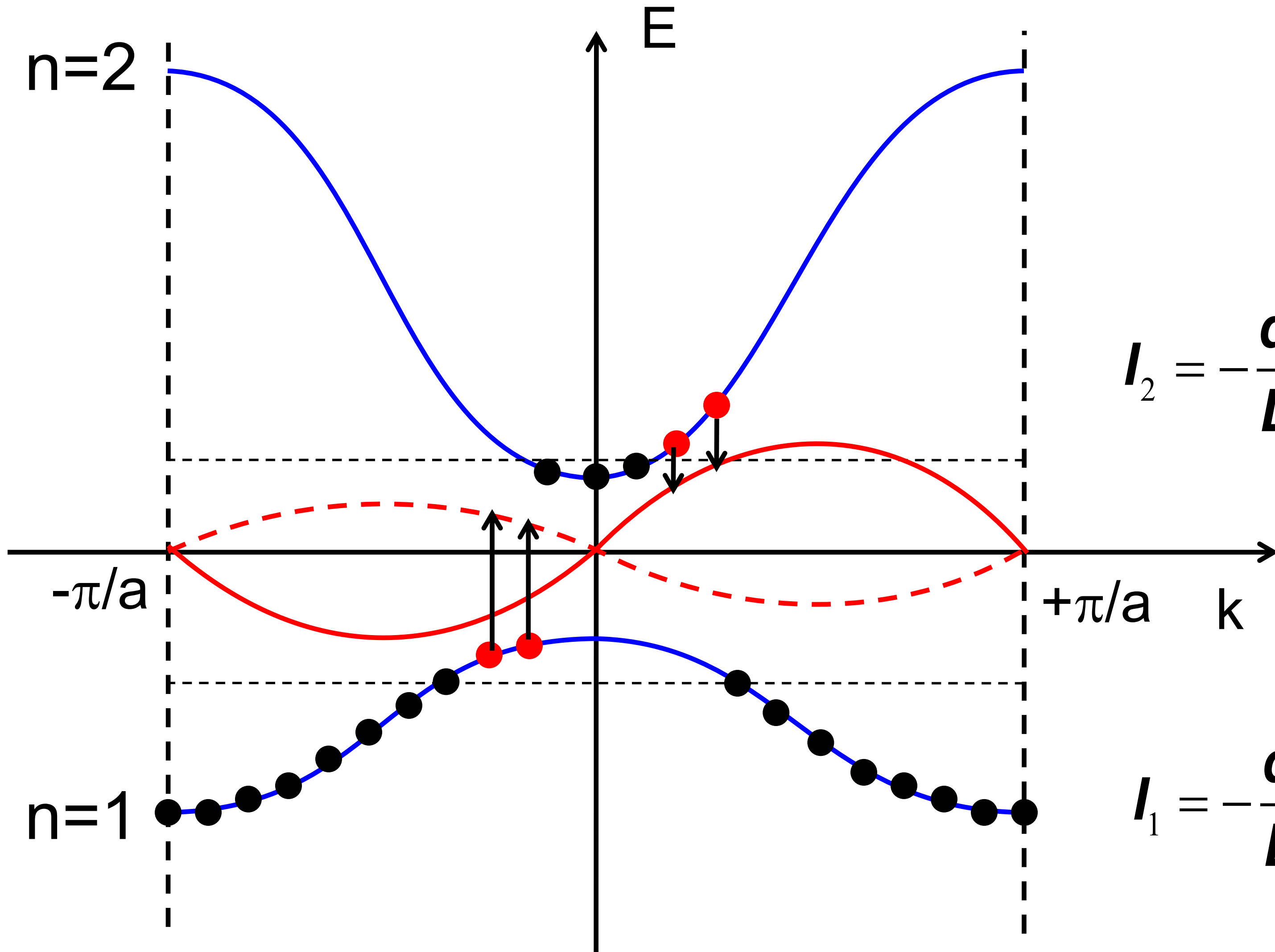
- Eccitazione termica sposta elettroni da banda 1 a banda 2 → generazione termica

Effetto del campo elettrico



- A causa dello shift degli stati popolati, ci sono stati con v_i non più compensate → $I_{1,2} \neq 0$

Velocità coerenti

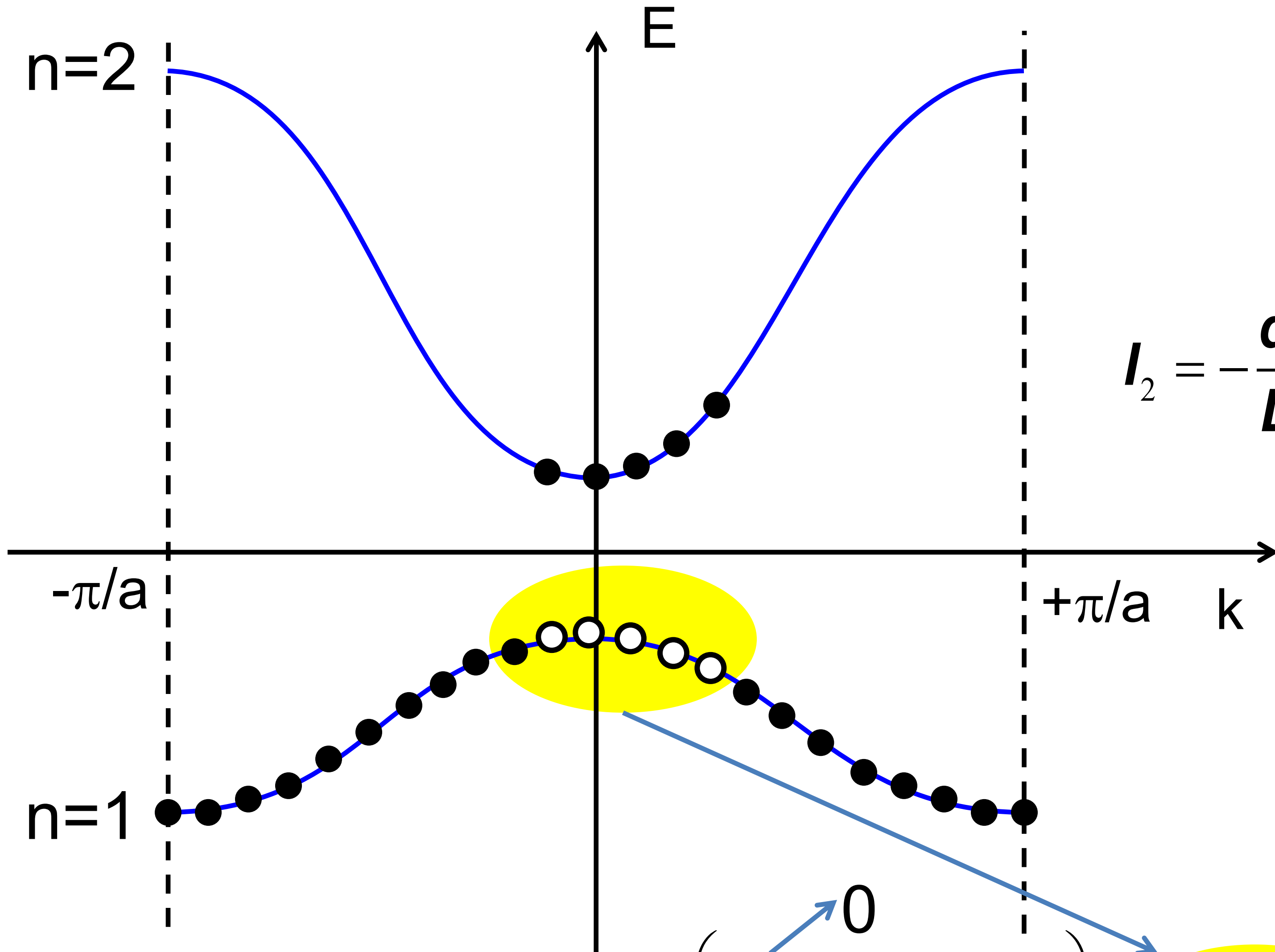


$$I_2 = -\frac{q}{L}\sum_{i,pieni} v_i$$

$$I_1 = -\frac{q}{L}\sum_{i,pieni} v_i$$

- Sebbene $m^*_1 < 0$, gli elettroni in banda 1 che contribuiscono alla corrente hanno velocità > 0

Quasi-particelle con carica positiva



$$I_2 = -\frac{q}{L}\sum_{i,pieni} v_i$$

$$I_1 = -\frac{q}{L}\sum_{i,pieni} v_i = +\frac{q}{L}\left(\sum_{i,tutti} v_i - \sum_{i,pieni} v_i\right) = +\frac{q}{L}\sum_{i,vuoti} v_i$$

Il concetto di lacuna

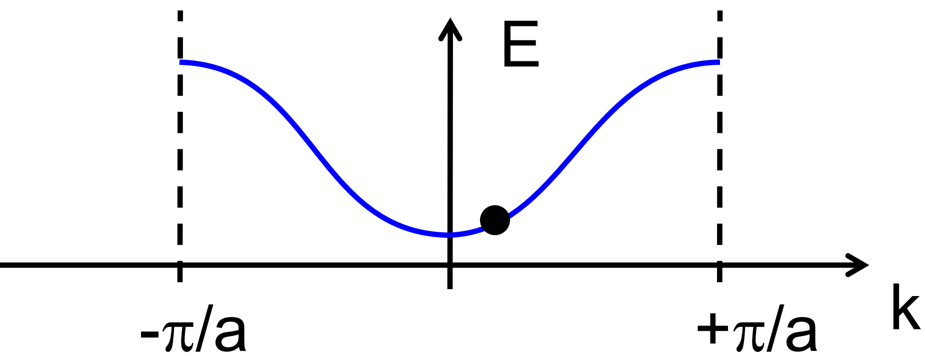
- Dovremmo considerare una banda quasi piena di elettroni con
  - Carica negativa
  - Massa (efficace) negativa
- Invece consideriamo una banda quasi vuota di particelle fittizie (lacune o buche) con:
  - Carica positiva
  - Massa (efficace) positiva
- Il moto collettivo degli elettroni di valenza si spiega agevolmente introducendo questa particella fittizia, analogamente al moto di bolle in un liquido

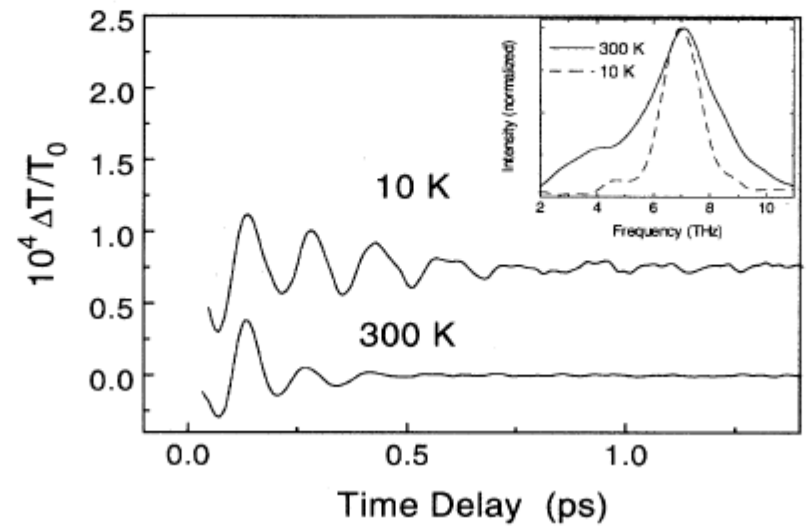
Corrente in banda di conduzione

- La densità di corrente è data da j=-qnv, con q = carica dell'elettrone, n = densità di elettroni in banda di conduzione, v = velocità media degli elettroni
- Approssimazione semiclassica: $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_0 + \frac{\mathcal{F}}{\hbar}\boldsymbol{t}$ → la velocità avrebbe un andamento oscillante. Ad esempio nella banda di <u>tight binding</u>: $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{E}_0 - 2\beta \cos \boldsymbol{ka}$

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\hbar}\frac{\boldsymbol{dE}}{\boldsymbol{dk}} = \frac{2\beta \boldsymbol{a}}{\hbar}\sin \boldsymbol{ka} = \frac{2\beta \boldsymbol{a}}{\hbar}\sin\left(\boldsymbol{k}_0 + \frac{\mathcal{F}}{\hbar}\boldsymbol{t}\right)\boldsymbol{a}$$

Oscillazioni di Bloch





- Un pacchetto in una banda si muove di moto uniforme nello spazio k e di moto oscillatorio nello spazio reale → oscillazioni di Bloch
- Il pacchetto è distrutto da dispersione e scattering → non è osservabile per tempi lunghi

Tempo di rilassamento del momento

- Le oscillazioni di Bloch non vengono normalmente osservate in metalli/semiconduttori: perché?
- Il moto dell'elettrone è disturbato da scattering, cioè urti con impurezze (droganti, difetti di punto) e vibrazioni reticolari (fononi)
- Il modello normalmente adottato è di un elettrone che azzera il suo momento ogni volta che incorre in una collisione → introduciamo il tempo di rilassamento del momento $\tau_m \approx 10^{-14}$-10^{-12} s

Libero cammino medio

- Libero cammino medio (mean free path) $\lambda = v\tau_m$

- Stima di λ: velocità di agitazione termica degli elettroni v_{th}:

$$\frac{1}{2}m_e^* v_{th}^2 = \frac{3}{2}kT \rightarrow v_{th} = \sqrt{\frac{3kT}{m_e^*}} \approx 10^5 ms^{-1}$$

- Quindi $\lambda = v_{th}\tau_m = 10^5 * 10^{-14}$ m = 1 nm
- In generale l'elettrone vola attraverso parecchi siti atomici prima di scatterare

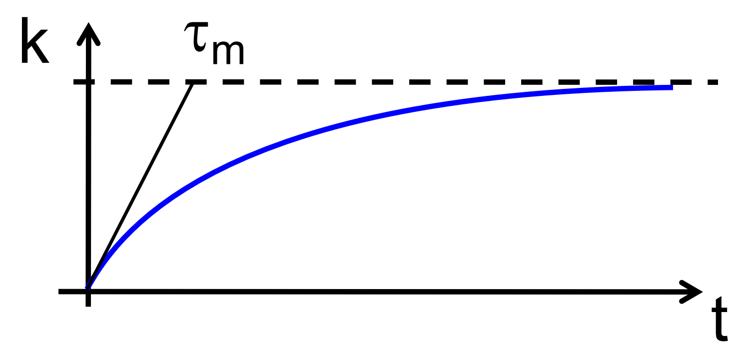
Modello di Drude

- Lo scattering è trattato come una resistenza al moto della particella, come un proiettile in un fluido viscoso (e.g. acqua o aria). Il k medio soddisfa:

$$\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}+\frac{\boldsymbol{k}}{\tau_m}=\frac{q\boldsymbol{F}}{\hbar}$$

- Con campo costante, dopo un primo transitorio che dura $\tau_m \approx 10^{-14}$-10^{-12} s, k raggiunge un valore asintotico dato da:

$$\boldsymbol{k}=\frac{q\boldsymbol{F}\tau_m}{\hbar}\rightarrow \boldsymbol{v}_e=\frac{\hbar \boldsymbol{k}}{m_e^*}=\frac{q\tau_m}{m_e^*}\boldsymbol{F}$$



Mobilità di elettrone e di lacuna

- Si può ripetere il discorso per la lacuna, ottenendo una velocità:

$$\boldsymbol{v_h} = \frac{\hbar \boldsymbol{k}}{\boldsymbol{m_h^*}} = \frac{\boldsymbol{q}\tau_{\boldsymbol{m}}}{\boldsymbol{m_h^*}}\boldsymbol{F}$$

- Definizione di mobilità:

$$\mu_{\boldsymbol{n}} = \frac{\boldsymbol{v_e}}{\boldsymbol{F}} = \frac{\boldsymbol{q}\tau_{\boldsymbol{m}}}{\boldsymbol{m_e^*}}$$

$$\mu_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{v_h}}{\boldsymbol{F}} = \frac{\boldsymbol{q}\tau_{\boldsymbol{m}}}{\boldsymbol{m_h^*}}$$

- Tipici valori nei semiconduttori $\mu_{n,p}$ = 100-10000 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ (dipende dal materiale, drogaggio, temperatura)

Resistività

- Definita come ρ = F/j = $(nq\mu_n)^{-1}$ per conduzione da soli elettroni (e.g. metalli)
- Tipica resistività in metalli ρ = 10 $\mu\Omega$cm
- Infatti assumendo n = $3\text{x}10^{21}$ cm^{-3}, q = 1.6 x 10^{-19} C e $\mu_n = q\tau_m/m^*_e$ con $\tau_m = 10^{-14}$ s e $m^*_e = m_0$ = 9.1 x 10^{-31} kg si ottiene:

$$\rho = \frac{1}{\boldsymbol{qn}\mu_{\boldsymbol{n}}} = \frac{\boldsymbol{m}_{\boldsymbol{h}}^*}{\boldsymbol{q}^2\boldsymbol{n}\tau_{\boldsymbol{m}}} = \frac{9.1\times10^{-31}}{(1.6\times10^{-16})^2 * 3\times10^{21} * 10^{-14}} \approx 10^{-7}\Omega\boldsymbol{m}$$

Conclusioni

- L'effetto dell'applicazione di una forza ad una particella nel reticolo si può descrivere come uno spostamento nello spazio k (approssimazione semiclassica) e una resistenza 'viscosa' dovuta allo scattering e descritta da un tempo di rilassamento del momento τ_m
- Bande completamente piene/vuote non conducono
- Una banda quasi piena (e.g. valenza) può essere trattata come banda quasi vuota di portatori di carica positiva (lacune)
- Introduzione di nuovi concetti: mobilità, resistività